บทที่ 3
ไอเกนฟังก์ชันพลังงาน

ในกรณีที่พลังงานศักย์ไม่ขึ้นกับเวลา ทำให้เราสามารถหาผลเฉลยของสมการที่อยู่ในรูปของผลคูณของฟังก์ชันของเวลากับระยะทางได้

3.1 การแยกสมการคลื่น (Separation of the wave equation)

เราจะพิจารณาคำตอบเฉพาะของสมการในกรณีที่พลังงานศักย์ไม่ขึ้นกับเวลา เราสามารถเขียนให้อยู่ในรูปของการแยกตัวแปรได้(Separation of variables) โดยให้

$$\psi(x,t) = u(r)\, f(t)$$

แทนค่าในสมการชเรอดิงเงอร์จะได้

$$\frac{i\hbar}{f}\frac{df}{dt} = \frac{1}{u}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 u + V(r)u\right]$$

จะเห็นว่าด้านซ้ายของสมการขึ้นกับเวลาเท่านั้นและด้านขวาของสมการขึ้นกับระยะทางเท่านั้น แสดงว่าทั้งสองข้างของสมการต้องเท่ากับค่าคงที่ค่าหนึ่ง ซึ่งเราจะให้เท่ากับ E
เมื่ออินทิเกรตด้านซ้ายของสมการแต่ละข้างจะได้

$$f(t) = Ce^{-iEt/\hbar}$$

และด้านขวาของสมการ คือ

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 u + V(r)\right]u(r) = Eu(r)$$

ซึ่งจะได้ผลเฉลยของสมการคลื่นว่า

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

ความสำคัญของค่าคงที่ E

ถ้าเราให้ตัวดำเนินการ E กระทำกับฟังก์ชันคลื่น ψ จะได้ว่า

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \mathrm{E}\psi$$

สมการข้างบนเราเรียกว่า สมการค่าไอเกน และเรียก ψ ว่า ฟังก์ชันไอเกน E ทางขวาของสมการเรียกว่า ค่าไอเกน ψ ใช้เป็นตัวแทนของสเตทคงที่ของอนุภาค ทั้งนี้ $|\psi|^2$ มีค่าคงที่

สมการชเรอดิงเงอร์ที่ไม่ขึ้นกับเวลาก็เป็นสมการค่าไอเกนด้วยเพราะว่า ψ เป็นไอเกนฟังก์ชันของดำเนินการ

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 u + V(r)\right]$$ โดยมี E เป็นค่าไอเกนเหมือนกัน

ภาวะขอบเขตที่ระยะไกล (Boundary condition at great distance)

เราอาจแบ่งฟังก์ชันคลื่นเป็น 2 กลุ่ม

1) กลุ่มคลื่นซึ่งมีขอบเขตจำกัด ใช้แทนอนุภาค
2) คลื่นฮาร์โมนิก ใช้ได้ดีในการอธิบายการกระเจิงของอนุภาคอย่างไรก็ตามฟังก์ชันคลื่นทั้งสองชนิดนี้จะต้องมีขอบเขตที่ระยะไกล

ภาวะต่อเนื่อง (Continuity conditions)

ฟังก์ชันคลื่นที่ไม่ขึ้นกับเวลาเป็นสมการอนุพันธ์อันดับสองของ r ดังนั้นถ้า $V(r)$ มีค่าจำกัดไม่ว่าจะมีความต่อเนื่องหรือไม่ก็ตามข้อมูลที่ได้จากฟังก์ชันคลื่นจะต้องสามารถอินทิเกรตได้ทุกๆจุด ดังนั้นฟังก์ชันคลื่นและอนุพันธ์ของฟังก์ชันต้องมีค่าต่อเนื่อง มีค่าจัดและมีค่าเดียวที่จุดใดๆนอกจากนี้ ความหนาแน่นความน่าจะเป็นตำแหน่ง P(r) , ความหนาแน่นกระแสความน่าจะเป็น S(r) ต้องมีค่าจำกัดและต่อเนื่องทุกๆจุดด้วย

ภาวะขอบเขตสำหรับศักย์ขนาดไม่จำกัด(Boundary conditions for infinite potential energy)

ถ้าศักย์มีขนาดไม่จำกัด เงื่อนไขขอบเขตที่เหมาะสมสามารถพิสูจน์ได้โดยการจำกัดกระบวนการให้เริ่มจากบริเวณที่ศักย์มีขนาดจำกัดและมีค่าต่อเนื่อง

สมมติว่ามีศักย์ที่ไม่ต่อเนื่องและไม่แน่นอนอยู่ทั่วบริเวณพื้นผิวที่มีค่าต่อเนื่อง แล้วให้พลังงานศักย์มีค่าต่อเนื่องในด้านหนึ่งของผิวและเราต้องการกำหนดเงื่อนไขขอบเขตในบริเวณนี้ ถ้าเราแทนผิวที่มีค่าต่อเนื่องด้วยระนาบที่มีความต่อเนื่องและเปลี่ยนพลังงานศักย์ด้านหนึ่งให้มีค่าคงที่ทั้งนี้การเปลี่ยนศักย์จะเทียบเท่ากับการเปลี่ยนแปลงของพลังงาน เราเลือกจุดกำเนิดเป็นจุดที่สนใจและให้แกน x เป็นแกนตั้งฉากกับระนาบ

เราจะได้สมการคลื่นในมิติเดียวตามแกน x เท่านั้น

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u}{dx^2}+V(x)u=\mathrm{E}u \qquad \text{เมื่อ } V(x)=0; x<0 \quad \text{และ} \quad V(x)=V_0; x>0$$

ให้ $V_0 \to +\infty$ สมมติว่า $0 \le \mathrm{E} < V_0$

เราจะได้ผลเฉลยของสมการข้างบนว่า

$U_x = A\sin\alpha x + B\cos\alpha x \quad : \quad x < 0$

$$U_x = Ce^{-\beta x} + De^{\beta x} \qquad : \quad x > 0$$

โดยที่

$$\alpha = +\sqrt{\frac{2m\mathrm{E}}{\mathrm{h}^2}} \qquad , \qquad \beta = +\sqrt{\frac{2m(\mathrm{V}_0 - \mathrm{E})}{\mathrm{h}^2}}$$

เงื่อนไขขอบดังกล่าว u เป็นระยะที่ไกลมาก กำหนดให้ $D = 0$ ดังนั้น u จะมีความต่อเนื่องที่ x =0 ให้ $B = C$ ดังนั้น du/dx จะมีความต่อเนื่อง ให้ $\alpha A = -\beta C$ คำตอบสำหรับ x < 0 ต้องมีค่าจำกัด ความสัมพันธ์ที่สองแสดงให้เห็นว่าเมื่อ C เป็นศูนย์จะทำให้ V มีค่าอนันต์ ซึ่งจะทำให้ B มีค่าเป็นศูนย์ด้วย ส่วน A จะไม่ขึ้นกับความสัมพันธ์ดังกล่าวแต่อาจคงที่ได้ด้วยการนอร์แมลไลซ์

ดังนั้นเงื่อนไขขอบเขตที่พื้นผิวซึ่งมีศักย์ไม่จำกัดจะทำให้ฟังก์ชันคลื่นมีค่าเป็นศูนย์ สมมติฐานข้างบนกำหนดว่า สำหรับที่ E < 0 ฟังก์ชัน sine ,cosine จะถูกแทนด้วยไฮเพอบอริกไซน์และโคไซน์ ซึ่งจะไม่ทำให้เกิดการเปลี่ยนแปลงแต่อย่างใด แม้จะมีความต่อเนื่องที่ x = 0 แต่ du/dx มีค่าไม่ต่อเนื่อง

ขอบเขตของพื้นผิวชนิดนี้ใช้แทนผิวแข็งที่ไม่สามารถทะลุผ่านกำแพงได้เทียบได้กับสถานการณ์ที่อนุภาคที่มีพลังงานจำกัดเกิดโมเมนตัมสะท้อนกลับเมื่ออนุภาคชนพื้นผิวในเวลาสั้นๆ

3.2 ค่าไอเกนพลังงานในหนึ่งมิติ(Energy eigenvalues in one dimension)

พลังงานของไอเกนฟังก์ชันเป็นพลังงานของอนุภาคที่ถูกขังไว้ในพื้นที่เฉพาะด้วยพลังงานศักย์ (ชั้นแรก) ค่าไอเกนที่ได้จะเป็นค่าที่ไม่ต่อเนื่อง เนื่องจากค่าไอเกนไม่เป็นศูนย์ที่ระยะไกลมากๆ(ชั้นที่สอง)ค่าไอเก้นจะมีความต่อเนื่อง เราจะพิจารณาปริมาณเหล่านี้จากคำตอบของสมการคลื่นใน 1 มิติ ในขั้นแรกเราจะสมมติว่า ในบริเวณที่ไกลมากๆ $V(x)$ = 0 ยกเว้นบริเวณใกล้ x

$$\mathrm{E} < 0$$

ให้อนุภาคมีพลังงานรวมเป็น E จะทำให้อนุภาคถูกขังในบริเวณนี้เท่านั้น จะได้คำตอบของสมการคลื่นเป็น

$$e^{-\beta|x|} \qquad \text{เมื่อ} \qquad \beta = +\sqrt{\frac{-2m\mathrm{E}}{\hbar^2}}$$

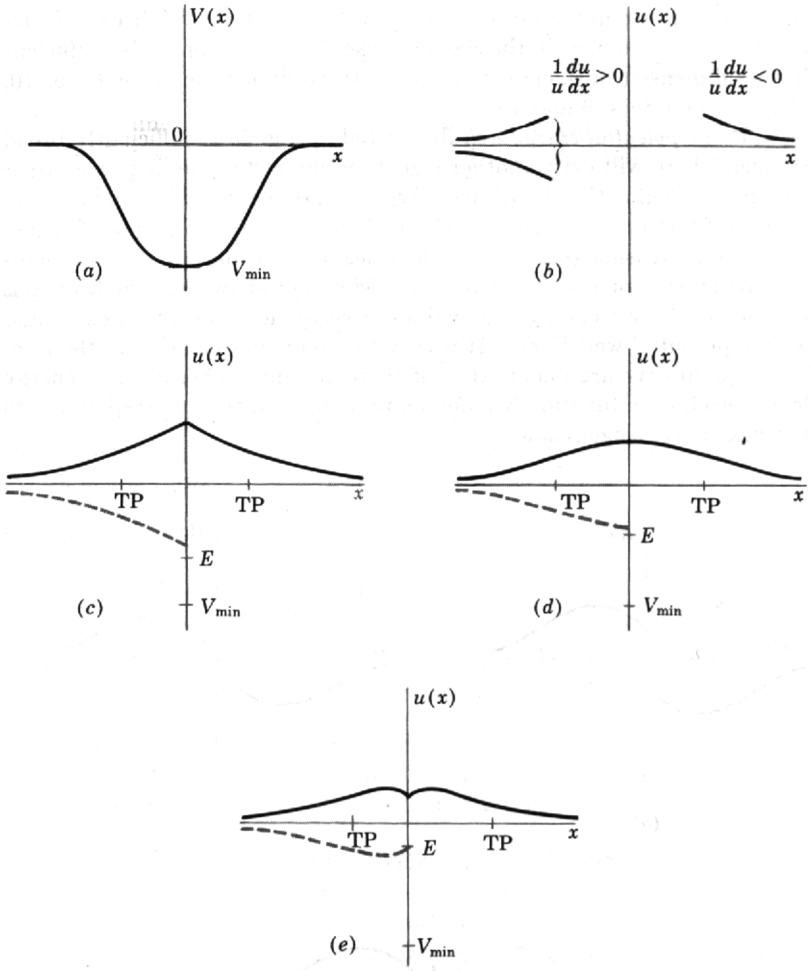
ทำให้สมการคลื่นมีค่าต่อเนื่องที่ $x = 0$

เราสามารถทำให้ ψ มีค่าต่อเนื่องได้โดยการเลือกค่าคงที่ที่เหมาะสม เพื่อที่ทำให้ค่าของ E , du/dx มีความต่อเนื่อง

ในบริเวณซึ่ง $\mathrm{E} < V(x)$, $\left(\dfrac{d^2u}{dx^2}\right)/u$ จะมีค่าเป็นบวก ดังนั้นคำตอบทั้งสองจะมีค่าต่อเนื่องตลอดในบริเวณที่พลังงานรวมน้อยกว่าศักย์ จุดที่ $\mathrm{E} = V(x)$ เรียกว่าจุดกลับ (turning point ,TP) ของการเคลื่อนที่เป็นขอบเขตของการเคลื่อนที่ของอนุภาคพลังงาน E เป็นจุดวกกลับหรือถอยหลังของอนุภาค

ระดับพลังงานไม่ต่อเนื่อง (discrete energy levels)

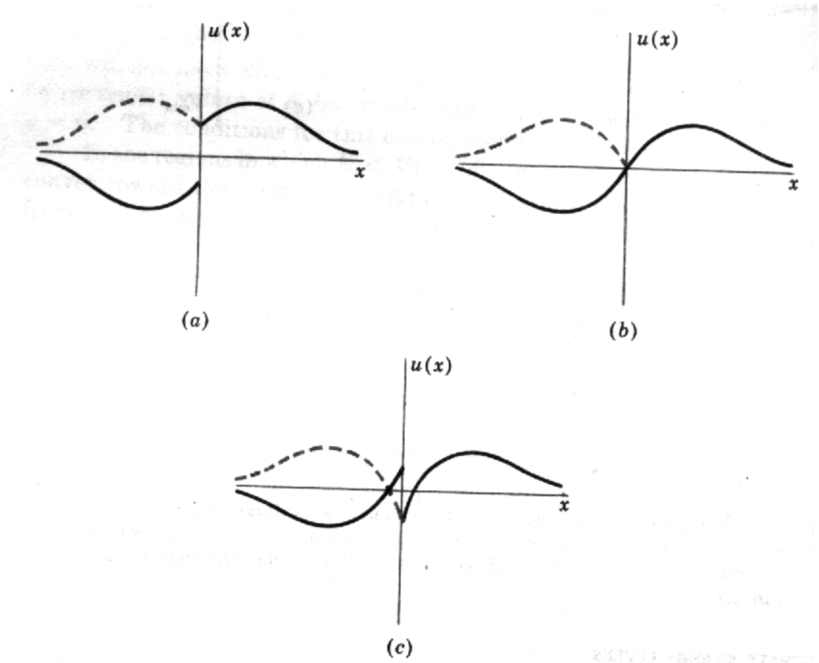
เราจะเห็นว่าค่าไอเกนฟังก์ชันจะสอดคล้องกับเงื่อนไขขอบเขตและความต่อเนื่องใช้แทนอนุภาคที่ถูกขังโดยพลังงานศักย์ซึ่งจะเป็นไปได้เมื่อศักย์มีค่าน้อยกว่าศูนย์และเป็นการเคลื่อนที่ใน 1 มิติทั่วๆไป ถ้าพลังงานศักย์มีลักษณะเป็นบ่อลึกไอเกนฟังก์ชันจะมีลักษณะอีกแบบหนึ่ง



รูปที่ 2.1 ไอเกนฟังก์ชันสอดคล้องกับเงื่อนไขขอบเขตและความต่อเนื่อง

(a) ฟังก์ชันของพลังงานศักย์ (b) คำตอบสำหรับ x ที่มีขนาดใหญ่

(c) แสดงฟังก์ชันที่ไม่ต่อเนื่อง (d),(e) แสดงพลังงานของไอเกนฟังก์ชัน



รูปที่ 3.2 แสดงความลึกของหลุมศักย์และความกว้างของพลังงานรวม โดยที่พลังงานเพิ่มจาก(a) to (b) to (c) และแสดงให้เห็นว่าที่รูป b ค่าไอเก้นมีความต่อเนื่องที่ $x=0$

ค่าไอเกนพลังงานที่ต่อเนื่อง(continuous energy eigenvalues)

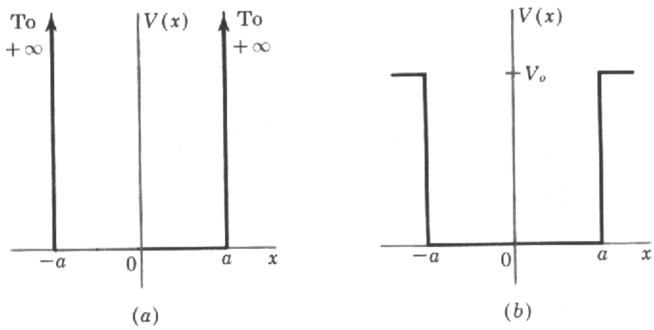
เป็นไปได้ที่เราจะหาไอเก้นฟังก์ชันจากค่าความต่อเนื่องและเงื่อนไขขอบเขตของค่าไอเก้นทุก ๆค่าพลังงานที่อยู่นอกเหนือขอบเขตที่กำหนด ถ้าพลังงานศักย์มีลักษณะเป็นหลุมลึก คำตอบของพลังงานคลื่นเราจะพบได้ในทุก ๆค่า E ที่เป็นค่าบวก เพราะคำตอบสำหรับค่า x ที่มีค่ามากจะอยู่ในรูป

$$A\sin\alpha|x| + B\cos\alpha|x| \qquad \text{โดยที่} \quad \alpha = +\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

และไม่มีเหตุผลว่าทำไมเทอมทั้งสองจึงไม่มีอยู่จริง ดังนั้นเพื่อให้เป็นไปได้เราจึงต้องมีการปรับเฟสของฟังก์ชันคลื่นเพื่อให้เกิดความต่อเนื่องที่ $x = 0$

3.3 ศักย์บ่อรูปสี่เหลี่ยมในหนึ่งมิติ (One dimensional square well potential)

ตัวอย่างที่ง่ายที่สุดสำหรับการคำนวณพลังงานที่มีค่าไม่ต่อเนื่องของอนุภาคในกลสาสตร์ควอนตัม คืออนุภาคที่ถูกขังอยู่ในกำแพงของพลังงานศักย์



รูปที่ 3.3 บ่อพลังงานศักย์ใน 1 มิติ (ก) ศักย์มีค่าเป็นอนันต์ (ข) ศักย์มีค่าจำกัด

จากรูปเป็นตัวอย่างง่ายของศักย์ 2 ชนิดที่เราจะพิจารณารูป (ก) $V(x) = 0$ เมื่อ $-a < x < a$ ส่วนรูป (ข) แสดงการเพิ่มขึ้นของศักย์คล้ายๆรูป (ก) ต่างกันที่ศักย์มีค่าจำกัด กรณีทั้งสองนี้เราเรียกว่า ศักย์บ่อรูปสี่เหลี่ยม (square well potential) การเคลื่อนที่ของอนุภาคแบบดั้งเดิมที่มีพลังงานรวมน้อยกว่าพลังงานศักย์จะเหมือนกันกรณีทั้งสองแต่พฤติกรรมทางกลศาสตร์ควอนตัมจะแตกต่างกัน ในกรณีโดยทั่วไปการเพิ่มขึ้นของพลังงานศักย์ที่ขอบของบริเวณที่มีอิทธิลพของแรงจะทำให้บริเวณภายในหลุมแรงมีค่าเป็นศูนย์ยกเว้นบริเวณขอบเท่านั้น

ผนังแข็งแกร่งสมบูรณ์ (Perfectly rigid walls)

จากรูป (ก) เราจะได้สมการคลื่นในรูป

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

ซึ่งเราจะได้คำตอบแบบทั่วไปว่า

$$u(x) = A\sin\alpha x + B\cos\alpha x \qquad \text{เมื่อ} \qquad \alpha = +\sqrt{\frac{2m\mathrm{E}}{\hbar^2}}$$

ใช้เงื่อนไขขอบเขตที่ -a < x < a ฟังก์ชันคลื่นจะมีค่าเป็นศูนย์ จะได้ว่า

$$A\sin\alpha a + B\cos\alpha a = 0$$

$$-A\sin\alpha a + B\cos\alpha a = 0$$

จะได้ว่า

$$A\sin\alpha a = 0 \quad , \qquad B\cos\alpha a = 0$$

เราไม่ต้องการให้ทั้ง A และ B เป็นศูนย์พร้อมกันทั้งคู่ เพราะจะทำให้ฟังก์ชันคลื่นมีค่าเป็นศูนย์ในทุกๆจุด

ผลเฉลยเราจะแบ่งได้ 2 กรณีคือ

1. A = 0 , $\cos\alpha a = 0$
2. B = 0 , $\sin\alpha a = 0$

ดังนั้นเราจะได้ว่า $\alpha a = n\pi/2$ เมื่อ n เป็นเลขจำนวนเต็ม โดยที่ เป็นเลขคี่สำหรับกรณีที่ 1 และเป็นเลขคู่สำหรับกรณีที่ 2 เราจะได้คำตอบสำหรับค่าไอเกนของพลังงานว่า

$$u(x) = B\cos\frac{n\pi x}{2a}$$

$$u(x) = A\sin\frac{n\pi x}{2a}$$

ทั้งสองกรณีจะได้ว่า $$\mathrm{E} = \frac{(\pi\hbar x)^2}{8ma^2}$$

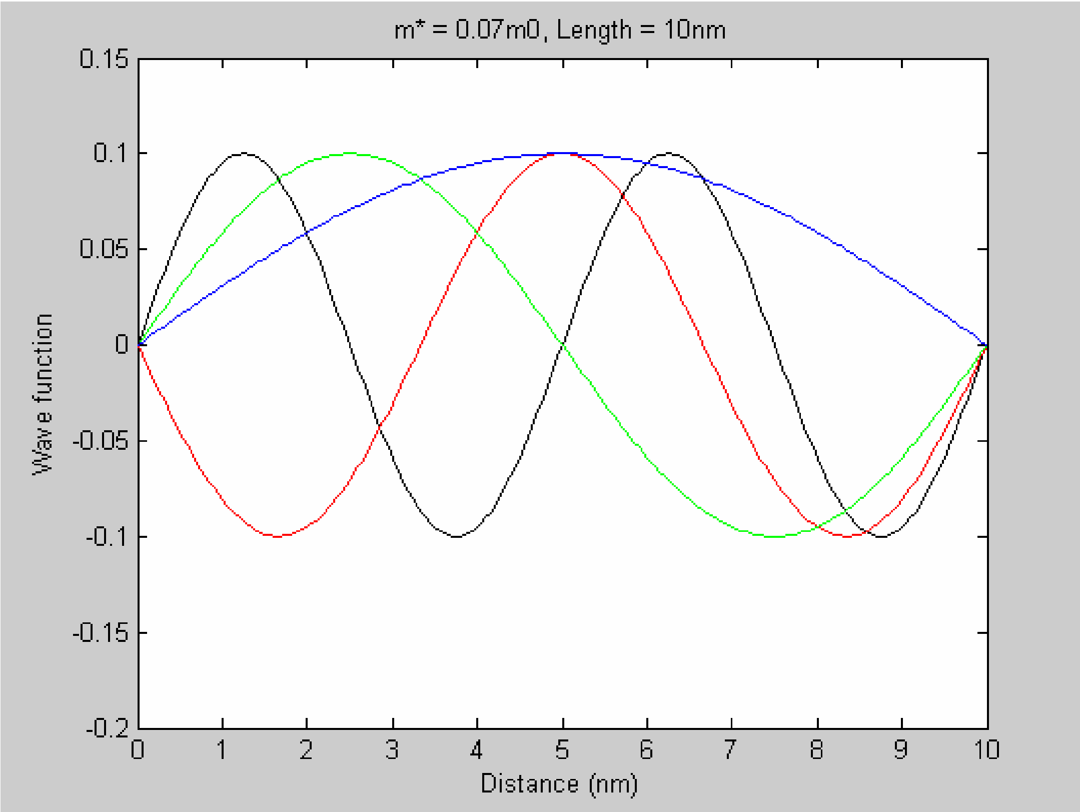
ค่าคงที่ A และ B หาได้โดยการนอร์แมลไลซ์ ผลเฉลยที่ได้แสดงให้เห็นถึงค่าความไม่ต่อเนื่องของพลังงานซึ่งจะสอดคล้องกับเลขควอนตัม n สิ่งที่เราสนใจคือค่าพลังงานที่ระดับต่ำสุดหรือพลังงานที่สถานะพื้น

โปรแกรมคอมพิวเตอร์ที่ใช้ในการหาผลเฉลยของสมการชเรอดิงเงอร์ สำหรับศักย์บ่อสี่เหลี่ยมที่มีความสูงไม่จำกัด

```
%numerical solution to Schroedinger equation for
%rectangular potential well with infinite barrier energy
clear
clf;

length = 10;                  %length of well (nm)
npoints=200;                  %number of sample points
x=0:length/npoints:length;    %position of sample points
mass=0.07;                    %effective electron mass
num_sol=4;                    %number of solutions sought

for i=1:npoints+1; v(i)=0; end      %potential (eV)

[energy,phi]=solve_schM(length,npoints,v,mass,num_sol);
                              %call solve_schM

 for i=1:num_sol
 sprintf(['eigenenergy (',num2str(i),') = ',num2str(energy(i)),'
eV'])                         %energy eigenvalues
 end

figure(1);
 plot(x,v,'b');xlabel('Distance (nm)'),ylabel('Potential energy,
(eV)');
 ttl=['m* = ',num2str(mass),'m0, Length = ',num2str(length),'nm'];
 title(ttl);
```

```
s=char('y','k','r','g','b','m','c');
                                %plot curves in different colors

figure(2);
for i=1:num_sol
   j=1+mod(i,7);
     plot(x,phi(:,i),s(j));     %plot eigenfunctions
     hold on;
  end
 xlabel('Distance (nm)'),ylabel('Wave function');
 title(ttl);
hold off;
```

ผลเฉลยสำหรับ n = 1,2,3,4 คือ



3.4 ศักย์ขั้นค่าจำกัด (Finite potential step)

เมื่อมีพลังงานศักย์ในลักษณะรูป (ข) ต้องมีการเปลี่ยนแปลงผลเฉลยใหม่ กำหนดฟังก์ชันคลื่น

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u}{dx^2}+V_0u=\mathrm{E}u$$

ซึ่งเราจะได้ผลเฉลยทั่วไปสำหรับกรณี $\mathrm{E} < V_0$ ว่า

$$u(x)=Ce^{-\beta x}+De^{\beta x} \quad \text{เมื่อ} \quad \beta=+\sqrt{\frac{2m\left(V_0-\mathrm{E}\right)}{\hbar^2}}$$

เราจะให้ D = 0 สำหรับฟังก์คลื่นที่ x > 0 และให้ C = 0 สำหรับฟังก์ชันคลื่นที่ x < -a ให้ u และ du/dx มีค่าต่อเนื่องที่ x = +a,-a เราจะได้ว่า

$$\begin{aligned}
A\sin\alpha a+B\cos\alpha a &= Ce^{-\beta a}\\
\alpha A\sin\alpha a-\alpha B\cos\alpha a &= -\beta Ce^{-\beta a}\\
-A\sin\alpha a+B\cos\alpha a &= De^{-\beta a}\\
\alpha A\sin\alpha a+\alpha B\cos\alpha a &= -\beta De^{-\beta a}
\end{aligned}$$

จะได้ว่า

$$2A\sin\alpha a=(C-D)e^{-\beta a} \qquad 2\alpha A\cos\alpha a=-\beta(C-D)e^{-\beta a}$$

$$2B\cos\alpha a=(C+D)e^{-\beta a} \qquad 2\alpha B\sin\alpha a=\beta(C+D)e^{-\beta a}$$

ถ้าหากว่า A = 0 และ C = D จะได้ว่า $\alpha\cot\alpha a=-\beta$

ถ้าหากว่า B = 0 และ C = -D จะได้ว่า $\alpha\tan\alpha a=\beta$

ซึ่งเป็นไปไม่ได้ที่ทั้งสองกรณีจะมีค่าในขณะเดียวกัน ด้วยเหตุที่มีการจำกัดค่าของ β ว่าเป็นค่าบวกเท่านั้น เรายังไม่ต้องการให้ค่าของ A ,B ,C, D เป็นศูนย์พร้อมๆกัน

ดังนั้น คำตอบของสมการคลื่นจะมีอยู่ 2 แบบคือ

ชั้นที่ 1 A = 0 ,C = D $\alpha\tan\alpha a = \beta$

ชั้นที่ 2 B = 0 , C = -D $\alpha\cot\alpha a = -\beta$

ระดับพลังงาน

ระดับพลังงานหาได้จากการแก้สมการโดยวิธีวิเคราะห์เชิงตัวเลขหรือวิธีกราฟกับนิยามของ α และ β ในที่นี้เราจะใช้วิธีการหาค่าจากกราฟซึ่งระดับพลังงานจะขึ้นอยู่กับ V_0 และ α โดยเราจะให้

$$\xi = \alpha a$$

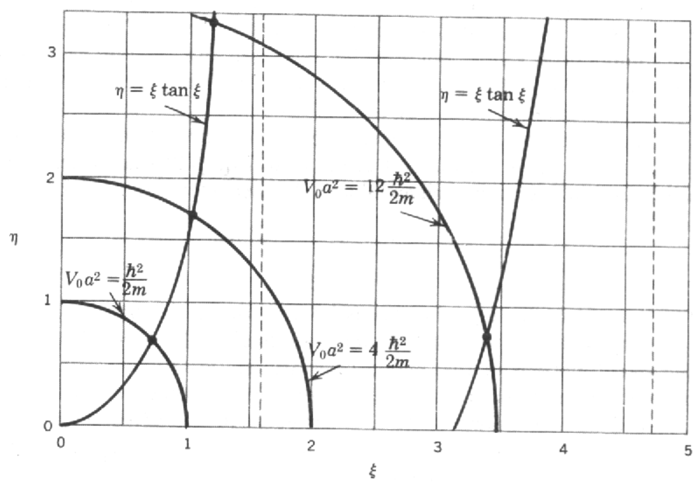
$$\eta = \beta a$$

จะได้ $\xi \tan \xi = \eta$

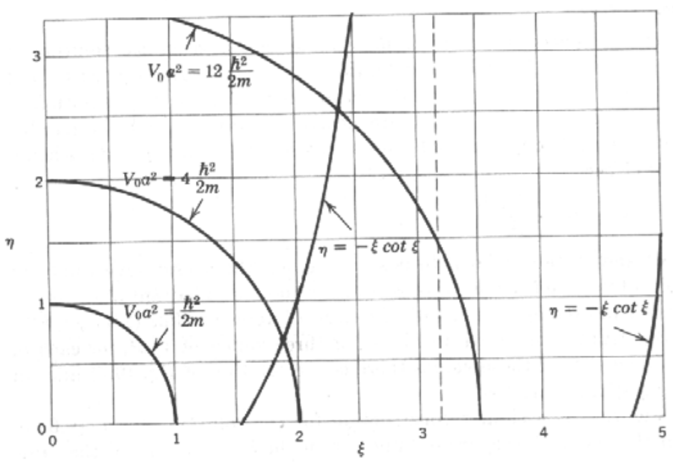
โดยที่ $\xi^2 + \eta^2 = 2mV_0 a^2 \frac{1}{\eta^2}$

ทั้งนี้ค่าของ ξ และ η จะต้องเป็นค่าบวกเท่านั้น ระดับพลังงานอาจพบในรูปการตัดกันของเส้นโค้งของ $\xi \tan \xi = \eta$ กับเส้นโค้งของรัศมี $\frac{2mV_0 a^2}{h^2}$

รูปที่ 3.4 แสดงค่าของ $V_0 a^2$ จำนวน 3 ค่ากับค่าของ $\xi \tan \xi$ จำนวน 2 ค่า ส่วนรูปที่ 3.5 แสดงค่าของ $V_0 a^2$ จำนวน 3 ค่ากับค่าของ $-\xi \tan \xi$ จะเห็นว่าน้อยที่สุดของ $V_0 a^2$ ไม่มีคำตอบ



รูปที่ 3.4 ผลเฉลย $\xi \tan \xi = \eta$

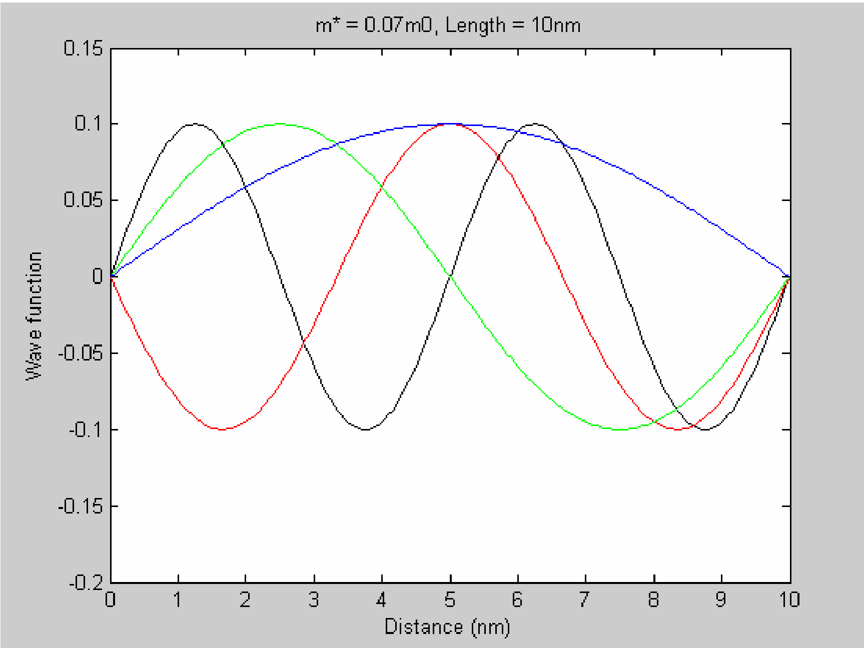


รูปที่ 3.5 ผลเฉลย -$\xi \cot \xi = \eta$

โปรแกรมคอมพิวเตอร์ที่ใช้ในการหาผลเฉลยของสมการชเรอดิงเงออร์ สำหรับศักย์บ่อสี่เหลี่ยมที่มีความสูงจำกัด

```
%This function plots the probability and real part of the wave
%function for an electron
%tunneling through a rectangular barrier of energy V0 and width bx1
%distance runs from -5nm to 5nm and the barrier starts at x = 0

function Tun
clear;
clf;

hbar=1.05457159e-34;          %Planck's constant (J s)
echarge=1.6021764e-19;        %electron charge (C)
m0=9.109382e-31;              %electron mass (kg)

meff=1.0;                     %effective electron mass / m0

mass=m0*meff;                 %effective electron mass (kg)
E=0.9;                        %energy of electron(eV)
V0=1.0 ;                      %potential barrier energy(eV)
bx1=0.5;                      %barrier width(nm)

npoints=1000;                 %defines number of points in plot
scale=npoints/10;

for j=1:npoints
   x(j)=-5+j/scale;           %distance, x (nm)
   psi=Tunnel(x(j),hbar,echarge,mass,E,V0,bx1); %wave function
   y(j)=(abs(psi))^2;
                        %absolute value of wave function squared
   z(j)=real(psi);            %real part of wave function
   end

figure(1);
plot(x,y);
ttl=[' E = ',num2str(E),' eV, V0 = ',num2str(V0),' eV, L =
',num2str(bx1),' nm, m = ',num2str(meff),' x m0'] ;
title(ttl)
xlabel('Distance, x (nm)');
ylabel('abs(wave function)^2');

figure(2);
plot(x,z)
title(ttl)
xlabel('Distance, x (nm)');
ylabel('real(wave function)');
```

```
%.................. Wave function calculation.......
function tun=Tunnel(z,hbar,echarge,mass,E,V0,bx1)

L=bx1*1e-9;
x=z*1e-9;
k=(sqrt(2*mass*E*echarge))/hbar;
      %wave vector (outside barrier)
ka=(sqrt(2*mass*(V0-E)*echarge))/hbar;
      %wave vector (inside barrier)
u=(k/ka);
F=(4*i*u*exp(-i*k*L))/((exp(-ka*L)*(1+i*u)^2)-(exp(ka*L)*(1-
i*u)^2));
C=0.5*(1+i*u)*F*exp(i*k*L)*exp(-ka*L);
D=0.5*(1-i*u)*F*exp(i*k*L)*exp(ka*L);
B=(-i*(1+u^2)*exp(i*k*L)*F*sinh(ka*L))/(2*u);

if (z<=0)
   wf1=exp(i*k*x)+B*exp(-i*k*x);
   tun=wf1;
end
if (0<z)&(z<=L*1e9)
   wf2=C*exp(ka*x)+D*exp(-ka*x);
   tun=wf2;
end
if (z>L*1e9)
   wf3=F*exp(i*k*x);
   tun=wf3;
end
```



3.5 พาริตี (Parity)

จากที่กล่าวมาเราจะเห็นว่าไอเกนฟังก์ชันของชั้นที่ 1 เป็นฟังก์ชันคี่ ซึ่งสัมพันธ์กับ x[u(-x)=u(x)] ในขณะที่ไอเกนฟังก์ชันของชั้นที่ 2 เป็นฟังก์ชันคู่ x[u(-x) = -u(x)]
ถ้าเราแทน x ด้วย -x ลงในสมการคลื่น จะได้ว่า

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

ถ้า V(x) = V(-x) พลังงานศักย์มีความสมมาตร

ดังนั้น u(x) และ u(-x) เป็นคำตอบของสมการคลื่นเดียวกันและมีค่าไอเกนเดียวกัน สมมติว่า ไอเก้นฟังก์ชันที่เป็นเชิงเส้นเพียงฟังก์ชันเดียวที่สอดคล้องกับระดับพลังงานโดยให้

$$u(-x) = \varepsilon u(x)$$
$$u(x) = \varepsilon u(-x)$$

จาก 2 สมการข้างบนจะได้ว่า $\varepsilon^2 = 1$

ถ้าไอเกนฟังก์ชันของศักย์ที่สมมาตรไม่ว่าจะเป็นฟังก์ชันคู่หรือฟังก์ชันคี่เราเรียกว่า พาริตี
ถ้าค่าไอเกนมีฟังก์ชันเชิงเส้นที่เป็นอิสระต่อกันมากกว่า 1 ไอเกนฟังก์ชันเหล่านี้ไม่จำเป็นว่าต้องมีค่าจำกัดหรือเป็นฟังก์ชันคู่หรือว่าฟังก์ชันคี่ อย่างไรก็ตามเราสามารถรวมฟังก์ชันเหล่านั้นเข้าด้วยกันได้ สมมติว่ามีฟังก์ชันไอเก้น u(x) ที่มีค่าไม่ใช่ค่าอนันต์ เราเขียนได้ว่า

$$u(x) = u_e(x) + u_0(x)$$

ซึ่งจะได้สมการคลื่นสองสมการแยกกันแต่มีค่าไอเก้นเหมือนกัน

ผลเฉลยรูปแบบง่าย

สำหรับคำตอบที่อยู่ในรูปแบบง่ายๆที่เราต้องการ เราจะพบว่าอยู่ในรูปของฟังก์ชันคี่แทนด้วยสมการ

$$u(x) = B\cos \alpha x \qquad 0 < x < a$$
$$u(x) = C e^{-\beta a} \qquad x > 0$$

เนื่องจากฟังก์ชันและอนุพันธ์ของฟังก์ชัน u มีค่าต่อเนื่องที่ x = a ในกรณีของฟังก์ชันคู่เราจะได้คำตอบว่า

$$u(x) = A\sin \alpha x \qquad 0 < x < a$$
$$u(x) = C e^{-\beta a} \qquad x > 0$$

ตัวอย่าง 3. 1 พิจารณาอนุภาคมวล m เคลื่อนที่ภายใต้ศักย์ 1 มิติ V(x) สมมุติว่า บางพื้นที่ V(x) มีค่าคงที V(x) = V จงหาสเตทคงที่ ของอนุภาด บริเวณนี้ เมื่อ
ก) E >V ข) E <V และ ค) E =V เมื่อ E เป็นพลังงานของอนุภาค

วิธีทำ ก) สเตทคงที่เป็นผลเฉลยของ

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

เมื่อ E >V ให้ $\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ = E – V เมือ k เป็นค่าบวก

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

ผลเฉลยของสมการนี้ จะอยู่ในรูป

$$\Phi(x) = Ae^{ikx} + A'e^{-ikx}$$

เมือ A และ A′ เป็นค่าคงที่

ข) ให้ $\frac{\hbar^2\beta}{2m}$ = V – E เมือ β เป็นค่าคงที่บวก

ผลเฉลยของสมการนี้ จะอยู่ในรูป

$$\Phi(x) = Be^{ikx} + B'e^{-ikx}$$

เมือ B และ B′ เป็นค่าคงที่

ค) เมือ E =V จะได้ $\frac{\partial^2\Phi}{\partial x^2}(x) = 0$

$$\Phi(x) = Cx + C'$$

เมือ C และ C′ เป็นค่าคงที่

ตัวอย่างที่ 3.2 พิจารณาอนุภาคมวล m อยู่ภายใต้ศักย์บ่อ 1 มิติ ขนาดไม่จำกัด ความกว้าง a ดังนี้

$$V(x) = \begin{cases} 0, -\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2} \\ x, otherwise \end{cases}$$

จงหาไอเกนสเตท (eigenstates) และ ไอเกนพลังงาน (eigenenergjies)

วิธีทำ $\psi\ (x > \frac{a}{2}) = 0$ $\psi\ (x \leq \frac{a}{2}) = 0$

$$\psi\ (\frac{a}{2}) = \psi\ (-\frac{a}{2}) = 0$$

สำหรับ $\varepsilon>0$ ให้ $\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E$

$$\Phi(x) = Ae^{ikx} + A'e^{-ikx}$$

ดังนั้น

$$Ae^{ika/2} + A'e^{-ika/2} = 0 \qquad \text{---------------(1)}$$

$$Ae^{-ika/2} + A'e^{ika/2} = 0 \qquad \text{---------------(2)}$$

คูณ (1) ด้วย $e^{ika/2}$ จะได้ว่า $A' = -Ae^{ika/2}$ แทนในสมการที่ (2)

$$Ae^{-ika/2} - A\,Ae^{ika/2}\,e^{ika/2} = 0$$

คูณด้วย $e^{-ika/2}$ แล้วหารด้วย A จะได้

$$e^{-ika/2} - e^{ika/2} = 0$$

จาก $e^{i\alpha} = \cos\alpha + i\sin\alpha$

$$-2i\sin(ka) = 0$$

$ka = n\pi$ เมื่อ n เป็นเลขจำนวนเต็ม

$$E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 (n\pi)^2}{a} = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2m\omega^2}$$

ψ_n (x) = A $e^{ik_n x}$ – A$e^{ik_n a}e^{-ik_n x}$

ψ_n (x) = A $e^{in\pi x/a}$ – A$e^{ik\pi(a-x)/a}$

= A$e^{in\pi/2}$ [$e^{in\pi(x/a-1/2)}$ – $e^{-in\pi(x/a-1/2)}$]

= Csin [n$\pi(\frac{x}{a}-\frac{1}{2})$] n = 0,1,2,3,…

$\frac{1}{c^2}$ = $\int_{-a/2} \sin^2[n\pi(\frac{x}{a}-\frac{1}{2})]dx$

ให้ $y = \frac{x}{a}-\frac{1}{2}$ จะได้ว่า $dy = \frac{dx}{a}$

$\frac{1}{c^2}$ = a $\int_{-1} \sin^2[n\pi y]dx$

= $\frac{a}{2}\int_{-1}[1-\cos(2\pi ny)]dy$

= $\frac{a}{2}$ [y $-\frac{\sin(2\pi ny)}{2\pi n}$]$_{-1}$

= $\frac{a}{2}$

C = $\sqrt{(2/a)}$

ψ_n (x) = $\sqrt{(2/a)}$ sin [nπ ($\frac{x}{a}-\frac{1}{2}$)]

สำหรับ E < 0 ให้ $\frac{\hbar^2\rho^2}{2m} = -E$

$$\psi_n(x) = Be^{\rho x} + B'e^{-\rho x}$$

อาศัยภาวะขอบเขต

$$Be^{\rho a/2} + B'e^{-\rho xa/2} = 0 \qquad \text{-------------(3)}$$

$$Be^{-\rho a/2} + B'e^{\rho a/2} = 0 \qquad \text{-------------(4)}$$

คูณ (3) ด้วย $e^{\rho a/2}$ จะได้

$$B' = -Be^{\rho a/2}$$ และหารด้วย B ได้

ดังนั้น $$Be^{-\rho a/2} + -Be^{\rho a/2}e^{\rho a/2} = 0$$

คูณด้วย $e^{\rho a/2}$ และหารด้วย B ได้

$$1 - e^{2\rho a/2} = 0$$

$$2\rho a = 0$$

เนื่องจาก ρ ต้องเป็นบวก จึงไม่มีสเตทที่ E เป็น 0 เลย สำหรับ E = 0 จะได้
$\psi(x) = Cx + C'$

$$C\frac{a}{2} + C' = 0$$

$$-C\frac{a}{2} + C' = 0$$

จะได้ $C = C' = 0$ จึงไม่มีสเตทที่ $E = 0$

แบบฝึกหัดบทที่ 3

1. สมมุติว่า ศักย์บ่ออยู่ระหว่าง x=0 และ x=a

$$V(x)=\begin{cases}0 & , \quad 0 \le x \le a \\ \infty & , \quad otherwise\end{cases}$$

จงหาไอเกนสเตทคงที่และไอเกนพลังงาน

2. จากตัวอย่าง 3.2 ที่ t=0 อนุภาคอยู่ในสเตทที่ได้จากการรวมตัวของสเตทต่ำสุด 2 สเตท

$$\psi(x,0)=\alpha\psi_1(x)+\beta\psi_2(x)$$
$$\left(|\alpha|^2+|\beta|^2=1\right)$$

ก) จงคำนวณฟังก์ชันคลื่น $\psi(x,t)$ และค่าเฉลี่ยของตัวดำเนินการ x และ p_x เป็นฟังก์ชันของเวลา

ข) จงพิสูจน์ทฤษฏีเออเรนเฟส

3.จงหาสัมประสิทธิ์การทะลุผ่านกำแพงศักย์

4. จงแสดงว่าสัมประสิทธิ์ของการทะลุผ่านจะมีค่าเท่ากันไม่ว่าอนุภาคจะเคลื่อนที่มาจากทางด้านซ้ายหรือทางด้านขวา