บทที่ 5
ไอเกนฟังก์ชันในปริภูมิโมเมนตัม

เราได้ศึกษาไอเกนฟังก์ชันในปริภูมิพิกัด (eigenfunctions in co-ordinate space) มาแล้วในบทที่ผ่านมา ในบทนี้จะกล่าวถึง ไอเกนฟังก์ชันในปริภูมิโมเมนตัม (Momentum eigenfunctions) บ้าง การที่เราจะเลือกใช้โมเมนตัมในปริภูมิใด ขึ้นอยู่กับรูปแบบของระบบที่เรากำลังทำการศึกษา บางระบบเราสามารถแก้ปัญหาได้ง่ายโดยอาศัยปริภูมิพิกัด แต่บางระบบจะแก้ปัญหาได้ยากหรือทำไม่ได้เลย ถ้าใช้ปริภูมิพิกัดจึงจำเป็นที่จะต้องเปลี่ยนมาแก้ปัญหาด้วยปริภูมิโมเมนตัมแทน

5.1 รูปแบบของไอเกนฟังก์ชันในปริภูมิโมเมนตัม

ฟังก์ชันไอเกนโมเมนตัมเป็นผลเฉลยของสมการไอเกน คือ

$$-i\eta\nabla u_p(r) = pu_p(r)$$

หรือเขียนแยกตามองค์ประกอบว่า

$$-i\eta\frac{\partial}{\partial x}u_p(r) = p_x u_p(r)$$

$$-i\eta\frac{\partial}{\partial y}u_p(r) = p_y u_p(r)$$

$$-i\eta\frac{\partial}{\partial z}u_p(r) = p_z u_p(r)$$

ซึ่งจะเขียนอยู่ในรูป $u_p(r) = Ce^{i(p.r)/\eta}$

เมื่อ C คือค่าคงที่ของการนอร์แมลไลซ์ เพื่อความสะดวกเราจะเปลี่ยนเวกเตอร์โมเมนตัม P ไปเป็นเวกเตอร์การกระจาย k โดยที่ $k = \frac{p}{\eta}$ เราจะเขียนฟังก์ชันไอเกนใหม่ว่า $u_k(r) = C\exp(ik.r)$

5.2 การนอร์แมลไลซ์ของอนุภาคในกล่อง

ฟังก์ชันไอเกนของพลังงาน เราสามารถหาได้โดยกำหนดบริเวณของ $u_k(r)$ ให้มีขนาดใหญ่แต่มีค่าจำกัด ถ้าให้กล่องลูกบาศก์มีปริมาตร L^3 จุดศูนย์กลางอยู่ที่จุดกำเนิด เงื่อนไขที่ผนังกล่องเป็นฟังก์ชันที่เป็นคาบ ดังนั้น $u_k(r)$ จะนอร์แมลไลซ์ถ้า $C = L^{-3/2}$ ดังนั้นองค์ประกอบของ k จะมีค่า

$$k_x = \frac{2\pi n_x}{L} \quad , \quad k_y = \frac{2\pi n_y}{L} \quad , \quad k_z = \frac{2\pi n_z}{L}$$

เมื่อ n_x, n_y, n_z เป็นจำนวนเต็มบวก เต็มลบหรือศูนย์ เวกเตอร์ k และค่าไอเกนพลังงาน $\frac{\eta^2 k^2}{2m}$ สามารถทำให้มีขนาดเล็กได้ตามต้องการ โดยให้ L มีขนาดใหญ่พอ ปกติจะให้ $L \to \infty$

สิ่งที่น่าสนใจคือ ฟังก์ชันไอเกนของโมเมนตัมเป็นศูนย์ที่ผนังกล่องของวัตถุแข็งเกร็ง เนื่องจากว่าฟังก์ชันไอเกนจะไม่เป็นศูนย์ที่บริเวณอื่นๆ ในกลศาสตร์แบบเดิมโมเมนตัมของอนุภาคที่สะท้อนจากผนังของวัตถุแข็งเกร็งจะไม่อนุรักษ์ ฟังก์ชันไอเกนของโมเมนตัมจะอยู่ในรูป $u_k(\vec{r}) = L^{-3/2}\exp(i\vec{k}\cdot\vec{r})$ อินทิเกรตตลอดปริมาตรจะได้

$$\int u_1^*(\vec{r})u_k(\vec{r})d^3r = \frac{1}{L^3}\int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} e^{i(kx-lx)}dx \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} e^{i(ky-ly)}dy \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} e^{i(kz-lz)}dz$$

$$= \delta_{k_x l_x}\delta_{k_y l_y}\delta_{k_z l_z} \equiv \delta_{kl}$$

5.3 ฟังก์ชันเดลต้าดิแรก (The Dirac Delta Function)

เราสามาถแสดงฟังก์ชันไอเกนของโมเมนตัมให้ชัดเจนยิ่งขึ้นโดยอาศัยฟังก์ชันเดลต้าของ ดิแรก ซึ่งกำหนดว่า

$$\delta(x) = 0 \quad \text{ถ้า} \quad x \neq 0 \qquad \text{และ} \quad \int \delta(x)dx = 1$$

เมื่อการอินทิเกรตรวมเอาจุดที่ x = 0 ด้วย สำหรับ f(x)ที่มีค่าต่อเนื่องที่x = 0 สมการจะเป็น

$$\int f(x)\delta(x)dx = f(0)$$

ซึ่งมีค่าเมื่อการอินทิเกรตรวมเอาจุดที่ x = 0 ด้วย ถ้าเทียบสมการข้างบนกับสมการ

$$\psi(r) = \int \psi(r')\left[\sum_E u_E^*(r')u_E(r)\right]d^3r'$$

ส่วนที่อยู่ในวงเล็บสามารถกระจายได้ว่า

$$\sum_E u_E^*(r')u_E(r) = \delta(x-x')\delta(y-y')\delta(z-z') \equiv \delta^3(r-r')$$

ฟังก์ชันที่ใช้แทนฟังก์ชันเดลต้าดิแรก

จากนิยามของฟังก์ชันเดลตาแสดงว่า $\delta\,(\,x\,)$ เป็นฟังก์ชันที่มีค่าเป็นศูนย์ในทุกๆ จุดยกเว้นจุด x = 0 และพื้นที่ใต้กราฟทั้งหมดมีค่าเป็น 1 เราอาจแทนฟังก์ชันเดลตาด้วย

$$\delta(x) = \lim_{g\to\infty}\frac{\sin gx}{\pi x}$$

g เป็นจำนวนจริงบวกใดๆ

การนอร์แมลไลซ์ในเทอมของฟังก์ชันเดลต้าดิแรก

จากฟังก์ชันไอเกนของโมเมนตัม ตามสมการ $u_k(r) = C\exp(i\vec{k}\cdot\vec{r})$ อินทิกรัลของ $\int u_1^*(r)u_k(r)d^3r$ เป็นผลคูณของ 3 อินทิกรัลซึ่งแต่ละเทอมสามารถแสดงในรูปของฟังก์ชันเดลต้าได้

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{i(k_x - l_x)x}dx = \lim_{g\to\infty}\int_{-g}^{g} e^{i(k_x - l_x)x}dx$$

$$= \lim_{g\to\infty}\frac{2\sin g(k_x - l_x)}{k_x - l_x}$$

$$= 2\pi\delta(k_x - l_x)$$

ดังนั้นฟังก์ชันไอเกนโมเมนตัมในปริภูมิทั้งหมดสามารถเขียนได้ว่า

$$u_k(r) = (8\pi^3)^{-\frac{1}{2}} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$$

ซึ่งในกรณีที่เป็นออร์โทโกนอล ความสัมพันธ์จะเป็น

$$\int u_E^*(\vec{r}) u_k(\vec{r}) d^3 r = \delta(k_x - l_x)\delta(k_y - l_y)\delta(k_z - l_z) \equiv \delta^3(k - l)$$

คุณสมบัติของฟังก์ชันเดลต้าดิแรก

ความสัมพันธ์ของฟังก์ชันเดลต้ามีดังนี้

1. $\delta(x) = \delta(-x)$
2. $\delta'(x) = -\delta'(-x)$
3. $x\delta(x) = 0$
4. $x\delta'(x) = -\delta(x)$
5. $\delta(ax) = a^{-1}\delta(x)$
6. $\delta(x^2 - a^2) = (2a)^{-1}\left[\delta(x - a) + \delta(x + a)\right]$
7. $\int \delta(a - x)\delta(b - x)dx = \delta(a - b)$
8. $f(x)\delta(x - a) = f(a)\delta(x - a)$

หกสมการแรกสามารถพิสูจน์ได้โดยการคูณทั้งสองข้างของสมการด้วย f(x) ที่มีค่าต่อเนื่องและหาอนุพันธ์ได้ แล้วอินทิเกรตตลอด x เช่นสมการที่4คูณทั้งสองข้างด้วย f(x)

$$\int f(x) x\delta'(x)dx = -\delta(x)\frac{d}{dx}\left[xf(x)\right] dx$$

$$= \int \delta(x)\left[f(x) + xf'(x)\right] dx$$

ซึ่งอินทิกรัลเทอมที่สองจะมีค่าเป็นศูนย์ จะได้

$$\int f(x)x\delta'(x)dx = -\int f(x)\delta(x)dx$$

ในทำนองเดียวกันสมการที่ 7. พิสูจน์ได้โดยคูณทั้งสองข้างของสมการด้วย f(a) หรือ f(b) แล้วอินทิเกรตตลอด a หรือ b ส่วนสมการสุดท้ายจะใช้วิธีอินทิเกรตทั้งสองข้างของสมการตลอด x หรือ a

5.4 คุณสมบัติปิด (closure)

อาศัยฟังก์ชันคลื่นในกล่องและฟังก์ชันเดลต้าที่นอร์แมลไลซ์แล้วจะได้

$$\sum_k u_k^*(\vec{r}')u_k(\vec{r}) = L^{-3}\sum_{n_x=-\infty}^{\infty}\sum_{n_y}\sum_{n_z}\exp 2\pi i\left[\, n_x(x-x')n_y(y-y')n_z(z-z')\right]/L$$

ถ้า L มีค่ามากๆ เราสามารถแทน

$$\sum_{n_x=-\infty}^{\infty} \text{ ด้วย } \int_{-\infty}^{\infty} dn_x = \frac{L}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk_x$$

ดังนั้น

$$\sum_k u_k^*(\vec{r}')u_k(\vec{r}) \xrightarrow[L\to\infty]{} (8\pi^3)^{-1}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} e^{i[k_x(x-x')k_y(y-y')k_z(z-z')]}dk_x dk_y dk_z$$

$$= \delta(x-x')\delta(y-y')\delta(z-z') = \delta^3(r-r')$$

การคำนวณอีกวิธีหนึ่งโดยใช้ฟังก์ชันเดลต้า

$$\int u_k^*(\vec{r}')u_k(\vec{r})d^3r = \iiint u_k^*(\vec{r}')u_k(\vec{r})dk_x dk_y dk_z = \delta^3(\vec{r}-\vec{r}')$$

คุณสมบัติแบบปิด แสดงให้เห็นว่าฟังก์ชันไอเกนของโมเมนตัมเป็นออร์โทนอร์มอล

5.5 การกระจายไอเกนฟังก์ชันโมเมนตัม

ฟังก์ชัน $\psi(\vec{r})$ ที่มีค่าต่อเนื่องสามารถเขียนในเทอมของฟังก์ชันเดลตาได้ว่า

$$\psi(\vec{r}) = \int \psi(\vec{r}')\delta^2(\vec{r}-\vec{r}')d^3r'$$

จากสมการข้างบนจะได้

$$\psi(\vec{r}) = \int \psi(\vec{r}')\sum_k u_k^*(\vec{r}')u_k(\vec{r})d^3r' = \sum_k A_k u_k(\vec{r})$$

$$A_k = \int u_k^*(\vec{r}')\psi(\vec{r}')d^3r'$$

ในทำนองเดียวกันจะได้ว่า

$$\psi(\vec{r}) = \int \psi(\vec{r}')\int u_k^*(\vec{r}')u_k(\vec{r})d^3k d^3r' = \int A_k u_k d^3k$$

จากสมการทั้งสองจะเห็นว่าเราสามารถกระจายฟังก์ชันของค่าคงที่ในฟังก์ชันไอเกนโมเมนตัมที่นอร์แมลไลซ์แล้วทั้งวิธีอาศัยฟังก์ชันคลื่นในกล่องและฟังก์ชันเดลตา

5.6 ฟังก์ชันความน่าจะเป็นและค่าคาดหมาย (Probability function and expectation value)

ความสัมพันธ์ระหว่างฟังก์ชันความน่าจะเป็นของโมเมนตัมกับฟังก์ชันคลื่นที่นอร์มอลไลซ์แล้วจะได้ว่า $\psi(\vec{r})$ จะเป็นสัดส่วนกับ $|A_k|^2$ ถ้าเราให้

$$P(\vec{k}) = |A_k|^2$$

ซึ่ง $\sum_k p(\vec{k}) = 1$ และ $\int p(\vec{k}) d^3k = 1$

ค่าคาดหมายของโมเมนตัม เมื่อใช้ฟังก์ชันคลื่นในกล่อง

$$\langle p \rangle = \hbar \sum_{\vec{k}} \vec{k} p(\vec{k}) = \hbar \sum_{\vec{k}} \int \vec{k} u_k^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}) d^3r \int u_k(r') \psi^*(r') d^3r'$$

ถ้าเราแทน $k u_k^*(r)$ ด้วย $i \nabla u_k^*(r)$ ลงในสมการข้างบนจะได้

$$\langle p \rangle = -i\hbar \sum_k \int u_k^*(r) \nabla \psi(r) d^3r \int u_k(r') \psi^*(r') d^3r'$$

$$= -i\hbar \iint \psi^*(r') [\nabla \psi(r)] \delta^3(r - r') d^3r d^3r'$$

$$= -i\hbar \int \psi^*(r) \nabla \psi(r) d^3r$$

ถ้าเราใช้ฟังก์ชันเดลตาที่นอร์แมลไลซ์แล้วมาใช้ รายละเอียดการคำนวณจะคล้ายๆ ข้างบนยกเว้น อินทิกรัลเชิงผิวของพื้นที่รัศมีอนันต์ จะมีค่าเป็นศูนย์เพราะ ψ จะมีค่าเข้าสู่ศูนย์ที่ระยะไกลมากๆสออดคล้องกับหลักการรวมกันได้ของคลื่น ไม่เช่นนั้นค่าเฉลี่ยของโมเมนตัมจะไม่มีความหมาย

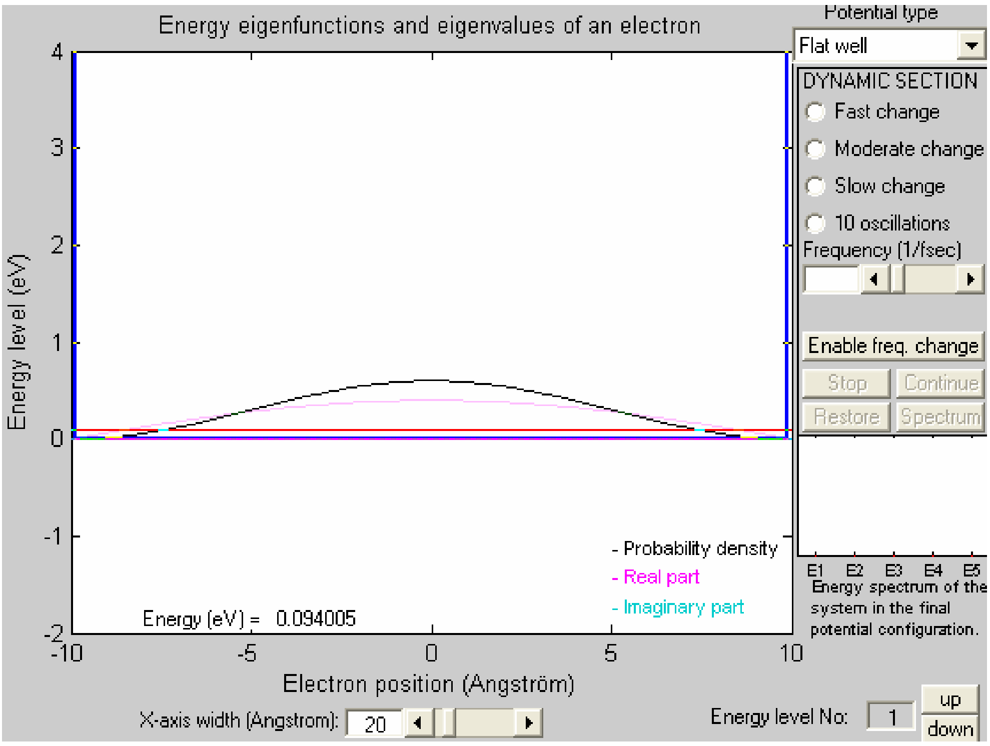
5.7 โปรแกรม potwells

เป็นโปรแกรมที่ช่วยให้นักศึกษาสามารถสังเกตดูไอเกนฟังก์ชันและค่าไอเกนด้วยตาของนักศึกษา ซึ่งจะทำให้นักศึกษาเข้าใจการแก้สมการชเรอดิงเงอร์ได้ดีขึ้น นักศึกษาสามารถเลือกศักย์ได้หลายชนิด โดยโปรแกรมจะใช้รูทีน SCHROSC.DLL เพื่อแสดงการเปลี่ยนแปลงของไอเกนฟังก์ชันของอิเล็กตรอนภายในบ่อกวัดแกว่งและใช้รูทีน SCHRSTP.DLL เพื่อแสดงการเปลี่ยนแปลงของไอเกนฟังก์ชันของอิเล็กตรอนจากบ่อหนึ่งไปอีกบ่อหนึ่ง โปรแกรมคำนวณผลเฉลยของสมการ

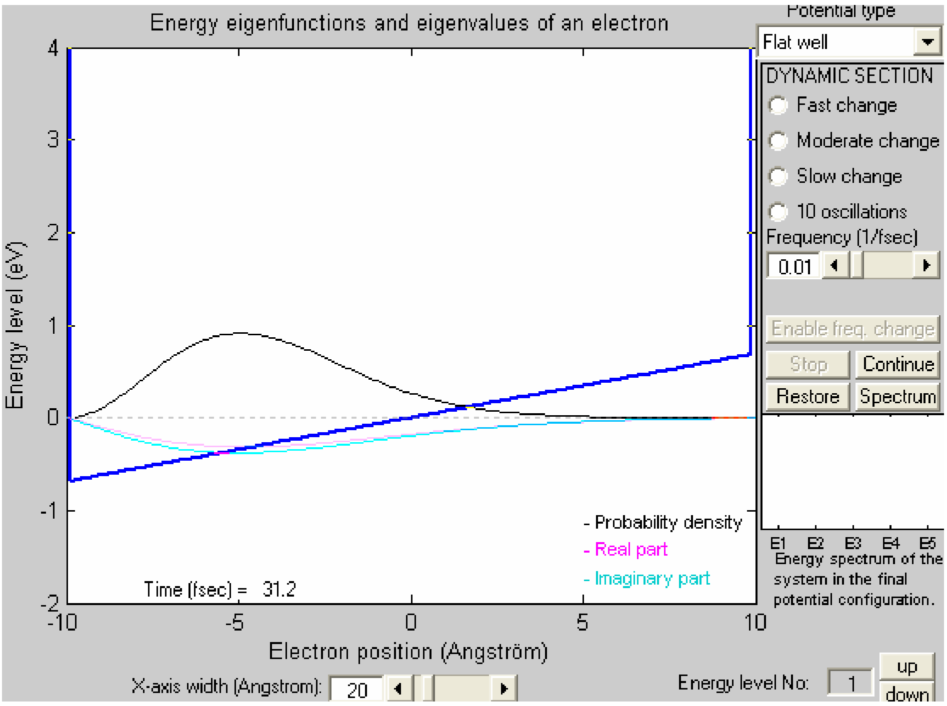
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u}{dx^2}+V_0u=\mathrm{E}u$$

ซอร์สโค๊ดของโปรแกรมอยู่ในภาคผนวก2 ตัวอย่างของเอาท์พุทจากโปรแกรม คือ

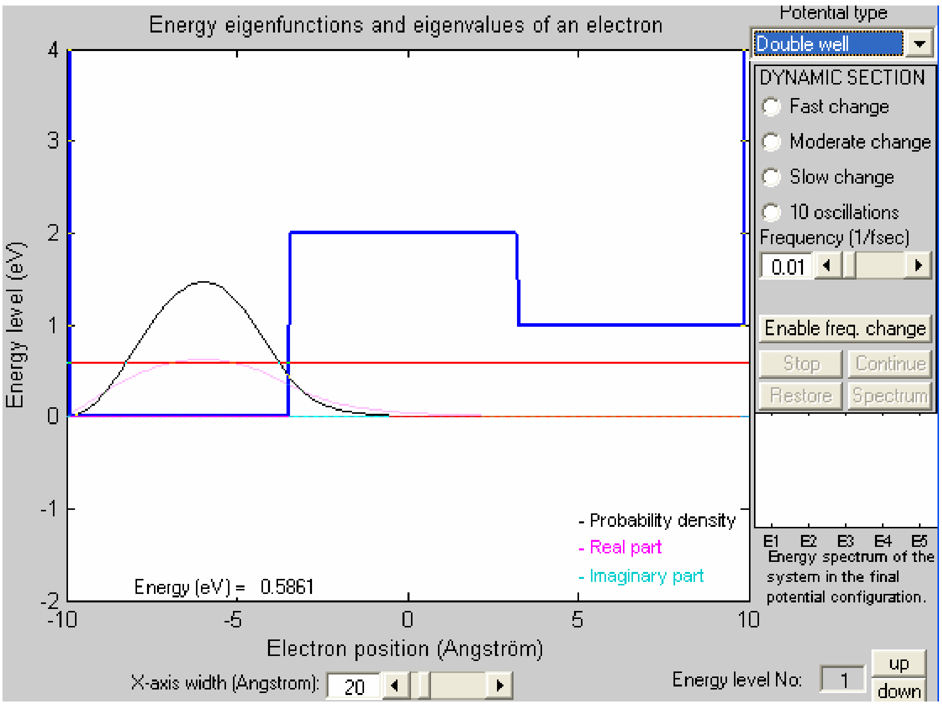
1. บ่อระนาบ แสดงไอเกนฟังก์ชันและไอเกนของอิเล็กตรอน



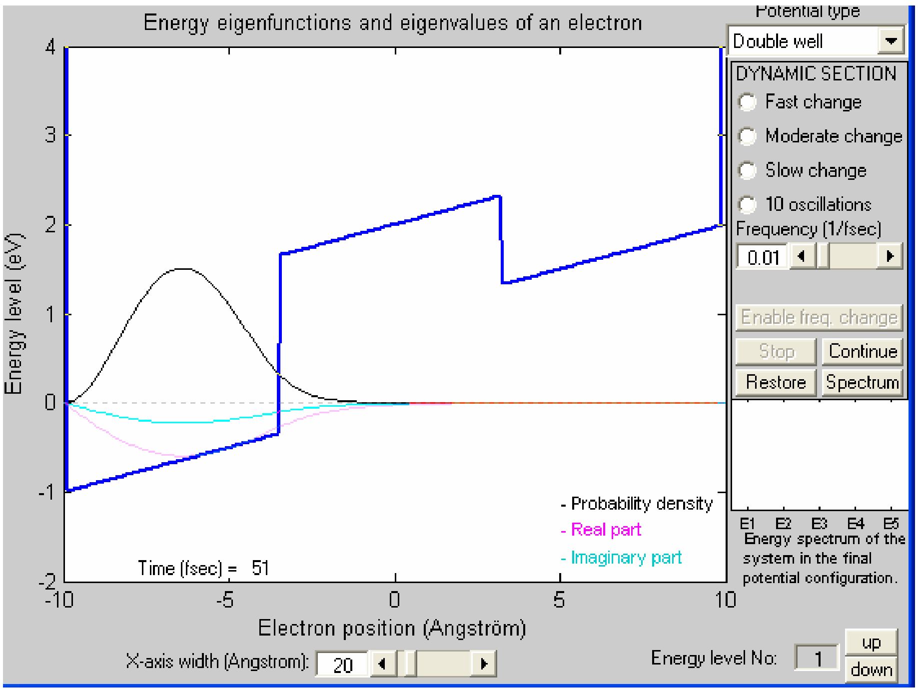
การเปลี่ยนแปลงเมื่อเวลาผ่าน 31.2 t วินาที



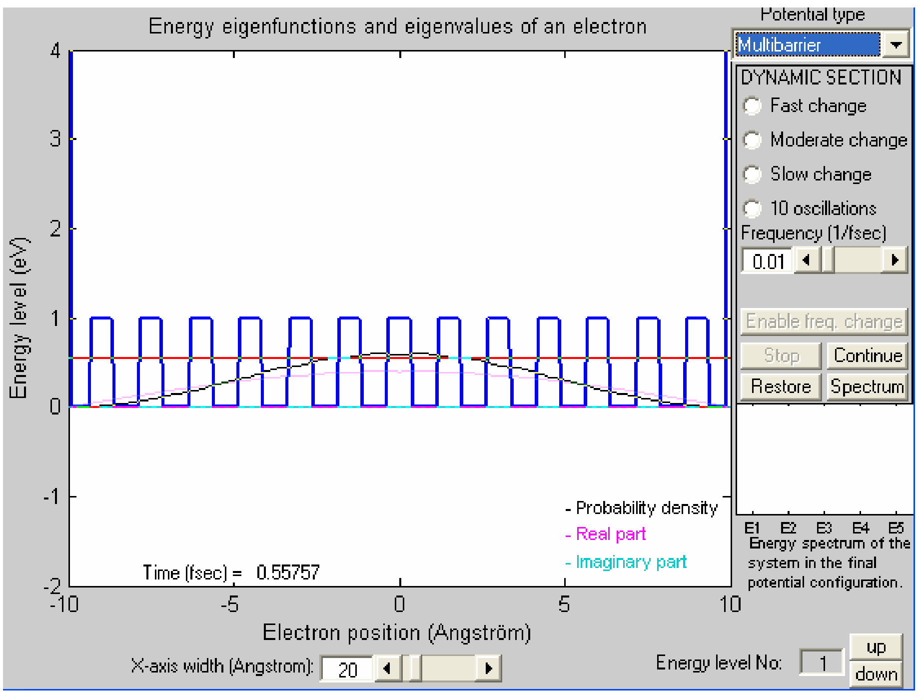
2.บ่อคู่



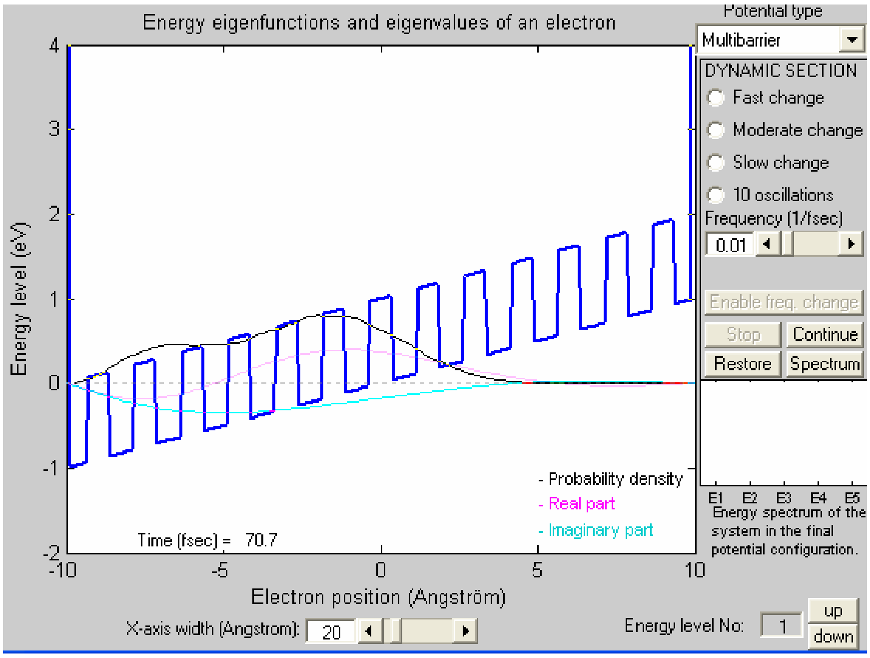
การเปลี่ยนแปลงเมื่อเวลาผ่าน 51 t วินาที



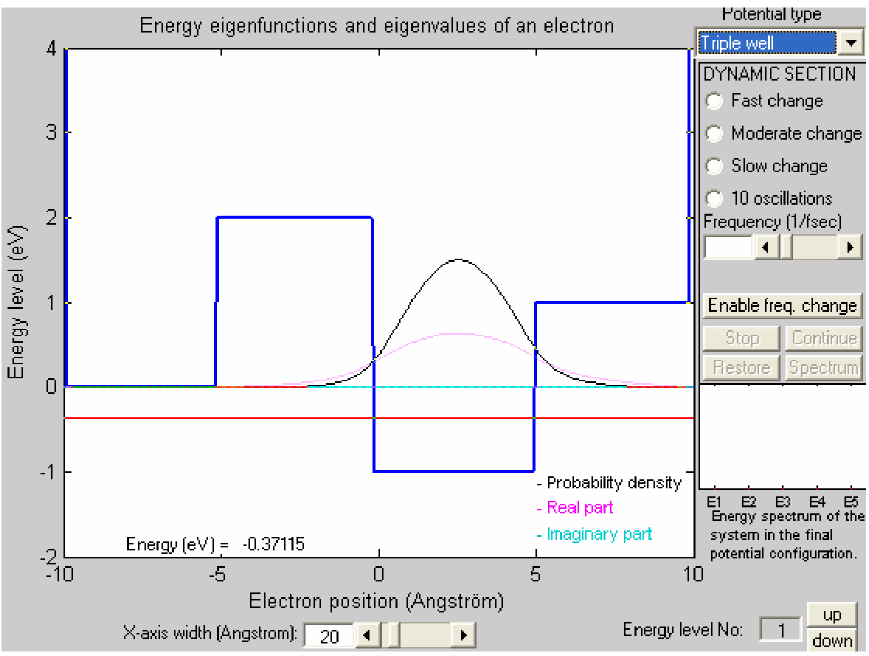
3. กำแพงกั้นหลายอัน



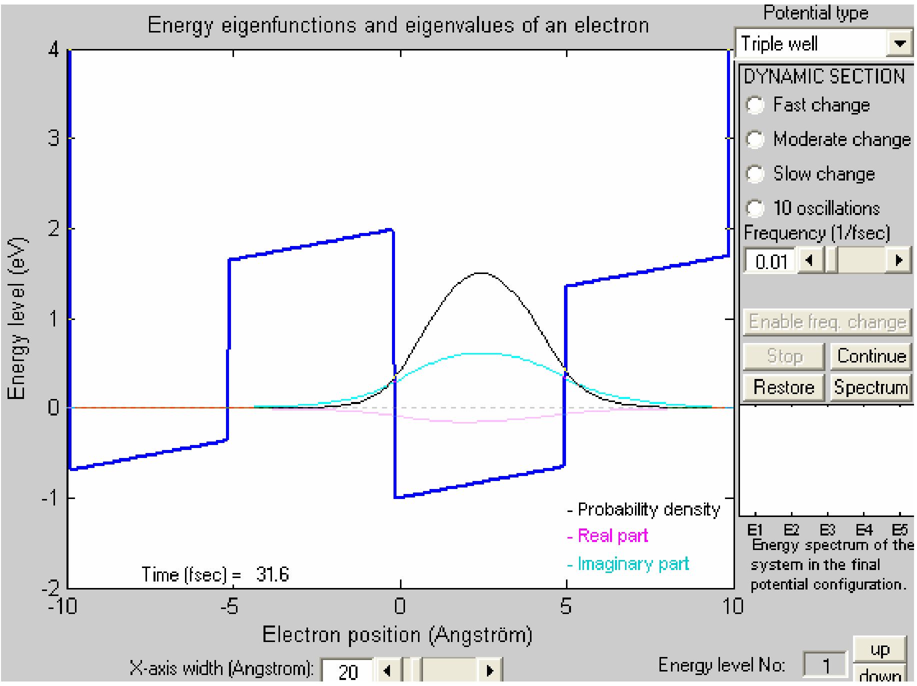
การเปลี่ยนแปลงเมื่อเวลาผ่าน 70.7 t วินาที



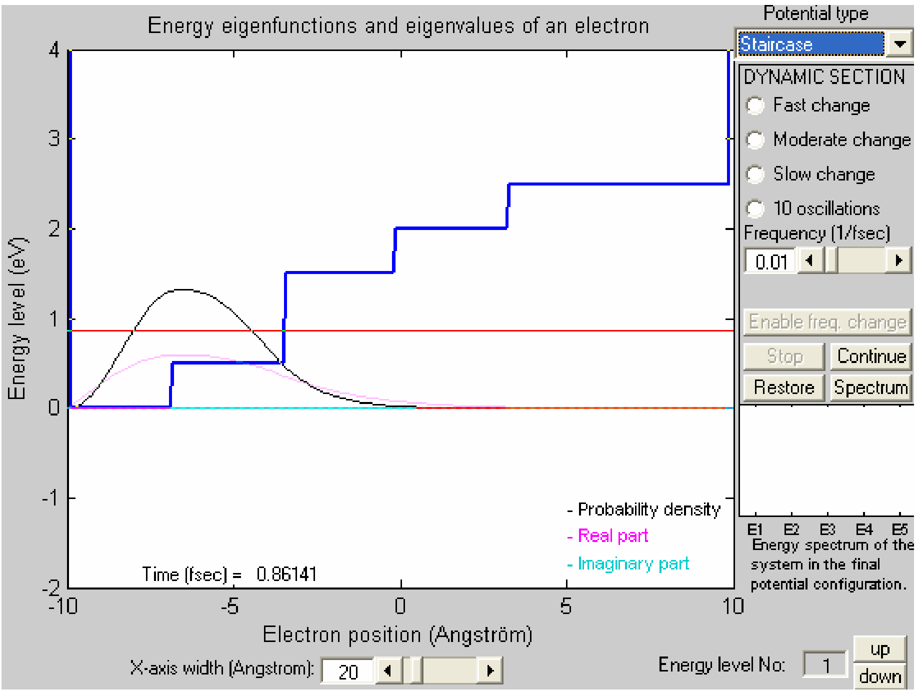
4. สามบ่อ



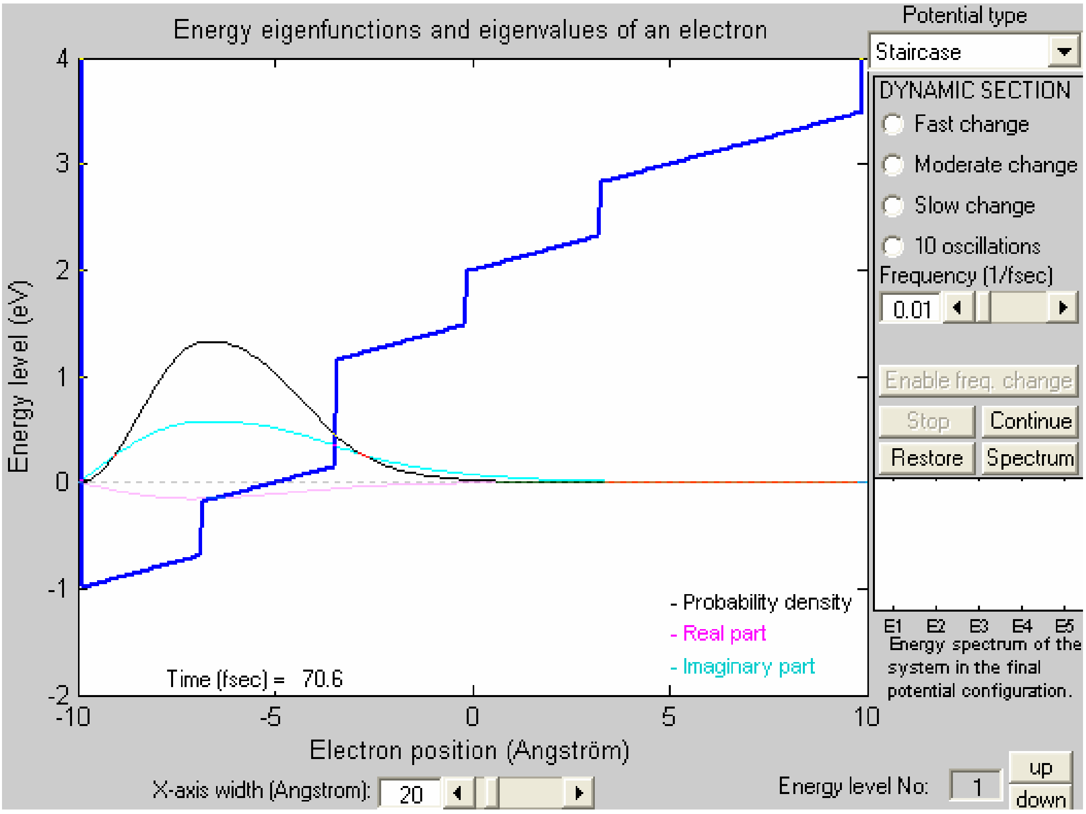
การเปลี่ยนแปลงเมื่อเวลาผ่าน 31.6 t วินาที



5. ขั้นบันได



การเปลี่ยนแปลงเมื่อเวลาผ่าน 70.6 t วินาที



ตัวอย่าง 1 ฟังก์ชัน ψ (x) สามารถกระจายได้เป็น

$$\psi(x) = \sum C_n \Phi_n(x)$$

เมือ Φ_n เป็น เซตออร์โทโกนอล จงหาสมการของสัมประสิทธิ์ C_m

วิธีทำ กำหนดให้ $\int \Phi^*_m(x)\ \psi\ (x)dx = \sum C_n \int \Phi^*_m(x)\Phi_m(x)dx$

ดังนั้น

$$C_m = \frac{\int \Phi^*_m(x)\ \psi(x)dx}{\int \Phi^*_m(x)\Phi_m(x)dx}$$

ในกรณีที่ เซต $\{\Phi_n(x)\}$ เป็นออร์โทโกนอล

$$\int \Phi^*_n(x)\Phi_m(x)dx = \delta_{nm}$$

เราจะได้ว่า

$$C_m = \int \Phi^*_m(x)\ \psi\ (x)dx$$

ตัวอย่างที่ 2 กำหนดให้ตัวดำเนินการโปรเจ็ค (Projection operator)

$$P_i\psi\ (x) = \Phi_i(x)\int \Phi^*_i(x)\ \psi\ (x)dx = \Phi_i(x)(\Phi_i, \psi)$$

ปริมาณ (Φ_i, ψ) เรียกว่าผลคูณสเกลาร์ (scalar product)ของ Φ_i และ ψ ถ้าเราใช้สัญญาลักษณ์ดิแรก จะเขียนได้เป็น $< i\,|\psi >$

ก. จงแสดงว่า $P_m\psi\ (x) = C_m\Phi_m(x)$ เมือ C_m เป็นสัมประสิทธ์ของการกระจาย
ข. จงแสงดงว่า $P_m^2 = P_m$
ค. จงแสงดว่า $\sum P_n = 1$

วิธีทำ ก. ψ (x) สามารถกระจายได้เป็น

$$\psi(x) = \sum C_n \Phi_n(x)$$

$$P_m \psi(x) = \Phi_m(x) \sum C_n \int \Phi^*_m(x) \Phi_n(x) dx = Cm \Phi_m(x)$$

ถ้าใช้สัญญาลักษณ์ดิแรก การกระจายเขียนเป็น

$$|\psi> = \sum C_n |n>$$

และสามารถเขียน ตัวดำเนินการโปรเจ็คเป็น

$$P_m = |m><m|$$

จะได้ว่า

$$P_m|\psi> = |m><m|\psi> = |m>C_m$$

ข.จากข้อ ก.

$$P_m \psi(x) = C_m \Phi_m(x)$$

ใช้ P_m อีกครั้ง

$$P_m^2 \psi(x) = C_m P_m \Phi_m(x) = C_m \Phi_m(x)$$

หรือ

$$P_m^2 = P_m$$

ถ้าใช้สัญญลักษณ์ดิแรก

$$P_m^{\;2} = P_m|m\rangle\langle m|m\rangle\langle m| = |m\rangle\langle m| = P_m$$

อาศัย $\langle m|m\rangle = \int \Phi^*_m \Phi_n dx = 1$

ค. พิจารณาผลรวม

$$\sum P_m \psi(x) = \sum C_m \Phi_m(x) = \psi(x)$$

เราสรุปได้ว่า $\sum P_n = 1$

$$|\psi\rangle = \sum C_m|n\rangle = \sum |n\rangle\langle n|\psi\rangle$$

แต่

$$\sum P_n|\psi\rangle = \sum |n\rangle\langle n|\psi\rangle = |\psi\rangle$$

ดังนั้น

$$\sum |n\rangle\langle n| = 1$$

เมือ $\sum P_n$ เป็น ตัวดำเนินการเอกลักษณ์ (identity operator)

ตัวอย่าง 3 orthonormal set ของฟังก์ชันในตัวอย่างที่ผ่านมาสามารถใช้แทน periodic function ใดๆ f(x) ในช่วง $(-\pi, +\pi)$ โดยที่

$$f(x) = \frac{A_0}{\sqrt{2\pi}} + \sum_{n=1}^{\infty} (A_n \cos nx + B_n \sin nx)$$

จงหาสัมประสิทธ์ A_0, A_n และ B_n

วิธีทำ

$$A_0 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi} f(x)\, dx$$

$$A_n = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\pi}- \cos nx . f(x)\, dx$$

$$B_n = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\pi} \sin nx\, . f(x)\, dx$$

จะได้ว่า $a_0 = \frac{\sqrt{2}}{\pi}$, $a_n = \frac{A_n}{\sqrt{\pi}}$, $b_n = \frac{B_n}{\sqrt{\pi}}$

แบบฝึกหัดบทที่ 5

1. จงพิสูจน์คุณสมบัติของฟังก์ชันเดลตาดิแรกทั้ง 8 ข้อ

2. จงพิสูจน์ว่า
   ก) $F\left[\delta\left(x-x_0\right)\right]=F\left[\delta\left(x\right)\right]e^{-ikx_0}$
   ข) $F\left[\delta\left(ax\right)\right]=\frac{1}{a}F\left[\delta\left(\frac{k}{a}\right)\right]$

3. จงหาการแปลงฟูเรียร์ของ $e^{-x^2/2}$

4. จงหาของ

$$f\left(x\right)=\frac{\pi-x}{2},\ 0\le x\le 2\pi$$

5. จงแสดงว่า ค่าไอเกนของตัวดำเนินการชนิดเฮอร์มิเทียนเป็นค่าจริง