บทที่ 1
บทนำ

1.1 ที่มาของปัญหา

สมการชเรอดิงเงอร์ (Schrödinger equation) เป็นสมการที่ใช้อธิบายพฤติกรรมของอนุภาคระดับจุลภาค ในวิชากลศาสตร์ควอนตัม ถ้าการเปลี่ยนแปลงของระบบควอนตัมไม่ขึ้นกับเวลา (time independent) สมการชเรอดิงเงอร์จะเป็นสมการอนุพันธ์ย่อยอันดับสอง มีรูปสมการดังนี้

$$\left(-\frac{\bar{h}^2}{2m}\nabla^2 + V(r)\right)\Psi(r) = E\Psi(r)$$

เมื่อ $\Psi(r)$ คือ ฟังก์ชันคลื่นของอนุภาคในระบบ

V (r) คือ พลังงานศักย์ในระบบนั้น

E คือ พลังงานอนุภาคในระบบที่สอดคล้องกับฟังก์ชันคลื่นนั้น

การหาคำตอบของสมการนี้ค่อนข้างยุ่งยากและซับซ้อน และขึ้นอยู่กับรูปแบบของพลังงานศักย์ตรงบริเวณที่อนุภาคนั้นอยู่ ถ้าอนุภาคถูกจำกัดให้เคลื่อนที่ในบริเวณที่มีพลังงานศักย์ที่มีค่าไม่เป็นศูนย์ ในเบื้องต้นจะต้องหาฟังก์ชันคลื่นของอนุภาคเพื่อที่จะอธิบายพฤติกรรมของมัน ตัวอย่างที่กล่าวถึงในหนังสือกลศาสตร์ควอนตัมทั่วไป ส่วนใหญ่จะยกตัวอย่างที่พลังงานศักย์อยู่ในรูปง่าย ๆ เช่น เป็นบ่อพลังงานศักย์แบบสี่เหลี่ยม (Square well potential) ถึงแม้จะจำกัดมิติการเคลื่อนที่ของอนุภาคให้เป็นแบบ 1 มิติ นักศึกษาก็ยังมองภาพการหาฟังก์ชันคลื่น และพลังงานซึ่งเป็นค่าเจาะจง (eigen value) ที่สอดคล้องกับฟังก์ชันคลื่นไม่ชัดเจน ทำให้การเรียนรู้วิธีการหาคำตอบของสมการชเรอดิงเงอร์ เป็นเรื่องที่เป็นนามธรรม เข้าใจยากและน่าเบื่อ

เพื่อที่จะแก้ปัญหาตรงจุดนี้ จึงจัดทำโปรแกรมจำลองการเคลื่อนที่ของอนุภาคในบ่อศักย์แบบ 1 มิติ สามารถทำงานในคอมพิวเตอร์แบบ PC ใช้การคำนวณเชิงตัวเลข หาคำตอบของสมการชเรอดิงเงอร์ของอนุภาคในบ่อศักย์ที่มีรูปแบบต่าง ๆ กัน พร้อมแสดงผลออกมาในรูปของกราฟิก สามารถกำหนดค่าพลังงานของอนุภาค แล้วให้คอมพิวเตอร์แสดงฟังก์ชันคลื่นของอนุภาคที่ค่าพลังงานนั้นออกมาให้เห็นอย่างทันทีทันใด ผู้เรียนสามารถเปรียบเทียบผลลัพธ์ที่ได้กับคำตอบที่ได้จากวิธีวิเคราะห์ทางคณิตศาสตร์ ทำให้การเรียนรู้กลศาสตร์ควอนตัมเป็นเรื่องที่น่าสนใจ และใช้เวลาในการเรียนรู้สั้นลง การดัดแปลงหรือเพิ่มเติมโปรแกรมอีกเพียงเล็กน้อย สามารถนำไปใช้อธิบายพฤติกรรมของอนุภาคซึ่งถูกกักไว้ในบ่อศักย์แบบอื่น ๆ ที่ไม่ได้กล่าวถึงในที่นี้ได้อีกด้วย

1.2. ความมุ่งหมายของการวิจัย

เพื่อพัฒนาโปรแกรม แสดงแบบจำลองอนุภาคในบ่อศักย์แบบต่าง ๆ สำหรับประกอบการเรียนการสอนวิชา กลศาสตร์ควอนตัม และวิชาฟิสิกส์ 2 (หัวข้อ กลศาสตร์ควอนตัมเบื้องต้น)

1.3 ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ

1. ได้โปรแกรมสำหรับใช้ในการจำลองอนุภาคในบ่อศักย์แบบต่าง ๆ ในกลศาสตร์ควอนตัม

2. สามารถนำไปประกอบบทเรียน E-learning เรียนรู้ผ่านเครือข่ายอินเตอร์เน็ตได้

1.4 ขอบเขตของโครงการวิจัย

แบบจำลองอนุภาคในบ่อศักย์ แบบต่าง ๆ ได้กำหนดขอบเขตของลักษณะของบ่อศักย์ที่ใช้ในแบบจำลอง ดังต่อไปนี้

1. บ่อศักย์ที่เป็นรูปสี่เหลี่ยม (Square well) สามารถเปลี่ยนระดับความลึกของบ่อได้จนถึงค่าอนันต์ โดยให้ความกว้างของบ่อศักย์คงที่

2. บ่อศักย์แบบพาราโบลา (Parabolic well) เป็นบ่อศักย์ที่เกิดจากฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์ (Harmonic oscillator)

3. บ่อศักย์แบบสามเหลี่ยมสมมาตร (Symmetric triangular well) เป็นบ่อศักย์ที่เป็นรูปสามเหลี่ยมที่สมมาตรในแนวแกน y

4. บ่อศักย์แบบแทนเจนต์กำลังสอง (Square tangent Well) เป็นบ่อศักย์ที่เกิดจากค่ากำลังสองของแทนเจนต์ จะมีลักษณะคล้ายกับบ่อศักย์รูปสี่เหลี่ยมในข้อ 1. แต่ก้นหลุมจะมีพลังงานศักย์เป็นศูนย์

5. บ่อศักย์แบบไฮเปอร์บอลิกโคไซน์กำลังสอง (Square hyperbolic cosine Well) เป็นบ่อศักย์ที่เกิดจากค่ากำลังสองของ cosh x จะมีลักษณะคล้ายกับบ่อศักย์แบบพาราโบลาในข้อ 2. แต่ก้นหลุมของพลังงานศักย์จะมีค่าเป็นลบ

1.5 นิยามศัพท์เฉพาะ

กลศาสตร์ควอนตัม (Quantum mechanics) เป็นสาขาหนึ่งในวิชาฟิสิกส์ กล่าวถึงพฤติกรรมของอนุภาคขนาดเล็กระดับอะตอมหรือเล็กกว่าอะตอม พฤติกรรมของอนุภาคเหล่านี้จะไม่เป็นไปตามกฎของนิวตันในกลศาสตร์คลาสสิก (Classical mechanics) อนุภาคสามารถแสดงสมบัติความเป็นคลื่นได้ ในขณะเดียวกันคลื่นที่เคยเชื่อกันว่าต่างจากอนุภาคอย่างสิ้นเชิง ก็มีสมบัติความเป็นอนุภาคได้เช่นกัน ปริมาณทางฟิสิกส์หลาย ๆ ปริมาณที่เราเชื่อกันว่ามีค่าต่อเนื่อง กลับ

พบว่ามันมีค่าได้เพียงบางค่าเท่านั้น เช่น พลังงาน โมเมนตัมเชิงมุม การที่ปริมาณทางฟิสิกส์มีค่าไม่ต่อเนื่องหรือมีค่าเป็นช่วง ๆ เรียกลักษณะเช่นนี้ว่า Quantization กลศาสตร์ควอนตัมทำให้มุมมองของนักวิทยาศาสตร์ที่มีต่อปรากฏการณ์ในระดับจุลภาคแตกต่างไปจากเดิม สามารถตอบปัญหาต่าง ๆ ที่ฟิสิกส์ยุคเก่าไม่สามารถตอบได้ หรืออธิบายไม่ถูกต้อง นำไปสู่การค้นพบและประดิษฐ์คิดค้นสิ่งใหม่ ๆ เช่น สารกึ่งตัวนำ เลเซอร์ และนาโนเทคโนโลยี

บ่อศักย์ (Potential well) หมายถึงบริเวณที่มีพลังงานศักย์ซึ่งสามารถกักกันอนุภาคไว้ในบริเวณนั้น ๆ ในกลศาสตร์นิวตัน ถ้าอนุภาคมีพลังงานไม่มากพอที่จะหลุดพ้นจากสนามที่ทำให้เกิดพลังงานศักย์นั้น อนุภาคจะถูกกักขังไว้ในบริเวณนั้น ไม่สามารถหลุดพ้นไปจากบ่อนี้ได้พลังงานของอนุภาคในบ่อศักย์นั้นสามารถมีได้ทุก ๆ ค่า (แต่ต้องไม่เกินค่าที่จะทำให้อนุภาคนั้นหลุดพ้นไปจากบ่อ) แต่ในกลศาสตร์ควอนตัม พบว่าพลังงานของอนุภาคมีได้เพียงบางค่าเท่านั้น พลังงานของอนุภาคนี้ต้องเป็นค่าเจาะจงที่สอดคล้องกับฟังก์ชันคลื่นที่เป็น eigen function ของค่าพลังงานนี้ด้วย

ฟังก์ชันเจาะจง (Eigen function) หมายถึงฟังก์ชันใด ๆ เมื่อนำตัวปฏิบัติการทางคณิตศาสตร์กระทำกับฟังก์ชันนี้แล้ว ผลลัพธ์ที่ได้มาจะเป็นฟังก์ชันอันเดิมคูณกับจำนวนจริงค่าหนึ่ง เรียกจำนวนจริงที่ได้นี้ว่า เป็นค่าเจาะจง (Eigenvalue) ตัวอย่างเช่น f(x) = ce^{-2x} เมื่อใช้ตัวปฏิบัติการ $\frac{d}{dx}$ กระทำกับฟังก์ชัน f(x) นี้จะผลลัพธ์เป็น

$$\frac{df(x)}{dx} = \frac{d}{dx}(ce^{-2x}) = -2ce^{-2x}$$

หรือ $$\frac{df(x)}{dx} = -2f(x)$$

f(x) จัดเป็นฟังก์ชันเจาะจง เพราะเมื่อใช้การหาอนุพันธ์ $\frac{d}{dx}$ เป็นตัวปฏิบัติการกระทำกับ f(x) แล้วจะได้ผลลัพธ์เป็นฟังก์ชันเดิม ค่าเจาะจงที่ได้ในที่นี้คือ -2

ในสมการชเรอดิงเงอร์ นั้น $\Psi(r)$ เป็นฟังก์ชันเจาะจง โดยมี $\left(-\frac{\bar{h}^2}{2m}\nabla^2 + V(r)\right)$ เป็นตัวปฏิบัติการ และ E เป็นค่าเจาะจง

This page left blank intentionally