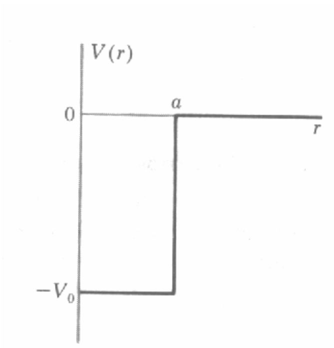
บทที่ 9
อนุภาคภายใต้ศักย์รูปสี่เหลี่ยมใน 3 มิติ

ในบทนี้จะกล่าวถึงอนุภาคภายใต้ศักย์รูปสี่เหลี่ยมใน 3 มิติ ถ้าพลังงานของอนุภาคน้อยกว่าความลึกของบ่อ อนุภาคจะถูกขังอยู่ในบ่อ เรียกว่าอยู่ในสเตทขัง (bound state)



รูปที่ 9.1 อนุภาคในบ่อ3 มิติ

$$V(r) = \begin{cases} -V0 & , \ r < a \\ 0 & , \ r > a \end{cases}$$

9.1 สมการชเรอดิงเงอร์ของอนุภาคในบ่อ3 มิติ

โมเมนตัมเชิงมุม ถ้า l = 0 จะแก้สมการคลื่นได้

$$R(r) = X(r) / \lambda$$

$$-\frac{\eta^2}{2m}\frac{d^2X}{dr^2} - V_0 X = EX \qquad \text{r<a}$$

$$-\frac{\eta^2}{2m}\frac{d^2X}{dr^2} = EX \qquad \text{r>a}$$

ผลเฉลยจะอยู่ในรูป

$$X(r) = A\sin\alpha r + B\cos\alpha r$$

$$\alpha = \left[\frac{2m\left(V_0 - |E|\right)}{h^2}\right]^{1/2}, r < a$$

$$X(r) = Ce^{-\beta t}$$

$$\beta = \left[\frac{2m|E|}{h^2}\right]^{1/2}, r > a$$

ถ้า $l \neq 0$ ให้ $\rho = \alpha r$

$$\frac{d^2R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{dR}{d\rho} + \left[1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]R = 0$$

R(r) สามารถเขียนในรูปฟังก์ชันเบสเซล (Bessel functions)

$$j_i(\rho) = \left(\frac{\pi}{2\rho}\right)^{1/2} J_{l+\frac{1}{2}}(\rho)$$ ฟังก์ชันเบสเซลทรงกลม(spherical bessel functions)

เมื่อ J เป็นฟังก์ชันเบสเซลทั่วไป (ordinary bessel functions)

สำหรับ ฟังก์ชันนอยแมนทรงกลม (spherical Neumann functions)

$$j_l(\rho) = (-1)^{l+1}\left(\frac{\pi}{2\rho}\right)^{1/2} J_{-l-\frac{1}{2}}(\rho)$$

ตัวอย่าง

$$j_0(\rho) = \frac{\sin\rho}{\rho} \qquad n_0(\rho) = -\frac{\cos\rho}{\rho}$$

$$j_1(\rho) = \frac{\sin\rho}{\rho^2} - \frac{\cos\rho}{\rho} \qquad n_1(\rho) = -\frac{\cos\rho}{\rho^2} - \frac{\sin\rho}{\rho}$$

$$j_2(\rho) = \left(\frac{3}{\rho^3} - \frac{1}{\rho}\right)\sin\rho - \frac{3}{\rho^2}\cos\rho \qquad n_2(\rho) = -\left(\frac{3}{\rho^3} - \frac{1}{\rho}\right)\cos\rho - \frac{3}{\rho^2}\sin\rho$$

ถ้า ρ มีค่าน้อย

$$j_l(\rho) \xrightarrow[\rho\to 0]{} \frac{\rho^l}{(2l+1)!!}$$

$$n_l(\rho) \xrightarrow[\rho\to 0]{} -\frac{(2l-1)!!}{\rho^{l+1}}$$

(2l+1)!!=1.3.s…..(2l+1)

สำหรับการกระจายระยะไกล

$$j_l(\rho) \xrightarrow[\rho\to 0]{} \frac{1}{\rho}\cos\left[\rho - \frac{1}{2}(l+1)\pi\right]$$

$$n_l(\rho) \xrightarrow[\rho\to 0]{} \frac{1}{\rho}\sin\left[\rho - \frac{1}{2}(l+1)\pi\right]$$

คุณสมบัติบางข้อของ $j's$ และ $n's$

$$\int j_0^2(\rho)\rho^2 d\rho = \frac{1}{2}\rho^3\left[j_0^2(\rho) + n_0(\rho)j_1(\rho)\right]$$

$$\int n_0^2(\rho)\rho^2 d\rho = \frac{1}{2}\rho^3\left[n_0^2(\rho) - j_0(\rho)n_1(\rho)\right]$$

$$n_{l-1}(\rho)j_l(\rho) - n_l(\rho)j_{l-1}(\rho) = \frac{1}{\rho^2}, l > 0$$

$$j_l(\rho)\frac{d}{d\rho}n_l(\rho) - n_l(\rho)\frac{d}{d\rho}j_l(\rho) = \frac{1}{\rho^2}, l > 0$$

ผลเฉลย เมื่อ r<a

$$R(r) = Aj_l(\alpha r)$$

ผลเฉลยเมื่อ l มีค่าใดๆ

สำหรับ r>a ผลเฉลยจะอยู่ในรูปฟังก์ชันแฮนเกลทรงกลม(spherical Hankel functions)

$$h_l^{(1)}(\rho) = j_l(\rho) + in_l(\rho)$$

$$h_l^{(2)}(\rho) = j_l(\rho) - in_l(\rho)$$

รูปแบบระยะไกล

$$h_l^{(1)}(\rho)\xrightarrow[\rho\to 0]{}\frac{1}{\rho}e^{i\left[\rho-\frac{1}{2}(l+1)\pi\right]}$$

$$h_l^{(2)}(\rho)\xrightarrow[\rho\to 0]{}\frac{1}{\rho}e^{-i\left[\rho-\frac{1}{2}(l+1)\pi\right]}$$

ผลเฉลย เมื่อ r>a คือ

$$R(r) = Bh_l^{(1)}(i\beta r) = B\left[j_l(i\beta r) + in_l(i\beta r)\right]$$

ฟังก์ชันแฮนเกลทรงกลมลำดับต้น

$$h_0^{(1)}(i\beta r) = -\frac{1}{\beta r}e^{-\beta r}$$

$$h_1^{(1)}(i\beta r) = i\left(\frac{1}{\beta r} + \frac{1}{\beta^2 r^2}\right)e^{-\beta r}$$

ระดับพลังงานหาได้จาก $\frac{1}{2}\frac{dR}{dr}$ จะต้องต่อเนื่องที่ r = a

สำหรับ l = 0 จะได้

$$\xi \cot \xi = -\eta \qquad\qquad \xi^2 + \eta^2 = \frac{2mV_0 a^2}{\eta^2}$$

เมื่อ $\xi = \alpha a$ และ $\eta = \beta a$

สำหรับ l = 1 จะได้

$$\frac{\cot \xi}{\xi} - \frac{1}{\xi^2} = \frac{1}{\eta} + \frac{1}{\eta^2} \qquad\qquad \xi^2 + \eta^2 = \frac{2mV_0 a^2}{\eta^2}$$

ตัวอย่างที่ 9.1 อนุภาคภายใต้ศักย์บ่อทรงกลมขนาดไม่จำกัด

$$V(r) = \begin{cases} 0 & , 0 \le r \le a \\ \infty & , a<r \end{cases}$$

ก. จงเขียนสมการดิฟเฟอเรนเชียลของส่วนรัศมีและส่วนมุมและจงแก้สมการส่วนมุม

ข. จงคำนวณระดับพลังงานและสมการคลื่นคงที่สำหรับ l = 0

วิธีทำ ก) $H = \dfrac{p^2}{2m} + V(r) = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)$

เมื่อ ∇^2 ในพิกัดทรงกลม คือ

$$\nabla^2 = \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r) + \frac{1}{r^2}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right] = \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r) - \frac{L^2}{\hbar^2 r^2}$$

ดังนั้น

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r) + \frac{L^2}{2mr^2} + V(r)$$

สมการอนุพันธ์ของสมการคลื่นคงที่ $\psi(r,\theta,\phi)$ คือ

$$H\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r\psi) + \frac{L^2\psi}{2mr^2} + V(r)\psi = E\psi$$

พิสูจน์ได้ว่า

$\left[H, L^2\right] = 0$ จึงเขียน $\psi = R_{nl}Y_l^m$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{Y_l^m(\theta,\phi)}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}\left[rR_{nl}(r)\right] + \frac{R_{nl}(r)L^2Y_l^m(\theta,\phi)}{2mr^2} + R_{nl}V(r)Y_l^m(\theta,\phi) = ER_{nl}(r)Y_l^m(\theta,\phi)$$

เนื่องจาก $Y_l^m(\theta,\phi)$ เป็นฟังก์ชันไอเกนของ L^2

$$L^2Y_l^m(\theta,\phi) = \hbar^2 l(l+1)Y_l^m(\theta,\phi)$$

ดังนั้น สมการรัศมี คือ

.

$$-\frac{\eta^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}\left[rR_{n1}(r)\right]+\left[\frac{\eta^2}{2mr^2}l(l+1)+V(r)\right]R_{n1}(r)=ER_{n1}(r)$$

ข) สำหรับ l = 0

$$-\frac{\eta^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}\left[rR_{n0}(r)\right]+V(r)R_{n0}(r)=ER_{n0}(r)$$

แทนค่า $R_{n0}=R(r)$ สำหรับ r > a ฟังก์ชันจะเท่ากับศูนย์ เพราะว่า V(r) มีค่าไม่จำกัด

สำหรับ $0 \le r \le a$

$$-\frac{\eta^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}\left[rR(r)\right]=ER(r)$$

ให้ U(r)=rR(r) จะได้

$$-\frac{\eta^2}{2m}\frac{\partial^2 U}{\partial r^2}=EU(r)$$

หรือ

$$\frac{\partial^2 U}{\partial r^2}+\frac{2mE}{\eta^2}U(r)=0$$

ผลเฉลย คือ

$$U(r)=A\cos(kr)+B\sin(kr) \qquad \text{เมื่อ} \quad k=\sqrt{2mE/\eta^2}$$

ภาวะขอบเขต

$$U(r=0)=\left[rR(r)\right]|_{r=0}=0$$

$$U(r=a)=\left[rR(r)\right]|_{r=a}=0$$

จะได้ U(0)=A=0 และ U(a)=Bsin(ka)=0 $\Rightarrow ka = n\pi$

$$E_n = \frac{(n \eta \pi)^2}{2ma^2}$$

$$R(r) = \frac{U(r)}{r} = \begin{cases} \dfrac{B\sin(kr)}{r}, 0 \le r \le a \\ 0, otherwise \end{cases}$$

$$\int_0^\infty |R|^2 4\pi r^2 dr = \int_0^a 4\pi \frac{B^2 \sin^2(kr)}{r^2} r^2 dr = 4\tau B^2 \int_0^a \sin(kr) dr$$

$$= \frac{4\pi B^2}{k}\left[-\frac{1}{2}\cos x \sin x + \frac{1}{2}x\right]\Big|_0^{ka=n\pi}$$

$$= \frac{2n\pi^2 B^2}{n\pi / a}$$

$$= 1$$

ดังนั้น

$$B = \frac{1}{\sqrt{2\pi a}}$$

$$\psi = (r, \theta, \phi) = R(r) = \frac{1}{\sqrt{2\pi a}} \frac{1}{r} \sin\left(\sqrt{\frac{2mE}{\eta^2}} r\right)$$

สำหรับ l = 0

ตัวอย่างที่ 9.2 พิจารณาอนุภาคที่มีฟังก์ชันคลื่น

$$\psi = (x, y, z) = N(x + y + z)e^{-\left[\left(x^2+y^2+z^2\right)/\alpha^2\right]}$$

เมื่อ N เป็นค่าคงที่ของการนอร์มอลไลซ์และแอลฟ่าเป็นพารามิเตอร์ เราทำการวัด L^2 และL_z จงหาโอกาสในการวัดซึ่งได้ค่า

a) $L^2 = 2\eta^2, L_z = 0$

b) $L^2 = 2\eta^2, L_z = \eta$

c) $L^2 = 2\eta^2, L_z = -\eta$

โดยใช้ค่า

$$Y_1^1(\theta,\phi) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{i\theta}$$

$$Y_1^0(\theta,\phi) = -\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta$$

$$Y_1^{-1}(\theta,\phi) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{-i\theta}$$

วิธีทำ เขียน $\psi = (x, y, z)$ ในพิกัดทรงกลม

$$x = r\sin\theta\cos\phi, y = r\sin\theta\sin\phi, z = r\cos\theta$$

เมื่อ $r^2 = x^2 + y^2 + z^2$ ดังนั้น

$$\psi(r,\theta,\phi) = N\left[\sin\theta(\cos\phi + \sin\phi) + \cos\theta\right]re^{-r^2/\alpha^2}$$

เขียน $\psi(r,\theta,\phi)$ ในรูป $\psi(r,\theta,\phi) = R(r)T(\theta,\phi)$

จะได้

$$T(\theta,\phi) = \sum_{lm} a_{lm}Y_l^m(\theta,\phi) = \sin\theta\cos\phi + \sin\theta\sin\phi + \cos\theta$$

หาสัมประสิทธิ์ a_{lm}

$$a_{lm} = \langle lm \mid T(\theta,\iota) \rangle = \int \left(Y_l^m\right)^* T(\theta,\phi)\, d\theta d\phi$$

อาศัยคุณสมบัติของ ฮาร์มอนิกทรงกลม

$$T(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{8\pi}{3}}\left[\frac{1}{2}\left(Y_1^{-1} - Y_1^{1}\right) - \frac{1}{2i}\left(Y_1^{-1} + Y_1^{1}\right)\right] + \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_1^{0}$$

$$= \sqrt{\frac{2\pi}{3}}\left[(1+i)Y_1^{-1} - (1-i)Y_1^{1} + \sqrt{2} Y_1^{0}\right]$$

ก่อนที่จะคำนวณความน่าจะเป็น จะต้องนอร์แมลไลซ์ฟังก์ชัน $T(\theta,\phi)$ ก่อน

ให้ $T'(\theta,\phi) = \beta T(\theta,\phi)$

$$\beta^2 \int T^*(\theta,\phi) T(\theta,\phi)\, d\theta d\phi = \beta^2 \frac{2\pi}{3}(2+2+2) = 4\pi\beta^2 = 1$$

$$\therefore \beta = 1/\sqrt{4\pi}$$

$$T'(\theta,\phi) = \frac{1}{\sqrt{6}}\left[(1+i)Y_1^{-1} - (1-i)Y_1^{1} + \sqrt{2} Y_1^{0}\right]$$

ความน่าจะเป็น คือ

a) $p = |\langle 1,0 \mid T' \rangle|^2 = \left|\frac{1}{\sqrt{6}}\sqrt{2}\right|^2 = \frac{1}{3}$

b) $p = |\langle 1,1 \mid T' \rangle|^2 = \left|-\frac{1-i}{\sqrt{6}}\right|^2 = \frac{1}{3}$

c) $p = |\langle 1,-1 \mid T' \rangle|^2 = \left|\frac{1+i}{\sqrt{6}}\right|^2 = \frac{1}{3}$

แบบฝึกหัดบทที่ 9

1. จงหาสมการของระดับพลังงานของอนุภาคในศักย์บ่อรูปสี่เหลี่ยม $(l=0)$ เมื่อ V_0a^2 จะมีค่ามากกว่า $\dfrac{\pi^2\hbar^2}{8m}$ เล็กน้อย

2. สมมุติว่าอันตรกิริยาระหว่างนิวตรอนและโปรตอนภายในดิวเทอรอนสามารถแทนด้วยศักย์บ่อรูปสี่เหลี่ยมโดยมี $a = 2\times10^{-13}$ ซม.ถ้าระดับพลังงานต่ำสุด $(l=0)$ มีค่า - 2.32 MeV จงหาค่า V_0

3. กำหนดฟังก์ชันคลื่น

$$u = Ae^{-\gamma r}\cos^2\theta$$

ก) จงนอร์แมลไลซ์ฟังก์ชันคลื่นนี้

ข) จงกระจาย u ในรูปฮาร์มอนิกทรงกลมและจงหาโอกาสที่จะพบ $l = 0,1,2$

ค) จงหา $\langle \mathrm{H} \rangle$ ถ้า $\mathrm{H} = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \beta r^2$

4. ถ้า $\mathrm{H} = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)$

จงแสดงว่า $\left[L_{z,}L^2\right] = \left[L_{z,}\mathrm{H}\right] = \left[L^2,\mathrm{H}\right] = 0$ แต่ $\left[L_z, L_x\right] \neq 0$

5. จงอาศัยฟังก์ชันก่อกำเนิดสำหรับพหุนามเลอจองหาค่า

$$\int_{-1}^{1} p_l(\omega)\, p_{l'}(\omega)\, d\omega$$