1 Tính chẵn lẻ của hàm sóng

Thế năng ta chọn là hằng số nên xem là hàm chẵn $V_0(-x) = V_0(x)$. Khi đó có thể chứng minh rằng, hàm sóng sẽ là hàm chẵn hoặc hoặc lẻ $\psi(-x) = \pm\psi(x)$. Trong bài toán này, ta sẽ chọn nghiệm là hàm chẵn. Do đó ta dùng sự đối xứng để tinh chỉnh hàm sóng:

- Bỏ số hạng $C\sin lx$ của hàm sóng trong khoảng $(-a, a)$.
- $\psi(x < -a) = \psi(x > a) = Fe^{\kappa x}$

$$\psi(x) = \begin{cases} Fe^{-\kappa x}, & (x > a) \\ D\cos lx, & (0 < x < a) \\ \psi(-x), & (x < 0) \end{cases} \tag{1}$$

Với hàm sóng trên thì ta chỉ cần làm việc với $\psi(x > 0)$.

2 Điều kiện biên

Hàm sóng và đạo hàm bậc một của chúng phải liên tục tại biên $x = a$:

- $lim_{x\to a^-}\psi(x) = lim_{x\to a^+}\psi(x)$

$$Fe^{-\kappa a} = D\cos la \tag{2}$$

- $\left.\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}\right|_{x=a^-} = \left.\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}\right|_{x=a^+}$

$$-\kappa Fe^{-\kappa a} = -lD\sin la \tag{3}$$

Chia hai vế cho nhau ta được

$$\kappa = l\tan la \tag{4}$$

κ và l đều là hàm của năng lượng E, nên giải phương trình trên thì ta sẽ thu được các mức năng lượng. Để giải phương trình trên, ta thực hiện đổi biến để thuận tiện cho tính toán. Ta có:

$$\kappa \equiv \frac{\sqrt{-2mE}}{cc} \qquad l \equiv \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{cc} \tag{5}$$

$$\implies \kappa^2 + l^2 = \frac{2mV_0}{cc^2} \tag{6}$$

$$\implies \kappa^2 a^2 = \frac{2mV_0}{cc^2} a^2 - l^2 a^2 \tag{7}$$

Đặt $z \equiv la$ và $z_0 \equiv \frac{a}{cc}\sqrt{2mV_0}$. Từ phương trình (4) suy ra:

$$z_0^2 - z^2 = z^2 \tan z^2 \tag{8}$$

$$\implies \tan z = \sqrt{\left(\frac{z_0}{z}\right)^2 - 1} \tag{9}$$

Trường hợp giếng sâu rộng: a_0 và V_0 càng lớn nên z_0 càng lớn, đồ thị vế phải sẽ giao với đồ thị của vế trái càng nhiều điểm. Với điều kiện xác định của căn thức thì ta sẽ sẽ có tập xác định của z là $0 < z < z_0$. Cộng thêm tính tuần hoàn của $\tan z$ thì $z \in (0, \frac{\pi}{2}) \cup (\frac{\pi}{2} + k\pi, \frac{\pi}{2} + (k+1)\pi)(k = 0, 1, 2, 3...)$. Với mỗi điểm cắt sẽ ứng với một mức năng lượng (z là hàm của năng lượng). Và với mỗi điểm đó sẽ ứng với một hàm sóng.

Trường hợp giếng nông hẹp: Là khi z_0 rất nhỏ. Số nghiệm của phương trình sẽ ít vì hàm căn thức rất hẹp nên sẽ cắt hàm $\tan z$ ít điểm hơn. Nhưng dù z_0 rất nhỏ tiến tới 0 thì vẫn tồn tại ít nhất một điểm cắt, nghĩa là vẫn sẽ luôn tồn tại một trạng thái cơ bản của hệ.