

(\*利用连续性来确定能量E\*)

(\*奇数次归一化条件为:  $B^2/k \cdot \text{Exp}[-2 \cdot a \cdot k] + A^2 \cdot a + A^2/2/q \cdot \text{Sin}[2 \cdot q \cdot a] == 1$ \*)  
指数形式 正弦

(\*偶数次归一化条件为:  $D^2/k \cdot \text{Exp}[-2 \cdot a \cdot k] + C^2 \cdot a - C^2/2/q \cdot \text{Sin}[2 \cdot q \cdot a] == 1$ \*)  
偏导 指数形式 常量 常量 正弦

In[72]:= (\*参数定义\*)

```
m = 1;  
V0 = 1;  
a = 3;  
q = Sqrt[2 * m * (V0 + e)];  
平方根  
k = Sqrt[2 * m * (- e)];  
平方根
```

In[84]:= (\*偶次能级\*)

(\*整个波函数必须满足连续性与连续可微性, 即 $\psi'(x)/\psi(x)$ 连续。  
故有 $q \cdot \text{Tan}[q \cdot a] == k$

正切

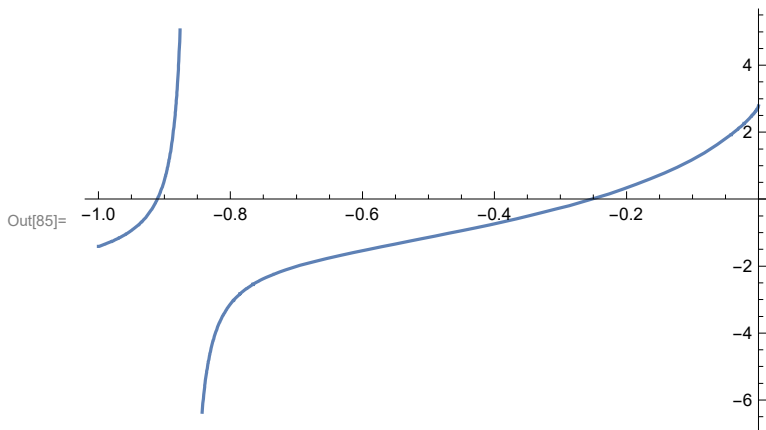
\*)

(\*先作图查看上面方程的根\*)

```
f = q * Tan[q * a] - k;  
正切
```

```
Plot[f, {e, -1, 0}]
```

绘图



In[86]:= (\*找到两个根, 列在下方\*)

```
FindRoot[q * Tan[q * a] - k, {e, -0.9}]  
求根 正切
```

Out[86]= {e → -0.910757}

In[87]:= FindRoot[q \* Tan[q \* a] == k, {e, -0.2}]

求根 正切

Out[87]= {e → -0.252509}

(\*由归一化关系和连续性可得两个本征波函数\*)

```
In[103]:= FindRoot[{B^2 / k * Exp[-2 * a * k] + A^2 a + A^2 / 2 / q * Sin[2 * q * a] == 1 /.
  |求根 |指数形式 |正弦
  {e → -0.9107569241661659`},
  B Exp[-k a] == A Cos[q a] /. {e → -0.9107569241661659`}}, {{A, 1}, {B, 1}}]
  |指数形式 |余弦
```

```
Out[103]= {A → 0.517023, B → 8.85551}
```

```
In[106]:= FindRoot[{B^2 / k * Exp[-2 * a * k] + A^2 a + A^2 / 2 / q * Sin[2 * q * a] == 1 /.
  |求根 |指数形式 |正弦
  {e → -0.2525089824565585`},
  B Exp[-k a] == A Cos[q a] /. {e → -0.2525089824565585`}}, {{A, 2}, {B, 3}}]
  |指数形式 |余弦
```

```
Out[106]= {A → 0.476343, B → -3.47226}
```

(\*所以可以列出偶次能级的两个本征波函数和本征能量\*)

```
In[141]:= E1 = -0.9107569241661659`
ψ1 = Piecewise[
  |分段函数
  {{8.855509285993705` Exp[k x], x < -a}, {0.5170226357133262` Cos[q x], -a < x < a},
  |指数形式 |余弦
  {8.855509285993705` Exp[-k x], x > a}}, x] /. {e → -0.9107569241661659`}
  |指数形式
```

```
Out[141]= -0.910757
```

```
Out[142]= {
  8.85551 e1.34963 x x < -3
  0.517023 Cos[0.422476 x] -3 < x < 3
  8.85551 e-1.34963 x x > 3
  x True
```

```
In[143]:= E2 = -0.2525089824565585`
ψ2 = Piecewise[
  |分段函数
  {{-3.472259720458546` Exp[k x], x < -a}, {0.4763433377842185` Cos[q x], -a < x < a},
  |指数形式 |余弦
  {-3.472259720458546` Exp[-k x], x > a}}, x] /. {e → E2}
  |指数形式
```

```
Out[143]= -0.252509
```

```
Out[144]= {
  -3.47226 e0.710646 x x < -3
  0.476343 Cos[1.22269 x] -3 < x < 3
  -3.47226 e-0.710646 x x > 3
  x True
```

(\*奇次能级\*)

(\*整个波函数必须满足连续性与连续可微性, 即 $\psi'(x)/\psi(x)$ 连续。

故有 $-q \cdot \tan[q \cdot a] = k$

|正切

\*)

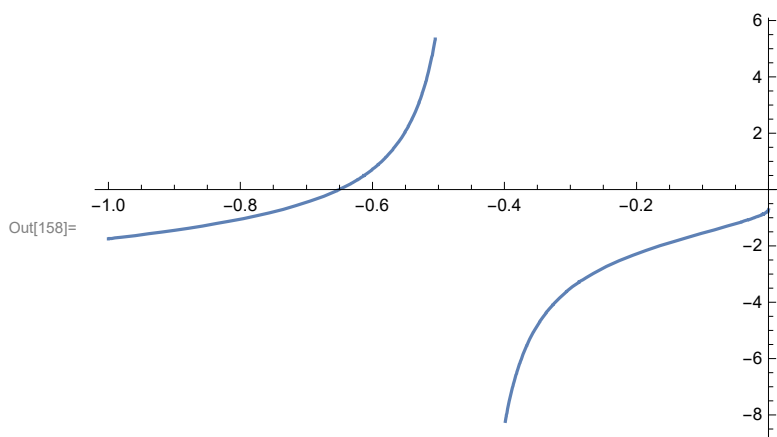
(\*先作图查看上面方程的根\*)

In[157]:=  $g = -q * \text{Cot}[q * a] - k;$

[\[余切\]](#)

$\text{Plot}[g, \{e, -1, 0\}]$

[\[绘图\]](#)



In[159]:= (\*找到一个根，列在下方\*)

$\text{FindRoot}[-q * \text{Cot}[q * a] - k, \{e, -0.8\}]$

[\[求根\]](#)

[\[余切\]](#)

Out[159]=  $\{e \rightarrow -0.650311\}$

(\*由归一化关系和连续性可得本征波函数\*)

In[160]:=  $\text{FindRoot}[\{d^2 / k * \text{Exp}[-2 * a * k] + c^2 a - c^2 / 2 / q * \text{Sin}[2 * q * a] == 1 / .$

[\[求根\]](#)

[\[指数形式\]](#)

[\[正弦\]](#)

$\{e \rightarrow -0.6503105289329637^{\wedge}$

$-d * \text{Exp}[-k * a] == c * \text{Sin}[q * a] / . \{e \rightarrow -0.6503105289329637^{\wedge}\}, \{\{d, 2\}, \{c, 3\}\}]$

[\[指数形式\]](#)

[\[正弦\]](#)

Out[160]=  $\{d \rightarrow -9.19332, c \rightarrow 0.507879\}$

(\*所以可以列出奇次能级的本征波函数和本征能量\*)

In[165]:=  $E3 = -0.6503105289329637^{\wedge}$

$\psi3 = \text{Piecewise}[$

[\[分段函数\]](#)

$\{-9.193319314915835^{\wedge} * \text{Exp}[k * x], x < -a\}, \{0.5078793789347211^{\wedge} * \text{Sin}[q * x], -a < x < a\},$

[\[指数形式\]](#)

[\[正弦\]](#)

$\{9.193319314915835^{\wedge} * \text{Exp}[-k * x], x > a\}\}, x] / . \{e \rightarrow E3\}$

[\[指数形式\]](#)

Out[165]=  $-0.650311$

Out[166]= 
$$\begin{cases} -9.19332 e^{1.14045 x} & x < -3 \\ 0.507879 \text{Sin}[0.836289 x] & -3 < x < 3 \\ 9.19332 e^{-1.14045 x} & x > 3 \\ x & \text{True} \end{cases}$$

(\*最后把上面三个波函数做在一个图里\*)

```
In[167]:= Plot[{ $\psi_1$ ,  $\psi_2$ ,  $\psi_3$ }, {x, -5, 5}, AxesLabel → {"x", " $\psi(x)$ "},  
[绘图] [坐标轴标签]  
Prolog → Thickness[0.001], PlotRange → {-0.7, 0.7}, PlotLegends → "Expressions"]  
[绘制主...] [粗细] [绘制范围] [绘图的图例]
```

