第 55 卷 第 4 期 2006 年 4 月
1000-3290/2006/55(04)/1571-09
物 理 学 报
ACTA PHYSICA SINICA
Vol.55,No.4,April,2006

精确的量子化条件和不变量*

马中骐[1)†] 许伯威[2)]

1)(中国科学院高能物理研究所,北京 100049)

2)(上海交通大学物理系,上海 200030)

(2005 年 1 月 14 日收到;2005 年 8 月 31 日收到修改稿)

提出并证明了一维量子系统和三维球对称量子系统的一个精确的量子化条件.在此精确量子化条件中,除了通常的 $N\pi$ 项外,还有一积分项,称为修正项. 发现该修正项正是在超对称量子力学中所谓的有形状不变势的量子系统的一个不变量,它不依赖于波函数的节点数.对这些系统,可用基态能级和波函数确定此不变量的值,从而由精确的量子化条件容易算出全部束缚态的能级. 计算得到能级的正确性又反过来验证了在有形状不变势的量子系统中此修正项确实是不变量.计算的有形状不变势的量子系统,包括一维的有限方势阱、Morse 势及其变形、Rosen-Morse 势、两类 Pöschl-Teller 势、Eckart 势、Hulthen 势、一维和三维的简谐振子势和三维氢原子势.

关键词:量子化条件,超对称量子力学,形状不变势,不变量

PACC:0365,1130

1. 引　　言

20 世纪 80 年代提出的超对称量子力学[1—3]发现某些一维量子系统的能级可以代数求解[4]. 这些系统哈密顿量可以因子化,引入的超对称配对势有相同的空间依赖性,称为形状不变势(shape invariant potential). 以后又进一步发现,这些量子系统的波函数和散射矩阵也可以代数求解[5—8].超对称量子力学中引入的超对称势实际上与基态波函数的对数微商成比例(见文献[2]中的(6)式). 这意味着,有形状不变势的量子系统,基态波函数决定了所有激发态的能谱和波函数. 对称性应该与一定的不变量相联系,但超对称量子力学没有讨论此形状不变势与何种不变量相联系. 本文在有形状不变势的量子系统中找到了这一不变量.

在量子力学发展初期,旧量子理论中的 Bohr-Sommerfeld 量子化条件起到经典力学和量子力学的桥梁作用[9],但此量子化条件只对个别量子系统成立. Wentzel-Kramers-Brillouin (WKB) 近似[10—12]是一个近似处理 Schrödinger 波函数的方法,其中提出了一个近似的量子化条件[9]

$$\int_{x_A}^{x_B} k\,\mathrm{d}x = (n+1/2)\pi \qquad (n=0,1,2,\cdots), \tag{1}$$

式中 x_A 和 x_B 是势能 $V(x)$ 的两个转折点,

$$\begin{aligned} &E > V(x) \quad (x_A < x < x_B),\\ &E < V(x) \quad (-\infty < x < x_A \text{ 或 } x_B < x < \infty),\\ &E = V(x) \quad (x = x_A \text{ 或 } x = x_B). \end{aligned} \tag{2}$$

对一般的一维 Schrödinger 方程

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x) = -\frac{2M}{\hbar^2}[E - V(x)]\psi(x), \tag{3}$$

我们提出并证明了一个精确的量子化条件

$$\int_{x_A}^{x_B} k(x)\,\mathrm{d}x = N\pi + \int_{x_A}^{x_B}\phi(x)\left[\frac{\mathrm{d}k(x)}{\mathrm{d}x}\right]\left[\frac{\mathrm{d}\phi(x)}{\mathrm{d}x}\right]^{-1}\mathrm{d}x. \tag{4}$$

这里,M 是粒子质量,势 $V(x)$ 是 x 的分片连续函数,它满足(2)式,在两转折点之间的波矢 $k(x)$ 为

$$k(x) = \sqrt{2M[E - V(x)]}/\hbar \qquad (E \geqslant V(x)), \tag{5}$$

$\phi(x)$ 是波函数 $\psi(x)$ 的对数微商,

---

* 国家自然科学基金(批准号:10475082)资助的课题.

† E-mail:mazq@mail.ihep.ac.cn

$$\phi(x) = \frac{1}{\psi(x)}\frac{\mathrm{d}\psi(x)}{\mathrm{d}x}, \qquad (6)$$

N 是 $\phi(x)$ 在两转折点之间的零点数，$N=n+1$，其中 n 是波函数 $\psi(x)$ 的节点数. 证明中不含任何近似，因而此量子化条件是精确的. 势函数(2)式的形式可以推广.

此量子化条件可推广到球对称的三维 Schrödinger 系统. 设

$$\psi(\boldsymbol{r}) = r^{-1}R(r)\mathrm{Y}_m^l(\theta,\varphi),$$

其中 $\mathrm{Y}_m^l(\theta,\varphi)$ 是球谐函数，则可把波函数的角度部分分离出去,得径向方程为

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}^2R(r)}{\mathrm{d}r^2} &= -\frac{2M}{\hbar^2}[E-U(r)]R(r),\\ U(r) &= \frac{l(l+1)\hbar^2}{2Mr^2}+V(r).\end{aligned} \qquad (7)$$

方程(7)和(3)很相似，因而可得类似的量子化条件

$$\begin{aligned}&\int_{r_A}^{r_B}k(r)\mathrm{d}r\\ &= N\pi+\int_{r_A}^{r_B}\phi(r)\left[\frac{\mathrm{d}k(r)}{\mathrm{d}r}\right]\left[\frac{\mathrm{d}\phi(r)}{\mathrm{d}r}\right]^{-1}\mathrm{d}r.\end{aligned} \qquad (8)$$

这里，r_A 和 r_B 是两个转折点，$U(r_A)=U(r_B)=E$，而

$$k(r) = \sqrt{2M[E-U(r)]}/\hbar \qquad (E\geqslant U(r)),$$

$$\phi(r) = R(r)^{-1}\frac{\mathrm{d}R(r)}{\mathrm{d}r}.$$

(4)和(8)式等号右端第二项称为量子化条件中的修正项. 我们发现有形状不变势的一维量子系统或三维球对称量子系统，此修正项是一个不变量，它独立于波函数对数微商 $\phi(x)$ 的零点数. 基态波函数的对数微商 $\phi_0(x)$ 只包含一个零点，没有极点，形式相当确定，可用代数方法由 Riccati 方程计算. 有了 $\phi_0(x)$ 就可确定此不变量，从而由量子化条件直接算出这样的量子系统所有激发态的能谱. 与超对称量子力学类似，对有形状不变势的量子系统，我们通过另一种更简单的方法实现了由基态能级和波函数计算出所有激发态的能谱. 计算的正确性反过来验证了此修正项确实是有形状不变势的量子系统普遍存在的一个不变量.

2. 量子化条件的级数形式

讨论 Schrödinger 方程(3)，其中势 $V(x)$ 是 x 的分片连续函数，满足(2)式. 波函数 $\psi(x)$ 在区域 $x<x_A$ 和 $x>x_B$ 是指数衰减的，因而波函数的对数微商在转折点处的值 $\phi(x_A)$ 和 $-\phi(x_B)$ 是正数.

由 Schrödinger 方程(3)直接导出波函数的对数微商 $\phi(x)$ 满足 Riccati 方程

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\phi(x) = -k(x)^2-\phi(x)^2 \quad (E\geqslant V(x)), \qquad (9)$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\phi(x) = \kappa(x)^2-\phi(x)^2 \quad (E\leqslant V(x)), \qquad (10)$$

式中 $k(x)$ 由(5)式给出，而

$$\kappa(x) = \sqrt{2\mu[V(x)-E]}/\hbar \qquad (E\leqslant V(x)). \qquad (11)$$

在转折点，

$$k(x_A) = k(x_B) = \kappa(x_A) = \kappa(x_B) = 0. \qquad (12)$$

很明显，在 $E\geqslant V(x)$ 区域 $\phi(x)$ 随 x 单调下降. 应该注意的是,在波函数 $\psi(x)$ 的零点处，$\phi(x)$ 随 x 单调下降到 $-\infty$，经过跳跃至 $+\infty$ 后继续单调下降.

对于任意选定的能量参数 E，两个转折点 x_A 和 x_B 满足 $V(x_A)=V(x_B)=E$ 和 $x_A<x_B$. 根据微积分的基本方法,把转折点之间的区域分成 m 份. 为叙述方便起见，取此 m 个间隔宽度 d 相同，$d=(x_B-x_A)/m$. 在第 j 份，$x_A+jd-d\leqslant x\leqslant x_A+jd$，$V(x)$ 可看成常数 V_j，

$$\begin{aligned}V_j &= V(x_A+jd-d/2),\\ k_j &= \sqrt{2\mu(E-V_j)}/\hbar.\end{aligned} \qquad (13)$$

在此间隔求解 Schrödinger 方程，得

$$\psi_j(x) = C_j\sin(k_jx+\delta_j). \qquad (14)$$

在间隔的两个端点，对数微商值 ϕ_{j-1} 和 ϕ_j 要分别与相邻间隔中对数微商的端点值相衔接，

$$\begin{aligned}\phi_{j-1} &= \frac{1}{\psi_j(x)}\frac{\mathrm{d}\psi_j(x)}{\mathrm{d}x}\bigg|_{x=x_A+jd-d}\\ &= k_j\cot[k_j(x_A+jd-d)+\delta_j],\\ \phi_j &= \frac{1}{\psi_j(x)}\frac{\mathrm{d}\psi_j(x)}{\mathrm{d}x}\bigg|_{x=x_A+jd}\\ &= k_j\cot[k_j(x_A+jd)+\delta_j].\end{aligned} \qquad (15)$$

由此得

$$\phi_j = k_j\cot\left\{\mathrm{Arctan}\left(\frac{k_j}{\phi_{j-1}}\right)+k_jd\right\} \qquad (16)$$

和

$$
\begin{aligned}
& k_j d = -\operatorname{Arctan}\left(\frac{k_j}{\phi_{j-1}}\right)+\operatorname{Arctan}\left(\frac{k_j}{\phi_j}\right)+q\pi, \\
& q=\begin{cases}0, & \text{在间隔 } x_A+jd-d \leqslant x<x_A+jd \text{ 内 } \phi(x) \text{ 无零点}, \\ 1, & \text{在间隔 } x_A+jd-d \leqslant x<x_A+jd \text{ 内 } \phi(x) \text{ 有一个零点}.\end{cases}
\end{aligned} \tag{17}
$$

这里的 $\operatorname{Arctan}\beta$ 是反正切函数的主值,

$$
\begin{aligned}
& \operatorname{Arctan}\beta=\alpha, \\
& \beta=\tan\alpha, \\
& (-\pi/2<\alpha \leqslant \pi/2).
\end{aligned} \tag{18}
$$

q 的取值由下面计算给出. 因为 $\phi(x)$ 在区间 $E>V(x)$ 内随 x 单调下降(见(9)式),如果在间隔 $x_A+jd-d \leqslant x<x_A+jd$ 内 $\phi(x)$ 没有零点,则

$$
\operatorname{Arctan}\left(\frac{k_j}{\phi_{j-1}}\right)<\operatorname{Arctan}\left(\frac{k_j}{\phi_j}\right) \leqslant \pi/2,
$$

(17)式中第一式等号右端的 q 为零. 如果在间隔 $x_A+jd-d \leqslant x<x_A+jd$ 内 $\phi(x)$ 有一个零点,则 $\phi_{j-1} \geqslant 0, \phi_j<0$,

$$
\operatorname{Arctan}\left(\frac{k_j}{\phi_{j-1}}\right) \sim \pi/2
$$

和

$$
\operatorname{Arctan}\left(\frac{k_j}{\phi_j}\right) \sim -\pi/2,
$$

(17)式中第一式等号右端必须补上一个附加的 π,使右端为正,且等于 $k_j d$,即 $q=1$. 既然间隔的厚度 d 很小,我们不必考虑在一个间隔内 $\phi(x)$ 出现多于一个零点的情况.

随 j 由 1 增至 m,可以应用递推关系(16)式,由 $\phi_0=\phi(x_A)$ 计算出 $\phi_m=\phi(x_B-)$. 计算精度依赖于所分的间隔数目 m. 只要 m 取得足够大,可以算得足够精确的 $\phi(x_B-)$.

把(17)式对 j 相加,j 取 1 到 m,得

$$
\begin{aligned}
\sum_{j=1}^m k_j d = {} & N\pi-\operatorname{Arctan}\left(\frac{k_1}{\phi_0}\right)+\operatorname{Arctan}\left(\frac{k_1}{\phi_1}\right) \\
& -\operatorname{Arctan}\left(\frac{k_2}{\phi_1}\right)+\operatorname{Arctan}\left(\frac{k_2}{\phi_2}\right)-\cdots \\
& -\operatorname{Arctan}\left(\frac{k_{m-1}}{\phi_{m-2}}\right)+\operatorname{Arctan}\left(\frac{k_{m-1}}{\phi_{m-1}}\right) \\
& -\operatorname{Arctan}\left(\frac{k_m}{\phi_{m-1}}\right)+\operatorname{Arctan}\left(\frac{k_m}{\phi_m}\right),
\end{aligned}
$$

其中 $\phi_0=\phi(x_A)$, $\phi_m=\phi(x_B)$, N 是波函数对数微商 $\phi(x)$ 在区间 $x_A \leqslant x<x_B$ 中的零点数. 当 m 趋于无穷,d 趋于零,得

$$
\begin{aligned}
\int_{x_A}^{x_B} k(x)\, dx = {} & N\pi+\lim_{m\to\infty}\left\{-\operatorname{Arctan}\left(\frac{k_1}{\phi(x_A)}\right)\right. \\
& +\operatorname{Arctan}\left(\frac{k_m}{\phi(x_B)}\right)+\sum_{j=1}^{m-1}\left[\operatorname{Arctan}\left(\frac{k_j}{\phi_j}\right)\right. \\
& \left.\left.-\operatorname{Arctan}\left(\frac{k_{j+1}}{\phi_j}\right)\right]\right\}.
\end{aligned} \tag{19}
$$

(19)式等号右端第一项来自波函数对数微商 $\phi(x)$ 在区域 $x_A \leqslant x<x_B$ 内零点的贡献. 如果势 $V(x)$ 在转折点连续,则由于 $\phi(x_A)>0$ 和 $\phi(x_B)<0$,随着 m 的增大,(19)式等号右端第二项和第三项都趋于零. 但如果势 $V(x)$ 在转折点不连续,则此两项可能不为零. 最后一项就是量子修正项,式中 ϕ_j 可用递推关系(16)式计算. 这就是量子化条件的级数形式. 只要 m 取得足够大,此量子化条件是精确的.

量子化条件的级数形式是可以用作实际的数值计算. 把区间 $x<x_A$ 和区间 $x>x_B$ 也分成小间隔,同样可以得到波函数对数微商的递推关系[13],

$$
\varphi_j=\kappa_j \frac{\kappa_j \tanh(\kappa_j d)+\varphi_{j-1}}{\kappa_j+\varphi_{j-1}\tanh(\kappa_j d)} \quad (x<x_A), \tag{20}
$$

$$
\varphi_{j-1}=\kappa_j \frac{\varphi_j-\kappa_j \tanh(\kappa_j d)}{\kappa_j-\varphi_j \tanh(\kappa_j d)} \quad (x>x_B). \tag{21}
$$

由于 Schrödinger 方程是二阶线性微分方程,有两个线性独立的解. 在无穷远处,由于 $E<V$,一个解指数发散,一个解指数收敛. 后者才是物理允许的解. 根据能量参数 E 和无穷远处的势能值 $V(\pm\infty)$,可算出无穷远处的对数微商值 $\phi(\pm\infty)$. 根据递推关系(20)式,可由 $x=-\infty$ 处的对数微商值 $\phi(-\infty)$ 算出 x_A 点的对数微商值 $\phi(x_A)$,再由递推关系(16)式算得 x_B 点的对数微商值 $\phi(x_B-)$. 另一方面,根据递推关系(21)式,可由 $x=\pm\infty$ 处的对数微商值 $\phi(+\infty)$ 算出 x_B 点的对数微商值 $\phi(x_B+)$. 根据 Sturm-Liouville 定理,随能量参数 E 的增加,$\phi(x_B-)$ 单调下降,$\phi(x_B+)$ 单调上升,容易用二分法确定束缚态的能量 E[13].

3. 量子化条件的积分形式

量子化条件的级数形式(19)式的等号右端包含

一项对 m 的求和式. 当 m 趋于无穷大时求和式变成积分,得

$$
\begin{aligned}
&\int_{x_A}^{x_B} k(x)\mathrm{d}x \\
&= N\pi + \lim_{m\to\infty}\left\{-\mathrm{Arctan}\left(\frac{k_1}{\phi(x_A)}\right)\right. \\
&\quad\left.+\mathrm{Arctan}\left(\frac{k_m}{\phi(x_B)}\right)\right\} \\
&\quad+\int_{x_A}^{x_B}\phi(x)\left[\frac{\mathrm{d}k(x)}{\mathrm{d}x}\right]\left[\frac{\mathrm{d}\phi(x)}{\mathrm{d}x}\right]^{-1}\mathrm{d}x. \qquad (22)
\end{aligned}
$$

如果势 $V(x)$在转折点连续,$k(x_A)=0$ 和 $k(x_B)=0$,则得量子化条件(4)式.本节采用更直接的方法证明此量子化条件[14].

从 Schrödinger 方程(3)直接推出 Riccati 方程(9)和(10).令 $\tan\theta(x)=k(x)/\phi(x)$,有

$$\theta(x) = \mathrm{Arctan}[k(x)/\phi(x)] + n\pi.$$

其中 Arctan β 是反正切函数的主值. 既然在区域 $E\geqslant V(x)$,对数微商$\phi(x)$随 x 单调下降,每当 x 增加而经过$\phi(x)$的零点时,n 就增加 1. 这样,

$$
\begin{aligned}
&\int_{x_A}^{x_B}\frac{\mathrm{d}\theta(x)}{\mathrm{d}x}\mathrm{d}x \\
&= N\pi - \lim_{x\to x_A+}\mathrm{Arctan}\left(\frac{k(x)}{\phi(x_A)}\right) \\
&\quad+\lim_{x\to x_B-}+\mathrm{Arctan}\left(\frac{k(x)}{\phi(x_B)}\right), \qquad (23)
\end{aligned}
$$

式中 N 是波函数对数微商$\phi(x)$在区域 $x_A\leqslant x<x_B$ 的零点数,$N=n+1$,其中 n 是波函数$\psi(x)$在此区域的节点数. 在此区域外,波函数没有节点,对数微商没有零点.由于 Sturm 定理,节点数 N 随能量E 的增加而逐渐增加.

另一方面,由(9)式得

$$
\begin{aligned}
&\frac{\mathrm{d}\theta(x)}{\mathrm{d}x} \\
&= k(x) - \phi(x)\left[\frac{\mathrm{d}k(x)}{\mathrm{d}x}\right]\left[\frac{\mathrm{d}\phi(x)}{\mathrm{d}x}\right]^{-1} \\
&\qquad (x_A\leqslant x\leqslant x_B). \qquad (24)
\end{aligned}
$$

将(24)式两边对 x 积分,并用(23)式代入,就得(22)式.

4. 有形状不变势的量子系统

4.1. 有限方势阱

讨论有限方势阱 $V(x)$,

$$V(x) = \begin{cases} V_A & (x\leqslant-\pi),\\ V_B & (x\geqslant\pi),\\ 0 & (-\pi<x<\pi). \end{cases} \qquad (25)$$

这是量子力学教科书中常讨论的一个典型例子,但用我们得到的精确量子化条件(22)式来计算就会变得十分简单.

取参数 E 满足$E<V_A$ 和 $E<V_B$,在转折点 $x_A=-\pi$ 和 $x_B=\pi$ 处波函数的对数微商为

$$
\begin{aligned}
\phi(x_A) &= \kappa_\mathrm{I} = \sqrt{2\mu(V_A-E)}/\hbar,\\
\phi(x_B) &= -\kappa_\mathrm{F} = -\sqrt{2\mu(V_B-E)}/\hbar.
\end{aligned} \qquad (26)
$$

因为势在转折点处不连续,(22)式的极限项必须保留. 但由于 $k(x)$在两个转折点间取常数值,修正项为零. 由(22)式得常数波矢 $k^{(n)}$满足[15]

$$
\begin{aligned}
2\pi k^{(n)} &= n\pi - \mathrm{Arctan}(k^{(n)}/\kappa_\mathrm{I})\\
&\quad-\mathrm{Arctan}(k^{(n)}/\kappa_\mathrm{F}), \qquad (27)
\end{aligned}
$$

式中 n 是波函数对数微商$\phi_n(x)$在区域$|x|<\pi$ 内的零点数.当 V_A 和 V_B 为无限大时,(27)式等号右端后两项为零,即对应 Bohr 量子化条件.

4.2. 一维简谐振子

一维简谐振子势为

$$V(x) = M\omega^2x^2/2.$$

解得转折点为

$$x_B = -x_A = \alpha^{-1}\sqrt{2E_n/(\hbar\omega)},$$

其中 $\alpha=\sqrt{M\omega/\hbar}$,$(n+1)$是波函数对数微商 $\phi_n(x)$的零点数. 两转折点间的波矢为 $k_n(x)=\alpha^2[(x-x_A)(x_B-x)]^{1/2}$.基态波函数的对数微商 $\phi_0(x)$有一个零点,但没有极点. 再考虑对空间反演的对称性,它只能取 $-Cx$ 形式.因 $\phi_0(x)$随 x 单调下降,$C>0$. 把此形式代入 Riccati 方程(9),解得 $C=\alpha^2$ 和 $E_0=\hbar\omega/2$. 显然,当 $x\to\infty$ 时 $\phi_0(x)$是负的,当 $x\to-\infty$ 时 $\phi_0(x)$是正的,符合所需的物理边界条件. 本节讨论的其他方程解都满足此性质,不再重复.在量子化条件(4)式中两个积分分别计算如下:

$$\int_{x_A}^{x_B}\phi_0(x)\left[\frac{\mathrm{d}k_0(x)}{\mathrm{d}x}\right]\left[\frac{\mathrm{d}\phi_0(x)}{\mathrm{d}x}\right]^{-1}\mathrm{d}x = -\pi/2, \qquad (28)$$

$$\int_{x_A}^{x_B}k_n(x)\mathrm{d}x = E_n\pi/(\hbar\omega). \qquad (29)$$

由此计算得到的一维简谐振子能级符合通常结果[9],

$$E_n = (n+1/2)\hbar\omega. \qquad (30)$$

4.3. 一维 Morse 势及其推广势

一维推广的 Morse 势为

$$V(x)=D(e^{-2x/a}-Ce^{-x/a})=Dy(y-C),$$

其中 $y=e^{-x/a}$. 当 $C=2$ 时就是通常的 Morse 势[3]. 满足 Riccati 方程(9)只含一个零点的对数微商只能取

$$\phi_0(x)=\sqrt{2MD}(y-C/2)/\hbar+1/(2a).$$

计算得到量子化条件(4)式中两个积分分别为

$$\int_{x_A}^{x_B}\phi_0(x)\left[\frac{\mathrm{d}k_0(x)}{\mathrm{d}x}\right]\left[\frac{\mathrm{d}\phi_0(x)}{\mathrm{d}x}\right]^{-1}\mathrm{d}x=-\pi/2, \quad (31)$$

$$\int_{x_A}^{x_B}k_n(x)\mathrm{d}x=\frac{a\sqrt{2M}}{2\hbar}[C\sqrt{D}-2\sqrt{-E_n}]\pi. \quad (32)$$

由此计算得到推广的一维 Morse 势的能谱为

$$E_n=-\frac{D}{4}\left[C-\frac{(2n+1)\hbar}{a\sqrt{2MD}}\right]^2. \quad (33)$$

当 $C=2$ 时此结果符合一维 Morse 势能谱的通常计算结果[3].

Morse 势还有进一步的推广形式[16],即

$$V(x)=D[1-b(e^{r/a}-1)^{-1}]^2.$$

令 $y=(e^{r/a}-1)^{-1}$,满足 Riccati 方程(9)只含一个零点的对数微商只能取

$$\phi_0(x)=C(y+1/2)-MDb(b+2)/(\hbar^2C),$$

$$C=[1+\sqrt{1+8MDa^2b^2/\hbar^2}]/(2a).$$

计算得到量子化条件(4)式中两个积分分别为

$$\int_{x_A}^{x_B}\phi_0(x)\left[\frac{\mathrm{d}k_0(x)}{\mathrm{d}x}\right]\left[\frac{\mathrm{d}\phi_0(x)}{\mathrm{d}x}\right]^{-1}\mathrm{d}x$$

$$=-\frac{\sqrt{2MD}ab\pi}{\hbar}+\pi[aC-1], \quad (34)$$

$$\int_{x_A}^{x_B}k_n(x)\mathrm{d}x$$

$$=\frac{\sqrt{2MD}a\pi}{\hbar}\left[\sqrt{(b+1)^2-\frac{E_n}{D}}-\sqrt{1-\frac{E_n}{D}}-b\right]. \quad (35)$$

由量子化条件(4)式计算得到能谱为[16]

$$E_n=D-\frac{\hbar^2}{2M}\left[\frac{MDb(b+2)}{\hbar^2(C+n/a)}-\frac{C+n/a}{2}\right]^2. \quad (36)$$

4.4. 一维 Rosen-Morse 势

不对称的一维 Rosen-Morse 势[3]为

$$V(x)=-U_0\mathrm{sech}^2(x/a)+U_1\tanh(x/a),$$

其中 $0\leqslant U_1<2U_0$. 当 $U_1=0$ 时称它为对称的一维 Rosen-Morse 势. 设 $y=\tanh(x/a)$, Riccati 方程(9)有一个零点的解为

$$\phi_0(x)=-Cy-MU_1/(\hbar^2C),$$

$$C=[\sqrt{1+8MU_0a^2/\hbar^2}-1]/(2a).$$

由此计算得到量子化条件(4)式中的两个积分分别为

$$\int_{x_A}^{x_B}\phi_0(x)\left[\frac{\mathrm{d}k_0(x)}{\mathrm{d}x}\right]\left[\frac{\mathrm{d}\phi_0(x)}{\mathrm{d}x}\right]^{-1}\mathrm{d}x$$

$$=\frac{a\pi\sqrt{2MU_0}}{\hbar}-\pi(aC+1), \quad (37)$$

$$\int_{x_A}^{x_B}k_n(x)\mathrm{d}x$$

$$=\frac{a\pi}{2}\frac{\sqrt{2MU_0}}{\hbar}\left[2-\sqrt{\frac{-E_n-U_1}{U_0}}-\sqrt{\frac{-E_n+U_1}{U_0}}\right]. \quad (38)$$

由量子化条件(4)式解得能级为[3]

$$-E_n=\frac{\hbar^2(C-n/a)^2}{2M}+\frac{MU_1^2}{2\hbar^2(C-n/a)^2}. \quad (39)$$

存在有 n 个节点的波函数解的条件是

$$U_1<\hbar^2(C-n/a)^2/M<2U_0.$$

4.5. 一维 Pöschl-Teller 势

第一类一维 Pöschl-Teller 势[3]是

$$V(x)=\frac{\hbar^2}{2Ma^2}\left[\frac{\mu(\mu-1)}{\sin^2(x/a)}+\frac{\lambda(\lambda-1)}{\cos^2(x/a)}\right]$$

$$\left(0<x<\frac{a\pi}{2}\right), \quad (40)$$

式中 μ 和 λ 是大于 1 的常数. 当 x 趋于 0 或 $a\pi/2$ 时势 $V(x)$ 趋于无穷大. 设 $y=\tan^2(x/a)$, Riccati 方程(9)有一个零点的解为

$$\phi_0(x)=-\lambda y^{1/2}/a+\mu y^{-1/2}/a.$$

计算得到量子化条件(4)式中的两个积分分别为

$$\int_{x_A}^{x_B}\phi_0(x)\left[\frac{\mathrm{d}k_0(x)}{\mathrm{d}x}\right]\left[\frac{\mathrm{d}\phi_0(x)}{\mathrm{d}x}\right]^{-1}\mathrm{d}x$$

$$=\frac{\pi}{2}[(\mu+\lambda-2)-\sqrt{\mu(\mu-1)}-\sqrt{\lambda(\lambda-1)}], \quad (41)$$

$$\int_{x_A}^{x_B}k_n(x)\mathrm{d}x$$

$$=\frac{\pi}{2}\left[\frac{a\sqrt{2ME_n}}{\hbar}-\sqrt{\mu(\mu-1)}-\sqrt{\lambda(\lambda-1)}\right]. \quad (42)$$

激发态能谱为[3]

$$E_n = \frac{\hbar^2(\mu+\lambda+2n)^2}{2Ma^2}. \tag{43}$$

第二类一维 Pöschl-Teller 势[3]是

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{2Ma^2}\left[\frac{\mu(\mu-1)}{\sinh^2(x/a)} - \frac{\lambda(\lambda+1)}{\cosh^2(x/a)}\right], \tag{44}$$

式中 $\lambda > \mu - 1 > 0$. $V(x)$在 $x = 0$ 处趋于无穷大. 设 $y = \tanh^2(x/a)$,Riccati 方程(9)一个零点的解为

$$\phi_0(x) = -\lambda y^{1/2}/a + \mu y^{-1/2}/a.$$

计算得到量子化条件(4)式中的两个积分分别为

$$\int_{x_A}^{x_B}\phi_0(x)\left[\frac{\mathrm{d}k_0(x)}{\mathrm{d}x}\right]\left[\frac{\mathrm{d}\phi_0(x)}{\mathrm{d}x}\right]^{-1}\mathrm{d}x$$

$$= \frac{\pi}{2}\left[(\mu-\lambda-2) - \sqrt{\mu(\mu-1)} + \sqrt{\lambda(\lambda+1)}\right], \tag{45}$$

$$\int_{x_A}^{x_B} k_n(x)\,\mathrm{d}x$$

$$= \frac{\pi}{2}\left[-\frac{a\sqrt{-2ME_n}}{\hbar} - \sqrt{\mu(\mu-1)} + \sqrt{\lambda(\lambda+1)}\right]. \tag{46}$$

激发态的能谱为[3]

$$E_n = -\frac{\hbar^2(\lambda-\mu-2n)^2}{2Ma^2} \quad (0 \leqslant n < (\lambda-\mu)/2). \tag{47}$$

4.6. Eckart 势

Eckart 势[2]是

$$V(x) = U_0\,\mathrm{csch}^2(r/a) - U_1\coth(r/a).$$

设 $y = \coth(r/a)$,Riccati 方程(9)有一个零点的解为

$$\phi_0(x) = Cy - MU_1/(\hbar^2 C),$$

$$C = \left[1 + \sqrt{1 + 8Ma^2U_0/\hbar^2}\right]/(2a).$$

计算得到量子化条件(4)式中的两个积分分别为

$$\int_{x_A}^{x_B}\phi_0(x)\left[\frac{\mathrm{d}k_0(x)}{\mathrm{d}x}\right]\left[\frac{\mathrm{d}\phi_0(x)}{\mathrm{d}x}\right]^{-1}\mathrm{d}x$$

$$= -\frac{a\pi\sqrt{2MU_0}}{\hbar} + \pi[Ca - 1], \tag{48}$$

$$\int_{x_A}^{x_B} k_n(x)\,\mathrm{d}x$$

$$= -\frac{a\pi\sqrt{2MU_0}}{2\hbar}\left[2 + \sqrt{\frac{-E_n - U_1}{U_0}} - \sqrt{\frac{-E_n + U_1}{U_0}}\right]. \tag{49}$$

由量子化条件(4)式计算得到激发态能谱为[2]

$$-E_n = \frac{MU_1^2}{2\hbar^2(C+n/a)^2} + \frac{\hbar^2(C+n/a)^2}{2M}. \tag{50}$$

4.7. Hulthen 势

Hulthen 势[3]是

$$V(x) = -U_0(\mathrm{e}^{r/a} - 1)^{-1},$$

其中 $U_0 > 0$ 和 $a > 0$. 设 $y = (\mathrm{e}^{r/a} - 1)^{-1}$,Riccati 方程(9)有一个零点的解为

$$\phi_0(x) = (y + 1/2)/a - aMU_0/\hbar^2.$$

计算得到量子化条件(4)式中的两个积分分别为

$$\int_{x_A}^{x_B}\phi_0(x)\left[\frac{\mathrm{d}k_0(x)}{\mathrm{d}x}\right]\left[\frac{\mathrm{d}\phi_0(x)}{\mathrm{d}x}\right]^{-1}\mathrm{d}x = 0, \tag{51}$$

$$\int_{x_A}^{x_B} k_n(x)\,\mathrm{d}x$$

$$= \frac{a\pi\sqrt{2MU_0}}{\hbar}\left[\sqrt{1 - E_n/U_0} - \sqrt{-E_n/U_0}\right]. \tag{52}$$

由量子化条件(4)式计算得到激发态能谱为[3]

$$E_n = -U_0\left[\frac{a\sqrt{2MU_0}}{2\hbar(n+1)} - \frac{\hbar(n+1)}{2a\sqrt{2MU_0}}\right]^2. \tag{53}$$

4.8. 三维简谐振子

三维简谐振子的等效势为

$$U_l(r) = l(l+1)\hbar^2/(2Mr^2) + M\omega^2r^2/2.$$

设 $\alpha = \sqrt{M\omega/\hbar}$,$(n-l)$是非负偶数,$(n-l+2)/2$ 是波函数对数微商 $\phi_{nl}(r)$包含的零点数. 只有一个零点的对数微商为

$$\phi_{ll}(r) = (l+1)r^{-1} - \alpha^2 r,$$

对应能量

$$E_{ll} = \hbar\omega(l + 3/2).$$

在量子化条件(8)式中的两个积分分别为

$$\int_{r_A}^{r_B}\phi_{nl}(r)\left[\frac{\mathrm{d}k_{nl}(r)}{\mathrm{d}r}\right]\left[\frac{\mathrm{d}\phi_{nl}(r)}{\mathrm{d}r}\right]^{-1}\mathrm{d}r$$

$$= \left[l - \sqrt{l(l+1)} - 1/2\right]\pi/2 \quad (n = l), \tag{54}$$

$$\int_{r_A}^{r_B} k_{nl}(r)\,\mathrm{d}r$$

$$= \left[\frac{E_{nl}}{\hbar\omega} - \sqrt{l(l+1)}\right]\pi/2. \tag{55}$$

计算得到三维简谐振子量子化条件和能级分别为[9]

$$\int_{r_A}^{r_B} k_{nl}(r)\,\mathrm{d}r = \left[n - \sqrt{l(l+1)} + 3/2\right]\pi/2, \quad E_{nl} = (n + 3/2)\hbar\omega. \tag{56}$$

4.9. 氢原子

氢原子的等效势为

$$U_l(r) = l(l+1)\hbar^2/(2Mr^2) - \mathrm{e}^2/r.$$

当 $l>0$ 时，满足 $U_l(r_A)=U_l(r_B)=E_{nl}$ 的两个转折点 r_A 和 r_B 为

$$r_A=(-2E_{nl})^{-1}\left\{e^2-[e^4+2l(l+1)\hbar^2E_{nl}/M]^{1/2}\right\},$$
$$r_B=(-2E_{nl})^{-1}\left\{e^2+[e^4+2l(l+1)\hbar^2E_{nl}/M]^{1/2}\right\},\tag{57}$$

式中$(n-l)$是波函数对数微商 $\phi_{nl}(r)$的零点数．当 $l=0$ 时，定义 $r_A=0$，$U(r_A)=-e^2/r_A\sim-\infty$，而 r_B 仍满足 $U(r_B)=E_{nl}$．这样，(57)式对 $l=0$ 仍成立．当 $l=0$ 时，在原点附近 $k_{nl}(r)\sim r^{-1/2}$ 和 $\phi_{nl}(r)\sim r^{-1}$，因而(22)式中的两个含极限的项都为零．含一个零点的波函数对数微商只能取

$$\phi_{(l+1)l}(r)=(l+1)/r-Me^2/[(l+1)\hbar^2]$$

和

$$E_{(l+1)l}=-Me^4/[2(l+1)^2\hbar^2].$$

计算得到量子化条件(8)式中的两个积分分别为

$$\int_{r_A}^{r_B}\phi_{nl}(r)\left[\frac{\mathrm{d}k_{nl}(r)}{\mathrm{d}r}\right]\left[\frac{\mathrm{d}\phi_{nl}(r)}{\mathrm{d}r}\right]^{-1}\mathrm{d}r$$
$$=\left[l-\sqrt{l(l+1)}\right]\pi\qquad(n=l+1),\tag{58}$$
$$\int_{r_A}^{r_B}k_{nl}(r)\mathrm{d}r$$
$$=\left[\frac{e^2}{\hbar}\sqrt{\frac{M}{-2E_{nl}}}-\sqrt{l(l+1)}\right]\pi.\tag{59}$$

由此得氢原子的量子化条件和能级分别为[9]

$$\int_{r_A}^{r_B}k_{nl}(r)\mathrm{d}r=\left[n-\sqrt{l(l+1)}\right]\pi,$$
$$E_{nl}=-\frac{Me^4}{2n^2\hbar^2}.\tag{60}$$

以上根据量子化条件中的修正项独立于波函数节点数的条件，对所有已知的有形状不变势的量子系统[2,3,15]计算得到的能级与已知的精确解符合，由此验证了在量子化条件中的修正项确实是有形状不变势的量子系统的不变量．这是有形状不变势的量子系统独有的不变量．

5．波函数对数微商的计算

根据 Sturm 定理，随着能量升高一维 Schrödinger 系统的波函数的节点数由零逐个增加．波函数对数微商的零点数等于波函数节点数再加 1，极点数等于波函数的节点数，因而它的形式相当确定．把此形式代入 Riccati 方程，不一定能够得到解析解．但对有形状不变势的量子系统，这样的解是存在的．这正是有形状不变势量子系统的一个重要特征．因此，对有形状不变势的量子系统，激发态的能量和波函数都可以由 Riccati 方程用代数方法计算．下面就一维简谐振子举例说明能级和波函数的计算方法．

一维简谐振子的 Riccati 方程为

$$\frac{\mathrm{d}\phi_n(x)}{\mathrm{d}x}=-\frac{2M}{\hbar^2}[E_n-V(x)]-\phi_n(x)^2.\tag{61}$$

由于谐振子势对 x 的反演是对称的，波函数对数微商 $\phi_n(x)$对 x 的反演总是反对称的．第一激发态的波函数对数微商 $\phi_1(x)$含两个零点和一个极点，只能取如下形式：

$$\phi_1(x)=\frac{c_2x^2+c_0}{x}\qquad(c_2<0).$$

代入 Riccati 方程(61)得

$$\begin{aligned}&c_2-c_0x^{-2}\\&=-\frac{2ME_1}{\hbar^2}+\left(\frac{M\omega}{\hbar}\right)^2x^2-c_2^2x^2\\&\quad-2c_2c_0-c_0^2x^{-2}.\end{aligned}$$

解为

$$\begin{aligned}c_0&=1,\\c_2&=-M\omega/\hbar=-\alpha^2,\\\phi_1(x)&=-\alpha^2x+x^{-1},\\E_1&=\frac{-\hbar^23c_2}{2M}=\frac{3\hbar\omega}{2}.\end{aligned}$$

第二激发态的波函数对数微商 $\phi_2(x)$含三个零点和两个极点，只能取如下形式：

$$\phi_2(x)=\frac{c_3x^3+c_1x}{x^2+c_2}\qquad(c_3<0).$$

代入 Riccati 方程(61)得

$$\begin{aligned}&(3c_3x^2+c_1)(x^2+c_2)-(c_3x^3+c_1x)2x\\&=\left\{-\frac{2ME_2}{\hbar^2}+\left(\frac{M\omega}{\hbar}\right)^2x^2\right\}(x^2+c_2)^2\\&\quad-c_3^2x^6-2c_3c_1x^4-c_1^2x^2.\end{aligned}$$

解为

$$\begin{aligned}c_3&=-\alpha^2,\\c_2&=-\alpha^{-2}/2,\\c_1&=5/2,\\\phi_2(x)&=\frac{-2\alpha^4x^3+5\alpha^2x}{2\alpha^2x^2-1},\\E_2&=\frac{5\hbar\omega}{2}.\end{aligned}$$

6. 结 论

本文提出并证明了一维 Schrödinger 方程的量子化条件(4)式和三维球对称 Schrödinger 方程的量子化条件(8)式.证明中没有引入任何近似,因而此量子化条件是精确的.在量子数较大时,精确的量子化条件给出 WKB 近似结果.精确的量子化条件的级数形式可用来作数值计算,计算精度相当高.精确的量子化条件的积分形式中,除了通常的 $N\pi$ 项外,还有一项修正项.对超对称量子力学中所讨论的有形状不变势的量子系统,我们发现此修正项是一个不变量,它不依赖于波函数的节点数.对这些系统,可用基态能级和波函数确定此不变量的值,从而由精确的量子化条件容易得到全部束缚态的能级.能级计算的正确性又反过来验证了此修正项正是有形状不变势的量子系统的一个不变量.有形状不变势的量子系统还有一个重要的特征,就是波函数的对数微商可以通过代数方法解 Riccati 方程得到.在超对称量子力学中对有形状不变势的量子系统引入超对称势,它与基态波函数对数微商成比例,由超对称势可以计算得到所有激发态的能谱和波函数.

[1] Witten E 1981 *Nucl. Phys.* B **188** 513
[2] Cooper F, Khare A, Sukhatme U 1995 *Phys. Rep.* **251** 267
[3] de Lange O L, Raab R E 1991 *Operator Methods in Quantum Mechanics* (Oxford: Clarendon Press)
[4] Gendenshtein L 1983 *JETP Lett.* **38** 356
[5] Dutt R, Khare A, Sukhatme U 1986 *Phys. Lett.* B **181** 295
[6] Dabrowska J, Khare A, Sukhatme U 1988 *J. Phys. A* **21** L195
[7] Cooper F, Ginocchio J N, Wopf A 1988 *Phys. Lett.* A **129** 145
[8] Khare A, Sukhatme U 1988 *J. Phys. A* **21** L501
[9] Schiff L I 1968 *Quantum Mechanics* (3rd ed) (New York: McGraw-Hill)
[10] Wentzel G 1926 *Z. Physik* **38** 518
[11] Kramers H A 1926 *Z. Physik* **39** 828
[12] Brillouin L 1926 *Compt. Rend.* **183** 24
[13] Ma Z Q, Xu B W 2005 *Int. J. Mod. Phys.* E **14** 599
[14] Ma Z Q, Xu B W 2005 *Europhys. Lett.* **69** 685
[15] Messiah A 1961 *Quantum Mechanics* (Amsterdam: North-Holland) p88
[16] Mesa A D S, Quesne C, Smirnov Y F 1998 *J. Phys. A* **31** 321

Exact quantization rule and the invariant *

Ma Zhong-Qi[1)†] Xu Bo-Wei[2)]

1)(*Institute of High Energy Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing* 100049, *China*)

2)(*Department of Physics, Shanghai Jiaotong University, Shanghai* 200030, *China*)

(Received 14 January 2005; revised manuscript received 31 August 2005)

Abstract

We present and prove the exact quantization rules both for the one-dimensional Schrödinger equation and for the three-dimensional Schrödinger equation with a spherically symmetric potential. In the exact quantization rule, in addition to the usual term $N\pi$, there is an integral term, called the correction term. For the quantum systems with a so-called shape invariant potential in the supersymmetric quantum mechanics, we find that the correction term is an invariant, independent of the number of nodes in the wave functions. In those systems, the invariant can be determined with the help of the energy and the wave function of the ground state, and then, the energy levels of all the bound states can be easily calculated from the exact quantization rule. Conversely, the validity of the calculated energy levels shows that the correction term is an invariant in those quantum system with a shape invariant potential. The systems with a shape invariant potential we calculated in this paper are the one-dimensional systems with a finite square well, with the harmonic oscillator potential, with the Morse potential and its generalizations, with the Rosen-Morse potentials, with the Pöschl-Teller potentials, with the Eckart potential, and with the Hulthen potential, and the three-dimensional systems of harmonic oscillators and the hydrogen atom.

Keywords: quantization rule, supersymmetric quantum mechanics, shape invariant potential, invariant

PACC: 0365, 1130

---

* Project supported by the National Natural Science Foundation, China (Grant No. 10475082).

† E-mail: mazq@mail.ihep.ac.cn