บทที่ 7
การกวัดแกว่งฮาร์มอนิก

การเคลื่อนที่ใน 1 มิติ ของอนุภาคซึ่งถูกจับโดยแรงภายนอก (พลังงานศักย์) ให้อยู่ภายในบริเวณที่จำกัดโดยที่แรงเป็นสัดส่วนกับระยะทางเป็นหนึ่งในปัญหาหลักของกลศาสตร์แบบดั้งเดิม ความสำคัญของปัญหานี้จะนำไปสู่ความเข้าใจในระบบที่สลับซับซ้อนขึ้น ในแง่ของกลศาสตร์ควอนตัมปัญหาการกวัดแกว่งฮาร์มอนิก (harmonic oscillator) มีความสำคัญมาก เช่น การสั่นของอะตอมในโมเลกุลและในผลึก ทฤษฎีควอนตัมของสนามแม่เหล็กไฟฟ้า การสั่นของสนามแม่เหล็กไฟฟ้าในช่องกลาง ที่สามารถอธิบายได้โดยใช้การกวัดแกว่งฮาร์มอนิกการกระตุ้นอะตอมให้มีการเปลี่ยนระดับพลังงาน การแก้ปัญหาการกวัดแกว่งฮาร์มอนิก เราจะเริ่มจากสมการของชเรอดิงเงอร์ อย่างไรก็ตามเราสามารถแก้ปัญหานี้โดยใช้วิธีการทางพีชคณิตโดยใช้ทฤษฎีเมตริกซ์

7.1 การกวัดแกว่งฮาร์มอนิกเชิงเส้น

คุณสมบัติระยะไกล

$$-\frac{\eta^2}{2m}\frac{d^2u}{dx^2}+\frac{1}{2}kx^2u = Eu$$

กำหนดให้ $\xi = \alpha x$

ถ้า $\alpha^4 = \frac{mk}{\eta}, \lambda = \frac{2E}{\eta}\left(\frac{m}{k}\right)^{\frac{1}{2}} = \frac{2E}{\eta\omega}$

เมื่อ $\omega = \left(\frac{k}{m}\right)^{\frac{1}{2}}$ เป็นความถี่เชิงมุมของการกวัดแกว่งฮาร์มอนิกดั้งเดิม

จะได้

$$\frac{d^2u}{d\xi^2}+\left(\lambda-\xi^2\right)u=0$$

ในบริเวณห่างไกล $\xi \to \pm\infty$ ฟังก์ชันคลื่นจะอยู่ในรูป

$$u\left(\xi\right)=\xi^n e^{\pm\frac{1}{2}\xi^2}$$

ซึ่งจะเป็นผลเฉลยของสมการข้างบน อย่างไรก็ตามผลเฉลยจริงควรจะอยู่ในรูป

$$u\left(\xi\right)=H(\xi)e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$$

เมื่อ $H\left(\xi\right)$ เป็นพหุนาม

แทน $u\left(\xi\right)$ ลงในสมการข้างบน จะได้

$$H''-2\xi H'+\left(\lambda-1\right)H=0$$

ระดับพลังงาน จะหาผลเฉลยของ $H\left(\xi\right)$ ในรูป

$$u\left(\xi\right)=\xi^s\left(a_0+a_1\xi+a_2\xi^2+......\right) \qquad a_0\neq 0, s\geq 0$$

สมการของ $H\left(\xi\right)$ ต้องหาค่าได้ทุกๆค่าของ ξ ดังนั้น สัมประสิทธิ์ ของแต่ละกำลังของ ξ ต้องเท่ากับศูนย์

$$s(s-1)\ a_0 = 0$$
$$(s+1)\ sa_1 = 0$$
$$(s+2)(s+1)a_2 - (2s+1-\lambda)\ a_0 = 0$$
$$(s+3)(s+2)a_3 - (2s+3-\lambda)\ a_1 = 0$$
$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$$
$$(s+v+2)(s+v+1)a_{v+2} - (2s+2v+1-\lambda)a_v = 0$$

เมื่อ v เป็นเลขเต็มหน่วย เนื่องจาก $a_0 \neq 0$ ดังนั้นจากสมการแรกจะได้S=0 หรือ S =1

จากสมการที่สอง จะได้ S=0 หรือ a_1=0 หรือทั้งคู่เท่ากับศูนย์

สมการที่ 3 ให้ a_2 ในเทอมของ a_0

สมการที่ 4 ให้ a_4 ในเทอมของ a_1

สมการทั่วไป ให้ a_{v+2} ในรูป a_v

a_1 และ สัมประสิทธิ์อื่นๆที่มีตัวห้อยเป็นเลขคี่มีค่าเป็นศูนย์ทุกๆตัว ฟังก์ชันคลื่นจะเป็นคู่หรือเป็นคี่ขึ้นกับ S=0 หรือ S=1

$$\frac{a_{v+2}}{a_v} \xrightarrow[v\to\infty]{} \frac{2}{v}$$

อนุกรม $H(\xi)$ จะต้องสิ้นสุด หมายความว่า

$$\lambda = 2s + 2v + 1$$

v ต้องเป็นเลขคู่ เพราะว่า $a_0 \neq 0$

S=0 หรือ 1 ทำให้ $\lambda = 2v + 1$

ถ้าเขียนในรูปเลขควอนตัม(quantum number n)

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

พลังงานที่จุดศูนย์

จากสมการระดับพลังงานข้างบนจะเห็นว่าสอดคล้องกับสมมติฐานของแพลงค์ และกฎควอนไทเซชั่นของทฤษฎีควอนตัมแบบเก่า อย่างไรก็ตามค่าของพลังงานที่สถานะพื้นเรียกว่าพลังงานที่จุดศูนย์ $E = \frac{1}{2}\hbar\omega$ เป็นลักษณะเฉพาะของกลศาสตร์ควอนตัมที่เกี่ยวข้องกับหลักความไม่แน่นอน

7.2 พหุนามเฮอร์ไมท์ (Hermite polynomials)

พหุนามลำดับที่ n ของสมการ

$$H_n - 2\xi H_n + 2nH_n = 0$$

เมื่อ $\lambda = 2n + 1$ เรียกว่า พหุนามเฮอร์ไมท์ $H_n(\xi)$

เขียน $H_n(\xi)$ ในรูป $s(\xi, s)$ เรียกว่าฟังก์ชันก่อกำเนิด (generating function)

$$s(\xi, s) = e^{\xi^2 - (s-\xi)^2} = e^{-s^2 + 2s\xi} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi)}{n!} s^n$$

ต้องการแสดงว่า $H_n(\xi)$ เป็นผลเฉลยของสมการ

$$\frac{\partial s}{\partial \xi} = 2se^{-s^2+2s\xi} = \sum_n \frac{2s^{n+1}}{n!} H_n(\xi)$$

$$= \sum_n \frac{s^n}{n!} H_n(\xi)$$

$$\frac{\partial S}{\partial s} = (-2s + 2\xi)e^{-s^2+2s\xi} = \sum_n \frac{(-2s + 2\xi)}{n!} H_n(\xi)$$

$$= \sum_n \frac{s^{n-1}}{(n-1)!} H_n(\xi)$$

สำหรับ s ที่ยกกำลังเท่ากัน

$$H_n = 2nH_{n-1}$$

$$H_{n+1} = 2\xi H_n - 2nH_{n-1}$$

สำหรับฟังก์ชันใดๆในรูป $f(s-\xi)$ จะได้ว่า

$$\frac{\partial f}{\partial s} = -\frac{\partial f}{\partial \xi}$$

ดังนั้น

$$\frac{\partial^n S}{\partial s^n} = e^{\xi^2} \frac{\partial^n}{\partial s^n} e^{-(s-\xi)^2}$$

$$= (-1)^n e^{\xi^2} \frac{\partial^n}{\partial \xi^n} e^{-(s-\xi)^2}$$

จะได้สมการลำดับที่ n ของพหุนามเฮอร์ไมท์

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{\partial^n}{\partial \xi^n} e^{-\xi^2}$$

ตัวอย่างพหุนาม 3 ตัวแรก คือ

$$H_0(\xi) = 1$$
$$H_1(\xi) = 2\xi$$
$$H_3(\xi) = 4\xi^2 - 2$$

7.3 ฟังก์ชันคลื่นของการกวัดแกว่งฮาร์มอนิก (Harmonic oscillator wave function)

$$u_n(x) = N_n H_n(\alpha x) e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2}$$

ต้องการนอร์แมลไลซ์ $u_n(x)$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |u_n(x)|^2 dx = \frac{|N_n|^2}{\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} H_n^2(\xi) e^{-\xi^2} d\xi = 1$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-s^2+2s\xi} e^{-t^2+2t\xi-\xi^2} d\xi = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{s^n t^m}{n!m!} \int_{-\infty}^{\infty} H_n(\xi) H_m(\xi) e^{-\xi^2} d\xi$$

อินทีเกรตทางซ้ายได้

$$\pi^{\frac{1}{2}} e^{2st} = \pi^{\frac{1}{2}} \sum_{-\infty}^{\infty} \frac{(2st)^n}{n!}$$

เทียบกำลังของ s และ t จะได้

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n^2(\xi) e^{-\xi^2} d\xi = \pi^{\frac{1}{2}} 2^n n!$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n(\xi) H_m e^{-\xi^2} d\xi = 0, n \neq m$$

ดังนั้น

$$N_n = \left(\frac{\alpha}{\pi^{\frac{1}{2}} 2^n n!} \right)^{\frac{1}{2}}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} u_n^*(x) u_m(x) dx = \frac{N_n^* N_m}{\alpha^2} \int_{-\infty}^{\infty} \xi H_n(\xi) H_m(\xi) e^{-\xi^2} d\xi$$

สามารถหาค่าได้โดยใช้ฟังก์ชันก่อกำเนิด

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-s^2+2s\xi} e^{-t^2+2t\xi-\xi^2} d\xi = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{s^n t^m}{n!m!} \int_{-\infty}^{\infty} H_n(\xi) H_m(\xi) e^{-\xi^2} d\xi$$

และ

$$\pi^{\frac{1}{2}} (s+t) e^{2st} = \pi^{\frac{1}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} 2^n \left(s^{n+1} t^n + s^n t^{n+1} \right) \left(\frac{1}{n!} \right)$$

เทียบกันเทอมต่อเทอม

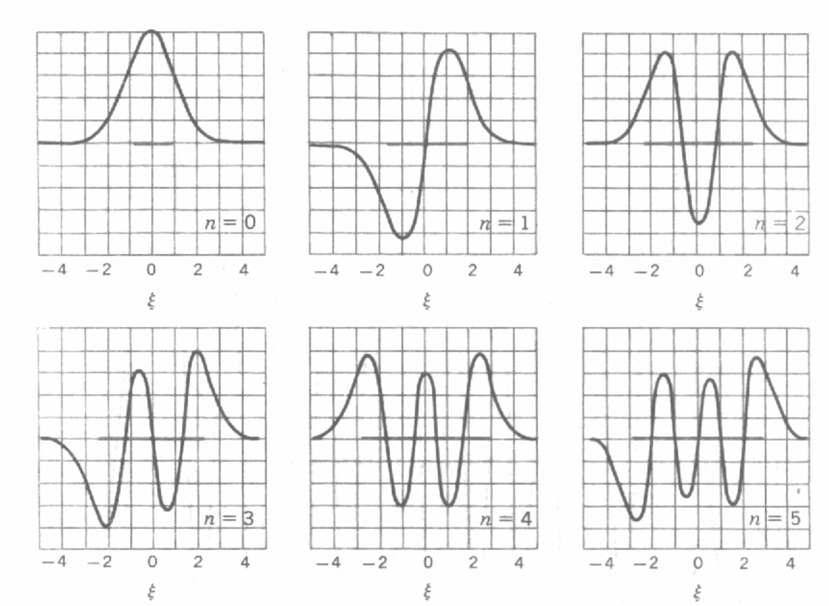
$$\int_{-\infty}^{\infty} u_n^*(x) u_m(x) dx = \left\{ \frac{1}{\alpha} \left(\frac{n+1}{2} \right)^{\frac{1}{2}} \text{''''''''} m = n+1 \right.$$

$$= \left\{ \frac{1}{\alpha} \left(\frac{n}{2} \right)^{1/2} \text{''''''''} m = n-1 \right.$$

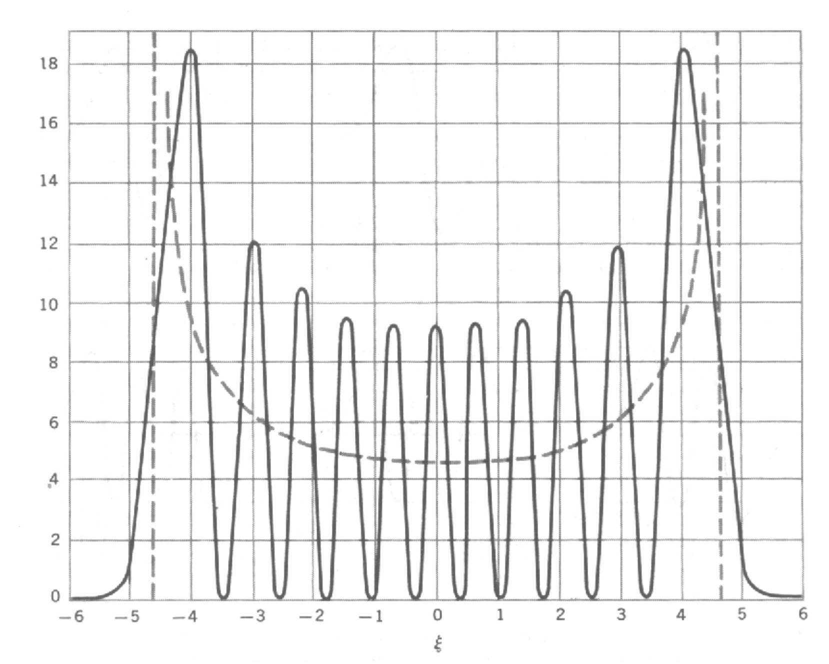
= 0 อื่นๆ

7.4 การเปรียบเทียบกับทฤษฎีดั้งเดิม

ความหนาแน่นความน่าจะเป็นตำแหน่ง $|u_n|^2$ เมื่อ n มีค่าน้อยจะแตกต่างจากการกวัดแกว่งฮาร์มอนิกดั้งเดิม แต่ถ้า n มีค่ามากๆ จะมีค่าใกล้เคียงกัน



รูปที่ 7.1 ไอเกนฟังก์ชันพลังงานของ 6 สถานะแรก ของการกวัดแกว่งอาร์มอนิก



รูปที่ 7.2 ความน่าจะเป็นตำแหน่งของสถานะที่ n=10 มีค่าใกล้เคียงกับการกวัดแกว่งฮาร์มอนิกดั้งเดิม

ค่าคาดหมายของพลังงานศักย์หาได้จาก

$$\langle v \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} u_n^*(x)\,\frac{1}{2}kx^2 u_n(x)\,dx = \frac{1}{2}kx\;\frac{2n+1}{2\alpha^2} = \frac{1}{2}\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\,\omega = \frac{1}{2}E_n$$

เหมือนทฤษฎีดั้งเดิม

<x> = <p> = 0 ทุกๆ ฟังก์ชันคลื่นการกวัดแกว่งฮาร์มอนิก ดังนั้น

$$(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle$$

$$(\Delta p)^2 = \langle p^2 \rangle$$

$$\therefore \Delta x \cdot \Delta p = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar$$

สำหรับฟังก์ชันคลื่นของสเตทพื้น

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

จะได้ $\Delta x . \Delta p = \frac{1}{2}\hbar$ น้อยที่สุด

7.5 กลุ่มคลื่นการกวัดแกว่ง (Oscillating wave packet)

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}kx^2\right)\psi(x,t)$$

ผลเฉลย

$$\psi(x,t) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n U_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}$$

$$= e^{-\frac{1}{2}i\varpi_c t} \sum_{n=0}^{\infty} A_n U_n(x) e^{-in\varpi_c t}$$

$$\psi(x,0) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n U_n(x)$$

$$= \frac{\alpha^{\frac{1}{2}}}{\pi^{\frac{1}{2}}} e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 (x-a)^2}$$

คูณด้วย $U_m^*(x)$ แล้วอินทิเกรต

$$A_m = \int_{-\infty}^{\infty} U_m^*(x)\psi(x,0)dx = \frac{N_m^*}{\pi^4 \alpha^{\frac{1}{2}}} \int_{-\infty}^{\infty} H_m(\xi) e^{-\frac{1}{2}\xi^2} e^{-\frac{1}{2}(\xi-\xi_0)^2} d\xi$$

อาศัยฟังก์ชันก่อกำเนิด

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-s^2+2s\xi} e^{-(\xi^2-\xi\xi_0+\frac{1}{2}\xi_0)} d\xi = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{s^n}{n!} \int_{-\infty}^{\infty} H_n(\xi) e^{-(\xi^2-\xi\xi_0+\frac{1}{2}\xi_0^2)} d\xi$$

แล้วจะได้ว่า

$$\pi^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{4}\xi_0^2+s\xi_0} = \pi^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{4}\xi_0^2} \sum_{n=0}^{\infty} (s\xi_0)^n \frac{1}{n!}$$

$$= \frac{\alpha^{\frac{1}{2}}}{\pi^{\frac{1}{4}}} \exp(-\frac{1}{2}\xi^2 - \frac{1}{4}\xi_0^2 - \frac{1}{2} i\omega_c t + \xi\xi_0^2 e^{-i\omega_c t})$$

$$= \frac{\alpha^{\frac{1}{2}}}{\pi^{\frac{1}{4}}} \exp(-\frac{1}{2}(\xi^2 - \xi_0 \cos\omega_c t)^2$$

$$- i(\frac{1}{2}\omega_c t + \xi\xi_0 \sin\omega_c t - \frac{1}{4}\xi_0^2 \sin 2\omega_c t)$$

ความหนาแน่นความน่าจะเป็นตำแหน่ง

$$\left|\psi(x,t)\right|^2 = \frac{\alpha}{\pi^{\frac{1}{2}}} e^{-\alpha^2(x-a\cos\omega_c t)^2}$$

แสดงว่า ψ แทนกลุ่มคลื่นซึ่งการกวัดแกว่งโดยไม่เปลี่ยนรูปร่าง รอบ x=0 โดยมีแอมพลิจูด a เมื่อ a เข้าใกล้สู่ ศูนย์ ψ จะเข้าใกล้ $U_0(x)e^{-\frac{1}{2}\varpi_c t}$

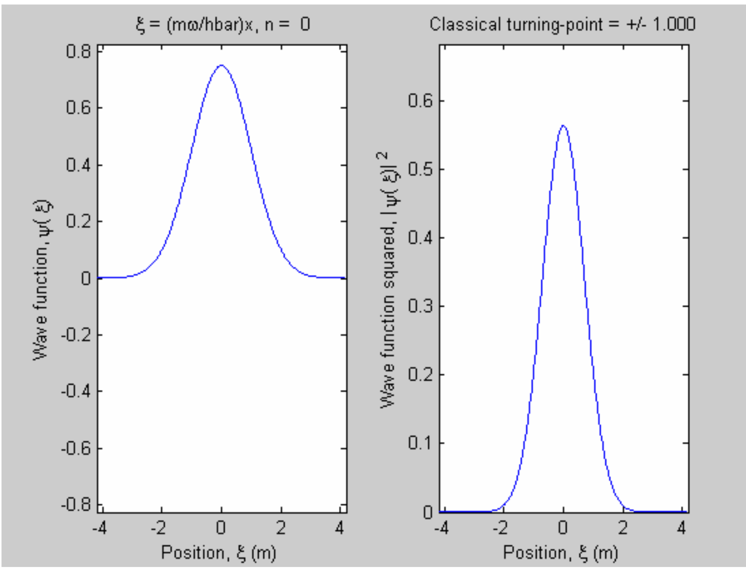
โปรแกรมแสดงฟังก์ชันคลื่นของการกวัดแกว่งฮาร์มอนิก โดยจะเขียนกราฟ ψ และ $|\psi|^2$ ของสเตทที่ n ต่าง ๆตามที่เราอินพุทเข้าไปทางคีย์บอร์ด

```
%simple harmonic oscillator wave function psi_n(xi)and wave
%function squared |psi_n(xi)|^2
%xi=(m*w/hbar)*x
%using relation psi_n=((2/n)^0.5)*((xi*psi_n-1)-((((n-
%1)/2)^0.5)*psi_n-2))
%input quantum index n=0,1,2,3, ... from keyboard
clear;
clf;
npoints=500;            %(number of data points in plot) - 1
nlim=100;   %arbitrary limit to value of n that can be plotted

n=input('Input quantum index n = ');
            %input from keyboard value of quantum index n

            %of wave function to be plotted (n=0,1,2,3, ...)

if n < 0;    error('minimum value of n must be greater or equal to
0');     end;
if n > nlim; error('maximum value of n must be less than or equal to
100'); end;

ximax=sqrt((2*n)+1);          %classical turning point
xiplot=(3/((n+1)^(1/3)))+(1.2*ximax);   %plot range of x-axis
deltaxi=2*xiplot/npoints;     %increment in xi

Ao=(1/pi)^(1/4);              %normalization amplitude for n=0
An=1.1*Ao/((n+1)^0.1);        %fix vertical scale

xi(1)=-xiplot;                %first value of xi

for j=2:1:npoints+1
   xi(j)=xi(j-1)+deltaxi;
   psi1(j)=Ao*exp((-xi(j)^2)/2);    %known n=0 ground-state wave
function
   psi2(j)=(sqrt(2))*xi(j)*psi1(j);
                    %known n=1 first excited-state wave function
   psi(j)=psi2(j);
end
      if n < 1; psi=psi1; end;
```

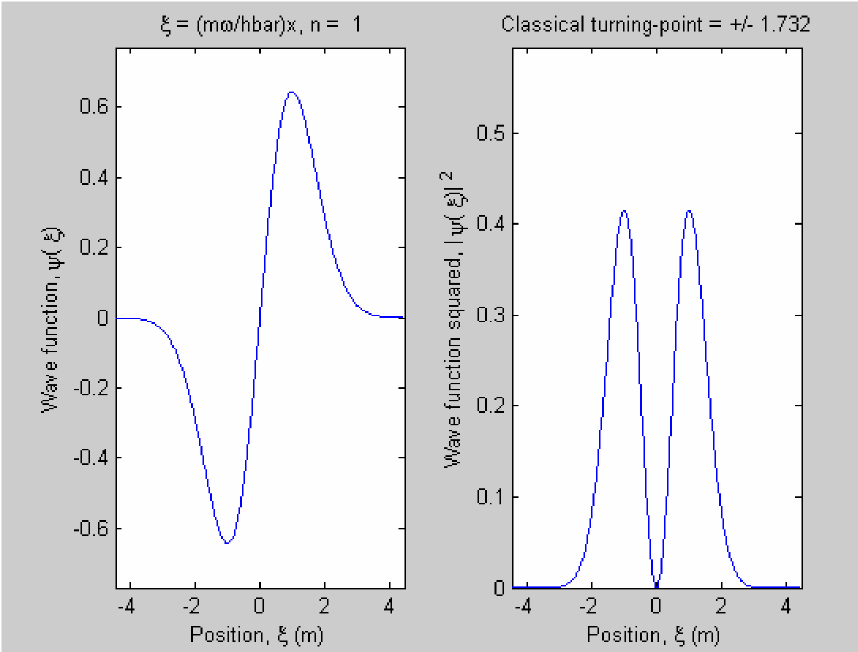
```
if n>=2
      for ni=2:1:n

for j=2:1:npoints+1
   xi(j)=xi(j-1)+deltaxi;     %increment to new value of xi
   psi(j)=(sqrt(2/ni))*((xi(j)*psi2(j))-((sqrt((ni-1)/2))*psi1(j)));
   psi1(j)=psi2(j);           %update new value of psi_(n-2)
   psi2(j)=psi(j);            %update new value of psi_(n-1)
end
            end
end

figure(1);
subplot(1,2,1),plot(xi,psi);
axis([-xiplot,xiplot,-An,An]),xlabel('Position, \xi
(m)'),ylabel('Wave function, \psi( \xi)');
ttl = ('Chapt6Exercise4c, \xi = (m\omega/hbar)x');
ttltmp = sprintf(', n =%3.0f',n);
title ([ttl,ttltmp]);
subplot(1,2,2),plot(xi,abs(psi.^2));
axis([-xiplot,xiplot,0,An^2]),xlabel('Position, \xi
(m)'),ylabel('Wave function squared, | \psi( \xi)| ^2');
ttl2=sprintf('Classical turning-point = +/- %5.3f',ximax);
title (ttl2);
```

เอาท์พุทจากโปรแกรม คือ

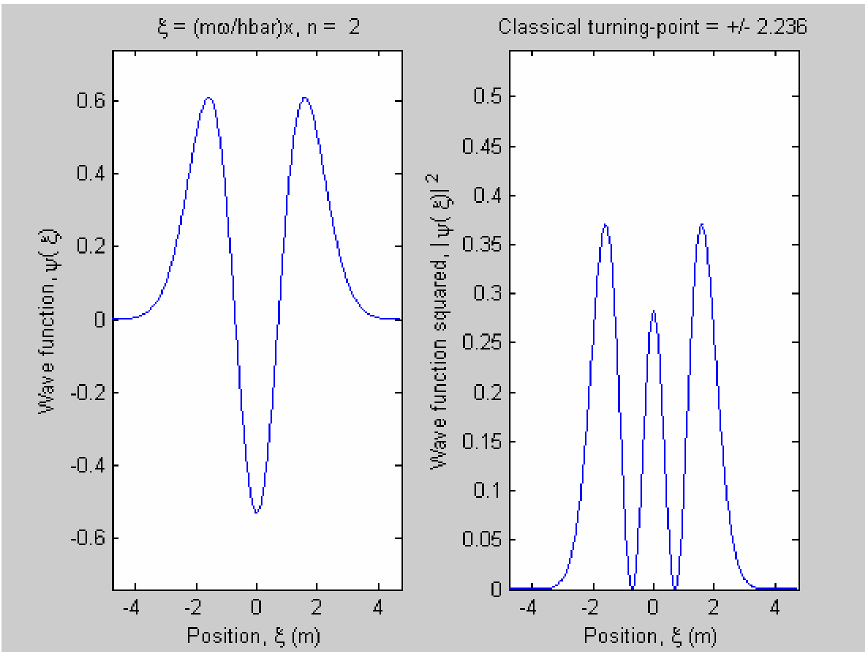
สำหรับ n = 0 สเตทพื้น



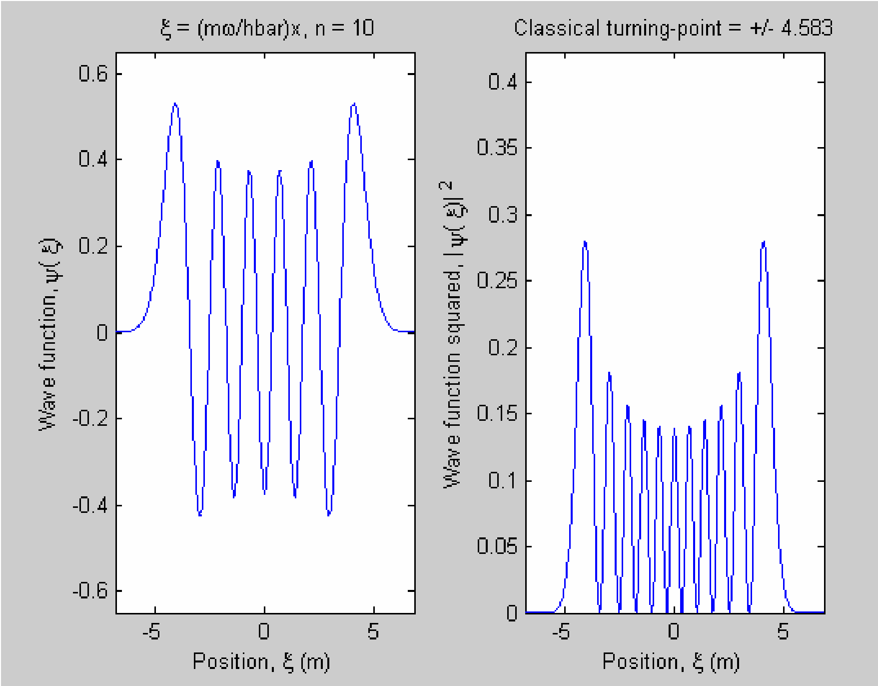
สำหรับ n = 1 สเตทกระตุ้นที่ 1



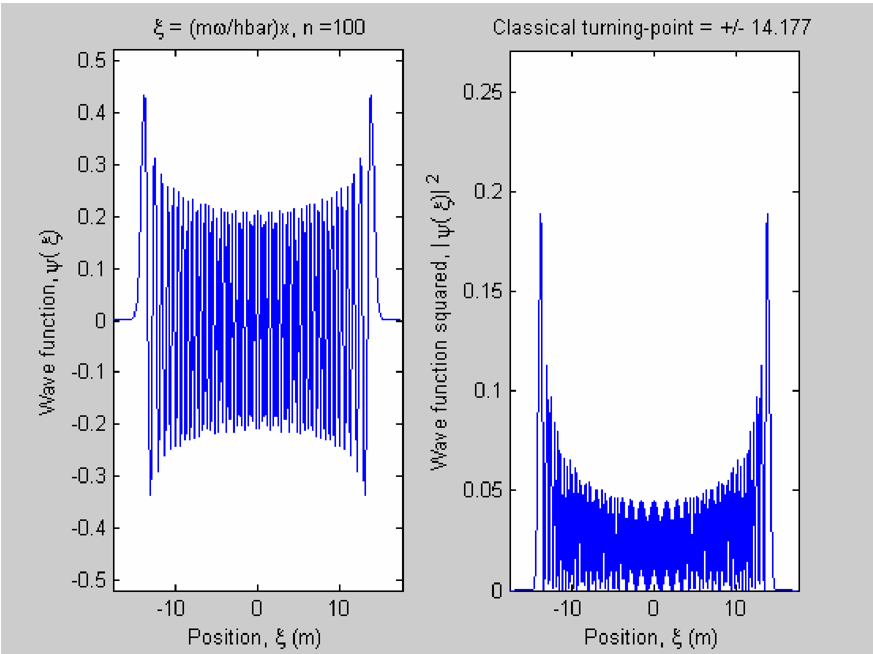
สำหรับ n = 2 สเตทกระตุ้นที่ 2



สำหรับ n = 10 สเตทกระตุ้นที่ 10



สำหรับ n = 100 สเตทกระตุ้นที่ 100



ตัวอย่างที่ 7.1 การกวัดแกว่งฮาร์มอนิก 1 มิติ

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2$$

เมื่อ k เป็นค่าคงที่บวกจริง ความถี่เชิงมุม $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ เมื่อ m เป็นมวลของตัวกวัดแกว่ง

ก) จงแก้สมการชเรอดิงเงอร์สำหรับศักย์นี้และจงหาไอเกนสเตทคงที่(stationary eigenstates) ของระบบนี้

ข) จากข้อ ก) จงหาค่าของค่าไอเกนพลังงาน (energy eigenvalues) ของตัวกวัดแกว่งและจงอธิบายค่าไอเกนพลังงานที่น้อยสุด

วิธีทำ ก) แฮลมิลโทเนี่ยนของระบบคือ

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2$$

หรือ

$$H = -\frac{\eta^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2}x^2$$

ดังนั้น สมการค่าไอเกน คือ

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

กำหนดให้ $\varepsilon = \frac{2E}{\eta\omega}$ และเปลี่ยนตัวแปรเป็น $\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\eta}}x$ จะได้

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

ดังนั้น

$$\frac{\eta\omega}{2}\frac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2} + E\psi(\xi) - \frac{\eta\omega}{2}\xi^2\psi(\xi) = 0$$

หรือ

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

เมื่อ ξ มีค่ามากๆ จะเหลือสมการ

$$\frac{d^2\psi}{d\psi^2} + \xi^2\psi = 0$$

ผลเฉลยของสมการนี้จะขึ้นกับคุณสมบัติระยะไกลของฟังก์ชันคลื่น เมื่อ ξ มีค่ามากจะได้ว่า

$$\psi(\xi) \approx e^{-\frac{\xi^2}{2}} \qquad \text{หรือ} \qquad \psi(\xi) = H(\xi)e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

แทนลงในสมการ

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} = \frac{d}{d\xi}\left[H'(\xi)e^{-\frac{\xi^2}{2}} - \xi H(\xi)e^{-\frac{\xi^2}{2}}\right]$$

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

หรือ $$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} = \left[H''(\xi) - 2\xi H'(\xi) + (\xi^2 - 1)H\right]e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

ดังนั้น

$$\left[H''(\xi) - 2\xi H'(\xi) + (\xi^2 - 1)H\right]e^{-\frac{\xi^2}{2}} + (\varepsilon - \xi^2)He^{-\frac{\xi^2}{2}} = 0$$

จะได้สมการอนุพันธ์พหุนามเฮอร์ไมท์

$$\frac{d^2H(\xi)}{d\xi^2} - 2\xi\frac{dH(\xi)}{d\xi} + (\varepsilon - 1)H(\xi) = 0$$

ฟังก์ชันคลื่นใกล้จุด $\xi = 0$ (x=0) เราสามารถแทนด้วย โพลิโนเมียลนี้ การแก้สมการเราแทน

$$H(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \xi^n$$

ดังนั้น

$$\frac{d^2H}{d\xi^2} = \sum_{n=0}^{\infty} a_n n(n-1)\xi^{n-2} = \sum_{n=0}^{\infty} a_{n+2}(n+2)(n+1)\xi^n$$

และ

$$-2\xi\frac{dH}{d\xi} = -\sum_{n=0}^{\infty} 2na_n\xi^n$$

ดังนั้น

$$\sum_{n=0}^{\infty}\left[a_{n+2}(n+2)(n+1) - 2na_n + (\varepsilon - 1)a_n\right]\xi^n = 0$$

ดังนั้น สัมประสิทธิ์ของอนุกรมนี้จะต้องเท่ากับศูนย์ก็คือ

$$a_{n+2}(n+2)(n+1) + (\varepsilon - 2n - 1)a_n = 0$$

หรือ

$$a_{n+2} = \frac{2n + 1 - \varepsilon}{(n+2)(n+1)}a_0$$

เรากำหนดให้ a_0 ไม่เท่ากับศูนย์ และ a_1 = 0 ทำให้ได้ค่า สัมประสิทธิ์ที่เป็นเลขคู่ถ้าให้ a_0 = 0 และ $a_1 \neq 0$ จะได้สัมประสิทธิ์ที่เป็นเลขคี่ค่า a_0 และ a_1 หาได้จากการนอลแมลไลซ์ของฟังก์ชันคลื่น

ข) เริ่มต้นให้ สัมประสิทธิ์ของ $H(\xi) = 0$ สำหรับบางค่าของ n ซึ่งค่า n นั้นทำให้ได้

$$2n + 1 - \varepsilon = 0$$

หรือ

$$\varepsilon = 2n + 1$$

นั้นคือ

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\eta\omega$$

พลังงานต่ำสุดคือ $E_0 = \frac{\eta\omega}{2}$ ที่อุณหภูมิ T = 0 จากความสัมพันธ์ไม่แน่นอน

$$\Delta x . \Delta p = \frac{\eta}{2}$$

ตัวอย่างที่ 7.2 อนุภาคพลังงาน $E = \frac{h\,\omega}{2}$ เคลื่อนที่ภายใต้ศักย์ของตัวกวัดแกว่งฮาร์มอนิก จงเปรียบเทียบโอกาสที่จะพบอนุภาคในบริเวณต้องห้ามดั้งเดิม(classically forbidden) กับโอกาสที่จะพบอนุภาคที่มีพลังงานสูง

วิธีทำ สำหรับตัวกวัดแกว่งฮาร์มอนิกดั้งเดิม

$$x = A_n\cos\omega t \quad , \quad P = -mA_n\,\omega\sin\omega t$$

ดั้งนั้น พลังงานคือ

$$E_n = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 = \frac{m\,\omega^2A^2n}{2}$$

ทำให้ได้ An = $\frac{\sqrt{2E_n}}{m\omega^2}$ บริเวณต้องห้ามดั้งเดิมของทฤษฎีคือบริเวณที่ |x| > An หรือ

|x| > $\frac{\sqrt{2E_n}}{m\omega^2}$

ดังนั้น โอกาสที่จะพบอนุภาคในบริเวณนี้คือ

$$P_n = \int_{-\infty} \psi^*_n(x)\psi_n(x)dx + \int_{An} \psi^*_n(x)\psi_n(x)dx$$

$$P_n = 2\int_{An} \psi^*_n(x)\psi_n(x)dx$$

$$P_n = 1 - 2\int_{0} \psi^*_n(x)\psi_n(x)dx$$

สำหรับสเตทพื้น

$$P_0 = 2\int_{An} \psi^*_0(x)\psi_0(x)dx = 2\sqrt{1}/n\lambda^2 \int_{A0} e^{-x/\lambda} dx$$

ให้ $\eta = x/\lambda$ จะได้

$$P_0 = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{An/\lambda} e^{-\eta} d\eta = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{0} e^{-\eta} d\eta$$

เรามี $A_0/\lambda = 1$ ดังนั้น

$$P_0 = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_{0} e^{-\eta} d\eta$$

แสมการโดยใช้การวิเคราะห์เชิงตัวเลขได้

$$P_0 = 0.1578$$

สำหรับสเตทกระตุ้นโอกาสที่จะพบอนุภาคในบริเวณต้องห้าม คือ

$$P_n = 1 - 2\int^{An} \frac{1}{\sqrt{n\lambda^2 2^n n}}\ \underline{\ 1\ }\ H_n^2(x)(\frac{x}{n})\ e^{-x/\lambda}\ dx$$

$$P_n = 1 - \frac{1}{\sqrt{\pi 2^{n-1} n}} \int_0 H_n^2 (\frac{x}{n})\ e^{-x/\lambda}\ dx$$

ให้ $\eta = x/\lambda$ จะได้ว่า

$$Pn = 1 - \frac{1}{\sqrt{\pi 2^{n-1} n}} \int_0 H_n^2 (\frac{x}{n})\ e^{-\eta}\ dx$$

จากค่าของพหุนามเฮอร์ไมท์

$H_0(\eta) = 1$, $H_1(\eta) = 2\eta$, $H_2(\eta) = 4\eta^2 - 2$ และ $A_1/\lambda = \sqrt{3}$ จะได้ว่า

$$P_1 = 1 - \frac{4}{\sqrt{\pi}}\int_0 \eta^2 e^{-\eta}\ d\eta$$

แก้สมการโดยใช้การวิเคราะห์เชิงตัวเลขจะได้ว่า $P_1 = 0.1116$

เราสามารถหา P_2 ได้จาก

$$P_2 = 1 - \frac{1}{4\sqrt{\pi}} \int^{\sqrt{5}} (16\eta^4 - 16\eta^2 + 4)\ e^{-\eta}\ d\eta$$

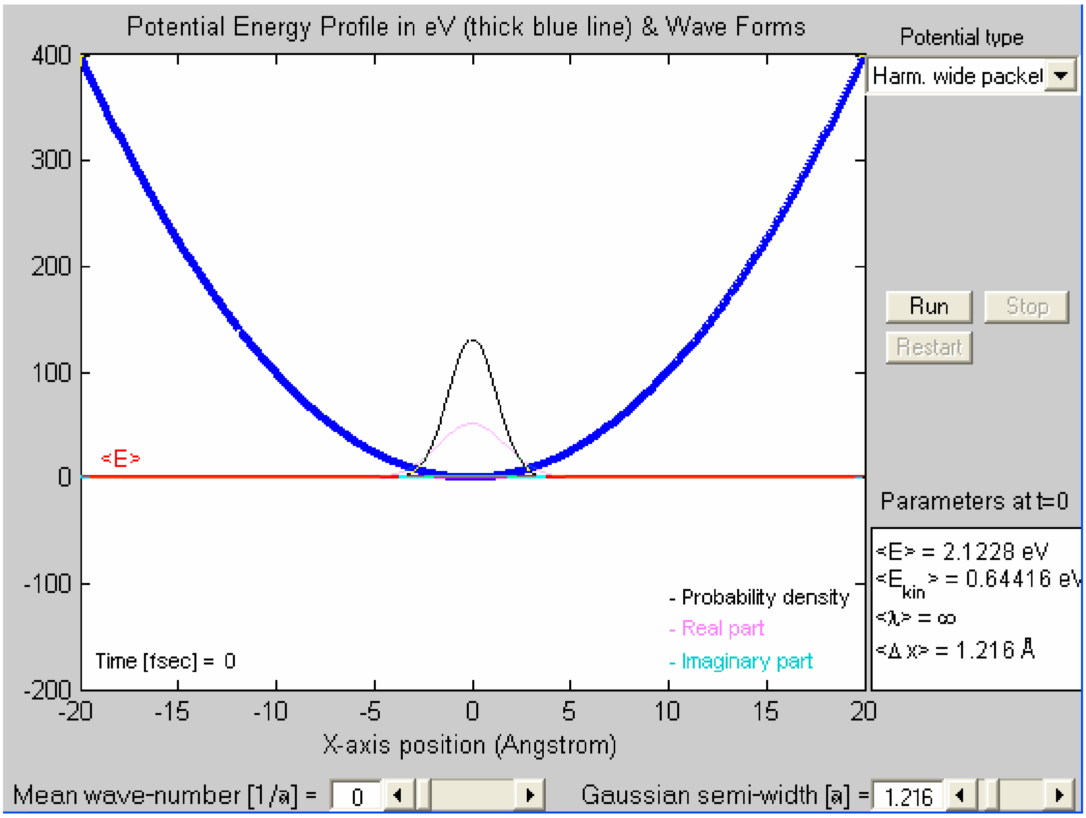
$$P_2 = 1 - \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int^{\sqrt{5}} (4\eta^4 - 4\eta^2 + 4)\ e^{-\eta}\ d\eta$$

$$= 0.0951$$

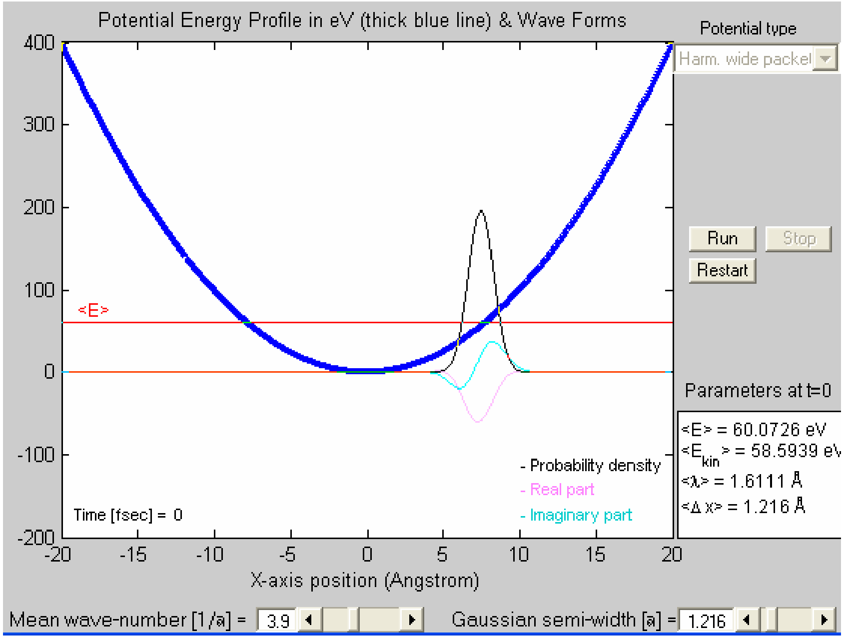
สรุปได้ว่า $P_0 = 0.1573$, $P_1 = 0.1116$, $P_3 = 0.0951$ ค่า Pn จะน้อยลงเมื่อระดับพลังงานสูงขึ้น อนุภาคที่มีพลังงานสูง จะเข้าใกล้อนุภาคของทฤษฎีดั้งเดิม มากขึ้น

ตัวอย่างที่ 7.3 โปรแกรมแสดงการเคลื่อนที่ของกลุ่มคลื่นภายใต้ศักย์กวัดแกว่งฮาร์มอนิกอยู่ในภาคผนวก 1

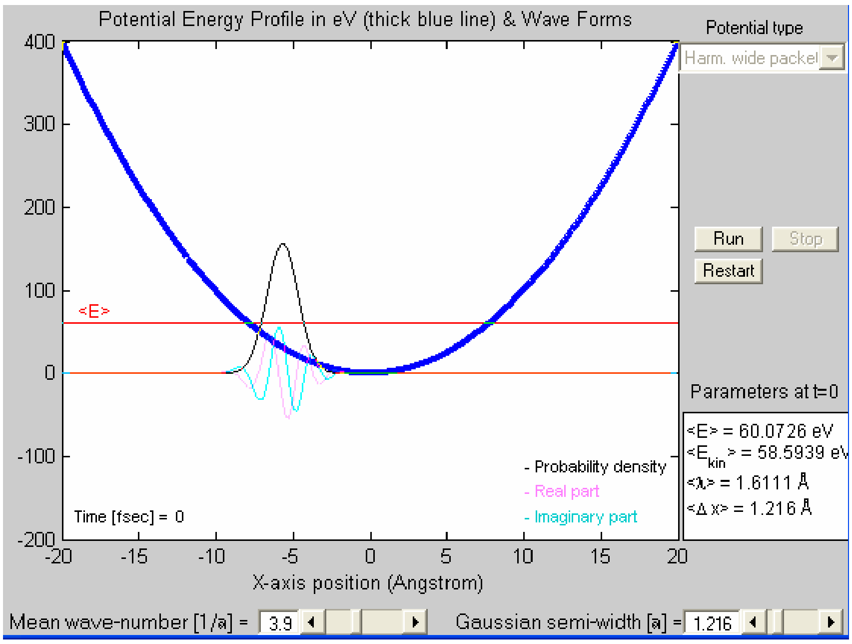
กรณีที่ 1 $\langle \mathrm{E} \rangle = 2.1228\ eV$ กลุ่มคลื่นจะอยู่ภายในศักย์เป็นส่วนใหญ่ มีส่วนน้อยที่สามารถทะลุกำแพงศักย์ออกมาได้



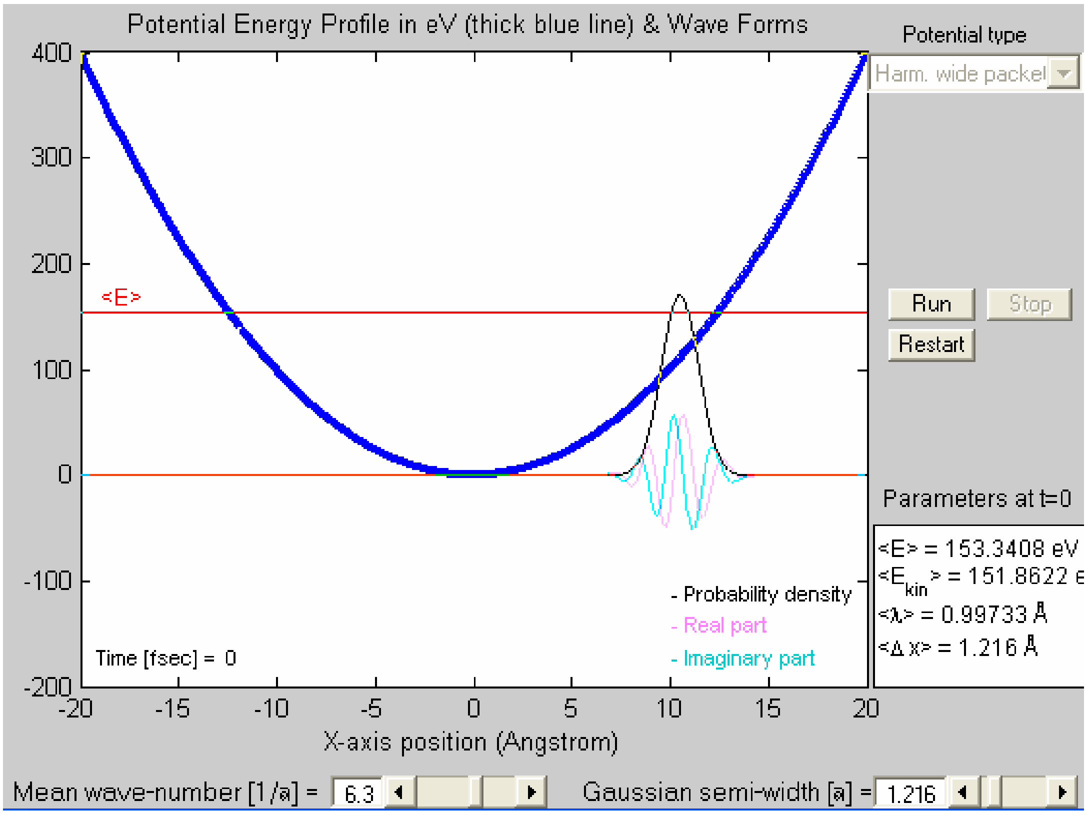
กรณีที่ 2 $\langle E \rangle = 60.0726\ eV$ t = 0.2วินาที กลุ่มคลื่นจะมีการแผ่กระจายออกมาภายนอกกำแพงศักย์เพิ่มมากขึ้น



กรณีที่ 3 $\langle E \rangle = 60.0726\ eV$ t = 0.5 วินาที



กรณีที่ 4 $\langle E \rangle = 153.3408\ eV$ t = 0.2 วินาที เมื่อพลังงานมีค่าสูงมากขึ้น คลื่นจะสามารถทะลุผ่านกำแพงศักย์ออกมาได้เกือบหมด



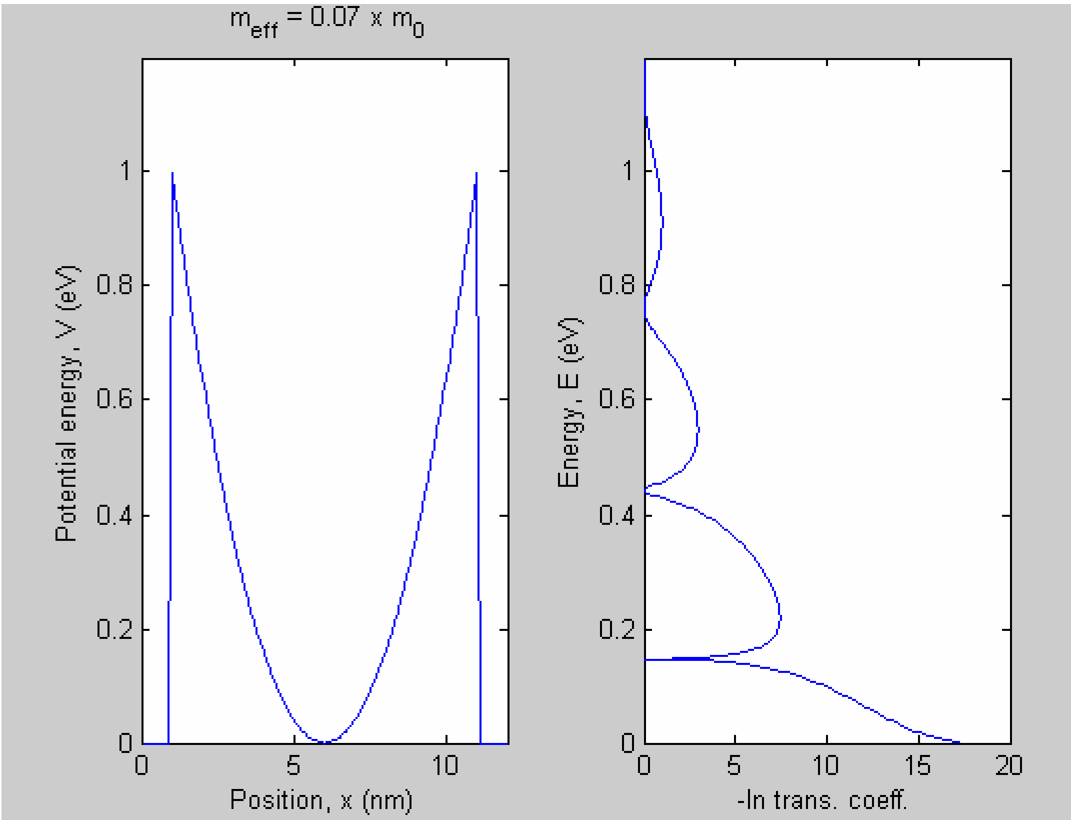
ตัวอย่างที่ 7.4 โปรแกรมต่อไปนี้คำนวณสัมประสิทธิ์การทะลุผ่านกำแพงศักย์กวัดแกว่งฮาร์มอนิก

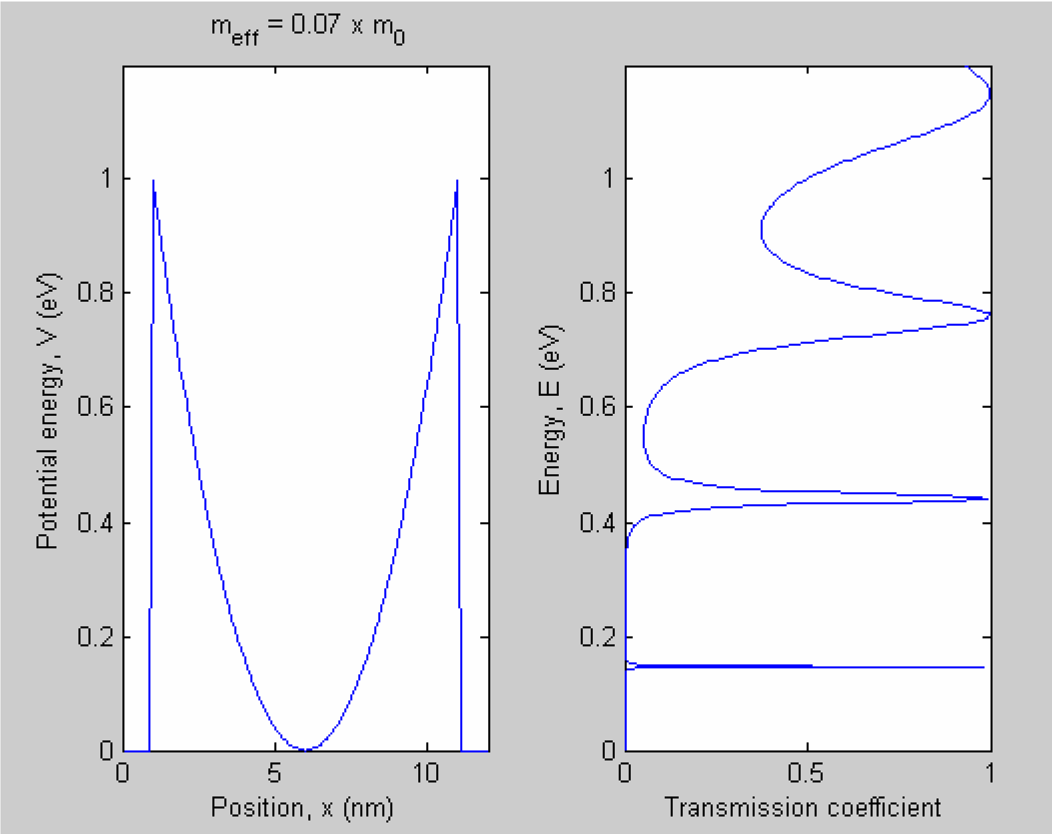
```
%transmission through parabolic potential well
clear
clf;

N=120;                          %number of samples of potential
dL=1e-10;                       %position increment (m)
for j=1:101
   y(j)=((j-51)/50)^2;          %parabolic potential
end

V(1:9)=0;V(10:110)=y;V(111:N)=0;      %potential array

Emin=pi*1e-5;                   %add (pi*1.0e-5) to energy to avoid divide by zero
Emax=1.2;                       %maximum particle energy (eV)
npoints=400;                    %number of points in energy plot
dE=Emax/npoints;                %energy increment (eV)
hbar=1.05457159e-34;            %Planck's constant (J s)
eye=complex(0.,1.);             %square root of -1
m0=9.109382e-31;                %bare electron mass (kg)
meff=0.07;                      %effective electron mass / m0
m=meff*m0;                      %effective electron mass (kg)
echarge=1.6021764e-19;          %electron charge (C)
```

```
  for j=1:npoints
    E(j)=dE*j+Emin;
    bigP=[1,0;0,1];
        %default value of matrix bigP
        for i=1:N
      k(i)=sqrt(2*echarge*m*(E(j)-V(i)))/hbar;      %wave vector at energy E
        end
    for n=1:(N-1)                    %multiply out propagation matrix
      p(1,1)=0.5*(1+k(n+1)/k(n))*exp(-eye*k(n)*dL);
      p(1,2)=0.5*(1-k(n+1)/k(n))*exp(-eye*k(n)*dL);
      p(2,1)=0.5*(1-k(n+1)/k(n))*exp(eye*k(n)*dL);
      p(2,2)=0.5*(1+k(n+1)/k(n))*exp(eye*k(n)*dL);
      bigP=bigP*p;
    end
    Trans(j)=(abs(1/bigP(1,1)))^2;                %transmission coefficient
  end

figure(1);                              %plot potential and transmission coefficient
ttl=([' m_{eff} = ',num2str(meff),' x m_0']);
subplot(1,2,1),plot([1:N]/10,V),axis([0,N/10,0,Emax]),xlabel('Position, x
(nm)'),ylabel('Potential energy, V (eV)');
title(ttl);
subplot(1,2,2),plot(Trans,E),axis([0,1,0,1.2]),xlabel('Transmission
coefficient'),ylabel('Energy, E (eV)');
```

```
figure(2);
subplot(1,2,1),plot([1:N]/10,V),axis([0,N/10,0,Emax]),xlabel('Position, x
(nm)'),ylabel('Potential energy, V (eV)');
title(ttl);
subplot(1,2,2),plot(-log(Trans),E),axis([0,20,0,Emax]),xlabel('-ln trans.
coeff.'),ylabel('Energy, E (eV)');
```

เอาท์พุทจากโปรแกรมคือ





กราฟทั้งสองรูปแสดงสัมประสิทธิ์การทะลุผ่านกำแพงศักย์กวัดแกว่งฮาร์มอนิก ซึ่งนักศึกษาสามารถเปลี่ยนค่าพารามิเตอร์ต่าง ๆภายในซอร์สโค๊ดเพื่อศึกษาเพิ่มเติมได้

แบบฝึกหัดแบบที่ 7

1. จงอาศัยหลักการไม่แน่นอน คำนวณพลังงานน้อยที่สุดของตัวกวัดแกว่งควอนตัม
2. สมมุติว่าที่เวลา t = 0 ฟังก์ชันคลื่นของอนุภาคภายใต้ศักย์กวัดแกว่งฮาร์มอนิก

   คือ $$\psi(x,0) = \frac{e^{-(y-y_0)^2}}{2}$$

   จงแสดงว่าเมื่อเวลาผ่านไป ความหนาแน่นความน่าจะเป็น (probability density) จะค่าเท่ากับ $|\psi|^2 = e^{-(y-y_0\cos\omega t)^2}$
3. จงอาศัยฟังก์ชันก่อกำเนิดสำหรับพนุนามเฮอร์ไมท์

   เพื่อคำนวณ $$\int_{-\infty}^{\infty} u_n^*(x)\, x^2 u_n(x)\,dx$$

   เพื่อ $u_n(x)$ เป็นฟังก์ชันคลื่นของตัวกวัดแกว่งฮาร์มอนิก
4. จงหาไอเกนฟังก์ชันและค่าไอเกนของตัวกวัดแกว่งฮาร์มอนิก 2 ตัว และจงหาสภาพซ้อนสถานะของระดับพลังงาน
5. อนุภาคมวล m อยู่ภายใต้ศักย์ฮาร์มอนิก 1 มิติ ที่ t = 0 ฟังก์ชันคลื่น

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

   เมื่อ $\sigma^2 \neq \frac{\hbar}{m\omega}$ เป็นค่าคงที่ จงหาโอกาสที่โมเมนตัมของอนุภาคที่ t > 0 จะมีค่าเป็นบวก