Voraussetzungen

- Potential der Form $V(x) = \begin{cases} \infty & , |x| > a/2 \\ 0 & , |x| \leq a/2 \end{cases}$

Randbedingungen

Da $V(x) = \infty \quad \forall |x| > a/2$ verschwindet die Wahrscheinlichkeitsdichte dort.
Es gilt also:

$$\Psi(|x| > a/2) = 0$$

Außerdem ist die WF stetig, weshalb:

$$\Psi(|x| = a/2) = 0 \quad \Rightarrow \quad \Psi(|x| \geq a/2) = 0$$

Ansatz

Unterteile Definitionsbereich in die drei Intervalle:

- $x \in (-\infty, -a/2)$
- $x \in [-a/2, a/2]$
- $x \in (a/2, \infty)$

Im mittleren Intervall gilt die Schrödingergleichung:

$$i\hbar\partial_t \Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}{\partial_x}^2 \Psi = E\Psi$$

Diese lässt sich mit dem folgenden Ansatz lösen:

$$\Psi(x) = A \exp\left(i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right) + B \exp\left(-i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right)$$

Lösung

Für die endgültige Lösung müssen nur noch die Randbedingungen eingesetzt werden:

RB1: $x = -a/2$

$$\begin{aligned} 0 = A \exp\left(-i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}a/2\right) + B \exp\left(i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}a/2\right) \\ \Leftrightarrow B = -A \exp\left(-i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}a\right) \\ \Rightarrow \Psi(x) = A\left[\exp\left(i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right) - \exp\left(-i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}(x+a)\right)\right] \end{aligned}$$

RB2: $x = a/2$

$$0 = A \exp\left(i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}a/2\right)\left[1 - \exp\left(-i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}2a\right)\right]$$
$$\Rightarrow \pi k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}a \quad k \in \mathbb{N}$$
$$\Leftrightarrow E = \frac{\pi^2\hbar^2k^2}{2ma^2}$$

Hier bei ist k die Wellenzahl.
Es muss $k \neq 0$ gelten, da man sonst $\Psi = 0$ erhält, was nicht normierbar ist!
Somit folgt die Wellenfunktion:

$$\begin{aligned}\Psi(x) &= A\left[\exp\left(i\pi k\frac{x}{a}\right) - (-1)^k \exp\left(-i\pi k\frac{x}{a}\right)\right]\\ &= 2A\begin{cases}\cos \pi kx/a & , k \text{ ungerade}\\ i\sin \pi kx/a & , k \text{ gerade}\end{cases}\end{aligned}$$

Normierung (RB3: $1 = \int |\Psi(x)|^2 \mathrm{d}x$)

$$\begin{aligned}1 &\overset{!}{=} \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x)|^2 \mathrm{d}x\\ &= |A|^2 2\int_{-a/2}^{a/2}\left[1 - (-1)^k \cos 2\pi k\frac{x}{a}\right]\mathrm{d}x\\ &= |A|^2 2a\\ \Leftrightarrow A &= \frac{\exp i\Phi}{\sqrt{2a}} \qquad \Phi = \text{const.}\end{aligned}$$

Die komplexe Phase $\exp i\Phi$ kann nach Bedarf gewählt werden.
Im einfachsten Fall wählt man $\Phi = 0$.
Somit ergibt sich die Lösung zu:

$$\begin{aligned}\Phi(x) &= \frac{e^{i\Phi}}{\sqrt{2a}}\left[\exp\left(i\pi k\frac{x}{a}\right) - (-1)^k \exp\left(-i\pi k\frac{x}{a}\right)\right]\\ &= e^{i\Phi}\sqrt{\frac{2}{a}}\begin{cases}\cos \pi kx/a & , k \text{ ungerade}\\ \sin \pi kx/a & , k \text{ gerade}\end{cases}\end{aligned}$$