

Rješenje Schrödingerove jednadžbe unutar potencijalne jame

Jakobović, Nika

Undergraduate thesis / Završni rad

2022

Degree Grantor / Ustanova koja je dodijelila akademski / stručni stupanj: **University of Zagreb, Faculty of Science / Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet**

Permanent link / Trajna poveznica: <https://um.nsk.hr/um:nbn:hr:217:639693>

Rights / Prava: [In copyright](#)/Zaštićeno autorskim pravom.

Download date / Datum preuzimanja: **2024-09-28**



Repository / Repozitorij:

[Repository of the Faculty of Science - University of Zagreb](#)





Sveučilište u Zagrebu
PRIRODOSLOVNO-MATEMATIČKI FAKULTET
Kemijski odsjek

Nika Jakobović

Studentica 3. godine Preddiplomskog sveučilišnog studija KEMIJA

RJEŠENJE SCHRÖDINGEROVE JEDNADŽBE UNUTAR POTENCIJALNE JAME

Završni rad

Rad je izrađen u Zavodu za fizikalnu kemiju

Mentor rada: prof. dr. sc. Tomica Hrenar

Zagreb, 2022. godina.

Datum predaje prve verzije Završnog rada:

27.svibnja 2022.

Datum ocjenjivanja Završnog rada i polaganja Završnog ispita:

15. srpnja 2022.

Mentor rada: prof. dr.sc. Tomica Hrenar

Potpis:

Sadržaj

§ SAŽETAK.....	VII
§ 1. UVOD.....	1
§ 2. RJEŠENJA SCHRÖDINGEROVE JEDNADŽBE	2
2.1. Čestica u jednodimenzionalnoj kutiji.....	2
2.2. Čestica u konačnoj potencijalnoj jami	4
2.2.1. Parna rješenja $\psi(x)=\psi(-x)$	6
2.2.2. Neparna rješenja $-\psi(x)=\psi(-x)$	9
2.3. Delta potencijal.....	12
§ 3. LITERATURNI IZVORI.....	15

§ Sažetak

Rješenje Schrödingerove jednadžbe unutar potencijalne jame se odnosi na slučaj čestice koja se giba ograničena određenim potencijalom. Takav slučaj je čest u prirodi i prema tome zanimljiv za razmatranje. Postoji i idealizirani sustav koji se često naziva čestica u jednodimenzionalnoj kutiji, što je ustvari slučaj potencijalne jame kad potencijal teži u beskonačnost. Dobro je biti upoznat sa oba slučaja budući da se na sličan način dolazi do kvantiziranih energijskih stanja čestice u takvim jamama. Broj veznih stanja za beskonačnu potencijalnu jamu jest beskonačan budući da se čestica nikako ne može osloboditi iz beskonačnog potencijala. S druge strane, čestica u konačnoj potencijalnoj jami se može osloboditi i početi ponašati kao slobodna čestica ako joj se dovede dovoljno energije. Prema tome, postoji konačni točno određeni broj veznih stanja koje čestica može poprimiti. Broj tih stanja ovisi o parametrima jame tj. o dubini i širini same potencijalne jame. Matematičkim operacijama može se doći do tog broja, ali to se može i vrlo jasno grafički prikazati što je u ovom radu i učinjeno. Iz dobivenih rješenja se može zaključiti da je broj veznih stanja veći što je potencijalna jama dublja i šira. Također, bitno je napomenuti da uvijek postoji barem jedno vezno stanje neovisno o plitkoći i uskosti jame.

§ 1. UVOD

Kao uvod u samu kvantnu mehaniku često se obrađuje sistem čestice u jednodimenzionalnoj kutiji te čestice u konačnoj potencijalnoj jami. Pojam potencijalne jame veoma je značajan u kemiji jer se pojedini efekti mogu objasniti modeliranjem veze potencijalnom jamom. Primjerice, molekula β -karotena, poznatog pigmenta iz mrkve, sadrži 22 π -elektrona u konjugiranoj vezi, a samu konjugiranu vezu se može modelirati kao potencijalnu jamu određene duljine.¹ Pomoću ovakvog jednostavnog sustava u jednoj dimenziji mogu se proučavati stacionarna stanja čestice i primijeniti na nešto kompleksnije sustave. Stacionarna stanja proizlaze iz vremenski neovisne Schrödingerove jednadžbe. Za razliku od beskonačne potencijalne jame tj. čestice u jednodimenzionalnoj kutiji, konačna potencijalna jama nema beskonačno mnogo veznih stanja, a to je zato jer energija čestice može biti dovoljna da se čestica oslobodi iz same potencijalne jame i počne se ponašati kao slobodna čestica. Za obradu konačne potencijalne jame bitno je biti upoznat s beskonačno dubokom potencijalnom jamom jer se ona može definirati kao svojevrsni limes konačne jame kako potencijal teži u beskonačnost.

U ovom radu cilj će biti odrediti koje su energijske razine moguće i u kojim uvjetima. Dobivene spoznaje valja usporediti s beskonačnom potencijalnom jamom te s efektima u prirodi. Dozvoljena energijska stanja konačne potencijalne jame bit će dobivena sličnim matematičkim putevima kao i kod beskonačne potencijalne jame, no za konačnu postoji mnogo više ograničenja i uvjeta. Sama konačna potencijalna jama bolje opisuje prirodne efekte nego beskonačna jer je ona viskoidealizirana.

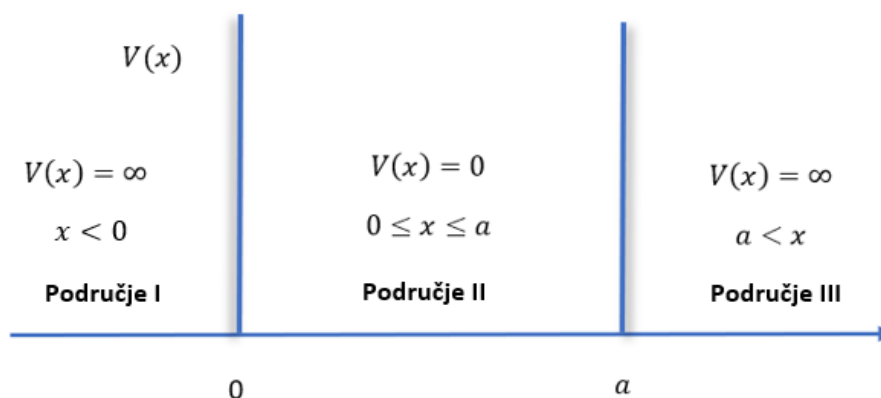
§ 2. RJEŠENJA SCHRÖDINGEROVE JEDNADŽBE

2.1. Čestica u jednodimenzionalnoj kutiji

Prije obrade same čestice u potencijalnoj jami, valja se upoznati sa viskoidealiziranim sustavom čestice u jednodimenzionalnoj kutiji. To je sustav u kojem se mikroskopska čestica mase m gibira u jednoj dimenziji x te je pod utjecajem potencijala. U područjima I i III potencijal je beskonačan, a u području II je jednak nuli (ref. 2):

$$V = \begin{cases} 0 & \text{za } 0 \leq x \leq a \\ \infty & \text{za } x < 0 \text{ i za } x > a \end{cases} \quad (1)$$

Navedeni sustav prikazan je slikom 1.



Slika 1. Skica čestice u jednodimenzionalnoj kutiji (ref.3).

Rješenja dobivena rješavanjem Schrödingerove jednadžbe

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = (E - V(x))\psi(x) \quad (2)$$

ovakvog slučaja bit će definirana preko kvantnog broja n te energijski najniže stanje će biti ono s kvantnim brojem $n = 1$. Takva kvantizacija proizlazi iz rubnih uvjeta. Rubni uvjeti su uvjeti

da valna funkcija $\psi(x)$ u točkama 0 i a mora biti kontinuirana, što znači da se funkcije područja moraju „stapati“ u jednu.

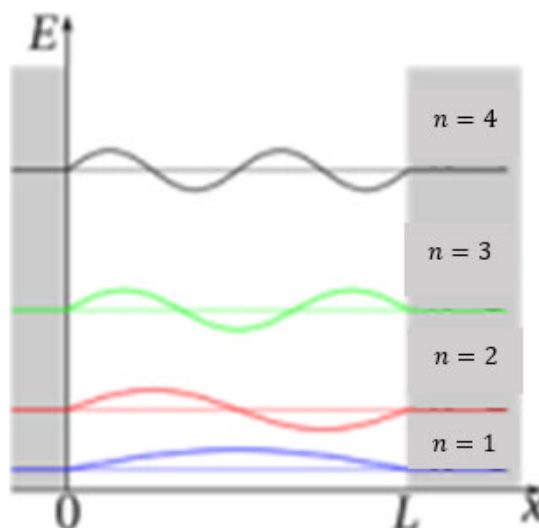
Za beskonačnu potencijalnu jamu se lako može izračunati da je $\psi(x) = 0$ unutar područja I i III, što znači da valna funkcija ne prodire unutar beskonačne potencijalne barijere. Za područje II se može doći do rješenja (3) rješavajući diferencijalnu jednadžbu drugog reda te jednadžbu rubnih uvjeta, a norma se može dobiti normiranjem valne funkcije, no ona nije potrebna za određivanje energije prikazane jednadžbom (4).

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right); n \in \mathbb{N} \quad (3)$$

$$E_n = \frac{n^2 \hbar^2 \pi^2}{2ma^2}; n \in \mathbb{N} \quad (4)$$

Za kvantne brojeve n je neprihvatljivo da budu 0 ili negativni iz razloga što 0 bi davala rješenje $\psi(x) = 0$ koje označava odsustvo tj. nepostojanje čestice, a kako je sinus neparna funkcija negativne vrijedosti n bi davale isti skup rješenja kao i pozitivne vrijednosti.

Sa slike 2. vidljivo je da prve derivacije valnih funkcija nisu kontinuirane tj. da bi došlo do loma, a to je upravo zato što je ovakav sustav visokoidealiziran i fizikalno neostvariv u prirodi.



Slika 2. Četiri najniže valne funkcije čestice u kutiji (ref.4).

Kod valnih funkcija prikazanih na slici 2. vidljiva je pojava „špiceva“ funkcija prelaskom iz područja zbog čega prve derivacije nisu kontinuirane.

Bitni zaključci koji se mogu izvesti iz obrađenog sustava su:

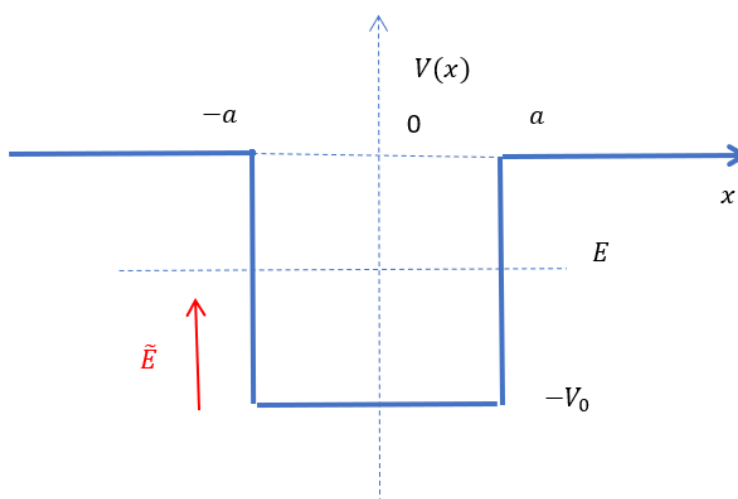
- 1) Svaka vrijednost kvantnog broja n daje različitu vrijednost energije što implicira da u beskonačnoj potencijalnoj jami nema degeneracije u energijskom spektru.⁵ Također, osnovno stanje ima vrijednost $n = 1$ jer energija u kvantnoj mehanici ne može imati vrijednost 0 budući da bi to kršilo Heisenbergovo načelo neodređenosti
- 2) Povučemo li se crta po središtu potencijalne kutije na slici 2. može se zamijetiti alternirajuća izmjena simetričnih i antisimetričnih rješenja.⁵

2.2. Čestica u konačnoj potencijalnoj jami

Česticu u konačnoj potencijalnoj jami se može definirati na potpuno identičan način kao i česticu u kutiji do na iznosa potencijala barijere. Dakle, u izrazu (1) dovoljno je promijeniti ∞ u neku određenu konačnu vrijednost potencijala. Ipak, takvo definiranje bi matematički zakompliciralo rješavanje pa se konačna potencijalna jama definira izrazom (5).

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & \text{za } |x| \leq a, V_0 > 0 \\ 0 & \text{za } |x| > a \end{cases} \quad (5)$$

Sustav je opisan slikom 3.



Slika 3. Čestica u konačnoj potencijalnoj jami

Dakle, za razliku od beskonačne potencijalne jame, širina jame opisane slikom 3. jest $2a$, te je središte jame postavljeno u vrijednosti 0 x -osi. Takvo definiranje jame omogućuje da funkcija potencijala bude parna odnosno $V(x) = V(-x)$. Radi takve simetrije potencijala, vezna stanja će biti ili simetrične funkcije ili antisimetrične funkcije.⁵ Također, za konačnu potencijalnu jamu dno je smješteno u vrijednost potencijalne energije $-V_0$, a za beskonačnu je bilo smješteno u nulu. Takvo podešavanje ima smisla iz više razloga: energija veznog stanja je opisana negativnim predznakom budući da je potrebno uložiti energiju kako bi se čestica oslobodila iz potencijala te kako se energije veznih stanja gledaju u odnosu na dno jame kod beskonačne bi to dno bilo definirano s beskonačnošću što naravno nije praktično, no za konačnu je to određeni iznos pa je dno moguće tako definirati. Energija E sa slike 3. je dakle negativne vrijednosti što ustvari ne bi bilo usporedivo s identičnim energijskim stanjem u beskonačnoj potencijalnoj jami. Energija koja bi bila usporediva s beskonačnom potencijalnom jamom jest na slici 3. označena kao \tilde{E} , a jednaka je $\tilde{E} = E - (-V_0) = V_0 - |E| > 0$. Minus ispred apsolutne vrijednosti potječe iz toga što je energija E negativnog predznaka, a veličina \tilde{E} usporediva s beskonačnom potencijalnom jamom jest pozitivna vrijednost kako je predočeno slikom 3.

Početna Schrödingerova jednadžba za konačnu potencijalnu jamu jest identična kao i za beskonačnu, a malim izmjenama se dobiva sljedeće:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\psi(x) = \alpha(x)\psi(x) \quad (6)$$

Budući da vrijedi $-V_0 < E < 0$ što je vidljivo iz slike 3., konstanta α iz jednadžbe (6) može biti pozitivna ili negativna konstanta ovisno o regiji x -osi gdje se nalazi čestica. Energija E naravno može biti veća od nule, ali takav slučaj se više ne odnosi na česticu u jami nego na slobodnu česticu, pa takav slučaj nije zanimljiv.

$$\alpha(x) = \begin{cases} > 0 & \text{za } |x| > a \\ < 0 & \text{za } |x| < a \end{cases} \quad (7)$$

Iz izraza (6) i (7) je vidljivo da će se rješenja po regijama dobiti rješavanjem diferencijalne jednadžbe drugog reda, no da će unutar same jame rješenje biti izraženo preko trigonometrijskih funkcija radi negativne konstante α , a unutar barijere će rješenje biti izraženo eksponencijalnim funkcijama. Osim razmatranja različitih rješenja unutar jame i unutar barijere, bitno je razmotriti zasebno parna i neparna rješenja što proizlazi iz simetričnog potencijala.

2.2.1. Parna rješenja $\psi(x) = \psi(-x)$

U nastavku slijedi postupak rješavanja Schrödingerove jednadžbe unutar jame.

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\psi(x) = -\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - |E|)\psi(x) = -k^2\psi(x) \quad (8)$$

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - |E|), k > 0 \quad (9)$$

Jedino moguće parno rješenje jest:

$$\psi(x) = A \cos(kx) ; |x| < a \quad (10)$$

U izrazu (10) nije potrebno stavljati konstantu normiranja za traženje mogućih veznih stanja, ali također ne smeta.

Rješenje Schrödingerove jednadžbe unutar barijere slijedi u nastavku:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\psi(x) = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - 0)\psi(x) = \frac{2m}{\hbar^2}|E|\psi(x) = \kappa^2\psi(x) \quad (11)$$

$$\kappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2}|E|, \kappa > 0 \quad (12)$$

Radi normiranja jednadžbe rješenja moraju biti padajuće eksponencijalne funkcije:

$$\psi(x) = B e^{-\kappa|x|} ; |x| > a \quad (13)$$

U jednadžbi (13) je obavezno pisanje konstante B jer ona omogućuje slaganje s rubnim uvjetima. Također u jednadžbi (13) moguće je izostaviti zagrade apsolutnih vrijednosti jer radi simetrije problema je sasvim dovoljno riješiti samo jednu stranu.⁵ Konstante k i κ su konstante koje sadržavaju mnogo mjernih jedinica, pa ih valja reprezentirati nekim izrazima bez mjerene jedinice. Iz izraza (10) i (13) je vidljivo da navedene konstante pomnožene s fizikalnom veličinom s mjernom jedinicom duljine daju vrijednost bez mjerne jedinice. Prema tome:

$$\eta \equiv ka > 0 \quad (14)$$

$$\xi \equiv \kappa a > 0 \quad (15)$$

Izrazi (14) i (15) očito ovise o energiji veznog stanja. Zbrajanjem izraza (9) i (12) dobiva se sljedeće:

$$\kappa^2 + k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} |E| + \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - |E|) = \frac{2mV_0}{\hbar^2} \quad (16)$$

Pomoću izraza (16) analogno kao što su izvedene oznake η i ξ može se izvesti veoma bitan izraz bez mjernih jedinica:

$$z_0^2 = \frac{2mV_0a^2}{\hbar^2} \quad (17)$$

Izraz (17) je iznimno bitan i koristan jer sadrži parametre dubine (V_0) i širine ($2a$) potencijalne jame. z_0 govori upravo o broju veznih stanja. Dakle, što je jama šira i dublja bit će više veznih stanja i obrnuto. Povezivanjem izraza (14), (15), (16) i (17) dobiva se jednadžba kružnice:

$$\eta^2 + \xi^2 = z_0^2 \quad (18)$$

Nadalje, valja primijeniti uvjete kontinuiranosti valne funkcije i prve derivacije u rubnim točkama $x = a$ i $x = -a$. Ipak, radi simetrije problema dovoljno je odrediti samo za $x = a$.

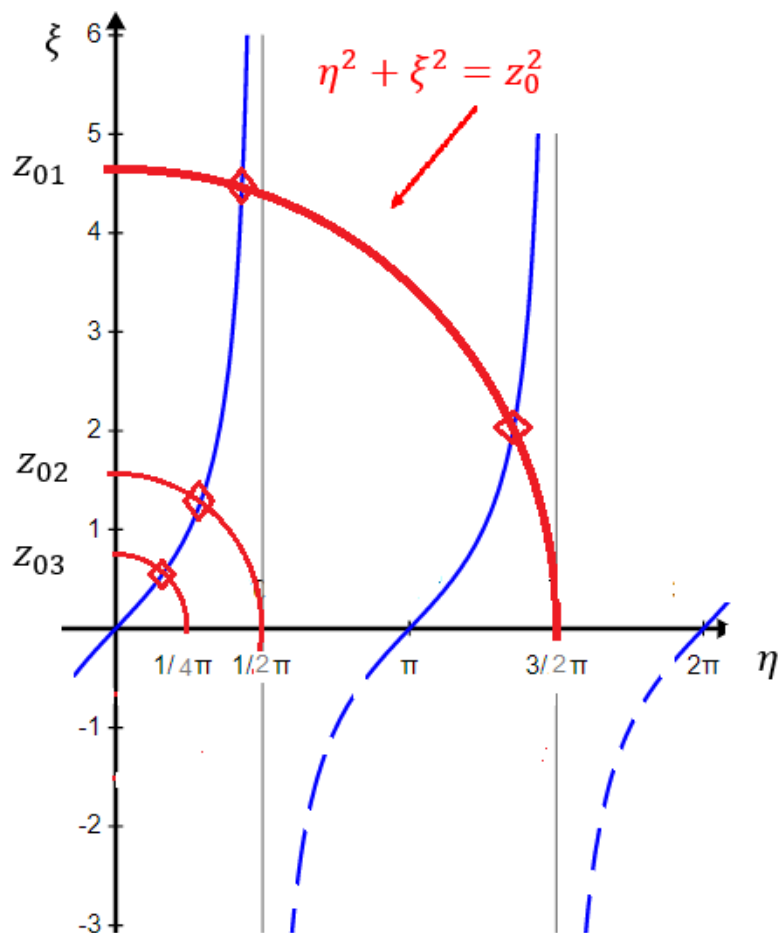
$$A \cos(ka) = B e^{-\kappa a} \quad (19)$$

$$-kA \sin(ka) = -B\kappa e^{-\kappa a} \quad (20)$$

Dijeljenjem izraza (20) s izrazom (19) eliminiraju se konstante normiranja, a množenjem dobivenog izraza s a dobiva se funkcija bez mjernih jedinica.

$$\eta \operatorname{tg}(\eta) = \xi \quad (21)$$

Povezivanjem izraza (21) i (18) potrebno je riješiti jednadžbu tipa „tangens varijable = jednadžba kružnice u istoj varijabli“. Takva jednadžba nema rješenje preko elementarnih funkcija, što znači da se mora rješavati numerički.¹ Ipak, grafičko rješavanje je mnogo intuitivnije tj. lakše objašnjivo.



Slika 4. Grafički prikaz rješenja jednadžbi (18) i (21).

Na slici 4. je vidljiv prikaz grafičkog rješenja problema broja veznog stanja. Crvene kružnice prikazuju različita rješenja za različite vrijednosti z_0 . Sjecišta funkcije tangens i kružnice označavaju vezna stanja. Vidljivo je da neovisno o broju z_0 tj. o dubini i širini jame uvijek postoji barem jedno parno rješenje jer će kružnica uvijek sjeći barem prvu krivulju funkcije (21). Prikazan je samo prvi kvadrant zato jer su η i ξ pozitivne vrijednosti. Očitavanjem η i ξ za neko vezno stanje može se doći do samog iznosa energije određenog veznog stanja budući da vrijedi:

$$\xi^2 = \kappa^2 a^2 = \frac{2ma^2|E|}{\hbar^2} \cdot \frac{V_0}{V_0} = z_0^2 \frac{|E|}{V_0} \Rightarrow \left(\frac{\xi}{z_0}\right)^2 = \frac{|E|}{V_0} \quad (22)$$

$$\tilde{E} = \frac{\eta^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad (23)$$

Dakle, što je veća vrijednost ζ to je veća $|E|$. Navedeno ustvari znači da veći ζ podrazumijeva dublje vezno stanje. Isto bi se moglo zaključiti i preko η . Stoga sjecište prve krivulje funkcije (21) i kružnice je osnovno stanje.

2.2.2. Neparna rješenja $-\psi(x) = \psi(-x)$

Za neparna rješenja sve definicije ostaju iste osim funkcije (10) koja više nije parna funkcija kosinusa već neparna funkcija sinus.

$$\psi(x) = C \sin(kx) ; |x| < a \quad (24)$$

Uvođenjem uvjeta kontinuiranosti funkcija i prvih derivacija se zato dobiva

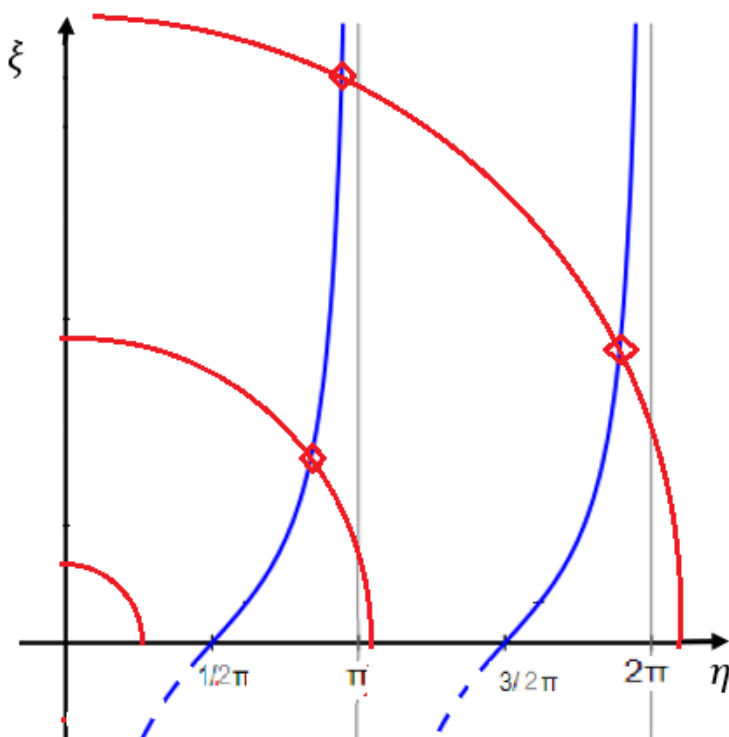
$$C \sin(ka) = B e^{-\kappa a} \quad (25)$$

$$kC \cos(ka) = -B \kappa e^{-\kappa a} \quad (26)$$

Dijeljenjem izraza (26) i (25) i množenjem s a dobiva se:

$$-\eta \operatorname{ctg}(\eta) = \xi \quad (27)$$

Vezna stanja se opet mogu naći numerički ili grafički kao u poglavlju 2.2.1 rješavanjem jednadžbe kružnice (18) i jednadžbe (27).

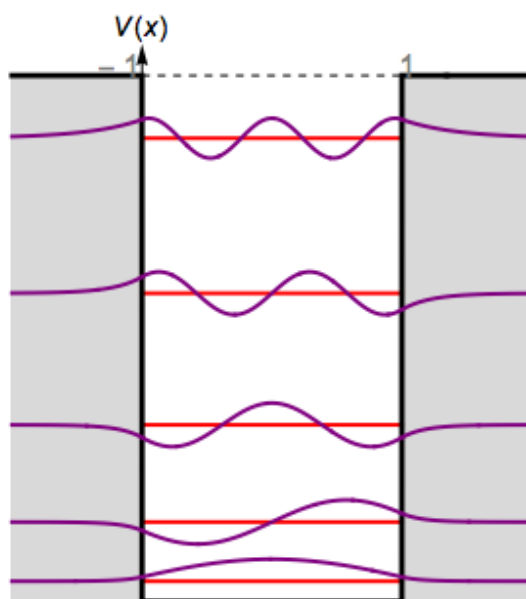


Slika 5. Prikaz rješenja jednačbi (18) i (27).

Na slici 5. se nalazi skica koja objašnjava pronalazak neparnih rješenja veznih stanja. Sjecišta krivulja označavaju vezna stanja. Vidljivo je da neparnih rješenja ne mora biti tj. ako je z_0 koji označava radijus kružnice manji od određene vrijednosti, nema sjecišta. Vidi se da nije nužno da postoji neparno vezno stanje, ako je jama dovoljno uska odnosno plitka. Ukoliko je $z_0 < (\pi/2)$ kao što je vidljivo na slici 5. onda neparnog rješenja nema. Dakle pomoću navedene nejednakosti i izraza (17) može se doći do sljedećeg uvjeta:

$$V_0 a^2 > \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m} \quad (28)$$

Uvjet (28) govori kakvi moraju biti parametri jame da bi postojalo rješenje.



Slika 6. Prikaz prvih 5 energijskih razina u potencijalnoj jami (ref.6).

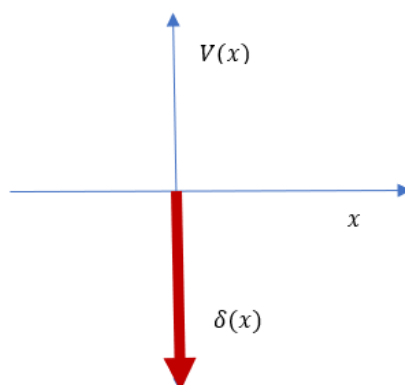
Na slici 6. prikazana su i parna i neparna rješenja veznih stanja i vidljivo je kako alterniraju u nizu parno-neparno te kako broj čvorova raste od 0 za osnovno najniže stanje prema 4 za četvrto pobuđeno stanje koje je ujedno parno. Najdublje ima najnižu energiju, a svako iduće sve veću. Veće energije omogućuju sve dublje prodiranje u barijeru. Na slici 6. je također vidljivo da kako raste energija čestice te eksponencijalna funkcija unutar barijere sporije trne što znači da čestica ima dovoljno energije da uđe dublje u barijeru. Zato se može zaključiti da u beskonačnoj potencijalnoj jami ne dolazi do prodora u barijeru. U prethodnom odlomku je izveden zaključak da ukoliko je jama plitka ili uska da tada ne mora postojati prvo neparno rješenje veznog stanjem, no u izvodu parnog rješenja došlo se do zaključka da ono uvijek postoji tj. da postoji barem jedno osnovno parno rješenje. To proizlazi iz toga što diskretna energetska stanja su sve više razmaknuta (ne nužno za n^2), a što je jama uža to su razmaknutija. Prema tome sve manje stanja „stane“ u samu jamu. Primjer sustava koji ima samo 1 vezano stanje je deutron koji se ne može dovesti u pobuđeno stanje nego dopremanjem energije dolazi do raspada deuterona.¹

2.3. Delta potencijal

Delta potencijal u potencijalnoj jami je opisan Diracovom delta funkcijom. Kvalitativni opis takvog potencijala bi bio potencijal koji je jednak nuli za sve vrijednosti x osim u samo jednoj točki gdje je beskonačan. Potencijal je za česticu mase m delta funkcija $\delta(x)$ pomnožena s konstantom α lokalizirana u $x = 0$:

$$V(x) = -\alpha\delta(x) ; \alpha > 0 \quad (29)$$

Dakle, potencijal je beskonačan i negativan u točki $x = 0$ kao što je opisano jednadžbom (29) i prikazano slikom 7. Takav oblik potencijala bi se mogao opisati kao limes potencijalne jame koja istovremeno postaje sve dublja i uža. Radi toga je navedeni delta potencijal mogući način analitičkog rješavanja i računanja energijskih stanja. Sužavanjem potencijalne jame, ukoliko postoji vezno stanje, očekuje se diskontinuirana derivacija. Delta funkcija je skup pravila koja omogućava potrebno istovremeno sužavanje i produbljivanje potencijala što osigurava da je površina ispod krivulje očuvana.⁷



Slika 7. Skica oblika delta potencijala.

Vezna stanja za ovaj potencijal su $E < 0$ što osigurava da za $x \neq 0$ valna funkcija pada i bude normirana. Vremenski ovisna Schrödingerove jednadžbe glasi:

$$-\frac{\hbar^2 d^2\psi}{2m dx^2} = (E - V(x))\psi \quad (30)$$

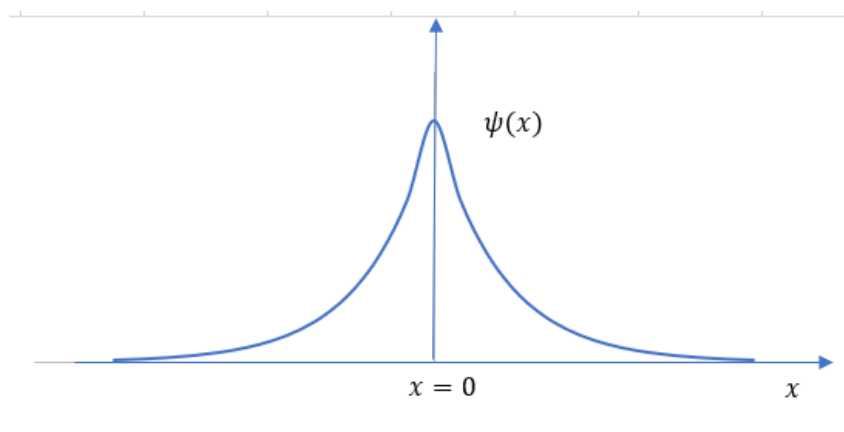
Za $x \neq 0$ vrijedi $V = 0$:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi = \kappa^2\psi ; \kappa^2 \equiv -\frac{2mE}{\hbar^2} > 0 \quad (31)$$

κ^2 je pozitivna konstanta budući da je E definirana kao negativna vrijednost.

Moguća rješenja jednačbe (31) su $e^{-\kappa x}$, $e^{\kappa x}$, $\sinh \kappa x$ i $\cosh \kappa x$, no za reprodukciju rješenja valne funkcije nisu pogodne sve navedene funkcije. Ukoliko postoji jedno vezno stanje ono je osnovno stanje i ono je parno jer je i potencijal paran tj. $\delta(x) = \delta(-x)$. Kada bi postojalo prvo pobuđeno stanje ono bi moralo biti neparno i moralo bi imati čvor u $x = 0$ što zadovoljava samo $\sinh \kappa x$. Funkcija $\sinh \kappa x$ s druge strane ne zadovoljava uvjet normiranosti valne funkcije pa se dolazi do zaključka da potencijal definiran delta funkcijom ne može imati neparna rješenja, a time se zaključuje da ako postoji rješenje, ono je jedinstveno. Stoga, valna funkcija koja opisuje osnovno stanje je izražena jednačbom (32) i slikom 8.:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{-\kappa x} & \text{za } x > 0 \\ Ae^{\kappa x} & \text{za } x < 0 \end{cases} \quad (32)$$



Slika 8. Vezno stanje valne funkcije za delta potencijal (ref.8).

Navedena valna funkcija je kontinuirana, ali njena derivacija nije. Prema tome se integracija jednačbe (30) provodi u rasponu od $-\epsilon$ do ϵ pri čemu je ϵ mali pozitivan broj blizak nuli.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d\psi}{dx} \Big|_{\epsilon} - \frac{d\psi}{dx} \Big|_{-\epsilon} \right) + \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx (-\alpha \delta(x)) \psi(x) = E \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \psi(x) dx \quad (33)$$

Radi kontinuiranosti $\psi(x)$ desna strana jednačbe (33) nakon integracije postaje 0 ako se promatra slučaj kad $\epsilon \rightarrow 0$, a izraz $\int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx (-\alpha \delta(x)) \psi(x)$ je radi delta funkcije različit od 0 samo kada bi ϵ bio jednak 0. Stoga slijedi:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(\frac{d\psi}{dx} \Big|_{\epsilon} - \frac{d\psi}{dx} \Big|_{-\epsilon} \right) - \alpha \psi(0) = 0 \quad (34)$$

Daljnijim rješavanjem dolazi se do uvjeta diskontinuiranosti koji proizlazi iz delta funkcije $\delta(x)$:

$$\Delta_0 \frac{d\psi}{dx} = \frac{-2m\alpha\psi(0)}{\hbar^2} \quad (35)$$

Uvjet diskontinuiranosti dozvoljava da valna funkcija ima diskontinuitet u prvoj derivaciji ako navedena valna funkcija ne nestaje u toj točki. Takav diskontinuitet je proporcionalan vrijednosti valne funkcije u toj točki, a konstanta α se mijenja ovisno o zadanom potencijalu $V(x)$.

Primjenjujući jednadžbu uvjeta diskontinuiranosti (35) na rješenja valne funkcije (32) dobiva se sljedeće:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(\frac{d\psi}{dx} \Big|_{\epsilon} - \frac{d\psi}{dx} \Big|_{\epsilon} \right) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} (-\kappa A e^{-\kappa x} - \kappa A e^{-\kappa x}) = -2\kappa A = -\frac{2m\alpha A}{\hbar^2} \quad (36)$$

Prema jednadžbi (36) dolazi se do relacije:

$$\kappa = \frac{m\alpha}{\hbar^2} \quad (37)$$

Po definiciji κ iz jednadžbe (31) i dobivene relacije (37) dolazi se do izraza za energiju veznog stanja:

$$E = \frac{-\hbar^2 \kappa^2}{2m} = -\frac{1}{2} \frac{m\alpha^2}{\hbar^2} \quad (38)$$

Koristeći više delta potencijala može se doći do više veznih stanja.⁷ Također mnogi sustavi se mogu opisati kao dvostruke ili višestruke periodične potencijalne jame opisane preko delta potencijala.⁸

§ 3. LITERATURNI IZVORI

1. P. Žugec: *Fizika 2*, elektronički materijali kolegija dostupni putem Sveučilišnog centra za e-učenje Merlin (<https://moodle.srce.hr/2019-2020/>; (datum pristupa 20. prosinca 2020.)
2. I. N. Levine, *Physical Chemistry*, McGraw Hill, New Delhi, 2009, str. 606–610.
3. <https://physics.stackexchange.com/questions/214188/particle-in-a-box-value-for-wave-function-ux-when-potential-vx-is-infin> (datum pristupa 27. prosinca 2020.)
4. <https://dradchem.wordpress.com/tag/particle-in-1d-box/> (datum pristupa 27. prosinca 2020.)
5. https://ocw.mit.edu/courses/physics/8-04-quantum-physics-i-spring-2016/lecture-notes/MIT8_04S16_LecNotes11.pdf (datum pristupa 25. prosinca 2020.)
6. <https://demonstrations.wolfram.com/BoundStatesOfAFinitePotentialWell/> (datum pristupa 26. prosinca 2020.)
7. https://ocw.mit.edu/courses/8-04-quantum-physics-i-spring-2016/ff9fdb4da09b783255583e2a61d1279_MIT8_04S16_LecNotes13.pdf (datum pristupa 27. svibnja 2022.)
8. http://www.niser.ac.in/~sbasak/p303_2010/06.09.pdf (datum pristupa 27. svibnja 2022.)