บทที่ 6
กลศาสตร์ควอนตัมเบื้องต้น

วัตถุประสงค์

หลังจากศึกษาบทที่ 6 แล้ว นักศึกษาสามารถ

1) เขียนสมการคลื่นโชว์ดิงเจอร์แบบขึ้นกับเวลาและไม่ขึ้นกับเวลา ทั้งในกรณี 1 มิติ และ 3 มิติได้
2) บรรยายคุณสมบัติของฟังก์ชันคลื่นได้
3) พิสูจน์สมการ 6.13 ได้
4) อธิบายวิธีการหาฟังก์ชันคลื่นและพลังงานของอนุภาคในกล่อง 1 มิติได้
5) ทำแบบฝึกหัดได้อย่างน้อย 6 ข้อ

จากบทที่ 3 เราได้ศึกษาสมมติฐานคลื่นสสารของเดอบรอยล์ ซึ่งได้รับการสนับสนุนจากการทดลองของดาวิสสันและเจอร์เมอร์เป็นอย่างดี แต่ว่ายังไม่มีสมการคลื่นของคลื่นอนุภาคนั้นเลย โชร์ดิงเจอร์ (Schroedinger) ได้อาศัยแนวคิดคลื่นสสารของเดอบรอยล์ และเป็นผู้เสนอสมการคลื่นของคลื่นอนุภาคขึ้นมา เรียกว่าสมการคลื่นโชร์ดิงเจอร์ นับเป็นจุดเริ่มต้นของกลศาสตร์คลื่น (wave mechanics) หรือกลศาสตร์ควอนตัม (quantum mechanics) และต่อมาได้มีการพัฒนาโดยนักฟิสิกส์หลายท่าน เช่น ไฮเซนเบอร์ก บอร์น และดิแรก เป็นต้น

6.1 สมการคลื่นโชร์ดิงเจอร์

ที่มาของสมการคลื่นโชร์ดิงเจอร์ซึ่งไม่ใช่เป็นการพิสูจน์อาจทำได้ดังนี้ พิจารณาคลื่นที่มีสมการเป็น

$$\Psi(x,t) = Ae^{i(kx - \omega t)} \tag{6.1}$$

เมื่อ A = อัมปลิจูดของคลื่นความถี่เชิงมุม $\omega = 2\pi\nu$ และเลขคลื่น (wave number) $k = 2\pi/\lambda$ แทนค่า ω และ k ในเทอมของพลังงาน E และโมเมนตัม p ของอนุภาค จะได้

$$E = h\nu = \frac{h}{2\pi} . 2\pi\nu = \hbar\omega$$

$$p = \frac{h}{1} = \frac{h}{2\pi} .\frac{2\pi}{\lambda} = \hbar k$$

ดิฟเฟอเรนชิเอตสมการ (6.1) เทียบกับ x จะได้

$$\frac{\partial\Psi}{\partial x} = ik\Psi$$

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = -k^2\Psi$$

หรือ
$$-\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = k^2\Psi \tag{6.2}$$

ดิฟเฟอเรนชิเอตสมการ (6.1) เทียบกับ t จะได้

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -i\omega\Psi$$

หรือ $\frac{i\partial\Psi}{\partial t} = \omega\Psi$

สำหรับอนุภาคความเร็วต่ำเทียบกับ c

พลังงานจลน์ + พลังงานศักย์ = พลังงานทั้งหมด

$$\frac{p^2}{2m} + V \qquad = E$$

คูณทั้งสองข้างด้วย Ψ

$$\frac{p^2}{2m}\Psi + V\Psi \qquad = E\Psi$$

แทนค่า $E = \hbar\omega$ และ $p = \hbar k$ ลงในสมการข้างต้น

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m}\Psi + V\Psi \qquad = \qquad \hbar\omega\Psi$$

แทน $k^2\Psi$ และ $\omega\Psi$ จากสมการ (6.2) และ (6.3) ลงในสมการข้างต้น จะได้

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t) + V\,\Psi(x,t) \quad = \quad i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}(x,t)} \tag{6.4}$$

สมการ (6.4) คือสมการคลื่นโชร์ดิงเจอร์ใน 1 มิติที่ขึ้นกับเวลา (time dependent Schroedinger wave equation)

ในทำนองเดียวกัน กรณี 3 มิติ จะได้สมการคลื่นโชร์ดิงเจอร์ที่ขึ้นกับเวลาคือ

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\Psi(x,y,z,t) + V\Psi(x,y,z,t) = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}(x,y,z,t)} \tag{6.5}$$

6.2 ความหมายของฟังก์ชันคลื่น

สำหรับกลศาสตร์นิวตัน การอธิบายการเคลื่อนที่ของอนุภาค หมายถึงต้องระบุสถานะการเคลื่อนที่ของอนุภาคด้วยตำแหน่งและโมเมนตัมที่เวลาใด ๆ ได้ แต่ในกลศาสตร์ควอนตัมเราไม่ทราบค่าที่แน่นอนของตำแหน่งและโมเมนตัมพร้อม ๆ กันได้ (ตามหลักความไม่แน่นอนของไฮเซนเบอร์ก) ดังนั้นการอธิบายระบบใด ๆ ในกลศาสตร์ควอนตัม (กรณีกลศาสตร์คลื่น) หมายถึงการหาฟังก์ชันคลื่นของระบบนั้น จากการแก้สมการโชร์ดิงเจอร์ และฟังก์ชันคลื่นที่ได้นี้เป็นคลื่นที่คล้องจองกับอนุภาค ในปี ค.ศ. 1926 บอร์น (Born) ได้เสนอว่าฟังก์ชันคลื่น $\Psi(x,y,z,t)$ เป็นปริมาณที่ผลคูณ $|\Psi(x,y,z,t)|^2 dv$ ใช้บอกโอกาสที่จะพบอนุภาคในบริเวณ dv ที่เวลา t เมื่ออนุภาคอยู่ในสถานะที่แสดงด้วยฟังก์ชันคลื่น $\Psi(x,y,z,t)$ (คล้ายกับกรณีของคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าที่ความเข้มเป็นปฏิภาคโดยตรงกับอัมปลิจูดกำลังสอง)

ฟังก์ชันคลื่นอาจเป็นค่าบวกหรือค่าลบ ค่าจริงหรือค่าเชิงซ้อนก็ได้ แต่ปริมาณ $\Psi^*\Psi = |\Psi|^2$ ต้องเป็นค่าจริงที่เป็นบวกเสมอ

Ψ^* คือค่าคอนจุเกตเชิงซ้อน (complex conjugate) ของ Ψ หาได้ด้วยการเปลี่ยนเครื่องหมายหน้า i ของฟังก์ชันคลื่นเป็นตรงกันข้าม

เช่น $\Psi = a + ib$

$$\Psi^* = (a + ib)^* = a - ib$$

และ $\Psi^*\Psi = (a \quad ib)(a + ib)$

$$= a^2 + b^2 \qquad (\text{เมื่อ } i^2 = -1)$$

หรือ $\Psi = Ae^{-i(kx - \omega t)}$ เมื่อ A เป็นค่าจริง

$$\Psi^* = Ae^{i(kx \quad \omega t)}$$

$$\Psi^*\Psi = A^2$$

กรณีหนึ่งมิติ ปริมาณ $\Psi^*(x,t)\ \Psi(x,t)dx = |\Psi(x,t)|^2 dx$ คือปริมาณที่ใช้บอกโอกาสที่จะพบอนุภาคในบริเวณ dx ที่เวลา t

$\Psi^*(x,t)\ \Psi(x,t) = |\Psi(x,t)|^2$ คือปริมาณที่ใช้บอกโอกาสที่จะพบอนุภาค ณ ตำแหน่ง x และ เวลา t บางครั้งเรียกว่าความหนาแน่นของโอกาส (probability density) โอกาสที่จะพบอนุภาคอยู่ระหว่างช่วงจำกัด x_1 และ x_2 หาได้โดยการรวมโอกาส ซึ่งแสดงด้วยเครื่องหมายอินทีกรัล ดังนี้

$$\text{โอกาสที่จะพบอนุภาคอยู่ระหว่าง } x_1 \text{ และ } x_2 = \int_{x_1}^{x_2} |\Psi(x,t)|^2 dx$$

เนื่องจากโอกาสที่จะพบอนุภาคที่ตำแหน่งใด ๆ ในอวกาศมีค่าเป็นหนึ่ง กล่าวคือ

$$\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,t)|^2 dx = 1} \qquad (6.6)$$

เราอาจเลือกค่าใด ๆ คูณกับฟังก์ชันคลื่น แล้วทำให้โอกาสทั้งหมดที่จะพบอนุภาคเท่ากับหนึ่งได้ เรียกค่าคงที่นี้ว่า ค่าคงที่ของความปกติ (normalization constant) และเรียกฟังก์ชันคลื่นที่

มีสภาพเช่นนี้ (ฟังก์ชันคลื่นที่เป็นไปตามสมการ 6.6) ว่า พังก์ชันคลื่นปกติ (normalized wave function) ฟังก์ชันคลื่นใด ๆ สามารถทำเป็นฟังก์ชันคลื่นปกติได้เช่นในกรณีที่

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi (x, t)|^2 dx = N \tag{6.7}$$

ฟังก์ชันคลื่น $\Psi(x,t)$ ในสมการ (6.7) ไม่ใช่ฟังก์ชันคลื่นปกติ แต่ทำเป็นฟังก์ชันคลื่นปกติได้โดยคูณด้วยค่าคงที่ ดังนี้

$$\Psi'(x,t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \Psi(x,t)$$

โดยที่ฟังก์ชันคลื่น $\Psi'(x,t)$ นี้ เป็นไปตามสมการ (6.6)

6.3 สมการของโชร์ดิงเจอร์แบบไม่ขึ้นกับเวลา

สมการโชร์ดิงเจอร์ (6.5) เป็นสมการเชิงอนุพันธ์ย่อย สำหรับ Ψ ซึ่งเป็นฟังก์ชันของตำแหน่งและเวลา เนื่องจากระบบต่าง ๆ ในทางฟิสิกส์ ส่วนใหญ่แล้วพลังงานศักย์ V ของระบบไม่เป็นฟังก์ชันของเวลาอย่างชัดแจ้ง ดังนั้นเราสามารถแก้สมการโชร์ดิงเจอร์ (6.5) ได้ง่ายขึ้นโดยใช้วิธีการแยกตัวแปร กล่าวคือแยกฟังก์ชันคลื่นออกเป็นผลคูณของสองฟังก์ชัน ฟังก์ชันหนึ่งขึ้นกับตำแหน่งอย่างเดียว และอีกฟังก์ชันหนึ่งขึ้นกับเวลาอย่างเดียว ดังนี้

$$\Psi(x,y,z,t) = \psi(x,y,z)\, T(t) \tag{6.8}$$

แทนค่า $\Psi(x,y,z,t)$ ลงในสมการ (6.5)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} T(t)\, \nabla^2 \psi(x,y,z) + V(x,y,z)\, \psi(x,y,z)\, T(t) = i\hbar\, \psi(x,y,z) \frac{dT}{dt}(t)$$

หารสมการข้างต้นตลอดด้วย $\psi(x,y,z)\, T(t)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi(x,y,z)} \nabla^2 \psi(x,y,z) + V(x,y,z) = i\hbar \frac{1}{T(t)} \frac{dT(t)}{dt} \tag{6.9}$$

ทางซ้ายมือของสมการ (6.9) เป็นฟังก์ชันของตำแหน่งอย่างเดียว และทางขวามือเป็นฟังก์ชันของเวลาอย่างเดียว แต่ทั้งสองข้างเท่ากัน แสดงว่าแต่ละข้างของสมการ (6.9) ต้องเท่ากับค่าคงที่เท่านั้น นั่นคือ

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(x,y,z) + V(x,y,z)\, \psi(x,y,z) = C\, \psi(x,y,z) \tag{6.10}$$

และ

$$i\hbar \frac{dT}{dt} = C T(t) \tag{6.11}$$

จากสมการ (6.11) ได้

$$\frac{dT(t)}{T(t)} = \frac{C}{i\hbar}dt = -\frac{iC}{\hbar}dt$$

$$\int\frac{dT(t)}{T(t)} = -\int\frac{iC}{\hbar}dt$$

$$\ln T(t) = \frac{-iCt}{\hbar}$$

$$\boxed{T(t) = e^{-iCt/\hbar}} \qquad (6.12)$$

เนื่องจาก $e^{-iCt/\hbar} = \cos(Ct/\hbar) - i\sin(Ct/\hbar)$

ดังนั้น $\frac{C}{\hbar} = \omega = 2\pi\nu = \frac{2\pi E}{h} = \frac{E}{\hbar}$

ได้ C คือ E พลังงานรวมของระบบนั่นเอง แทนค่าลงในสมการ (6.10) และ (6.12) จะได้

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(x,y,z) + V(x,y,z)\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z)} \qquad (6.13)$$

และ $T(t) = e^{-iEt/\hbar}$ (6.14)

ดังนั้น $\boxed{\Psi(x,y,z,t) = \psi(x,y,z)e^{-iEt/\hbar}}$ (6.15)

สมการ (6.13) คือสมการโชร์ดิงเจอร์ที่ไม่ขึ้นกับเวลา (time independent Schroedinger wave equation)

สรุป ในกรณีที่พลังงานศักย์ V ของระบบเป็นฟังก์ชันของตำแหน่งอย่างเดียว เราสามารถเขียนฟังก์ชันคลื่น $\Psi(x,y,z,t) = \psi(x,y,z)e^{-iEt/\hbar}$ โดยที่ $\psi(x,y,z)$ เป็นคำตอบของสมการ (6.13)

6.4 คุณสมบัติของฟังก์ชันคลื่น

ฟังก์ชันคลื่นที่ได้จากการแก้สมการโชร์ดิงเจอร์ ทุกคำตอบไม่จำเป็นต้องเป็นฟังก์ชันคลื่นที่ใช้แทนอนุภาคได้ อย่างไรก็ตามฟังก์ชันคลื่นที่ใช้แทนอนุภาคได้นั้น ต้องมีคุณสมบัติต่าง ๆ ดังนี้

1. ค่า Ψ และอนุพันธ์ของมัน (เช่น $\frac{\partial\Psi}{\partial x}$) ต้องมีค่าต่อเนื่อง (continuous) ทุกแห่ง
2. ค่า Ψ ต้องมีค่าที่แน่นอน (finite) คือทำให้ $\int|\Psi(x,t)|^2\,dx$ มีค่าที่แน่นอน
3. ค่า Ψ ที่ตำแหน่งหนึ่ง ๆ ต้องมีค่าเดียว (single valued)

คุณสมบัติของฟังก์ชันคลื่นที่มีความสำคัญมากอีกประการหนึ่งคือการเกิดการแทรกสอด ซึ่งเป็นปรากฏการณ์ที่แสดงคุณสมบัติเชิงคลื่นของอนุภาค ถ้าให้ Ψ_A เป็นฟังก์ชันคลื่นที่อธิบายสถานะที่เป็นไปได้สถานะหนึ่งของระบบ และ Ψ_B เป็นฟังก์ชันคลื่นที่อธิบายสถานะที่เป็นไปได้อีกสถานะหนึ่งของระบบ ดังนั้นจะมีฟังก์ชั่นคลื่น Ψ โดยที่

$$\Psi = a\Psi_A + b\Psi_B \tag{6.16}$$

เมื่อ a และ b เป็นค่าคงที่ที่เหมาะสม และ Ψ นี้จะเป็นฟังก์ชันคลื่นที่อธิบายสถานะที่เป็นไปได้ของระบบด้วย จะเห็นว่า Ψ เกิดจากการรวมกันระหว่าง Ψ_A และ Ψ_B เมื่อขยายแนวความคิดนี้ออกไปจะได้ว่า การรวมกันของฟังก์ชันคลื่นต่าง ๆ ชุดหนึ่งที่แทนสถานะที่เป็นไปได้ของระบบจะได้ฟังก์ชันคลื่นที่แทนสถานะของระบบนั้นด้วย กฎที่กล่าวมานี้ เรียกว่า หลักแห่งการรวมกัน (principle of supperposition)

6.5 ตัวดำเนินการสำหรับปริมาณที่สังเกตได้

ถึงแม้ฟังก์ชันคลื่นจะประกอบด้วยข้อมูลต่าง ๆ เกี่ยวกับอนุภาคในระบบที่เรากำลังศึกษา แต่ฟังก์ชันคลื่นไม่สามารถสังเกตได้โดยตรง ปัญหาที่เกิดขึ้นคือฟังก์ชันคลื่นมีความสัมพันธ์กับปริมาณที่สังเกตได้อย่างไร ในกลศาสตร์ควอนตัมจะมีตัวดำเนินการที่คล้องจองกับปริมาณที่สังเกตได้ทุก ๆ ตัว โดยที่ตัวดำเนินการเหล่านี้มีคุณสมบัติเป็นตัวดำเนินการเชิงเส้น (linear operator) และเป็นตัวดำเนินการเฮอร์มิเทียน (hermitian operator) เมื่อตัวดำเนินการนี้กระทำ (operate) ต่อฟังก์ชันคลื่นแล้วจะให้ปริมาณที่สังเกตได้ (หรือปริมาณที่วัดได้) คูณกับฟังก์ชันคลื่นเดิม เช่น ถ้า A เป็นตัวดำเนินการที่คล้องจองกับปริมาณที่สังเกตได้ a จะได้

$$A\Psi = a\Psi \tag{6.17}$$

ตาราง 6.1 แสดงตัวดำเนินการในกลศาสตร์ควอนตัมที่คล้องจองกับปริมาณที่สังเกตได้ต่าง ๆ กันของกลศาสตร์ยุคเก่า ค่าในตารางนี้สามารถหาตัวดำเนินการอื่น ๆ ได้

ตาราง 6.1 ตัวดำเนินการกลศาสตร์ควอนตัม

ปริมาณในกลศาสตร์ยุคเก่า		ตัวดำเนินการกลศาสตร์ควอนตัม
ตำแหน่ง	x, y, z	x, y, z
โมเมนตัม	p	$p = -i\hbar\nabla = -i\hbar\,\mathrm{grad}$
องค์ประกอบ	x, p_x	$p_x = -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x} = \dfrac{\hbar}{i}\dfrac{\partial}{\partial x}$

ปริมาณในกลศาสตร์ยุคเก่า	ตัวดำเนินการกลศาสตร์ควอนตัม
องค์ประกอบ y, p_y	$p_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}$
องค์ประกอบ z, p_z	$p_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z}$
พลังงาน E	$E = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} = \frac{-\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}$

สมการ (6.17) เรียกว่า สมการค่าไอแกน (eigenvalue equation) ฟังก์ชันคลื่นในสมการนี้เรียกว่าฟังก์ชันไอแกน (eigenfunction) และปริมาณ a เรียกว่า ค่าไอแกน (eigenvalue) พิจารณาสมการโชร์ดิงเจอร์แบบไม่ขึ้นกับเวลา (กรณีหนึ่งมิติ)

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

สมการข้างต้นเขียนใหม่ได้ดังนี้

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]\psi(x) = E\psi(x)$$

$$\text{ให้ } H_{op} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)$$

ดังนั้นสมการโชร์ดิงเจอร์แบบไม่ขึ้นกับเวลาเขียนได้ง่าย ๆ ดังนี้

$$\boxed{H_{op}\psi(x) = E\psi(x)} \qquad (6.18)$$

$$\text{เมื่อ} \quad H_{op} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V = \frac{p^2_{op}}{2m} + V$$

และเนื่องจาก $\frac{p^2}{2m} + V$ คือฟังก์ชันแฮมิลโทเนียน ดังนั้น H_{op} จึงเรียกว่าตัวดำเนินการแฮมิลโทเนียน ซึ่งเป็นตัวดำเนินการของพลังงานอีกรูปแบบหนึ่งนอกเหนือจากที่กล่าวไว้ในตาราง 6.1

ปัญหาส่วนใหญ่ในกลศาสตร์ควอนตัมเราจะหาทั้งฟังก์ชันไอเกน ψ และค่าไอเกน (E) จากสมการ (6.18) ของระบบต่าง ๆ เมื่อเราทราบตัวดำเนินการแฮมิลโทเนียนของระบบนั้น ๆ

6.6 ค่าเฉลี่ยหรือค่าคาดหมาย

ในการทดลองวัดปริมาณที่สังเกตเห็นได้ เช่นการวัดตำแหน่งของอนุภาค เมื่อทำการวัดซ้ำแล้วซ้ำอีกเพื่อจะวัดตำแหน่งขณะใดขณะหนึ่ง ผลที่ได้จะต่างกัน กล่าวคือ จะมีความไม่

แน่นอนเกี่ยวกับการวัด ดังนั้นต้องใช้ค่าเฉลี่ยของการวัดหลาย ๆ ครั้ง สำหรับในกลศาสตร์ควอนตัมได้ให้ความสัมพันธ์สำหรับการหาค่าเฉลี่ยของการวัดหลาย ๆ ครั้งดังนี้ ค่าเฉลี่ยหรือค่าคาดหมาย (expectation value) ของปริมาณที่สังเกตเห็นได้ a ที่คล้องจองกับตัวดำเนินการ A ของระบบทางฟิสิกส์ในสถานะ Ψ กำหนดโดย (กรณีหนึ่งมิติ)

$$\boxed{\langle a\rangle = \frac{\int \Psi^* A \Psi dx}{\int \Psi^* \Psi dx}} \tag{6.19}$$

ถ้า Ψ เป็นฟังก์ชันคลื่นปกติ จะได้

$$\langle a\rangle = \int \Psi^* A \Psi dx \tag{6.20}$$

สำหรับค่าคาดหมายของปริมาณทางฟิสิกส์ต่าง ๆ สามารถหาได้โดยใช้หลักการเช่นเดียวกับสมการ (6.20) เช่น

ค่าคาดหมายของตำแหน่ง

$$\langle x\rangle = \int \Psi^* x_{op} \Psi dx = \int \Psi^* x \Psi dx$$

ค่าคาดหมายของโมเมนตัมในแนวแกน x

$$\langle p_x\rangle = \int \Psi^* p_{x\,op} \Psi dx = \int \Psi^* \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right) \Psi dx$$

และค่าคาดหมายของพลังงาน

$$\langle E\rangle = \int \Psi^* E_{op} \Psi\, dx = \int \Psi^* \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right) \Psi dx$$

หรืออาจเขียนได้อีกกรณีหนึ่งคือ

$$\langle E\rangle = \int \Psi^* E_{op} \Psi dx = \int \Psi^* H_{op} \Psi dx$$

เมื่อ H_{op} คือตัวดำเนินการแฮมิลโทเนียน

ตัวอย่าง กำหนดฟังก์ชันคลื่นปกติ

$$\Psi(x, t) = A \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) e^{-iE_0 t/\hbar} \qquad 0 \leq x \leq a$$

เมื่อ E_0 และ A เป็นค่าคงที่

ก) จงหาค่าคงที่ A

ข) จงหาค่าคาดหมายของ x และของ E

ก) เนื่องจาก $\Psi(x, t)$ ที่กำหนดให้เป็นฟังก์ชันคลื่นปกติ ดังนั้น

$$\int \Psi^*(x, t)\, \Psi(x, t)\, dx = 1 \qquad 0 \leqslant x \leqslant a$$

$$\Psi(x, t) = A \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) e^{-iE_o t/\hbar}$$

$$\Psi^*(x, t) = A^* \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) e^{iE_o t/\hbar}$$

แทนค่า Ψ และ Ψ^* ลงในสมการข้างต้น จะได้

$$\int_0^a |A|^2 \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx = 1$$

$$|A|^2 \int_0^a \frac{1}{2}\left[1 - \cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\right] dx = 1$$

$$\frac{|A|^2}{2}\left[x - \left(\frac{a}{2\pi}\right) \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\right]_0^a = 1$$

$$|A|^2 = \frac{2}{a}$$

$$|A| = \left(\frac{2}{a}\right)^{1/2}$$

ข) ค่าคาดหมายของ x คือ

$$<x> = \int \Psi^* x\, \Psi\, dx$$

$$= \int_0^a \left(\frac{2}{a}\right) x \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx$$

$$= \frac{2}{a}\int_0^a \frac{x}{2}\left(1 - \cos\frac{2\pi x}{a}\right) dx$$

$$= \frac{1}{a}\left[\frac{x^2}{2} - \frac{ax}{2\pi} \sin\frac{2\pi x}{a} - \left(\frac{a}{2\pi}\right)^2 \cos\frac{2\pi x}{a}\right]_0^a$$

$$= \frac{a}{2}$$

ค่าคาดหมายของ E คือ

$$<E> = \int \Psi^* E_{op}\, \Psi\, dx$$

$$= \int_0^a \left(\frac{2}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) e^{iE_o t/\hbar} \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right) \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) e^{-iE_o t/\hbar}\, dx$$

$$= \frac{2}{a}\int_0^a \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) e^{iE_0 t/\hbar}\, i\hbar\left(\frac{-iE_0}{\hbar}\right) e^{-iE_0 t/\hbar}\, dx$$

$$= \frac{2}{a}\int_0^a E_0 \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx$$

$$= \frac{2}{a} E_0 \frac{a}{2}$$

$$= E_0$$

ตอนต่อไปเราจะแสดงการใช้กลศาสตร์ควอนตัมศึกษาระบบต่าง ๆ โดยการหาคำตอบ $\Psi(x, t)$ ของสมการโชร์ดิงเจอร์ เมื่อพลังงานศักย์ V ของระบบมีรูปร่างต่าง ๆ กัน เพื่อความง่ายจะพิจารณาในกรณีหนึ่งมิติ

6.7 อนุภาคอิสระ

พิจารณากรณีที่ง่ายที่สุด คือ $V(x, t)$ = ค่าคงที่ สำหรับอนุภาคที่เคลื่อนที่ภายใต้พลังงานศักย์เช่นนี้จะไม่มีแรงภายนอกมากระทำ (เพราะว่า $F(x, t) = -\partial V(x, t)/\partial x$) กล่าวคือเป็นอนุภาคอิสระ เพื่อความสะดวกจะเลือกค่า $V(x, t) = 0$ ในกลศาสตร์ยุคเก่า อนุภาคอิสระอาจหยุดนิ่งหรือเคลื่อนที่ด้วยโมเมนตัมที่คงที่ โดยมีพลังงานรวม E เป็นค่าคงที่

ในกลศาสตร์ควอนตัมเราต้องหาคำตอบจากสมการคลื่นโชว์ดิงเจอร์ กรณี $V(x, t) = 0$ เนื่องจากพลังงานศักย์นี้ไม่เป็นฟังก์ชันของ t เราจึงใช้สมการคลื่นโชร์ดิงเจอร์ที่ไม่ขึ้นกับเวลาได้ นั่นคือ

เวลาได้ นั่นคือ

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

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) = 0$$

อนุภาคอิสระมีพลังงาน $E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ (6.21)

แทนค่า E ลงในสมการ (6.21) จะได้

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + k^2\psi(x) = 0 \qquad (6.22)$$

คำตอบของสมการ (6.22) จะหาค่าได้สำหรับค่า E ใด ๆ ที่มากกว่าหรือเท่ากับศูนย์ ($E \geqslant 0$) และจะได้คำตอบ คือ

$$\boxed{\psi(x) = e^{\pm ikx}}$$

เมื่อ $\psi(x) = e^{+ikx}$ แทนอนุภาคอิสระโมเมนตัม p เคลื่อนที่ไปในทิศ +x

และ $\psi(x) = e^{-ikx}$ แทนอนุภาคอิสระโมเมนตัม p เคลื่อนที่ไปในทิศ -x

ฟังก์ชันคลื่นของอนุภาคอิสระ คือ

$$\Psi(x,t) = e^{-iEt/\hbar}\,\psi(x)$$

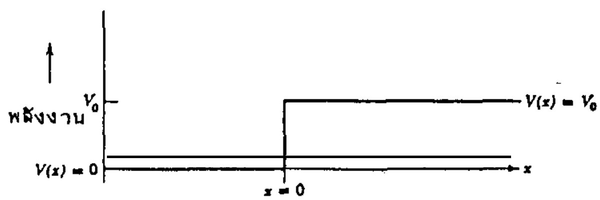
พิจารณาโอกาสที่จะพบอนุภาค

$$|\Psi(x,t)|^2 = \Psi^*(x,t)\,\Psi(x,t)$$
$$= 1$$

แสดงว่าโอกาสที่จะพบอนุภาคมีค่าเท่ากันทุกแห่ง ทำให้ไม่สามารถบอกได้ว่าอนุภาคอยู่ที่ใด ซึ่งสอดคล้องกับหลักความไม่แน่นอนของไฮเซนเบอร์ก เนื่องจาก $\psi(x) = e^{\pm ikx}$ แทนอนุภาคอิสระที่มีโมเมนตัมที่แน่นอน ดังนั้นความไม่แน่นอนของโมเมนตัม $\Delta p = 0$ ทำให้ได้ $\Delta x \rightarrow \infty$

6.8 ศักย์เป็นขั้น

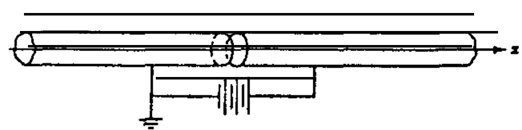
เราจะหาฟังก์ชันคลื่น $\psi(x)$ สำหรับอนุภาคที่เคลื่อนที่ผ่านพลังงานศักย์ รูปร่างเป็นขั้น ดังรูป 6.1



รูป 6.1 ศักย์เป็นขั้น

$$V(x) = V_0 \qquad x \geqslant 0$$
$$= 0 \qquad x < 0$$

ระบบในฟิสิกส์ที่ประมาณได้ว่ามีลักษณะคล้ายกับระบบของศักย์เป็นขั้นคือ ระบบของอนุภาคที่มีประจุเคลื่อนที่ไปตามแกนของอิเลกโทรด (electrod) 2 อัน และอิเลกโทรดทั้งสองนี้มีความต่างศักย์ไฟฟ้า ดังรูป 6.2



รูป 6.2 ระบบทางฟิสิกส์ที่ประมาณได้ว่าคือศักย์เป็นขั้น

ในปัญหานี้แบ่งการพิจารณาเป็น 2 กรณี คือ

ก. $E < V_0$

ข. $E > V_0$

กรณี $E < V_0$

ให้อนุภาคเคลื่อนที่มาจากทางซ้ายมืออย่างเดียว เมื่ออนุภาคมีพลังงาน E น้อยกว่า V_0 ฟิสิกส์ยุคเก่าทำนายว่า อนุภาคจะผ่านไปทางขวามือไม่ได้ กล่าวคืออนุภาคจะสะท้อนกลับหมด

ในกลศาสตร์ควอนตัม เราจะหาฟังก์ชันคลื่น $\psi(x)$ จากสมการโชร์ดิงเจอร์ที่ไม่ขึ้นกับเวลา เนื่องจาก V เป็นฟังก์ชันของตำแหน่งอย่างเดียว ไม่เป็นฟังก์ชันของเวลา คือ

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + V(x) = E\psi(x) \qquad (6.23)$$

(1) ในบริเวณ $x<0$, $V=0$ สมการโชร์ดิงเจอร์คือ

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + V(x) = E\psi(x) \qquad (6.23)$$

หรือ $$\frac{d^2}{dx^2}\psi_1(x) + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi_1(x) = 0$$

ให้ $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ ดังนั้นสมการข้างต้นเขียนได้เป็น

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi_1(x) + k^2\psi_1(x) = 0$$

คำตอบของสมการนี้ คือ

$$\psi_1(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \qquad (6.24)$$

A และ B เป็นค่าคงที่

Ae^{ikx} แทนอนุภาคที่เคลื่อนที่ไปในทิศ $+x$ (คลื่นตกกระทบ)
Be^{-ikx} แทนอนุภาคที่เคลื่อนที่ไปในทิศ $-x$ (คลื่นสะท้อน)

(2) ในบริเวณ $x>0$, $V = V_0$ สมการโชร์ดิงเจอร์คือ

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi_2(x) + V_0\psi_2(x) = E\psi_2(x)$$

หรือ $$\frac{d^2}{dx^2}\psi_2(x) - \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\Psi_2(x) = 0$$

ให้ $\alpha^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}$ แทนค่าลงในสมการข้างต้น จะได้

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi_2(x) - \alpha^2\psi_2(x) = 0$$

คำตอบของสมการนี้ คือ

$$\psi_2(x) = Ce^{-\alpha x} + De^{\alpha x}$$

เนื่องจากเทอม $e^{\alpha x}$ ทำให้ฟังก์ชันคลื่น $\psi_2(x)$ มีค่ามาก เมื่อ $x \to +\infty$ ซึ่งไม่ตรงกับความจริง เพราะเมื่อตกกระทบศักย์ V_0 ที่กีดขวาง โอกาสที่อนุภาคจะผ่านเข้ามาต้องน้อยลง จึงตัดเทอมนี้ทิ้งไป ดังนั้น

$$\psi_2(x) = Ce^{-\alpha x} \tag{6.25}$$

ความหนาแน่นของโอกาสที่จะพบอนุภาคในช่วง $x>0$ คือ $|\psi_2(x)|^2 = |C|^2 e^{-2\alpha x}$ ถึงแม้ค่านี้จะลดลงอย่างรวดเร็วเมื่อ x มีค่ามากขึ้น อย่างไรก็ตามแสดงว่ามีโอกาสที่จะพบอนุภาคในช่วงนี้ กล่าวคือมีคลื่นของอนุภาคผ่านเข้าไปยังช่วงนี้ได้ ซึ่งตามกลศาสตร์ยุคเก่าอนุภาคจะผ่านเข้าไปในช่วงนี้ไม่ได้

ค่า A, B และ C หาได้โดยใช้เงื่อนไขที่ว่าฟังก์ชันคลื่นและอนุพันธ์ของมัน ต้องมีค่าต่อเนื่องที่รอยต่อขอบเขต เงื่อนไขนี้เรียกว่า เงื่อนไขขอบเขต (boundary condition) ในกรณีนี้จะได้ว่า

$$\psi_1(0) = \psi_2(0), \tag{6.26}$$

และ $$\frac{d\psi_1}{dx}\Big|_{x=0} = \frac{d\psi_2}{dx}\Big|_{x=0} \tag{6.27}$$

จากสมการ (6.26) เราได้

$$A + B = C \tag{6.28}$$

และจากสมการ (6.27) ได้

$$ik(A - B) = -\alpha C \tag{6.29}$$

หาค่า B และ C ในเทอมของ A จากสมการ (6.28) และ (6.29) จะได้

$$B = \frac{(ik + \alpha)}{(ik - \alpha)} A \tag{6.30}$$

และ $$C = \frac{2ik}{(ik - \alpha)} A \tag{6.31}$$

นั่นคือ

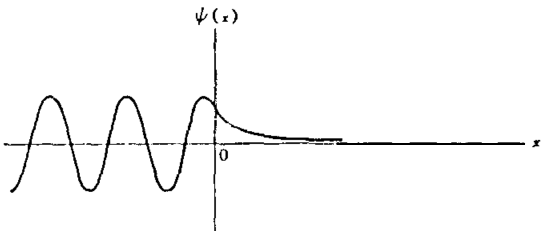
$$\boxed{\begin{aligned} \Psi(x) &= A\left[e^{ikx} + \left(\frac{ik + \alpha}{ik - \alpha}\right)e^{-ikx}\right] & x \leqslant 0 \\ &= \frac{2ik}{ik - \alpha} Ae^{-\alpha x} & x \geqslant 0 \end{aligned}}$$

เนื่องจากเราให้อนุภาคเคลื่อนที่มาจากทางซ้ายมือแต่เพียงอย่างเดียว ดังนั้น A ในสมการ (6.24) แทนอัมปลิจูดของคลื่นที่คล้องจองกับอนุภาคตกกระทบ B เป็นอัมปลิจูดของคลื่นสะท้อนซึ่งมีการสะท้อนที่ศักย์ไม่ต่อเนื่อง คือที่จุด $x=0$, C เป็นอัมปลิจูดของคลื่นที่ผ่านเข้าไปในช่วงที่ 2 จากสมการ (6.24) จะได้ว่าความเข้มของคลื่นของอนุภาคที่ตกกระทบคือ $(A^*e^{-ikx})(Ae^{ikx}) = |A|^2$ และความเข้มของคลื่นที่สะท้อนกลับคือ $(B^*e^{ikx})(Be^{-ikx}) = |B|^2$ จากสมการ (6.30) จะได้

$$|B|^2 = \left[\left(\frac{ik+\alpha}{ik-\alpha}\right)A\right]\left[\left(\frac{-ik+\alpha}{-ik-\alpha}\right)A^*\right]$$

$$= |A|^2$$

แสดงว่าความเข้มของคลื่นตกกระทบและคลื่นสะท้อนกลับเท่ากัน หมายความว่าเมื่ออนุภาคที่มี $E<V_0$ มาถึงศักย์เป็นขั้น อนุภาคจะสะท้อนกลับรวมทั้งพวกที่ผ่านเข้าไปในช่วงที่ 2 เพียงเล็กน้อยด้วย



รูป 6.3 ฟังก์ชันไอเกนของศักย์เป็นคาบในกรณี $E<V_0$

กรณี $E>V_0$

เมื่ออนุภาคมีพลังงาน $E>V_0$ ฟิสิกส์ยุคเก่า คาดคะเนว่าอนุภาคทั้งหมดจะเคลื่อนที่เข้าไปในช่วง $x>0$ แต่จะเคลื่อนที่ด้วยความเร็วช้าลงกว่าเดิม

(1) ในบริเวณ $x<0$ $V=0$ คำตอบในช่วงนี้เหมือนกับของกรณี $E<V_0$ ที่กล่าวมาแล้ว คือ

$$\psi_1(x) = A\,e^{ik_1x} + B\,e^{-ik_1x} \tag{6.32}$$

(2) ในบริเวณ $x>0$, $V=V_0$ สมการโชร์ดิงเจอร์คือ

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi_2(x) + V_0\psi_2(x) = E\ W,(x)$$

หรือ $$\frac{d^2}{dx^2}W,(X) + \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}\psi_2(x) = 0$$

ให้ $(k')^2 = \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}$

ดังนั้น $\frac{d^2}{dx^2}\psi_2(x) + (k')^2\psi_2(x) = 0$

คำตอบของสมการข้างต้น คือ

$$\psi_2(x) = C\, e^{ik'x} \qquad (6.33)$$

เนื่องจากเราให้อนุภาคเคลื่อนที่ มาจากทางซ้ายมืออย่างเดียว
ใช้เงื่อนไขขอบเขต ที่ $x=0$ คือสมการ (6.26) และ (6.27) จะได้

$$A+B = C \qquad (6.34)$$

และ $$k(A-B) = k'C \qquad (6.35)$$

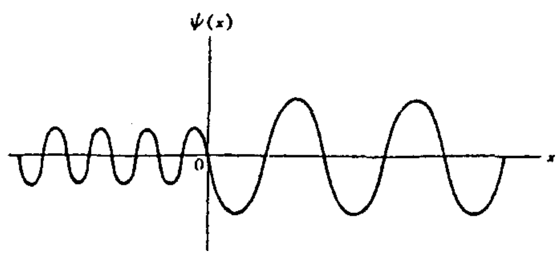
จากสมการ (6.34) และ (6.35) หาค่า B และ C ในเทอมของ A จะได้

$$B = \frac{(k-k')}{(k+k')}A \qquad (6.36)$$

$$C = \frac{2k}{k+k'}A \qquad (6.37)$$

ดังนั้น

$$\boxed{\begin{aligned}\Psi(x) &= A\left[e^{ikx} + \left(\frac{k-k'}{k+k'}\right)e^{-ikx}\right] & x \leqslant 0\\ &= \frac{2k}{k+k'}A\,e^{ik'x} & x \geqslant 0\end{aligned}}$$



รูป 6.4 ฟังก์ชันไอเกนของศักย์เป็นขั้นกรณีที่ $E > V_0$

ให้ v และ v' เป็นความเร็วของอนุภาคในบริเวณ $x<0$ และบริเวณ $x>0$ ตามลำดับ ดังนั้น

$$v = \frac{p}{m} = \frac{\hbar k}{m} \qquad (6.38)$$

และ $$v' = \frac{\hbar k'}{m} \qquad (6.39)$$

เนื่องจากความเข้มของคลื่นตกกระทบคือ $|A|^2$ ความเข้มของคลื่นสะท้อนคือ $|B|^2$ และความเข้มของคลื่นที่ผ่านเข้าไป คือ $|C|^2$ จะได้ฟลักซ์ (flux) ของคลื่นตกกระทบเป็น $v\,|A|^2$ ฟลักซ์ของคลื่นสะท้อนเป็น $v\,|B|^2$ และฟลักซ์ของคลื่นที่ผ่านเข้าไปเป็น $v'|C|^2$ กำหนด

$$\text{สัมประสิทธิ์การสะท้อน (Reflection coefficient) } R = \frac{\text{ฟลักซ์ของคลื่นสะท้อน}}{\text{ฟลักซ์ของคลื่นตกกระทบ}}$$

$$= \frac{v|B|^2}{v|A|^2}$$

จากสมการ (6.36) จะได้

$$\boxed{R = \left(\frac{k-k'}{k+k'}\right)^2} \tag{6.40}$$

สัมประสิทธิ์การผ่านเข้าไป (transmission coefficient)

$$T = \frac{\text{ฟลักซ์ของคลื่นที่ผ่านเข้าไป}}{\text{ฟลักซ์ของคลื่นตกกระทบ}}$$

$$= \frac{v'\,|C|^2}{v\,|A|^2}$$

แทนค่า C,v และ v' จากสมการ (6.37),(6.38) และ (6.39) ลงในสมการข้างต้น จะได้

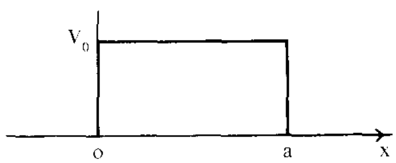
$$T = \frac{k'}{k}\left(\frac{2k}{k+k'}\right)^2$$

$$\boxed{T = \frac{4kk'}{(k+k')^2}} \tag{6.41}$$

ตามกลศาสตร์ยุคเก่า R ควรเท่ากับศูนย์และ T ควรเท่ากับหนึ่ง แต่ตามกลศาสตร์ควอนตัมได้แสดงให้เห็นข้างต้นแล้วว่า R ไม่เท่ากับศูนย์ และ T ไม่เท่ากับหนึ่ง แต่ $R+T = 1$

6.9 กำแพงของศักย์ที่จำกัด

ปัญหาที่น่าสนใจอีกกรณีหนึ่งคือกรณีที่อนุภาคเคลื่อนที่ผ่านกำแพงของศักย์ พิจารณากำแพงของศักย์ ที่มีความสูง V_0 ดังรูป



รูป 6.5 แสดงกำแพงของศักย์ที่จำกัด

$$V(x) = 0 \qquad x < 0 \,;\, x > a$$
$$= V_0 \qquad 0 < x < a$$

แบ่งการพิจารณาออกเป็น 2 กรณี คือ กรณี $E < V_0$ และ $E > V_0$

ก) กรณี $E < V_0$

ให้อนุภาคเคลื่อนที่มาจากทางซ้ายมือ เมื่ออนุภาคมีพลังงาน E น้อยกว่า V_0 ฟิสิกส์ยุคเก่า คาดคะเนว่า อนุภาคเหล่านี้จะสะท้อนกลับหมดที่ $x = 0$ ในกลศาสตร์ควอนตัม ใช้วิธีการคล้ายคลึงกับที่ทำในศักย์เป็นขั้น แบ่งบริเวณออกเป็น 3 ช่วงดังนี้

บริเวณที่ I เมื่อ $x < 0 \;\; V = 0$

สมการโชร์ดิงเจอร์ที่ไม่ขึ้นกับเวลา คือ

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi_1(x) = E\,\psi_1(x)$$

ได้
$$\psi_1(x) = A\,e^{ikx} + B\,e^{-ikx} \tag{6.42}$$

เมื่อ
$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

บริเวณที่ II $\quad 0 < x < a \quad V = V_0$

สมการโชร์ดิงเจอร์ที่ไม่ขึ้นกับเวลา คือ

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi_2(x) + V_0\,W,(x) = E\,W,(x)$$

หรือ $\frac{d^2}{dx^2}u/,(x) - \frac{2m\,(V_0 - E)}{\hbar^2}\psi_2(x) = 0$

ให้
$$\alpha^2 = \frac{2m\,(V_0 - E)}{\hbar^2}$$

ได้
$$\psi_2(x) = C\,e^{\alpha x} + D\,e^{-\alpha x} \tag{6.43}$$

บริเวณที่ III $\quad x > a \quad V = 0$

สมการโชร์ดิงเจอร์ที่ไม่ขึ้นกับเวลา คือ

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi_3(x) = E\,W,(x)$$

ได้
$$V,(x) = F\,e^{ikx} \tag{6.44}$$

ในกรณีนี้มีรอยต่อขอบเขตสองแห่ง คือ ที่ $x = 0$ และที่ $x = a$ ดังนั้นจะได้เงื่อนไขขอบเขตสี่สมการคือ

$$\psi_1(0) = \psi_2(0)$$

$$\frac{d\psi_1}{dx}\bigg|_{x=0} = \frac{d\psi_2}{dx}\bigg|_{x=0}$$

$$\psi_2(a) = \psi_3(a)$$

$$\frac{d\psi_2}{dx}\bigg|_{x=a} = \frac{d\psi_3}{dx}\bigg|_{x=a}$$

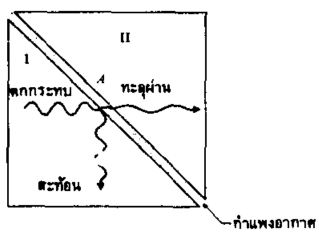
จากสมการข้างต้นเหล่านี้สามารถคำนวณหา B, C, D และ F ในเทอมของ A ได้ ปัญหาที่น่าสนใจคือ *การหาสัมประสิทธิ์การผ่านเข้าไป* (T) เนื่องจาก

$$T = \frac{\text{ฟลักซ์ของคลื่นที่ผ่านเข้าไปในบริเวณที่ III}}{\text{ฟลักซ์ของคลื่นตกกระทบ}}$$

$$= \frac{v|F|^2}{v|A|^2}$$

$$\boxed{T = \frac{|F|^2}{|A|^2}}$$

สมการข้างต้นแสดงว่า $T \neq 0$ หมายความว่าอนุภาคมวล m ที่มีพลังงาน E เมื่อตกกระทบกำแพงของศักย์ที่จำกัดสูง V_0 และกว้าง a โดยที่ $V_0 > E$ อนุภาคนี้มีโอกาส T ในการทะลุผ่านกำแพงของศักย์ที่จำกัดและไปปรากฏอีกด้านหนึ่งได้ ปรากฏการณ์นี้เรียกว่า การทะลุผ่านกำแพง (barrier penetration) ปรากฏการณ์นี้ ใช้อธิบายการสลายตัวของอนุภาคอัลฟาได้ผลดีมาก เพราะก่อนหน้านี้มีปัญหาว่าอนุภาคอัลฟาแผ่ออกมาจากนิวเคลียสของสารกัมมันตรังสีได้อย่างไร โดยที่อนุภาคอัลฟาที่พบนั้น มีพลังงานประมาณ 4-5 MeV เท่านั้น แต่ศักย์ที่นิวเคลียส (คือ V_0) มีค่าประมาณ 20 MeV ปัญหานี้กลศาสตร์ยุคเก่าอธิบายไม่ได้ ต้องอธิบายโดยใช้กลศาสตร์ควอนตัม



รูป 6.6 แสดงปรากฏการณ์การทะลุผ่านของกำแพงเชิงทัศนศาสตร์

การทะลุผ่านกำแพงโดยคลื่นสสารคล้ายคลึงกับการทะลุผ่านกำแพงในวิชาทัศน-ศาสตร์ กล่าวคือ สมมติว่าลำของแสงตกกระทบบนปริซึม I ดังรูป 6.6 ถ้ามุมตกกระทบมากกว่ามุมวิกฤต (critical angle) ควรจะเกิดการสะท้อนกลับหมด ถ้านำปริซึมแก้วอีกอันหนึ่ง (ปริซึม II) วางดังรูป 6.6 จะมีคลื่นผ่านเข้าไปในปริซึม II ได้ ในกรณีนี้อากาศระหว่างปริซึมทั้งสองคือกำแพง ความเข้มของคลื่นผ่านเข้าไปขึ้นกับความหนาของกำแพงอากาศ

ข) กรณี $E > V_0$

กลศาสตร์ยุคเก่าคาดคะเนว่า อนุภาคจะข้ามกำแพงของศักย์ไปยังบริเวณที่ III ทั้งหมด แต่ในกลศาสตร์ควอนตัม พบว่า อนุภาคบางตัวจะสะท้อนที่ $x = 0$ และ $x = a$ ด้วย รายละเอียดในการคำนวณคล้ายคลึงกับกรณีศักย์เป็นขั้น จะได้ฟังก์ชันคลื่นในบริเวณทั้งสามดังนี้

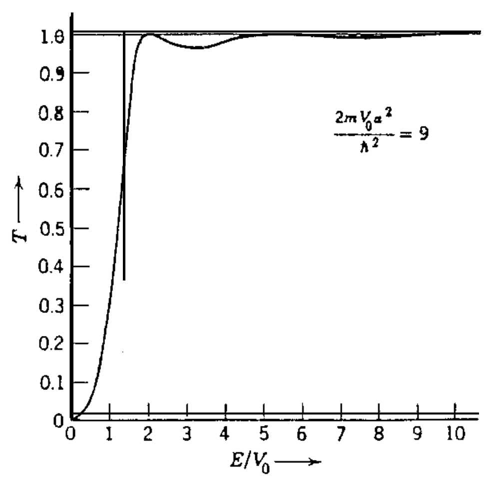
$$\psi_1(x) = A\, e^{ikx} + B\, e^{-ikx} \qquad x < 0$$

$$\psi_2(x) = C\, e^{ik'x} + D\, e^{-ik'x} \qquad 0 < x < a$$

$$\psi_3(x) = F\, e^{ikx} \qquad x > a$$

เมื่อ $k^2 = \dfrac{2mE}{\hbar^2}$ และ $(k')^2 = \dfrac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}$

โดยการใช้เงื่อนไขขอบเขตที่ $x = 0$ และ $x = a$ จะหาค่า B, C, D และ F ในเทอมของ A ได้ และได้ค่า $T = |F|^2/|A|^2$

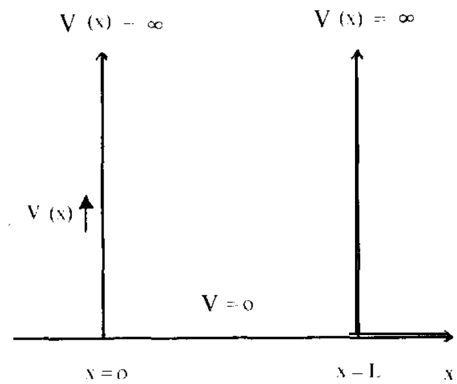


รูป 6.7 แสดงสัมประสิทธิ์การผ่านเข้าไปสำหรับกำแพงศักย์

ในกรณี $E > V_0$ จะได้ $T = 1$ หมายถึงอนุภาคผ่านเข้าไปหมด เมื่อความยาวคลื่นในช่วงนี้เป็นจำนวนเต็มของ 2a ซึ่งเป็นปรากฏการณ์อภินาท (resonance effect)

6.10 อนุภาคในกล่อง

พิจารณาอนุภาคเคลื่อนที่ไปมาอย่างอิสระในกล่องซึ่งกว้าง L ให้ผนังกล่องอยู่ที่ $x=0$ และ $x=L$ เมื่ออนุภาควิ่งชนผนังกล่องมันจะสะท้อนกลับทันทีโดยไม่เสียพลังงาน ในลักษณะเช่นนี้เป็นการจำกัดการเคลื่อนที่ของอนุภาคมวล m ตามแนวแกน x ระหว่าง $x=0$ ถึง $x=L$ ดังแสดงในรูป



รูป 6.8 แสดงพลังงานศักย์ของอนุภาคในกล่อง 1 มิติ

$$V(x) = 0 \qquad 0 < X < L$$
$$= \infty \qquad X \leqslant 0 \text{ และ } X \geqslant L$$

เราจะหาพลังงานของอนุภาคว่ามีค่าเท่าใดได้บ้าง และฟังก์ชันคลื่นที่ใช้แทนอนุภาคเขียนได้อย่างไร เนื่องจากพลังงานศักย์ (V) ของปัญหานี้ไม่เป็นฟังก์ชันของเวลาแต่เป็นฟังก์-ชันของตำแหน่งเท่านั้น ดังนั้นเราใช้สมการโชร์ดิงเจอร์ที่ไม่ขึ้นกับเวลาได้ กล่าวคือ

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + V\psi(x) = E\,\psi(x) \tag{6.45}$$

ภายในกล่อง $V=0$ สมการโชร์ดิงเจอร์ของอนุภาคในกล่องเขียนได้เป็น

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

$$\text{หรือ} \quad \frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) = 0 \tag{6.46}$$

$$\text{ให้} \quad \psi(x) = e^{\beta x}$$

$$\text{และ} \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

แทนค่า ψ (x) และ k^2 ลงในสมการ (6.46) จะได้

$$\beta^2\psi(x) + k^2\psi(x) = 0$$

$$\beta = \pm ik$$

ดังนั้น $\psi(x) = Ce^{ikx} + De^{-ikx}$

$$= C(\cos kx + i\sin kx) + D(\cos kx - i\sin kx)$$

$$= (C + D)\cos kx + i(C-D)\sin kx$$

$$\psi(x) = B\cos kx + A\sin kx \qquad (6.47)$$

เมื่อ $B = C+D$ และ $A = i(C-D)$ โดยที่ A และ B เป็นค่าคงที่ใด ๆ

พิจารณาเงื่อนไขขอบเขตของอนุภาคในกล่อง เนื่องจากอนุภาคถูกจำกัดให้เคลื่อนที่อยู่ภายในกล่องเท่านั้น คือ $0 \leqslant x \leqslant L$ ดังนั้นโอกาสที่จะพบอนุภาคนอกกล่องมีค่าเท่ากับศูนย์ นั่นคือ $\psi^*\psi = 0$ ที่ $x \leqslant 0$ และ $x \geqslant L$ หมายความว่าฟังก์ชันคลื่นจะต้องเป็นศูนย์ที่ $x \leqslant 0$ และ $x \geqslant L$ คือ

$\psi(0) = 0$ และ $\psi(L) = 0$

แทนค่า $x = 0$ ในสมการ (6.40) จะได้

$$\psi(0) = B$$

$$0 = B$$

แทนค่า $B = 0$ ในสมการ (6.47)

$$\psi(x) = A\sin kx \qquad (6.48)$$

ในกรณีที่ $x = L$, $\psi(x) = 0$

นั่นคือ $A\sin kL = 0$

เนื่องจาก A ต้องไม่เป็นศูนย์ มิฉะนั้นจะไม่มีฟังก์ชันคลื่น จะได้

$$\sin kL = 0$$

แสดงว่า $kL = n\pi$ เมื่อ $n = 1, 2, 3,$

$$k = \frac{n\pi}{L}$$

ดังนั้น $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{n^2\pi^2}{L^2}$

$$E = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$$

ค่าพลังงานที่ระดับ n คือ $\boxed{E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2}}$ (6.49)

พลังงานต่ำสุดของระบบ $n = 1 \quad E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$

กรณี $n = 2 \quad E_2 = \frac{4\pi^2\hbar^2}{2mL^2} = 4E_1$

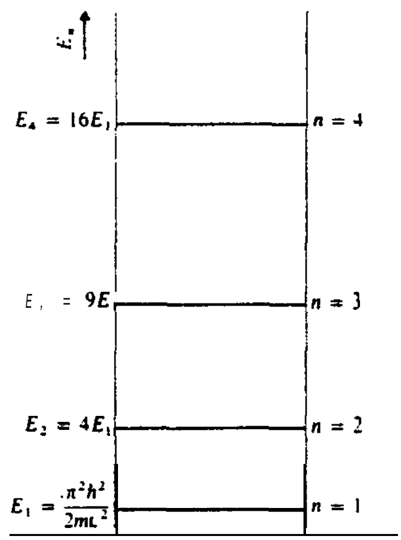
$n = 3 \quad E_3 = \frac{9\pi^2\hbar^2}{2mL^2} = 9E_1$

....

นั่นคือ พลังงานของสถานะอื่น ๆ สามารถเขียนในเทอมของ E_1 ได้ดังนี้

$$E_n = n^2E_1$$

อนุภาคจะมีพลังงานเป็นค่าต่าง ๆ กันไม่ต่อเนื่อง เรียกว่า พลังงานควอนไตซ์ ดังแสดงในรูป 6.9



รูป 6.9 แสดงระดับพลังงานของอนุภาคในกล่อง

สำหรับฟังก์ชันคลื่นของอนุภาค จากสมการ (6.48) กรณี n ใด ๆ จะได้

$$\psi_n(x) = A\sin k_nx = A\sin\frac{n\pi x}{L}$$

ที่ $n = 1 \quad \psi_1(x) = A\sin\frac{\pi x}{L}$

$n = 2 \quad \psi_2(x) = A\sin\frac{2\pi x}{L}$

เนื่องจาก $|\psi|^2$ dx คือโอกาสที่จะพบอนุภาคในบริเวณ dx ถ้า dx คือบริเวณ $0<x<L$ เราจะต้องพบอนุภาคแน่นอน ดังนั้น

$$\int \psi_n^* (x)\, \psi_n (n)\, dx = 1$$

$$|A|^2 \int_0^L \sin^2 \frac{n\pi x}{L}\, dx = 1$$

$$\frac{|A|^2}{2} \left[x - \frac{L}{2n\pi} \sin \frac{2n\pi x}{L} \right]_0^L = 1$$

$$|A|^2 \frac{L}{2} = 1$$

$$|A| = \left(\frac{2}{L}\right)^{1/2}$$

ดังนั้นฟังก์ชันคลื่นปกติของอนุภาคในกล่อง คือ

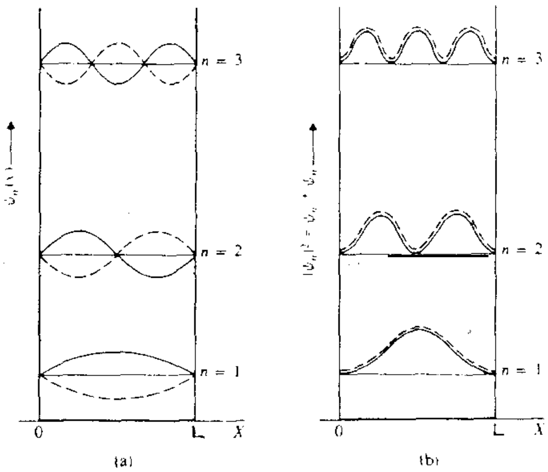
$$\psi_n (x) = \left(\frac{2}{L}\right)^{1/2} \sin \frac{n\pi x}{L}$$

ฟังก์ชันคลื่นปกติโดยทั่วไปของอนุภาคในกล่อง คือ

$$\Psi_n(x,t) = \psi_n (x)\, e^{-iE_n t/\hbar}$$

$$\boxed{\Psi_n (x, t) = \left(\frac{2}{L}\right)^{1/2} \sin \frac{n\pi x}{L}\, e^{-iE_n t/\hbar}} \qquad (6.50)$$

ค่า $\psi_n (x)$ และ $|\psi_n (x)|^2$ ที่ตำแหน่งต่าง ๆ กัน แสดงไว้ดังรูป 6.10



รูป 6.10 (ก) กราฟของ 3 ฟังก์ชันคลื่นแรกของอนุภาคในกล่อง

(ข) กราฟของโอกาสที่จะพบอนุภาคตามแกน x ภายในกล่องของ 3 สถานะแรก

จากรูปจะเห็นว่า โอกาสที่จะพบอนุภาคตามที่ต่าง ๆ ในกล่องเปลี่ยนไปเมื่ออนุภาคมีพลังงานเพิ่มขึ้น

6.11 ฮาร์โมนิกออสซิลเลเตอร์

การเคลื่อนที่แบบฮาร์โมนิกเกิดเมื่อระบบมีการสั่นรอบ ๆ จุดสมดุล ถ้าทำให้อนุภาคมวล m เคลื่อนที่ออกจากตำแหน่งสมดุลเป็นระยะ x_0 อนุภาคจะสั่นแบบไซน์รอบจุดสมดุลด้วยความถี่

$$\nu = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{m}}$$

เมื่อ k เป็นค่าคงที่

ในกลศาสตร์ยุคเก่าพลังงานรวม E ของอนุภาคจะเป็นสัดส่วนกับ x_0^2 และ E จะมีค่าเท่าใดก็ได้เพราะ x_0 มีค่าได้ทุกค่า ตามสมมติฐานของแพลงค์ที่ใช้ตัวสั่นฮาร์โมนิกเป็นต้นกำเนิดคลื่นที่แผ่จากวัตถุดำด้วยความถี่ต่าง ๆ โดยที่พลังงานของออสซิลเลเตอร์มีค่าเป็นค่า ๆ ขึ้นกับความถี่ที่แผ่ออกมา ($E = nh\nu = n\hbar\omega$) การใช้กลศาสตร์ควอนตัมศึกษาการเคลื่อนที่แบบฮาร์โมนิก เริ่มจากสมการโชร์ดิงเจอร์ที่ไม่ขึ้นกับเวลา (เนื่องจาก V เป็นฟังก์ชันของตำแหน่งอย่างเดียว ไม่เป็นฟังก์ชันของเวลา) ในหนึ่งมิติ

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \tag{6.51}$$

แทนค่า $V(x) = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$ ลงในสมการ (6.44) จะได้

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\psi(x) = E\psi(x)$$

หรือ $$\frac{d^2}{dx^2}u/(x) + \left[\frac{2mE}{\hbar^2} - \left(\frac{\omega m}{\hbar}\right)^2 x^2\right]W(X) = 0 \tag{6.52}$$

ให้ $$\alpha = \frac{\omega m}{\hbar}$$

$$\beta = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

แทนค่า α และ β ลงในสมการ (6.52) จะได้

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + (\beta - \alpha^2x^2)\psi = 0 \tag{6.53}$$

เพื่อความสะดวกจะเปลี่ยนตัวแปรใหม่ โดยให้

$$q = \sqrt{\alpha}\, x$$

$$\frac{d\psi}{dx} = \frac{d\psi}{dq}\frac{dq}{dx} = \sqrt{\alpha}\,\frac{d\psi}{dq}$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{d}{dx}\left(\sqrt{\alpha}\,\frac{d\psi}{dq}\right) = \sqrt{\alpha}\,\frac{d^2\psi}{dq^2}\,\frac{dq}{dx} = \alpha\,\frac{d^2\psi}{dq^2}$$

แทนค่า $\frac{d^2\psi}{dx^2}$ ลงในสมการ (6.46) จะได้

$$\alpha\frac{d^2}{dx^2}\,\psi(q) + (\beta - \alpha q^2)\,\psi(q) = 0$$

หรือ $$\frac{d^2\psi}{dq^2}(q) + (\epsilon - q^2)\,\psi(q) = 0 \qquad (6.54)$$

เมื่อ $\epsilon = \frac{\beta}{\alpha} = \frac{2E}{\hbar\omega}$

ในการหาคำตอบของสมการ (6.54) ครั้งแรกเราจะพิจารณารูปแบบของคำตอบอซิมพ์โทท (asymptotic solution) เมื่อ q มีค่ามาก ๆ จากนั้นจะสมมติว่าคำตอบของสมการ (6.54) สามารถเขียนอยู่ในรูปผลคูณของคำตอบอซิมพ์โททและอนุกรมกำลัง (power series) ของ q นั่นคือ

$$\psi = \psi_a H(q)$$

เมื่อ ψ_a เป็นคำตอบอซิมพ์โทท และ H (q) เป็นอนุกรมกำลังของ q การหาคำตอบอซิมพ์โทท เราให้ q มีค่ามาก ๆ ($q \to \infty$) สำหรับค่า E ใด ๆ ϵ จะมีค่าน้อยมากจนละทิ้งได้เมื่อเทียบกับ q^2 ดังนั้นสมการ (6.54) ประมาณได้เป็น

$$\frac{d^2}{dq^2}\,\psi_a - q^2\psi_a = 0$$

คำตอบของสมการข้างต้น คือ

$$\psi_a = Ae^{-q^2/2} + B\,e^{q^2/2} \qquad (6.55)$$

เนื่องจาก $\psi_a \to 0$ เมื่อ $q \to \pm\infty$ ดังนั้นค่า B ในสมการ (6.48) ต้องเท่ากับศูนย์จะได้

$$\psi_a = A\,e^{-q^2/2}$$

คำตอบของสมการ (6.54) คือ

$$\psi(q) = e^{-q^2/2}\,H(q) \qquad (6.56)$$

สัมประสิทธิ์ A รวมอยู่ในเทอม H (q) แทนค่า ψ (q) ลงในสมการ (6.54) จะได้

$$\frac{d^2}{dq^2} H(q) - 2q\frac{dH}{dq}(q) - (\epsilon-1) H(q) = 0 \qquad (6.57)$$

สมการข้างต้น คือสมการเฮอร์ไมท์ (hermite equation) นั่นเอง การหาคำตอบของสมการ (6.57) ต้องสมมติให้ H (q) อยู่ในรูปของอนุกรมกำลังของ q

$$H(q) = a_0 + a_1q + a_2q^2 + \ldots\ldots + a_rq^r + \ldots\ldots$$

$$\frac{d}{dq} H(q) = a_1 + 2a_2q + 3a_3q^2 + \ldots\ldots\ldots + ra_rq^{r-1} + \ldots\ldots\ldots$$

$$\frac{d^2}{dq^2} H(q) = (1\times2)\,a_2 + (2\times3)\,a_3q + (3\times4)\,a_4q^2 + \ldots\ldots\ldots$$

แทนค่า H (q), $\frac{d}{dq}$ H (q) และ $\frac{d^2}{dq^2}$ H (q) ลงในสมการ (6.50) แล้วแยกสัมประสิทธิ์ของ q ออกไว้เป็นพวก ๆ จะได้

$$\left[(\epsilon-1)\,a_0 + (1\times2)\,a_2\right] + \left[(\epsilon-1-2)\,a_1 + (2\times3)\,a_3\right] q + \ldots\ldots$$
$$+ \left[\left\{(\epsilon-1)-2r\right\} a_r + (r+1)(r+2)\,a_{r+2}\right] q^r + \ldots\ldots\ldots = 0$$

สมการข้างต้นจะเป็นจริงได้ก็ต่อเมื่อสัมประสิทธิ์ของทุก q เป็นศูนย์ เขียนเป็นสมการทั่วไปได้ว่า

$$\boxed{a_{r+2} = \frac{2r+1-\epsilon}{(r+1)(r+2)}\,a_r} \qquad (6.58)$$

สมการ (6.58) เรียกว่า recursion formula ซึ่งแสดงให้เห็นว่า ค่า a ต่าง ๆ สามารถหาได้ในเทอมของ a_0 และ a_1

เนื่องจาก H (q) เป็นอนุกรมกำลังที่มีลักษณะของ e^{q^2} เมื่อ q มีค่ามาก ซึ่งเราจะแสดงให้ดูดังต่อไปนี้ เริ่มจาก

$$e^{q^2} = 1 + \frac{q^2}{1} + \frac{q^4}{2!} + \frac{q^6}{3!} + \ldots\ldots\ldots + \frac{q^r}{\left(\frac{r}{2}\right)!} + \frac{q^{r+2}}{\left(\frac{r}{2}+1\right)!} + \ldots\ldots$$

หรือเขียนได้เป็น $e^{q^2} = b_0 + b_2q^2 + b_4q^4 + \ldots\ldots\ldots + b_rq^r + b_{r+2}q^{r+2} + \ldots\ldots$

อัตราส่วนของสัมประสิทธิ์ของ q ที่อยู่ติดกัน คือ

$$\frac{b_{r+2}}{b_r} = \frac{\left(\frac{r}{2}\right)!}{\left(\frac{r}{2}+1\right)!}$$

เมื่อ $r \to \infty$ $\quad \frac{b_{r+2}}{b_r} \to \frac{2}{r}$

พิจารณาอนุกรมกำลังของ H (q) ซึ่งมีสัมประสิทธิ์เป็น a จากสมการ (6.58) จะได้

$$\frac{a_{r+2}}{a_r} = \frac{2r-\epsilon+1}{(r+1)(r+2)}$$

เมื่อ $r \to \infty, \frac{a_{r+2}}{a_r} \to \frac{2}{r}$

ดังนั้นเมื่อ q มีค่ามาก ๆ H (q) จึงเป็นเหมือน e^{q^2} และ

$$\begin{aligned}\psi(q) &= e^{-q^2/2} H(q) \\ &\approx e^{-q^2/2} e^{q^2} \\ &\approx e^{q^2/2}\end{aligned}$$

ซึ่งเป็นค่าที่ยอมรับไม่ได้ เนื่องจากเมื่อ $q \to \pm\infty$, $\psi(q) \to \infty$ ด้วยเหตุนี้ H (q) จะเป็นอนุกรมกำลังไม่ได้แต่จะต้องสิ้นสุดเป็นโพลีโนเมียล (polynomial) ให้อนุกรม H (q) นี้สิ้นสุดลงที่เทอมที่ n จาก recursion formula เมื่อ $r = n$ ดังนั้น a_{n+1} และสัมประสิทธิ์ของเทอมสูงกว่านี้ จะต้องเป็นศูนย์ เมื่อ

$$\epsilon = 2n+1$$

ให้ $a_0 = 0$ เมื่อ $n = 1, 3, 5, \ldots$ (n เป็นเลขคี่)

$a_1 = 0$ เมื่อ $n = 0, 2, 4, \ldots$ (n เป็นเลขคู่)

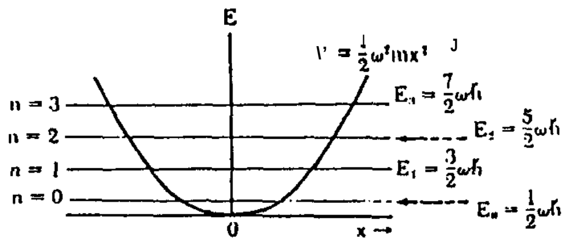
H (q) จะเป็นโพลีโนเมียลซึ่งเรียกว่าโพลีโนเมียลเฮอร์ไมท์ และทำให้ $\psi(q) \to 0$ เมื่อ $q \to \pm\infty$ เราสามารถหาความสัมพันธ์ของ n และ E ได้ดังนี้ จาก

$\epsilon = 2n+1$ และ $\epsilon = \frac{2E}{\hbar\omega}$

ดังนั้น $$\frac{2E}{hw} = 2n+1$$

จะได้ $$\boxed{E_n = (n+\tfrac{1}{2})\hbar\omega \qquad n = 0, 1, 2, 3 \ldots\ldots} \qquad (6.59)$$

n เรียกว่าเลขควอนตัม (quantum mumber) พลังงานของฮาร์โมนิกออสซิลเลเตอร์มีค่าเป็นค่า ๆ ไม่ต่อเนื่องและเป็นระดับพลังงาน โดยที่แต่ละระดับพลังงานห่างกัน $\hbar\omega$ ผลที่ได้นี้ยืนยันความถูกต้องของสมมติฐานของแพลงค์



รูป 6.11 แสดงระดับพลังงานของฮาร์โมนิกออสซิลเลเตอร์

สำหรับโพลีโนเมียลเฮอร์ไมท์อาจหาได้จากสูตร

$$H_n(q) = (-1)^n e^{q^2} \frac{d^n}{dq^n} (e^{-q^2}) \qquad (6.60)$$

เช่นเมื่อ n = 2 จะได้

$$H_2(q) = (-1)^2 e^{q^2} \frac{d^2}{dq^2} (e^{-q^2}) \qquad (6.61)$$

$$= e^{q^2} \frac{d}{dq} (-2q\ e^{-q^2})$$

$$= e^{q^2}\left[(-2q)(-2q)\ e^{-q^2} + e^{-q^2}(-2)\right]$$

$$= 4q^2 - 2$$

หรือโพลีโนเมียลเฮอร์ไมท์อาจหาได้จาก recursion formula สมการ (6.58) ดังนี้

$$a_{r+2} = \frac{2r+1-E}{(r+1)(r+2)} a_r$$

แต่ $E = 2n+1$

$$a,., = \frac{2(r-n)}{(r+1)(r+2)}$$

a, = 0 เมื่อ n เป็นเลขคี่

a, = 0 เมื่อ n เป็นเลขคู่

เช่น n = 2, $a_1 = 0$ ดังนี้

$$a_3 = a_5 = a_7 = \ldots\ldots\ldots = 0$$

$$a_2 = \frac{2 \cdot (0-2)}{(0+1)(0+2)} a_0 = -2a_0$$

$$a_4 = \frac{2\ (2-2)}{(2+1)(2+2)} a_2 = 0$$

$$a_6 = a_8 = a_{10} = \ldots\ldots\ldots = 0$$

$$H_2(q) = a_0 - 2a_0 q^2$$

ค่า a_0 เป็นค่าคงที่ใด ๆ เพื่อความสะดวกจะเลือกค่า a_0 (หรือ a_1) ที่ทำให้สัมประสิทธิ์ของเทอม q ที่มีกำลังสูงสุดเป็น 2^n ดังนั้นในตัวอย่างนี้ $a_0 = -2$

จะได้ $H_2(q) = 4q^2 - 2$

ซึ่งตรงกับค่าที่หาได้จากสมการ (6.53)

ตัวอย่างของโพลีโนเมียลเฮอร์ไมท์ คือ

$$H_0(q) = 1$$

$$H_1(q) = 2q$$

$$H_3(q) = 8q^3 - 12q$$

$$H_4(q) = 16q^4 - 48q^2 + 12$$

$$H_5(q) = 32q^5 - 160q^3 + 120q$$

$$H_6(q) = 64q^6 - 480q^4 + 720q^2 - 120$$

จากสมการ (6.56) เราจะได้ฟังก์ชันคลื่นของฮาร์โมนิกออสซิลเลเตอร์ เป็น

$$\boxed{\psi_n(q) = e^{-q^2/2} H_n(q)}$$

เปลี่ยนตัวแปรจาก q เป็น x จะได้

$$\psi_n(x) = e^{-m\omega x^2/2\hbar} H_n\left(\frac{\sqrt{m\omega}}{\hbar} x\right)$$

และฟังก์ชันคลื่นปกติของฮาร์โมนิกออสซิลเลเตอร์ คือ

$$W_n(x) = N_n e^{-m\omega x^2/2\hbar} H_n\left(\frac{\sqrt{m\omega}}{\hbar} x\right)$$

เมื่อ N_n คือค่าคงที่ของความปกติ ซึ่งหาได้จากความสัมพันธ์

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x)\, \psi_n(x)\, dx = 1$$

จะได้

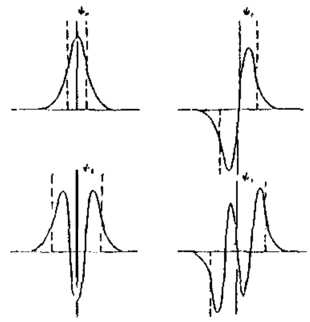
$$N_n = \left[\frac{1}{2^n n!} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2}\right]^{1/2}$$

ตัวอย่างของฟังก์ชันคลื่นปกติของฮาร์โมนิก คือ

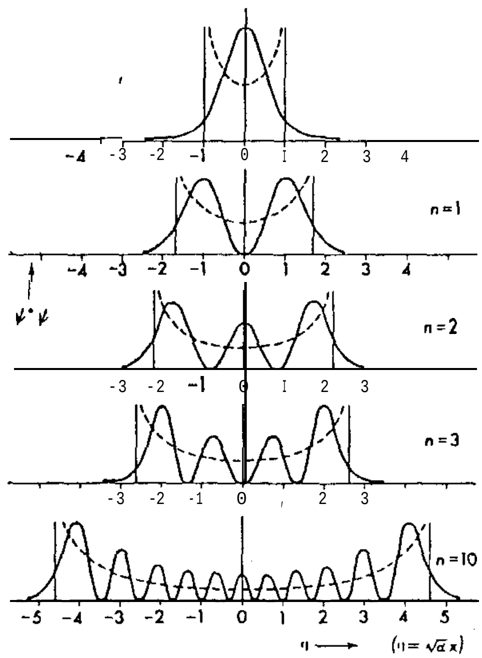
$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-m\omega x^2/2\hbar}$$

$$\psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} 2\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, x\, e^{-m\omega x^2/2\hbar}$$

$$\psi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{8}}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\left(\frac{4m\omega x^2}{\hbar} - 2\right) e^{-m\omega x^2/2\hbar}$$



รูป 6.12 ฟังก์ชันคลื่น 4 ฟังก์ชันแรกของฮาร์โมนิกออสซิลเลเตอร์ เส้นประแสดงลิมิตของการเคลื่อนที่ยุคเก่า



รูป 6.13 เส้นทึบแสดงความหนาแน่นของโอกาส $|\psi(q)|^2$ เส้นประแสดงความน่าจะเป็นของกลศาสตร์ยุคเก่าสำหรับค่าพลังงานเดียวกัน

สรุป

บอร์นได้เสนอว่าฟังก์ชันคลื่น $\Psi(x, y, z, t)$ เป็นปริมาณที่ผลคูณ $|\Psi(x, y, z, t)|^2 dv$ ใช้บอกโอกาสที่จะพบอนุภาคในบริเวณ dv ที่เวลา t เมื่ออนุภาคอยู่ในสถานะที่แสดงได้ด้วยฟังก์ชันคลื่น $\Psi(x, y, z, t)$

สมการคลื่นโชร์ดิงเจอร์ที่ขึ้นกับเวลา คือ $H\Psi = E\Psi$

หรือ $$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V(x, y, z, t)\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

สมการคลื่นโชร์ดิงเจอร์ที่ไม่ขึ้นกับเวลาใน 1 มิติ คือ

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(x)]\psi(x) = 0$$

คุณสมบัติของฟังก์ชันคลื่น คือ (1) คือ Ψ และอนุพันธ์ของมันต้องมีค่าต่อเนื่อง (2) ค่า Ψ ต้องมีค่าแน่นอน (3) ค่า Ψ ที่ตำแหน่งหนึ่ง ๆ ต้องมีค่าเดียว

ถ้าตัวดำเนินการ A สอดคล้องกับปริมาณที่สังเกตได้ a

$$A\psi = a\psi$$

เมื่อ ψ เป็นฟังก์ชันไอเกน และ a เป็นค่าไอเกน

ค่าเฉลี่ยของปริมาณที่สังเกตได้ a คือ

$$\langle a\rangle = \frac{\int\Psi^* A\,\Psi\,dxdydz}{\int\Psi^*\Psi\,dxdydz}$$

สำหรับอนุภาคอิสระ $\psi(x) = e^{\pm ikx}$

สำหรับอนุภาคที่เคลื่อนที่ในกล่อง 1 มิติ

$$\psi_n(x) = \left(\frac{2}{L}\right)^{1/2}\sin\frac{n\pi x}{L}$$

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$$

พลังงานของการเคลื่อนที่แบบฮาร์โมนิกออสซิลเลเตอร์ในกรณี 1 มิติ สำหรับ $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$ จะมีค่าเป็นค่า ๆ คือ

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \qquad n = 0, 1, 2, \ldots$$

ถ้าอนุภาคพลังงาน E ตกกระทบบนกำแพงศักย์โดยที่ $E < V_0$ ตามทฤษฎียุคเก่าจะไม่มีอนุภาคผ่านกำแพงศักย์นี้ไปได้ แต่ตามกลศาสตร์ควอนตัมมีโอกาสที่จะทะลุผ่านกำแพงศักย์ได้

แบบฝึกหัดบทที่ 6

1. อนุภาคชนิดหนึ่งมีฟังก์ชันคลื่นปกติ

$$\psi(x) = \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-x^2/2}$$

จงคำนวณหาโอกาสที่จะพบอนุภาคนี้ในช่วง $x = 1$ ถึง $x = 2$

2. อนุภาคมวล m เคลื่อนที่ภายในกล่อง 1 มิติ กว้าง L จงคำนวณหาโอกาสที่จะพบอนุภาคในสถานะที่มีพลังงานต่ำสุดอยู่ในช่วง $\frac{L}{4}$ ถึง $\frac{3L}{4}$
3. จงหาพลังงานต่ำสุดของนิวตรอนที่อยู่ในกล่องกว้าง 5×10^{-15} เมตร ตอบในหน่วย eV
4. จงแสดงว่าพลังงานจลน์ของอนุภาคใน 1 มิติ สอดคล้องกับปริมาณ $-(\hbar^2/2m)\, d^2\psi/dx^2$ ในสมการโชร์ดิงเจอร์
5. จงแสดงว่า สมการโชร์ดิงเจอร์นี้ไม่ขึ้นกับเวลาของอนุภาคในกล่อง 2 มิติ คือ

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

6. จงแสดงว่าคำตอบของสมการโชว์ดิงเจอร์สำหรับอนุภาคในกล่อง 2 มิติ คือ

$$\psi = A \begin{Bmatrix} \sin \\ \cos \end{Bmatrix} mx \begin{Bmatrix} \sin \\ \cos \end{Bmatrix} ny$$

7. จงหา $\langle x \rangle$ และ $\langle p \rangle$ ของอนุภาคในกล่องหนึ่งมิติ สำหรับสถานะ $n = 1$ และ $n = 2$
8. ฮาร์โมนิกออสซิลเลเตอร์มีฟังก์ชันคลื่นที่ขึ้นกับเวลาซึ่งเป็นผลรวมของฟังก์ชันไอเกนสถานะพื้นและสถานะกระตุ้นสถานะแรก คือ

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left| \Psi_0(x, t) + \Psi_1(x, t) \right|$$

จงหาค่าคาดหมายของพลังงาน

9. จงหาค่าเฉลี่ย $\langle T \rangle$ และ $\langle V \rangle$ สำหรับพลังงานจลน์และพลังงานศักย์ของฮาร์โมนิกออสซิลเลเตอร์ที่อยู่ในสถานะพื้น