

บทที่ 2

ทฤษฎีและเอกสารที่เกี่ยวข้อง

ในบทนี้กล่าวถึงทฤษฎีและเอกสารที่เกี่ยวข้องตามหัวข้อต่อไปนี้

- 2.1 สมการชเรอดิงเงอร์ 1 มิติ ที่ไม่ขึ้นกับเวลา
- 2.2 บ่อศักย์แบบต่าง ๆ
- 2.3 วิธีการคำนวณเชิงตัวเลขที่ใช้ในงานวิจัย
- 2.4 งานวิจัยหรือโปรแกรมเกี่ยวกับการจำลองปรากฏการณ์ในกลศาสตร์ควอนตัม

2.1 สมการชเรอดิงเงอร์ 1 มิติ ที่ไม่ขึ้นกับเวลา

(Time independent Schrodinger equation in 1 dimension)

สมการชเรอดิงเงอร์ (Schrödinger equation) สำหรับระบบควอนตัมทั่วไป (General quantum system) มีรูปสมการดังนี้

$$\hat{H}\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (2.1)$$

เมื่อ Ψ คือ ฟังก์ชันคลื่นของอนุภาค

$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ คือ ตัวปฏิบัติการพลังงาน (Energy operator)

$\hat{H}$ คือ ตัวปฏิบัติการแฮมิลโทเนียน (Hamiltonian operator)

กรณีเฉพาะสำหรับอนุภาคที่ถูกกักอยู่ในบ่อศักย์ โดยที่การเปลี่ยนแปลงของระบบควอนตัมนี้ไม่ขึ้นกับเวลา (time independent) สามารถเขียนสมการชเรอดิงเงอร์จากสมการ (2.1) ให้อยู่ในรูปของสมการอนุพันธ์ย่อยอันดับสอง คือ

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

$V(r)$ คือ พลังงานศักย์ที่ตำแหน่ง r ใด ๆ ในบริเวณนั้น ไม่ขึ้นกับเวลา

E คือ พลังงานทั้งหมดของระบบ

การหาค่าเฉลยของสมการนี้เพื่อหาฟังก์ชันคลื่นของอนุภาคค่อนข้างยุ่งยากและซับซ้อน และขึ้นอยู่กับพลังงานศักย์ตรงบริเวณที่อนุภาคนั้นอยู่ด้วย ในที่นี้จึงใช้กรณีที่เราเข้าใจได้ง่ายคือ การเคลื่อนที่ของอนุภาคเป็นแบบ 1 มิติ ในบ่อศักย์ 1 มิติเช่นกัน สมการชเรอดิงเงอร์ จะกลายเป็น

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \Psi(x) = E \Psi(x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + V(x) \psi(x) = E \psi(x)$$

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) \psi(x) = 0 \quad (2.2)$$

พิจารณาเทอม $\frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x))$ หรือเขียนในรูป $\frac{2mc^2}{\hbar^2 c^2} (E - V(x))$ ถ้าอนุภาคเป็นอิเล็กตรอน จะได้ $mc^2 = 5.11 \times 10^5 \text{ eV}$ และ $\hbar c = 197.3 \text{ eV nm}$ ปรากฏการณ์ที่มีขนาดเล็กระดับอะตอม นิยมใช้หน่วยในการวัดพลังงานเป็น eV และวัดขนาดความยาวเป็น nm

อย่างไรก็ตาม หน่วยในระบบ SI หรือ CGS เหมาะสมกับการใช้อธิบายปริมาณทางฟิสิกส์ในกลศาสตร์คลาสสิก แต่ถ้านำมาใช้ในกลศาสตร์ควอนตัม เช่นในการคำนวณเชิงตัวเลขที่เกี่ยวข้องกับค่าคงที่ของพลังค์ (Planck's constant) มีขนาดประมาณ 10^{-34} จูล.วินาที มวลของอิเล็กตรอนมีขนาดประมาณ 10^{-31} กิโลกรัม จะเกิดความคลาดเคลื่อนอันเกิดจากคอมพิวเตอร์คำนวณเลขจำนวนน้อย ๆ ได้ง่ายมาก และในกรณีที่มีการคำนวณซ้ำ ๆ หลายรอบ ความคลาดเคลื่อนนี้จะถูกสะสมไว้ ทำให้ผลลัพธ์ที่ได้ห่างไกลค่าแท้จริงอย่างสิ้นเชิง

เพื่อให้เกิดความสะดวกในการคำนวณ จึงเลือกใช้ หน่วยในระบบอะตอม หรือ Atomic Units หน่วยนี้จะกำหนดให้ค่าคงที่ของพลังค์ และมวลของอิเล็กตรอน มีขนาด 1 หน่วย ($m_e = \hbar = 1$) การกำหนดเช่นนี้จึงเกิดหน่วยใหม่ขึ้นเป็นจำนวนมาก (ดูรายละเอียดในภาคผนวก 1) สมการ (2.2) จะถูกลดรูปเหลือเพียง

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + 2(E - V(x)) \psi(x) = 0 \quad (2.3)$$

สมบัติของฟังก์ชันคลื่นที่เป็นผลเฉลยของสมการชเรอดิงเงอร์ บางประการที่จะต้องนำไปใช้ในการคำนวณของโปรแกรม มีดังนี้

1. รูปแบบของฟังก์ชันจะเป็นฟังก์ชันคู่และฟังก์ชันคี่สลับกันไป (จะเป็นฟังก์ชันคู่หรือคี่นั้น โดยการเทียบกับเส้นที่แบ่งครึ่งตรงกลางของบ่อศักย์) และเป็นจริงเช่นนี้เสมอสำหรับพลังงานศักย์ทุกแบบ ที่มีคุณสมบัติสมมาตร หรือ $V(-x) = V(x)$

2. ฟังก์ชันคลื่นที่สอดคล้องกับจำนวนเต็ม $n = 1, 2, 3, \dots$ เรียก n ว่าเลขควอนตัม (quantum number) จะเป็นฟังก์ชันเจาะจง (eigen function) ใช้ในการอธิบายระดับพลังงานของ

อนุภาค (E, energy) ในบ่อศักย์ เรียก E ว่าเป็นค่าเจาะจง (eigenvalue) ที่สถานะ $n = 1$ จะเป็นค่าพลังงานต่ำสุดของระบบ เรียกระดับพลังงานนี้ว่าเป็นระดับ ground state

3. ในการแปลความหมายฟังก์ชันคลื่น จะใช้ขนาดของฟังก์ชันคลื่น (magnitude of the wave function) เป็นตัวบ่งบอกถึงความน่าจะเป็นที่จะพบอนุภาคในบริเวณดังกล่าว เรียกว่า Probability density เขียนเป็นสัญลักษณ์คือ $P(x,t)$

$$P(x,t) = \psi^*(x,t)\psi(x,t) \quad (2.4)$$

ซึ่งเป็นการหาอัมพลิจูดของฟังก์ชันคลื่นนั่นเอง ถ้ามีอนุภาคอยู่ในระบบหนึ่ง ความน่าจะเป็นที่จะพบอนุภาคในบริเวณนั้นควรมีค่าเป็น 1 หรือมีโอกาสที่จะพบอนุภาคนั้นอยู่ในบริเวณนั้นอย่างแน่นอน 100% นั่นคือ

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x)\psi(x)dx = 1 \quad (2.5)$$

สมการ (2.5) เป็นการปรับความสูงของอัมพลิจูดของฟังก์ชันคลื่น ขั้นตอนที่เราเรียกว่า Normalization ฟังก์ชันคลื่น $\psi(x)$ และอนุพันธ์ของมันจะต้องมีค่าต่อเนื่องทุกค่าของ x จากสมการ (2.5) จะเห็นได้ว่า กำลังสองของฟังก์ชันคลื่นต้องสามารถหาปริพันธ์ได้ด้วย

4. ฟังก์ชันคลื่นของอนุภาคในบ่อศักย์ (ที่ไม่ใช่ตรงผนังของบ่อ) อาจมีค่าเป็นศูนย์ได้ในบางตำแหน่งของ x เราเรียกจุด x ที่ทำให้ฟังก์ชันคลื่น ณ ตำแหน่งนี้มีค่าเป็นศูนย์ว่า node หรือ zero crossing จำนวน node ของฟังก์ชันคลื่นของอนุภาคที่มีพลังงาน E_n พบว่ามีจำนวน $n - 1$ จุด และพบว่าที่ระดับพลังงานที่ $n = 1$ ไม่มี node เกิดขึ้นที่ระดับพลังงานนี้

5. ฟังก์ชันคลื่นของอนุภาคที่ถูก normalize แล้วมีคุณสมบัติเป็น orthogonal (ตั้งฉากซึ่งกันและกัน) หรือ orthonormal (เป็นทั้ง orthogonal และ normalize) สามารถเขียนเป็นสมการได้เป็น

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m^*(x)\psi_n(x)dx = \delta_{mn}$$

เมื่อ δ_{mn} คือ Kronecker delta function มีค่าเท่ากับ 1 เมื่อ $m = n$ (ซึ่งก็คือสมการ (2.5) นั่นเอง) และมีค่าเป็น 0 เมื่อ $m \neq n$ คุณสมบัตินี้สอดคล้องกับคุณสมบัติของเวกเตอร์ เราจึงสามารถเขียนเซตของฟังก์ชันคลื่นในแบบ vector space ได้

6. สามารถเขียนฟังก์ชันคลื่นอยู่ในรูป complete set โดยที่เราสามารถเขียนฟังก์ชัน $f(x)$ ซึ่งเป็นฟังก์ชันใด ๆ ในรูปของฟังก์ชันคลื่นดังนี้

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n$$

การหาค่าสัมประสิทธิ์ c_n ซึ่งเป็นค่าคงที่ สามารถอาศัยสมบัติ Normalization และเทคนิคการแปลงแบบฟูเรียร์ (Fourier transformation) หาได้โดยตรงดังนี้

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) f(x) dx = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) \psi_n(x) dx = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \delta_{nn}$$

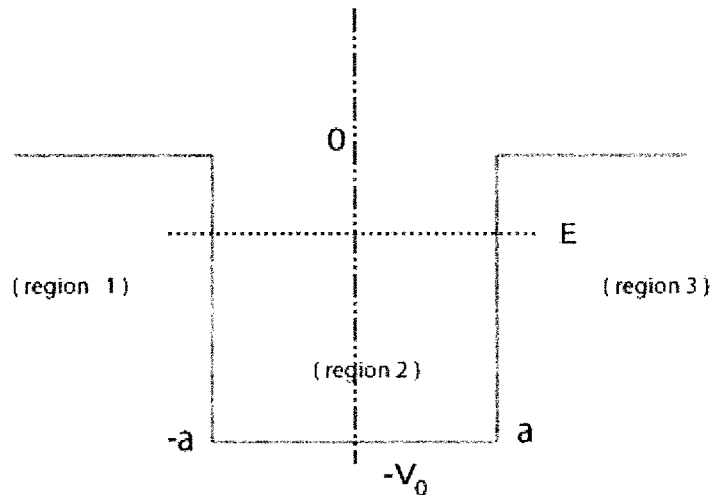
$$\sum_{n=1}^{\infty} c_n = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) f(x) dx$$

2.2 บ่อศักย์แบบต่าง ๆ

2.2.1 บ่อศักย์เป็นแบบสี่เหลี่ยมมีความลึกจำกัด (1 dimensional finite rectangular well)

อนุภาคมวล m เคลื่อนที่ในบ่อศักย์ที่มีขอบเขต ดังนี้

$$V = \begin{cases} -V_0 & \text{if } -a < x < a \\ 0 & \text{if } |x| \geq a \end{cases}$$



รูป 2.1 บ่อศักย์แบบสี่เหลี่ยมมีความลึกจำกัดใน 1 มิติ

อนุภาคที่มีพลังงานมากกว่าศูนย์ ($E > 0$) จะไม่ถูกกักไว้ในบ่อ แต่จะถูกกระเจิงออกไปโดยพลังงานศักย์ของบ่อ อนุภาคที่มีพลังงานน้อยกว่าศูนย์ ($-V_0 < E < 0$) จะถูกยึดไว้ในบ่อศักย์ เรียกกรณีนี้ว่าเป็น Bound state ตามทฤษฎีของกลศาสตร์คลาสสิก อนุภาคจะถูกกักและสะท้อนกลับไปกลับมาะหว่างขอบเขต $-a < x < a$ เท่านั้น โดยที่อนุภาคจะมีค่าพลังงานเป็นค่าใด ๆ ก็ได้

ในกลศาสตร์ควอนตัม พลังงานของอนุภาคจะมีค่าได้เพียงบางค่าเท่านั้น และค่านี้เป็นค่าเจาะจง (Eigen value) ของฟังก์ชันคลื่นที่เป็น Eigen function ที่สอดคล้องกัน

ในแต่ละบริเวณสามารถเขียน สมการ (2.2) ได้แตกต่างกันดังนี้

บริเวณที่ 1 (region 1) บริเวณนี้ $x < a$ แทนค่า $V(x) = 0$ $E = -E$

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = \frac{2m}{\hbar^2} E \psi(x)$$

บริเวณที่ 2 (region 2) $-a \leq x \leq a$ แทนค่า $V(x) = -V_0$ และ E มีค่าติดลบ

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E) \psi(x) = 0$$

บริเวณที่ 3 (region 3) $x > a$ แทนค่า $V = 0$

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = \frac{2m}{\hbar^2} E \psi(x)$$

เพื่อสะดวกต่อการเขียนสมการ จึงกำหนดให้

$$\ell = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad (2.6)$$

$$\text{และ } \kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)} \quad (2.7)$$

ค่า ℓ และ κ เป็นจำนวนจริงบวก กรณี bound state $V_0 - E > 0$

บริเวณที่ 1 และบริเวณที่ 3 : $V = 0$ แทนค่า $\ell = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ สมการจะกลายเป็น

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \ell^2 \psi = 0 \quad (2.8)$$

บริเวณที่ 1 จะได้ผลเฉลยทั่วไป

$$\psi_1 = Ae^{\ell x} + Be^{-\ell x}$$

เมื่อ A และ B คือค่าคงที่ พิจารณาที่ $x \rightarrow -\infty$ จะเห็นว่าเทอม $Be^{-\ell x}$ มีค่ามาก นั่นหมายถึง ψ_1 มีค่ามากตามไปด้วย ซึ่งเป็นไปไม่ได้ ดังนั้น B จึงต้องมีค่าเป็นศูนย์ ผลเฉลยของสมการจะเหลือเพียง

$$\psi_1 = Ae^{\ell x}$$

บริเวณที่ 3 จะได้ผลเฉลยทั่วไปคือ

$$\psi_3 = Fe^{\ell x} + Ge^{-\ell x}$$

เมื่อ F และ G คือค่าคงที่ พิจารณาที่ $x \rightarrow +\infty$ จะเห็นว่าเทอม $Fe^{\ell x}$ มีค่ามาก อันที่จริง ψ_3 ควรมีค่าเป็นศูนย์ ดังนั้น F จึงต้องมีค่าเป็นศูนย์ ดังนั้นผลเฉลยของสมการคือ

$$\psi_3 = Ge^{-\ell x}$$

บริเวณที่ 2: $V = -V(x)$ ค่าพลังงานของอนุภาค $|E|$ มีค่าน้อยกว่า $|V(x)|$ เมื่อแทนค่า

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)} \text{ แล้วรูปสมการจะได้เป็น}$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \kappa^2 \psi = 0 \quad (2.9)$$

ผลเฉลยทั่วไปของสมการนี้คือ

$$\psi_2 = Ce^{i\kappa x} + De^{-i\kappa x}$$

เมื่อ C และ D คือค่าคงที่

อาศัยเงื่อนไขขอบเขตตรงบริเวณรอยต่อ (Boundary condition) ที่ว่า ฟังก์ชันคลื่นและอนุพันธ์อันดับหนึ่งของฟังก์ชันคลื่นตรงบริเวณรอยต่อ ($x = -a$ และ $x = a$) ต้องมีค่าต่อเนื่อง

ที่ $x = -a$ ใช้เงื่อนไข $\psi_1(-a) = \psi_2(-a)$ จะได้

$$Ae^{-\ell a} = Ce^{-i\kappa a} + De^{i\kappa a} \quad (2.10)$$

ใช้เงื่อนไข $\left. \frac{\partial \psi_1}{\partial x} \right|_{x=-a} = \left. \frac{\partial \psi_2}{\partial x} \right|_{x=-a}$ จะได้

$$A\ell e^{-\ell a} = i\kappa(Ce^{-i\kappa a} - De^{i\kappa a}) \quad (2.11)$$

ที่ $x = +a$ ใช้เงื่อนไข $\psi_2(a) = \psi_3(a)$ จะได้

$$Ge^{-\ell a} = Ce^{i\kappa a} + De^{-i\kappa a} \quad (2.12)$$

ใช้เงื่อนไข $\left. \frac{\partial \psi_2}{\partial x} \right|_{x=a} = \left. \frac{\partial \psi_3}{\partial x} \right|_{x=a}$ จะได้

$$-G\ell e^{-\ell a} = i\kappa(Ce^{+i\kappa a} - De^{-i\kappa a}) \quad (2.13)$$

หาค่าของ C และ D ในเทอมของ A จะได้

$$i\kappa(2.10) + (2.11) \quad C = e^{(-\ell+i\kappa)a} \left(\frac{\ell+i\kappa}{2i\kappa} \right) A \quad (2.14)$$

$$(2.11) - i\kappa(2.10) \quad -D = e^{-(\ell+i\kappa)a} \left(\frac{\ell-i\kappa}{2i\kappa} \right) A \quad (2.15)$$

หาค่าของ C และ D ในเทอมของ G จะได้

$$i\kappa(2.12) + (2.13) \quad -C = e^{-(\ell+i\kappa)a} \left(\frac{\ell-i\kappa}{2i\kappa} \right) G \quad (2.16)$$

$$(2.13) - i\kappa(2.12) \quad D = e^{(-\ell+i\kappa)a} \left(\frac{\ell+i\kappa}{2i\kappa} \right) G \quad (2.17)$$

หาความสัมพันธ์ระหว่าง A และ G

จากสมการ (2.14) และ (2.16) ต่างเท่ากับ C จะได้

$$e^{(-\ell+i\kappa)a} \left(\frac{\ell+i\kappa}{2i\kappa} \right) A = -e^{-(\ell+i\kappa)a} \left(\frac{\ell-i\kappa}{2i\kappa} \right) G \quad (2.18)$$

จากสมการ (2.15) และ (2.17) ต่างเท่ากับ D จะได้

$$-e^{-(\ell+i\kappa)a} \left(\frac{\ell-i\kappa}{2i\kappa} \right) A = e^{(-\ell+i\kappa)a} \left(\frac{\ell+i\kappa}{2i\kappa} \right) G \quad (2.19)$$

$$(2.18) \div (2.19)$$

$$\frac{e^{(-\ell+i\kappa)a} (\ell+i\kappa)}{e^{-(\ell+i\kappa)a} (\ell-i\kappa)} = \frac{e^{-(\ell+i\kappa)a} (\ell-i\kappa)}{e^{(-\ell+i\kappa)a} (\ell+i\kappa)}$$

$$e^{i(2\kappa a)} = \pm \frac{(\ell-i\kappa)}{(\ell+i\kappa)} \quad (2.20)$$

สมการ (2.20) แยกได้เป็น 2 กรณี คือ

$$\frac{\ell-i\kappa}{\ell+i\kappa} = -e^{i(2\kappa a)} \quad (2.21)$$

และ
$$\frac{\ell - i\kappa}{\ell + i\kappa} = +e^{i(2\kappa a)} \quad (2.22)$$

พิจารณากรณี
$$\frac{\ell - i\kappa}{\ell + i\kappa} = -e^{i(2\kappa a)}$$

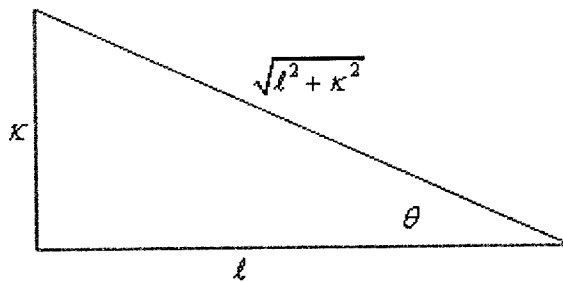
กำหนดให้ด้านซ้ายมือ $\frac{\ell - i\kappa}{\ell + i\kappa} = +e^{-i(2\theta)}$ เมื่อ θ คือมุมที่กำหนดขึ้นมาและจะนำไปหาความสัมพันธ์ระหว่าง θ กับ κa

หรือ
$$\frac{\ell^2 - \kappa^2}{\ell^2 + \kappa^2} - i \frac{2\ell\kappa}{\ell^2 + \kappa^2} = \cos 2\theta - i \sin 2\theta \quad (2.23)$$

จากสมการ (2.23) จะได้
$$\cos 2\theta = \frac{\ell^2 - \kappa^2}{\ell^2 + \kappa^2}$$

และจะได้
$$\cos \theta = \sqrt{\frac{1}{2}(\cos 2\theta + 1)} = \pm \frac{\ell}{\sqrt{\ell^2 + \kappa^2}}$$

นำไปสู่
$$\sin \theta = \pm \frac{\kappa}{\sqrt{\ell^2 + \kappa^2}} \quad \text{และ} \quad \cot \theta = \frac{\ell}{\kappa}$$



ด้านขวามือของสมการ (2.21) $-e^{i(2\kappa a)} = e^{-i2\theta}$

นั่นคือ
$$2\kappa a = \pi - 2\theta$$

$$\theta = \frac{\pi}{2} - \kappa a$$

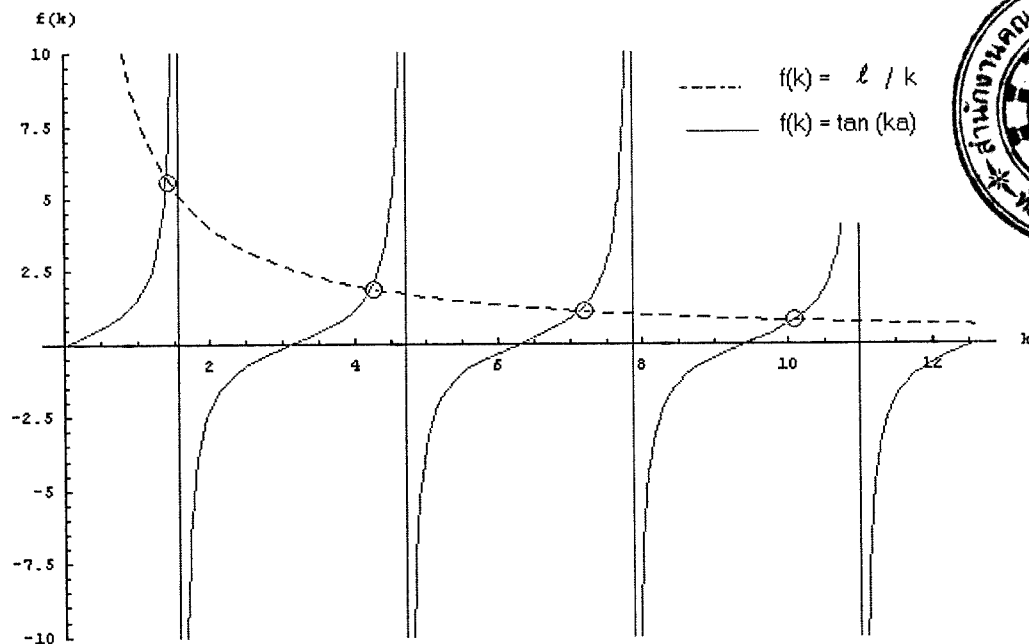
จาก $\cot \theta = \frac{\ell}{\kappa}$ แทนค่า θ

$$\cot \theta = \cot\left(\frac{\pi}{2} - \kappa a\right) = \tan(\kappa a) = \frac{\ell}{\kappa}$$

$$\tan(\kappa a) = \frac{\ell}{\kappa} \quad (2.24)$$

เป็นจริงทุก ๆ ค่าของ κ โดยที่ $\tan(\kappa a)$ มีค่ามากกว่าหรือเท่ากับ 0

สมการที่ (2.24) สามารถนำไปใช้หาพลังงานของอนุภาคที่เป็นไปได้ภายในบ่อศักย์ เพราะ k เป็นฟังก์ชันกับ E แต่การหาค่า E ไม่สามารถทำได้โดยง่าย เพราะสมการที่ (2.24) เป็นฟังก์ชันอดิศัย (transcendental function) ตัวแปร k ปรากฏอยู่ในค่า $\tan$ ด้านซ้ายมือ และยังปรากฏให้เห็นด้านขวามืออีกด้วย การหารากสมการนี้ต้องทำโดยวิธีคำนวณเชิงตัวเลข (numerical method) หรือ ใช้วิธีพล็อตกราฟ ระหว่าง $\tan ka$ กับ $\frac{\ell}{k}$ บนแกนเดียวกัน เพื่อหาจุดตัดของกราฟ



รูปที่ 2.2 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่าง $\tan(ka)$ และ $\frac{\ell}{k}$ กับ k

จุดที่ตัดกันนั้นคือจุดที่ k มีค่าเป็นไปได้สอดคล้องกับสมการที่ (2.24) เมื่อรู้ค่า k สามารถนำไปหาพลังงานของอนุภาคได้ ซึ่งแสดงให้เห็นว่า พลังงานสามารถมีค่าได้เพียงบางค่าหรือมีค่าไม่ต่อเนื่อง

ทดลองตรวจสอบผลลัพธ์ที่ได้โดย พิจารณากรณีที่ $V \rightarrow \infty$ ค่า $\tan ka \rightarrow 0$ นั่นคือ $ka = n\pi$ ฟังก์ชันคลื่น ψ จะหายไปหนึ่งบ่อ พลังงานของอนุภาค E หาได้จาก

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \left(\frac{n\pi}{a}\right)^2}{2m} = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2ma^2}$$

ผลลัพธ์นี้สอดคล้องกับระดับพลังงานของอนุภาคที่ถูกกักอยู่ในบ่อศักย์สี่เหลี่ยมที่มีความสูงอนันต์

เพื่อให้ง่ายต่อการเขียนกราฟและอธิบายผล จึงเปลี่ยนรูปของสมการ (2.24) ให้อยู่ในรูปของ cosine ดังนี้

สำนักงานคณะกรรมการวิจัยแห่งชาติ	
ห้องสมุดงานวิจัย	
วันที่.....	- 5 ส.ค. 2555
เลขทะเบียน.....	244418
เลขเรียกหนังสือ.....	

$$\tan^2 \kappa a + 1 = \frac{\ell^2 + \kappa^2}{\kappa^2} = \sec^2 \kappa a = \frac{1}{\cos^2 \kappa a} \quad (2.25)$$

เมื่อแทนค่า ℓ และ κ จากสมการ (2.6) และ (2.7) ลงในเทอม $\ell^2 + \kappa^2$

$$\text{จะได้ } \ell^2 + \kappa^2 = \frac{2mV(x)}{\hbar^2} = \kappa_0^2 \quad (2.26)$$

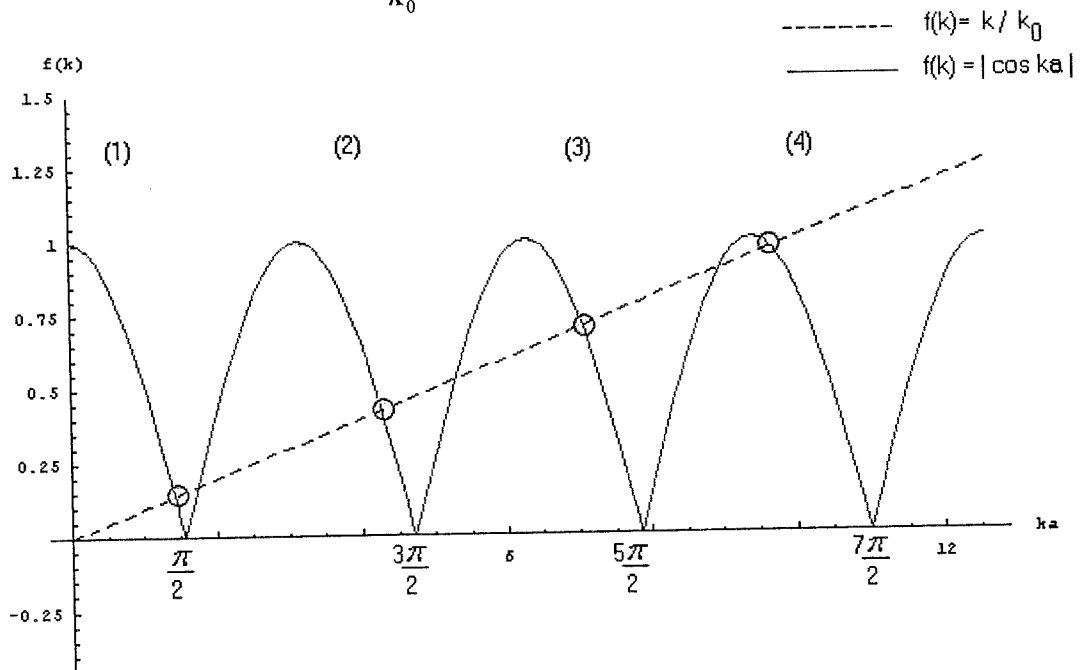
κ_0 จะเป็นตัวบอกความลึกของบ่อศักย์

สมการ (2.25) จะได้ผลลัพธ์เป็น

$$|\cos \kappa a| = \frac{\kappa}{\kappa_0} \quad (2.27)$$

สมการ (2.27) เป็นจริงสำหรับทุกค่าของ κ โดยที่ $\tan(\kappa a) \geq 0$

เขียนกราฟระหว่าง $|\cos \kappa a|$ กับ $\frac{\kappa}{\kappa_0}$ บนแกนเดียวกัน เพื่อหาจุดตัดของกราฟ



รูปที่ 2.3 เปลี่ยนรูปฟังก์ชัน $\tan$ ให้อยู่ในรูป $\cos$ เพื่อจะได้ดูง่ายขึ้น

บริเวณที่แรเงา (1) (2) (3) และ (4) เป็นบริเวณที่ $\tan \kappa a \geq 0$ จากค่า κ_0 ที่กำหนดให้ จะได้ค่า κ ที่เป็นรากสมการของสมการ (2.27) จำนวน 4 ค่า ถ้า κ_0 เพิ่มค่ามากขึ้น จะได้จำนวนรากสมการเพิ่มขึ้นตามไปด้วย จะเห็นว่าทุก ๆ ค่า κ_0 จะต้องมียากสมการหรือมีระดับพลังงานของ Bound state อย่างน้อย 1 ค่าเสมอ

พิจารณากรณี
$$\frac{\ell - i\kappa}{\ell + i\kappa} = e^{-i(2\kappa a)}$$

กำหนดให้ด้านซ้ายมือ $\frac{\ell - i\kappa}{\ell + i\kappa} = +e^{-i(2\theta)}$ เช่นเดียวกันกับกรณีแรก

นั่นคือ

$$e^{-i(2\theta)} = e^{i(2\kappa a)}$$

$$2\theta = -2\kappa a$$

เพราะ $\cot \theta = \frac{\ell}{\kappa}$ แทนค่า θ จะได้

$$\cot(-\kappa a) = -\cot(\kappa a) = \frac{\ell}{\kappa}$$

$$-\cot(\kappa a) = \frac{\ell}{\kappa} \quad (2.28)$$

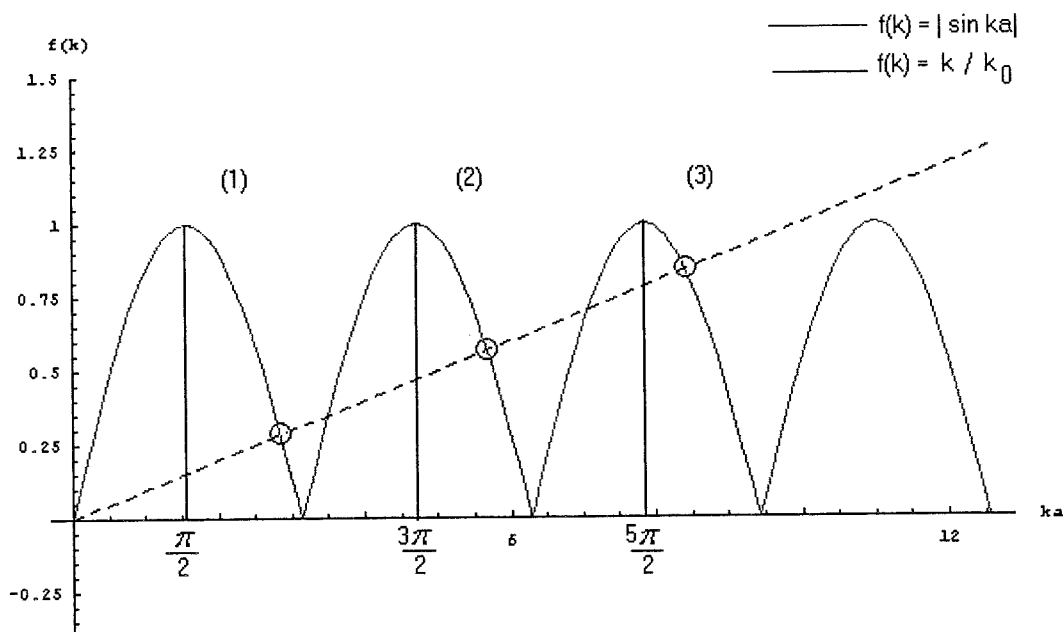
สมการ (2.28) เป็นจริงสำหรับทุก ๆ ค่าของ κ โดยที่ $\cot(\kappa a) \leq 0$

เพื่อให้่ายต่อการพล็อตกราฟ จึงเป็นรูปสมการ (2.28) ให้เป็นฟังก์ชันของ sine ดังนี้

$$1 + \cot^2 \kappa a = \frac{\kappa^2 + \ell^2}{\kappa^2} = \frac{\kappa_0^2}{\kappa^2} = \operatorname{cosec}^2 \kappa a = \frac{1}{\sin^2 \kappa a}$$

$$|\sin \kappa a| = \frac{\kappa}{\kappa_0} \quad (2.29)$$

เขียนกราฟระหว่าง $|\sin \kappa a|$ กับ $\frac{\kappa}{\kappa_0}$ บนแกนเดียวกัน เพื่อหาจุดตัดของกราฟ โดยเลือกจุดตัดที่เกิดขึ้นตรงบริเวณที่ $\cot(\kappa a) \leq 0$



รูปที่ 2.4 เปลี่ยนรูปฟังก์ชัน $\cot$ ให้อยู่ในรูป $\sin$ เพื่อจะได้ดูง่ายขึ้น

นำค่า κ ที่หาได้ไปแทนค่าลงในสมการ $e^{i(2\kappa a)} = \pm \frac{(\ell - i\kappa)}{(\ell + i\kappa)}$ (สมการ (2.20)) เพื่อหาความสัมพันธ์ระหว่าง A, C, D และ G ได้ดังนี้

เมื่อ $\frac{\ell - i\kappa}{\ell + i\kappa} = -e^{i(2\kappa a)}$ จะได้ $C = D$ และ $A = G$ ทำให้ได้ฟังก์ชันคลื่นที่มีคุณสมบัติ $\psi(-x) = \psi(x)$ ผลเฉลยที่ได้จะเป็น ฟังก์ชันคู่ (Even function)

เมื่อ $\frac{\ell - i\kappa}{\ell + i\kappa} = +e^{i(2\kappa a)}$ จะได้ $C = -D$ และ $A = -G$ ทำให้ได้ฟังก์ชันคลื่นที่มีคุณสมบัติ $\psi(-x) = -\psi(x)$ ผลเฉลยที่ได้จะเป็น ฟังก์ชันคี่ (Odd function)

จากสมการ (2.24) และ (2.28) ทำให้เกิดฟังก์ชันคลื่นที่เป็นฟังก์ชันคู่และคี่ตามลำดับ นำความรู้ทางตรีโกณมิติ รวมสมการทั้งสองเป็นสมการเดียวกัน ดังนี้

จากสมการ (2.28) ซึ่งมีรูปสมการเป็น $-\cot(\kappa a) = \frac{\ell}{\kappa}$ เขียนให้อยู่ในรูป $\tan$ โดยอาศัยความสัมพันธ์ $\tan(\theta - \frac{\pi}{2}) = -\cot \theta$ สมการ (2.28) จะกลายเป็น

$$\tan(\kappa a - \frac{\pi}{2}) = \frac{\ell}{\kappa} \quad (2.30)$$

เมื่อนำสมการ (2.24) ไปพล็อตกราฟ จะได้ค่า $\tan$ เป็นช่วง ๆ ดังรูปที่ 2.2 โดยอาศัยความสัมพันธ์ทางตรีโกณมิติ

$$\tan(\theta - \pi) = \tan(\theta - 2\pi) = \tan(\theta - 3\pi) \dots = \tan(\theta - m\pi) = \tan(\theta)$$

เมื่อ $m = 0, 1, 2, 3, \dots$

จึงเขียนสมการ (2.24) ให้อยู่ในรูปทั่วไปได้เป็น

$$\begin{aligned} \tan(\kappa a - m\pi) &= \frac{\ell}{\kappa} \\ \text{หรือ} \quad \kappa a &= m\pi + \tan^{-1} \frac{\ell}{\kappa} \end{aligned} \quad (2.31)$$

และเขียนสมการ (2.30) อยู่ในรูปทั่วไปได้เช่นกัน

$$\begin{aligned} \tan(\kappa a - \frac{\pi}{2} - m\pi) &= \frac{\ell}{\kappa} \\ \text{หรือ} \quad \kappa a &= \frac{\pi}{2} + m\pi + \tan^{-1} \frac{\ell}{\kappa} \end{aligned} \quad (2.32)$$

สมการ (2.31) คือสมการที่ทำให้ผลเฉลยเป็นฟังก์ชันคู่และ สมการ (2.32) คือสมการที่ทำให้ผลเฉลยเป็นฟังก์ชันคี่ เมื่อ $m = 0, 1, 2, 3, \dots$ รูปสมการทั้งสองมีลักษณะคล้ายกัน ต่างกัน

ตรงค่า $\frac{\pi}{2}$ ต้องการรวมสมการทั้งสองให้เขียนเป็นสมการเดียวกันเพื่อความกระชับ โดยจัดเงื่อนไขให้เหมาะสม จนสามารถสอดคล้องกับความเป็นฟังก์ชันคู่และคี่ของสมการได้

ถ้ากำหนดให้ $m = \frac{1}{2}(n-1)$ สามารถเขียนรวมสมการ (2.31) และ (2.32) ให้เหลือสมการเดียวดังนี้

$$\begin{aligned}\kappa a &= \frac{1}{2}(n-1)\pi + \tan^{-1} \frac{\ell}{\kappa} \\ 2\kappa a &= (n-1)\pi + 2 \tan^{-1} \frac{\ell}{\kappa}\end{aligned}\quad (2.33)$$

เมื่อ $n = 1, 2, 3, \dots$ เป็นจำนวนเต็มบวกที่เริ่มต้นด้วย 1

เมื่อ $n = 1, 3, 5, 7, 9, \dots$ จะสอดคล้องกับสมการ (2.31) หรือผลเฉลยที่ได้จะเป็นฟังก์ชันคู่

เมื่อ $n = 2, 4, 6, 8, 10, \dots$ จะสอดคล้องกับสมการ (2.32) ผลเฉลยที่ได้จะเป็นฟังก์ชันคี่

ค่า n นี้คือเลขควอนตัม ที่แสดงสถานะของพลังงานของอนุภาคในระบบ จะเห็นว่า n ที่เป็นเลขคี่ จะให้ฟังก์ชันคลื่นที่เป็นฟังก์ชันคู่ ในทางกลับกัน n ที่เป็นเลขคู่ จะให้ฟังก์ชันคลื่นที่เป็นฟังก์ชันคี่ สมการ (2.33) ทำให้มองภาพการหาพลังงาน (E) ได้ชัดเจนขึ้น เมื่อแทนค่า κ และ ℓ ลงไป จะได้เป็น

$$2a\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)} = (n-1)\pi + 2 \tan^{-1} \sqrt{\frac{E}{V_0 - E}} \quad (2.34)$$

ในหน่วยอะตอม สมการจะถูกลดรูปเหลือเพียง

$$2a\sqrt{2(V_0 - E)} = (n-1)\pi + 2 \tan^{-1} \sqrt{\frac{E}{V_0 - E}}$$

สมการที่ (2.34) เป็นฟังก์ชันอดิศัย (transcendental function) จะเห็นว่าตัวแปร E ไม่สามารถเขียนแสดงความสัมพันธ์กันได้อย่างชัดเจน มี E ปรากฏอยู่ทางด้านซ้ายมือ และยังมี E ปรากฏให้เห็นด้านขวามืออีกด้วย การหาค่า E ไม่สามารถทำได้โดยวิธีวิเคราะห์ ต้องใช้วิธีการคำนวณเชิงตัวเลขเข้ามาช่วย

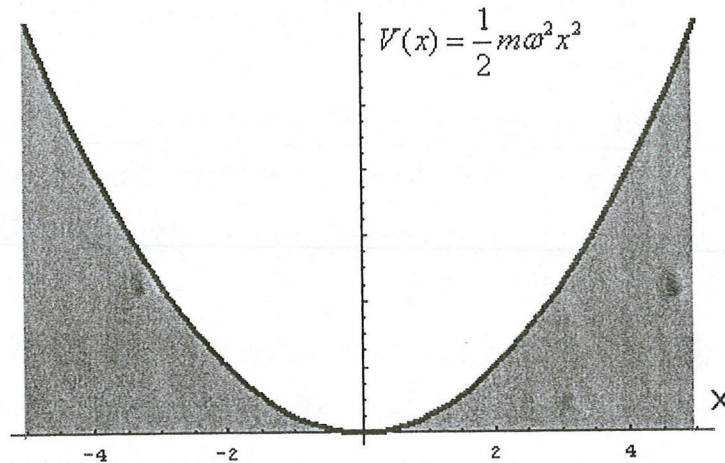
2.2.2 ฮาร์มอนิก ออสซิลเลเตอร์ แบบ 1 มิติ (Harmonic Oscillator)

สมการชเรอดิงเงอร์เขียนได้เป็น

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \psi(x) = E \psi(x) \quad (2.35)$$

เมื่อ $V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$

ω คือความเร็วเชิงมุมของการสั่นของอนุภาคในหน่วย radian/sec



รูปที่ 2.5 พลังงานของ Harmonic oscillator

กำหนดให้ $\varepsilon = \frac{2E}{\hbar \omega}$ และ $\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x$

โดยใช้กฎลูกโซ่ (chain rule)

$$\frac{d\psi}{dx} = \frac{d\psi}{d\xi} \frac{d\xi}{dx} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \frac{d\xi}{dx} \frac{d\psi}{d\xi}$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{d}{dx} \frac{d\psi}{dx} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \frac{d}{d\xi} \left(\frac{d\psi}{d\xi} \frac{d\xi}{dx} \right) = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \frac{d^2\psi}{d\xi^2}$$

แทนค่าลงในสมการ (2.35) จะเหลือสั้น ๆ เพียง

$$\frac{d^2\psi_n}{d\xi^2} + (\varepsilon - \xi^2) \psi_n = 0 \quad (2.36)$$

ในหนังสือกลศาสตร์ควอนตัมเกือบทุกเล่ม จะหาคำตอบของสมการอนุพันธ์ สมการ (2.36) นี้โดยการหาค่า ψ ที่ ξ มีค่ามาก ๆ สู่อนันต์ ที่เรียกว่า asymptotic จากนั้นจึงกลับมาหาค่า ψ ที่ ξ มีค่าน้อย ๆ ซึ่งจะได้ผลเฉลยทั่วไปของสมการอนุพันธ์นี้คือ

$$\psi(\xi) = H(\xi)e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

ในที่นี้จะใช้ตัวปฏิบัติการดิฟเฟอเรนเชียล (Differential operator) หาค่าพลังงานของระบบ จัดรูปสมการ (2.36) ใหม่ โดยแทนค่า $\varepsilon = \frac{2E}{\hbar\omega}$ กลับคืน จะได้

$$\left(-\frac{d^2}{d\xi^2} + \xi^2\right)\psi_n = \frac{2E_n}{\hbar\omega}\psi_n \quad (2.37)$$

จากคุณสมบัติของ Differential operator

$$\begin{aligned} \left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right)\left(\xi + \frac{d}{d\xi}\right) &= \xi^2 - \frac{d^2}{d\xi^2} - \frac{d}{d\xi}\xi + \xi\frac{d}{d\xi} \\ &= \xi^2 - \frac{d^2}{d\xi^2} - 1 - \xi\frac{d}{d\xi} + \xi\frac{d}{d\xi} \\ &= \xi^2 - \frac{d^2}{d\xi^2} - 1 \end{aligned} \quad (2.38)$$

และ

$$\begin{aligned} \left(\xi + \frac{d}{d\xi}\right)\left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right) &= \xi^2 - \frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{d}{d\xi}\xi - \xi\frac{d}{d\xi} \\ &= \xi^2 - \frac{d^2}{d\xi^2} + 1 + \xi\frac{d}{d\xi} - \xi\frac{d}{d\xi} \\ &= \xi^2 - \frac{d^2}{d\xi^2} + 1 \end{aligned} \quad (2.39)$$

ใช้ความสัมพันธ์ในสมการ (2.38) และ (2.39) สามารถเปลี่ยนรูปสมการ (2.37) ได้ 2 แบบคือ

แบบที่ 1

$$\left[\left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right)\left(\xi + \frac{d}{d\xi}\right) + 1\right]\psi_n = \frac{2E}{\hbar\omega}\psi_n$$

หรือ
$$\left[\left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right) \left(\xi + \frac{d}{d\xi} \right) \right] \psi_n = \left(\frac{2E}{\hbar\omega} - 1 \right) \psi_n \quad (2.40)$$

แบบที่ 2

$$\left[\left(\xi + \frac{d}{d\xi} \right) \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right) - 1 \right] \psi_n = \frac{2E}{\hbar\omega} \psi_n$$

หรือ
$$\left[\left(\xi + \frac{d}{d\xi} \right) \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right) \right] \psi_n = \left(\frac{2E}{\hbar\omega} + 1 \right) \psi_n \quad (2.41)$$

จากสมการ (2.40)

ให้
$$\phi_n = \left(\xi + \frac{d}{d\xi} \right) \psi_n \quad (2.42)$$

สมการที่ (2.40) จะเหลือเพียง

$$\left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right) \phi_n = \left(\frac{2E}{\hbar\omega} - 1 \right) \psi_n$$

เมื่อใช้ Hamiltonian operator กระทำกับ ϕ_n เพื่อหาค่าไอเกนของระบบ

$$\begin{aligned} \hat{H}\phi_n &= \left[\left(\xi + \frac{d}{d\xi} \right) \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right) - 1 \right] \phi_n \\ &= \left(\xi + \frac{d}{d\xi} \right) \left[\left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right) \left(\xi + \frac{d}{d\xi} \right) - 1 \right] \psi_n \\ &= \left(\xi + \frac{d}{d\xi} \right) \left[\left(\frac{2E}{\hbar\omega} - 1 \right) - 1 \right] \psi_n \\ &= \left(\frac{2E_n}{\hbar\omega} - 2 \right) \phi_n \end{aligned}$$

จะเห็นว่าค่าไอเกนที่สอดคล้องกับสมการชเรอดิงเงอร์คือ $\left(\frac{2E_n}{\hbar\omega} - 2 \right)$

ในทำนองเดียวกันจากสมการ (2.41)

ให้
$$\theta_n = \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right) \psi_n \quad (2.43)$$

เมื่อใช้ Hamiltonian operator กระทำกับ θ_n เพื่อหาค่าไอเกนของระบบ จะได้

$$\hat{H}\theta_n = \left(\frac{2E_n}{\hbar\omega} + 2 \right) \theta_n$$

จะเห็นว่า $\left(\xi + \frac{d}{d\xi}\right)$ เป็น operator ที่ลดค่า (lower) พลังงานของระบบ และ $\left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right)$ เป็น operator ที่เพิ่มค่า (raise) พลังงานของระบบ

แต่การลดค่าพลังงาน สามารถลดค่าได้ไม่น้อยกว่าพลังงานต่ำสุดของบ่อศักย์ สำหรับฮาร์โมนิก ออสซิลเลเตอร์ มีค่าพลังงานต่ำสุดเท่ากับ ศูนย์ ดังนั้น

$$\left(\xi + \frac{d}{d\xi}\right)\psi_0 = 0$$

$$\frac{d\psi_0}{d\xi} = -\xi\psi_0$$

หาปริพันธ์ทั้งสองข้าง เพื่อหาฟังก์ชันคลื่น ψ_0

$$\int \frac{d\psi_0}{\psi_0} = -\int \xi d\xi$$

$$\ln \psi_0 = -\frac{\xi^2}{2} + \ln A$$

$$\psi_0 = Ae^{-\frac{\xi^2}{2}} = Ae^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}$$

เมื่อ A คือค่าคงที่ใดๆ ฟังก์ชันคลื่นนี้เป็นฟังก์ชันคลื่นที่ยังไม่ได้ทำการ normalize ต้องการหาค่า E_0 ทำได้โดยแทนค่า ψ_0 ลงในสมการ (2.38)

$$\left[\left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right)\left(\xi + \frac{d}{d\xi}\right)\right]\psi_0 = \left(\frac{2E}{\hbar\omega} - 1\right)\psi_0$$

$$\text{ด้านซ้ายมือมีค่าเป็นศูนย์ เพราะ } \left(\xi + \frac{d}{d\xi}\right)\psi_0 = 0$$

$$\text{จึงได้} \quad \left(\frac{2E}{\hbar\omega} - 1\right) = 0$$

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$$

เริ่มต้นจาก ψ_0 สามารถใช้ raising operator โดยกำหนดให้ $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right) = a_+$ หาค่าพลังงานที่ระดับพลังงาน n ต่าง ๆ กันได้

$$\text{จากสมการ (2.43)} \quad \theta_n = \left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right)\psi_n$$

$$\theta_0 = a_+ \psi_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right) \psi_0 = C_0 \psi_1$$

และใช้ lower operator โดยกำหนดให้ $\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi + \frac{d}{d\xi} \right) = a_-$ หาพลังงานที่เลขควอนตัม n มีค่าต่ำลง

$$\text{จากสมการ (2.42)} \quad \phi_n = \left(\xi + \frac{d}{d\xi} \right) \psi_n$$

$$\phi_1 = a_- \psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi + \frac{d}{d\xi} \right) \psi_1 = D_1 \psi_0$$

เมื่อ C_0 และ D_0 เป็นค่าคงที่ การใช้ operator กระทำกับฟังก์ชันคลื่นเช่นนี้ ทำให้ได้เซตของพลังงานที่เลขควอนตัม n ใด ๆ ชุดหนึ่งดังนี้

$$E_n = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (2.44)$$

เมื่อ $n = 0, 1, 2, 3, \dots$

ในการเขียนโปรแกรมเพื่อจำลองอนุภาคในบ่อศักย์ ต้องการให้ n เริ่มต้นที่ 1, 2, 3, ... จึงแทนค่า n ด้วย $n-1$ สมการ (2.44) จะกลายเป็น

$$E_{n-1} = \hbar \omega \left(n - \frac{1}{2} \right) \quad (2.45)$$

เมื่อ $n = 1, 2, 3, \dots$

ขั้นตอนการหาพลังงานโดยใช้ตัวปฏิบัติการทั้งหมด สามารถนำไปเปรียบเทียบกับการใช้ตัวปฏิบัติการที่พบในหนังสือกลศาสตร์ควอนตัมทั่วไป ดังนี้

$$\text{ให้} \quad p = -i\hbar \frac{d}{dx}$$

เขียนสมการชเรอดิงเงอร์ให้อยู่ในรูปสมการพลังงานได้ดังนี้

$$\frac{1}{2m} (p^2 + (m\omega x)^2) \psi_n = E_n \psi_n$$

p และ x ไม่เป็นไปตามกฎการสลับที่ นั่นคือ

$$[x, p] = xp - px = \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{d}{dx} - \frac{d}{dx} x \right)$$

$$= \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{d}{dx} - x \frac{d}{dx} - 1 \right) = i\hbar$$

$$\frac{1}{2m} (p^2 + (m\omega x)^2) \psi_n = \frac{1}{2m} ((m\omega x + ip)(m\omega x - ip) - m\hbar\omega) \psi_n$$

$$= \frac{1}{2m} ((m\omega x - ip)(m\omega x + ip) + m\hbar\omega) \psi_n$$

นิยามให้ $a_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} (\mp ip + m\omega x)$ จะสอดคล้องกับ $a_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi \mp \frac{d}{d\xi} \right)$ ที่ได้แสดงไว้ในข้างต้น

2.2.3 บ่อศักย์แบบอื่น ๆ

บ่อศักย์แบบสามเหลี่ยมสมมาตร (Symmetric triangular well) เป็นบ่อศักย์ที่เป็นรูปสามเหลี่ยมที่สมมาตรในแนวแกน y พจน์ของบ่อศักย์จะมีลักษณะคล้ายกับพจน์ของบ่อศักย์ที่เกิดจากฮาร์มอนิก ออสซิลเลเตอร์ ก้นหลุมจะอยู่ที่จุดกำเนิด และพลังงานศักย์จะมีค่าเป็นบวก ต่างกันคือพจน์ของบ่อศักย์แบบสามเหลี่ยมจะลาดชันเป็นเส้นตรง สมการของบ่อศักย์ มีดังนี้

$$V(x) = V_0 |x|$$

บ่อศักย์แบบส่วนกลับของกำลังสองของไฮเพอร์บอริก โคไซน์ (Inverse square hyperbolic cosine well) รูปของบ่อจะมีลักษณะคล้ายกับแบบฮาร์มอนิก ออสซิลเลเตอร์ (1 มิติ) แต่มีค่าเป็นลบ โดยที่ความลึกของบ่อคือ V_0 สมการของบ่อศักย์มีลักษณะดังนี้

$$V(x) = -\frac{V_0}{\cosh^2(\alpha x)}$$

บ่อศักย์แบบแทนเจนต์กำลังสอง (Square tangent Well) เป็นบ่อศักย์ที่เกิดจากค่ากำลังสองของแทนเจนต์ จะมีลักษณะคล้ายกับบ่อศักย์รูปสี่เหลี่ยม. แต่ก้นหลุมจะมีพลังงานศักย์เป็นศูนย์ สมการของบ่อศักย์ คือ

$$V(x) = V_0 \tan^2 ax$$

$$\text{โดยที่ } -\frac{\pi}{2} \leq x \leq \frac{\pi}{2}$$

2.3 วิธีการคำนวณเชิงตัวเลขที่ใช้ในงานวิจัย

ในการหาผลเฉลยของสมการชเรอดิงเงอร์แบบ 1 มิติ ไม่ขึ้นกับเวลาตามสมการ (2.3) ที่มีรูปสมการ ดังนี้

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + 2(E - V(x))\psi(x) = 0$$

ค่า $V(x)$ จะเปลี่ยนไปตามบ่อศักย์ที่เลือกใช้ สมการนี้เป็นสมการอนุพันธ์อันดับสอง การหาผลเฉลยซึ่งก็คือฟังก์ชันคลื่นของอนุภาค $\psi(x)$ แล้วนำไปสู่การหาค่าพลังงาน E ซึ่งเป็นค่าเจาะจง (Eigen value) และระดับพลังงาน n ซึ่งมีค่าไม่ต่อเนื่อง วิธีการคำนวณเชิงตัวเลขที่ต้องนำมาใช้มีดังนี้

2.3.1 การหาผลเฉลยของสมการอนุพันธ์อันดับสอง โดยวิธีนูนเมอโรฟ (Numerov's method)

Boris Vasil'evich Numerov. เป็นผู้คิดวิธีการหาผลเฉลยของสมการอนุพันธ์ ในปี 1927 โดยที่สมการอนุพันธ์จะต้องมีอันดับสองอยู่ในรูปแบบดังนี้

$$\frac{d^2 y}{dx^2} + f(x)y = g(x) \quad (2.46)$$

ให้ $f(x)$ และ $g(x)$ เป็นฟังก์ชันที่มีค่าต่อเนื่องในช่วง $[a, b]$ แบ่งค่า x ในช่วง a ถึง b นี้ ออกเป็นส่วนย่อยเท่า ๆ กัน แต่ละส่วนมีค่าเท่ากับ h

จัดรูปสมการ (2.46) ใหม่จะได้เป็น

$$\frac{d^2 y}{dx^2} = -(f(x)y(x) - g(x))$$

เขียนสั้น ๆ ได้เป็น $y_i'' = -(f_i y_i - g_i)$ (2.47)

เมื่อ $f_i = f(x_i)$ $y_i = y(x_i)$ และ $g_i = g(x_i)$

ให้ $\Delta x = h = x_i - x_{i-1}$

เริ่มต้นด้วยการกระจาย $y(x_i)$ เป็นอนุกรมเทเลอร์ (Taylor series) รอบ ๆ จุด x_i

$$y_{i+1} = y(x_i + h) = y(x_i) + hy'(x_i) + \frac{h^2}{2!} y''(x_i) + \frac{h^3}{3!} y'''(x_i) + \frac{h^4}{4!} y^{(4)}(x_i) + \frac{h^5}{5!} y^{(5)}(x_i) + \dots$$

$$y_{i-1} = y(x_i - h) = y(x_i) - hy'(x_i) + \frac{h^2}{2!} y''(x_i) - \frac{h^3}{3!} y'''(x_i) + \frac{h^4}{4!} y^{(4)}(x_i) - \frac{h^5}{5!} y^{(5)}(x_i) + \dots$$

นำสมการทั้งสองบวกเข้าด้วยกัน

$$y_{i+1} + y_{i-1} = 2y_i + h^2 y_i'' + \frac{h^4}{12} y_i^{(4)} + O(h^6)$$

แทนค่า $y_i'' = -(f_i y_i - g_i)$ จากสมการ (2.47)

$$h^2 (f_i y_i - g_i) = 2y_i - y_{i+1} - y_{i-1} + \frac{h^4}{12} y_i^{(4)} + O(h^6) \quad (2.48)$$

จากสมการ (2.47) หาอนุพันธ์ 2 ครั้ง

$$y''''(x) = -\frac{d^2}{dx^2}(f(x)y(x) - g(x))$$

จากนิยามการหาอนุพันธ์อันดับสอง ที่ใช้ในวิชาแคลคูลัส

$$f''(x) = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2}$$

ดังนั้น

$$y''''(x_i) = -\frac{d^2}{dx^2}(f(x_i)y(x_i) - g(x_i)) = -\frac{(f_{i+1}y_{i+1} - g_{i+1}) - 2(f_i y_i - g_i) + (f_{i-1}y_{i-1} - g_{i-1}))}{h^2} \quad (2.49)$$

แทนค่า y'''' จากสมการ (4) ลงในสมการ (2.48)

$$h^2(f_i y_i - g_i) = 2y_i - y_{i+1} - y_{i-1} - \frac{h^4}{12} \left(\frac{(f_{i+1}y_{i+1} - g_{i+1}) - 2(f_i y_i - g_i) + (f_{i-1}y_{i-1} - g_{i-1}))}{h^2} \right) + O(h^6)$$

ต้องการหาค่า y_{i+1} จัดเทอมสมการบน เสียใหม่

$$\left(1 + \frac{h^2}{12} f_{i+1}\right) y_{i+1} = 2\left(1 - \frac{5h^2}{12} f_i\right) y_i - \left(1 + \frac{h^2}{12} f_{i-1}\right) y_{i-1} + \frac{h^2}{12} (g_{i+1} + 10g_i + g_{i-1}) + O(h^6) \quad (2.50)$$

สมการ (2.50) คือสมการที่ใช้ในการหาผลเฉลยของสมการอนุพันธ์อันดับสอง

จากสมการชเรอดิงเงอร์ที่ไม่ขึ้นกับเวลา มีรูปสมการเป็น

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) \psi(x) = 0$$

$$\text{ให้ } k^2(x) = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V)$$

จะได้
$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + k^2(x) \psi(x) = 0$$

ซึ่งมีรูปสมการสอดคล้องกับสมการ (2.46) โดยที่ $k^2(x)$ เทียบได้กับ $f(x)$ และ $g(x) = 0$ จึงสามารถ

ใช้วิธีนูนเมรอฟมาใช้แก้ปัญหาก็ได้ โดยตัดเทอม $g(x)$ ทิ้งไป สมการ (2.50) จะเหลือเพียง

$$\left(1 + \frac{h^2}{12} f_{i+1}\right) y_{i+1} = \left(2 - \frac{5h^2}{6} f_i\right) y_i - \left(1 + \frac{h^2}{12} f_{i-1}\right) y_{i-1} + O(h^6)$$

$$y_{i+1} = \frac{(2 - \frac{5h^2}{6} f_i) y_i - (1 + \frac{h^2}{12} f_{i-1}) y_{i-1}}{(1 + \frac{h^2}{12} f_{i+1})} + O(h^6)$$

จะเห็นได้ว่าอนุกรมจะลู่เข้า(converge) ที่เทอมอันดับที่ 4 จึงตัดเทอม h^6 ทิ้ง เมื่อนำตัวแปรในสมการชเรอดิงเงอร์ เทียบกับสมการ (2.50) จะได้

$$\psi_{i+1} = \frac{(2 - \frac{5h^2}{6} k_i^2) \psi_i - (1 + \frac{h^2}{12} k_{i-1}^2) \psi_{i-1}}{(1 + \frac{h^2}{12} k_{i+1}^2)} \quad (2.51)$$

ในการคำนวณเชิงตัวเลข ให้ $x_0, x_1, x_2, \dots, x_i, x_{i+1}, x_{i+2}, \dots, x_n$ หมายถึงจุดต่าง ๆ ซึ่งมีค่าอยู่ระหว่าง $x = a$ ถึง $x = b$ ต้องกำหนดเงื่อนไขขอบเขต (Boundary condition) มาให้ ต้องทราบค่า ψ_i, ψ_{i-1} จึงจะหาค่า ψ_{i+1} ได้

2.3.2. การหารากสมการโดยวิธีแบ่งครึ่งช่วง (Bisection method)

การหาค่าพลังงานของอนุภาค E ในบ่อศักย์ ดังสมการ (2.34) ไม่สามารถใช้วิธีวิเคราะห์หาได้โดยตรง การตรวจสอบผลลัพธ์ที่คำนวณได้จากการจำลองสถานการณ์ จึงต้องใช้วิธีการหารากสมการโดยวิธีแบ่งครึ่งช่วงหาผลลัพธ์เปรียบเทียบ จากสมการ (2.34)

$$2a\sqrt{2(V_0 - E)} = (n-1)\pi + 2 \tan^{-1} \sqrt{\frac{E}{V_0 - E}}$$

เมื่อ $2a$ คือความกว้างของบ่อศักย์ V_0 คือความลึกของบ่อศักย์ซึ่งกำหนดมาให้ จัดรูปสมการใหม่ดังนี้

$$f(E) = 2a\sqrt{2(V_0 - E)} - (n-1)\pi - 2 \tan^{-1} \sqrt{\frac{E}{V_0 - E}}$$

ถ้า E เป็นรากสมการ เมื่อแทนค่าลงไปในสมการแล้วจะทำให้ $f(E) = 0$

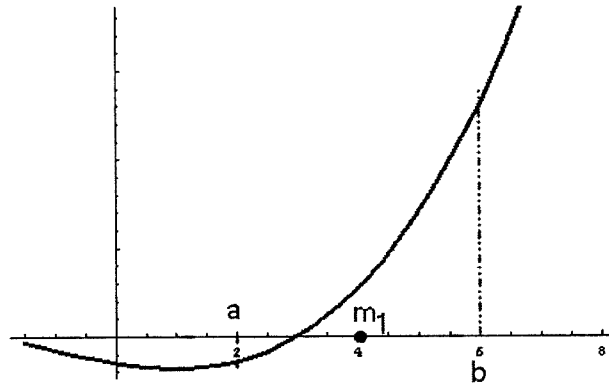
การหารากสมการโดยวิธีแบ่งครึ่งช่วง เริ่มต้น ด้วยการระบุช่วงตัวเลขที่ต้องการหารากสมการขึ้นมาก่อน สมมติว่าอยู่ในช่วง a ถึง b โดยที่ค่า b มีค่ามากกว่า a เขียนเป็นสัญลักษณ์ได้เป็น $[a, b]$ a คือ ขีดจำกัดล่าง b คือ ขีดจำกัดบน ค่าฟังก์ชัน $f(x)$ ในช่วง $[a, b]$ นี้ต้องมีค่าต่อเนื่อง

เมื่อนำ a และ b แทนค่าลงในฟังก์ชันแล้ว ผลคูณของค่าฟังก์ชันจะต้องมีค่าเป็นลบ ($f(a) \cdot f(b) < 0$)

ขั้นตอนการหารากสมการมีดังนี้

ขั้นที่ 1 เลือกค่า a และ b โดยการสุ่มแต่ต้องทำให้ $f(a) \cdot f(b)$ น้อยกว่า ศูนย์ หรือเส้นกราฟมีจุดตัดบนแกน x

ขั้นที่ 2 หาค่ารากสมการโดยประมาณโดยแบ่งครึ่งช่วง ระหว่าง a กับ b ให้จุดที่แบ่งครึ่ง (ครั้งที่ 1) นี้คือ m_1 (m คือ midpoint) $m_1 = (a + b)/2$ ดังรูป 2.6



รูปที่ 2.6 การแบ่งครึ่งช่วงครั้งที่ 1

ขั้นที่ 3 ขณะนี้ช่วง a และ b จะถูกแบ่งเป็น 2 ช่วง โดยมี m_1 เป็นจุดแบ่งครึ่ง ตรวจสอบดูว่า รากสมการที่แท้จริงอยู่ช่วงใด

ก. ถ้า $f(a) \cdot f(m_1) < 0$ แสดงว่ารากสมการอยู่ในช่วง $[a, m_1]$

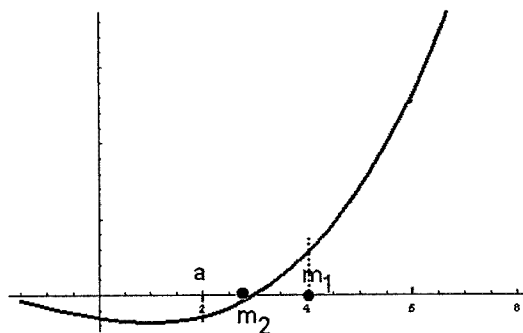
ข. ถ้า $f(m_1) \cdot f(b) < 0$ แสดงว่ารากสมการอยู่ในช่วง $[m_1, b]$

ค. ถ้า $f(a) \cdot f(m_1) = 0$ หรือน้อยกว่าความคลาดเคลื่อนที่ยอมรับได้แสดงว่า m_1 คือรากสมการและสิ้นสุดการคำนวณ

ขั้นที่ 4 ถ้า m_1 ยังไม่ใช่รากสมการที่ต้องการ ให้แบ่งครึ่งช่วงอีก (ย้อนกลับไปขั้นที่ 2) จากรูปที่

2.7

$$m_2 = (a + m_1)/2$$



รูปที่ 2.7 การแบ่งครึ่งช่วงในขั้นตอนที่ 2

กระทำซ้ำเช่นนี้เรื่อย ๆ จนถึง k ครั้ง เมื่อได้ $f(m_{k-1}) \cdot f(m_k)$ เท่ากับศูนย์หรือน้อยกว่าความคลาดเคลื่อนที่กำหนดแล้ว ค่า m_k นี้คือรากสมการที่ต้องการ

การแบ่งครึ่งช่วงแต่ละครั้ง จะทำให้ความกว้างของช่วงตัวเลขแคบลงเรื่อย ๆ แต่ละครั้งจุด m_k จะเป็นค่าประมาณของรากสมการ การกระทำซ้ำจะสิ้นสุดลงเมื่อ m_k อยู่ในช่วงความคลาดเคลื่อนที่ยอมรับได้ (given tolerance)

เพื่อป้องกันความผิดพลาดที่ไม่คาดคิดเกิดขึ้น ทำให้โปรแกรมทำงานวนรอบไม่สิ้นสุด จึงกำหนดจำนวนรอบสูงสุดของการกระทำซ้ำไว้ด้วย รายละเอียดของโปรแกรมที่ใช้คำนวณหารากสมการโดยวิธีแบ่งครึ่งช่วง ได้แสดงไว้ในภาคผนวก 3

2.3.3 การหาปริพันธ์โดยใช้วิธีแบ่งเป็นสี่เหลี่ยมคางหมู (Trapezoidal rule)

การหาปริพันธ์ใช้ในการ normalize ฟังก์ชันคลื่น ตามสมการ (2.5) ในที่นี้เลือกใช้วิธีแบ่งพื้นที่ใต้เส้นโค้งให้เป็นรูปสี่เหลี่ยมคางหมูเล็ก ๆ เป็นจำนวนมาก แล้วรวมพื้นที่เล็ก ๆ ของสี่เหลี่ยมคางหมูเหล่านี้จะได้เป็นผลลัพธ์ของการหาปริพันธ์ในช่วงที่ต้องการ

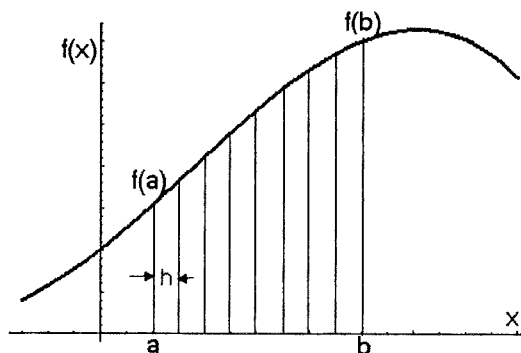
การหาปริพันธ์ของฟังก์ชัน $f(x)$ ที่มีค่าต่อเนื่องในช่วง a, b โดยที่ $a \leq x \leq b$ เขียนเป็นสัญลักษณ์ $\int_a^b f(x)dx$ มีค่าเท่ากับพื้นที่ใต้เส้นโค้งของ $f(x)$ ในช่วงดังกล่าว

การหาพื้นที่ใต้เส้นโค้ง ทำได้โดยแบ่งพื้นที่ออกเป็นรูปเหลี่ยมเล็ก ๆ จำนวนมาก (เรียกรูปเหลี่ยมเล็ก ๆ นี้ว่า quadrilaterals หรือ numerical quadrature) จากนั้นรวมพื้นที่เล็ก ๆ เหล่านี้เข้าด้วยกัน กลายเป็นพื้นที่ส่วนที่แรเงาทั้งหมด

เขียนเป็นสมการได้ดังนี้

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=1}^N f(x_i) \omega_i$$

เมื่อ N คือจำนวนเส้นที่แบ่งพื้นที่ใต้โค้งจากรูป $N = 9$ จะแบ่งพื้นที่ออกเป็น 8 ส่วนเล็ก ๆ ω_i คือค่าน้ำหนัก (weight) ของ $f(x)$ ของแต่ละค่า i



รูปที่ 2.8 แสดงการแบ่งพื้นที่ในช่วง $x=a$ ถึง $x=b$ เป็นสี่เหลี่ยมคางหมูเล็ก ๆ

แบ่งพื้นที่ใต้โค้งในช่วง a ถึง b ออกเป็นช่องเล็ก (interval) กว้างช่องละ h แต่ละช่องลากเส้นตรงเชื่อมจุดบนเส้นโค้งจะเกิดเป็นสี่เหลี่ยมคางหมูเป็นจำนวนมาก รวมสี่เหลี่ยมคางหมูเล็ก ๆ เหล่านี้ทั้งหมดจะได้เป็นค่าประมาณของการหาปริพันธ์ของ $f(x)$ ในช่วง a ถึง b ยิ่งแบ่งช่วงระยะ h ให้มีค่าน้อยเท่าใดเส้นตรงที่ลากเชื่อมจุดต่าง ๆ บนเส้นโค้งจะทับกับเส้นกราฟของฟังก์ชันที่แท้จริงมากขึ้นเพียงนั้น

ที่จุด x_i ใด ๆ สามารถหาค่าโดยวัดจาก a เป็นหลัก

$$x_i = a + (i-1)h \quad \text{เมื่อ } i = 1, 2, \dots, N$$

เมื่อแทน $x_i = b$ โดยที่ $i = N$ จะได้

$$h = \frac{b-a}{N-1}$$

พื้นที่สี่เหลี่ยมคางหมูแต่ละส่วนเล็ก ๆ

$$\begin{aligned} \int_{x_i}^{x_{i+h}} f(x) dx &\cong \frac{1}{2} \times \text{ฐาน} \times (\text{ผลบวกด้านคู่ขนาน}) \\ &= \frac{1}{2} h (f(x_i) + f(x_{i+1})) \end{aligned}$$

พื้นที่ทั้งหมดใต้เส้นโค้งในช่วง $[a, b]$ คือ

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &\cong \frac{h}{2} f(x_1) + hf(x_2) + hf(x_3) + \dots + hf(x_{N-1}) + \frac{h}{2} f(x_N) \\ &= \left(\sum_{i=1}^n f(x_i) - \frac{f(x_1)}{2} - \frac{f(x_n)}{2} \right) h \end{aligned}$$

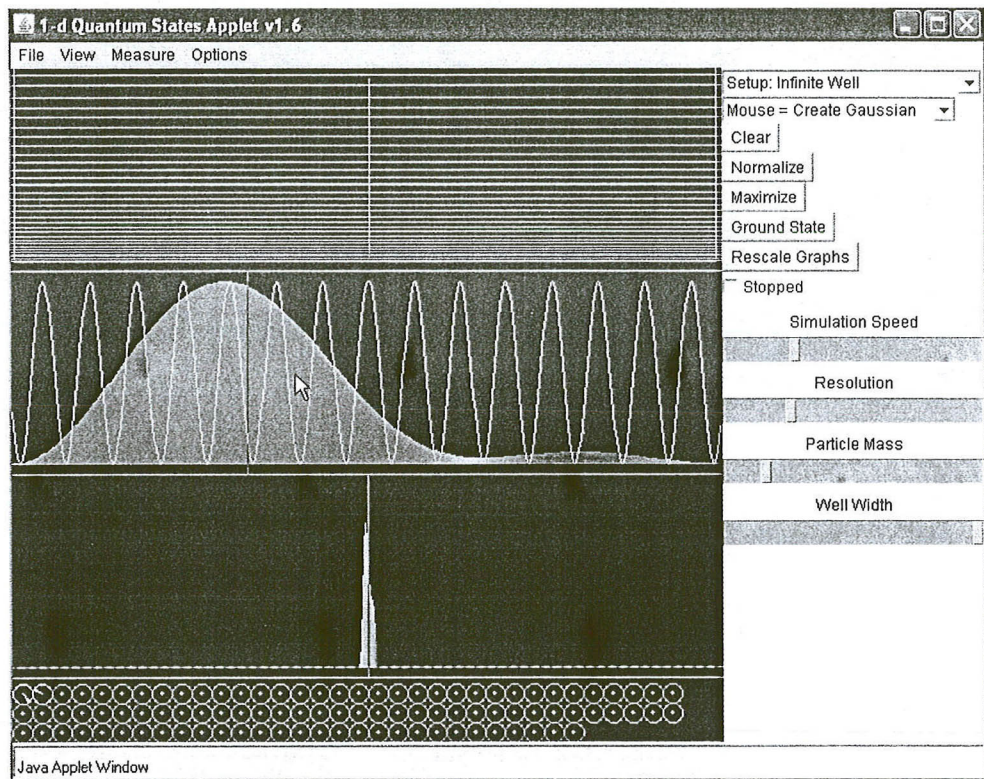
จุด x_i ที่ไม่ใช่เป็นจุดปลายจะถูกนับ 2 ครั้ง จากสมการจะเห็นว่าค่าน้ำหนัก (w_i) ที่ x_i ใด ๆ คือ

$$w_i = \left\{ \frac{h}{2}, h, \dots, h, \frac{h}{2} \right\}, \quad i=1, N$$

2.4 งานวิจัยหรือโปรแกรมเกี่ยวกับการจำลองสถานการณ์ในกลศาสตร์ควอนตัม

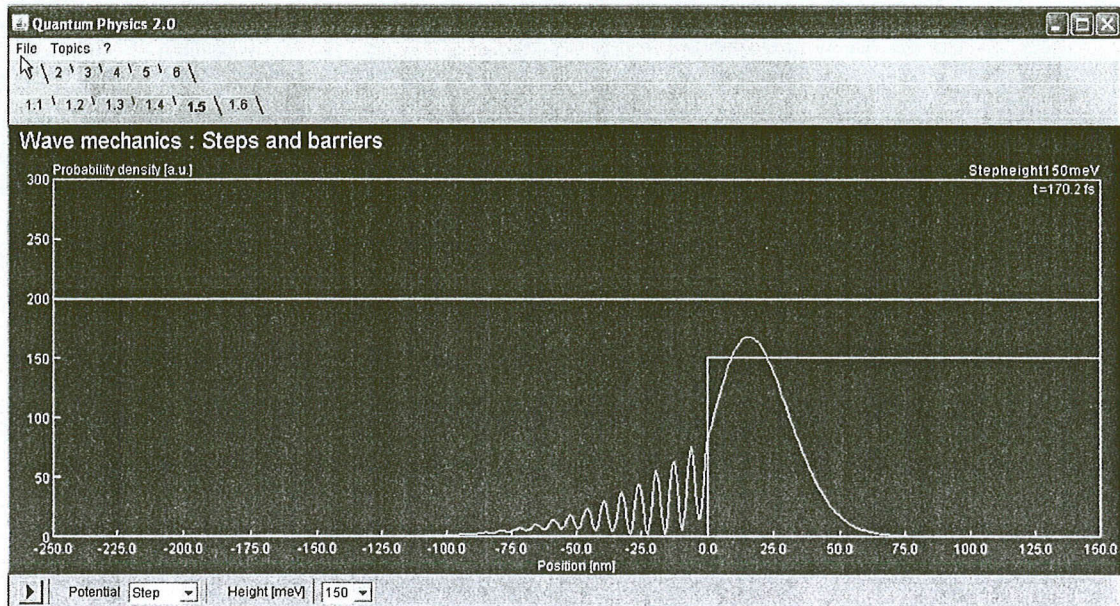
การจำลองสถานการณ์ในกลศาสตร์ควอนตัม ได้มีผู้จัดทำและเผยแพร่ ผลงานที่น่าสนใจมีดังนี้

Falstad, Paul ได้สร้างโปรแกรมแสดงการเคลื่อนที่ของอนุภาคแบบ 1 มิติ ในบ่อศักย์แบบสี่เหลี่ยม แสดงผลในรูปของ applet สามารถเข้าถึงได้จาก <http://www.falstad.com/>



รูปที่ 2.9 แสดงการจำลองอนุภาคในบ่อศักย์แบบสี่เหลี่ยม

Joffre, M. Basdevant, J. และ Dalibard, J. ภาควิชาฟิสิกส์ สถาบัน Ecole Polytechnique ประเทศฝรั่งเศส เข้าถึงโดย <http://www.quantum-physics.polytechnique.fr/> ได้สร้างโปรแกรมจำลองการแพร่ของ Gaussian wave packet เมื่อคลื่นกระทบกับกำแพงศักย์ และศักย์ที่มีค่าเป็นขั้น โดยใช้ค่าเริ่มต้นได้มาจากการทดลองให้อิเล็กตรอนเคลื่อนที่ในสารกึ่งตัวนำ GaAs กำหนดพลังงานจลน์ของอิเล็กตรอนมีค่าเริ่มต้นที่ 200 eV เมื่อกำหนดให้กำแพงศักย์มีค่าสูงกว่าพลังงานของอิเล็กตรอนมาก ๆ จะเห็นการสะท้อนของคลื่นได้อย่างชัดเจน ตรงกับคำทำนายของกลศาสตร์คลาสสิก และเกิดปรากฏการณ์แทรกสอดระหว่างคลื่นตกกระทบกับคลื่นสะท้อนให้เห็นด้วย มีคลื่นบางส่วนที่สามารถส่งผ่านไปยังกำแพงศักย์ ซึ่งจะมีความเร็วลดลงมาก เนื่องจากพลังงานจลน์ของอิเล็กตรอนลดค่าลง เป็นการแสดงเหตุการณ์การเกิด Tunnel effect



รูปที่ 2.10 แสดงสมบัติความเป็นคลื่นของอนุภาค

Raedt H. ศูนย์ฟิสิกส์ทฤษฎีและวัสดุศาสตร์ (Theoretical Physics and Materials Science Centre) ของมหาวิทยาลัย Groningen เว็บไซต์ <http://rugth30.phys.rug.nl/quantummechanics/> ได้สร้างบทเรียนวิชากลศาสตร์ควอนตัม จำลองสถานการณ์ต่าง ๆ ในบทเรียน เช่น การเคลื่อนที่ของอนุภาคอย่างอิสระ การเคลื่อนที่ของอนุภาคในสนามของแรง บางส่วนเขียนด้วยภาษา FORTRAN บางส่วนเขียนด้วย FLASH จากนั้นจับภาพเคลื่อนไหวเหล่านั้นแปลงเป็น video file แสดงภาพเคลื่อนไหวโดยใช้โปรแกรม real player

Open Source Physics หรือ OSP มีเว็บไซต์อยู่ที่ <http://www.compadre.org/osp/> เป็นโครงการที่ได้รับการสนับสนุนจาก National Science Foundation and วิทยาลัยเดวิดสัน (Davidson College) เน้นการศึกษาฟิสิกส์โดยใช้คอมพิวเตอร์เข้ามามีส่วนช่วยในการเรียนการสอน ได้จัดทำคลังโปรแกรมที่เปิดเผยโปรแกรมต้นฉบับ (open source code libraries) เกี่ยวกับการคำนวณเชิงตัวเลข โปรแกรมจำลองปรากฏการณ์ทางฟิสิกส์ด้านต่าง ๆ จัดทำเครื่องมือที่ช่วยทำให้การเขียนโปรแกรมคอมพิวเตอร์สำหรับเรียนรู้บทเรียนทางฟิสิกส์ได้ง่ายขึ้นเรียกว่า Ejs หรือ Easy java simulation มีทำบทเรียนชุดสำเร็จสำหรับฟิสิกส์ขั้นสูง ในชุดบทเรียนประกอบด้วยหนังสือประกอบการเรียน โปรแกรมคอมพิวเตอร์ที่เกี่ยวข้องกับเรื่องนั้น ๆ และใบงานที่ใช้ในบทเรียน บทเรียนบางเรื่องสามารถศึกษาและดาวน์โหลดได้ผ่านทางเว็บไซต์

โปรแกรมทั้งหมดเขียนเป็นภาษาจาวามีการเปิดเผยรายละเอียดของ source code ทั้งหมดสามารถนำไปพัฒนาต่อยอด หรือดัดแปลงแก้ไขใช้ร่วมกับโปรแกรมที่กำลังพัฒนา

The screenshot shows the Open Source Physics (OSP) website interface. The browser address bar displays the URL: <http://www.compadre.org/osp/document/ServeFile.cfm?ID=7209&DocID=375>. The page features a navigation menu on the left with categories like SIMULATIONS, EJS MODELING, CURRICULUM, PROGRAMMING, TOOLS, BROWSE MATERIALS, RELATED SITES, DISCUSSION, and ABOUT OSP. The main content area is titled "Classical Model of Helium" and includes a simulation window with a plot of two electrons moving in a potential well. The plot shows two electrons (represented by dots) and their braided orbits. The axes are labeled X and Y, ranging from -4 to 4. The simulation window has buttons for "File", "Display", "Tools", and "Help". Below the plot are buttons for "Next", "Previous", "Home", and "Clear". The right side of the page contains text describing the simulation: "body problem and is similar to gravitational... of two electrons moving in a $2/r$ potential well... set to show phenomena such as autoionization or... a OSP collection for classical helium." The footer includes the text "brought to you by the AAPT and NSF-NSDI" and "a member of the comPADRE Digital Library".

รูปที่ 2.11 เว็บไซต์ของ Open source physics