บทที่ 9
ทฤษฎีการรบกวนและทฤษฎีการแปรผัน

วัตถุประสงค์

1) ศึกษาทฤษฎีการรบกวนโดยที่ค่าไอเกนไม่ต่อเนื่องและไม่แตกตัว
2) ศึกษาทฤษฎีการรบกวนโดยที่ค่าไอเกนไม่ต่อเนื่องและแตกตัว
3) ศึกษาทฤษฎีการแปรผัน

การหาคำตอบโดยตรงใช้ได้กับระบบทางควอนตัมบางระบบเท่านั้น ระบบส่วนใหญ่จะต้องใช้การประมาณค่า ซึ่งแบ่งเป็นสองชนิดคือ วิธีการรบกวน และวิธีการแปรผัน

9.1 ทฤษฎีการรบกวน (ค่าไอเกนไม่ต่อเนื่อง และไม่แตกตัว)

กำหนดให้ $\hat{H}^o$ เป็นแฮมมิลโทเนียนของระบบที่ยังไม่มีการรบกวน มีค่าไอเกน E_n^o และฟังก์ชั่นไอเกน U_n^o ดังนั้น

$$\hat{H}^o U_n^o = E_n^o U_n^o$$

เราต้องการหาคำตอบของสมการ

$$\hat{H} U_n = E_n U_n \tag{9.1}$$

เมื่อ $$\hat{H} = \hat{H}^o + \hat{H}'$$

จะสามารถใช้ทฤษฎีการรบกวนได้ เมื่อ $\hat{H}^o \gg \hat{H}'$ เราสามารถเขียน

$$E_n = E_n^o + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + \ldots\ldots\ldots \tag{9.2}$$

$$U_n = U_n^o + U_n^{(1)} + U_n^{(2)} + \ldots\ldots\ldots \tag{9.3}$$

เมื่อเลขตัวยกแสดงถึงลำดับของการแก้ แทนสมการ (9.2) และสมการ (9.3) ลงในสมการ (9.1) และแยกเทอมจะได้

ลำดับ

$$0 : \quad (\hat{H}^o - E^o)U^o = 0$$

$$1 : \quad (\hat{H}^o - E^o)U^{(1)} + (\hat{H}' - E^{(1)})U^o = 0$$

$$2 : \quad (\hat{H}^o - E^o)U^{(2)} + (\hat{H}' - E^{(1)})U^{(1)} = E^{(1)}U^o$$

(9.4)

$$k : \quad (\hat{H}^o - E^o)U^{(k)} + (\hat{H}' - E^{(1)})U^{(k-1)} = \sum_{j=2}^{k} E^{(j)}U^{(k-j)}$$

เมื่อละตัวห้อย n ไว้เพื่อความสะดวกในการเขียนสมการ จากการนอร์มอลไลซ์ฟังก์ชั่นคลื่น จะได้

$$<U_n|U_n> \; = 1 \qquad \text{และ} \qquad <U_n^o|U_n^o> \; = 1$$

ดังนั้น

$$1 : \quad <U^o|U^{(1)}> + <U^{(1)}|U^o> \; = 0$$

$$2 : \quad <U^o\, U^{(2)}> + <U^{(1)}|U^{(1)}> <U^{(2)}|U^{(1)}> \; = 0$$

(9.5)

$$k : \quad \sum_{j=0}^{k} <U^{(j)}|\, U^{(k-j)}> = 0$$

สมการสำหรับการแก้ค่าพลังงาน สามารถหาได้โดยการคูณสมการ (9.4) ด้วย $(U^o)^*$ และอินทีเกรต จะได้

$$
\begin{aligned}
0 \quad &: \quad E^{o} = \langle U^{o} | \hat{H}^{o} | U^{o} \rangle \\
1 \quad &: \quad E^{(1)} = \langle U^{o} | \hat{H}' | U^{o} \rangle \\
&\vdots \\
&\vdots \\
k \quad &: \quad E^{(k)} = \langle U^{o} | \hat{H}' - E^{(1)} | U^{(k-1)} \rangle - \sum_{j=1}^{k-2} E^{(k-1)} \langle U^{o} | U^{(j)'} \rangle
\end{aligned}
\tag{9.6}
$$

เทอม $\langle U^{o} | \hat{H}^{o} - E^{o} | U^{(k)} \rangle$ เป็นศูนย์ เนื่องจากคุณสมบัติเฮอร์มิเทียนของ $\hat{H}^{o}$ คำตอบของสมการ (9.6) สามารถหาได้ โดยทั่วไปจะใช้คำตอบในรูปการกระจายอนุกรมของฟังก์ชั่นคลื่น

$$U_{n}^{(k)} = \sum_{j} c_{jn}^{(k)} U_{j}^{o}$$

ซึ่งจะทำให้ได้ค่าแก้ของพลังงาน ดังนี้

$$E_{n}^{(1)} = \int U_{n}^{o*} \hat{H}' U_{n}^{o} \, d\tau = \langle n | \hat{H}' | n \rangle \qquad \text{(ลำดับแรก)}$$

$$E_{n}^{(2)} = \sum_{k \neq n} \frac{\left| \langle n | \hat{H}' | k \rangle \right|^{2}}{E_{n}^{o} - E_{k}^{o}} \qquad \text{(ลำดับที่สอง)}$$

จาก

$$(\hat{H}^{o} - E_{n}^{o}) U_{n}^{(1)} + (\hat{H}' - E^{(1)}) U_{n}^{o} = 0$$

แทนค่า

$$U_{n}^{(1)} = \sum c_{jn}^{(1)} U_{j}^{o}$$ ลงไป จะได้

$$(\hat{H}^{o} - E_{n}^{o}) \sum_{j} c_{jn}^{(1)} U_{j}^{o} + (\hat{H}' - E^{(1)}) U_{n}^{o} = 0$$

คูณด้วย $(U_{j}^{o})^{*}$ และอินทีเกรต จะได้

$$(E_{j}^{o} - E_{n}^{o}) c_{jn}^{(1)} = - \langle U_{j}^{o} | \hat{H}' | U_{n}^{o} \rangle$$

ดังนั้น

$$U_n^{(1)} = \sum_{j\neq n}\frac{<U_j^o|\hat{H}'|U_n^o>}{(E_n^o - E_j^o)}U_j^o$$

สัมประสิทธิ์ $c_{nn}^{(1)}$ เป็นศูนย์ เนื่องจากการนอร์มอลไลซ์

$$<U^o|U^{(1)}> + <U^{(1)}|U^o> = 0$$

และการแก้ค่าฟังก์ชั่นไอเกนถึงลำดับศูนย์ คือ

$$U_n^{(1)} = \sum_{k\neq n}\frac{<k|\hat{H}'|n>}{(E_n^o - E_k^o)}U_k^o \qquad \text{(ลำดับแรก)}$$

$$U_n^{(2)} = \sum_{\ell\neq n}\left\{\sum_{k\neq n}\frac{<\ell|\hat{H}'|k><k|\hat{H}'|n>}{(E_\ell^o - E_n^o)(E_k^o - E_n^o)} \frac{<\ell|\hat{H}'|n><n|\hat{H}'|n>}{(E_\ell^o - E_n^o)^2}\right\}U_\ell^o$$

(ลำดับที่สอง)

กรณีไม่แตกตัว จะใช้ได้ ถ้า $|<k|\hat{H}'|n>| \ll |E_n^o - E_k^o|$

Qlfl $E^{(2)} = <U^o|\hat{H}' - E^{(1)}|U^{(1)}>$

แทนค่า $U^{(1)}$ จะได้

$$E_n^{(2)} = \int (U_n^o)^*(\hat{H}' - E^{(1)})\sum\frac{<U_j^o|\hat{H}'|U_n^o>}{(E_n^o - E_j^o)}U_j^o d\tau$$

$$= \sum_{j\neq n}\frac{<n|\hat{H}'|j><j|\hat{H}'|n>}{(E_n^o - E_j^o)}$$

$$= \sum_{j\neq n}\frac{|<n|\hat{H}'|j>|^2}{(E_n^o - E_j^o)}$$

9.2 ทฤษฎีการรบกวน (ค่าไอเกนไม่ต่อเนื่องและแตกตัว)

สมมุติว่า ฟังก์ชั่นไอเกน $U^o_{n\alpha}$ มีพลังงานค่าเดียว E^o_n เมื่อ $\alpha = 1,2,\ldots\ldots,k$ เรียกว่า **ระดับพลังงานแตกตัว k ชั้น (k-fold degenerate)**

จากสมการค่าไอเกน

$$\hat{H}U_n = E_n U_n$$

เมื่อ

$$\hat{H} = \hat{H}^o + \hat{H}'$$

โดยที่ $\hat{H}'$ ทำให้เกิดการแตกตัว ค่าไอเกนและฟังก์ชั่น ที่ k ได้จากการแตกตัวที่ n สามารถหาได้จากการแก้สมการต่อไปนี้

$$\begin{vmatrix} H'_{11} - E'_n S_{11} & H'_{12} - E'_n S_{12} \cdots H'_{1k} - E'_n S_{1k} \\ & \\ H'_{k1} - E'_n S_{k1} \ldots\ldots & H'_{kk} - E'_n S_{kk} \end{vmatrix} = 0$$

เมื่อ

$$H_{ij} = \langle n_i | \hat{H}' | n_j \rangle = \int U^{o*}_{nj} \hat{H}' U^o_{nj} d\tau$$

$$S_{ij} = \langle n_i \, n_j \rangle = \int U^{o*}_{nj} U^o_{nj} d\tau$$

ซึ่งจะได้ค่าแก้ในลำดับศูนย์ เพราะว่า จะคิดเฉพาะผลลัพธ์ที่ได้จาก E^o_n เท่านั้น

ตัวอย่างที่ 9.1 ระบบประกอบด้วยสเตท 2 สเตทที่เป็นไปได้ โดยรวมกันเป็นฟังก์ชั่นคลื่นในรูป

$$\psi = c_1\phi_1 + c_2\phi_2$$

ก) จงเขียนสมการของพลังงานในรูปของเมทริกซ์ของ $\hat{H}$ สมมุติว่า $\hat{H}$ และสัมประสิทธ์ c_n เป็นค่าจริงและ ϕ_1 และ ϕ_2 เป็นเซทของออร์โทนอร์มอล

ข) ให้ $\hat{H} = \hat{H}^o + \hat{H}'$ ซึ่ง $\hat{H}^o\phi_n = E_n^o\phi_n$ จงเปรียบเทียบผลที่ได้จากทฤษฎีการรบกวนที่มีการแตกตัวและไม่มีการแตกตัว

ลิทำ ก)

$$\begin{vmatrix} H_{11} - E & H_{12} \\ H_{12} & H_{22} - E \end{vmatrix} = 0$$

$$(H_{11} - E)(H_{22} - E) - H_{12}^2 = 0$$

หรือ $$E^2 - (H_{11} + H_{22})E + H_{11}H_{22} - H_{12}^2 = 0$$

ดังนั้น

$$E = \frac{H_{11} + H_{22} \pm \sqrt{(H_{11} + H_{22})^2 + (H_{12}^2 - H_{11}H_{22})}}{2}$$

$$= \frac{H_{11} + H_{22}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{H_{22} - H_{11}}{2}\right)^2 + H_{12}^2}$$

$$= \frac{H_{11} + H_{22}}{2} \pm \left(\frac{H_{22} - H_{11}}{2}\right)\sqrt{1 + \left[\frac{H_{12}}{(H_{22} - H_{11})/2}\right]^2}$$

ถ้า $[2H_{12}/(H_{22} - H_{11})]^2 < 1$ เราสามารถกระจายเป็นอนุกรมเทย์เลอร์ได้

$$(1+\theta)^{1/2} = 1 + \frac{1}{2}\theta - \frac{(1/2)(1/2)\theta^2}{2!} + \ldots\ldots$$

ดังนั้น

$$E = \frac{H_{11} + H_{22}}{2} \pm \left(\frac{H_{22} - H_{11}}{2}\right)\left[1 + 2\left(\frac{H_{12}}{(H_{22} - H_{11})}\right)^2 - 2\left(\frac{H_{12}}{(H_{22} - H_{11})}\right)^4 \ldots\ldots\right]$$

รากทั้งสอง คือ

$$E_1 = H_{11} - \frac{H_{12}^2}{(H_{22} - H_{11})} + \frac{H_{12}^4}{(H_{22} - H_{11})^3} \ldots\ldots \quad (1)$$

$$E_2 = H_{22} + \frac{H_{12}^2}{(H_{22} - H_{11})} - \frac{H_{12}^4}{(H_{22} - H_{11})^3} \ldots\ldots \quad (2)$$

ข) เขียนสมการ (1) และ (2) ในเทอมของ $\hat{H}'$ สำหรับ $E_1^0 \neq E_2^0$ จะได้

$$E_1 = E_1^0 + H'_{11} - \frac{H'^2_{12}}{(H_{22} - H_{11})} + \frac{H'^4_{12}}{(H_{22} - H_{11})^3} + \cdots\cdots$$

$$E_2 = E_2^0 + H'_{22} + \frac{H'^2_{12}}{(H_{22} - H_{11})} \frac{H'^4_{12}}{(H_{22} - H_{11})^3} + \cdots\cdots$$

โดยการประมาณค่าให้ $H_{22} - H_{11}$ มีค่าเท่ากับ $E_2^0 - E_1^0$ จะได้ผลลัพธ์ตรงกับทฤษฎีการรบกวน

ถ้า ϕ_1 และ ϕ_2 แตกแยก จะได้

$$\hat{H}^0\phi_1 = E_1^0\phi_1 \qquad \text{และ} \qquad \hat{H}^0\phi_2 = E_1^0\phi_2$$

เราสามารถเขียน

$$E = \frac{H_{11} + H_{22}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{H_{22} - H_{11}}{2}\right)^2 + H_{12}^2}$$

$$= E_1^0 \pm H_{12}$$

แทนค่า $\hat{H} = \hat{H}^o + \hat{H}'$ จะได้

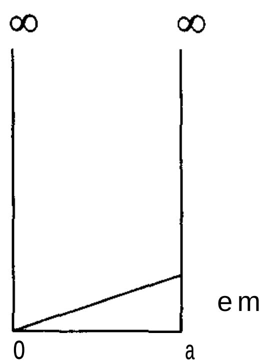
$$E = E_1^0 \pm <\phi_1|\hat{H}^0 + \hat{H}'|\phi_2>$$

$$= E_1^0 \pm <\phi_1|\hat{H}'|\phi_2>$$

$$= E_1^0 \pm H'_{12}$$

ซึ่งผลลัพธ์ที่ได้นี้ ตรงกับผลลัพธ์ที่ได้จากทฤษฎีการรบกวนชนิดแตกแยก

ตัวอย่างที่ 9.2 พิจารณาอิเล็กตรอนซึ่งอยู่ภายในกล่องศักย์ความยาว a เมื่อให้สนามไฟฟ้า ε ในทิศ x อิเล็กตรอนจะได้รับแรง $-e\varepsilon$ ทำให้ศักย์เปลี่ยนแปลง ดังรูป



ก) จงหาระดับพลังงานต่ำที่สุดของอิเล็กตรอน (ประมาณค่าถึงลำดับที่ 1)
สมมุติว่า $e\mathcal{E}x$ น้อยกว่าพลังงานของระดับพื้นฐานมาก

ข) อาศัยทฤษฎีการรบกวนลำดับที่ 1 จงหาฟังก์ชั่นคลื่นของสเตทพื้นฐาน และหาค่าแก้เทอมแรก

วิธีทำ ก) สำหรับระบบนี้ $\hat{H} = \hat{H}^o + \hat{H}'$ โดยที่

$$\hat{H}^0 = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} \qquad \text{และ} \qquad \hat{H}' = e\mathcal{E}x$$

คำตอบของสมการ $\hat{H}^0 U_n^0 = E_n^0 U_n^0$ สำหรับอนุภาคภายในกล่อง คือ

$$E_n^0 = \frac{n^2h^2}{8ma^2} \qquad \text{และ} \qquad U_n^0 = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$

และจากทฤษฎีการรบกวนลำดับ 1 $\qquad E_n = E_n^0 + E_n^{(1)}$

โดยที่

$$\begin{aligned}
E_n^{(1)} &= \int_0^a (U_n^0)^* \hat{H}' U_n^0 dx \\
&= e\varepsilon\int_0^a (U_n^0)^* x U_n^0 dx \\
&= e\varepsilon < x > \\
&= \frac{e\varepsilon a}{2}
\end{aligned}$$

ดังนั้น

$$E_1 = E_1^0 + E_1^{(1)} = \frac{h^2}{8ma^2}\frac{e\varepsilon a}{2}$$

ข) จากทฤษฎีการรบกวนลำดับ 1

$$U_1 \cong U_1^0 + \sum_{k\neq 1}\frac{< k|\hat{H}'|1 >}{E_1^0 - E_k^0}U_k^0$$

เทอมแรก คือ

$$\frac{< 2|\hat{H}'|1 >}{E_1^0 - E_2^0} = \frac{\int_0^a \left(U_2^0\right)^* e\varepsilon x U_1^0 dx}{-3\left(h^2/8ma^2\right)}$$

เมื่อ

$$\int_0^a \left(U_2^0\right)^* (e\varepsilon x) U_1^0\, dx = \frac{2e\varepsilon}{a}\int_0^a \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) x\,dx$$

ให้ $y = \pi x/a$ จะได้

$$\left(\frac{a}{\pi}\right)^2 \int_0^\pi \sin y \sin 2y (y dy) = \left(\frac{a}{\pi}\right)^2 \int_0^\pi y \sin y (2\sin y \cos y) dy$$

$$= \left(\frac{a}{\pi}\right)^2 \int_0^\pi 2y\left(1-\cos^2 y\right)\cos y\, dy$$

$$= 2\left(\frac{a}{\pi}\right)^2 \left[\int_0^\pi y \cos y\, dy - \int_0^\pi y \cos^3 y\, dy\right]$$

จากตารางจะได้

$$\int y\cos y\, dy = \cos y - y \sin y$$

และ

$$\int y \cos^3 y\, dy = \frac{y\sin 3y}{12} + \frac{\cos 3y}{36} + \frac{3}{4} y \sin y + \frac{3}{4}\cos y$$

แทนค่าสูตรทั้งสอง จะได้

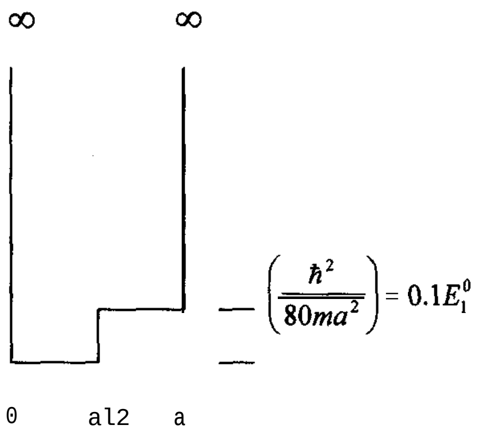
$$\int_0^a \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)\sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) x\,dx = -0.8889\left(\frac{a}{\pi}\right)^2$$

และ จะได้

$$\frac{<1|\hat{H}'|2>}{E_1^0 - E_2^0} = 0.889\left(\frac{2e\varepsilon a}{3\pi^3}\right)\left(\frac{8ma^2}{h^2}\right)$$

และ $$U_1 \cong U_1^0 + 0.480\, e\varepsilon a\left(\frac{ma^2}{h^2}\right)U_2^0 \ldots\ldots$$

ตัวอย่างที่ 9.3 อนุภาคมวล m อยู่ภายในกล่องศักย์ ซึ่งถูกรบกวน ดังรูป



ก) จงใช้ทฤษฎีการรบกวนลำดับที่ 1 คำนวณค่าแก้ของค่าไอเกน

ข) จงหาฟังก์ชั่นของสเตทพื้นฐาน

ค) จงคำนวณค่าไอเกนต่ำสุด ถึงค่าแก้ลำดับที่สอง

วิธีทำ ก) สำหรับอนุภาคภายในกล่องเมื่อยังไม่ถูกรบกวน

$$E_n^0 = \frac{n^2h^2}{8ma^2} \qquad \text{และ} \qquad U_n^0 = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$

เมื่อเพิ่ม $\hat{H}' = \left(h^2/80ma^2\right)$ ภายในช่วง $a/2 \le x \le a$ และค่าแก้ของพลังงานในลำดับที่ 1

คือ $E_n^{(1)} = \langle n|\hat{H}|n\rangle$

$$= 0.1E_1^0 \int_{a/2}^{a} \left(U_n^0\right)^* U_n\, dx$$

$$= 0.1E_1^0 \left(\frac{1}{2}\right)\int_0^a \left(U_n^0\right)^* U_n^0\, dx$$

$$= \frac{0.1E_1^0}{2}$$

$$= \frac{1}{2}\left(\frac{h^2}{80ma^2}\right)$$

ดังนั้น $E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)}$

$$= \quad \frac{h^2}{8ma^2} + \left(n^2 + 0.05\right)$$

ข) ฟังก์ชั่นคลื่นของสเตทพื้นฐานแก้ค่าถึงลำดับ 1 คือ

$$U_1 \quad = \quad U_1^0 + \sum_{k \neq 1} \frac{<1|\hat{\mathrm{H}}'|k>}{\mathrm{E}_1^0 - \mathrm{E}_k^0} U_k^0$$

$$U_1 \quad = \quad \mathrm{up} + \frac{<2|\hat{\mathrm{H}}'|1>}{\mathrm{E}_1^0 - \mathrm{E}_2^0} + \frac{<3|\hat{\mathrm{H}}'|1>}{\mathrm{E}_1^0 - \mathrm{E}_3^0} + \frac{<4|\hat{\mathrm{H}}'|1>}{\mathrm{E}_1^0 - \mathrm{E}_4^0} + \ldots$$

$$\frac{<n|\hat{\mathrm{H}}'|k>}{|\mathrm{H}'|} = \frac{2}{a}\int_{a/2}^{a} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{k\pi x}{a}\right) dx$$

$$= \left(\frac{2}{a}\right)\left(\frac{a}{\pi}\right)\int_{\pi/2}^{\pi} \sin(ny)\sin(ky)dy$$

$$= \frac{1}{\pi}\left\{\frac{\sin(n-k)y}{(n-k)} - \frac{\sin(n+k)y}{(n+k)}\right\}\Bigg|_{\pi/2}^{\pi}$$

เมื่อ $\quad n^2 \neq k^2$

จากสมการข้างบนนี้ จะได้

$$<2|\hat{\mathrm{H}}'|1> \quad = \quad 0.1\mathrm{E}_1^0 \left(-\frac{4}{3\pi}\right)$$

$$<3|\hat{\mathrm{H}}'|1> \quad = \quad 0$$

$$<4|\hat{\mathrm{H}}'|1> \quad = \quad 0.1\mathrm{E}_1^0 \left(\frac{8}{15\pi}\right)$$

ฟังก์ชั่นคลื่นของระดับพื้นฐาน โดยประมาณ คือ

$$U_1 \quad = \quad U_1^0 + \frac{0.1\mathrm{E}_1^0}{-3\mathrm{E}_1^0}\left(-\frac{4}{3\pi}\right)U_2^0 + \frac{0.1\mathrm{E}_1^0}{-15\mathrm{E}_1^0}\left(\frac{8}{15\pi}\right)U_4^0 + \ldots$$

$$= \quad U_1^0 + \left(\frac{2}{45\pi}\right)U_2^0 - \left(\frac{4}{1125\pi}\right)U_4^0 + \ldots$$

ค) ค่าแก้ลำดับที่สอง

$$E_1^{(2)} = \sum_{k\neq 1} \frac{\left|<1\left|\hat{H}'\right|k>\right|}{E_1^0 - E_k^0}$$

$$= \frac{\left|<1\left|\hat{H}'\right|2>\right|^2}{E_1^0 - E_2^0} + \frac{\left|<1\left|\hat{H}'\right|3>\right|^2}{E_1^0 - E_3^0} + \frac{\left|<1\left|\hat{H}'\right|4>\right|^2}{E_1^0 - E_4^0} + \ldots$$

อาศัยสูตรการอินทีเกรตจากข้อ ข) จะได้

$$E_1^{(2)} = -\frac{10^{-2}(E_1^0)^2}{-3E_1^0}\left(\frac{4}{3\pi}\right)^2 - \frac{10^{-2}(E_1^0)^2}{15E_1^0}\left(\frac{8}{15\pi}\right)^2 \ldots$$

$$\cong -6.196\times 10^{-4}\left(\frac{h^2}{8ma^2}\right)$$

และค่าไอเกนคำนวณถึงลำดับที่สอง คือ

$$E_1 \approx E_1^0 + E_1^{(1)} + E_1^{(2)} = \frac{h^2}{8ma^2}(1+0.05-6.196\times 10^{-4})$$

ตัวอย่างที่ 9.4 ฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์อย่างง่าย มีมวล μ และค่าคงที่ของแรง k ถูกรบกวนด้วย $\hat{H}' = ax^4$ จงหาค่าไอเกนที่ n ของออสซิลเลเตอร์นี้ โดยการประมาณค่าถึงลำดับที่ 1 และหาฟังก์ชั่นคลื่นของสเตทพื้นฐาน ถึงเทอมที่ไม่ใช่ศูนย์ลำดับที่ 1

วิธีทำ

$$\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{H}' = \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2\right) + ax^4$$

สำหรับออสซิลเลเตอร์ที่ไม่ถูกรบกวน

$$E_n^0 = \left(n+\frac{1}{2}\right)h\upsilon \quad \text{และ} \quad U_n^0(x) = \left(\frac{1}{2^n n!}\sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}\right)^{1/2} e^{-\alpha x^2/2} H_n\left(\sqrt{\alpha}x\right)$$

ค่าแก้ลำดับ 1 ของค่าไอเกนที่ n คือ

$$E_n^{(1)} = <n\left|ax^4\right|n>$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} U_n^0(x)^*\left[ax^4\right]U_n^0(x)dx$$

การหาค่าอินทีเกรตสามารถกระทำได้โดยใช้สูตร

$$< n|x|k > = x_{nk} = \delta_{k,n+1}\sqrt{\frac{n+1}{2\alpha}} + \delta_{k,n-1}\sqrt{\frac{n}{2\alpha}} \qquad (1)$$

สมาชิกของเมทริกซ์ $(x^4)_{nn}$ สามารถหาได้จากการคูณกันของเมทริกซ์

$$(x^4)_{nn} = \sum_k (x^2)_{nk}(x^2)_{kn}$$

จากสมการ (1) สมาชิกของเมทริซ์ x^2 ที่ไม่เป็นศูนย์ คือ

$$\begin{aligned}(x^2)_{n,n+2} &= \sum_k x_{nk}x_{k,n+2} \\ &= x_{n,n+1}x_{n+1,n+2} \\ &= \sqrt{\frac{n+1}{2\alpha}}\sqrt{\frac{n+2}{2\alpha}} \\ &= \sqrt{\frac{(n+1)(n+2)}{2\alpha}}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}(x^2)_{n,n-2} &= x_{n,n-1}x_{n-1,n-2} \\ &= \sqrt{\frac{n(n-1)}{2\alpha}}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}(x^2)_{nn} &= x_{n,n+1}x_{n+1,n} + x_{n,n-1}x_{n-1,n} \\ &= \frac{n+1}{2\alpha} + \frac{n}{2\alpha} \\ &= \frac{(2n+1)}{2a}\end{aligned}$$

รวมเทอมทั้งหมดนี้ จะได้

$$\begin{aligned}(x^4)_{nn} &= \frac{1}{4\alpha^2}\left[(n+1)(n+2)n(n-1) + 4n^2 + 4n + 1\right] \\ &= \frac{3}{2\alpha^2}\left(n^2 + n + \frac{1}{2}\right)\end{aligned}$$

จะได้ค่าแก้ถึงลำดับ 1

$$E_n^{(1)} = \frac{3a}{2\alpha^2}\left(n^2 + n + \frac{1}{2}\right)$$

ฟังก์ชั่นคลื่นของสเตทพื้นฐานถึงค่าแก้ลำดับที่ 1 คือ

$$U_0 = U_0^0 + \frac{<1|\hat{H}'|0>}{E_0^0 - E_1^0}U_1^0 + \frac{<2|\hat{H}'|0>}{E_0^0 - E_2^0}U_2^0 + \frac{<3|\hat{H}'|0>}{E_0^0 - E_3^0}U_3^0$$

เทอมที่สองและเท ที่สี่ท ด้ องสมการเป็นศู เพราะว่า เป็นการอินทีเกรตฟังก์ชั่นคี่ นเทอมที่สาม เรา ใช้ส ชิ ริกซ์ ต่อไปนี้

$$\left(x^4\right)_{n,n-2} = x_{nn}^2 x_{n,n-2}^2 + x_{n,n-2}^2\, x_{n-2,n-2}^2$$
$$= \frac{(2n+1)}{2\alpha}\sqrt{\frac{n(n-1)}{2\alpha}} + \sqrt{\frac{n(n-1)}{2\alpha}}\frac{(2n-3)}{2\alpha}$$
$$= \frac{\sqrt{n(n-1)}(2n-1)}{2\alpha^2}$$

ดังนั้น

$$U_0 = U_0^0 - \frac{3\sqrt{2}a}{4\alpha^2 h\upsilon}U_2^0 + \ldots$$

ตัวอย่างที่ 9.5 ฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์อย่างง่ายมีมวล μ และค่าคงที่ของแรง k ถูกรบกวนโดย $\hat{H}' = ax^3$ จงหาพลังงานถึงการแก้ลำดับที่สอง และจงหาฟังก์ชั่นคลื่นถึงการแก้ลำดับที่หนึ่ง

วิธีทำ

$$\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{H}' = \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2\right) + ax^3$$

ค่าไอเกนของ $\hat{H}^0$ คือ

$$E_n^0 = \left(n+\frac{1}{2}\right)h\upsilon$$

และฟังก์ชั่นไอเกนของ $\hat{H}^0$ คือ

$$U_n^0(x) = \left(\frac{1}{2^n n!}\sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}\right)^{1/2} e^{-\alpha x^2/2} H_n(\alpha x)$$

ดังนั้น ค่าไอเกนที่ n แก้ถึงลำดับที่ คือ

$$E_n^{(1)} = < n|ax^3|n > = 0$$

และแก้ถึงลำดับที่สอง คือ

$$E_n^{(2)} = \sum_{k\neq n} \frac{\left|< n\left|\hat{H}'\right|k >\right|^2}{E_n^0 - E_k^0}$$

$$= \frac{\left|< n\left|ax^3\right|n+3 >\right|^2}{E_n^0 - E_{n+3}^0} + \frac{\left|< n\left|ax^3\right|n+1 >\right|^2}{E_n^0 - E_{n+1}^0} + \frac{\left|< n\left|ax^3\right|n-1 >\right|^2}{E_n^0 - E_{n-1}^0} + \frac{\left|< n\left|ax^3\right|n-3 >\right|^2}{E_n^0 - E_{n-3}^0}$$

ซึ่งจะสามารถหาค่าได้โดยใช้สมการ

$$< n\left|ax^3\right|m > \quad = \quad a\sum_k < n\left|x^2\right|k > < k\left|x\right|m >$$

ค่า k จะมีเพียง $n\pm 2$ และ n ส่วนค่า m จะมีเพียง $n\pm 3, n\pm 1$ ดังนั้น

$$a\left(x^3\right)_{n,n+3} = a(x^2)_{n,n+2}(x)_{n+2,n+3}$$

$$= a\sqrt{\frac{(n+1)(n+2)(n+3)}{(2\alpha)^3}}$$

$$a\left(x^3\right)_{n,n+1} = a\left[(x^2)_{n,n+2}(x)_{n+2,n+1} + (x^2)_{n,n}(x)_{n,n+1}\right]$$

$$= 3a\sqrt{\frac{(n+1)^3}{(2\alpha)^3}}$$

$$a\left(x^3\right)_{n,n-1} = a\left[(x^2)_{n,n-2}(x)_{n-2,n-1} + (x^2)_{n,n}(x)_{n,n-1}\right]$$

$$= 3a\sqrt{\frac{(n)^3}{(2\alpha)^3}}$$

$$a\left(x^3\right)_{n,n-3} = a(x^2)_{n,n-2}(x)_{n-2,n-3}$$

$$= a\sqrt{\frac{n(n-1)(n-2)}{(2\alpha)^3}}$$

ดังนั้น

$$E_n^{(2)} = -\frac{30a^2}{h\upsilon(2\alpha)^3}\left[n^2 + n + 11/30\right]$$

$$U_n = U_n^0 + \sum_{k\neq n} \frac{< k\left|\hat{H}'\right|n >}{E_n^0 - E_k^0} U_k^0$$

$$= U_n^0 + \frac{a}{2\alpha h\upsilon}\left[\frac{1}{3}\sqrt{\frac{n(n-1)(n-2)}{2\alpha}}U_{n-3}^0 + 3n\sqrt{\frac{n}{2\alpha}}U_{n-1}^0\right.$$

$$\left. - 3(n+1)\sqrt{\frac{(n+1)}{2\alpha}}U_{n+1}^0 - \frac{1}{3}\sqrt{\frac{(n+1)(n+2)(n+3)}{2\alpha}}U_{n+3}^0\right]$$

ตัวอย่างที่ 9.6 ฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์ถูกรบกวนโดยไฟฟ้า $\mathcal{E}$ ถ้ามวลที่แกว่งมีประจุ $-e$ แฮมโทเนียนที่รบกวนระบบคือ $\hat{H}' = +e\varepsilon x$ จงหาค่าแก้ของพลังงานถึงลำดับที่สอง

วิธีทำ

พลังงานถึงลำดับที่สอง คือ

$$E_n = E_n^0 + E_n^{(1)} + E_n^{(2)}$$
$$= E_n^0 + H'_{nn} + \sum_{k \neq n} \frac{|H'_{nk}|^2}{E_n^0 - E_k^0}$$

ดังนั้น ค่าแก้ลำดับที่ 1 คือ H'_{nn} หาได้จาก

$$H'_{nk} = \langle n|\hat{H}'|n\rangle$$
$$= +e\mathcal{E} \langle n|x|n\rangle = 0$$

เพราะว่า ฟังก์ชั่นไอเกนของ $\hat{H}^0$ เป็นฟังก์ชั่นคี่ หรือฟังก์ชั่นคู่ เสมอและ x เป็นคี่

สมาชิกเมทริกซ์สำหรับการแก้ลำดับที่สอง คือ

$$H'_{nk} = +e\varepsilon \langle n|x|k\rangle = \begin{cases} +e\varepsilon\sqrt{\dfrac{n+1}{2\alpha}}, k=n+1 \\ +e\varepsilon\sqrt{\dfrac{n}{2\alpha}}, k=n-1 \end{cases}$$

ในที่นี้ $\mu = \dfrac{2\pi\mu\upsilon}{\hbar}$, $\upsilon = \dfrac{1}{2\pi}\sqrt{\dfrac{k}{\mu}}$

μ เป็นมวลของออสซิลเลเตอร์ และ k เป็นค่าคงที่ของแรงพลังงานถึงลำดับที่สอง คือ

$$E_n = E_n^0 + E_n^{(1)} + E_n^{(2)}$$
$$= (n+1/2)h\upsilon + 0 + \frac{|H'_{n,n+1}|^2}{E_n^0 - E_{n+1}^0} + \frac{|H'_{n,n-1}|^2}{E_n^0 - E_{n-1}^0}$$

$$= \quad (n+1/2)h\upsilon + (e\varepsilon)^2 \left[\frac{\left(\frac{n+1}{2\alpha}\right)}{-h\upsilon} + \frac{\left(\frac{n}{2\alpha}\right)}{h\upsilon} \right]$$

$$= \quad (n+1/2)h\upsilon - \frac{e^2\varepsilon^2}{8\pi^2\mu\upsilon^2}$$

ดังนั้น ค่าแก้ของพลังงานจะมีค่าเท่ากันทุกสเตท ซึ่งค่าแก้ถึงลำดับที่สองในที่นี้มีค่าเท่ากับค่าที่แท้จริง

ตัวอย่างที่ 9.7 จากตัวอย่างที่ผ่านมา จงหาคำตอบที่แท้จริง โดยการแทน x ด้วย $x' - e\,\mathcal{E}/\mathrm{k}$

วิธีทำ

แฮมมิลโทเนียนสำหรับประจุภายในสนามไฟฟ้า คือ

$$\hat{\mathrm{H}} \quad = \quad -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2 + e\,\mathcal{E}\,x$$

แทนค่า $x = x' - e\,\mathcal{E}/\mathrm{k}$ จะได้

$$\hat{\mathrm{H}} \quad = \quad -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dx'^2} + \frac{1}{2}k(x')^2 - \frac{1}{2k}e^2\,\mathcal{E}^2$$

สมการชเรอดิงเงอร์จะเปลี่ยนเป็น

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dx'^2} + \frac{1}{2}k(x')^2\right]U(x') = (\mathrm{E}' + \frac{1}{2k}e^2\,\mathcal{E}^2)U(x')$$

$$= \quad \mathrm{E}U(x')$$

เนื่องจาก $\mathrm{E} = (n+1/2)h\upsilon$ ดังนั้น

$$\mathrm{E}' \quad = \quad \mathrm{E} - \frac{(e\varepsilon)^2}{2k}$$

หรือ $$\mathrm{E}' \quad = \quad (n+1/2)h\upsilon - \frac{e^2\varepsilon^2}{8\pi^2\mu\upsilon^2}$$

ตัวอย่างที่ 9.8 กำหนดเมทริกซ์แฮมิลโทเนียน ต่อไปนี้

$$H = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & c & 0 \\ c & 0 & 0 \\ 0 & 0 & c \end{pmatrix}$$

เมื่อ $H = H^0 + H'$ และ c เป็นค่าคงที่

ก) จงหาค่าไอเกนที่แท้จริง ของ H

ข) จงใช้ทฤษฎีการรบกวนหาค่าไอเกน โดยทำการแก้ค่าถึงลำดับที่สอง

ค) เปรียบเทียบผลลัพธ์จากข้อ ก) และข้อ ข)

วิธีทำ ก) ค่าไอเกนหาได้จาก

$$\begin{vmatrix} & c & 0 \\ c & 3-R & 0 \\ 1-A & 0 & c-2+\lambda \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1-\lambda & c \\ c & 3-\lambda \end{vmatrix} (c-2-4 = 0$$

ดังนั้น

$$\lambda = c-2, 2 \pm \sqrt{1+c^2}$$

ข) ค่าพลังงาน แก้ถึงลำดับที่สอง

$$E = E^0 + E^{(1)} + E^{(2)}$$

หรือ

$$(E)_{ii} = (H^0)_{ii} + (H')_{ii} + \sum_{k \neq i} \frac{H'_{ik} H'_{ki}}{(E_i^0 - E_k^0)}$$

$(H')_{ii}$ เป็นค่าแก้ของพลังงานถึงลำดับที่หนึ่ง โดยที่

$$H'_{11} = 0, H'_{22} = 0, H'_{33} = c$$

สำหรับการแก้ค่าถึงลำดับที่สอง

$$E_{11}^{(2)} = \frac{H'_{12}H'_{21}}{E_1^0 - E_2^0} + \frac{H'_{13}H'_{31}}{E_1^0 - E_3^0}$$

$$= \frac{c^2}{-2} + \frac{0}{3} = -\frac{1}{2}c^2$$

$$E_{22}^{(2)} = \frac{H'_{21}H'_{12}}{E_2^0 - E_1^0} + \frac{H'_{23}H'_{32}}{E_2^0 - E_1^0}$$

$$= \frac{c^2}{3-1} + \frac{0.0}{3+2} = +\frac{1}{2}c^2$$

และ

$$E_{33}^{(2)} = \frac{H'_{31}H'_{13}}{E_3^0 - E_1^0} + \frac{H'_{32}H'_{23}}{E_3^0 - E_2^0} = 0$$

ดังนั้น ถ้าใช้เครื่องหมายเมทริกซ์

$$E^0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix} \quad , E^{(1)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & c \end{pmatrix}$$

$$E^{(2)} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2}c^2 & 0 & 0 \\ 0 & +\frac{1}{2}c^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

หรือ

$$E \approx \begin{pmatrix} 1-\frac{1}{2}c^2 & 0 & 0 \\ 0 & 3+\frac{1}{2}c^2 & 0 \\ 0 & 0 & c-2 \end{pmatrix}$$

ถึงลำดับสอง

ง) อาศัยอนุกรมไบโนเมียล

$$2 \pm \sqrt{1+c^2} = 2 \pm \left(1 + \frac{1}{2}c^2 + \ldots\right)$$

$$= 3 + \frac{1}{2}c^2, 1 - \frac{1}{2}c^2 \qquad \left(c^2 << 1\right)$$

ซึ่งให้ผลลัพธ์ ตรงกับในข้อ ข)

ตัวอย่างที่ 9.9 กำหนดให้แฮมมิลโทเนียนค่าดังนี้

$$H = H^0 + H' = \begin{pmatrix} 20 & 0 & 0 \\ 0 & 20 & 0 \\ 0 & 0 & 30 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 2 \\ 0 & 2 & 0 \end{pmatrix}$$

ก) จงหาค่าไอเกนที่แท้จริง

ข) จงหาค่าไอเกนโดยประมาณอาศัยทฤษฎีการรบกวนแก้ค่าจริงลำดับที่สอง

44 วธทำ ก)

$$\begin{vmatrix} 20-a & 1 & 0 \\ 1 & 20-R & 2 \\ 0 & 2 & 30-\lambda \end{vmatrix} = 0$$

หรือ

$$-\lambda^3 + 70\lambda^2 - 1595\lambda + 11890 = (\lambda - 20.806)(\lambda - 18.805)(\lambda - 30.389)$$
$$= 0$$

ค่าไอเกนที่แท้จริง คือ

20.806 , 18.805 และ 30.389

ข)
$$\begin{vmatrix} 20-\lambda & 1 \\ 1 & 20-\lambda \end{vmatrix} |30 - a(= (21-\lambda)(19-\lambda)(30-\lambda)$$
$$= 0$$

กำหนด ϕ_1, ϕ_2 ให้ ϕ_3 และเป็นฟังก์ชั่นรากฐาน (basic functions) ชนิดออร์โทนอร์มอล

ดังนั้นฟังก์ชั่นคลื่น คือ

$$\lambda = 21, x_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 + \phi_2)$$

$$\lambda = 19, x_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 - \phi_2)$$

ดังนั้น สำหรับการคำนวณถึงลำดับที่สอง เราจะสร้างเมทริกซ์แฮมมิลโทนียนใหม่ โดยอาศัยฟังก์ชั่น x_1, x_2 และ ϕ_3

เนื่องจาก

$$\begin{aligned} H'_{13} &= \langle x_1 | \hat{H} | \phi_3 \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \langle \phi_1 + \phi_2 | \hat{H} | \phi_3 \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(H_{13} + H_{23}) \\ &= \sqrt{2} = H'_{31} \end{aligned}$$

เช่นเดียวกัน

$$H'_{23} = H'_{32} = -\sqrt{2}$$

เราสามารถหาพลังงานแก้ค่าถึงลำดับที่สองจากเมทริกซ์

$$\begin{pmatrix} 21 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 19 & -\sqrt{2} \\ \sqrt{2} & -\sqrt{2} & 30 \end{pmatrix}$$

ดังนั้น แก้ค่าถึงลำดับที่สองจะได้

$$E_1 = 21 + 0 + \frac{(\sqrt{2})^2}{21-30} = 20.777$$

$$E_2 = 19 + 0 + \frac{(\sqrt{2})^2}{19-30} = 18.818$$

และ

$$E_3 = 30 + 0 + \frac{(\sqrt{2})^2}{30-21} + \frac{(\sqrt{2})^2}{30-19} = 30.404$$

สรุป

ราก	ลำดับที 1	ลำดับที 2	ค่าทีแท้จริง
1	21	20.111	20.806
2	19	18.818	18.805
3	30	30.404	30.389

9.3 ทฤษฎีการแปรผัน

จากหลักการแปรผัน

$$E_0 \le \frac{\int \psi^* \hat{H} \psi d\tau}{\int \psi^* \psi d\tau} = W$$

เมื่อ E_0 เป็นค่าไอเกนต่ำที่สุดของ $\hat{H}$ และ ψ เป็นฟังก์ชั่นที่ใช้แทนฟังก์ชั่นคลื่น ทั้งสองข้างของสมการจะมีค่าเท่ากัน เมื่อ ψ เป็นฟังก์ชั่นคลื่นที่แท้จริงของระบบ

ถ้า $$\psi = \psi(a,b,c,\ldots)$$

ฟังก์ชั่น ψ ที่ใกล้กับฟังก์ชั่นคลื่นมากที่สุดจะเกิดขึ้นเมื่อ

$$\frac{\partial W}{\partial a} = \frac{\partial W}{\partial b} = \frac{\partial W}{\partial c} = \ldots\ldots\ldots\ \ldots = 0$$

ในทฤษฎีการแปรผันโดยตรง จะเลือกเซทของฟังก์ชั่น $\{\phi_i\}$ และฟังก์ชั่นที่ทดลองใช้แทนฟังก์ชั่นคลื่น จะอยู่ในรูป

$$\psi = c_1\phi_1 + c_2\phi_2 + \ldots = \sum_{n=1}^{N} c_n\phi_n$$

ซึ่ง W จะมีค่าน้อยที่สุด เมื่อ

$$\begin{vmatrix} H_{11}-S_{11}W & H_{12}-S_{12}W \cdots\cdots H_{1N}-S_{1N}W \\ & \\ H_{N1}-S_{N1}W\ldots\ldots & H_{NN}-S_{NN}W \end{vmatrix} = 0$$

เมื่อ

$$H_{ij} = \langle i|\hat{H}|j\rangle = \int \phi_i^* \hat{H} \phi_j d\tau$$

$$S_{ij} = \langle i|j\rangle = \int \phi_i^* \phi_j d\tau$$

ราก $W_0, W_1, \ldots\ldots\ldots W_N$ เป็นขอบเขตบนของ $E_0, E_1, \ldots\ldots\ldots E_N$ ตามลำดับ โดยที E_N เป็นค่าไอเกนต่ำสุดของ $\hat{H}$

ตัวอย่างที่ 9.10 สมมุติว่าฟังก์ชั่นคลื่นต่ำสุดของฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์อย่างง่าย สามารถแทนได้ด้วย $U_0 = N\exp(-cx^2)$ จงอาศัยวิธีการแปรผันหาค่า c และจงคำนวณระดับพลังงานของฟังก์ชั่นคลื่นนี้ด้วย

วิธีทำ จากการนอร์มอลไลซ์

$$\int_{-\infty}^{+\infty} N^2 e^{-2cx^2}dx = N^2\sqrt{\frac{\pi}{2c}} = 1$$

$$N^2 = \sqrt{\frac{2c}{\pi}}$$

สำหรับฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{1}{2}kx^2$$

ปริมาณ W หาได้จาก

$$\begin{aligned}
W &= \int_{-\infty}^{+\infty} U_0^{*}\hat{H}\,U_0\,dx \\
&= \sqrt{\frac{2c}{\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-cx^2}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{k}{2}x^2\right]e^{-cx^2}dx \\
&= \sqrt{\frac{2c}{\pi}}\left[\left(\frac{k}{2}-\frac{2\hbar^2c^2}{m}\right)\int_{-\infty}^{+\infty}x^2e^{-2cx^2}dx+\frac{c\hbar^2}{m}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-2cx^2}dx\right]
\end{aligned}$$

เพราะว่า

$$\frac{d^2}{dx^2}\left(e^{-ex^2}\right) = \left(4e^2x^2-2e\right)e^{-ex^2}$$

จากตาราง

$$\int_0^{\infty} x^{2n}e^{-ax}dx = \frac{1.3.5....(2n-1)}{2^{n+1}a^n}\sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

ดังนั้น

$$\begin{aligned}
W &= \sqrt{\frac{2c}{\pi}}\left[\left(\frac{k}{2}-\frac{2\hbar^2c^2}{m}\right)\frac{1}{4c}\sqrt{\frac{\pi}{2c}}+\frac{c\hbar^2}{m}\sqrt{\frac{\pi}{2c}}\right] \\
&= \frac{k}{8c}+\frac{c\hbar^2}{2m}
\end{aligned}$$

หาค่าที่น้อยที่สุด ของ W

$$\frac{dW}{dc} = -\frac{k}{8c^2}+\frac{\hbar^2}{2m} = 0$$

ดังนั้น ค่าที่ดีที่สุดของ c คือ

$$c^2 = \frac{km}{4\hbar^2} \qquad \text{หรือ} \qquad c = \frac{\pi}{h}\sqrt{km} = \frac{\alpha}{2}$$

จากวิธีแปรผันจะได้

$$U_0 = \left(\frac{2c}{\pi}\right)^{1/4} e^{-cx^2} = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\alpha x^2/2}$$

ซึ่งเป็นค่าที่แท้จริงของฟังก์ชั่นคลื่น ของระดับพื้นฐานเนื่องจากการเลือก U_0 ใกล้กับฟังก์ชั่นคลื่นที่แท้จริง

ระดับพลังงานของ U_0 คือ

$$W = \frac{k}{8\pi}\frac{h}{\sqrt{km}} + \frac{\pi}{h}\sqrt{km}\frac{\hbar^2}{2m}$$

$$= \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{m}}\left(\frac{h}{2}\right)$$

$$= \frac{h}{2}\left(\frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{m}}\right)$$

$$= \frac{h\upsilon_0}{2}$$

ตัวอย่างที่9.11 สมมุติว่า ฟังก์ชั่นคลื่นระดับ 1*s* ของอะตอมไฮโดรเจนสามารถแทนได้ด้วยฟังก์ชั่น Ae^{-er^2} จงหา A จากภาวะการนอร์มอลไลซ์ และใช้วิธีแปรผันหาค่าพารามิเตอร์ c ความคลาดเคลื่อนของพลังงานจากการคำนวณโดยวิธีนี้มีค่าเท่าใด

วิธีทำ จากการนอร์มอลไลซ์

$$\int_0^\infty A^2 e^{-2cr^2} r^2 dr = 1$$

จากตาราง

$$\int_0^\infty x^2 e^{-ax^2} dx = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{\pi}{a^3}}$$

หรือ

$$A^2\int_0^\infty e^{-2er^2} r \; dr = \frac{A^2}{4}\sqrt{\frac{\pi}{8c^3}} = 1$$

หาค่าพลังงาน

$$W = \int_0^\infty \psi^*\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 - \frac{e^2}{(4\pi\varepsilon_0)r}\right]\psi r^2 dr$$

เนื่องจาก ψ ไม่ขึ้นกับมุม θ และ ϕ ขึ้นกับ r อย่างเดียว

$$W = A^2\int_0^\infty e^{-cr^2}\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(-6ce^{-cr^2}+4c^2r^2e^{-cr^2}\right)-\frac{e^2}{(4\pi\varepsilon_0)r}\right]e^{-cr^2}r^2dr$$

$$= \frac{3A^2c\hbar^2}{\mu}\int_0^\infty e^{-2cr^2}r^2dr-\frac{2A^2c^2\hbar^2}{\mu}\int_0^\infty e^{-2cr^2}r^4dr-\frac{A^2c^2}{(4\pi\varepsilon_0)}\int_0^\infty e^{-2cr^2}rdr$$

เนื่องจาก

$$A^2\int_0^\infty e^{-2cr^2}r^4dr = 8\sqrt{\frac{2c^3}{\pi}}\left(\frac{3c}{32}\sqrt{\frac{\pi}{2c^3}}\right)=\frac{3}{4c}$$

$$A^2\int_0^\infty e^{-2cr^2}rdr = \frac{1}{4c}\left(8\sqrt{\frac{2c^3}{\pi}}\right)=\frac{2}{c}\sqrt{\frac{2c^3}{\pi}}$$

ดังนั้น

$$W = \frac{3c\hbar^2}{\mu}-\frac{2c^2\hbar^2}{\mu}\left(\frac{3}{4c}\right)-\frac{e^2}{(4\pi\varepsilon_0)}\left(\frac{2}{c}\sqrt{\frac{2c^3}{\pi}}\right)$$

$$= \frac{3c\hbar^2}{2\mu}-\frac{2e^2}{(4\pi\varepsilon_0)}\sqrt{\frac{2c}{\pi}}$$

หาค่า W น้อยที่สุด

$$\frac{dW}{dc} = \frac{3\hbar^2}{2\mu}-\frac{e^2}{(4\pi\varepsilon_0)}\sqrt{\frac{2}{\pi c}}=0$$

และ

$$c = \frac{8}{9}\left[\frac{e^4\mu^2}{(4\pi\varepsilon_0)^2\pi\hbar^4}\right]$$

แทนค่า c จะได้

$$W = -\frac{8}{3\pi}\left[\frac{\mu e^4}{2\hbar^2\ (4\pi\varepsilon_0)}\right]_I$$

$$= -0.848\left[\frac{\mu e^4}{2\hbar^2(4\pi\varepsilon_0)^2}\right]$$

เนื่องจาก ค่าที่แท้จริงของพลังงานของระดับพื้นฐาน คือ

$$-\left[\frac{\mu e^4}{2\hbar^2(4\pi\varepsilon_0)^2}\right]$$

ดังนั้น วิธีการแปรผัน ให้ค่าพลังงานคลาดเคลื่อนจากค่าแท้จริง 15.2 %

ตัวอย่างที่ 9.12 อนุภาคอยู่ในกล่อง 1 มิติ ให้ $V = 0$ เมื่อ $-1 \le x \le +1$ และ $V = \infty$ เมื่อ x มีค่าอื่น จงอาศัยวิธีการแปรผัน โดยใช้ $f_1 = (1 - x^2)$ และ $f_2 = (1 - x^4)$ สร้างฟังก์ชั่น U โดยที่

$$U = c_1 f_1 + c_2 f_2$$

ก) จงคำนวณพลังงานของฟังก์ชั่น นี้และเปรียบเทียบกับค่าแท้จริง

ข) จงหาค่าดีที่สุดของ c_1 และ c_2

วิธีทำ ก) ค่าดีที่สุดของ c_1 และ c_2 จะเกิดขึ้น เมื่อ

$$\begin{vmatrix} H_{11} - S_{11}W & H_{12} - S_{12}W \\ H_{21} - S_{21}W & H_{22} - S_{22}W \end{vmatrix} = 0$$

โดยที่

$$\mathrm{H},, = \int_{-1}^{+1} (1 - x^2)\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\right](1 - x^2)dx$$

$$= \frac{\hbar^2}{m}\int_{-1}^{+1}(1 - x^2)dx$$

$$= \frac{4\hbar^2}{3m}$$

$$H_{22} = \int_{-1}^{+1}(1 - x^4)\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\right](1 - x^4)dx$$

$$= \frac{6\hbar^2}{m}\int_{-1}^{+1}(1 - x^4)x^2 dx$$

$$= \frac{16\hbar^2}{7m}$$

$$H_{12} = H_{21} = \int_{-1}^{+1}(1 - x^4)\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\right](1 - x^2)dx$$

$$= \frac{\hbar^2}{m}\int_{-1}^{+1}(1 - x^4)dx$$

$$= \frac{8\hbar^2}{5m}$$

$$S_{11} = \int_{-1}^{+1}(1 - x^2)^2 dx$$

$$= \frac{16}{15}$$

$$S_{22} = \int_{-1}^{+1}(1 - x^4)^2 dx$$

$$= \frac{64}{45}$$

$$S_{12} = S_{21} = \int_{-1}^{+1} (1 - x^2)(1 - x^4)\,dx$$

$$= \frac{128}{105}$$

กำหนดให้ $W' = Wm/\hbar^2$

$$\begin{vmatrix} \left(\frac{4}{3} - \frac{16}{15}W'\right) & \left(\frac{8}{5} - \frac{128}{105}W'\right) \\ \left(\frac{8}{5} - \frac{128}{105}W'\right) & \left(\frac{16}{7} - \frac{64}{45}W'\right) \end{vmatrix} = 0$$

$$(W')^2 - 14W' + 15.75 = 0$$

จะได้ $W' = 1.23, 12.77$

ค่าไอเกน คือ

$$W_3 = 12.77\hbar^2/m \quad \text{และ} \quad W_1 = 1.23\hbar^2/m$$

ค่าแท้จริง คือ

$$\mathrm{E}_3 = 11.10\hbar^2/m \quad \text{และ} \quad \mathrm{E}_1 = 1.23\hbar^2/m$$

เนื่องจาก f_1 และ f_2 เป็นฟังก์ชั่นคู่ ดังนั้นฟังก์ชั่นคลื่นที่เป็นชนิดคู่เท่านั้น ที่มีผลต่อค่าไอเกน

ข) หาค่าไอเกนเวกเตอร์

$$\left(\frac{4}{3} - \frac{16}{15}W'\right)c_{1n} + \left(\frac{8}{5} - \frac{128}{105}W'\right)c_{2n} = 0$$

$W_1' = 1.23$: $[1.3333 - 1.0666(1.23)]c_{11} + [1.6 - 1.2191(1.23)]c_{21} = 0$

ดังนั้น

$$U_1 = c_{11}[(1 - x^2) - 0.2118(1 - x^4)]$$

หาคา c_{11} ได้จากการนอร์มอลไลซ์

$$\int U_1^* U_1\,dv = 1$$

$$c_{11}^2 [S_{11} - 2(0.2118)S_{12} + 0.0449\ S_{22}] = 1$$

$$c_{11}^2(0.6141) = 1$$

$$c_{11} = 1.276$$

$$U_1 = 1.276(1 - x^2) - 0.2703(1 - x^4)$$

W_3' : 12.77 : $[1.3333 - 10666\,(12.77)]c_{13} + [1.6 - 1.2191\,(12.77)]c_{23} = 0$

$$c_{23} = -0.8798c_{13}$$

$$U_3 = c_{13}\left[\left(1 - x^2\right) - 0.8798\left(1 - x^4\right)\right]$$

จากการนอร์มอลไลซ์

$$\int U_3^* U_3 \, dv = 1$$

$$c_{13}^2\left[S_{11} - 2(0.8798)S_{12} + 0.778 S_{22}\right] = 1$$

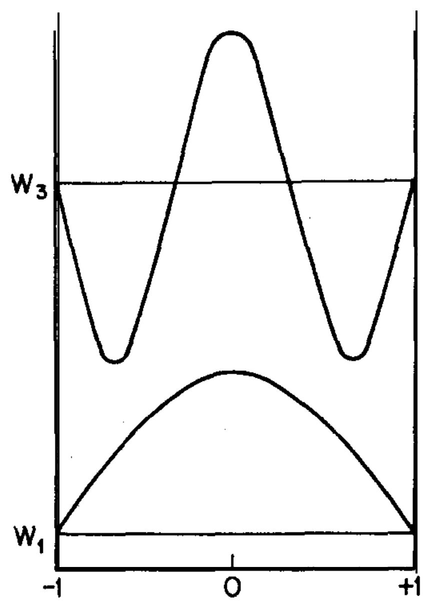
$$c_{13}^2\,(0.0228) = 1$$

$$c_{13} = 6.6625$$

และ

$$U_3 = 6.6625\left(1 - x^2\right) - 5.8285\left(1 - x^4\right)$$

ฟังก์ชั่นคลื่นโดยประมาณนี้ แสดงได้ดังรูป



ตัวอย่างที่ 9.13 พิจารณาฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์อย่างง่าย

$$\hat{H}^0 = \frac{\hat{p}^2}{2\mu} + \frac{1}{2}kx^2$$

ซึ่งถูกรบกวนโดยศักย์ ax^4 เมื่อ $ax^4 << \hat{H}^0$ สมมุติว่า ฟังก์ชั่นคลื่นของสเตทพื้นฐานสามารถเขียนได้ เป็น

$$U_0 = c_0 U_0^0 + c_2 U_2^0$$

เมื่อ U_0^0 และ U_2^0 เป็นฟังก์ชั่นคลื่นชนิดคู่ของออสซิลเลเตอร์ที่ไม่ถูกรบกวน จงอาศัยการนอร์มอลไลซ์ และวิธีการแปรผันหาค่าดีที่สุดของ c_0 และ c_2 และจงคำนวณพลังงานของสเตทพื้นฐาน ของออสซิลเลเตอร์ที่ถูกรบกวนนี้

วิธีทำ

จากการนอร์มอลไลซ์ และ เนื่องจาก U_0^0 และ U_2^0 เป็น ออโทนอร์มอล

$$\int \left| c_0 U_0^0 + c_2 U_2^0 \right|^2 dx = 1$$

$$c_0^2 + c_2^2 = 1$$

หรือ

$$c_0 = \pm\sqrt{1 - c_2^2}$$

เมื่อ c_0 และ c_2 เป็นค่าคงที่ชนิดจริง

กำหนดให้ $c_0 = \cos\beta$ และ $c_2 = \sin\beta$

ดังนั้น $U_0 = \cos\beta U_0^0 + \sin\beta U_2^0$

ซึ่ง U_0 ถูกนอร์มอลไลซ์ แล้ว

ในที่นี้ $\hat{H} = \hat{H}^0 + ax^4$

$$W = \int_{-\infty}^{+\infty} U_0^* \hat{H}\, U_0\, dx$$

$$= \{\cos\beta < 0| + \sin\beta < 2|\}\hat{H}\,\{\cos\beta |0> + \sin\beta |2>\}$$

$$= \cos^2\beta < 0|\hat{H}|0> + 2\sin\beta\cos\beta < 0|\hat{H}|2> + \sin^2\beta < 2|\hat{H}|2>$$

เนื่องจาก

$$< n|x^4|n > = \frac{3}{2\alpha^2}\left(n^2 + n + \frac{1}{2}\right)$$

$$< n|x^4|n-2 > = \frac{(2n-1)\sqrt{n(n-1)}}{2\alpha^2}$$

ดังนั้น

$$< 0|\hat{\mathrm{H}}|0 > \quad = \frac{h\upsilon_0}{2} + \mathrm{a} < 0|x^4|0 >$$

$$= \frac{h\upsilon_0}{2} + \frac{3}{4}\frac{a}{\alpha^2}$$

$$< 0|\hat{\mathrm{H}}|2 > \quad = a < 0|x^4|2 >$$

$$\frac{a}{2}\frac{3\sqrt{2}}{\alpha^2}$$

$$< 2|\hat{\mathrm{H}}|2 > \quad = \frac{5}{2}h\upsilon_0 + a < 2|x^4|2 >$$

$$= \frac{5}{2}h\upsilon_0 + \frac{39}{4}\frac{a}{\alpha^2}$$

และ

$$W = \cos^2\beta\left(\frac{h\upsilon_0}{2} + \frac{3}{4}\frac{a}{\alpha^2}\right) + 2\sin\beta\cos\beta\left(\frac{3\sqrt{2}}{2}\frac{a}{\alpha^2}\right) + \sin^2\beta\left(\frac{5}{2}h\upsilon_0 + \frac{39}{4}\frac{a}{\alpha^2}\right)$$

$$= \left(\frac{h\upsilon_0}{2} + \frac{3a}{4\alpha^2}\right) + \sin 2\beta\left(\frac{3\sqrt{2}}{2}\frac{a}{\alpha^2}\right) + \sin^2\beta\left(\frac{5}{2}h\upsilon_0 + \frac{39}{4}\frac{a}{\alpha^2}\right)$$

ทำให้ W มีค่าน้อย เมื่อเทียบกับ β จะได้

$$\frac{\partial W}{\partial\beta} = 0 = 2\cos 2\beta\left(\frac{3\sqrt{2}}{2}\frac{a}{\alpha^2}\right) + 2\sin\ \beta\cos\beta\left(2h\upsilon_0 + \frac{9a}{\alpha^2}\right)$$

เนื่องจาก $\beta \ll 1$

$$0 = \frac{3\sqrt{2}}{2}\frac{a}{\alpha^2} + \beta\left(2h\upsilon_0 + \frac{9a}{\alpha^2}\right)$$

หรือ $$\beta = -\frac{3\sqrt{2}}{4h\upsilon_0}\left(\frac{a}{\alpha^2}\right); \cos\beta \cong 1, \sin\beta \cong \beta$$

และ $$\frac{a}{\alpha^2} \ll 1$$

ดังนั้น ในช่วงที่ a มีค่าน้อย ฟังก์ชั่นคลื่นที่ดีที่สุด คือ

$$U_0 = U_0^0 - \frac{3\sqrt{2}}{4h\upsilon_0}\left(\frac{a}{\alpha^2}\right)U_2^0$$

พลังงานของสเตทพื้นฐานโดยประมาณ คือ

$$W = \left(\frac{h\upsilon_0}{2} + \frac{3}{4}\frac{a}{\alpha^2}\right) - \frac{3\sqrt{2}}{2h\upsilon_0}\left(\frac{a}{\alpha^2}\right)\frac{3\sqrt{2}}{2}\left(\frac{a}{\alpha^2}\right) + \left(\frac{3\sqrt{2}}{4h\upsilon_0}\ \frac{a}{\alpha^2}\right)^2\left(2h\upsilon_0 + \frac{9a}{\alpha^2}\right)$$

$$\cong \frac{h\upsilon_0}{2} + \frac{3}{4}\left(\frac{a}{\alpha^2}\right) + \frac{9}{4h\upsilon_0}\left(\frac{a}{\alpha^2}\right)^2 + \ldots$$

ตัวอย่างที่ 9.14 ให้สนามไฟฟ้าความเข้ม $\mathcal{E}$ แต่ฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์ ดังนั้น

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2 - e\,\mathcal{E}\,x$$

ให้คิดว่าเทอม $-e\,\mathcal{E}\,x$ เป็นการรบกวนระบบจงคำนวณการเปลี่ยนแปลงของระดับพลังงานถึงลำดับที่สองโดยวิธีการรบกวน และโดยวิธีการคำนวณโดยตรง และจงเปรียบเทียบผลลัพธ์ที่ได้จากทั้งสองวิธี

วิธีทำ **คำตอบโดยตรง**

เรามี $$H\psi_n = E_n\psi_n$$

$$\left[\frac{p^{\prime}}{2m} + \frac{1}{2}kx^2 - e\varepsilon x\right]\psi_n = E_n\psi_n$$

หรือ $$\left[\frac{p^2}{2m} + \frac{k}{2}\left(x^2 \frac{e^2 2\hat{e}\varepsilon x}{k} + \frac{e^2\varepsilon^2}{k^2} - \quad k^2 - \right)\right]\psi_n = E_n\psi_n$$

$$\left[\frac{p^2}{2m} + \frac{k}{2}\left(x - \frac{e\varepsilon}{k}\right)^2 - \frac{e^2\varepsilon^2}{k^2}\right]\psi_n = E_n\psi_n$$

ให้ $$x' = x - \frac{e\varepsilon}{k} \Rightarrow \left[\frac{p'^2}{2m} + \frac{1}{2}kx'^2\right]\psi_n = \left(E_n + \frac{e^2\varepsilon^2}{2k}\right)\psi_n$$

ซึ่งก็สมการของฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์ ดังนั้น

$$E_n + \frac{e^2\varepsilon^2}{2k} = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\sqrt{\frac{k}{m}}$$

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\sqrt{\frac{k}{m}} - \frac{e^2\varepsilon^2}{2k}$$

วิธีการรบกวนระบบ

$$E_n = E_n^0 + \langle n|H'|n\rangle + \sum_{m\neq n}\frac{|\langle n|H'|m\rangle|^2}{E_n^0 - E_m^0} + \ldots$$

เมื่อ $H = H_0 + H'$ โดยที่ $H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2, H' = -eEx$

จากคุณสมบัติของฟังก์ชั่นคลื่นของฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์

จะได้

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\,\psi_n^{0*}\psi_n^0 = 0$$

และ

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\psi_n^{0*}\psi_{n+1}^0 = \int_{-\infty}^{\infty} dx\psi_{n+1}^{0*}\psi_n^0 = \left(\frac{\hbar}{km}\right)^{1/4}\sqrt{\frac{n+1}{2}}$$

ดังนั้น $\langle n|-e\varepsilon x|n\rangle = 0$ และเราจะต้องใช้รบกวนระบบถึงลำดับที่สองจึงจะสังเกตเห็นสตาร์กเอฟเฟ็คของระบบนี้ได้

$$E_n = E_n^0 + \sum_{m\neq n}\frac{|\langle n|H'|m\rangle|}{E_n^0 - E_{n-1}^0}$$

$$= E_n^0 + \frac{|\langle n|H'|n+1\rangle|^2}{E_n^0 - E_{n+1}^0} + \frac{|\langle n|H'|n-1\rangle|^2}{E_n^0 - E_{n-1}^0}$$

$$= E_n^0 + e^2E^2\left(\frac{\hbar^2}{km}\right)^{1/2}\frac{1}{\hbar}\sqrt{\frac{m}{k}}\left[\frac{(n+1)/2}{n-(n+1)} + \frac{n/2}{n-(n-1)}\right]$$

$$= E_n^0 - \frac{e^2E^2}{2k}$$

เมื่อเปรียบเทียบกับผลลัพธ์จากการคำนวณโดยตรง จะเห็นได้ว่าการแก้เพียงลำดับที่หนึ่งก็ให้ค่าตรงกับการคำนวณโดยตรง

ตัวอย่างที่ 9.15 อะตอมคล้ายอะตอมไฮโดรเจนมีประจุ Ze กระจายอย่างสม่ำเสมอภายในนิวเคลียสซึ่งเป็นรูปทรงกลมรัศมี R ให้คิดว่าพลังงานที่รบกวนระบบ คือผลต่างของพลังงานศักย์ของระบบกับพลังงานศักย์คูลอมบ์ จงหา ΔE ของระดับ $1s$ โดยใช้ทฤษฎีการรบกวนลำดับที่ 1

วิธีทำ

จากกฎของเกาส์สำหรับประจุ Ze ที่กระจายภายในทรงกลมรัศมี R จะได้

$$\int \vec{E} \cdot d\vec{S} = 4\pi q$$

$$r > R : E(r) = \frac{Ze}{r^2}, V(r) = \frac{-Ze^2}{r}$$

$$r < R : E(r) = \frac{Ze}{R^3} r, V(r) = \frac{-Ze^2}{R}\left[\frac{3}{2} - \frac{1}{2}\left(\frac{r}{R}\right)^2\right]$$

แฮมมิลโทเนียน คือ $H = H_0 + H'$ เมื่อ

$$H_0 = \frac{\vec{p} \cdot \vec{p}}{2m} - \frac{Ze^2}{r}$$

และ $H' = 0 \qquad r > R$

$$H' = \frac{-Ze^2}{R}\left[-\frac{R}{r} + \frac{3}{2} - \frac{1}{2}\left(\frac{r}{R}\right)^2\right] \qquad r < R$$

ระดับ $1s$ ของอะตอมคล้ายอะตอมไฮโดรเจนเป็นที่ระดับไม่แยกตัว เราสามารถใช้ทฤษฎีระบบกวนคำนวณค่าแก้ของพลังงาน

$$\Delta E_{1s} = \frac{-Ze^2}{R}\int_0^R r^2 dr \int d\Omega \psi_{1s}^* \left[-\frac{R}{r} + \frac{3}{2} - \frac{1}{2}\left(\frac{r}{R}\right)^2\right]\psi_{1s}$$

เมื่อ $$\psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-\frac{z}{a_0}r} \qquad a, = \frac{\hbar^2}{me^2}$$

ดังนั้น $$\Delta E_{1s} = \frac{-4Ze^2}{R}\int_0^R r^2 dre^{-2\frac{z}{a_0}r}\left[-\frac{R}{r}+\frac{3}{2}-\frac{1}{2}\left(\frac{r}{R}\right)^2\right]$$

การอินทีเกรทรูปนี้จะใช้สูตรทั่วไปดังนี้

$$\int_0^R drr^n e^{-2\frac{z}{a_0}r} = e^{-2\frac{z}{a_0}r}\sum_{k=0}^{n}\frac{(-1)^k}{\left(-2\,z/a_0\right)^{k+1}}\frac{n!}{(n-k)!}r^{n-k}\Big|_0^R$$

ผลลัพธ์คือ

$$\Delta E_{1s} = \frac{-3}{2}\frac{Ze^2}{R}e^{-2\frac{z}{a_0}R}\left\{1+\frac{2}{\left(\frac{z}{a_0}R\right)^2}\right\}\frac{-3}{2}\frac{Ze^2}{R}\left\{1-\frac{2}{3}\frac{z}{a_0}R-\frac{1}{\left(\frac{z}{a_0}R\right)^2}\right\}$$

ค่านี้คือค่าแก้ของระดับ 1s เนื่องจากขนาดจำกัดของนิวเคลียส เนื่องจาก $\frac{}{a_0}R << 1$,การกระจาย $e^{-2\frac{z}{a_0}R}$ จะทำให้ได้พลังงานคำนวณถึงลำดับต่ำสุด

$$\Delta E_{1s} \cong \frac{2}{5}\frac{Ze^2}{R}\left(\frac{z}{a_0}R\right)^3$$

ตัวอย่างที่ 9.16 จงอาศัยทฤษฎีการรบกวนลำดับที่หนึ่งของคำนวณหาระดับพลังงานของอนุภาค ภายใต้ศักย์ $V(x) = a|x|, |x| < L$ และ $V(x) = \infty, x$ ค่าอื่น

วิธีทำ

$$H = H_0 + H'$$

เมื่อ $H_0 = \frac{p^2}{2m} + V_0$, $V_0 = 0$ เมื่อ , $|x| < L$

$= \infty$ x ค่าอื่น

$= \infty$

จาก $$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = \mathrm{E}\psi$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \alpha^2\psi = 0$$ เมื่อ $\alpha = \sqrt{\frac{2m\mathrm{E}}{\hbar^2}}$

สำหรับคำตอบคู่

$$\psi = A\cos\alpha x + B\sin\alpha x$$

เนื่องจากฟังก์ชั่นคลื่นเป็นศูนย์ที่ $x = \pm L$

$$\psi = A\cos\alpha x, \cos\alpha L = 0, \alpha L = \frac{n\pi}{2}, n = 1,3,5,\ldots$$

$$\mathrm{E} = \frac{\hbar^2}{2\mathrm{m}}\alpha^2 = \frac{\hbar^2 n^2\pi^2}{8mL^2}$$

$$\int_{-L}^{L} dx\,\psi^2 = A^2\int_{-L}^{L} dx\cos^2\alpha x = \frac{A^2}{2}\int_{-L}^{L} dx = A^2 L = 1$$

จะได้ $A = \frac{1}{\sqrt{L}}$

สำหรับคำตอบคี

$$\psi = \boldsymbol{B}\sin\alpha x, \sin\alpha L = 0, \alpha L = \frac{n\pi}{2}, n = 2,4,6,\ldots$$

$$\mathrm{E} = \frac{\hbar^2 n^2\pi^2}{8mL^2}, B = \frac{1}{\sqrt{L}}$$

คำตอบของระบบที่ไม่ถูกรบกวนคือ

$$E_n^0 = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{8mL^2} \qquad n = 1,2,3,..$$

$$\psi_n^0 = \frac{1}{\sqrt{L}} \frac{\cos}{\sin} \frac{n\pi x}{2L} \ .$$

การรบกวนพลังงาน คือ

$$H'_{nn} = \int_{-L}^{L} dx \psi_n^{0*} H' \psi_n^0 = \frac{a}{L} \int_{-L}^{L} dx|x| \frac{\cos^2}{\sin^2} \frac{n\pi x}{2L} = \frac{2a}{L} \int_0^L dx x \frac{\cos^2}{\sin^2} \frac{n\pi x}{2L}$$

$$= \frac{a}{L} \int_0^L dx x \left(1 \pm \cos \frac{n\pi x}{L}\right) = \frac{a}{L} \frac{L^2}{2} + \frac{a}{L} \int_0^L dx x \cos \frac{n\pi x}{L}$$

$$= \frac{aL}{2} \pm \frac{a}{L} \left[\frac{x \sin \frac{n\pi x}{L}}{\left(\frac{n\pi}{L}\right)} + \frac{\cos \frac{n\pi x}{L}}{\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2} \right]_0^L$$

$$= \frac{aL}{2} \pm \frac{a}{L} \left[\frac{\cos \ n\pi x - 1}{\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2} \right]$$ สำหรับ n เลขคู่

$$= \frac{aL}{2}$$

$$= \frac{aL}{2} - \frac{a}{L} \frac{2}{\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2}$$ สำหรับ n เลขคี่ $= a \ L \left[\frac{1}{2} - \frac{2}{n^2\pi^2}\right]$

ผลลัพธ์สุดท้ายของระดับพลังงาน คือ

$$E_n^0 = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{8mL^2} + \frac{aL}{2}$$ สำหรับ n เลขคู่

$$= \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{8mL^2} + aL\left[\frac{1}{2} - \frac{2}{n^2\pi^2}\right]$$ สำหรับ n เลขคี่

ใช้ทฤษฎีการรบกวน ถ้า $H'_{nn} << E_n - E_{n-1}$ เมื่อ n มีค่ามากจะได้

$$\frac{aL}{2} << \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2 \quad \hbar^2 (n-1)^2 \pi^2}{8mL^2 \qquad 8mL^2}$$

$$\frac{aL}{2} << \frac{\hbar^2 n \pi^2}{4mL^2}$$

ตัวอย่างที่ 9.17 ระบบควอนตัมประกอบด้วย 3 สเตท เมื่อถูกรบกวนโดยแฮมมิลโทเนียนต่อไปนี้

$$<H> = \begin{bmatrix} E_1^0 & 0 & a \\ 0 & E_1^0 & b \\ a^* & b^* & E_2^0 \end{bmatrix} \quad \text{เมื่อ } E_2^0 > E_1^0$$

ปริมาณ a และ b เป็นตัวรบกวนที่มีขนาดใกล้เคียงกัน และมีค่าน้อยเมื่อเปรียบเทียบกับ $E_2^0 - E_1^0$

ก) จงหาค่าไอเกนที่แท้จริง (หาโดยตรง)

ข) จงหาค่าไอเกนโดยใช้ทฤษฎีการรบกวนลำดับศูนย์ และเปรียบเทียบผลลัพธ์ที่ได้

วิธีทำ

แฮมมิลโทเนียนที่โจทย์กำหนดสามารถเขียนเป็นเมทริกซ์ 2 อัน

$$<H> \quad = <H_0> + <H'>$$

$$<H_0> \quad = \begin{bmatrix} E_1^0 & 0 & 0 \\ 0 & E_1^0 & 0 \\ 0 & 0 & E_2^0 \end{bmatrix} \quad \text{เมื่อ} \quad \begin{matrix} E_1^0 < E_2^0 \\ H_0\psi_{11}^0 = E_1^0\psi_{11}^0 \\ H_0\psi_{21}^0 = E_2^0\psi_{211}^0 \\ H_0\psi_{12}^0 = E_1^0\psi_{12}^0 \end{matrix}$$

และเมทริกซ์รบกวน

$$<H'> \quad = \begin{vmatrix} 0 & 0 & a \\ 0 & 0 & b \\ a^* & b^* & 0 \end{vmatrix} \quad a,b \text{ มีค่าน้อยเมื่อเทียบกับ } E_2^0 - E_1^0$$

ค่าแก้ของพลังงานถึงลำดับหนึ่งจะเป็นศูนย์จึงต้องแก้ค่าถึงลำดับที่สอง

หาค่าที่แท้จริงโดยวิธีการโดยตรงก่อน

ก)

$$\det\begin{vmatrix} E_1^0-\lambda & 0 & \boldsymbol{a} \\ 0 & E_1^0-\lambda & \boldsymbol{b} \\ a^* & b^* & E_2^0-\lambda \end{vmatrix} = \boldsymbol{0}$$

$$(E_1^0-\lambda)\{(E_1^0-\lambda)(E_2^0-\lambda)-|b|^2-|a|^2\}=0$$

ดังนั้น

$$E_{11}=\lambda_0=E_1^0, \lambda_\pm=\frac{1}{2}(E_1^0+E_2^0)\pm\sqrt{(E_1^0+E_2^0)^2-4E_1^0E_2^0+4(|a|^2+|b|^2)}$$
$$=\frac{1}{2}(E_1^0+E_2^0)\pm\sqrt{(E_1^0-E_2^0)^2+4(|a|^2+|b|^2)}$$

เปรียบเทียบกับการรบกวน เรากระจาย $\lambda_\pm$ ถึงลำดับที่หนึ่ง $|a|^2+|b|^2$

$$E_{12}=\lambda_+\cong E_1^0+\frac{|a|^2+|b|^2}{E_1^0-E_2^0}$$ เพราะว่า เมื่อ $a,b\to 0, \lambda_+\to E_1^0$

$\lambda_-\to E_1^0$

$$E_{21}=\lambda_-\cong E_1^0-\frac{|a|^2+|b|^2}{E_1^0-E_2^0}$$

ข) ในการแก้ลำดับสอง

$$\sum_{m\neq n,\ell}\sum_{k'}\langle nq|H'|m\ell\rangle\langle m\ell|H'|nk'\rangle=B_{kq}E_{nk}^{(2)}$$

สำหรับ $B_{kk'}$ และ E_{nk}^2

สำหรับ $n=2$ จะไม่มีการแตกตัว ดังนั้น $B=1$ และผลลัพธ์ คือ

$$E_{21}^{(2)}=\frac{\langle 21|H'|11\rangle\langle 11|H'|21\rangle}{E_2^0-E_1^0}+\frac{\langle 21|H'|12\rangle\langle 12|H'|21\rangle}{E_2^0-E_1^0}$$
$$=\frac{a'a}{E_2^0-E_1^0}+\frac{b'b}{E_2^0-E_1^0}=\frac{|a|^2+|b|^2}{E_2^0-E_1^0}$$

$$E_{11}^{(2)}B_{11} = \sum_{k'} B_{1k'} \sum_{m\neq 1,\ell} \frac{\langle 11|H'|m\ell\rangle\langle m\ell|H'|k'\rangle}{E_1^0 - E_m^0}$$

$$= \sum_{k'} B_{1k'} \frac{\langle 11|H'|21\rangle\langle 21|H'|k'\rangle}{E_1^0 - E_2^0}$$

$$= B_{11}\frac{\langle 11|H'|21\rangle\langle 21|H'|11\rangle}{E_1^0 - E_2^0} + \frac{(1\,1|H'|21\rangle\langle 21|H'|12\rangle}{E_1^0 - E_2^0}$$

$$= B_{11}\frac{|a|^2}{E_1^0 - E_2^0} + B_{12}\frac{ab^*}{E_1^0 - E_2^0}\ .$$

เช่นเดียวกัน สำหรับ $q = 2$

$$E_{11}^{(2)}B_{12} = B_{11}\frac{\langle 12|H'|21\rangle\langle 21|H'|11\rangle}{E_1^0 - E_2^0} + \frac{\langle 12|H'|21\rangle\langle 21|H'|12\rangle}{E_1^0 - E_2^0}$$

$$= B_{11}\frac{ba^*}{E_1^0 - E_2^0} + B_{12}\frac{|b|^2}{E_1^0 - E_2^0}$$

สมการเหล่านี้ สามารถเขียนในรูปเมทริกซ์ ได้ดังนี้

$$E_{11}^2\begin{pmatrix} B_{11} \\ B_{12} \end{pmatrix} = \frac{1}{E_1^0 - E_2^0}\begin{bmatrix} |a|^2 - \lambda & ab^* \\ a^*b & |b|^2 - \lambda \end{bmatrix}\begin{pmatrix} B_{11} \\ B_{12} \end{pmatrix}$$

และ พลังงานถึงลำดับสอง ก็คือ

$$\det\begin{vmatrix} |a|^2 - \lambda & ab^* \\ a^*b & |b|^2 - \lambda \end{vmatrix} = 0$$

$$\left(|a|^2 - \lambda\right)\left(|b|^2 \quad \lambda\right) - |a|^2|b|^2 = 0$$

$$\lambda^2 - \lambda\left(|a|^2 + |b|^2\right) = 0$$

ดังนั้น $\lambda = 0,\ \lambda = |a|^2 + |b|^2$

จะได้ $E_{11} = E_1^0$

$$E_{12} = E_1^0 + \frac{|a|^2 + |b|^2}{E_1^0 - E_2^0}$$

และจากข้างบน $E_{21} = E_2^0 + \dfrac{|a|^2 + |b|^2}{E_1^0 - E_2^0}$

ดังนั้น ผลลัพธ์จากทฤษฎีการรบกวนถึงลำดับที่สองมีค่าตรงกับผลลัพธ์จากการคำนวณโดยตรง

ตัวอย่างที่ 9.18 จงคำนวณการเปลี่ยนแปลงของพลังงานคำนวณถึงลำดับที่ 1 ของฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์ชนิดแอนฮาร์มอนิก

$$U(r) = \frac{M\omega^2}{2} x^2 + \varepsilon_1 x^3 + \varepsilon_2 x^4$$

วิธีทำ

$$\therefore H = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + U(r)$$

$$H = H_0 + H' = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{M\omega^2}{2} x^2 + \varepsilon_1 x^3 + \varepsilon_2 x^4$$

ให้ ε_1 และ ε_2 เป็นค่าคงที่มีค่าน้อย

ถ้า $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$

ใช้ $H' = \varepsilon_1 x^3 + \varepsilon_2 x^4$

$$\therefore H'_{nn} = \varepsilon_1 \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n x^3 \psi_n dx + \varepsilon_2 \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n x^4 \psi_n dx$$

$\psi_n \rightarrow n$ ฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์ไอเกนฟังก์ชั่น

x^3 เป็นฟังก์ชั่นเพิ่ม และ ψ_n^2 เป็นฟังก์ชั่นลด

$$\therefore H'_{nn} = \varepsilon_2 \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n x^4 \psi_n dx$$

พิจารณา

$$< x^4 >_n = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* x^4 \psi_n dx = x_0^5 \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \xi^4 \psi_n d\xi \qquad \text{ถ้า } x = \xi x_0$$

$$\therefore dx = x_0 d\xi$$

$$\xi^2 \psi_n = \xi(\xi\psi_n) = \frac{1}{2}\sqrt{n(n-1)}\psi_{n-2} + \left(n + \frac{1}{2}\right)\psi_n + \frac{1}{2}\sqrt{(n+1)(n+2)}\psi_{n+2}$$

$$\therefore \xi^4 \psi_n = \xi^2(\xi^2\psi_n) = \frac{1}{4}\sqrt{n(n-1)(n-2)(n-3)}\psi_{n-4} \frac{1}{2}\sqrt{n(n-1)^3}\psi_{n-2}$$
$$+ \frac{3}{4}(2n^2 + 2n + 1)\psi_n + \overline{(n+1)(n+2)(n+3)^2}\psi_{n+2}$$
$$+ \frac{1}{4}\overline{n+1 \;\; n+2 \;\; n+3 \;\; n+4)}\psi_{n+4}$$

$$\therefore \langle x^4 \rangle_n = \frac{3}{4}x_0^4\left(2n^2+2n+1\right) = \frac{3}{4}x_0^4\left(2n^2+2n+1\right)\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n\psi_n dx$$

เมื่อ $\quad x_0^2 = \dfrac{\hbar}{m\omega}$

พลังงานระดับ $E_n^{(0)}$ คือ

$$H'_{nn} = \frac{3}{4}\varepsilon_2 x_0^4\left(2n^2+2n+1\right)$$

ลำดับที่ 1 ของฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์

$$E_n = E_n^{(0)} + H'_{nn} = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega + \frac{3}{4}\varepsilon_2 x_0^4\left(2n^2+2n+1\right)$$

ตัวอย่างที่ 9.19 จงอาศัยวิธีการเปลี่ยนตัวแปรหาค่าพลังงานพื้นฐานของอนุภาคซึ่งอยู่ภายใต้ศักย์ต่อไปนี้

$$V(z) = \infty, z < 0$$
$$V(z) = mgz\,; z > 0$$

และจงแก้สมการโดยวิธีตรง เปรียบเทียบผลลัพธ์ที่ได้กับวิธีการเปลี่ยนตัวแปร

วิธีทำ

ฟังก์ชั่นคลื่นเป็นศูนย์ที่จุดกำเนิดและที่อินฟินิตี้เรา จึงสามารถใช้วิธีการแปรเปลี่ยนได้ ลองใช้ฟังก์ชั่นคลื่นต่อไปนี้

$$\phi = Cze^{-\lambda z}$$

หาค่า C โดยการนอร์มอลไลซ์

$$\int_0^{\infty} dz\ \phi^*\phi = |C|^2 \int_0 dz z^2 e^{-2z\lambda} \qquad (\text{ให้ } y = 2\lambda z)$$

$$= \frac{|C|^2}{8\lambda^3}\int_0^{\infty} dy y^2 e^{-y} = \frac{|C|^2}{4\lambda^3} = 1$$

ดังนั้น $\qquad C = \sqrt{4\lambda^3}$

ต่อไป จะคำนวณค่าเฉลี่ยของ H

$$\int_0^\infty dz\ \phi^* H\phi = \int_0^\infty dz\,\phi^*\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dz^2} + mgz\right]\phi$$

$$= \int_0^\infty dz\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\phi\,\frac{d^2\phi}{dz^2} + mgz\ \phi^2\right] \text{ (อินทีเกรทโดยวิธีแยกส่วน)}$$

$$= \int_0^\infty dz\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2\phi}{dz^2}\right)^2 + mgz\ \phi^2\right]$$

$$= 4\lambda^3\int_0^\infty dz\left[\frac{\hbar^2}{2m}(1-\lambda z)^2 + mgz^3\right]e^{-2\lambda z} \quad (\text{ให้ } y = 2\lambda z)$$

$$= 2\lambda^2\int_0^\infty dy\left[\frac{\hbar^2}{2m}\left(1 - y + \frac{y^2}{4}\right) + \frac{mgy^3}{8\lambda^3}\right]e^{y}$$

$$= 2\lambda^2\left[\frac{\hbar^2}{2m}\left(1 - 1 + \frac{2^2}{4}\right) + \frac{mg\ 6}{8\lambda^3}\right]$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m}\lambda^2 + \frac{3}{2}\frac{mg}{\lambda}$$

ดิฟเฟอเรนชิเอทเทียบกับ λ และให้เท่ากับศูนย์

$$\frac{\hbar^2}{2m}\lambda - \frac{3}{2}\frac{mg}{\lambda^2} = 0 \Rightarrow \lambda^3 = \frac{3}{2}\frac{m^2 g}{\hbar^2} \Rightarrow \lambda = \left(\frac{3}{2}\right)^{\frac{1}{3}}\sqrt[3]{\frac{m^2 g}{\hbar^2}}$$

พลังงานของสเตทพื้นฐานคือ

$$\left(\int_0^\infty dz\,\phi^* H\phi\right)_{\min} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{3}{2}\frac{m^2 g}{\hbar^2}\right)^{2/3} + \frac{3}{2}mg\left(\frac{2}{3}\frac{\hbar^2}{m^2 g}\right)^{1/3}$$

$$= \left(\frac{3}{2}\right)^{\frac{5}{3}}\left(mg^2\hbar^2\right)^{1/3} = (1.963)\left(mg^2\hbar^2\right)^{1/3}$$

สำหรับอิเล็กตรอน $m = 9.1(10)^{-28}\ g$ ดังนั้น

$$\left(\int_0^\infty dz\,\phi^* H\phi\right)_{\min} = 9.14(10)^{-24}\,erg = 1.22(10)^{-12}\,eV$$

$$\left\{\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dz^2}+mgz\right\}\psi = E\psi$$

$$\frac{d^2\psi}{dz^2}+\left[\frac{2mE}{\hbar^2}-\frac{2m^2 g}{\hbar^2}z\right]\psi = 0$$

หรือ $$\frac{d^2\psi}{dz^2}+[b-az]\psi = 0$$

ให้ $$cy = az-b \Rightarrow \frac{d^2\psi}{dz^2}=\frac{d^2\psi}{dy^2}\frac{a^2}{c^2}$$

ดังนั้น $$\frac{a^2}{c^2}\frac{d^2\psi}{dy^2}-cy\psi = 0 \Rightarrow \frac{d^2\psi}{dy^2}-\frac{c^3}{a^2}y\psi = 0$$

เลือก $c^3 = a^2$ จะได้สมการง่าย ๆ

$$\frac{d^2\psi}{dy^2}-y\psi = 0$$

คำตอบของสมการนี้คือฟังก์ชั่นแอร์รี $A_i(x)$

ดังนั้น $\psi(y)=BA_i(y)$ เมื่อ B เป็นค่าคงที่ของการนอร์มอลไลซ์

ที่ $z=0,\psi(z)=0$ ดังนั้น $\psi\left(y=\frac{-b}{c}\right)=0$

หรือ $$A_i\left(-\left(\frac{2}{\hbar^2 g^2 m}\right)^{1/2}\mathrm{E}\right)=0$$

ดังนั้น ค่าไอเกนเป็นสัดส่วนกับรากของฟังก์ชั่นแอร์รี

ฟังก์ชั่นแอร์รีสามารถเขียนได้เป็น

$$A_i(y)=\frac{1}{\pi}\int_0^a ds\cos\left(\frac{1}{3}s^3+ys\right)$$

รากสุดท้ายที่ปรากฏที่ $y=-2.34$ ดังนั้นพลังงานของสเตทพื้นฐาน คือ

$$\mathrm{E}_1=(2.34)\left(\frac{\hbar^2 g^2 m}{2}\right)^{1/3}=(1.857)(mg^2\hbar^2)^{1/3}$$

ดังนั้น สำหรับอิเล็กตรอนค่าพลังงานจากการคำนวณโดยตรง $\mathrm{E}_1=1.15(10)^{-12}eV$ และวิธีการเปลี่ยนแปลงให้ค่าพลังงานใกล้เคียงในช่วง 6 %

ตัวอย่างที่ 9.20 จงหาค่าไอเกนและฟังก์ชั่นไอเกนของสเตทพื้นของอนุภาคเคลื่อนที่ภายใต้ศักย์

$$V(x)=\infty, x \le 0 =, V(x)=0, 0 < x > 2a, V(x)=\infty, x \ge 2a$$

โดยใช้วิธีการเปลี่ยนตัวแปร

วิธีทำ

พลังงานศักย์มีค่ามาก ๆ เมื่อ $x = 0$ และ $2a$ และมีค่าเท่ากับศูนย์ เมื่อ $0 \le x \le 2a$

ดังนั้น $$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$$

$\psi \to 0$ เมื่อ $x \to 0$

$x \to 2a$

ลองใช้ฟังก์ชั่นต่อไปนี้แทนฟังก์ชั่นคลื่น

$$\phi(x) = C\left[1-\frac{1}{a^2}(x-a)^2\right]$$

เนื่องจาก $\phi(0)=\phi(2a)=0$ และ ϕ ไม่เป็น 0 ระหว่าง 0 และ $2a$

จากการนอร์มอลไลซ์

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

$$C^2 a\int_{-1}^{1} du\left(1-u^2\right)^2 = 1 \qquad \text{เมื่อ} \qquad u=\frac{1}{a}(x-a)$$

จะได้ $$C=\sqrt{\frac{15}{16a}}$$

ค่าคาดหมาย

$$\int_0^{2a} dx\phi^* H\phi = C^2 a\int_{-1}^{1} du\left(1-u^2\right)\left(\frac{-\hbar^2}{2ma^2}\frac{d^2}{du^2}\right)\left(1-u^2\right)$$

$$= C^2 a\frac{-\hbar^2}{2ma^2}\int_{-1}^{1} du\left(1-u^2\right)(-2) = C^2\frac{\hbar^2}{ma}\left(u-\frac{u^3}{3}\right)\Bigg|_{-1}^{1}$$

$$= C^2\frac{\hbar^2}{m}\frac{4}{a}\frac{}{3} = \frac{15}{16a}\frac{\hbar^2}{ma}\frac{4}{3} = \frac{5}{4}\frac{\hbar^2}{ma^2} = (1.25)\frac{\hbar^2}{ma^2}$$

เนื่องจากค่าพลังงานที่คำนวณโดยตรง คือ

$$E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{8ma^2} = (1.23)\frac{\hbar^2}{ma^2}$$

ดังนั้น

$$\int\frac{\phi^* H\phi dx}{E_1} = 1.01$$

ผลลัพธ์จากการคำนวณโดยตรงมีค่าใกล้เคียงกับผลลัพธ์จากวิธีการเปลี่ยนแปลง