第二章习题答案

习题 2.1

因为

$$J = \frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi\nabla\Psi^* - \Psi^*\nabla\Psi\right),$$

所以

$$\frac{\partial J}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m}\left(\left(\frac{\partial\Psi}{\partial t}\right)\nabla\Psi^* + \Psi\left(\nabla\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\right) - \left(\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\right)\nabla\Psi - \Psi^*\left(\nabla\frac{\partial\Psi}{\partial t}\right)\right).$$

因为 $i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = E\Psi$ ，E 是实数，所以 $\left(i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}\right)^* = -i\hbar\frac{\partial\Psi^*}{\partial t} = \left(E\Psi\right)^* = E\Psi^*$ 。

所以

$$\begin{aligned}
\frac{\partial J}{\partial t} &= \frac{1}{2m}\left(\left(E\Psi\right)\nabla\Psi^* + \Psi\left(-E\nabla\Psi^*\right) - \left(-E\Psi^*\right)\nabla\Psi - \Psi^*\left(E\nabla\Psi\right)\right)\\
&= \frac{1}{2m}\left(E\Psi\nabla\Psi^* - E\Psi\nabla\Psi^* + E\Psi^*\nabla\Psi - E\Psi^*\nabla\Psi\right)\\
&= 0.
\end{aligned}$$

习题 2.2

(1)

$$\begin{aligned}
\nabla\psi_1 &= \frac{\partial\psi_1}{\partial r}\hat{r} = -\frac{1-ikr}{r^2}e^{ikr}\hat{r},\\
\nabla\psi_1^* &= \frac{\partial\psi_1^*}{\partial r}\hat{r} = -\frac{1+ikr}{r^2}e^{-ikr}\hat{r}.
\end{aligned}$$

根据习题 2.1 可得，概率流密度与时间无关，所以

$$\begin{aligned}
J_1(t) \equiv J_1(0) &= \frac{i\hbar}{2m}\left(\psi_1\nabla\psi_1^* - \psi_1^*\nabla\psi_1\right)\\
&= \frac{i\hbar}{2m}\left(\frac{1}{r}e^{ikr}\left(-\frac{1+ikr}{r^2}e^{-ikr}\hat{r}\right) - \frac{1}{r}e^{-ikr}\left(-\frac{1-ikr}{r^2}e^{ikr}\hat{r}\right)\right)\\
&= \frac{\hbar k}{mr^2}\hat{r}.
\end{aligned}$$

(2) 因为 $\psi_2 = \psi_1^*$ ，所以

$$
\begin{aligned}
J_2(t) \equiv J_2(0) &= \frac{i\hbar}{2m}\left(\psi_2 \nabla \psi_2^* - \psi_2^* \nabla \psi_2\right) \\
&= \frac{i\hbar}{2m}\left(\psi_1^* \nabla \psi_1 - \psi_1 \nabla \psi_1^*\right) \\
&= -J_1(0) \\
&= -\frac{\hbar k}{m r^2}\hat{r}.
\end{aligned}
$$

习题 2.3

因为

$$
-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x),
$$

所以

$$
\begin{cases}
\psi(x) = 0, & x < 0, \\
-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) = E\psi(x), & 0 < x < a, \\
\psi(x) = 0, & x > a,
\end{cases}
$$

因此

$$
\psi(x) = \begin{cases}
0, & x < 0, \\
A\cos kx + B\sin kx, & 0 < x < a, \\
0, & x > a,
\end{cases}
$$

其中

$$
k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar},
$$

而波函数自身是连续的 (注意，因为势能函数在 $(-\epsilon, \epsilon), (a-\epsilon, a+\epsilon)$ 是无界的，所以波函数的一阶导数在 $x = 0$ 与 $x = a$ 处是不连续的)，即

$$
\lim_{x \nearrow -a} \psi(x) = \lim_{x \searrow -a} \psi(x), \lim_{x \searrow a} \psi(x) = \lim_{x \nearrow a} \psi(x),
$$

因此

$$
A = 0,
$$

$$
\sin ka = 0,
$$

$$
k = \frac{n\pi}{a}, n = 1, 2, \ldots,
$$

因此

$$\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}=\frac{n\pi}{a},$$

能级为

$$E=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}.$$

$$\psi(x)=\begin{cases}0, & x<0,\\ B\sin\frac{n\pi x}{a}, & 0<x<a,\\ 0, & x>a,\end{cases}$$

而

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty}\left|\psi(x)\right|^2dx&=B^2\int_0^a\sin^2\frac{n\pi x}{a}dx\\&=\frac{aB^2}{n\pi}\int_0^{n\pi}\sin^2u\,du,\end{aligned}$$

此处利用了换元 $u=\dfrac{n\pi x}{a}$ 。注意 $f(u)=\sin^2u$ 的周期为 π ，而 $f(u)=\sin^2u$ 在一个周期内的平均值为 $\dfrac{1}{2}$ ，因此

$$\int_{-\infty}^{\infty}\left|\psi(x)\right|^2dx=\frac{aB^2}{n\pi}\frac{n\pi}{2}=\frac{1}{2}aB^2=1,$$

$$B=\sqrt{\frac{2}{a}},$$

波函数为

$$\psi(x)=\begin{cases}0, & x<0,\\ \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}, & 0<x<a,\\ 0, & x>a,\end{cases}$$

其中 $n=1,2,\ldots$ 。

习题 2.4

(2.6.14) 的表达式为

$$\psi_n(x) = \begin{cases} A \sin \frac{n\pi}{2a}(x+a), & |x| < a, \\ 0, & |x| \geq a, \end{cases}$$

因此

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} \left|\psi(x)\right|^2 dx &= A^2 \int_{-a}^{a} \sin^2 \frac{n\pi(x+a)}{2a} dx \\
&= \frac{2aA^2}{n\pi} \int_0^{n\pi} \sin^2 u\, du \\
&= \frac{2aA^2}{n\pi} \frac{n\pi}{2} \\
&= aA^2 = 1,
\end{aligned}$$

$$A = \sqrt{\frac{1}{a}}.$$

习题 2.5

$$\psi_n(x) = \left(\frac{\alpha}{\pi^{1/2} 2^n n!}\right)^{1/2} e^{-\alpha^2 x^2/2} H_n(\alpha x),$$

当 $n = 1$ 时，$H_n(\alpha x) = 2\alpha x$ ，因此

$$\psi_1(x) = \left(\frac{2\alpha}{\pi^{1/2}}\right)^{1/2} e^{-\alpha^2 x^2/2} \alpha x,$$

$$\left|\psi_1(x)\right|^2 = \left(\frac{2\alpha}{\pi^{1/2}}\right) e^{-\alpha^2 x^2} (\alpha x)^2,$$

因为 $\left|\psi_1(x)\right|^2 > 0$ ，所以 $\left|\psi_1(x)\right|^2$ 取到极大值当且仅当 $\log\left(\left|\psi_1(x)\right|^2\right)$ 取到极大值，而

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial x} \log\left(\left|\psi_1(x)\right|^2\right) &= \frac{\partial}{\partial x}\left(\log\left(\frac{2\alpha}{\pi^{1/2}}\right) - \alpha^2 x^2 + 2\log\alpha + 2\log x\right) \\
&= -2\alpha^2 x + \frac{2}{x},
\end{aligned}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \log\left(\left|\psi_1(x)\right|^2\right) = -2\alpha^2 - \frac{2}{x^2} < 0,$$

因此，当 $\frac{\partial}{\partial x} \log\left(\left|\psi_1(x)\right|^2\right) = 0$ 时，$\left|\psi_1(x)\right|^2$ 取到极大值，对应

$$x = \pm \frac{1}{a}.$$

习题 2.6

一维定态薛定谔方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x)+V(x)\psi(x)=E\psi(x),$$

因此

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(-x)+V(-x)\psi(-x)=E\psi(-x),$$

而

$$V(x)=V(-x),$$

因此

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(-x)+V(x)\psi(-x)=E\psi(-x),$$

其中 $\psi''(-x)$ 是二阶导数 $\theta(y)=\psi''(y)$ 在 $y=-x$ 处的取值。定义坐标反转函数

$$P(x)=-x,$$

因此

$$P'(x)\equiv-1,$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''\left(P(x)\right)+V(x)\psi\left(P(x)\right)=E\psi\left(P(x)\right),$$

而

$$\begin{aligned}\left(\psi\left(P(x)\right)\right)'&=\psi'\left(P(x)\right)P'(x)=-\psi'\left(P(x)\right),\\\left(\psi\left(P(x)\right)\right)''&=-\psi''\left(P(x)\right)P'(x)=\psi''\left(P(x)\right),\end{aligned}$$

因此

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\psi\left(P(x)\right)\right)''+V(x)\psi\left(P(x)\right)=E\psi\left(P(x)\right),$$

$\psi\left(P(x)\right)$ 是薛定谔方程的解。

任意薛定谔方程的解 $\psi(x)$ 都可以被分为偶函数与奇函数之和，记为 $\psi(x)=\psi_{\text{even}}(x)+\psi_{\text{odd}}(x)$ ，前者为偶函数 (称为偶宇称)，后者为奇函数 (称为奇宇称) 。其中

$$\psi_{\text{even}}(x)=\frac{\psi(x)+\phi(x)}{2},\psi_{\text{odd}}(x)=\frac{\psi(x)-\phi(x)}{2}.$$

附录：
一维定态薛定谔方程的解

$$X=\left\{\psi(x):-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x)+V(x)\psi(x)=E\psi(x),\int_{-\infty}^{\infty}\left|\psi(x)\right|^2dx<\infty\right\}$$

是复数域 $\mathbb{C}$ 上的向量空间。

证明：
(A) $(X,+)$ 是 Abel 群：

(I) 对于任意 $\psi(x),\theta(x)\in X$ ，都具有

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\psi(x)+\theta(x))''+V(x)(\psi(x)+\theta(x))=E(\psi(x)+\theta(x)),$$

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty}\left|\psi(x)+\theta(x)\right|^2dx &\le \int_{-\infty}^{\infty}\left(\left|\psi(x)\right|+\left|\theta(x)\right|\right)^2dx\\ &\le \int_{-\infty}^{\infty}\left(2\max\left(\left|\psi(x)\right|,\left|\theta(x)\right|\right)\right)^2dx\\ &\le \int_{-\infty}^{\infty}4\left(\left|\psi(x)\right|^2+\left|\theta(x)\right|^2\right)dx<\infty.\end{aligned}$$

所以 $\psi(x)+\theta(x)\in X$ 。

(II) $\psi(x)+\theta(x)\equiv\theta(x)+\psi(x).$

(B) X 是 $\mathbb{C}$ 上的模 (Module)，而 $\mathbb{C}$ 是域，因此 X 是向量空间：

(I) 对于任意 $\psi(x)\in X,z\in\mathbb{C}$ ，都具有

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(z\psi(x))''+V(x)(z\psi(x))=E(z\psi(x)),$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\left|z\psi(x)\right|^2dx=\left|z\right|^2\int_{-\infty}^{\infty}\left|\psi(x)\right|^2dx<\infty.$$

所以 $z\psi(x)\in X$ 。

(II) 对于任意 $\psi(x),\theta(x)\in X, z,w\in\mathbb{C}$ ，都具有

$$\begin{aligned} z(w\psi(x)) &= (zw)\psi(x),\\ 1\psi(x) &= \psi(x),\\ (z+w)\psi(x) &= z\psi(x)+w\psi(x),\\ z(\psi(x)+\theta(x)) &= z\psi(x)+z\theta(x). \end{aligned}$$

习题 2.7

因为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x)+V(x)\psi(x)=E\psi(x),$$

所以

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x)+V_0\psi(x)=E\psi(x), & x<-a,\\ -\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x)=E\psi(x), & -a<x<a,\\ -\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x)+V_0\psi(x)=E\psi(x), & x>a, \end{cases}$$

因此

$$\begin{cases} \psi''(x)-k^2\psi(x)=0, & x<-a,\\ \psi''(x)+l^2\psi(x)=0, & -a<x<a,\\ \psi''(x)-k^2\psi(x)=0, & x>a, \end{cases}$$

其中

$$\begin{cases} k=\frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar},\\ l=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \end{cases}$$

根据 $\lim\limits_{|x|\to\infty}\psi(x)=0$ 可得

$$\psi(x)=\begin{cases} Ae^{kx}, & x<-a,\\ B\cos lx+C\sin lx, & -a<x<a,\\ De^{-kx}, & x>a, \end{cases}$$

而波函数自身与其一阶导数是连续的，即

$$\lim_{x\nearrow -a}\psi(x)=\lim_{x\searrow -a}\psi(x), \lim_{x\searrow a}\psi(x)=\lim_{x\nearrow a}\psi(x),$$

$$\lim_{x\nearrow -a}\psi'(x)=\lim_{x\searrow -a}\psi'(x), \lim_{x\searrow a}\psi'(x)=\lim_{x\nearrow a}\psi'(x),$$

其一阶导数为

$$\psi'(x)=\begin{cases} Ake^{kx}, & x<-a, \\ -Bl\sin lx+Cl\cos lx, & -a<x<a, \\ -Dke^{-kx}, & x>a, \end{cases}$$

因此

$$\begin{aligned} Ae^{-ka} &= B\cos la - C\sin la, \\ De^{-ka} &= B\cos la + C\sin la, \\ Ake^{-ka} &= Bl\sin la + Cl\cos la, \\ -Dke^{-ka} &= -Bl\sin la + Cl\cos la, \end{aligned}$$

因为 $k^2+l^2=\dfrac{2mV_0}{\hbar^2}>0$，所以不可能出现 $k=l=0$ 的情况，只能是以下三种情况：

$$\text{(A) } k=0,\ l\neq 0;\ \text{(B) } k\neq 0,\ l=0;\ \text{(C) } k,l\neq 0.$$

情况 (A)：此时

$$E=V_0,$$

$$\psi(x)=\begin{cases} A, & x<-a, \\ B\cos lx+C\sin lx, & -a<x<a, \\ D, & x>a, \end{cases}$$

根据 $\lim_{|x|\to\infty}\psi(x)=0$ 可得

$$A=D=0,$$

根据**蓝色**部分可得

$$\begin{aligned} 0 &= B\cos la - C\sin la, \\ 0 &= B\cos la + C\sin la, \\ 0 &= Bl\sin la + Cl\cos la, \\ 0 &= -Bl\sin la + Cl\cos la, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} B\cos la &= 0, \\ B\sin la &= 0, \\ C\cos la &= 0, \\ C\sin la &= 0, \end{aligned}$$

而 $\cos^2 la + \sin^2 la = 1$ ，所以 $\cos la, \sin la$ 不可能同时为 0 ，因此

$$B = C = 0,$$

$\psi(x) \equiv 0$ ，这不是我们关心的解。

情况 (B)：此时

$$E = 0,$$

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{kx}, & x < -a, \\ B, & -a < x < a, \\ De^{-kx}, & x > a, \end{cases}$$

根据**蓝色**部分可得

$$\begin{aligned} Ae^{-ka} &= B, \\ De^{-ka} &= B, \\ Ake^{-ka} &= 0, \\ -Dke^{-ka} &= 0, \end{aligned}$$

因为 $k \neq 0, e^{-ka} \neq 0$ ，根据 (3), (4) 可得

$$A = D = 0,$$

根据 (1), (2) 可得

$$B = 0,$$

因此 $\psi(x) \equiv 0$ ，这不是我们关心的解。

情况 (C)：根据**蓝色**部分 $(1) \Leftrightarrow (3), (2) \Leftrightarrow (4)$ 可得

$$\begin{aligned} B\cos la - C\sin la &= \frac{l}{k}\left(B\sin la + C\cos la\right), \\ B\cos la + C\sin la &= \frac{l}{k}\left(B\sin la - C\cos la\right), \end{aligned}$$

因此

$$\begin{aligned} B\cos la &= \frac{l}{k}B\sin la, \\ C\sin la &= -\frac{l}{k}C\cos la, \end{aligned}$$

如果 $B=C=0$ ，那么 $\psi(x)\equiv 0$ ，这不是我们关心的解。如果 $B,C\neq 0$ ，那么

$$
\begin{aligned}
\cos la &= \frac{l}{k}\sin la,\\
\sin la &= -\frac{l}{k}\cos la,
\end{aligned}
$$

因此

$$
\cos^2 la+\sin^2 la=\left(\frac{l}{k}\sin la\right)\cos la+\left(-\frac{l}{k}\cos la\right)\sin la,
$$

而左边取值恒等于 1 ，右边取值恒等于 0 ，这是不可能的。因此，只有可能是

$$
\text{(I) } B\neq 0,\ C=0;\ \text{(II) } B=0,\ C\neq 0.
$$

情况 (I)：此时

$$
\psi(x)=\begin{cases} Ae^{kx}, & x<-a,\\ B\cos lx, & -a<x<a,\\ De^{-kx}, & x>a,\end{cases}
$$

根据**玫瑰色**部分可得

$$
\cos la=\frac{l}{k}\sin la,
$$

如果 $\cos la=0$ ，那么 $\sin la=\frac{k}{l}\cos la=0$ ，这是不可能的。因此 $\cos la\neq 0$ ，可得

$$
\tan la=\frac{k}{l},
$$

只需求解

$$
\tan\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}a\right)=\sqrt{\frac{V_0}{E}-1}
$$

对应的 E 即可。

根据**蓝色**部分可得

$$
A=D=Be^{ka}\cos la,
$$

因此

$$\psi(x)=\begin{cases}B\cos la\, e^{k(x+a)}, & x<-a,\\ B\cos lx, & -a<x<a,\\ B\cos la\, e^{-k(x-a)}, & x>a,\end{cases}$$

因为波函数与一个常数相乘，并不会改变其物理含义，所以可以假设 $B>0$ ，此时

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty}\left|\psi(x)\right|^2dx&=B^2\left(a+\frac{\cos^2 la}{k}+\frac{\sin 2la}{2l}\right)\\&=B^2\left(a+\frac{1}{k}\left(\cos^2 la+\frac{k}{2l}\sin 2la\right)\right)\\&=B^2\left(a+\frac{1}{k}\left(\cos^2 la+\frac{1}{2}\tan la\sin 2la\right)\right)\\&=B^2\left(a+\frac{1}{k}\right)\\&=1,\end{aligned}$$

$$B=\left(a+\frac{1}{k}\right)^{-1/2}=\left(a+\frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0-E)}}\right)^{-1/2}.$$

情况 (II)：此时

$$\psi(x)=\begin{cases}Ae^{kx}, & x<-a,\\ C\sin lx, & -a<x<a,\\ De^{-kx}, & x>a,\end{cases}$$

根据**玫瑰色**部分可得

$$\sin la=-\frac{l}{k}\cos la,$$

如果 $\cos la=0$ ，那么 $\sin la=-\frac{l}{k}\cos la=0$ ，这是不可能的。因此 $\cos la\neq 0$ ，可得

$$\tan la=-\frac{l}{k},$$

只需求解

$$\tan\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}a\right)=-\sqrt{\frac{E}{V_0-E}}$$

对应的 E 即可。

根据蓝色部分可得

$$A = -D = -Ce^{ka}\sin la,$$

因此

$$\psi(x) = \begin{cases} -C\sin la\, e^{k(x+a)}, & x < -a, \\ C\sin lx, & -a < x < a, \\ C\sin la\, e^{-k(x-a)}, & x > a, \end{cases}$$

因为波函数与一个常数相乘，并不会改变其物理含义，所以可以假设 $C > 0$ ，此时

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \left|\psi(x)\right|^2 dx &= C^2\left(a + \frac{\sin^2 la}{k} - \frac{\sin 2la}{2l}\right) \\ &= C^2\left(a + \frac{1}{k}\left(\sin^2 la - \frac{k}{2l}\sin 2la\right)\right) \\ &= C^2\left(a + \frac{1}{k}\left(\sin^2 la + \frac{1}{2}\cot la\sin 2la\right)\right) \\ &= C^2\left(a + \frac{1}{k}\right) \\ &= 1, \end{aligned}$$

$$C = \left(a + \frac{1}{k}\right)^{-1/2} = \left(a + \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}\right)^{-1/2}.$$

综上所述，$\psi(x)$ 只有可能为以下情况：

$$\psi_1(x) = \begin{cases} \left(a + \frac{1}{k}\right)^{-1/2}\cos la\, e^{k(x+a)}, & x < -a, \\ \left(a + \frac{1}{k}\right)^{-1/2}\cos lx, & -a < x < a, \\ \left(a + \frac{1}{k}\right)^{-1/2}\cos la\, e^{-k(x-a)}, & x > a, \end{cases}$$

$$\psi_2(x) = \begin{cases} -\left(a + \frac{1}{k}\right)^{-1/2}\sin la\, e^{k(x+a)}, & x < -a, \\ \left(a + \frac{1}{k}\right)^{-1/2}\sin lx, & -a < x < a, \\ \left(a + \frac{1}{k}\right)^{-1/2}\sin la\, e^{-k(x-a)}, & x > a, \end{cases}$$

其中

$$k=\frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar},$$
$$l=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar},$$

$\psi_1(x),\psi_2(x)$ 对应的能量 E 分别满足以下超越方程

$$\tan\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}a\right)=\sqrt{\frac{V_0}{E}-1},$$
$$\tan\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}a\right)=-\sqrt{\frac{E}{V_0-E}}.$$

习题 2.8 (过于复杂，可能会有计算上的错误)

$$\begin{cases}(1):\psi(x)=0, & x<0,\\ (2):-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x)+V_0\psi(x)=E\psi(x), & 0<x<a,\\ (3):-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x)-V_1\psi(x)=E\psi(x), & a<x<b,\\ (4):-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x)=E\psi(x), & x>b.\end{cases}$$

情况 (A) : $E\geq 0$

此时 (4) 的解为

$$\psi(x)=\begin{cases}A\cos kx+B\sin kx, & E>0,\\ Cx+D, & E=0,\end{cases}$$

其中 $k=\dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$. 因为

$$\int_{-\infty}^{\infty}\left|\psi(x)\right|^2dx=1<\infty,$$

所以

$$A=B=0,$$
$$C=D=0,$$

蓝色部分化简为

$$
\begin{cases}
(1): \psi(x) = 0, & x < 0, \\
(2): -\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + V_0\psi(x) = E\psi(x), & 0 < x < a, \\
(3): -\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) - V_1\psi(x) = E\psi(x), & a < x < b, \\
(4'): \psi(x) = 0, & x > b.
\end{cases}
$$

(3) 的解为

$$
\psi(x) = A\cos k(x-b) + B\sin k(x-b),
$$

其中 $k = \frac{\sqrt{2m(E+V_1)}}{\hbar}$. 因为势能函数在 $(b-\epsilon, b+\epsilon)$ 是有界的，所以 $\psi(x), \psi'(x)$ 在 $x = b$ 处连续，因此

$$
A = B = 0,
$$

蓝色部分化简为

$$
\begin{cases}
(1): \psi(x) = 0, & x < 0, \\
(2): -\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + V_0\psi(x) = E\psi(x), & 0 < x < a, \\
(3'): \psi(x) = 0, & x > a.
\end{cases}
$$

(2) 的解为

$$
\psi(x) = \begin{cases}
A\cos k(x-a) + B\sin k(x-a), & E > V_0, \\
C(x-a) + D, & E = V_0, \\
F\cosh l(x-a) + G\sinh l(x-a), & 0 \le E < V_0,
\end{cases}
$$

其中 $k = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}, l = \frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}$. 因为势能函数在 $(a-\epsilon, a+\epsilon)$ 是有界的，所以 $\psi(x)$, $\psi'(x)$ 在 $x = a$ 处连续，因此

$$
\begin{aligned}
A &= B = 0, \\
C &= D = 0, \\
F &= G = 0,
\end{aligned}
$$

$$
\psi(x) \equiv 0,
$$

这不是我们关心的解。

情况 (B)：$-V_1 < E < 0$

蓝色部分化简为

$$\psi(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ A\cosh k(x-a) + B\sinh k(x-a), & 0 < x < a, \\ C\cos l(x-b) + D\sin l(x-b), & a < x < b, \\ Fe^{-p(x-b)}, & x > b. \end{cases}$$

其中 $k = \dfrac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}, l = \dfrac{\sqrt{2m(E+V_1)}}{\hbar}, p = \dfrac{\sqrt{2m(-E)}}{\hbar}$.

因为势能函数在 $(a-\epsilon, a+\epsilon), (b-\epsilon, b+\epsilon)$ 是有界的，所以 $\psi(x), \psi'(x)$ 在 $x = a, b$ 处连续，因此

$$\begin{aligned} A &= C\cos l(a-b) + D\sin l(a-b), \\ kB &= -lC\sin l(a-b) + lD\cos(a-b), \\ C &= F, \\ lD &= -pF, \end{aligned}$$

因为势能函数在 $(-\epsilon, \epsilon)$ 是无界的，所以 $\psi(x)$ 在 $x = 0$ 处连续，$\psi'(x)$ 则不一定。因此

$$A\cosh ka - B\sinh ka = 0,$$

总结可得

$$\begin{aligned} 0 &= A\cosh ka - B\sinh ka, && (1) \\ A &= C\cos l(a-b) + D\sin l(a-b), && (2) \\ kB &= -lC\sin l(a-b) + lD\cos l(a-b), && (3) \\ C &= F, && (4) \\ lD &= -pF, && (5) \end{aligned}$$

将 (4), (5) 代入 (2), (3) 可得

$$\begin{aligned} A &= F\left(\cos l(a-b) - \frac{p}{l}\sin l(a-b)\right), && (2') \\ kB &= lF\left(-\sin l(a-b) - \frac{p}{l}\cos l(a-b)\right), && (3') \end{aligned}$$

将 (2′), (3′) 代入 (1) 可得

$$0 = F\left(\cosh ka\left(\cos l(a-b) - \frac{p}{l}\sin l(a-b)\right) - \frac{l}{k}\sinh ka\left(-\sin l(a-b) - \frac{p}{l}\cos l(a-b)\right)\right), \qquad (1')$$

显然 $F \neq 0$，否则 $A = B = 0, C = D = 0, \psi(x) \equiv 0$，这不是我们关心的解。因此

$$\cosh ka\left(\cos l(a-b) - \frac{p}{l}\sin l(a-b)\right) - \frac{l}{k}\sinh ka\left(-\sin l(a-b) - \frac{p}{l}\cos l(a-b)\right) = 0,$$

$$1-\frac{p}{l}\tan l(a-b)-\frac{l}{k}\tanh ka\left(-\tan l(a-b)-\frac{p}{l}\right)=0,$$

$$\tan l(a-b)=\frac{1+\frac{p}{k}\tanh ka}{\frac{p}{l}-\frac{l}{k}\tanh ka}.$$

波函数归一化的计算过于复杂，不做展开。

情况 (C)：$E=-V_1$

蓝色部分化简为

$$\psi(x)=\begin{cases}0, & x<0,\\ A\cosh k(x-a)+B\sinh k(x-a), & 0<x<a,\\ C(x-b)+D, & a<x<b,\\ Fe^{-p(x-b)}, & x>b.\end{cases}$$

其中 $k=\dfrac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}, p=\dfrac{\sqrt{2m(-E)}}{\hbar}$.

因为势能函数在 $(a-\epsilon,a+\epsilon),(b-\epsilon,b+\epsilon)$ 是有界的，所以 $\psi(x),\psi'(x)$ 在 $x=a,b$ 处连续，因此

$$\begin{aligned}A&=C(a-b)+D,\\ kB&=C,\\ C&=-pF,\\ D&=F,\end{aligned}$$

因为势能函数在 $(-\epsilon,\epsilon)$ 是无界的，所以 $\psi(x)$ 在 $x=0$ 处连续，$\psi'(x)$ 则不一定。因此

$$A\cosh ka-B\sinh ka=0,$$

总结可得

$$\begin{aligned}0&=A\cosh ka-B\sinh ka, &(1)\\ A&=C(a-b)+D, &(2)\\ kB&=C, &(3)\\ C&=-pF, &(4)\\ D&=F, &(5)\end{aligned}$$

将 (4), (5) 代入 (2), (3) 可得

$$\begin{aligned}A&=F\left(-p(a-b)+1\right), &(2')\\ kB&=-pF, &(3')\end{aligned}$$

将 $(2'),(3')$ 代入 (1) 可得

$$0 = F\left(\cosh ka\left(-p(a-b)+1\right) + \frac{p}{k}\sinh ka\right), \qquad (1')$$

显然 $F \neq 0$ ，否则 $A = B = 0,\ C = D = 0,\ \psi(x) \equiv 0$ ，这不是我们关心的解。因此

$$\cosh ka\left(-p(a-b)+1\right) + \frac{p}{k}\sinh ka = 0,$$

$$p(a-b) - 1 = \frac{p}{k}\tanh ka\,.$$

波函数归一化的计算过于复杂，不做展开。

情况 (D) : $E < -V_1$

蓝色部分化简为

$$\psi(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ A\cosh k(x-a) + B\sinh k(x-a), & 0 < x < a, \\ C\cosh l(x-b) + D\sinh l(x-b), & a < x < b, \\ Fe^{-p(x-b)}, & x > b\,. \end{cases}$$

其中 $k = \dfrac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}, l = \dfrac{\sqrt{2m(-V_1-E)}}{\hbar}, p = \dfrac{\sqrt{2m(-E)}}{\hbar}$.

因为势能函数在 $(a-\epsilon, a+\epsilon), (b-\epsilon, b+\epsilon)$ 是有界的，所以 $\psi(x), \psi'(x)$ 在 $x = a, b$ 处连续，因此

$$\begin{aligned} A &= C\cosh l(a-b) + D\sinh l(a-b), \\ kB &= lC\sinh l(a-b) + lD\cosh l(a-b), \\ C &= F, \\ lD &= -pF, \end{aligned}$$

因为势能函数在 $(-\epsilon, \epsilon)$ 是无界的，所以 $\psi(x)$ 在 $x = 0$ 处连续，$\psi'(x)$ 则不一定。因此

$$A\cosh ka - B\sinh ka = 0,$$

总结可得

$$\begin{aligned} 0 &= A\cosh ka - B\sinh ka, & (1) \\ A &= C\cosh l(a-b) + D\sinh l(a-b), & (2) \\ kB &= lC\sinh l(a-b) + lD\cosh l(a-b), & (3) \\ C &= F, & (4) \\ lD &= -pF, & (5) \end{aligned}$$

将 (4), (5) 代入 (2), (3) 可得

$$A = F\left(\cosh l(a-b) - \frac{p}{l}\sinh l(a-b)\right), \qquad (2')$$

$$kB = lF\left(\sinh l(a-b) - \frac{p}{l}\cosh l(a-b)\right), \qquad (3')$$

将 (2′), (3′) 代入 (1) 可得

$$0 = F\left(\cosh ka\left(\cosh l(a-b) - \frac{p}{l}\sinh l(a-b)\right) - \frac{l}{k}\sinh ka\left(\sinh l(a-b) - \frac{p}{l}\cosh l(a-b)\right)\right), \qquad (1')$$

显然 $F \neq 0$ ，否则 $A = B = 0,\ C = D = 0,\ \psi(x) \equiv 0$ ，这不是我们关心的解。因此

$$\cosh ka\left(\cosh l(a-b) - \frac{p}{l}\sinh l(a-b)\right) - \frac{l}{k}\sinh ka\left(\sinh l(a-b) - \frac{p}{l}\cosh l(a-b)\right) = 0,$$

$$1 - \frac{p}{l}\tanh l(a-b) - \frac{l}{k}\tanh ka\left(\tanh l(a-b) - \frac{p}{l}\right) = 0,$$

$$\tanh l(a-b) = \frac{1 + \frac{p}{k}\tanh ka}{\frac{p}{l} + \frac{l}{k}\tanh ka}.$$

波函数归一化的计算过于复杂，不做展开。