

กลศาสตร์ควอนตัมของกึ่งฮาร์โมนิกออสซิลเลเตอร์

เอกพันธ์ จันผง

**วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตร
ปริญญาวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต สาขาวิชาฟิสิกส์
มหาวิทยาลัยทักษิณ**

2552



ใบรับรองวิทยานิพนธ์
ปริญญาวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต สาขาวิชาฟิสิกส์
มหาวิทยาลัยทักษิณ

ชื่อวิทยานิพนธ์ : กลศาสตร์ควอนตัมของกึ่งสสารมอโนกอสซิลเลเตอร์

ชื่อ - ชื่อสกุลผู้ทำวิทยานิพนธ์ : นายเอกพันธ์ จันผง

อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์

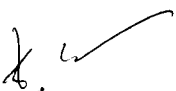
คณะกรรมการสอบปากเปล่าวิทยานิพนธ์


(รศ.ดร.นิคม ชุติริ)

ประธานที่ปรึกษา


(ผศ.ดร.จอมภพ แวเวศักดิ์)

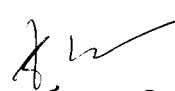
ประธานกรรมการ


(ดร.ประสงค์ เกษราธิคุณ)

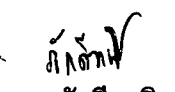
กรรมการที่ปรึกษา


(รศ.ดร.นิคม ชุติริ)

กรรมการ


(ดร.ประสงค์ เกษราธิคุณ)

กรรมการ


(ดร.ภราดร ภัคดีวานิช)

กรรมการ

มหาวิทยาลัยทักษิณอนุมัติให้รับวิทยานิพนธ์ฉบับนี้ เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตาม
หลักสูตรปริญญาวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต สาขาวิชาฟิสิกส์ ของมหาวิทยาลัยทักษิณ


(รองศาสตราจารย์ประสงค์ มีสุข)

คณบดีบัณฑิตวิทยาลัย

วันที่ 25 เดือน พฤษภาคม พ.ศ. 2572

ลิขสิทธิ์ของมหาวิทยาลัยทักษิณ

ประกาศคุณูปการ

วิทยานิพนธ์ฉบับนี้สำเร็จลุล่วงได้ด้วยความกรุณา ช่วยเหลือ แนะนำ และให้คำปรึกษาอย่างดียิ่งจาก รองศาสตราจารย์ ดร.นิคม ชูศิริ ประธานที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์ อาจารย์ ดร.ประสงค์ เกษ-
ราชิคุณ กรรมการที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์ คณะกรรมการสอบปากเปล่าวิทยานิพนธ์ และคณาจารย์
ภาควิชาฟิสิกส์ มหาวิทยาลัยทักษิณทุกท่าน ที่ได้กรุณาถ่ายทอดความรู้ แนวคิด วิธีการ คำแนะนำ
และตรวจแก้ไขข้อบกพร่องต่างๆ ด้วยความเอาใจใส่ยิ่ง ผู้วิจัยขอบพระคุณเป็นอย่างสูง

ขอขอบคุณ พี่ๆ เพื่อนๆ น้องๆ บ้านอับดุลรอชิด และนางสาวมนลดา ยูโซะ ที่คอยเป็น
กำลังใจ ให้คำแนะนำ และช่วยส่งเสริมจิตวิญญาณให้มีความเข้มแข็งและมั่นคงเสมอมา

ขอขอบคุณ นายตัน จันผง นางสุทิน จันผง เด็กหญิงสุนทรี จันผง และญาติพี่น้องทุกท่าน
ที่คอยช่วยเหลือสนับสนุนทั้งด้านกำลังใจและกำลังทรัพย์ด้วยดีตลอดมา นอกจากนี้ยังมีผู้ที่ให้ความ
ร่วมมือช่วยเหลืออีกหลายท่าน ซึ่งผู้วิจัยไม่สามารถกล่าวนามในที่นี้ได้หมด จึงขอขอบคุณทุกท่าน
เหล่านั้นไว้ ณ โอกาสนี้ด้วย

คุณค่าทั้งหลายที่ได้รับจากวิทยานิพนธ์ฉบับนี้ ผู้วิจัยขอมอบเป็นกตัญญูแก่เวทีแค่บิดา
มารดา และบูรพาจารย์ที่เคยอบรมสั่งสอน รวมทั้งผู้มีพระคุณทุกท่าน

เอกพันธ์ จันผง

บทคัดย่อ

ชื่อวิทยานิพนธ์ : กลศาสตร์ควอนตัมของกึ่งฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์

ชื่อ - ชื่อสกุลผู้ทำวิทยานิพนธ์ : นายเอกพันธ์ จันทอง

อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์ : รองศาสตราจารย์ ดร.นิคม ชูศิริ

อาจารย์ ดร.ประสงค์ เกษราธิคุณ

ปริญญาและสาขาวิชา : ปริญญาวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต สาขาวิชาฟิสิกส์

ปีการศึกษาที่สำเร็จ : 2551

ปัญหาของกึ่งฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์เป็นปัญหาของอนุภาคเคลื่อนที่ในหนึ่งมิติภายใต้อิทธิพลของศักย์แบบฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์ในย่าน $x > 0$ แต่ในย่าน $x \leq 0$ ศักย์กลับกลายเป็นอนันต์ จุดประสงค์ของงานวิจัยนี้ต้องการหาฟังก์ชันคลื่นและระดับพลังงานที่เป็นไปได้ของอนุภาคโดยอาศัยทฤษฎีอินทิกรัลตามเส้นทาง หลังจากการประยุกต์ใช้วิธีจุดภาพกระจกเงากับทฤษฎีอินทิกรัลตามเส้นทาง พบว่าตัวแผ่กระจายสามารถเขียนอยู่ในรูปแบบเชิงวิเคราะห์ดังนี้

$$K(b,a) = \left(\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin\omega T} \right)^{1/2} \times \exp\left(\frac{im\omega}{2\hbar \sin\omega T} (x_a^2 + x_b^2) \cos\omega T \right) \left\{ e^{\frac{-im\omega x_a x_b}{\hbar \sin\omega T}} - e^{\frac{im\omega x_a x_b}{\hbar \sin\omega T}} \right\}$$

โดยที่ $T = t_b - t_a$ จากตัวแผ่กระจายดังกล่าวสามารถนำมาคำนวณหาฟังก์ชันคลื่นและระดับพลังงานที่เป็นไปได้ของกึ่งฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์ เราได้ฟังก์ชันคลื่น

$$\psi_n(x) = A_n e^{-m\omega x^2/2\hbar} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right), \quad n = 1, 3, 5, \dots$$

เมื่อค่าคงตัวของความเป็นคลื่นปกติ

$$A_n = \left[\frac{1}{2^{n-1} n!} \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar} \right)^{1/2} \right]^{1/2}$$

ในที่นี้ $H_n(x)$ คือพหุนามเฮอร์มิตอันดับที่ n และระดับพลังงานที่เป็นไปได้อคือ

$$E_n = (n+1/2)\hbar\omega, \quad n = 1, 3, 5, \dots$$

หากไม่พิจารณาถึงเลขควอนตัม n รูปแบบเชิงคณิตศาสตร์ของผลลัพธ์ที่ได้นั้นเหมือนกับของฮาร์
มอริกอสซิลเลเตอร์ทุกประการ

Abstract

Thesis Title : Quantum Mechanics of the Semi-Harmonic Oscillator

Student's Name : Mr. Ekkapan Junpong

Advisory Committee : Assoc.Prof. Dr. Nikom Choosiri

Dr. Prasong Kessaratikoon

Degree and Program : Master of Science in Physics

Academic Year : 2008

A semi-harmonic oscillator problem is the problem of a particle moving in one dimension under the influence of an harmonic oscillator potential in the region $x > 0$, but in the region $x \leq 0$ the potential becomes infinity. The aim of this research was to find out the wave functions and possible energy levels of the particle by using path integral theory. After applying the image-point method to path integral theory, we find that the propagator of the particle can be written in an analytical form :

$$K(b,a) = \left(\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin\omega T} \right)^{1/2} \times \exp\left(\frac{i m \omega}{2 \hbar \sin\omega T} (x_a^2 + x_b^2) \cos\omega T \right) \left\{ e^{\frac{-i m \omega x_a x_b}{\hbar \sin\omega T}} - e^{\frac{i m \omega x_a x_b}{\hbar \sin\omega T}} \right\}$$

where $T = t_b - t_a$. From the propagator, the wave functions and the possible energy levels are derived. We obtain the wave functions :

$$\Psi_n(x) = A_n e^{-m\omega x^2/2\hbar} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right), \quad n = 1, 3, 5, \dots$$

where the normalization constant :

$$A_n = \left[\frac{1}{2^{n-1} n!} \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar} \right)^{1/2} \right]^{1/2}$$

here $H_n(x)$ is Hermite polynomial of order n , and we obtain the energy level :

$$E_n = (n + 1/2)\hbar\omega, \quad n=1,3,5,\dots$$

If we do not consider the quantum number n , the mathematical form of our results are the same as that of an harmonic oscillator.

สารบัญ

บทที่	หน้า
1 บทนำ	1
ความสำคัญและที่มาของการวิจัย	1
วัตถุประสงค์ของการวิจัย	5
ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ	6
ขอบเขตของการวิจัย	6
2 เอกสารและงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง	7
ปัญหาอิเล็กทรอนิกส์แบบต่างๆ	7
ปัญหากำแพงศักย์อนันต์	8
ปัญหาบ่อศักย์จำกัดรัศมีอนันต์	8
3 วิธีดำเนินการวิจัย	9
สมการคลื่นของชเรอดิงเงอร์	9
สมการคลื่นชเรอดิงเงอร์แบบไม่ขึ้นกับเวลา	10
อนุภาคอิสระ	12
ศักย์เป็นขั้นและกำแพงศักย์อนันต์	13
การหาค่าพลังงานและฟังก์ชันคลื่นของฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์	20
ทฤษฎีอินทิกรัลตามเส้นทางเบื้องต้น	25
ฟังก์ชันคลื่นและพลังงานของอนุภาค	30
การคำนวณหาตัวแปรกระจายของอนุภาคอิสระ	32
การประยุกต์ใช้วิธีจุดภาพกระจกเงาร่วมกับทฤษฎีอินทิกรัลตามเส้นทางในการแก้ปัญหา กำแพงศักย์อนันต์	35
ฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์หนึ่งมิติ	45
ฟังก์ชันคลื่นและพลังงานของฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์หนึ่งมิติ	48
วิธีดำเนินการเก็บรวบรวมข้อมูลวิจัย	51
4 ผลการวิจัย	53
ทฤษฎีของชเรอดิงเงอร์	53
ปัญหาแก๊สฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์	53
ระดับพลังงานที่เป็นไปได้และฟังก์ชันคลื่นของแก๊สฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์	57

สารบัญ (ต่อ)

บทที่	หน้า
4 (ต่อ)	
การหาค่าคงตัวของการเป็นคลื่นปกติ	60
อินทิกรัลตามเส้นทางของกึ่งฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์	61
ตัวแปรกระจายของกึ่งฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์	61
ระดับพลังงานที่เป็นไปได้และฟังก์ชันคลื่นของกึ่งฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์	62
เปรียบเทียบผลการคำนวณและกราฟที่ได้ระหว่างฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์กับ กึ่งฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์	70
เปรียบเทียบระดับพลังงานที่ได้ ระหว่างฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์กับ กึ่งฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์	72
5 สรุปและอภิปรายผล	73
บรรณานุกรม	74
ภาคผนวก	77
ประวัติย่อผู้วิจัย	79

สารบัญตาราง

ตารางที่	หน้า
1 แสดงฟังก์ชันคลื่นของฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์หนึ่งมิติต่อกรณี $n = 0, 1, 2$	25
2 เปรียบเทียบตัวแปรกระจาย ฟังก์ชันคลื่น ระดับพลังงานที่เป็นไปได้และปริมาณต่างๆ ระหว่างฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์กับกึ่งฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์	70

สารบัญภาพประกอบ

ภาพที่	หน้า
1.1 ศักย์แบบฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์	3
1.2 ศักย์แบบกึ่งฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์	5
3.1 แสดงศักย์ไฟฟ้าเป็นขั้น	13
3.2 แสดงศักย์ไฟฟ้าเป็นขั้น เมื่อ $V_0 = \infty$	20
3.3 ศักย์แบบฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์	21
3.4 แสดงเส้นทางที่เป็นไปได้ของอนุภาครวมทั้งเส้นทางแบบฉบับในการเดินทางจาก จุด a ไปยังจุด b	26
3.5 แสดงเส้นทางเดินของอนุภาคจากจุด x_a ไปยังจุด x_b โดยแบ่งออกเป็นเส้นทางย่อยๆ	28
3.6 แสดงเส้นทางแบบฉบับ $\bar{x}(t)$ และส่วนที่เบี่ยงเบนไปจากเส้นทางแบบฉบับ $y(t)$	29
3.7 แสดงเส้นทางแบบฉบับสองเส้นทางที่เชื่อมต่อกันที่จุด (x_a, t_a) และ (x_b, t_b) พร้อมด้วย จุดภาพในกระเจกเงาที่คล้องจองกัน	40
4.1 กราฟแสดงพลังงานศักย์ของกึ่งฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์	52
4.2 แสดงฟังก์ชันคลื่นอย่างคร่าวๆ 5 ลำดับแรกของฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์ (เส้นทึบ) และ 3 ลำดับแรกของกึ่งฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์ (เส้นประ)	71
4.3 แสดงการเปรียบเทียบระดับพลังงานที่เป็นไปได้ 3 สถานะ	72

บทที่ 1

บทนำ

1.1 ความสำคัญและที่มาของการวิจัย

วิชากลศาสตร์แบบฉบับหรือกลศาสตร์ดั้งเดิม (classical mechanics) เป็นวิชาที่ศึกษาปรากฏการณ์ธรรมชาติของวัตถุหรือระบบวัตถุที่มีขนาดใหญ่ ปรากฏการณ์ที่เกิดขึ้นมีสาเหตุมาจากแรงที่กระทำต่อวัตถุหรือระบบวัตถุเหล่านั้น โดยธรรมชาติแรงที่สำคัญและพบบ่อยในชีวิตประจำวันคือ แรงโน้มถ่วง แรงแม่เหล็ก และแรงยืดหยุ่นหรือแรงฮาร์มอนิก เป็นต้น กลุ่มของแรงเหล่านี้จัดเป็นแรงอนุรักษ์ (conservative force) กล่าวคืองาน (work) อันเนื่องมาจากแรงเหล่านี้จะไม่ขึ้นกับเส้นทางของวัตถุ แต่จะขึ้นอยู่กับตำแหน่งเริ่มต้นและตำแหน่งสุดท้ายของวัตถุ โดยที่งานเนื่องจากแรงดังกล่าวสอดคล้องกับกฎอนุรักษ์งานและพลังงาน (law of conservation of work and energy) กล่าวคือพลังงานรวมของระบบจะคงที่ทุกตำแหน่งเมื่อระบบอยู่ภายใต้แรงอนุรักษ์

วิชากลศาสตร์แบบฉบับที่นักวิทยาศาสตร์ได้คิดค้นเพื่อนำมาอธิบายปรากฏการณ์ธรรมชาติ ได้ผลอย่างดีเลิศจนกระทั่งถึงปลายศตวรรษที่ 19 มีสาระสำคัญพอสรุปได้ดังนี้ ในระบบต่างๆ ทางฟิสิกส์ ปริมาณทั้งหลายสามารถแทนได้ด้วยตัวแปรพลวัต (dynamical variable) ที่มีนิยามชัดเจน โดยตัวแปรเหล่านี้ยังแสดงถึงสถานะ (state) ของระบบขณะใดขณะหนึ่งด้วย ส่วนสถานะใดๆ สามารถติดตามได้ถ้าเพียงแต่ทราบสถานะเบื้องต้นเท่านั้น หลักนี้กล่าวในเชิงคณิตศาสตร์หมายความว่าตัวแปรพลวัตเหล่านี้สอดคล้องกับสมการเชิงอนุพันธ์ (differential equation) อันดับหนึ่งที่มีตัวแปรเป็นเวลาดังนั้นจุดประสงค์ของการศึกษากลศาสตร์แบบฉบับคือความพยายามของนักฟิสิกส์ที่จะแสวงหาตัวแปรพลวัตต่างๆ ที่สอดคล้องกับสมการการเคลื่อนที่ (equation of motion) เพื่อใช้ทำนายปรากฏการณ์ธรรมชาติ

นับตั้งแต่นิวตัน (Newton) ได้คิดค้นวิชากลศาสตร์ (mechanics) จนกระทั่งถึงปลายศตวรรษที่ 19 ยังไม่เคยปรากฏว่ามีปรากฏการณ์ใดขัดแย้งกับหลักสำคัญดังกล่าวข้างต้น แม้มีปรากฏการณ์ใหม่ๆ ที่ยุ่งยากเกิดขึ้นก็สามารถแก้ปัญหาได้โดยการเพิ่มหรือดัดแปลงตัวแปรหรือเพิ่มสมการใหม่ ทำให้กลศาสตร์แบบฉบับได้ก้าวหน้าไปอย่างไม่หยุดยั้ง ความก้าวหน้าดังกล่าวได้เจริญรุดหน้าไปเรื่อยๆ จนถึงปี ค.ศ. 1900 ก็เริ่มมีอุปสรรคเกิดขึ้น ทั้งนี้เพราะเราได้เข้าไปสู่ปรากฏการณ์ธรรมชาติที่มีขนาดเล็กในระดับอะตอมหรือเล็กกว่าอะตอม ในระดับนี้หลักต่างๆ ที่มีอยู่ในกลศาสตร์แบบฉบับไม่อาจนำมาใช้ได้ การ

อธิบายปรากฏการณ์เหล่านี้ต้องอาศัยหลักฟิสิกส์แนวใหม่ การค้นพบฟิสิกส์แนวใหม่เกิดขึ้นหลายระยะ และมีบุคคลหลายกลุ่มเกี่ยวข้องด้วย ทว่าจุดเริ่มต้นที่ถือว่าเป็นการค้นพบฟิสิกส์แนวใหม่คือปี ค.ศ.1925 ซึ่งเป็นปีที่ชเรอดิงเงอร์ (Schrödinger) ได้ให้กำเนิดวิชากลศาสตร์ควอนตัม (quantum mechanics)

หลักการของชเรอดิงเงอร์คือ อนุภาคที่มีขนาดเล็กในระดับอะตอมหรือเล็กกว่าจะมีพฤติกรรมแบบคลื่นสสาร ตำแหน่งและโมเมนตัมของอนุภาคนั้นไม่อาจทำนายได้แน่นอน แต่จะสอดคล้องหลักความไม่แน่นอนของไฮเซนเบิร์ก (the Heisenberg uncertainty principle) ดังนั้นจึงไม่กล่าวถึงเส้นทางเดินของอนุภาคเลย ปริมาณต่างๆ ที่บรรจุอยู่กับอนุภาคสามารถหาได้จากฟังก์ชันคลื่น (wave function) ซึ่งสมนัยกับอนุภาคนั้น โดยฟังก์ชันคลื่นที่กล่าวถึงนี้จะต้องสอดคล้องกับสมการคลื่นชเรอดิงเงอร์ (Schrödinger wave equation) ที่มีตัวแปรเป็นตำแหน่งและเวลา (x, y, z, t) ซึ่งเขียนได้ดังนี้

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x, y, z, t) \right) \psi(x, y, z, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, y, z, t) \quad (1.1)$$

เมื่อ ∇^2 และ $V(x, y, z, t)$ เป็นตัวดำเนินการลาปลาซเขียน และพลังงานศักย์ของอนุภาคตามลำดับ ข้อจำกัดของสมการชเรอดิงเงอร์ก็คือ หากพลังงานศักย์ของระบบมีรูปแบบเชิงคณิตศาสตร์ซับซ้อนและขึ้นต่อเวลาอย่างซับซ้อนแล้ว โอกาสที่จะแก้สมการหาคำตอบของฟังก์ชันคลื่นนั้นจึงแทบเป็นไปได้เลย

ในกรณีพิเศษเมื่อพลังงานศักย์ของระบบไม่ขึ้นต่อเวลาอย่างซับซ้อน กล่าวคือ $V = V(x, y, z)$ สมการชเรอดิงเงอร์ในสมการ (1.1) จะลดรูปไปสู่

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x, y, z) \right) \psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z) \quad (1.2)$$

และเรียกสมการ (1.2) นี้ว่าสมการชเรอดิงเงอร์ที่ไม่ขึ้นต่อเวลา จากสมการ (1.2) จะเห็นว่าแม้ตัวแปร t จะถูกกำจัดออกไปหนึ่งตัวแปรแล้ว หากพลังงานศักย์มีรูปแบบที่ซับซ้อนก็เชื่อว่าจะสามารถแก้สมการหาคำตอบฟังก์ชันคลื่นได้โดยง่าย

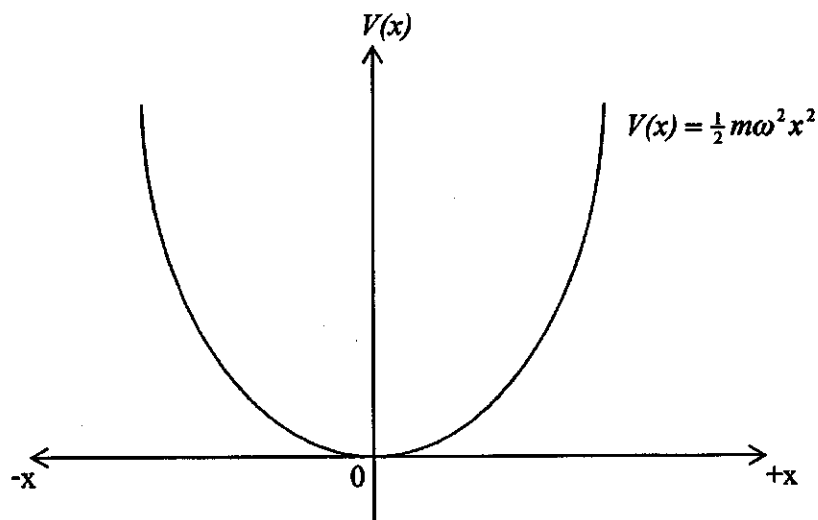
ต่อมาในปี ค.ศ.1948 ฟายน์แมน (Feynman) ได้เสนอกลศาสตร์ควอนตัมแนวใหม่คือ ทฤษฎีอินทิกรัลตามเส้นทาง (path integral theory) โดยฟายน์แมนได้นำเสนอตัวแผ่กระจาย (propagator) ของอนุภาคซึ่งอยู่ในรูปของอินทิกรัลตามเส้นทางที่เป็นไปได้ทั้งหมดของอนุภาค นับตั้งแต่นั้นเป็นต้นมา กลศาสตร์ควอนตัมตามแบบฉบับของฟายน์แมนได้รับความสนใจจากนักฟิสิกส์เป็นจำนวนมาก ทั้งนี้

เนื่องจากได้รับการพิสูจน์ว่าอินทิกรัลตามเส้นทางดังกล่าวมีประโยชน์ต่อวงการฟิสิกส์หลายสาขา อย่างไรก็ตามมีข้อเท็จจริงที่น่าประหลาดใจเป็นอย่างยิ่งว่า อินทิกรัลตามเส้นทางของฟายน์แมนขาดประสิทธิภาพในการแก้ปัญหาบางปัญหา อาทิเช่น ปัญหาอิเล็กตรอนในศักย์อุลอมบี ปัญหากำแพงศักย์อนันต์ และปัญหาอนุภาคในกล่องหรือบ่อจตุรัสลึกอนันต์ เป็นต้น

สำหรับปัญหาของอนุภาคซึ่งถูกจำกัดขอบเขตด้วยแรงฮาร์มอนิก (แรงยึดหยุ่นคล้ายแรงดึงกลับของสปริง) เป็นปัญหาที่ทราบกันดีในวิชากลศาสตร์ควอนตัม เรียกอนุภาคดังกล่าวว่าฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์หรือตัวแกว่งกวัดฮาร์มอนิก เราสามารถใช้กลศาสตร์เชิงคลื่นของชเรอดิงเงอร์คำนวณปริมาณทางกายภาพของอนุภาคดังกล่าวได้ อาทิ ฟังก์ชันคลื่น ระดับพลังงานที่เป็นไปได้ และโอกาสที่จะพบอนุภาค ณ ตำแหน่งต่างๆ เป็นต้น กล่าวในเชิงคณิตศาสตร์ฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์คืออนุภาคที่อยู่ภายใต้แรงซึ่งพลังงานศักย์เขียนได้เป็น

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2, \quad -\infty < x < \infty \quad (1.3)$$

หากเขียนกราฟของพลังงานศักย์เทียบกับตำแหน่ง x จะได้ภาพที่ 1.1



ภาพที่ 1.1 ศักย์แบบฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์

ซึ่งปัญหาฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์มักจะถูกนำไปเป็นตัวอย่างในกลศาสตร์ควอนตัมเบื้องต้นทั่วไป ผลจากการแก้สมการชเรอดิงเงอร์ที่ไม่ขึ้นต่อเวลา

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \psi(x) = E(x) \quad (1.4)$$

ได้ผลเฉลยเป็นฟังก์ชันคลื่น $\psi_n(x)$ ณ สถานะ n ต่าง ๆ ดังนี้

$$\psi_n(x) = A_n e^{-mx^2/2\hbar} H_n(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x) \quad (1.5)$$

โดยที่

$$A_n = \left[\frac{1}{(2^n)n!} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/2} \right]^{1/2} \quad (1.6)$$

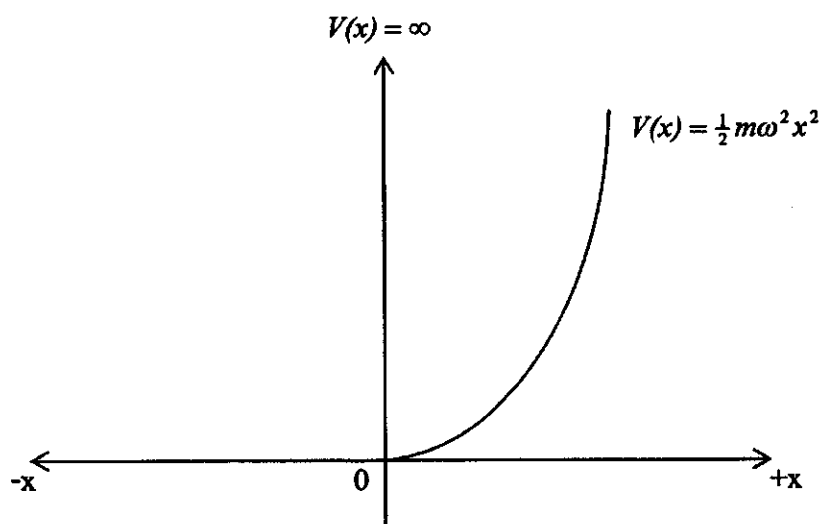
และ $H_n(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x)$ คือพหุนามแฮร์มิต (Hermite polynomial) คล้องจองกับพลังงาน

$$E_n = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (1.7)$$

สำหรับกึ่งฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์นั้นเป็นแบบจำลองที่ผู้วิจัยคิดค้นขึ้นมาซึ่งเป็นระบบของอนุภาคที่มีพลังงานศักย์

$$\left. \begin{aligned} V(x) &= \infty, \quad x \leq 0 \\ V(x) &= \frac{1}{2} m \omega^2 x^2, \quad x > 0 \end{aligned} \right\} \quad (1.8)$$

หากเขียนกราฟระหว่างพลังงานศักย์เทียบกับตำแหน่งจะได้ดังภาพที่ 1.2



ภาพที่ 1.2 ศักย์แบบกึ่งฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์

ซึ่งตามรูปแบบพลังงานศักย์ดังกล่าวอนุภาคจะถูกจำกัดให้อยู่ในย่าน $x \geq 0$ เท่านั้น เนื่องจากอนุภาคไม่สามารถฝ่ากำแพงศักย์สูงเป็นอนันต์ได้ สิ่งที่เราต้องการทราบเป็นอย่างยิ่งก็คือฟังก์ชันคลื่นและระดับพลังงานที่เป็นไปได้ของอนุภาคมีลักษณะแตกต่างกันหรือไม่อย่างไรกับฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์ปกติ หากอาศัยการแก้สมการชเรอดิงเงอร์ก็เป็นไปได้โดยมีเงื่อนไขขอบเขตบังเกิดขึ้นตรงผนังกำแพงศักย์ ทว่าในการหาผลเฉลยนี้ผู้วิจัยเน้นกลศาสตร์ควอนตัมแนวใหม่คือทฤษฎีอินทิกรัลตามเส้นทางของ ฟายน์แมนเพื่อคำนวณตัวแผ่กระจายของอนุภาคกึ่งฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์ จากตัวแผ่กระจายที่ได้สามารถนำไปสู่ฟังก์ชันคลื่นและระดับพลังงานที่เป็นไปได้

1.2 วัตถุประสงค์ของการวิจัย

1.2.1 เพื่อหาตัวแผ่กระจายของอนุภาคกึ่งฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์โดยวิธีอินทิกรัลตามเส้นทาง

1.2.2 เพื่อหาฟังก์ชันคลื่นของอนุภาคกึ่งฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์จากตัวแผ่กระจายที่ได้

1.2.3 เพื่อนำทฤษฎีของชเรอดิงเงอร์ไปประยุกต์ใช้ในการแก้ปัญหาที่กึ่งฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์

1.2.4 เพื่อหาระดับพลังงานที่เป็นไปได้ของอนุภาคกึ่งฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์

1.2.5 เพื่อเปรียบเทียบฟังก์ชันคลื่นและระดับพลังงานที่เป็นไปได้ระหว่างฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์กับกึ่งฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์

1.2.6 เพื่อเปรียบเทียบการคำนวณระหว่างอินทิกรัลตามเส้นทางกับทฤษฎีของชเรอดิงเงอร์

1.3 ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ

1.3.1 ทำให้ทราบรูปแบบเชิงคณิตศาสตร์ของตัวแม่กระจาย ฟังก์ชันคลื่นที่เป็นไปได้ และระดับพลังงานที่เป็นไปได้ของกึ่งฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์

1.3.2 เป็นพื้นฐานการวิจัยในระดับขั้นสูงต่อไป

1.3.3 กระบวนการทางคณิตศาสตร์ของการวิจัยเป็นประโยชน์ต่อนิสิตนักศึกษาสาขาวิชาฟิสิกส์ในการศึกษาในระดับบัณฑิตศึกษา และนักวิจัยฟิสิกส์ทฤษฎีทั่วไป

1.3.4 เพิ่มพูนทักษะตลอดจนประสบการณ์ในเชิงคณิตศาสตร์แก่ผู้วิจัย

1.3.5 ทำให้ทราบแนวทางในการนำแนวคิดวิธีคุณภาพของกระเจกเงาไปประยุกต์ใช้กับวิธีการอินทิเกรตตามเส้นทางของฟายน์แมนสำหรับกึ่งฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์ และอาจขยายไปสู่ระบบที่ซับซ้อนยิ่งขึ้น

1.4 ขอบเขตของการวิจัย

การวิจัยนี้มุ่งเน้นศึกษาอนุภาคในระบบหนึ่งมิติที่อยู่ภายใต้อิทธิพลของแรงอันเนื่องมาจากศักย์แบบกึ่งฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์ ปริมาณหลักที่ต้องการคำนวณ คือ ตัวแม่กระจาย ระดับพลังงานที่เป็นไปได้และฟังก์ชันคลื่นตามลำดับ พร้อมทั้งเปรียบเทียบกับทฤษฎีของชเรอดิงเงอร์และเปรียบเทียบปริมาณทั้งสามเทียบกับของฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์

บทที่ 2

เอกสารและงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

ความแตกต่างโดยสิ้นเชิงระหว่างวิธีการของชเรอดิงเงอร์และวิธีการของฟายน์แมนคือวิธีการของชเรอดิงเงอร์ ใช้วิธีการแก้สมการเชิงอนุพันธ์คำนวณหาฟังก์ชันคลื่นออกมา ในขณะที่วิธีการของฟายน์แมนใช้วิธีการอินทิเกรตตามเส้นทางคำนวณหาตัวแผ่กระจาย วิธีการทั้งสองมีความยากง่ายแตกต่างกันขึ้นอยู่กับรูปแบบของปัญหาเช่น ระบบของอิเล็กตรอนในอะตอมไฮโดรเจนสามารถคำนวณได้โดยง่ายด้วยวิธีการของชเรอดิงเงอร์ แต่ในการหาตัวแผ่กระจายของอิเล็กตรอนด้วยวิธีการของฟายน์แมนกลับกลายเป็นเรื่องยาก จนแทบเป็นไปไม่ได้ ในทางกลับกันการหาฟังก์ชันคลื่นของอนุภาคอิเล็กตรอนที่อยู่ภายใต้แรงฮาร์มอนิกสามแม่เหล็กและสนามไฟฟ้าที่ขึ้นต่อเวลาโดยวิธีการของชเรอดิงเงอร์ กลับกลายเป็นเรื่องยากและไม่น่าเป็นไปได้ ดังนั้นเรามาจะเลือกใช้ทฤษฎีที่เหมาะสมกับปัญหาเพื่อให้เข้าถึงองค์ความรู้ของปัญหาดังกล่าว

2.1 ปัญหาอิเล็กตรอนในศักย์แบบต่างๆ

โฮ และ อินะมาตะ (Ho and Inomata, 1982) ประสบความสำเร็จในการสร้างรูปแบบอินทิกรัลตามเส้นทางของอะตอมไฮโดรเจน โดยสามารถคำนวณฟังก์ชันกรีน (Green's function) หรือตัวแผ่กระจายของอิเล็กตรอนในรูปแบบที่กระชับได้

อินทิกรัลตามเส้นทางของอะตอมไฮโดรเจน (path integrals of the hydrogen atom) เป็นงานวิจัยของนิคม ชูศิริ และวิรุฬห์ สายคณิต (1984) ใช้วิธีอินทิเกรตตามเส้นทางคำนวณตัวแผ่กระจายของอิเล็กตรอนในอะตอมไฮโดรเจนออกมาพร้อมทั้งคำนวณฟังก์ชันคลื่นและพลังงานออกมา

ตัวแผ่กระจายแม่นยำตรง (exact propagator of a two-dimensional random system) เป็นงานวิจัยของวิรุฬห์ สายคณิต และคณะ (1987) ใช้วิธีอินทิเกรตตามเส้นทางคำนวณหาตัวแผ่กระจายของอิเล็กตรอนซึ่งเคลื่อนที่ในระนาบ (สองมิติ) ภายใต้สนามแม่เหล็กคงที่ สนามไฟฟ้าที่ขึ้นต่อเวลา นอกจากนั้นยังอยู่ภายใต้อิทธิพลของพลังงานศักย์ที่ไร้ระเบียบ

ความหนาแน่นสถานะระหว่างระดับแลนดาวของก๊าซอิเล็กตรอนสองมิติ (density of states between landau levels in a two-dimensional electron gas) เป็นงานวิจัยของวิรุฬห์ สายคณิต และคณะ (1988) ใช้วิธีอินทิเกรตตามเส้นทางคำนวณหาตัวแผ่กระจายของก๊าซอิเล็กตรอนที่อยู่ในระนาบภายใต้ศักย์ที่ไร้ระเบียบและสนามแม่เหล็กคงที่ จากนั้นคำนวณความหนาแน่นสถานะจาก

ตัวแปรกระจายที่ได้ทำให้พบความหนาแน่นสถานะที่บังเกิดขึ้นระหว่างระดับแถบควาค่อนข้าง สอดคล้องกับการทดลอง

2.2 ปัญหากำแพงศักย์อนันต์

path integral solution of the square well เป็นงานวิจัยของ M. Goodman (1981) ใช้วิธี อินทิเกรตตามเส้นทางร่วมกับวิธีจุดภาพกระจกเงาคำนวณตัวแปรกระจายของอนุภาคภายใต้อิทธิพล ของบ่อศักย์สี่กอนันต์ หลังจากนั้นคำนวณฟังก์ชันคลื่นและระดับพลังงานที่เป็นไปได้ของอนุภาค

อินทิกรัลตามเส้นทางสำหรับกำแพงศักย์อนันต์ (path integral for an infinite potential barrier) เป็นงานวิจัยของอัญชัช ดาวรสวรรณ และคณะ (2549) ใช้วิธีอินทิเกรตตามเส้นทางร่วมกับ วิธีจุดภาพกระจกเงาคำนวณตัวแปรกระจายของอนุภาคภายใต้อิทธิพลของกำแพงศักย์สูงอนันต์ หลังจากนั้นคำนวณฟังก์ชันคลื่นและระดับพลังงานที่เป็นไปได้ของอนุภาค

2.3 ปัญหาบ่อศักย์จตุรัสกอนันต์

อินทิกรัลตามเส้นทางสำหรับบ่อศักย์จตุรัสกอนันต์ (path integral for an infinite potential well) เป็นงานวิจัยของวิชา ทิพย์อักษร และคณะ (2550) ใช้วิธีอินทิเกรตตามเส้นทาง ร่วมกับวิธีจุดภาพกระจกเงาคำนวณตัวแปรกระจายของอนุภาคภายใต้อิทธิพลของบ่อศักย์จตุรัสกอนันต์ หลังจากนั้นคำนวณฟังก์ชันคลื่นและระดับพลังงานที่เป็นไปได้ของอนุภาค

จากแนวคิดดังกล่าว ทำให้สามารถคำนวณหาตัวแปรกระจายของอนุภาคภายใต้อิทธิพล ของบ่อศักย์จตุรัสกอนันต์ได้ คือ

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \frac{2}{L} \sum_{n=1}^{\infty} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{p_n^2}{2m} (t_b - t_a)\right) \sin\left(\frac{n\pi x_a}{L}\right) \sin\left(\frac{n\pi x_b}{L}\right)$$

พร้อมทั้งฟังก์ชันคลื่นและระดับพลังงานที่เป็นไปได้

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \text{ และ } E_n = \frac{p_n^2}{2m} \text{ ตามลำดับ}$$

บทที่ 3

วิธีดำเนินการวิจัย

3.1 สมการคลื่นของชเรอดิงเงอร์

ที่มาของสมการคลื่นชเรอดิงเงอร์ ซึ่งไม่ใช่เป็นการพิสูจน์ โดยพิจารณาให้ฟังก์ชันคลื่นมีรูปแบบเป็น

$$\psi(x,t) = Ae^{i(kx-\omega t)} \quad (3.1)$$

เมื่อ A = แอมพลิจูด (amplitude) ของคลื่น

ω = ความถี่เชิงมุม (angular frequency) = $2\pi\nu$

k = เลขคลื่น (wave number) = $\frac{2\pi}{\lambda}$

โดย ω และ k สัมพันธ์กับพลังงาน E และโมเมนตัม p ของอนุภาคตามลำดับ ดังนี้

$$E = h\nu = \frac{h}{2\pi} 2\pi\nu = \frac{h}{2\pi} \omega = \hbar\omega$$

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{2\pi} \frac{2\pi}{\lambda} = \hbar k$$

หาอนุพันธ์ของ $\psi(x,t)$ เทียบกับ x จะได้

$$\frac{\partial \psi(x,t)}{\partial x} = ik\psi(x,t)$$

$$\frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} = -k^2\psi(x,t)$$

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} = (\hbar k)^2 \psi(x,t)$$

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} = p^2 \psi(x,t) \quad (3.2)$$

และหาอนุพันธ์ของ $\psi(x,t)$ เทียบกับ t จะได้

$$\begin{aligned}\frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} &= -i\omega\psi(x,t) \\ i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} &= \hbar\omega\psi(x,t) \\ i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} &= E\psi(x,t)\end{aligned}\quad (3.3)$$

สำหรับอนุภาคที่มีอัตราเร็วต่ำเทียบกับอัตราเร็วแสงจะได้ว่า
พลังงานจลน์ + พลังงานศักย์ = พลังงานทั้งหมด

$$\frac{p^2}{2m} + V = E \quad (3.4)$$

คูณทั้งสองข้างของสมการ (3.4) ด้วย $\psi(x,t)$

$$\frac{p^2}{2m}\psi(x,t) + V\psi(x,t) = E\psi(x,t) \quad (3.5)$$

และแทนสมการ (3.2) และสมการ (3.3) ลงในสมการ (3.5) ได้ผลดังนี้

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x,t) + V\psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x,t) \quad (3.6)$$

สมการ (3.6) คือสมการคลื่นชเรอดิงเงอร์ใน 1 มิติที่ขึ้นกับเวลา (time dependent Schrödinger) ในทำนองเดียวกัน กรณี 3 มิติ จะได้สมการคลื่นชเรอดิงเงอร์ที่ขึ้นกับเวลา คือ

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi(x,y,z,t) + V\psi(x,y,z,t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x,y,z,t) \quad (3.7)$$

3.1.1 สมการคลื่นชเรอดิงเงอร์แบบไม่ขึ้นกับเวลา

จากสมการ (3.7) เป็นสมการเชิงอนุพันธ์ย่อยสำหรับ $\psi(x,t)$ ซึ่งเป็นฟังก์ชันของตำแหน่งและเวลา เนื่องจากระบบต่างๆ ในทางฟิสิกส์ส่วนใหญ่แล้วพลังงานศักย์ V ของระบบไม่เป็นฟังก์ชันของเวลาอย่างชัดเจน ดังนั้นสามารถแก้สมการชเรอดิงเงอร์ได้ง่ายขึ้น โดยใช้วิธีการแยกตัวแปร โดยแยกฟังก์ชันคลื่นออกเป็นผลคูณของสองฟังก์ชัน ฟังก์ชันหนึ่งขึ้นกับตำแหน่งเพียงอย่างเดียวและอีกฟังก์ชันหนึ่งขึ้นอยู่กับเวลาอย่างเดียว ดังนี้

$$\Psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z)T(t) \quad (3.8)$$

แทนค่า $\Psi(x, y, z, t)$ จากสมการ (3.8) ลงในสมการ (3.7)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}T(t)\nabla^2\psi(x, y, z) + V(x, y, z)\psi(x, y, z)T(t) = i\hbar\psi(x, y, z)\frac{dT(t)}{dt} \quad (3.9)$$

จากสมการ (3.9) หารลดด้วย $\psi(x, y, z)T(t)$ จะได้

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi(x, y, z)}\nabla^2\psi(x, y, z) + V(x, y, z) = i\hbar\frac{1}{T(t)}\frac{dT(t)}{dt} \quad (3.10)$$

จะเห็นได้ว่าทางด้านซ้ายมือของสมการ (3.10) เป็นฟังก์ชันของตำแหน่งเพียงอย่างเดียว และทางขวามือเป็นฟังก์ชันของเวลาอย่างเดียว แสดงว่าแต่ละข้างของสมการ (3.10) ต้องเท่ากับค่าคงที่เท่ากัน นั่นคือ

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(x, y, z) + V(x, y, z)\psi(x, y, z) = C\psi(x, y, z) \quad (3.11)$$

และ
$$i\hbar\frac{dT(t)}{dt} = CT(t) \quad (3.12)$$

จากสมการ (3.12) หาผลเฉลยของสมการได้ดังนี้

$$\frac{dT(t)}{T(t)} = \frac{C}{i\hbar}dt = -\frac{iC}{\hbar}dt$$

$$\int\frac{dT(t)}{T(t)} = -\int\frac{iC}{\hbar}dt$$

$$\ln T(t) = -\frac{iCt}{\hbar}$$

$$T(t) = e^{-\frac{iCt}{\hbar}} \quad (3.13)$$

เนื่องจาก
$$e^{-\frac{iCt}{\hbar}} = \cos\left(\frac{Ct}{\hbar}\right) - i\sin\left(\frac{Ct}{\hbar}\right) \text{ ดังนั้น } \frac{C}{\hbar} = \omega = 2\pi\nu = \frac{2\pi E}{h} = \frac{E}{\hbar} \quad (3.14)$$

จากสมการ (3.14) จะได้ว่า C ก็คือ E ซึ่งเป็นพลังงานรวมของระบบ และเมื่อนำไปแทนค่าลงในสมการ (3.11) และสมการ (3.13) จะได้

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(x,y,z) + V(x,y,z)\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z) \quad (3.15)$$

และ
$$T(t) = e^{\frac{iEt}{\hbar}} \quad (3.16)$$

เมื่อแทนสมการ (3.16) ลงในสมการ (3.8) ได้ผล

$$\Psi(x,y,z,t) = \psi(x,y,z)e^{\frac{iEt}{\hbar}} \quad (3.17)$$

3.1.2 อนุภาคอิสระ (the free particle)

อนุภาคอิสระเป็นอนุภาคที่เคลื่อนที่โดยปราศจากแรงภายนอกหรือภายใต้พลังงานศักย์คงที่ ทั้งนี้เพราะว่าความสัมพันธ์ระหว่างแรงกับพลังงานศักย์เป็นไปตามสมการ $F(x,t) = -\frac{\partial V(x,t)}{\partial x}$ เพื่อความสะดวก จะเลือกค่า $V(x,t) = 0$ ซึ่งหมายถึงอนุภาคอิสระจะหยุดนิ่งหรือเคลื่อนที่ด้วยโมเมนตัมที่คงที่ โดยมีพลังงานรวม E เป็นค่าคงที่

สำหรับกลศาสตร์ควอนตัม สามารถหาผลเฉลยของสมการคลื่นชเรอดิงเงอร์กรณี $V(x,t) = 0$ เนื่องจากพลังงานศักย์นี้ไม่เป็นฟังก์ชันของเวลา t ทำให้สามารถใช้สมการชเรอดิงเงอร์ที่ไม่ขึ้นกับเวลาได้ นั่นคือ

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

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) = 0 \quad (3.18)$$

เมื่ออนุภาคอิสระมีพลังงานเป็น $E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ และแทนค่า E ลงในสมการ (3.18) จะได้

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + k^2\psi(x) = 0 \quad (3.19)$$

ผลเฉลยของสมการ (3.19) จะหาได้สำหรับพลังงานใดๆ ที่มากกว่าหรือเท่ากับศูนย์ ($E \geq 0$) และจะได้ผลเฉลยเป็น

$$\psi(x) = e^{\pm ikx}$$

เมื่อ $\psi(x) = e^{+ikx}$ แทนอนุภาคอิสระ โมเมนตัม $p = \hbar k$ เคลื่อนที่ในทิศ $+x$

เมื่อ $\psi(x) = e^{-ikx}$ แทนอนุภาคอิสระ โมเมนตัม $p = \hbar k$ เคลื่อนที่ในทิศ $-x$
 ดังนั้นฟังก์ชันคลื่นของอนุภาคอิสระคือ

$$\Psi(x,t) = \psi(x)e^{\frac{iEt}{\hbar}}$$

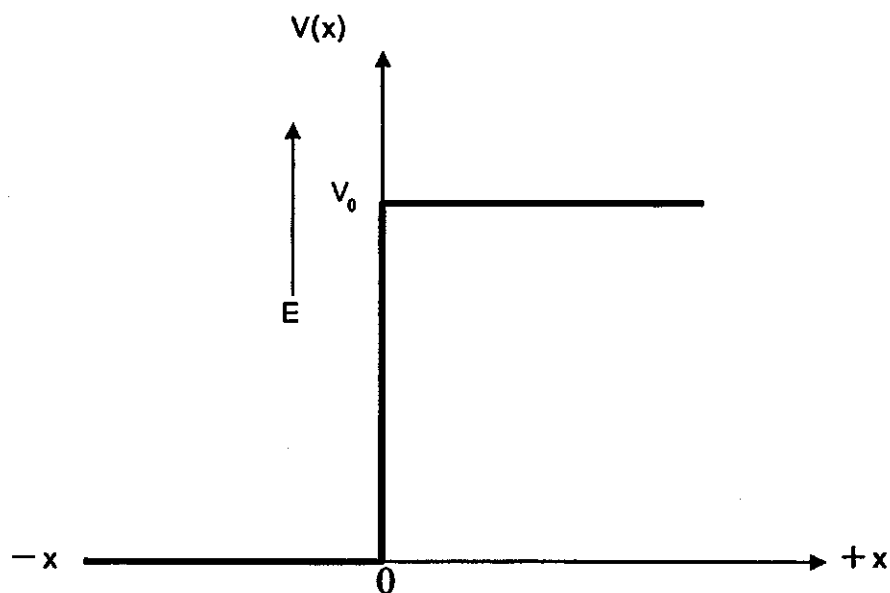
และเมื่อพิจารณาความหนาแน่นของโอกาสที่จะพบอนุภาค

$$\begin{aligned} |\Psi(x,t)|^2 &= \Psi^*(x,t)\Psi(x,t) \\ &= 1 \end{aligned}$$

แสดงว่าโอกาสที่จะพบอนุภาคมีค่าเท่ากันทุกแห่ง ดังนั้นอนุภาคจะอยู่ตรงไหนก็ได้ตั้งแต่ $-\infty$ ถึง $+\infty$ นั่นคือ $\Delta x = \infty$ ซึ่งสอดคล้องกับหลักความไม่แน่นอนของไฮเซนเบิร์ก กล่าวคือ $\Delta p = \frac{\hbar}{\Delta x} = \frac{\hbar}{\infty} = 0$ หมายความว่าโมเมนตัมของอนุภาคมีค่าแน่นอนนั่นเอง

3.1.3 สก๊อตเป็นขั้น (the step potential) และกำแพงศักย์อนันต์ (infinite potential barrier)

การหาฟังก์ชันคลื่น $\psi(x,t)$ สำหรับอนุภาคที่เคลื่อนที่ผ่านพลังงานศักย์ ดังแสดงใน
 ภาพที่ 3.1



ภาพที่ 3.1 แสดงศักย์ไฟฟ้าเป็นขั้น

ภาพที่ 3.1 เมื่อ $x \geq 0$ จะได้พลังงานศักย์ $V(x) = V_0$ เมื่อ $x < 0$ จะได้พลังงานศักย์ $V(x) = 0$

ในทางฟิสิกส์ประมาณได้ว่า ลักษณะระบบของศักย์ไฟฟ้าเป็นขั้นคล้ายกับระบบของอนุภาคที่ประจุเคลื่อนที่ไปตามแกนของอิเล็กโทรด (electrode) 2 อัน และอิเล็กโทรดทั้งสองมีความต่างศักย์ไฟฟ้า V ในกรณีนี้แบ่งการพิจารณาออกเป็น 2 ลักษณะ คือ

3.1.3.1 กรณี $E > V_0$

จากภาพที่ 3.1 กำหนดให้อนุภาคเคลื่อนที่มาจากทางซ้ายเพียงอย่างเดียว เมื่ออนุภาคมีพลังงาน E มากกว่า V_0 ในฟิสิกส์แผนเดิมคาดคะเนว่าอนุภาคทั้งหมดจะเคลื่อนที่เข้าไปในช่วง $x > 0$ แต่จะเคลื่อนที่ด้วยความเร็วที่ช้าลงกว่าเดิม แต่ในกลศาสตร์ควอนตัมฟังก์ชันคลื่นสอดคล้องสมการชเรอดิงเงอร์

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (3.20)$$

3.1.3.1.1 ในบริเวณ $x < 0; V = 0$ สมการชเรอดิงเงอร์

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

หรือ

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi_1(x) + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi_1(x) = 0 \quad (3.21)$$

กำหนดให้ $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ ดังนั้นสมการ (3.21) จึงเขียนใหม่ได้เป็น

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi_1(x) + k^2 \psi_1(x) = 0 \quad (3.22)$$

ผลเฉลยของสมการ (3.22) คือ

$$\psi_1(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad (3.23)$$

เมื่อ A และ B เป็นค่าคงที่

e^{ikx} แทนอนุภาคที่เคลื่อนที่ในทิศ $+x$ (คลื่นตกกระทบ)

e^{-ikx} แทนอนุภาคที่เคลื่อนที่ในทิศ $-x$ (คลื่นสะท้อน)

3.1.3.1.2 ในบริเวณ $x > 0; V = V_0$ สมการชเรอดิงเงอร์ คือ

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_2(x) + V_0 \psi_2(x) = E \psi_2(x)$$

หรือ
$$\frac{d^2}{dx^2} \psi_2(x) + \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} \psi_2(x) = 0 \quad (3.24)$$

กำหนดให้ $(k')^2 = \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}$ ดังนั้นสมการ (3.24) จึงเขียนใหม่ได้เป็น

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi_2(x) + (k')^2 \psi_2(x) = 0 \quad (3.25)$$

ผลเฉลยของสมการ (3.25) คือ

$$\psi_2(x) = C e^{ik'x} \quad (3.26)$$

ค่าคงที่ A, B และ C หาได้โดยใช้เงื่อนไขฟังก์ชันคลื่นและอนุพันธ์ของฟังก์ชันคลื่นจะต้องมีค่าต่อเนื่องที่รอยต่อขอบเขต เงื่อนไขนี้เรียกว่า เงื่อนไขขอบเขต (boundary condition) ในกรณีนี้จะได้ว่า

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) \quad (3.27)$$

และ
$$\left. \frac{d\psi_1}{dx} \right|_{x=0} = \left. \frac{d\psi_2}{dx} \right|_{x=0} \quad (3.28)$$

เนื่องจากกำหนดให้อนุภาคเคลื่อนที่มาจากทางซ้าย และเมื่อใช้เงื่อนไขขอบเขต ที่ $x = 0$ จากสมการ (3.27) และสมการ (3.28) จะได้

$$A + B = C \quad (3.29)$$

และ
$$k(A - B) = k'C \quad (3.30)$$

จากสมการ (3.29) และสมการ (3.30) เราหาค่า B และ C ในเทอมของ A ได้ดังนี้

$$B = \frac{(k - k')}{(k + k')} A \quad (3.31)$$

$$C = \frac{2k}{(k+k')} A \quad (3.32)$$

ดังนั้น เมื่อ $x < 0$ จะได้ $\psi(x) = A \left[e^{ikx} + \left(\frac{k-k'}{k+k'} \right) e^{-ikx} \right]$

และเมื่อ $x \geq 0$ จะได้ $\psi(x) = \frac{2k}{(k+k')} A e^{ikx}$

กำหนดให้ v และ v' เป็นความเร็วของอนุภาคในบริเวณ $x < 0$ และบริเวณ $x > 0$ ตามลำดับ จะได้

$$v = \frac{p}{m} = \frac{\hbar k}{m} \quad (3.33)$$

และ $v' = \frac{p'}{m} = \frac{\hbar k'}{m} \quad (3.34)$

เนื่องจากความเข้มของคลื่นที่ตกกระทบคือ $|A|^2$, ความเข้มของคลื่นสะท้อนคือ $|B|^2$ และความเข้มของคลื่นที่ผ่านเข้าไปคือ $|C|^2$ จะได้ฟลักซ์ (flux) ของคลื่นตกกระทบเป็น $v|A|^2$ และฟลักซ์ของคลื่นสะท้อนเป็น $v|B|^2$ รวมทั้งฟลักซ์ของคลื่นที่ผ่านเข้าไปเป็น $v|C|^2$

เมื่อกำหนดให้ R คือ สัมประสิทธิ์การสะท้อน (reflection coefficient) และ T คือ สัมประสิทธิ์การส่งผ่าน (transmission coefficient) จะได้

$$R = \frac{v|B|^2}{v|A|^2} \quad (3.35)$$

และ $T = \frac{v|C|^2}{v|A|^2} \quad (3.36)$

จากสมการ (3.31) จะได้

$$R = \left(\frac{k-k'}{k+k'} \right)^2 \quad (3.37)$$

และเมื่อแทนค่า C, v และ v' จากสมการ (3.32), (3.33) และสมการ (3.34) ลงในสมการ (3.36) จะได้สัมประสิทธิ์การส่งผ่าน ดังนี้

$$T = \frac{k'}{k} \left(\frac{2k}{k+k'} \right)^2$$

หรือ
$$T = \frac{4kk'}{(k+k')^2} \quad (3.38)$$

ในกลศาสตร์แผนเคิม สัมประสิทธิ์การสะท้อนควรเท่ากับศูนย์ และสัมประสิทธิ์การส่งผ่านควรเท่ากับหนึ่ง แต่ตามกลศาสตร์ควอนตัมได้แสดงให้เห็นว่าสัมประสิทธิ์การสะท้อนไม่เท่ากับศูนย์ และสัมประสิทธิ์การส่งผ่านไม่เท่ากับหนึ่ง แต่ผลรวมของสัมประสิทธิ์การสะท้อนกับสัมประสิทธิ์การส่งผ่านมีค่าเท่ากับหนึ่ง

3.1.3.2 กรณี $E < V_0$

จากภาพที่ 3.1 กำหนดให้อนุภาคเคลื่อนที่มาจากทางซ้ายเพียงอย่างเดียว เมื่ออนุภาคมีพลังงาน E น้อยกว่า V_0 ซึ่งฟิสิกส์แผนเคิมทำนายว่า อนุภาคจะผ่านไปทางขวามือไม่ได้ กล่าวคือ อนุภาคจะสะท้อนกลับหมด ซึ่งในกลศาสตร์ควอนตัมฟังก์ชันคลื่นที่ไม่เป็นฟังก์ชันของเวลาสอดคล้องกับสมการชเรอดิงเงอร์

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (3.39)$$

3.1.3.2.1 ในบริเวณ $x < 0; V = 0$

แทนค่าในสมการ (3.39) จะได้สมการชเรอดิงเงอร์คือ

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

หรือ
$$\frac{d^2}{dx^2} \psi_1(x) + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi_1(x) = 0 \quad (3.40)$$

กำหนดให้ $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ ดังนั้นสมการ (3.40) จึงเขียนใหม่ได้เป็น

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi_1(x) + k^2 \psi_1(x) = 0 \quad (3.41)$$

ผลเฉลยของสมการ (3.41) คือ

$$\psi_1(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad (3.42)$$

เมื่อ A และ B เป็นค่าคงที่

e^{ikx} แทนอนุภาคที่เคลื่อนที่ในทิศ $+x$ (คลื่นตกกระทบ)

e^{-ikx} แทนอนุภาคที่เคลื่อนที่ในทิศ $-x$ (คลื่นสะท้อน)

3.1.3.2.2 ในบริเวณ $x > 0; V = V_0$

แทนค่าในสมการ (3.39) ได้สมการชเรอดิงเงอร์คือ

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_2(x) + V_0 \psi_2(x) = E \psi_2(x)$$

หรือ

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi_2(x) - \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} \psi_2(x) = 0 \quad (3.43)$$

กำหนดให้ $\alpha^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}$ ดังนั้นสมการ (3.43) จึงเขียนใหม่ได้เป็น

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi_2(x) - \alpha^2 \psi_2(x) = 0 \quad (3.44)$$

ผลเฉลยของสมการ (3.44) คือ

$$\psi_2(x) = Ce^{-\alpha x} + De^{\alpha x}$$

เนื่องจากเทอม $e^{\alpha x}$ ทำให้ฟังก์ชันของ $\psi_2(x)$ มีค่ามาก เมื่อ $x \rightarrow +\infty$ ซึ่งไม่ตรงกับความเป็นจริง เพราะเมื่อตกกระทบศักย์ V_0 ที่กั้นขวาง โอกาสที่อนุภาคจะผ่านเข้ามาต้องน้อยลง จึงตัดเทอม $e^{\alpha x}$ ได้ ดังนั้น ผลเฉลยของสมการ (3.44) จึงเป็น

$$\psi_2(x) = Ce^{-\alpha x} \quad (3.45)$$

ความหนาแน่นของโอกาสที่จะพบอนุภาคในช่วง $x > 0$ คือ $|\psi_2(x)|^2 = |C|^2 e^{-2\alpha x}$ ถึงแม้ค่านี้จะลดลงอย่างรวดเร็วเมื่อ x มีค่ามากขึ้น อย่างไรก็ตามยังแสดงว่ามีโอกาสที่จะพบอนุภาคในช่วงนี้ กล่าวคือ มีคลื่นของอนุภาคผ่านเข้าไปยังช่วงนี้ได้ ซึ่งในฟิสิกส์แผนเดิมจะผ่านเข้าไปในช่วงนี้ไม่ได้

โดยใช้เงื่อนไขขอบเขตดังที่กล่าวมาสามารถหาค่าคงที่ A, B และ C ได้ ดังนี้

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) \quad (3.46)$$

และ
$$\left. \frac{d\psi_1}{dx} \right|_{x=0} = \left. \frac{d\psi_2}{dx} \right|_{x=0} \quad (3.47)$$

จากสมการ (3.46) จะได้

$$A + B = C \quad (3.48)$$

และจากสมการ (3.47) จะได้

$$ik(A - B) = -\alpha C \quad (3.49)$$

หาค่า B และ C ในเทอมของ A จากสมการ (3.48) และสมการ (3.49) ได้ดังนี้

$$B = \frac{(ik + \alpha)}{(ik - \alpha)} A \quad (3.50)$$

และ
$$C = \frac{2ik}{(ik - \alpha)} A \quad (3.51)$$

ดังนั้น เมื่อ $x < 0$ จะได้
$$\psi(x) = A \left[e^{ikx} + \left(\frac{ik + \alpha}{ik - \alpha} \right) e^{-ikx} \right]$$

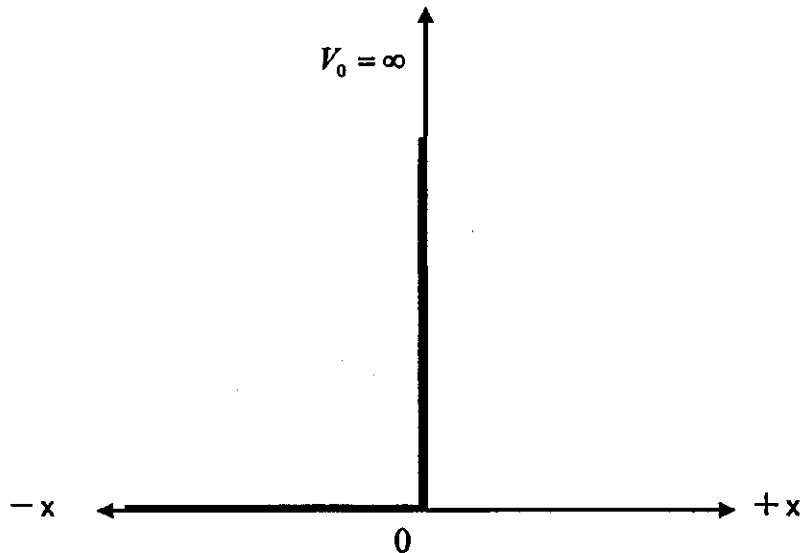
และเมื่อ $x \geq 0$ จะได้
$$\psi(x) = \frac{2ik}{(ik - \alpha)} A e^{-\alpha x}$$

เนื่องจากกำหนดให้อนุภาคเคลื่อนที่มาจากทางซ้ายเพียงทางเดียว ดังนั้น A ในสมการ (3.42) แทนค่าแอมพลิจูดของคลื่นที่เคลื่อนที่จากอนุภาคที่ตกกระทบ ส่วน B เป็นแอมพลิจูดของคลื่นสะท้อน ซึ่งมีการสะท้อนที่ศักย์ไม่ต่อเนื่อง ที่จุด $x = 0$ และ C เป็นแอมพลิจูดของคลื่นที่ผ่านเข้ามาในช่วงที่ 2 จากสมการ (3.42) จะให้ความเข้มของคลื่นของอนุภาคที่ตกกระทบ คือ $(A^* e^{-ikx})(A e^{ikx}) = |A|^2$ และความเข้มของคลื่นสะท้อนกลับ คือ $(B^* e^{ikx})(B e^{-ikx}) = |B|^2$ จากสมการ (3.50) จะได้

$$|B|^2 = \left[\left(\frac{ik + \alpha}{ik - \alpha} \right) A \right] \left[\left(\frac{-ik + \alpha}{-ik - \alpha} \right) A^* \right] = |A|^2$$

แสดงว่าความเข้มของคลื่นที่ตกกระทบและคลื่นสะท้อนกลับมีค่าเท่ากัน หมายความว่าเมื่ออนุภาคที่มี $E < V_0$ มาถึงศักย์เป็นขั้น อนุภาคจะสะท้อนกลับรวมทั้งคลื่นที่ผ่านเข้าไปในช่วงที่ 2 เพียงเล็กน้อยด้วย

ในกรณีที่ศักย์เป็นขั้นเมื่อ $V_0 = \infty$ ย่อมส่งผลให้ $\alpha = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$ มีค่าเป็นอนันต์ ด้วยเช่นกัน ปัญหาศักย์เป็นขั้นจะกลายเป็นปัญหากำแพงศักย์อนันต์ ดังแสดงในภาพที่ 3.2



ภาพที่ 3.2 แสดงศักย์ไฟฟ้าเป็นขั้น เมื่อ $V_0 = \infty$

โดยพิจารณาภาพที่ 3.2 และผลเฉลยของสมการชเรอดิงเงอร์ กรณี $E < V_0$ เมื่อ $V_0 = \infty$ ดังนั้น

$$\text{บริเวณ } x < 0, \quad \psi(x) = A(e^{ikx} - e^{-ikx}) = A' \sin kx$$

$$\text{หรือ} \quad \psi_p(x) = A' \sin \frac{px}{\hbar} \quad (3.52)$$

$$\text{และ บริเวณ } x > 0, \quad \psi(x) = 0 \quad (3.53)$$

กล่าวคือ กรณีกำแพงศักย์อนันต์ อนุภาคไม่อาจฝ่ากำแพงศักย์เข้าไปในบริเวณ $x > 0$ ได้เลย

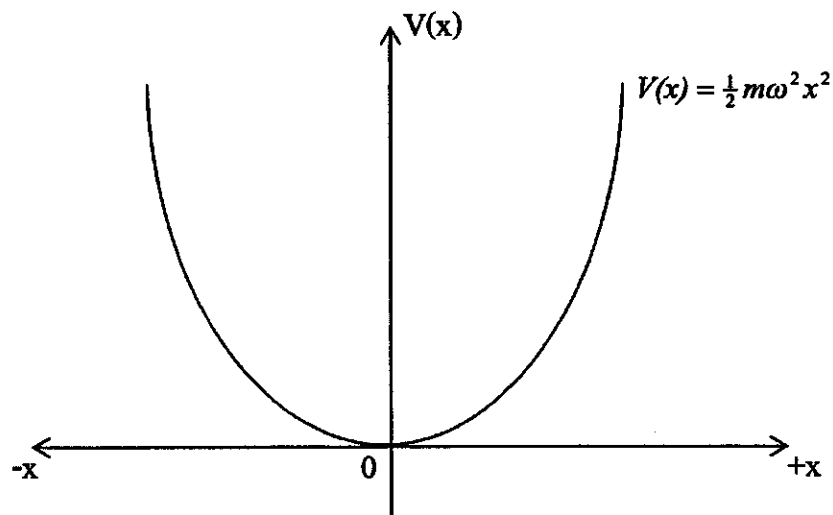
3.1.4 การหาค่าพลังงานและฟังก์ชันคลื่นของฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์

สำหรับปัญหาของอนุภาคซึ่งถูกจำกัดขอบเขตด้วยแรงฮาร์มอนิก (แรงยืดหยุ่นคล้ายแรงคืนกลับของสปริง) เป็นปัญหาที่ทราบกันดีในวิชากลศาสตร์ควอนตัม เราเรียกอนุภาคดังกล่าวว่าฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์หรือตัวแกว่งกวัดฮาร์มอนิก เราสามารถใช้กลศาสตร์เชิงคลื่นของชเรอดิงเงอร์คำนวณปริมาณทางกายภาพของอนุภาคดังกล่าวได้ อาทิ ฟังก์ชันคลื่น ระดับพลังงานที่เป็นไปได้

และโอกาสที่จะพบอนุภาค ณ ตำแหน่งต่างๆ เป็นต้น กล่าวในเชิงคณิตศาสตร์ฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์ คือ อนุภาคที่อยู่ภายใต้แรงซึ่งพลังงานศักย์เขียนได้เป็น

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2x^2, \quad -\infty < x < \infty \quad (3.54)$$

หากเขียนกราฟของพลังงานศักย์เทียบกับตำแหน่ง x จะได้ดังภาพที่ 3.3



ภาพที่ 3.3 ศักย์แบบฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์

ซึ่งปัญหาฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์มักจะถูกนำไปเป็นตัวอย่างในกลศาสตร์ควอนตัมเบื้องต้นทั่วไป ผลจากการแก้สมการชเรอดิงเงอร์ที่ไม่ขึ้นต่อเวลา

พิจารณาตัวแกว่งกวัดฮาร์มอนิกในกลศาสตร์ควอนตัม จากการพิจารณาพลังงานในกลศาสตร์แบบฉบับ ด้วยการเปลี่ยนพลังงานลงไปเป็นตัวดำเนินการ กล่าวคือ

$\frac{p^2}{2m} \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$ เราจะได้สมการสมการชเรอดิงเงอร์ในระบบดังกล่าว

$$\left. \begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \psi(x) &= E \psi(x) \\ \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + \left(E - \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right) \psi(x) &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (3.55)$$

สมการ (3.55) อยู่ในรูป

$$\frac{d^2 y}{dx^2} + f(x)y = 0 \quad (3.56)$$

โดยที่ $f(x) = \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right)$ สมการดังกล่าวไม่อาจหาผลเฉลยได้โดยง่าย เนื่องจากไม่ได้
อยู่ในรูป $\frac{d^2 y}{dx^2} \pm \alpha^2 y = 0$ ด้วยการคูณสมการ (3.55) ด้วย $\frac{2}{\hbar \omega}$ ได้ผล

$$\left(\frac{2}{\hbar \omega} \right) \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right) \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + \left(E \frac{2}{\hbar \omega} - \frac{2}{\hbar \omega} \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right) \psi(x) = 0$$

$$\frac{\hbar}{m \omega} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + \left(\frac{2E}{\hbar \omega} - \frac{m \omega}{\hbar} x^2 \right) \psi(x) = 0 \quad (3.57)$$

ให้

$$\lambda = \frac{2E}{\hbar \omega} \quad (3.58)$$

และ

$$\sqrt{\frac{m \omega}{\hbar}} x = \xi \quad (3.59)$$

สมการ (3.56) กลายเป็น

$$\frac{d^2}{d\xi^2} \psi(\xi) + (\lambda - \xi^2) \psi(\xi) = 0 \quad (3.60)$$

ผลเฉลยของสมการ (3.60) เมื่อ $\xi \rightarrow \pm \infty$ ใช้วิธีหาผลเฉลยอะซิมป์โทติก (asymptotic solution)

พิจารณาสมการ (3.59) เมื่อ ξ มีค่ามาก ($\xi \gg \lambda$) สมการ (3.59) ประมาณได้เป็น

$$\frac{d^2}{d\xi^2} \psi_{as}(\xi) - \xi^2 \psi_{as}(\xi) = 0 \quad (3.61)$$

$\psi_{as}(\xi)$ น่าจะมีผลเฉลยที่อยู่ในรูป

$$\psi_{as}(\xi) = A e^{\pm \xi^2 / 2} \quad (3.62)$$

อย่างไรก็ตาม ผลเฉลยที่ใช้การได้ควรจะเป็น $A e^{\pm \xi^2 / 2}$ (เพื่อป้องกันมิให้ $\psi_{as}(\infty) = \infty$)
ดังนั้นผลเฉลยทั่วไปของสมการ (3.60) ควรจะมีรูปแบบเชิงคณิตศาสตร์

$$\begin{aligned}\psi(\xi) &= \psi_{as}(\xi)H(\xi) \\ &= Ae^{\pm\xi^2/2}H(\xi)\end{aligned}\quad (3.63)$$

เมื่อ $H(\xi)$ เป็นฟังก์ชันใดๆ ที่ยังไม่ทราบแน่ชัด เมื่อแทน $\psi(\xi)$ ในสมการ (3.63) ลงในสมการ (3.60) ได้ผล

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{d\xi^2}(e^{-\xi^2}H(\xi)) + (\lambda - \xi^2)e^{-\xi^2/2}H(\xi) &= 0 \\ \frac{d^2}{d\xi^2}H(\xi) - 2\xi\frac{d}{d\xi}H(\xi) + (\lambda - 1)H(\xi) &= 0\end{aligned}\quad (3.64)$$

จะเห็นได้ว่าการเปลี่ยนรูป $\psi(\xi)$ ตามแบบสมการ (3.63) จะนำไปสู่รูปแบบปัญหาของสมการเชิงอนุพันธ์แบบใหม่ที่ดูเหมือนว่ายุ่งยากกว่าเดิม อย่างไรก็ตามสมการ (3.64) เป็นสมการเชิงอนุพันธ์มาตรฐานแบบหนึ่ง โดยมีผลเฉลยที่แน่นอน สมการแบบนี้มีชื่อเรียกว่า สมการเชิงอนุพันธ์เฮอร์ไมต์ (Hermite differential equation) ซึ่งจะมีผลเฉลยก็ต่อเมื่อ

$$\lambda - 1 = 2n, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (3.65)$$

โดยที่

$$\lambda - 1 = 2.0 \quad \text{จะคล้อยจองกับผลเฉลย} \quad H_0(\xi), n = 0$$

$$\lambda - 1 = 2.1 \quad \text{จะคล้อยจองกับผลเฉลย} \quad H_1(\xi), n = 1$$

...

...

...

$$\lambda - 1 = 2.n \quad \text{จะคล้อยจองกับผลเฉลย} \quad H_n(\xi), n = n$$

โดยที่ $H_n(\xi)$ มีรูปแบบเชิงคณิตศาสตร์ดังนี้

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} \quad (3.66)$$

$H_n(\xi)$ มีชื่อเรียกว่าพหุนามเฮอร์ไมต์อันดับที่ n

สรุปได้ว่าตัวแกว่งกวัดฮาร์มอนิกหนึ่งมิติในกลศาสตร์ควอนตัมจะมีฟังก์ชันคลื่น

$$\begin{aligned}\psi_n(\xi) &= Ae^{-\xi^2/2} H_n(\xi) \\ &= Ae^{-\xi^2/2} (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}\end{aligned}\quad (3.67)$$

คล้อยจองกับระดับพลังงานที่ n ดังนี้

$$\begin{aligned}\lambda - 1 &= 2.n \\ \frac{2E}{\hbar\omega} - 1 &= 2.n \\ E &= (n + 1/2)\hbar\omega \\ E_n &= (n + 1/2)\hbar\omega, n = 0, 1, 2, 3, \dots\end{aligned}\quad (3.68)$$

ตัวอย่าง พหุนามแฮร์มิตอันดับที่ n ต่างๆ

$$\begin{aligned}H_0(\xi) &= (-1)^0 e^{\xi^2} \frac{d^0}{d\xi^0} e^{-\xi^2} = (-1^0) (e^{\xi^2}) (e^{-\xi^2}) = 1 \\ H_1(\xi) &= (-1)^1 e^{\xi^2} \frac{d^1}{d\xi} e^{-\xi^2} = (-1^1) (e^{\xi^2}) (e^{-\xi^2}) (-2\xi) = 2\xi \\ H_2(\xi) &= 4\xi^2 - 2 \\ H_3(\xi) &= 8\xi^3 - 12\xi \\ H_4(\xi) &= 16\xi^4 - 48\xi^2 + 12 \text{ เป็นต้น}\end{aligned}$$

จากสมการ (3.67) เรามี $\psi_n(\xi) = Ae^{-\xi^2/2} H_n(\xi)$ ด้วยการเปลี่ยนตัวแปร $\xi \rightarrow x$ เราได้

$$\psi_n(x) = A_n e^{-m\omega^2 x^2 / 2\hbar} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right)\quad (3.69)$$

การหาค่าคงตัวของการเป็นคลื่นปกติ (A_n)

ใช้เงื่อนไขการทำฟังก์ชันคลื่นให้เป็นปกติ $\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) \psi_n(x) dx = 1$ เราได้

$$A_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-xax^2/2\hbar} H_n^* \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) e^{-max^2/2\hbar} H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) dx = 1$$

ส่งผลให้

$$A_n = \left[\frac{1}{(2^n)n!} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/2} \right]^{1/2} \quad (3.70)$$

ตารางที่ 1 แสดงฟังก์ชันคลื่นของฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์หนึ่งมิติ ต่อกรณี $n = 0, 1, 2$

n	E_n	$\psi_n(x)$
0	$\frac{1}{2}\hbar\omega$	$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-max^2/2\hbar}$
1	$\frac{3}{2}\hbar\omega$	$\psi_1(x) = \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right) \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-max^2/2\hbar} 2\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x$
2	$\frac{5}{2}\hbar\omega$	$\psi_2(x) = \left(\frac{1}{\sqrt{8}} \right) \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-max^2/2\hbar} \left(\frac{4max^2}{\hbar} - 2 \right)$

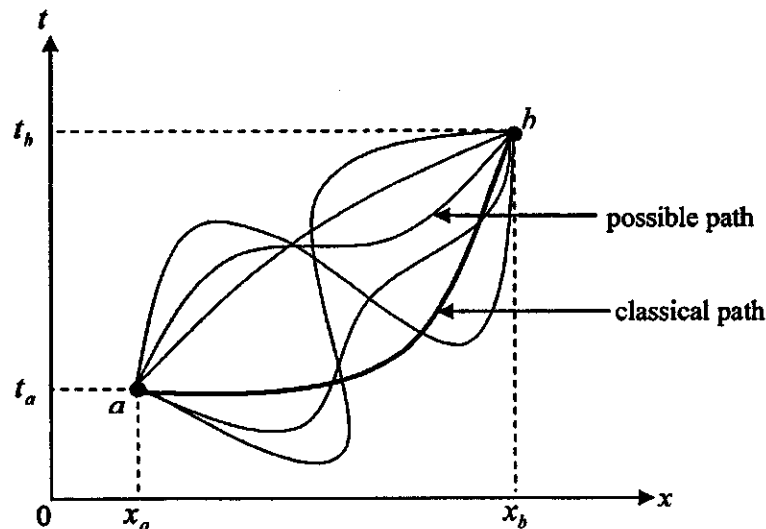
3.2 ทฤษฎีอินทิเกรตตามเส้นทางเบื้องต้น

เราได้พบแล้วว่ากลศาสตร์ควอนตัมอาจเสนอได้โดยใช้แนวความคิดของไฮเซนเบิร์กหรือแนวความคิดของชเรอดิงเงอร์ แนวคิดทั้งสองแบบนี้แม้ว่าการเริ่มต้นจะแตกต่างกันมาก แต่ผลสุดท้ายก็ให้ผลลัพธ์เหมือนกัน โดยเฉพาะอย่างยิ่งคณิตศาสตร์ที่ใช้ในการอธิบายควอนตัมทั้งสองรูปแบบนี้เราสามารถพิสูจน์ได้ว่าเท่ากันทุกประการ สำหรับวิธีการคำนวณของชเรอดิงเงอร์นั้นตัวกลางที่มีความสำคัญที่ช่วยในการอธิบายปริมาณควอนตัมต่างๆ คือ ฟังก์ชันคลื่น ซึ่งเป็นฟังก์ชันที่แสดงถึงคลื่นที่รวมอยู่กับอนุภาค ถ้าเรายอมรับว่าความคิดของเดอบรอยล์เป็นจริง การแทนที่อนุภาคโฟตอนด้วยอนุภาคอิเล็กตรอนก็จะทำให้สามารถคำนวณหาแอมพลิจูดของความน่าจะเป็น (probability amplitude) นอกจากนี้เรายังพบว่าแอมพลิจูดของความน่าจะเป็นนี้ที่แท้ก็คือ ฟังก์ชันคลื่นนั่นเอง

ต่อมาในปี ค.ศ. 1948 ฟายน์แมนได้ค้นพบวิธีการคำนวณหาแอมพลิจูดของความน่าจะเป็น โดยฟายน์แมนสังเกตว่าถ้าเราต้องการศึกษาพฤติกรรมของอิเล็กตรอน เราอาจใช้วิธีการของชเรอดิงเงอร์เพื่อหาแอมพลิจูดของความน่าจะเป็นของอิเล็กตรอนที่ประพาศติตัวเป็นคลื่น แต่จากการวิเคราะห์ปัญหาเกี่ยวกับธรรมชาติของการเป็นไปได้ทั้งคลื่นและอนุภาคแสดงว่าแอมพลิจูดของคลื่นของอิเล็กตรอนนั้นอาจคำนวณได้โดยถือว่าอิเล็กตรอนเป็นอนุภาค และแอมพลิจูดของความน่าจะเป็น

เป็นทั้งหมดของคลื่นที่สังสรรค์อยู่กับอนุภาคมีค่าเท่ากับแอมพลิจูดของความน่าจะเป็นย่อยๆ รวมกัน โดยที่แต่ละแอมพลิจูดของความน่าจะเป็นย่อยนั้นต้องคล้องจองกับทางเดินใดทางเดินหนึ่งของอนุภาค เพื่อความสะดวกในการคำนวณเราจะพิจารณาเฉพาะในกรณีการเคลื่อนที่ที่เป็นหนึ่งมิติเท่านั้น อย่างไรก็ตามวิธีการนี้สามารถจะขยายไปสู่กรณีสามมิติหรือมิติที่มากกว่าได้โดยไม่ยากนัก

เมื่อพิจารณาอนุภาคตัวหนึ่งเริ่มต้นเคลื่อนที่จากจุด a ที่ตำแหน่ง x_a ณ เวลา t_a ไปยังจุดสุดท้ายที่จุด b ที่ตำแหน่ง x_b ณ เวลา t_b ในกลศาสตร์แบบฉบับ (classical mechanics) เราสามารถบอกตำแหน่งของอนุภาคที่เวลาใดๆ ได้ นั่นคือเราทราบเส้นทางที่แน่นอนของอนุภาคซึ่งมีอยู่เส้นทางเดียว แต่ในทางควอนตัมเราไม่สามารถบอกตำแหน่งของอนุภาคได้แน่นอน เราบอกได้เพียงโอกาสของความน่าจะเป็นเท่านั้น ฟายน์แมนพบว่าเส้นทางเคลื่อนที่ของอนุภาคมีได้หลายเส้นทางนอกเหนือจากเส้นทางแบบฉบับ (classical path) ดังแสดงในภาพที่ 3.4



ภาพที่ 3.4 แสดงเส้นทางที่เป็นไปได้ของอนุภาครวมทั้งเส้นทางแบบฉบับ ในการเดินทางจากจุด a ไปยังจุด b

ฟายน์แมนยังพบอีกว่าแอมพลิจูดของความน่าจะเป็นเป็นสมนัยกับเส้นทางใดมีรูปแบบเชิงคณิตศาสตร์ดังนี้

$$\phi[x(t)] = [\text{const.}] e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t)]} \quad (3.71)$$

เมื่อ $\phi[x(t)]$ คือแอมพลิจูดของความน่าจะเป็น (probability amplitude) และ $S[x(t)]$ คือ กิริยา (action)

โดยที่
$$S[x(t)] = \int_{t_0}^{t_1} L(x, \dot{x}, t) dt \quad (3.72)$$

และ $L(x, \dot{x}, t)$ คือ ลากรางเจียน (Lagrangian) ของระบบที่กำลังพิจารณา ในกรณีที่อนุภาคมีมวล และเคลื่อนที่ภายใต้ศักย์ $V(x)$ ซึ่งเป็นฟังก์ชันที่ขึ้นอยู่กับโคออร์ดิเนต x เพียงอย่างเดียว

$$L(x, \dot{x}, t) = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 - V(x) \quad (3.73)$$

ฟายน์แมนได้ให้นิยามแอมพลิจูดของความน่าจะเป็นที่อนุภาคจะเคลื่อนที่จากจุด a ณ เวลา t_0 ไปยังจุด b ณ เวลา t_1 ไว้ดังนี้

$$K(b, a) = \sum_{\text{ทุกเส้นทาง}} \phi[x(t)] = \sum_{\text{ทุกเส้นทาง}} [\text{const.}] e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t)]} \quad (3.74)$$

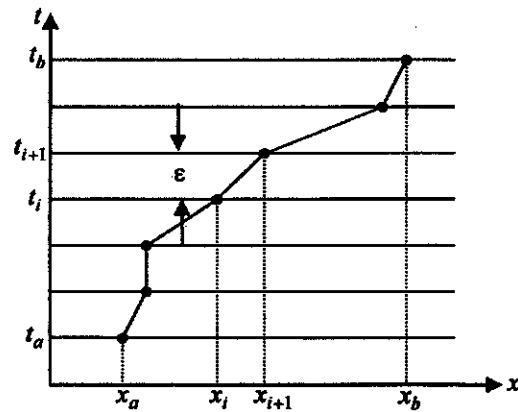
จาก a ไป b จาก a ไป b

และเรียกแอมพลิจูดของความน่าจะเป็นนี้ว่า ตัวแพร่กระจาย (propagator or transition amplitude) เนื่องจากจำนวนเส้นทางทั้งหมดระหว่างจุด a กับจุด b มีจำนวนมหาศาลจนนับไม่ถ้วนหรืออนันต์ ในการรวมแอมพลิจูดตามสมการ (3.74) จึงเป็นเรื่องยุ่งยากจนแทบเป็นไปได้ อย่างไรก็ตามโดยอาศัยวิธีการทางคณิตศาสตร์ที่ชาญฉลาดในแก้ปัญหาดังกล่าว ฟายน์แมนก็สามารถคำนวณเส้นทางทั้งหมดได้ โดยเปลี่ยนการบวกหรือผลบวก (summation) ในสมการ (3.74) เป็นการอินทิเกรตแทนด้วยวิธีการดังนี้

สมมติว่าเส้นทางเดินของอนุภาคมีลักษณะดังแสดงในภาพที่ 3.4 เราอาจแบ่งช่วงเวลาซึ่งถือว่าเป็นตัวแปรจาก t_0 ถึง t_1 ออกเป็นช่วงย่อยๆ กว้างเท่ากันเป็นจำนวน n ช่อง โดยที่ $t_n - t_{n-1} = t_{n-1} - t_{n-2} = \dots = t_i - t_{i-1} = \dots = t_2 - t_1 = t_1 - t_0 = \epsilon$ เมื่อ $t_0 = t_a, t_n = t_b, x(t_a) = x_a$ และ $x(t_b) = x_b$ โดยการแบ่งเช่นนี้ทำให้เราได้เวลาเป็นชุด ซึ่งมีระยะห่างเท่ากับ ϵ แต่ละ t_i เราอาจเลือก x_i คล้องจองกับ t_i หนึ่งจุด โดยการเชื่อมโยงจุดเหล่านั้นเข้าด้วยกันด้วยเส้นตรง เราจะได้เส้นทางของอนุภาคหนึ่งเส้นทางดังแสดงในภาพที่ 3.5 ในการเดินทางของอนุภาคจากจุด x_i ไปยังจุด x_{i+1} เราได้แอมพลิจูดของความน่าจะเป็นจะมีค่าประมาณดังนี้

$$K(x_{i+1}, x_i) \approx \frac{1}{A} \exp\left(\frac{i}{\hbar} [x_{i+1}, x_i]\right)$$

$$\approx \frac{1}{A} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \left[L\left(\frac{x_{i+1} - x_i}{\epsilon}, \frac{x_{i+1} + x_i}{2}, \frac{t_{i+1} + t_i}{2}\right) \epsilon \right]\right) \quad (3.75)$$



ภาพที่ 3.5 แสดงเส้นทางเดินของอนุภาคจากจุด x_a ไปยังจุด x_b โดยแบ่งออกเป็นเส้นทางย่อยๆ

แอมพลิจูดของความน่าจะเป็นในการเดินทางของอนุภาคจากจุด a ไปยังจุด b โดยใช้เส้นทางดังแสดงในภาพที่ 3.5 คือ

$$\phi[x(t)] \approx K(x_n, x_{n-1})K(x_{n-1}, x_{n-2}) \dots K(x_i, x_{i-1}) \dots K(x_1, x_0) = \prod_{i=1}^{n-1} K(x_i, x_{i-1}) \quad (3.76)$$

จากสมการ (3.75) และสมการ (3.76) เราจะได้ว่าผลรวมของการมีส่วนร่วม (contribution) จากแต่ละเส้นทางสามารถหาได้โดยการอินทิเกรตสมการ (3.76) ขอให้สังเกตว่าเราจะบังคับให้ $\epsilon \rightarrow 0$ ในสมการ (3.77) โดยตรงยังไม่ได้เพราะจะทำให้สมการดังกล่าวไม่มีขีดจำกัด เพื่อให้ได้ค่าที่เป็นที่ยอมรับได้เราจะต้องหาตัวประกอบแบบอย่าง (normalizing factor) (A) ซึ่งเป็นฟังก์ชันของ ϵ ที่จะทำให้สมการ (3.74) มีค่าเป็นที่ยอมรับได้เมื่อ $\epsilon \rightarrow 0$ กล่าวคือ

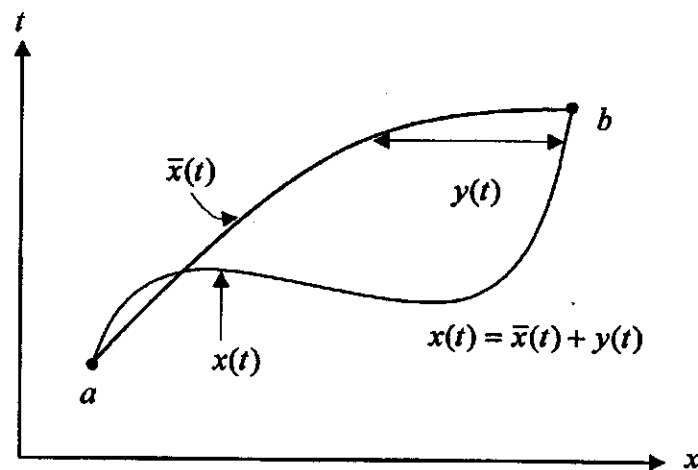
$$\begin{aligned} K(b, a) &= \sum_{a \rightarrow b} \phi[x(t)] = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \iint \dots \prod_{i=1}^n K(x_i, x_{i-1}) dx_1 dx_2 \dots dx_{n-1} \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \iint \dots \int \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \epsilon \sum_i L \left(\frac{x_{i+1} - x_i}{\epsilon}, \frac{x_{i+1} + x_i}{2}, \frac{t_{i+1} + t_i}{2} \right) \right\} \frac{dx_1}{A} \frac{dx_2}{A} \dots \frac{dx_i}{A} \dots \frac{dx_{n-2}}{A} \frac{dx_{n-1}}{A} \end{aligned} \quad (3.77)$$

โดยที่ A เป็นค่าคงที่ พบว่ามีค่าเป็น $\left(\frac{2\pi i \hbar \epsilon}{m} \right)^{\frac{1}{2}}$ สมการ (3.77) จึงสามารถเขียนให้อยู่ในรูปที่กะทัดรัดเพื่อความสะดวกเรานิยมเขียนสมการ (3.77) ดังนี้

$$K(b, a) = \int_a^b e^{\frac{i}{\hbar} S[b, a]} D[x(t)] \quad (3.78)$$

$$S[b, a] = \int_{t_a}^{t_b} L(x, \dot{x}, t) dt \quad (3.79)$$

สมการ (3.79) นี้เรารู้จักกันดีในนามของอินทิกรัลตามเส้นทาง (path integrals) หรือ อินทิเกรตตามเส้นทาง (path integration) พิจารณาสมการ (3.77) จะเห็นว่า การคำนวณตัวแปรกระจาย นั้น ความยากง่ายในการคำนวณขึ้นอยู่กับรูปแบบเชิงคณิตศาสตร์ของลากรางเจียนของระบบ ถ้าหาก ทำการอินทิเกรตแต่ละตัวแปร โดยตรงจำนวนครั้งของการอินทิเกรตมากมายมหาศาลจนแทบ เป็นไปไม่ได้ในทางปฏิบัติ อย่างไรก็ตาม เราสามารถเลี่ยงปัญหานี้ได้ โดยการแทนเส้นทางใดๆ ที่ เป็นไปได้ด้วยเส้นทางแบบฉบับ ดังแสดงในภาพที่ 3.6



ภาพที่ 3.6 แสดงเส้นทางแบบฉบับ $\bar{x}(t)$ และส่วนที่เบี่ยงเบนไปจากเส้นทางแบบฉบับ $y(t)$

ตัวอย่างเช่น ระบบของตัวแกว่งกวัดฮาร์มอนิกเชิงเส้นซึ่งมีลากรางเจียนดังนี้

$$L(x, \dot{x}) = \frac{m}{2} (\dot{x}^2 - \omega^2 x^2) \quad (3.80)$$

โดยการแทนเส้นทางใดๆ ที่เป็นไปได้ด้วยเส้นทางแบบฉบับกับส่วนที่เบี่ยงเบนไปจาก เส้นทางแบบฉบับ กล่าวคือ เราให้

$$x(t) = \bar{x}(t) + y(t) \quad (3.81)$$

เมื่อ $x(t)$ และ $y(t)$ คือ เส้นทางแบบฉบับและส่วนที่เบี่ยงเบนไปจากเส้นทางแบบฉบับ เมื่อแทนสมการ (3.81) ลงในสมการ (3.78) เราจะได้ว่า

$$\begin{aligned} K(b, a) &= e^{\frac{i}{\hbar} S_{cl}(x_a, x_b)} \int_0^0 D[y(t)] e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \frac{m}{2} (\dot{y}^2 - \omega^2 y^2) dt} \\ &= F(t_b, t_a) \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} S_{cl}(x_b, x_a) \right\} \end{aligned} \quad (3.82)$$

โดยที่ $F(t_b, t_a)$ คือ prefactor ซึ่งเป็นปริมาณที่ไม่ขึ้นอยู่กับจุดเริ่มต้นและจุดปลายของการเคลื่อนที่ของอนุภาค ส่วน $S_{cl}(x_b, x_a)$ คือแอคชันแบบฉบับ สามารถคำนวณได้โดยใช้หลัก principle of least action อย่างไรก็ตาม van Vleck และ Pauli พบว่าในกรณีที่ลากรางเจียนของระบบมีรูปแบบเชิงคณิตศาสตร์เป็น quadratic ค่า prefactor ของระบบสามารถหาได้โดยใช้สูตร

$$F(t_a, t_b) = \left[\det \left(\frac{i}{2\pi\hbar} \frac{\partial^2}{\partial x_a \partial x_b} S_{cl}(x_b, x_a) \right) \right]^{\frac{1}{2}} \quad (3.83)$$

โดยอาศัยสมการ (3.82) และ (3.83) เราจะได้ว่า ในการคำนวณหาตัวแผ่กระจายของอนุภาคในทางควอนตัม กลับกลายเป็นการคำนวณหาเส้นทางแบบฉบับแทน

3.2.1 ฟังก์ชันคลื่นและพลังงานของอนุภาค

เราได้กล่าวถึงวิธีการคำนวณหาตัวแผ่กระจายของอนุภาคที่เคลื่อนที่จากจุดหนึ่งจุดใดในอวกาศไปยังอีกจุดหนึ่งในอวกาศ โดยการติดตามเส้นทางเดินของอนุภาคอย่างใกล้ชิด เนื่องจากฟังก์ชันคลื่นแสดงถึงแอมพลิจูดของความน่าจะเป็น เมื่อเราพิจารณาสมการ (3.78) อีกครั้งหนึ่ง

$$K(b, a) = \int_a^b e^{\frac{i}{\hbar} S[b, a]} D[x(t)] \quad (3.84)$$

เนื่องจาก $S[b, a] = \int_{t_a}^{t_b} L(x, \dot{x}, t) dt$ และจากคุณสมบัติของการอินทิเกรต เราสามารถแบ่งช่วงของการอินทิเกรตออกเป็นสองส่วนได้ กล่าวคือ

$$\begin{aligned} S[b, a] &= \int_a^b L dt = \int_a^c L dt + \int_c^b L dt \\ S[b, a] &= S[b, c] + S[c, a] \end{aligned} \quad (3.85)$$

จากสมการ (3.84) และสมการ (3.85) เราจะได้ว่า

$$\begin{aligned} K(b, a) &= \int_{-\infty}^c \int \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[b, a]\right) D[x(t)] \int_c^b \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[c, a]\right) D[x(t)] dx_c \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} K(b, a) K(c, a) dx_c \end{aligned} \quad (3.86)$$

สมการ (3.86) นี้อาจตีความได้ว่าอนุภาคเคลื่อนที่จากจุด a ถึงจุด b จะเท่ากับ (หรือให้ผลเหมือนกับ) อนุภาคเคลื่อนที่จาก a ถึง c แล้วจาก c ถึง b แอมพลิจูดของอนุภาคที่เคลื่อนที่จาก a ถึง b จะเท่ากับผลคูณของแอมพลิจูดของแต่ละช่วงของการเดินทาง แอมพลิจูดรวมทั้งหมดของอนุภาคที่เคลื่อนที่จาก a ถึง b จึงได้จากการอินทิเกรตตัวแปร x_c กล่าวคือ

$$\begin{aligned} K(a \rightarrow c \rightarrow b) &= K(b, a) K(c, a) \\ K(a \rightarrow b) &= \int_{-\infty}^{\infty} K(b, a) K(c, a) dx_c \end{aligned} \quad (3.87)$$

ในกรณีที่เราไม่สนใจว่าอนุภาคเริ่มต้นมาจากตำแหน่งใด (x_a อาจมาจากตำแหน่งใดๆ ก็ได้) $K(b, a)$ ก็จะกลายเป็นแอมพลิจูดของความน่าจะเป็นที่จะพบอนุภาคที่ตำแหน่ง x_b ณ เวลา t_b แอมพลิจูดดังกล่าวนี้ก็คือฟังก์ชันคลื่นนั่นเอง กล่าวคือ

$$K(b, a) = K(x_b, t_b; x_a, t_a) \longrightarrow \psi(x_b, t_b)$$

ไม่สนใจต้นกำเนิด (x_a, t_a)

ดังนั้น จากสมการ (3.86) หรือ (3.87) ถ้าไม่สนใจตำแหน่งเริ่มต้น (x_a, t_a) เราจะได้ว่า

$$\psi(x_b, t_b) = \int_{-\infty}^{\infty} K(x_b, t_b; x_c, t_c) \psi(x_c, t_c) dx_c \quad (3.88)$$

สรุปได้ว่า ถ้าเราทราบฟังก์ชันคลื่น ณ เวลา t_c และทราบรูปแบบของตัวแผ่กระจาย เราก็สามารถหาฟังก์ชันคลื่น ณ เวลา t ใดๆ ได้ โดยที่ $t > t_c$

พิจารณาระบบนิ่ง (stationary system) แฮมิลโทเนียนของระบบไม่ขึ้นต่อเวลาอย่างชัดเจน คำตอบหรือผลเฉลยของสมการชเรอดิงเงอร์

$$H\psi(x,t) = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial}{\partial t} \psi(x,t) \quad (3.89)$$

จะอยู่ในรูป

$$\psi(x,t) = \sum_n C_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \psi_n(x) \quad (3.90)$$

โดยที่

$$C_n = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x,t) \psi_n^*(x) e^{\frac{i}{\hbar} E_n t} dx \quad (3.91)$$

เมื่อแทน C_n ลงในสมการ (3.90) เราจะได้

$$\begin{aligned} \psi(x,t) &= \sum_n \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x',t') \psi_n^*(x') e^{\frac{i}{\hbar} E_n t'} dx' \psi_n(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \sum_n \psi_n(x) \psi_n^*(x') e^{-\frac{i}{\hbar} E_n (t-t')} \psi(x',t') dx' \end{aligned} \quad (3.92)$$

เปรียบเทียบกับสมการ (3.88) กับสมการ (3.92) เราจะได้ว่า

$$K(x,t,x',t') = \sum_n \psi_n(x) \psi_n^*(x') e^{-\frac{i}{\hbar} E_n (t-t')} \quad (3.93)$$

จากสมการ (3.93) จะเห็นว่าตัวแพร่กระจายจะให้ความรู้แก่เราเกี่ยวกับฟังก์ชันคลื่นและพลังงานพร้อมๆ กัน

3.2.2 การคำนวณหาตัวแพร่กระจายของอนุภาคอิสระ (free particle)

อนุภาคอิสระหมายถึงอนุภาคที่ไม่อยู่ภายใต้อิทธิพลของแรงใดๆ พลังงานศักย์ของอนุภาคมีค่าเป็นศูนย์ ดังนั้นพลังงานรวมและลากรางเจียนของระบบจะประกอบด้วยพลังงานจลน์แต่เพียงอย่างเดียว กล่าวคือ

$$L(x, \dot{x}, t) = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 \quad (3.94)$$

อาศัยสมการ (3.77) ตัวแพร่กระจายสามารถเขียนได้ดังนี้

$$K(b,a) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int \dots \int \exp\left(\frac{im}{2\hbar\epsilon} \sum_{i=1}^n (x_i - x_{i-1})^2\right) dx_1 dx_2 \dots dx_{n-1} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon}\right)^{\frac{n}{2}} \quad (3.95)$$

เมื่อพิจารณาสมการ (3.95) จะเห็นว่าประกอบไปด้วยอินทิกรัลแบบเกาส์เซียน (Gaussian integral) เป็นจำนวนมาก การอินทิเกรตเหล่านี้เป็นอินทิกรัลในรูปแบบ

$$\int \exp(-ax^2) dx \quad \text{หรือ} \quad \int \exp(-ax^2 + bx) dx$$

เนื่องจากการอินทิเกรตทอมที่เป็นเกาส์เซียน ผลลัพธ์ที่ได้กลับมามีอยู่ในรูปเกาส์เซียนอีก ดังนั้นเราสามารถอินทิเกรตตัวแปรในสมการ (3.95) ทีละตัว พิจารณาการอินทิเกรตตัวแรกที่มีตัวแปรเป็น x_1 ดังนั้นนิพจน์ที่ควรพิจารณาคือ

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right) \exp\left(-\frac{m}{2i\hbar \epsilon} [(x_2 - x_1)^2 + (x_1 - x_0)^2] \right) dx_1 \\ &= \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \cdot 2\epsilon} \right)^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{m}{2i\hbar \epsilon} (x_2 - x_0)^2 \right) \end{aligned} \quad (3.96)$$

อันดับต่อไปเราดูสมการ (3.96) ด้วยทอม

$$\left(\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{m}{2i\hbar \epsilon} (x_3 - x_2)^2 \right) \quad (3.97)$$

แล้วทำการอินทิเกรตโดยให้ x_2 เป็นตัวแปร ผลที่ได้จะคล้ายกับสมการ (3.96) ยกเว้นตำแหน่ง $(x_2 - x_0)^2$ ต้องเปลี่ยนเป็น $(x_3 - x_0)^2$ นอกจากนี้ทอม 2ϵ จะถูกแทนด้วย 3ϵ ในสองตำแหน่ง ผลที่ได้คือ

$$\left(\frac{m}{2\pi i \hbar \cdot 3\epsilon} \right)^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{m}{2i\hbar \cdot 3\epsilon} (x_3 - x_0)^2 \right) \quad (3.98)$$

โดยวิธีการดังกล่าว หลังจากที่ได้ปฏิบัติเป็นจำนวน $n-1$ ครั้ง เราได้

$$\left(\frac{m}{2\pi i \hbar \cdot n\epsilon} \right)^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{m}{2i\hbar \cdot n\epsilon} (x_n - x_0)^2 \right) \quad (3.99)$$

เนื่องจาก $n\epsilon = t_n - t_0 = t_b - t_a$ ดังนั้น ในที่สุดเราได้ตัวแผ่กระจายของอนุภาคอิสระ

$$K(b, a) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar (t_b - t_a)} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left(-\frac{m}{2i \hbar (t_b - t_a)} (x_b - x_a)^2 \right) \quad (3.110)$$

ในอันดับต่อไปเราจะแสดงให้เห็นว่า ตัวแพร่กระจายได้ให้รายละเอียดหลายอย่าง เพื่อความสะดวกเราจะเลือกจุดเริ่มต้น a อยู่ที่ศูนย์ และเวลาเป็นศูนย์ด้วย ส่วนที่จุดปลาย b นั้นเราจะแทนด้วย x, t ดังนั้นตัวแพร่กระจายในสมการ (3.110) จึงเขียนใหม่ได้เป็น

$$K(x, t; 0, 0) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left(-\frac{m}{2i \hbar t} x^2 \right) \quad (3.111)$$

จากสมการ (3.111) ถ้าเราบังคับให้ t มีค่าคงที่ แอมพลิจูดของคลื่นจะเปลี่ยนแปลงไปตามระยะทาง x ซึ่งเราจะเห็นได้ว่า อนุภาคยิ่งเคลื่อนที่ไกลจากจุดเริ่มต้นมากเท่าใด การแกว่งของแอมพลิจูดจะเพิ่มมากขึ้น การแกว่งของแอมพลิจูดมีค่ามากจนระยะระหว่างบัพหรือลูกคลื่นเกือบจะเท่ากัน แสดงว่าคลื่นนี้มีลักษณะคล้ายคลื่นไซน์มากขึ้น ในกรณีเช่นนี้ความยาวคลื่นจะเปลี่ยนแปลงอย่างช้าๆ เมื่อ x มีค่ามาก เราอาจทำการคำนวณการเปลี่ยนแปลงของความยาวคลื่นได้ดังนี้

เราทราบแล้วว่าเมื่อ x เพิ่มขึ้นหนึ่ง λ เฟสของคลื่นจะเปลี่ยนไปเป็นจำนวน 2π เขียนเป็นสมการได้ดังนี้

$$2\pi = \frac{m(x+\lambda)^2}{2\hbar t} - \frac{mx^2}{2\hbar t} = \frac{m\lambda^2}{\hbar t} + \frac{m\lambda^2}{2\hbar t} \quad (3.112)$$

เนื่องจาก x มีค่ามากหรือ $x \gg \lambda$ ดังนั้นเทอมที่สองทางด้านขวามือของสมการ (3.112) จึงอาจตัดทิ้งได้ ในที่สุดเราจะได้

$$\lambda \approx \frac{2\pi \hbar}{m \left(\frac{x}{t} \right)} \quad (3.113)$$

ในกลศาสตร์แบบฉบับอนุภาคที่เคลื่อนที่เป็นระยะทาง x จากจุดเริ่มต้นในเวลา t จะมีความเร็วเท่ากับ $\frac{x}{t}$ และถ้าอนุภาคมีมวลเป็น m อนุภาคนี้ก็จะมีความโมเมนตัมเท่ากับ $m \frac{x}{t}$ เมื่อพิจารณาสมการ (3.113) โดยให้ $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ และแทนค่า $m \frac{x}{t}$ ด้วย p เราก็จะได้

$$\lambda \approx \frac{h}{p} \quad (3.114)$$

จะเห็นได้ว่าสมการ (3.114) นี้ก็คือสูตรของเดอบรอยล์นั่นเอง แสดงว่าตัวแพร่กระจายมีคุณสมบัติของคลื่นบรรจุอยู่ในตัวแล้ว

นอกจากจะศึกษาการเปลี่ยนแปลงของอำนาจกับระยะทางแล้ว เรายังอาจจะศึกษาการเปลี่ยนแปลงของอำนาจกับเวลา โดยบังคับให้ x มีค่าคงที่ แล้วปล่อยให้ตัวแผ่กระจายในสมการ (3.111) เปลี่ยนแปลงไปตามเวลา เมื่อสมมติว่า t มีค่ามาก และอำนาจของคลื่นที่ค่าคงที่หรือไม่ เปลี่ยนแปลงไปตามเวลา ถ้าเราให้ T คือคาบของการแกว่ง เมื่อ t เพิ่มขึ้นเป็นจำนวน T เฟสของตัวแผ่กระจายจะเปลี่ยนแปลงไปเท่ากับ 2π หรือเขียนเป็นสมการได้ดังนี้

$$2\pi = \frac{mx^2}{2\hbar t} - \frac{mx^2}{2\hbar(t+T)} = \frac{mx^2}{2\hbar t^2} \left(\frac{T}{1 + \frac{T}{t}} \right) \quad (3.115)$$

เมื่อ $t \gg T$ สมการ (3.115) จะกลายเป็น

$$2\pi \approx \frac{mx^2}{2\hbar t^2} T \quad (3.116)$$

จากคำจำกัดความ $\omega = \frac{2\pi}{T}$ เราก็จะได้ว่า

$$\omega \approx \frac{m}{2\hbar} \left(\frac{x}{t} \right)^2 \quad (3.117)$$

และจากกลศาสตร์แบบฉบับเราทราบว่า $\frac{1}{2} m \left(\frac{x}{t} \right)^2 = E$ คือพลังงานจลน์ ดังนั้นสมการ (3.117) จึงกลายเป็น

$$E \approx \hbar\omega \approx \hbar\nu \quad (3.118)$$

โดยที่ $\omega = 2\pi\nu$ จะเห็นได้ว่าสมการ (3.118) นี้ก็คือสูตรพลังงานของแพลงก์นั่นเอง

3.2.2 การประยุกต์ใช้วิธีจุดภาพระจกเงาร่วมกับทฤษฎีอินทิกรัลตามเส้นทางในการแก้ปัญหาค่าแวงศักย์อนันต์ (infinite potential barrier)

กำแพงศักย์อนันต์เป็นปัญหาของสถานะที่มีขอบเขตไม่จำกัด (unbounded-state problem) ที่ง่ายที่สุดปัญหาหนึ่งในกลศาสตร์ควอนตัม โดยทั่วไปแล้วมักปรากฏเป็นปัญหาตัวอย่างแรกๆ ตัวอย่างหนึ่งในตำรากลศาสตร์ควอนตัมเบื้องต้นทั่วไป เป็นปัญหาของอนุภาคตัวหนึ่งที่เคลื่อนที่ภายใต้อิทธิพลของศักย์

$$V(x) = \begin{cases} 0 & , x > 0 \\ \infty & , x \leq 0 \end{cases} \quad (3.119)$$

สถานะไอเกน โมเมนตัมต่อกรณีดังกล่าวมิได้เป็นไปตามแบบอย่างของอนุภาคอิสระ ทว่ากลับมีรูปแบบเป็น

$$\psi_p(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\pi\hbar}} \sin\left(\frac{px}{\hbar}\right) & , x > 0 \\ 0 & , x \leq 0 \end{cases} \quad (3.120)$$

สำหรับอนุภาคอิสระที่เคลื่อนที่นอกกำแพงศักย์สูงอนันต์ ($x > 0$) แอคชันแบบฉบับมีรูปแบบเป็น

$$S_d = \int_{t_a}^{t_b} L(x, \dot{x}, t) dt$$

เมื่อ
$$L = \frac{1}{2} m \dot{x}^2$$

โดยที่แอคชันแบบฉบับดังกล่าวสอดคล้องกับเงื่อนไข

$$\delta S_d = \delta \int_{t_a}^{t_b} L(x, \dot{x}, t) dt = 0$$

แสดงว่า $\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) - \frac{\partial L}{\partial x} = 0$ และหาผลเฉลยของสมการดังนี้

จาก
$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) - \frac{\partial L}{\partial x} = 0 \quad (3.121)$$

และ
$$\frac{\partial L}{\partial x} = 0$$

เมื่อแทนความสัมพันธ์ข้างต้นลงในสมการ (3.121) จะได้

$$m\ddot{x} = 0$$

$$\ddot{x} = 0$$

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{dx}{dt} \right) = 0$$

$$\left(\frac{dx}{dt}\right) = c_1$$

$$x = c_1 t + c_2 \quad (3.122)$$

หาค่าคงที่ c_1, c_2 ได้จากเงื่อนไขเริ่มต้น โดยพิจารณาภาพที่ 3.7 ประกอบ ดังนี้

$$x(t_b) = x_b; \quad x_b = c_1 t_b + c_2 \quad (3.123)$$

และ

$$x(t_a) = x_a; \quad x_a = c_1 t_a + c_2 \quad (3.124)$$

จากสมการ (3.123) และสมการ (3.124) จะได้ค่าคงที่ c_1 และ c_2 ดังนี้

$$c_1 = \frac{x_b - x_a}{t_b - t_a} \quad (3.125)$$

และ

$$c_2 = x_b - \left(\frac{x_b - x_a}{t_b - t_a}\right) t_b \quad (3.126)$$

เมื่อแทนสมการ (3.125) และสมการ (3.126) ลงในสมการ (3.122) จะได้

$$x = \left(\frac{x_b - x_a}{t_b - t_a}\right) t + x_b - \left(\frac{x_b - x_a}{t_b - t_a}\right) t_b \quad (3.127)$$

โดยที่ x ในสมการ (3.127) คือเส้นทางแบบฉบับ $\bar{x}(t)$ หรือ $x_{cl}(t)$

$$\bar{x}(t) = x_{cl}(t) = \left(\frac{x_b - x_a}{t_b - t_a}\right) t + x_b - \left(\frac{x_b - x_a}{t_b - t_a}\right) t_b \quad (3.128)$$

และ

$$\dot{\bar{x}}(t) = \dot{x}_{cl}(t) = \left(\frac{x_b - x_a}{t_b - t_a}\right) \quad (3.129)$$

จาก $S_{cl} = \int_{t_a}^{t_b} L(x, \dot{x}, t) dt$ สำหรับอนุภาคอิสระซึ่งมีลากรางเจียนเป็น $L = \frac{1}{2} m \dot{x}^2$ ดังนั้น

$$S_{cl} = \int_{t_a}^{t_b} \frac{1}{2} m (\dot{x})^2 dt \quad (3.130)$$

เมื่อแทนสมการ (3.129) ลงในสมการ (3.130) จะได้

$$S_{cl} = \int_{t_a}^{t_b} \frac{1}{2} m \left(\frac{x_b - x_a}{t_b - t_a} \right)^2 dt$$

$$S_{cl} = \frac{1}{2} m \frac{(x_b - x_a)^2}{t_b - t_a} \quad (3.131)$$

จากสมการ (3.82) นั่นคือ

$$K(b, a) = F(t_b, t_a) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S_{cl}(x_b, x_a) \right\} \quad (3.132)$$

โดยที่

$$F(t_b, t_a) = \left(\frac{i}{2\pi\hbar} \frac{\partial^2}{\partial x_a \partial x_b} S_{cl}(x_b, x_a) \right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.133)$$

เมื่อแทนสมการ (3.131) ลงในสมการ (3.133) จะได้

$$F(t_b, t_a) = \left(\frac{i}{2\pi\hbar} \left(\frac{-m}{t_b - t_a} \right) \right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.134)$$

$$F(t_b, t_a) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar (t_b - t_a)} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.135)$$

เมื่อแทนสมการ (3.131) และสมการ (3.135) ลงในสมการ (3.132) จะได้

$$K(b, a) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar (t_b - t_a)} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar} \frac{(x_b - x_a)^2}{(t_b - t_a)} \right\} \quad (3.136)$$

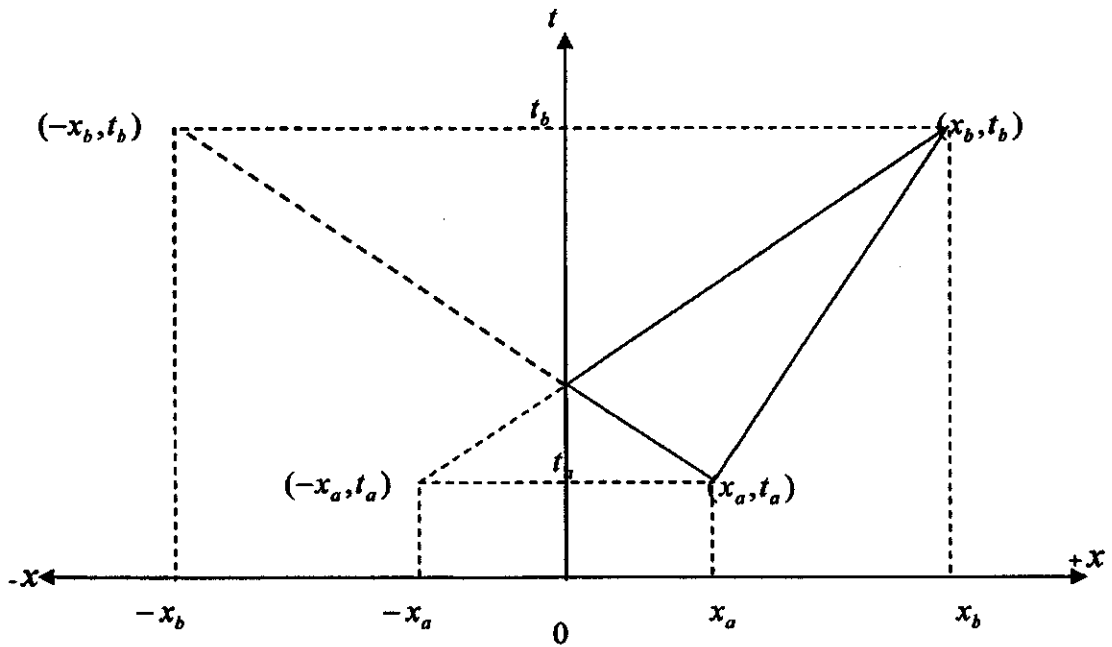
ตัวแพร่กระจายที่ได้จากสมการ (3.136) เป็นตัวแพร่กระจายของอนุภาคอิสระที่เคลื่อนที่จากตำแหน่ง (x_a, t_a) ไปยัง (x_b, t_b) โดยตรง ซึ่งอิทธิพลของกำแพงศักย์สูงอนันต์มิได้มีผลต่อ

อนุภาคแต่ประการใด ตัวแผ่กระจายดังกล่าวจึงไม่อาจใช้เป็นตัวแผ่กระจายของอนุภาคภายใต้ อิทธิพลของกำแพงศักย์สูงอนันต์ได้

ในปี ค.ศ.1981 Goodman [5] ได้เสนอแนวทางแก้ปัญหาดังกล่าว โดย Goodman เสนอว่า เส้นทางแบบฉบับของอนุภาคในการเคลื่อนที่จาก (x_a, t_a) ไปยัง (x_b, t_b) มีได้สองเส้นทาง เส้นทางแรกคือเส้นทางจาก (x_a, t_a) ไปยัง (x_b, t_b) โดยตรง ส่งผลให้ได้ตัวแผ่กระจายของอนุภาค อิตรระดังสมการ (3.18) ส่วนเส้นทางที่สองนั้นอนุภาคเคลื่อนที่จาก (x_a, t_a) ไปยังผนังกำแพงศักย์ ก่อน แล้วจึงสะท้อนกลับไปยัง (x_b, t_b) ดังแสดงในภาพที่ 3.7 อย่างไรก็ตามเส้นทางที่สองที่ผ่านการสะท้อนผนังกำแพงศักย์นั้นอาจอาศัยวิธีจุดภาพกระจกเงาหาเส้นทางสมมูลได้ กล่าวคือ โดยอาศัยผนังกำแพงศักย์เป็นกระจกเงาสะท้อนจุด (x_a, t_a) และ (x_b, t_b) ซึ่งเงาจุดดังกล่าวคือ $(-x_a, t_a)$ และ $(-x_b, t_b)$ ตามลำดับ จะได้ว่าเส้นทางแบบฉบับที่สะท้อนผ่านผนังจะสมมูลกับ เส้นทางแบบฉบับจาก $(-x_a, t_a)$ ไปยัง (x_b, t_b) และ (x_a, t_a) ไปยัง $(-x_b, t_b)$ ส่งผลให้ตัวแผ่กระจายที่ผ่านการสะท้อนกลับกลายเป็น

$$K(x_b, -x_a) = K(-x_b, x_a)$$

$$\begin{aligned} &= \left(\frac{m}{2\pi i \hbar (t_b - t_a)} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar} \frac{(x_b - (-x_a))^2}{(t_b - t_a)} \right\} \\ &= \left(\frac{m}{2\pi i \hbar (t_b - t_a)} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar} \frac{(-x_b - x_a)^2}{(t_b - t_a)} \right\} \end{aligned} \quad (3.137)$$



ภาพที่ 3.7 แสดงเส้นทางแบบฉบับสองเส้นทางที่เชื่อมต่อจุด (x_a, t_a) และ (x_b, t_b) พร้อมด้วยจุดภาพในกระจกเงาที่คล้องจองกัน

โดยอาศัยวิธีจุดภาพกระจกเงาของGoodman ตัวแปรกระจายของอนุภาคอิสระกรณีเคลื่อนที่ภายใต้อิทธิพลของกำแพงศักย์สูงอนันต์จากจุด a ไปยังจุด b เขียนเป็นสมการได้ ดังนี้

$$K(b, a) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar (t_b - t_a)} \right)^{\frac{1}{2}} \left\{ \exp \left(\frac{im}{2\hbar (t_b - t_a)} (x_b - x_a)^2 \right) - \exp \left(\frac{im}{2\hbar (t_b - t_a)} (-x_b - x_a)^2 \right) \right\} \quad (3.138)$$

$$K(b, a) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar (t_b - t_a)} \right)^{\frac{1}{2}} \left\{ \exp \left(\frac{i^2}{2i \frac{\hbar}{m} (t_b - t_a)} (x_b - x_a)^2 \right) - \exp \left(\frac{i^2}{2i \frac{\hbar}{m} (t_b - t_a)} (-x_b - x_a)^2 \right) \right\} \quad (3.139)$$

$$K(b,a) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar (t_b - t_a)} \right)^{\frac{1}{2}} \left\{ \exp \left[\frac{(-1)}{2i \frac{\hbar}{m} (t_b - t_a)} (x_b - x_a)^2 \right] - \exp \left[\frac{(-1)}{2i \frac{\hbar}{m} (t_b - t_a)} (-(x_b + x_a))^2 \right] \right\} \quad (3.140)$$

$$K(b,a) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar (t_b - t_a)} \right)^{\frac{1}{2}} \left\{ \exp \left[\frac{(x_b - x_a)^2}{4 \left(\frac{-i \hbar (t_b - t_a)}{2m} \right)} \right] - \exp \left[\frac{(-(x_b + x_a))^2}{4 \left(\frac{-i \hbar (t_b - t_a)}{2m} \right)} \right] \right\} \quad (3.141)$$

สมการ (3.141) คือ ตัวแปรกระจายของอนุภาคอิสระกรณีเคลื่อนที่ภายใต้อิทธิพลของกำแพงศักย์สูงอนันต์จากจุด a ไปยังจุด b ดังเส้นทางที่แสดงในภาพที่ 3.7 สาเหตุที่เทอมที่สองของฟังก์ชันเลขชี้กำลัง (exponential) มีค่าเป็นลบนั้น เนื่องจากเป็นตัวแปรกระจายของอนุภาคที่สะท้อนผ่านผนังกำแพงศักย์ เฟสย่อมเปลี่ยนไป π

3.2.2.1 สถานะเจาะจงโมเมนตัมและระดับพลังงานที่เป็นไปได้

การพิจารณาสถานะเจาะจง โมเมนตัมและระดับพลังงานของอนุภาคภายใต้กำแพงศักย์อนันต์ ต้องอาศัยตัวแปรกระจายที่ได้จากสมการ (3.23) โดยใช้สูตร

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{ax^2+bx} dx = \sqrt{\frac{\pi}{-a}} e^{-\frac{b^2}{4a}} \quad \text{หรือ} \quad e^{-\frac{b^2}{4a}} = \sqrt{\frac{-a}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ax^2+bx} dx$$

และ

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{ax^2 \pm ibx} dx = \sqrt{\frac{\pi}{-a}} e^{\frac{b^2}{4a}} \quad \text{หรือ} \quad e^{\frac{b^2}{4a}} = \sqrt{\frac{-a}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ax^2 \pm ibx} dx$$

โดยการเปลี่ยนตัวแปร x เป็น $\frac{p}{\hbar}$ นั่นคือ

$$e^{\frac{b^2}{4a}} = \sqrt{\frac{-a}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{a\left(\frac{p}{\hbar}\right)^2 + bi\left(\frac{p}{\hbar}\right)} d\left(\frac{p}{\hbar}\right) \quad (3.142)$$

เมื่อพิจารณาแต่ละเทอมที่เป็นฟังก์ชันกำลังในสมการ (3.141) และใช้สมการ (3.142) สามารถแปลงตัวประกอบเลขชี้กำลังในสมการดังกล่าวได้ดังนี้

$$\begin{aligned} \exp\left(\frac{(x_b - x_a)^2}{4\left(\frac{-i\hbar(t_b - t_a)}{2m}\right)}\right) &= \left(\frac{-(-i\hbar(t_b - t_a))}{2m\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left\{\left(\frac{-i\hbar(t_b - t_a)}{2m}\right)\left(\frac{p}{\hbar}\right)^2\right. \\ &\quad \left.+ (i(x_b - x_a))\left(\frac{p}{\hbar}\right)\right\} d\left(\frac{p}{\hbar}\right) \end{aligned} \quad (3.143)$$

$$= \left(\frac{i\hbar(t_b - t_a)}{2m\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left\{\left(\frac{-i\hbar(t_b - t_a)}{2m}\right)\left(\frac{p}{\hbar}\right)^2 + (i(x_b - x_a))\left(\frac{p}{\hbar}\right)\right\} d\left(\frac{p}{\hbar}\right) \quad (3.144)$$

$$= \left(\frac{i\hbar(t_b - t_a)}{2m\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left\{\left(\frac{-i(t_b - t_a)}{\hbar}\right)\left(\frac{p^2}{2m}\right) + (i(x_b - x_a))\left(\frac{p}{\hbar}\right)\right\} d\left(\frac{p}{\hbar}\right) \quad (3.145)$$

$$\begin{aligned} \exp\left(\frac{-(x_b + x_a)^2}{4\left(\frac{-i\hbar(t_b - t_a)}{2m}\right)}\right) &= \left(\frac{-(-i\hbar(t_b - t_a))}{2m\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left\{\left(\frac{-i\hbar(t_b - t_a)}{2m}\right)\left(\frac{p}{\hbar}\right)^2\right. \\ &\quad \left.+ (-i(x_b + x_a))\left(\frac{p}{\hbar}\right)\right\} d\left(\frac{p}{\hbar}\right) \end{aligned} \quad (3.146)$$

$$= \left(\frac{i\hbar(t_b - t_a)}{2m\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left\{\left(\frac{-i\hbar(t_b - t_a)}{2m}\right)\left(\frac{p}{\hbar}\right)^2 + (-i(x_b + x_a))\left(\frac{p}{\hbar}\right)\right\} d\left(\frac{p}{\hbar}\right) \quad (3.147)$$

$$= \left(\frac{i\hbar(t_b - t_a)}{2m\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left\{\left(\frac{-i(t_b - t_a)}{\hbar}\right)\left(\frac{p^2}{2m}\right) + (-i(x_b + x_a))\left(\frac{p}{\hbar}\right)\right\} d\left(\frac{p}{\hbar}\right) \quad (3.148)$$

เมื่อแทนสมการ (3.145) และสมการ (3.148) ลงในสมการ (3.141) จะได้

$$\begin{aligned}
 K(b, a) &= \left(\frac{m}{2\pi\hbar(t_b - t_a)} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{i\hbar(t_b - t_a)}{2m\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{1}{\hbar} \right) \\
 &\quad \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \exp \left(-\frac{i p^2}{\hbar 2m} (t_b - t_a) + i(x_b - x_a) \left(\frac{p}{\hbar} \right) \right) \right\} - \\
 &\quad \left\{ \exp \left(-\frac{i p^2}{\hbar 2m} (t_b - t_a) - i(x_b + x_a) \left(\frac{p}{\hbar} \right) \right) \right\} dp
 \end{aligned} \tag{3.149}$$

$$\begin{aligned}
 K(b, a) &= \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \right) \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \exp \left(-\frac{i p^2}{\hbar 2m} (t_b - t_a) + i(x_b - x_a) \left(\frac{p}{\hbar} \right) \right) \right\} - \\
 &\quad \left\{ \exp \left(-\frac{i p^2}{\hbar 2m} (t_b - t_a) - i(x_b + x_a) \left(\frac{p}{\hbar} \right) \right) \right\} dp
 \end{aligned} \tag{3.150}$$

$$\begin{aligned}
 K(b, a) &= \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \right) \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left(-\frac{i p^2}{\hbar 2m} (t_b - t_a) \right) \right. \\
 &\quad \left. \left[\exp \left(i(x_b - x_a) \left(\frac{p}{\hbar} \right) \right) \right] - \left[\exp \left(-i(x_b + x_a) \left(\frac{p}{\hbar} \right) \right) \right] \right\} dp
 \end{aligned} \tag{3.151}$$

$$\begin{aligned}
 K(b, a) &= \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \right) \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left(-\frac{i p^2}{\hbar 2m} (t_b - t_a) \right) \left[\exp \left(-i \frac{p}{\hbar} x_a \right) \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. \exp \left(i \frac{p}{\hbar} x_b \right) - \exp \left(-i \frac{p}{\hbar} x_b \right) \right] \right\} dp
 \end{aligned} \tag{3.152}$$

$$K(b, a) = \left(\frac{2i}{2\pi\hbar} \right) \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left(-\frac{i p^2}{\hbar 2m} (t_b - t_a) \right) \left[\exp \left(-i \frac{p}{\hbar} x_a \right) \right] \right.$$

$$\left\{ \frac{\exp\left(i\frac{p}{\hbar}x_b\right) - \exp\left(-i\frac{p}{\hbar}x_b\right)}{2i} \right\} dp \quad (3.153)$$

$$K(b,a) = \left(\frac{i}{\pi\hbar}\right) \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m}(t_b - t_a)\right) \left[\exp\left(-i\frac{p}{\hbar}x_a\right) \left[\sin\left(\frac{p}{\hbar}x_b\right) \right] \right] dp \right. \quad (3.154)$$

$$K(b,a) = \left(\frac{i}{\pi\hbar}\right) \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m}(t_b - t_a)\right) \left[\cos\left(\frac{p}{\hbar}x_a\right) - i\sin\left(\frac{p}{\hbar}x_a\right) \left[\sin\left(\frac{p}{\hbar}x_b\right) \right] \right] dp \right. \quad (3.155)$$

$$K(b,a) = \left(\frac{i}{\pi\hbar}\right) \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m}(t_b - t_a)\right) \left[\cos\left(\frac{p}{\hbar}x_a\right) \left[\sin\left(\frac{p}{\hbar}x_b\right) \right] \right] dp + \right. \\ \left. \left(\frac{-i^2}{\pi\hbar}\right) \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m}(t_b - t_a)\right) \left[\sin\left(\frac{p}{\hbar}x_a\right) \left[\sin\left(\frac{p}{\hbar}x_b\right) \right] \right] dp \right. \right. \quad (3.156)$$

$$K(b,a) = \left(\frac{i}{\pi\hbar}\right) \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m}(t_b - t_a)\right) \left[\cos\left(\frac{p}{\hbar}x_a\right) \left[\sin\left(\frac{p}{\hbar}x_b\right) \right] \right] dp + \right. \\ \left. \left(\frac{1}{\pi\hbar}\right) \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m}(t_b - t_a)\right) \left[\sin\left(\frac{p}{\hbar}x_a\right) \left[\sin\left(\frac{p}{\hbar}x_b\right) \right] \right] dp \right. \right. \quad (3.157)$$

เมื่อพิจารณาอินทิกรัลเทอมแรกในสมการ (3.157) ซึ่งเป็นการอินทิเกรตฟังก์ชันที่รอบ
แกนสมมาตรใดๆ ดังนั้น

$$+\left(\frac{i}{\pi\hbar}\right) \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m}(t_b - t_a)\right) \left[\cos\left(\frac{p}{\hbar}x_a\right) \left[\sin\left(\frac{p}{\hbar}x_b\right) \right] \right] dp = 0 \quad (3.158)$$

เมื่อแทนสมการ (3.158) ในสมการ (3.157) จะได้ตัวแพร่กระจายของอนุภาคอิสระกรณีเคลื่อนที่ภายใต้อิทธิพลของกำแพงศักย์สูงอนันต์จากจุด a ไปยังจุด b คือ

$$K(b, a) = \left(\frac{1}{\pi\hbar} \right) \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{i p^2}{\hbar 2m} (t_b - t_a) \right) \left[\sin\left(\frac{p}{\hbar} x_a \right) \right] \left[\sin\left(\frac{p}{\hbar} x_b \right) \right] \right\} dp \quad (3.159)$$

จากสมการ (3.159) จะได้สถานะเจาะจงโมเมนตัมดังนี้

$$\psi_p(x_a) = \frac{1}{\sqrt{\pi\hbar}} \sin\left(\frac{px_a}{\hbar} \right) \quad (3.160)$$

$$\psi_p^*(x_b) = \psi_p(x_b) = \frac{1}{\sqrt{\pi\hbar}} \sin\left(\frac{px_b}{\hbar} \right) \quad (3.161)$$

พร้อมด้วยระดับพลังงานที่ต่อเนื่องที่เป็นไปได้คือ $E(p) = \frac{p^2}{2m}$ ผลลัพธ์ที่ได้ดังกล่าวสอดคล้องกันเป็นอย่างดีกับค่าที่ได้โดยการแก้สมการชเรอดิงเงอร์

3.2.4 ฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์หนึ่งมิติ

ฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์หนึ่งมิติหรือตัวแกว่งกวัดฮาร์มอนิกหนึ่งมิติมีลากรางเขียนในรูปแบบดังนี้

$$L(x, \dot{x}, t) = \frac{m}{2} (\dot{x}^2 - \omega^2 x^2) \quad (3.162)$$

ดังนั้นตัวแพร่กระจายสามารถเขียนได้เป็น

$$K(b, a) = \int_a^b \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_a^b \left(\frac{m}{2} \dot{x}^2 - \frac{m}{2} \omega^2 x^2 \right) dt \right) D[x(t)] \quad (3.163)$$

เราอาจพิจารณาการอินทิเกรตข้างต้นโดยตรงเช่นเดียวกับกรณีของอนุภาคอิสระในทางทฤษฎีแล้ว เราอาจคำนวณค่าอินทิกรัลเหล่านี้ได้ เนื่องจากรูปแบบของการอินทิเกรตยังคงเป็นแบบเกาส์เซียน แต่ในทางปฏิบัติแล้ว การคำนวณดังกล่าวค่อนข้างยุ่งยาก จึงขอเสนอวิธีใหม่ดังได้แสดงไว้ในหัวข้อ 3.2 กล่าวคือแยกทางเดินแบบฉบับออกจากทางเดินที่เป็นไปได้ทั้งหมด วิธีการนี้จะ เป็นประโยชน์ไม่เฉพาะแต่ปัญหาของฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์เท่านั้น แต่จะมีประโยชน์ต่อปัญหาอื่นๆ ที่มีลากรางเขียนยุ่งยากกว่านี้

จากวิชากลศาสตร์แบบฉบับ ทางเดินของอนุภาคจะต้องสอดคล้องสมการลากรางหรือ สอดคล้องหลักแห่งการกระทำที่น้อยที่สุด (the principle of least action) กล่าวในเชิงคณิตศาสตร์ เราได้

$$\delta S = \delta \int L(x, \dot{x}, t) dt = 0 \quad (3.164)$$

ขั้นตอนในการคำนวณหาเส้นทางแบบฉบับ \bar{x} อาจกระทำได้ดังนี้ สมมติว่าเราทำให้ทางเดินเปลี่ยนไปจากทางเดินแบบฉบับเป็นจำนวน δx เนื่องจาก $\delta x(t_a) = \delta x(t_b) = 0$ ดังนั้น

$$\delta S = S(\bar{x} + \delta x) - S(\bar{x}) = 0 \quad (3.165)$$

และกระจาย δx ออกเป็นอนุกรมกำลัง โดยคิดเฉพาะกำลังที่หนึ่งของ δx เราสามารถเขียนได้ดังนี้

$$\begin{aligned} S(\bar{x} + \delta x) &= \int_{t_a}^{t_b} L(\dot{\bar{x}} + \delta \dot{x}, \bar{x} + \delta x, t) dt \\ &= \int_{t_a}^{t_b} \left(L(\dot{\bar{x}}, \bar{x}, t) + \delta \dot{x} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} + \delta x \frac{\partial L}{\partial x} \right) dt \\ &= S(\bar{x}) + \int_{t_a}^{t_b} \left(\delta \dot{x} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} + \delta x \frac{\partial L}{\partial x} \right) dt \end{aligned} \quad (3.166)$$

โดยการอินทิเกรตบางส่วนเราได้

$$\delta S = \delta x \frac{\partial L}{\partial x} \Big|_{t_a}^{t_b} - \int_{t_a}^{t_b} \delta x \left(\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) - \frac{\partial L}{\partial x} \right) dt \quad (3.167)$$

เนื่องจาก δx ที่จุดปลายทั้งสองมีค่าเป็นศูนย์ เทอมแรกทางขวาของสมการ (3.167) จึงมีค่าเป็นศูนย์ระหว่างจุดปลายทั้งสอง δx มีค่าเท่าใดก็ได้ เสร็จแล้ว $\delta S = 0$ จึงสอดคล้องกับ

$$\left(\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) - \frac{\partial L}{\partial x} \right) = 0 \quad (3.168)$$

เราเรียกสมการ (3.168) ว่าสมการลากราง (Lagrange equation)

สำหรับกรณีของฮาร์โมนิกออสซิลเลเตอร์ สมการ (3.168) กลับกลายเป็น

$$\ddot{\bar{x}} + \omega^2 \bar{x} = 0 \quad (3.169)$$

ผลเฉลยหรือคำตอบทั่วไปของสมการ (3.169) คือ

$$\bar{x} = A \cos \omega t + B \sin \omega t \quad (3.170)$$

เมื่อ A และ B เป็นค่าคงที่ไม่ใช่จะจง อาศัยเงื่อนไข $\bar{x}(t_a) = x_a$ และ $\bar{x}(t_b) = x_b$ คำตอบของสมการ (3.170) จึงกลายเป็น

$$\bar{x}(t) = \frac{1}{\sin \omega(t_b - t_a)} [x_b \sin \omega(t - t_a) + x_a \sin \omega(t_b - t)] \quad (3.171)$$

สมการ (3.171) นี้สามารถนำไปคำนวณหาแอมพลิจูดแบบฉบับ S_{cl} ได้กล่าวคือ

$$S_{cl} = \int_{t_a}^{t_b} \left(\frac{m}{2} \dot{\bar{x}}^2 - \frac{m}{2} \omega^2 \bar{x}^2 \right) dt \quad (3.172)$$

เราอาจคำนวณหา S_{cl} โดยการแทนค่า $\dot{\bar{x}}^2$ และ \bar{x}^2 ที่ได้จากสมการ (3.171) ลงในสมการ (3.172) แล้วทำการอินทิเกรต อย่างไรก็ตามการคำนวณจะสะดวกกว่าหากเราอินทิเกรตสมการ (3.172) บางส่วนเสียก่อน โดยที่

$$S_{cl} = \frac{m}{2} (\dot{\bar{x}}\bar{x}) \Big|_{t_a}^{t_b} - \int_{t_a}^{t_b} \left(\frac{m}{2} \dot{\bar{x}}^2 - \frac{m}{2} \omega^2 \bar{x}^2 \right) dt \quad (3.173)$$

เราจะเห็นว่าเทอมที่ 2 ทางด้านขวามือของสมการ (3.173) มีค่าเป็นศูนย์ เนื่องจาก $\dot{\bar{x}}$ สอดคล้องสมการ (3.171) ในที่สุดเราได้

$$S_{cl} = \frac{m}{2} (\dot{\bar{x}}(t_b)\bar{x}(t_a) - \dot{\bar{x}}(t_a)\bar{x}(t_b)) \quad (3.174)$$

หาค่าอนุพันธ์ของ $\bar{x}(t)$ เทียบกับเวลา t แล้วแทนค่า t เท่ากับ t_a และ t_b เราจะได้

$$\dot{\bar{x}}(t_a) = \frac{\omega}{\sin \omega(t_b - t_a)} (x_b - x_a \cos \omega(t_b - t_a)) \quad (3.175)$$

$$\dot{\bar{x}}(t_b) = \frac{\omega}{\sin \omega(t_b - t_a)} (x_b \cos \omega(t_b - t_a) - x_a) \quad (3.176)$$

แทนค่า $\dot{x}(t_a), \dot{x}(t_b), \bar{x}(t_a)$ และ $\bar{x}(t_b)$ ลงในสมการ (3.174) เราได้

$$S_{cl} = \frac{m\omega}{2 \sin \omega(t_b - t_a)} \left((x_a^2 + x_b^2) \cos \omega(t_b - t_a) - 2x_a x_b \right) \quad (3.177)$$

เมื่อได้ S_{cl} แล้ว เราก็สามารถคำนวณหา prefactor โดยใช้สูตรของ Van Vleck และ Pauli ได้ โดยอาศัยสมการ (3.83) จะได้

$$\begin{aligned} F(t_a, t_b) &= \left[\det \left(\frac{i}{2\pi\hbar} \frac{\partial^2}{\partial x_a \partial x_b} S_{cl}(x_b, x_a) \right) \right]^{\frac{1}{2}} \\ &= \left(\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega(t_b - t_a)} \right)^{\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (3.178)$$

จากสมการ (3.177), (3.178) และอาศัยสมการ (3.82) ในที่สุดจะได้ตัวแผ่กระจายของฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์เชิงเส้นดังนี้

$$K(b, a) = \left(\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega T} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left(\frac{i m \omega}{2 \hbar \sin \omega T} \left((x_a^2 + x_b^2) \cos \omega T - 2x_a x_b \right) \right) \quad (3.179)$$

โดยที่ $T = t_b - t_a$

3.2.4.1 ฟังก์ชันคลื่นและพลังงานของฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์หนึ่งมิติ

ในหัวข้อนี้จะแสดงให้เห็นว่าตัวแผ่กระจายของฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์ ได้ให้รายละเอียดเกี่ยวกับฟังก์ชันคลื่นและพลังงานของระบบไว้ครบถ้วน โดยที่ตัวแผ่กระจาย จากสมการ (3.179) สามารถเขียนให้อยู่ในรูปของฟังก์ชันคลื่นและพลังงานได้ดังนี้

$$\left(\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega T} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left(\frac{i m \omega}{2 \hbar \sin \omega T} \left((x_a^2 + x_b^2) \cos \omega T - 2x_a x_b \right) \right) = \sum_n \psi_n(x_b) \psi_n^*(x_a) e^{\frac{i}{\hbar} E_n T} \quad (3.180)$$

เพื่อให้ได้ฟังก์ชันคลื่นและพลังงานของฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์ เขียนสมการทางซ้ายมือของสมการ (3.180) เสียใหม่ โดยอาศัยความสัมพันธ์

$$\left. \begin{aligned} i \sin \omega T &= \frac{e^{i\omega T} (1 - e^{-2i\omega T})}{2} \\ \cos \omega T &= \frac{e^{i\omega T} (1 + e^{-2i\omega T})}{2} \end{aligned} \right\} \quad (3.181)$$

แทนค่าเหล่านี้ลงในสมการทางด้านซ้ายของสมการ (3.180) ก็จะได้

$$\begin{aligned} &\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{i\omega T}{2}} (1 - e^{-2i\omega T})^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} \left[(x_a^2 + x_b^2) \frac{1 + e^{-2i\omega T}}{1 - e^{-2i\omega T}} - \frac{4x_a x_b e^{-i\omega T}}{1 - e^{-2i\omega T}} \right] \right) \\ &= \sum_n \psi_n(x_b) \psi_n^*(x_a) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n T} \end{aligned} \quad (3.182)$$

ถ้าต้องการให้นิพจน์ทางซ้ายมือของสมการ (3.180) มีลักษณะคล้ายกับนิพจน์ทางขวามือ ซึ่งเป็นอนุกรม เราจำเป็นต้องกระจายสมการ (3.182) ออกเป็นอนุกรมกำลังของ $e^{-i\omega T}$ เนื่องจากเทอมแรกของสมการ (3.182) คือ $e^{-\frac{i\omega T}{2}}$ ดังนั้นเทอมต่อไปจะต้องมีรูปแบบเป็น $e^{-\frac{i\omega T}{2}} e^{-in\omega T}$ โดยที่ $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ การที่อนุกรมมีลักษณะเช่นนี้แสดงว่าพลังงานของฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์ คือ

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega \quad (3.183)$$

ถ้าต้องการทราบฟังก์ชันคลื่นของฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์ จะต้องกระจายนิพจน์ของสมการ (3.182) ให้สมบูรณ์กว่านี้ ในที่นี้จะแสดงวิธีการกระจายถึงเทอม $n = 2$ เท่านั้น อย่างไรก็ตามโดยหลักการแล้วสามารถกระจายถึงเทอมที่ n ใดๆ ก็ได้ โดยการกระจายนิพจน์ของสมการ (3.182) ถึงอันดับ $n = 2$ เราก็จะได้

$$\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{i\omega T}{2}} \left(1 + \frac{e^{-2i\omega T}}{2} + \dots \right) \exp\left\{ -\frac{m\omega}{2\hbar} (x_a^2 + x_b^2) - \frac{m\omega}{\hbar} (x_a^2 + x_b^2) (e^{-2i\omega T} + \dots) + \frac{2}{\hbar} m\omega x_a x_b e^{-i\omega T} + \dots \right\}$$

หรือ

$$\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x_a^2+x_b^2)} e^{-\frac{i\omega T}{2}} \left(1 + \frac{e^{-2i\omega T}}{2}\right) \exp\left\{1 + \frac{2}{\hbar} m\omega x_a x_b e^{-i\omega T} + \frac{4m^2\omega^2}{2\hbar^2} x_a^2 x_b^2 e^{-2i\omega T} - \frac{m\omega}{\hbar}(x_a^2 + x_b^2)e^{-2i\omega T} + \dots\right\} \quad (3.184)$$

เปรียบเทียบเทอมแรกของสมการ (3.184) กับสมการ (3.182) เราจะได้ว่า

$$\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x_a^2+x_b^2)} e^{-\frac{i\omega T}{2}} = e^{-\frac{i}{\hbar}E_0 T} \psi_0(x_b)\psi_0^*(x_a) \quad (3.185)$$

สมการ (3.185) นี้หมายความว่า $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$ และฟังก์ชันคลื่นที่สมนัยกับสถานะพื้นคือ

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega^2 x^2}{2\hbar}} \quad (3.186)$$

เราอาจคำนวณหาพลังงานและฟังก์ชันคลื่นในสถานะอื่นได้โดยพิจารณาเทอมต่อไป เช่น สถานะถัดจากสถานะพื้น พิจารณา

$$\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x_a^2+x_b^2)} e^{-\frac{i\omega T}{2}} e^{-i\omega T} \frac{2m\omega}{\hbar} x_a x_b = e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 T} \psi_1(x_b)\psi_1^*(x_a) \quad (3.187)$$

สมการนี้แสดงว่า $E_1 = \frac{3\hbar\omega}{2}$ และฟังก์ชันคลื่นคือ

$$\psi_1(x) = \left(\frac{2m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} x\psi_0(x) \quad (3.188)$$

ซึ่งสมการ (3.188) ที่ได้นี้ก็ตรงกับสูตรที่ได้จากวิธีการของชเรอดิงเงอร์ ในทำนองเดียวกันเทอมต่อไปจะให้พลังงาน $E_2 = \frac{5\hbar\omega}{2}$ สำหรับส่วนที่ขึ้นกับ x_a และ x_b จะมีลักษณะดังนี้

$$\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x_a^2+x_b^2)} \left\{ \frac{2m^2\omega^2}{\hbar} x_a^2 x_b^2 - \frac{m\omega}{\hbar} \left(x_a^2 + x_b^2 + \frac{1}{2}\right) \right\} \quad (3.189)$$

เทอมนี้จะต้องเท่ากับ $\psi_2(x_b)\psi_2^*(x_a)$ เนื่องจากเทอมที่อยู่ภายในวงเล็บใหญ่สามารถแยกตัวประกอบได้เป็น

$$\frac{1}{2}\left(\frac{2m\omega}{\hbar}x_a^2 - 1\right)\left(\frac{2m\omega}{\hbar}x_b^2 - 1\right) \quad (3.190)$$

ดังนั้นเราได้

$$\psi_2(x) = \left(\frac{1}{2}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{2m\omega}{\hbar}x^2 - 1\right) \psi_0(x) \quad (3.191)$$

ซึ่งสมการ (3.191) ที่ได้นี้ก็ตรงกับสูตรที่ได้จากวิธีการของชเรอดิงเงอร์เช่นกัน จากการพิสูจน์ให้เห็นด้วยสองตัวอย่างข้างต้น ถ้าทราบตัวแปรกระจายก็จะทำให้ทราบทั้งพลังงานและฟังก์ชันคลื่น และโดยอาศัยวิธีการดังกล่าวนี้ ก็สามารถคำนวณหาพลังงานกับฟังก์ชันคลื่นใดๆ ของฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์ได้ทุกระดับ

3.2.5 วิธีดำเนินการเก็บรวบรวมข้อมูลวิจัย

3.2.5.1 คำนวณหาฟังก์ชันคลื่นและพลังงานของกึ่งฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์โดยอาศัยทฤษฎีของชเรอดิงเงอร์

3.2.5.2 คำนวณตัวแปรกระจายของฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์

3.2.5.3 ศึกษาการกระจายตัวแปรกระจายของฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์เป็นอนุกรมเพื่อหาฟังก์ชันคลื่นและพลังงาน

3.2.5.4 คำนวณตัวแปรกระจายของกึ่งฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์โดยอาศัยทฤษฎีอินทิกรัลตามเส้นทางร่วมกับวิธีจุดภาพกระจกเงา (image point method) ของกูคแมน(M.Goodman)

3.2.5.5 กระจายตัวแปรกระจายของกึ่งฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์ออกเป็นอนุกรมเพื่อหาฟังก์ชันคลื่นและพลังงานที่เป็นไปได้

3.2.5.6 เปรียบเทียบฟังก์ชันคลื่นและพลังงานที่เป็นไปได้โดยอาศัยทฤษฎีอินทิกรัลตามเส้นทางร่วมกับวิธีจุดภาพกระจกเงากับทฤษฎีของชเรอดิงเงอร์

3.2.5.7 เปรียบเทียบฟังก์ชันคลื่นและพลังงานที่เป็นไปได้กับกรณีของฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์

บทที่ 4

ผลการวิจัย

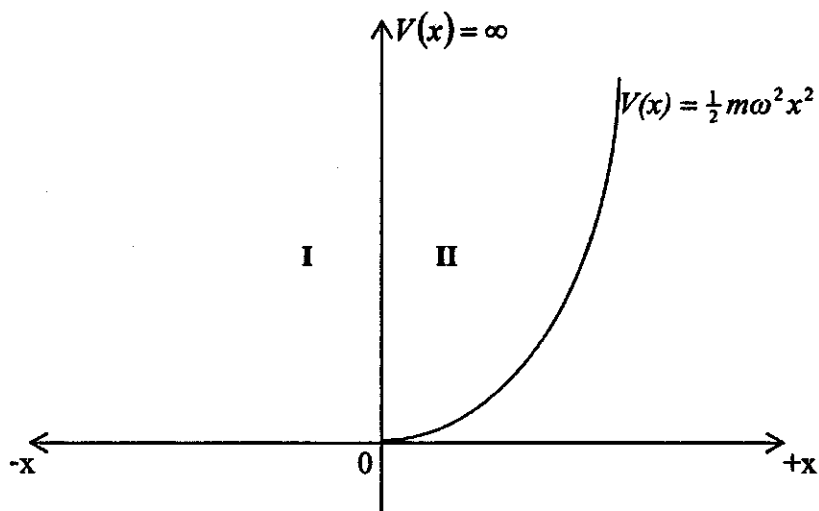
4.1 ทฤษฎีของชเรอดิงเงอร์

4.1.1 ปัญหาแก๊สฮาร์โมนิกออสซิลเลเตอร์

สำหรับแก๊สฮาร์โมนิกออสซิลเลเตอร์นั้นเป็นแบบจำลองที่ผู้ทำวิจัยได้ประยุกต์ขึ้นมาซึ่งเป็นระบบของอนุภาคที่มีพลังงานศักย์

$$\left. \begin{aligned} V(x) &= \infty, & x < 0 \\ V(x) &= \frac{1}{2} m \omega^2 x^2, & x \geq 0 \end{aligned} \right\} \quad (4.1)$$

หากเขียนกราฟระหว่างพลังงานศักย์เทียบกับตำแหน่งจะได้ดังภาพที่ 4.1



ภาพที่ 4.1 กราฟแสดงพลังงานศักย์ของแก๊สฮาร์โมนิกออสซิลเลเตอร์

ซึ่งตามรูปแบบพลังงานศักย์ดังกล่าวอนุภาคจะถูกจำกัดให้อยู่ในย่าน $x \geq 0$ เท่านั้น เนื่องจากอนุภาคไม่สามารถฝ่ากำแพงศักย์สูงเป็นอนันต์ได้ สิ่งที่เราต้องการทราบเป็นอย่างยิ่งก็คือฟังก์ชันคลื่นและระดับพลังงานที่เป็นไปได้ของอนุภาคมีลักษณะแตกต่างกันหรือไม่อย่างไรกับฮาร์โมนิกออสซิลเล

เตอร์ปกติ หากอาศัยการแก้สมการชเรอดิงเงอร์ก็อาจเป็นไปได้โดยมีเงื่อนไขขอบเขตบังเกิดขึ้นตรงผนังกำแพงศักย์

บริเวณ I ($x < 0$)

จะได้สมการ

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + \left(E - \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right) \psi(x) = 0$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_I(x) + (E - \infty) \psi_I(x) = 0 \quad (4.2)$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_I(x) - (\infty) \psi_I(x) = 0 \quad (4.3)$$

คูณสมการ (4.3) ด้วย $\frac{2m}{\hbar^2}$ ได้ผลเป็น

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) - \frac{2m}{\hbar^2} (\infty) \psi_I(x) = 0 \quad (4.4)$$

ได้สมการช่วย

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi_I - (\infty) \psi_I = 0 \quad (4.5)$$

หรือ

$$(m^2 - \infty) = 0$$

$$m = \pm \infty$$

$$\psi_I(x) = Ae^{+\sqrt{\infty}x} + Be^{-\sqrt{\infty}x}$$

เพื่อป้องกันไม่ให้ฟังก์ชันคลื่นเป็นอนันต์ ต้องให้ $B = 0$

$$\psi_I(x) = Ae^{+\sqrt{\infty}x} \quad (4.6)$$

ดังนั้นให้

$$\psi_I(x) = 0 \quad ; (x < 0) \quad (4.7)$$

ดังนั้น บริเวณ I ไม่มีอนุภาค

บริเวณ II ($x \geq 0$)

จากฮาร์โมนิกออสซิลเลเตอร์

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + \left(E - \frac{1}{2} m \omega^2 x^2\right) \psi(x) = 0 \quad (4.8)$$

สมการ (4.8) อยู่ในรูป

$$\frac{d^2 y}{dx^2} + f(x)y = 0 \quad (4.9)$$

โดยที่ $f(x) = \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{1}{2} m \omega^2 x^2\right)$ สมการดังกล่าวไม่อาจหาผลเฉลยได้โดยง่าย เนื่องจากมิได้อยู่ในรูป $\frac{d^2 y}{dx^2} \pm \alpha^2 y = 0$ ด้วยการคูณสมการ (4.8) ด้วย $\frac{2}{\hbar \omega}$ ได้ผล

$$\left(\frac{2}{\hbar \omega}\right) \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right) \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + \left(E \frac{2}{\hbar \omega} - \frac{2}{\hbar \omega} \frac{1}{2} m \omega^2 x^2\right) \psi(x) = 0$$

$$\frac{\hbar}{m \omega} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + \left(\frac{2E}{\hbar \omega} - \frac{m \omega}{\hbar} x^2\right) \psi(x) = 0 \quad (4.10)$$

ให้

$$\lambda = \frac{2E}{\hbar \omega} \quad (4.11)$$

และ

$$\sqrt{\frac{m \omega}{\hbar}} x = \xi \quad (4.12)$$

สมการ (4.10) กลับกลายเป็น

$$\frac{d^2}{d\xi^2} \psi(\xi) + (\lambda - \xi^2) \psi(\xi) = 0 \quad (4.13)$$

ผลเฉลยของสมการ (4.13) เมื่อ $\xi \rightarrow \pm\infty$ (Asymptotic Solution)พิจารณาสมการ (4.13) เมื่อ ξ มีค่ามาก ($\xi \gg \lambda$) สมการ (4.13) ประมาณได้เป็น

$$\frac{d^2}{d\xi^2} \psi_{as}(\xi) - \xi^2 \psi_{as}(\xi) = 0 \quad (4.14)$$

$\psi_{as}(\xi)$ น่าจะมีผลเฉลยที่อยู่ในรูป

$$\psi_{as}(\xi) = Ae^{\pm \xi^2/2} \quad (4.15)$$

อย่างไรก็ตามผลเฉลยที่ใช้การได้ควรจะเป็นมีรูปแบบเป็น $Ae^{-\xi^2/2}$ (เพื่อป้องกันมิให้ $\psi_{as}(\infty) = \infty$) ดังนั้นผลเฉลยทั่วไปของสมการ (4.13) ควรจะมีรูปแบบเชิงคณิตศาสตร์

$$\begin{aligned} \psi(\xi) &= \psi_{as}(\xi)H(\xi) \\ &= Ae^{-\xi^2/2}H(\xi) \end{aligned} \quad (4.16)$$

เมื่อ $H(\xi)$ เป็นฟังก์ชันใดๆ ที่ยังไม่ทราบแน่ชัด เมื่อแทน $\psi(\xi)$ ในสมการ (4.18) ลงในสมการ (4.13) ได้ผล

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{d\xi^2} (e^{-\xi^2} H(\xi)) + (\lambda - \xi^2) e^{-\xi^2} H(\xi) &= 0 \\ \frac{d^2}{d\xi^2} H(\xi) - 2\xi \frac{d}{d\xi} H(\xi) + (\lambda - 1)H(\xi) &= 0 \end{aligned} \quad (4.17)$$

จะเห็นได้ว่าการเปลี่ยนรูป $\psi(\xi)$ ตามแบบสมการ (4.16) จะนำไปสู่รูปแบบปัญหาของสมการเชิงอนุพันธ์แบบใหม่ที่ดูเหมือนว่ายุ่งยากกว่าเดิม อย่างไรก็ตามสมการ (4.17) เป็นสมการเชิงอนุพันธ์มาตรฐานแบบหนึ่งโดยมีผลเฉลยที่แน่นอน สมการแบบนี้มีชื่อเรียกว่า สมการเชิงอนุพันธ์เฮร์มิต (Hermite differential equation) ซึ่งจะมีผลเฉลยก็ต่อเมื่อ

$$\lambda - 1 = 2n, \quad n=0,1,2,3,\dots \quad (4.18)$$

โดยที่

$$\lambda - 1 = 2.0 \quad \text{จะคล่องจองกับผลเฉลย} \quad H_0(\xi), n=0$$

$$\lambda - 1 = 2.1 \quad \text{จะคล้อยจองกับผลเฉลย } H_1(\xi), n = 1$$

...

...

...

$$\lambda - 1 = 2.n \quad \text{จะคล้อยจองกับผลเฉลย } H_n(\xi), n = n$$

โดยที่ $H_n(\xi)$ มีรูปแบบเชิงคณิตศาสตร์ดังนี้

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} \quad (4.19)$$

$H_n(\xi)$ มีชื่อเรียกว่าพหุนามแฮร์มิตอันดับที่ n

สรุปได้ว่า ตัวแกว่งกวัดฮาร์มอนิกหนึ่งมิติในกลศาสตร์ควอนตัมจะมีฟังก์ชันคลื่น

$$\begin{aligned} \psi_n(\xi) &= A e^{-\xi^2/2} H_n(\xi) \\ &= A e^{-\xi^2/2} (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} \end{aligned} \quad (4.20)$$

คล้อยจองกับระดับพลังงานที่ n ดังนี้

$$\lambda - 1 = 2.n$$

$$\frac{2E}{\hbar\omega} - 1 = 2.n$$

$$E = (n + 1/2)\hbar\omega$$

หรือ $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega, n = 0, 1, 2, 3, \dots$ (4.21)

ตัวอย่าง พหุนามแฮร์มิตอันดับที่ n ต่างๆ

$$H_0(\xi) = (-1)^0 e^{\xi^2} \frac{d^0}{d\xi^0} e^{-\xi^2} = (-1^0) (e^{\xi^2}) (e^{-\xi^2}) = 1$$

$$H_1(\xi) = (-1)^1 e^{\xi^2} \frac{d^0}{d\xi} e^{-\xi^2} = (-1)^1 (e^{\xi^2}) (e^{-\xi^2}) (-2\xi) = 2\xi$$

$$H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2$$

$$H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi$$

$$H_4(\xi) = 16\xi^4 - 48\xi^2 + 12 \quad \text{เป็นต้น}$$

จากสมการ (4.21) เรามี $\psi_n(\xi) = A e^{-\xi^2/2} H_n(\xi)$ ด้วยการเปลี่ยนตัวแปร $\xi \rightarrow x$ จะได้

$$\psi_n(x) = A_n e^{-m\omega x^2/2\hbar} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right) \quad (4.22)$$

ดังนั้น

$$\psi_{II}(x) = \psi_n(x) = A_n e^{-m\omega x^2/2\hbar} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right) \quad (4.23)$$

4.1.2 ระดับพลังงานที่เป็นไปได้และฟังก์ชันคลื่นของกึ่งฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์
เนื่องจากใช้เงื่อนไขขอบเขต (boundary condition)

โดยอาศัย

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) \quad (4.24)$$

$$0 = A_n e^{-m\omega x^2/2\hbar} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right) \quad (4.25)$$

ดังนั้น

$$A_n e^{-m\omega x^2/2\hbar} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right) \Big|_{x=0} = 0 \quad (4.26)$$

หรือ

$$A_n H_n(0) = 0 \quad (4.27)$$

จากสมการ (4.27) เราสามารถพิสูจน์ได้ว่าพหุนามแฮร์มิตอันดับที่ n ใดบ้างที่สอดคล้องกับเงื่อนไขขอบเขต
กรณีที่ $n = 0$

$$\text{จาก } H_0(\xi) = 1 \text{ ได้ } H_0(0) = 1$$

$$\text{จากสมการ (4.27)} \quad A_n H_n(0) = 0$$

$$A_0 H_0(0) = 0$$

$$A_0(1) = 0$$

\therefore กรณีที่ $n = 0$ $H_0(\xi)$ ไม่สอดคล้องกับเงื่อนไขขอบเขต ดังนั้นต้องให้ $A_0 = 0$
กรณีที่ $n = 1$

$$\text{จาก } H_1(\xi) = 2\xi \text{ ได้ } H_1(0) = 0$$

$$\text{จากสมการ (4.27)} \quad A_n H_n(0) = 0$$

$$A_1 H_1(0) = 0$$

$$A_1(0) = 0$$

$$0 = 0$$

\therefore กรณีที่ $n = 1$ $H_1(\xi)$ สอดคล้องกับเงื่อนไขขอบเขต
กรณีที่ $n = 2$

$$\text{จาก } H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2 \text{ ได้ } H_2(0) = -2$$

จากสมการ (4.27) $A_n H_n(0) = 0$

$$A_2 H_2(0) = 0$$

$$A_2(-2) = 0$$

$$(-2)A_2 = 0$$

∴ กรณีที่ $n = 2$ $H_2(\xi)$ ไม่สอดคล้องกับเงื่อนไขขอบเขต ดังนั้นต้องให้ $A_2 = 0$

กรณีที่ $n = 3$

จาก $H_3(\xi) = 8\xi^2 - 12\xi$ ได้ $H_3(0) = 0$

จากสมการ (4.27) $A_n H_n(0) = 0$

$$A_3 H_3(0) = 0$$

$$A_3(0) = 0$$

$$0 = 0$$

∴ กรณีที่ $n = 3$ $H_3(\xi)$ สอดคล้องกับเงื่อนไขขอบเขต

กรณีที่ $n = 4$

จาก $H_4(\xi) = 16\xi^4 - 48\xi^2 + 12$ ได้ $H_4(0) = 12$

จากสมการ(4.27) $A_n H_n(0) = 0$

$$A_4 H_4(0) = 0$$

$$12A_4 = 0$$

∴ กรณีที่ $n = 4$ $H_4(\xi)$ ไม่สอดคล้องกับเงื่อนไขขอบเขต ดังนั้นต้องให้ $A_4 = 0$

พหุนามเฮอร์ไมต์อันดับที่ n เป็นเลขที่สอดคล้องกับเงื่อนไขขอบเขต ดังนั้นเลขควอนตัมของกึ่งฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์น่าจะเป็น $n = 1, 3, 5, \dots$ สามารถอนุมานได้ว่าระดับพลังงานที่เป็นไปได้ของกึ่งฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์คือ

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega \quad (4.41)$$

และฟังก์ชันคลื่น

$$\psi_n(x) = A_n e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right) \quad (4.42)$$

เมื่อ $n = 1, 3, 5, \dots$ และ $H_n(\xi)$ เรียกว่า พหุนามเฮอร์ไมต์ (Hermite polynomial) อันดับที่ n

4.1.3 การหาค่าคงตัวของการเป็นคลื่นปกติ (A_n)

จากฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์ โดยอาศัยการทำฟังก์ชันคลื่นให้เป็นปกติ

กล่าวคือ

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) \psi_n(x) dx = 1 \quad (4.43)$$

เราได้

$$A_{n(har)}^2 \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) \psi_n(x) dx = A_{n(har)}^2 \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n(x)|^2 dx = 1 \quad (4.44)$$

ได้ผล

$$A_{n(har)}^2 = \frac{1}{\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n(x)|^2 dx} = \left[\frac{1}{(2^n) n! \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}} \right]$$

หรือ

$$A_{n(har)} = \left[\frac{1}{(2^n)n!} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} \right]^{\frac{1}{2}}$$

ต่อกรณีกึ่งฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์

$$\int_0^{\infty} \psi_n^*(x) \psi_n(x) dx = 1$$

$$A_{n(semi)}^2 \int_0^{\infty} |\psi_n|^2 dx = 1$$

หรือ

$$\frac{A_{n(semi)}^2}{2} \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n|^2 dx = 1$$

$$A_{n(semi)}^2 = \frac{2}{\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n|^2 dx}$$

ดังนั้น

$$A_{n(semi)} = \sqrt{2} A_{n(har)}$$

$$A_{n(semi)} = \sqrt{2} A_{n(har)}$$

$$A_{n(semi)} = \left[\frac{1}{2^{n-1}n!} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/2} \right]^{1/2} \quad (4.45)$$

4.2 อินทิกรัลตามเส้นทางของกึ่งฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์

4.2.1 ตัวแปรกระจายของกึ่งฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์

สำหรับกึ่งฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์ ลากรางเทียนมีรูปแบบเดียวกับฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์ทุกประการ แต่อนุภาคถูกบังคับให้เคลื่อนที่ในย่าน $x \geq 0$ เท่านั้น หลังจากอาศัยทฤษฎี

อินทิเกรตตามเส้นทางผนวกกับหลักการของวิธีจุดภาพกระจเงตามแบบอย่างของปัญหากำแพงศักย์อนันต์ ได้ตัวแปรกระจายกึ่งฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์ดังนี้

$$K(b, a) = \left(\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega T} \right)^{\frac{1}{2}} \times \left\{ \exp \left(\frac{i m \omega}{2 \hbar \sin \omega T} (x_a^2 + x_b^2) \cos \omega T \right) \right\} \left\{ \exp \left(\frac{-i m \omega x_a x_b}{\hbar \sin \omega T} \right) - \exp \left(\frac{i m \omega x_a x_b}{\hbar \sin \omega T} \right) \right\} \quad (4.46)$$

โดยที่ $T = t_b - t_a$

4.2.2 ระดับพลังงานที่เป็นไปได้และฟังก์ชันคลื่นของกึ่งฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์

จากสมการ (4.46) สามารถคำนวณรายละเอียดเกี่ยวกับฟังก์ชันคลื่นและพลังงานของระบบกึ่งฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์ ได้โดยเขียนตัวแปรกระจายให้อยู่ในรูปของฟังก์ชันคลื่นและพลังงานดังนี้

$$\left(\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega T} \right)^{\frac{1}{2}} \left\{ \exp \left(\frac{i m \omega}{2 \hbar \sin \omega T} (x_a^2 + x_b^2) \cos \omega T \right) \right\} \left\{ \exp \left(\frac{-i m \omega x_a x_b}{\hbar \sin \omega T} \right) - \exp \left(\frac{i m \omega x_a x_b}{\hbar \sin \omega T} \right) \right\} \\ = \sum_{n=0}^{\infty} \psi_n(x_b) \psi_n^*(x_a) e^{\frac{i}{\hbar} E_n T} \quad (4.47)$$

เพื่อให้ได้มาซึ่งฟังก์ชันคลื่นและพลังงานของระบบกึ่งฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์ จะต้องเขียนสมการ (4.47) ใหม่ โดยอาศัยความสัมพันธ์

$$i \sin \omega T = \frac{1}{2} e^{i\omega T} (1 - e^{-2i\omega T}) \quad (4.48)$$

$$\cos \omega T = \frac{1}{2} e^{i\omega T} (1 + e^{-2i\omega T}) \quad (4.49)$$

แทนสมการ (4.48) ลงด้านซ้ายของสมการ (4.47) ได้ผล

$$K(b,a) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{i\omega T}{2}} (1-e^{-2i\omega T})^{-\frac{1}{2}} \times$$

$$\left\{ \exp\left(\frac{-m\omega}{2\hbar}(x_a^2 + x_b^2) \frac{(1+e^{-2i\omega T})}{(1-e^{-2i\omega T})}\right) \right\} \left\{ \exp\left(\frac{m\omega x_a x_b}{\hbar \frac{1}{2} e^{i\omega T} (1-e^{-2i\omega T})}\right) - \exp\left(\frac{-m\omega x_a x_b}{\hbar \frac{1}{2} e^{i\omega T} (1-e^{-2i\omega T})}\right) \right\}$$

(4.50)

$$K(b,a) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{i\omega T}{2}} (1-e^{-2i\omega T})^{-\frac{1}{2}} \left\{ \exp\left(\frac{-m\omega}{2\hbar}(x_a^2 + x_b^2)(1+e^{-2i\omega T})(1-e^{-2i\omega T})^{-1}\right) \right\} \times$$

$$\left\{ \exp\left(\frac{2mx_a x_b}{\hbar} e^{-i\omega T} (1-e^{-2i\omega T})^{-1}\right) - \exp\left(\frac{-2mx_a x_b}{\hbar} e^{-i\omega T} (1-e^{-2i\omega T})^{-1}\right) \right\}$$

(4.51)

ถ้าต้องการให้นิพจน์ด้านซ้ายของสมการ (4.47) มีลักษณะเดียวกับนิพจน์ด้านขวาซึ่งเป็นอนุกรม จะต้องกระจายสมการ (4.51) ออกเป็นอนุกรม ในที่นี้จะทำการกระจาย (4.47) ถึงเลขควอนตัม $n = 5$ โดยใช้สูตรดังนี้

$$(1+x)^{\frac{1}{2}} = 1 - \frac{1}{2}x + \frac{1 \cdot 3}{2 \cdot 4}x^2 - \frac{1 \cdot 3 \cdot 5}{2 \cdot 4 \cdot 6}x^3 + \dots$$

(4.52)

$$(1+x)^{-1} = 1 - x + x^2 - x^3 + x^4 - \dots \quad \text{โดยที่ } -1 < x < 1$$

(4.53)

กระจายนิพจน์ $(1-e^{-2i\omega T})^{-\frac{1}{2}}$ โดยใช้สมการ (4.52) จะได้

$$(1-e^{-2i\omega T})^{-\frac{1}{2}} = 1 + \frac{1}{2}e^{-2i\omega T} + \frac{3}{8}e^{-4i\omega T} + \frac{15}{48}e^{-6i\omega T} + \frac{105}{384}e^{-8i\omega T} + \frac{945}{3840}e^{-10i\omega T} + \dots$$

(4.54)

และกระจายนิพจน์ $(1-e^{-2i\omega T})^{-1}$ โดยใช้สมการ (4.53) จะได้

$$(1-e^{-2i\omega T})^{-1} = 1 + e^{-2i\omega T} + e^{-4i\omega T} + e^{-6i\omega T} + e^{-8i\omega T} + e^{-10i\omega T} + \dots$$

(4.55)

แทนสมการ (4.54) และ (4.55) ลงในสมการ (4.51) จะได้

$$\begin{aligned}
&= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{i\omega T}{2}} \left(1 + \frac{1}{2}e^{-2i\omega T} + \frac{3}{8}e^{-4i\omega T} + \frac{15}{48}e^{-6i\omega T} + \frac{105}{384}e^{-8i\omega T} + \frac{945}{3840}e^{-10i\omega T} + \dots \right) \times \\
&\left\{ \exp \left(\frac{-m\omega}{2\hbar} (x_a^2 + x_b^2) (1 + e^{-2i\omega T}) (1 + e^{-2i\omega T} + e^{-4i\omega T} + e^{-6i\omega T} + e^{-8i\omega T} + e^{-10i\omega T} + \dots) \right) \right\} \times \\
&\left\{ \exp \left(\frac{2mx_a x_b}{\hbar} e^{-i\omega T} (1 + e^{-2i\omega T} + e^{-4i\omega T} + e^{-6i\omega T} + e^{-8i\omega T} + e^{-10i\omega T} + \dots) \right) \right\} \\
&\left. - \exp \left(\frac{-2mx_a x_b}{\hbar} e^{-i\omega T} (1 + e^{-2i\omega T} + e^{-4i\omega T} + e^{-6i\omega T} + e^{-8i\omega T} + e^{-10i\omega T} + \dots) \right) \right\} \quad (4.56)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
K(b, a) &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{i\omega T}{2}} \left(1 + \frac{1}{2}e^{-2i\omega T} + \frac{3}{8}e^{-4i\omega T} + \frac{15}{48}e^{-6i\omega T} + \frac{105}{384}e^{-8i\omega T} + \frac{945}{3840}e^{-10i\omega T} + \dots \right) \times \\
&\left\{ \exp \left(\frac{-m\omega}{2\hbar} (x_a^2 + x_b^2) (1 + 2e^{-2i\omega T} + 2e^{-4i\omega T} + 2e^{-6i\omega T} + 2e^{-8i\omega T} + 2e^{-10i\omega T} + \dots) \right) \right\} \times \\
&\left\{ \exp \left(\frac{2mx_a x_b}{\hbar} (e^{-i\omega T} + e^{-3i\omega T} + e^{-5i\omega T} + e^{-7i\omega T} + e^{-9i\omega T} + e^{-11i\omega T} + \dots) \right) \right\} \\
&\left. - \exp \left(\frac{-2mx_a x_b}{\hbar} (e^{-i\omega T} + e^{-3i\omega T} + e^{-5i\omega T} + e^{-7i\omega T} + e^{-9i\omega T} + e^{-11i\omega T} + \dots) \right) \right\} \quad (4.57)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{i\omega T}{2}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x_a^2 + x_b^2)} \left(1 + \frac{1}{2}e^{-2i\omega T} + \frac{3}{8}e^{-4i\omega T} + \frac{15}{48}e^{-6i\omega T} + \frac{105}{384}e^{-8i\omega T} + \frac{945}{3840}e^{-10i\omega T} + \dots \right) \times \\
&\left\{ \exp \left(-\frac{m\omega}{\hbar} (x_a^2 + x_b^2) (e^{-2i\omega T} + e^{-4i\omega T} + e^{-6i\omega T} + e^{-8i\omega T} + e^{-10i\omega T} + \dots) \right) \right\} \times \\
&\left\{ \exp \left(\frac{2mx_a x_b}{\hbar} (e^{-i\omega T} + e^{-3i\omega T} + e^{-5i\omega T} + e^{-7i\omega T} + e^{-9i\omega T} + e^{-11i\omega T} + \dots) \right) \right\}
\end{aligned}$$

$$-\exp\left(\frac{-2mx_a x_b}{\hbar}(e^{-i\omega T} + e^{-3i\omega T} + e^{-5i\omega T} + e^{-7i\omega T} + e^{-9i\omega T} + e^{-11i\omega T} + \dots)\right)\} \quad (4.58)$$

จากสมการ (4.58) พบว่ามีบางส่วนของสมการอยู่ในรูปแบบ exponential ยกกำลัง exponential ต้องทำการกระจายถึง $n = 5$ เพื่อให้ได้ฟังก์ชันคลื่น 5 อันดับแรกที่สมบรูณ์ โดยอาศัยสูตร

$$e^\theta = 1 + \theta + \frac{1}{2!}\theta^2 + \frac{1}{3!}\theta^3 + \frac{1}{4!}\theta^4 + \frac{1}{5!}\theta^5 + \dots \quad (4.59)$$

สมการ (4.58) หลังจากกระจายในรูปแบบสมการ (4.59) แล้วเลือกเฉพาะกำลังไม่เกินลำดับ $n = 5$ จะได้

$$K(b, a) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} e^{\frac{i\omega T}{2}} e^{\frac{-m\omega}{2\hbar}(x_a^2 + x_b^2)} \left(1 + \frac{1}{2}e^{-2i\omega T} + \frac{3}{8}e^{-4i\omega T}\right) \times$$

$$\left\{1 - \frac{m\omega}{\hbar}(x_a^2 + x_b^2)(e^{-2i\omega T} + e^{-4i\omega T}) + \frac{1}{2}\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^2 (x_a^2 + x_b^2)^2 e^{-4i\omega T}\right\} \times$$

$$\left\{4\frac{m\omega}{\hbar}x_a x_b (e^{-i\omega T} + e^{-3i\omega T} + e^{-5i\omega T}) + \frac{16}{6}\left(\frac{m\omega}{\hbar}x_a x_b\right)^3 (e^{-3i\omega T} + 3e^{-5i\omega T}) + \frac{32}{60}\left(\frac{m\omega}{\hbar}x_a x_b\right)^5 e^{-5i\omega T}\right\} \quad (4.60)$$

$$K(b, a) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} e^{\frac{i\omega T}{2}} e^{\frac{-m\omega}{2\hbar}(x_a^2 + x_b^2)} \left(1 + \frac{1}{2}e^{-2i\omega T} + \frac{3}{8}e^{-4i\omega T}\right) \times$$

$$\left\{4\frac{m\omega}{\hbar}x_a x_b e^{-i\omega T} + 4\frac{m\omega}{\hbar}x_a x_b e^{-3i\omega T} + 4\frac{m\omega}{\hbar}x_a x_b e^{-5i\omega T} + \frac{8}{3}\left(\frac{m\omega}{\hbar}x_a x_b\right)^3 e^{-3i\omega T}\right.$$

$$+ 8\left(\frac{m\omega}{\hbar}x_a x_b\right)^3 e^{-5i\omega T} + \frac{32}{60}\left(\frac{m\omega}{\hbar}x_a x_b\right)^5 e^{-5i\omega T} - 4\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^2 x_a x_b (x_a^2 + x_b^2) e^{-3i\omega T}$$

$$\left. - 4\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^2 x_a x_b (x_a^2 + x_b^2) e^{-5i\omega T} - \frac{8}{3}\left(\frac{m\omega}{\hbar}x_a x_b\right)^3 \frac{m\omega}{\hbar}(x_a^2 + x_b^2) e^{-5i\omega T}\right\}$$

$$-4\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^2 x_a x_b (x_a^2 + x_b^2) e^{-5i\omega T} + 2\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^3 x_a x_b (x_a^2 + x_b^2)^2 e^{-5i\omega T} \quad (4.61)$$

$$\begin{aligned} K(b,a) = & \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} e^{\frac{i\omega T}{2}} e^{\frac{-m\omega}{2\hbar}(x_a^2 + x_b^2)} \left\{ 4\frac{m\omega}{\hbar} x_a x_b e^{-i\omega T} + 4\frac{m\omega}{\hbar} x_a x_b e^{-3i\omega T} + 4\frac{m\omega}{\hbar} x_a x_b e^{-5i\omega T} \right. \\ & + \frac{8}{3}\left(\frac{m\omega}{\hbar} x_a x_b\right)^3 e^{-3i\omega T} + 8\left(\frac{m\omega}{\hbar} x_a x_b\right)^3 e^{-5i\omega T} + \frac{32}{60}\left(\frac{m\omega}{\hbar} x_a x_b\right)^5 e^{-5i\omega T} \\ & - 4\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^2 x_a x_b (x_a^2 + x_b^2) e^{-3i\omega T} - 4\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^2 x_a x_b (x_a^2 + x_b^2) e^{-5i\omega T} \\ & - \frac{8}{3}\left(\frac{m\omega}{\hbar} x_a x_b\right)^3 \frac{m\omega}{\hbar} (x_a^2 + x_b^2) e^{-5i\omega T} - 4\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^2 x_a x_b (x_a^2 + x_b^2) e^{-5i\omega T} \\ & + 2\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^3 x_a x_b (x_a^2 + x_b^2)^2 e^{-5i\omega T} + 2\frac{m\omega}{\hbar} x_a x_b e^{-3i\omega T} + \frac{2m\omega}{\hbar} x_a x_b e^{-5i\omega T} \\ & \left. + \frac{8}{6}\left(\frac{m\omega}{\hbar} x_a x_b\right)^3 e^{-5i\omega T} - 2\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^2 x_a x_b (x_a^2 + x_b^2) e^{-5i\omega T} + \frac{3}{2}\frac{m\omega}{\hbar} x_a x_b e^{-5i\omega T} \right\} \quad (4.62) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} K(b,a) = & \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} e^{\frac{i\omega T}{2}} e^{\frac{-m\omega}{2\hbar}(x_a^2 + x_b^2)} \left\{ 4\frac{m\omega}{\hbar} x_a x_b e^{-i\omega T} \right. \\ & + 6\frac{m\omega}{\hbar} x_a x_b e^{-3i\omega T} + \frac{8}{3}\left(\frac{m\omega}{\hbar} x_a x_b\right)^3 e^{-3i\omega T} - 4\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^2 x_a x_b (x_a^2 + x_b^2) e^{-3i\omega T} \\ & + \frac{15}{2}\frac{m\omega}{\hbar} x_a x_b e^{-5i\omega T} - 10\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^2 x_a x_b^3 e^{-5i\omega T} - 10\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^2 x_a^3 x_b e^{-5i\omega T} \\ & \left. + \frac{80}{6}\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^3 x_a^3 x_b^3 e^{-5i\omega T} + 2\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^3 x_a x_b^5 e^{-5i\omega T} + 2\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^3 x_a^5 x_b e^{-5i\omega T} \right\} \end{aligned}$$

$$\left. -\frac{8}{3}\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^4 x_a^3 x_b^5 e^{-5i\omega T} - \frac{8}{3}\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^4 x_a^5 x_b^3 e^{-5i\omega T} + \frac{32}{60}\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^5 x_a^5 x_b^5 e^{-5i\omega T} \right\} \quad (4.63)$$

เปรียบเทียบกับเทอมแรกของสมการ (4.63) กับเทอมซ้ายมือของสมการ (4.47) จะได้

$$\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} e^{\frac{i\omega T}{2}} e^{\frac{-m\omega}{2\hbar}(x_a^2+x_b^2)} 4\frac{m\omega}{\hbar} x_a x_b e^{-i\omega T} = \psi_1(x_b) \psi_1^*(x_a) e^{\frac{i}{\hbar} E_1 T} \quad (4.64)$$

$$\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} 4\frac{m\omega}{\hbar} x_a x_b e^{\frac{-m\omega}{2\hbar}(x_a^2+x_b^2)} e^{\frac{i\omega T}{2}} e^{-i\omega T} = \psi_1(x_b) \psi_1^*(x_a) e^{\frac{i}{\hbar} E_1 T} \quad (4.65)$$

สมการ (4.65) แสดงให้เห็นว่า พลังงานต่ำสุดของกึ่งฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์ เท่ากับ

$$E_1 = \frac{3}{2} \hbar \omega \quad (4.66)$$

และฟังก์ชันคลื่น

$$\psi_1(x_b) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{\frac{-m\omega}{2\hbar} x_b^2} 2\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x_b \quad (4.67)$$

$$\psi_1^*(x_a) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{\frac{-m\omega}{2\hbar} x_a^2} 2\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x_a \quad (4.68)$$

สามารถคำนวณหาระดับพลังงานและฟังก์ชันคลื่นอื่นๆ ได้โดยพิจารณาเทอมต่อไป

คังกรณที่ $n = 3$

$$\psi_3(x_b) \psi_3^*(x_a) e^{\frac{i}{\hbar} E_3 T} = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} e^{\frac{-m\omega}{2\hbar}(x_a^2+x_b^2)} e^{\frac{i\omega T}{2}} e^{-3i\omega T} \times$$

$$\left\{ 6\frac{m\omega}{\hbar} x_a x_b + \frac{8}{3}\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^3 x_a^3 x_b^3 - 4\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^2 x_a x_b (x_a^2 + x_b^2) \right\} \quad (4.69)$$

จะได้ระดับพลังงานของกึ่งฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์ เมื่อ $n = 3$ เท่ากับ

$$E_3 = \frac{7}{2} \hbar \omega \quad (4.70)$$

พิจารณาสมการ (4.69) ทำการแยกฟังก์ชันคลื่นออกเป็นสองส่วน

$$\psi_3(x_b) \psi_3^*(x_a) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x_a^2+x_b^2)} \left\{ 6 \frac{m\omega}{\hbar} x_a x_b + \frac{8}{3} \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^3 x_a^3 x_b^3 - 4 \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^2 x_a x_b (x_a^2 + x_b^2) \right\} \quad (4.71)$$

จะได้ฟังก์ชันคลื่น

$$\psi_3(x_b) = \frac{1}{\sqrt{24}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega x_b^2}{2\hbar}} \left(8 \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{\frac{3}{2}} x_b^3 - 12 \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} x_b \right) \quad (4.72)$$

$$\psi_3^*(x_a) = \frac{1}{\sqrt{24}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega x_a^2}{2\hbar}} \left(8 \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{\frac{3}{2}} x_a^3 - 12 \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} x_a \right) \quad (4.73)$$

กรณีที่ $n = 5$

จะได้ระดับพลังงาน $E_5 = \frac{11}{2} \hbar \omega$ และสามารถหาฟังก์ชันคลื่นได้เท่ากับ

$$\psi_5(x_b) = \frac{1}{\sqrt{1920}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega x_b^2}{2\hbar}} \left(32 \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{\frac{5}{2}} x_b^5 - 160 \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{\frac{3}{2}} x_b^3 - 120 \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} x_b \right) \quad (4.74)$$

$$\psi_5^*(x_a) = \frac{1}{\sqrt{1920}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega x_a^2}{2\hbar}} \left(32 \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{\frac{5}{2}} x_a^5 - 160 \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{\frac{3}{2}} x_a^3 - 120 \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} x_a \right) \quad (4.75)$$

เราสามารถอนุมานได้ว่าระดับพลังงานที่เป็นไปได้ของกึ่งฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์คือ

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega \quad (4.76)$$

และฟังก์ชันคลื่น

$$\psi_n(x) = B_n e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right) \quad (4.77)$$

เมื่อ $n = 1, 3, 5, \dots$ และ $H_n(\xi)$ เรียกว่า พหุนามเฮอร์มิต (Hermite polynomial) อันดับที่ n และได้ค่าคงตัวที่ทำให้เป็นคลื่นปกติ (normalization constant)

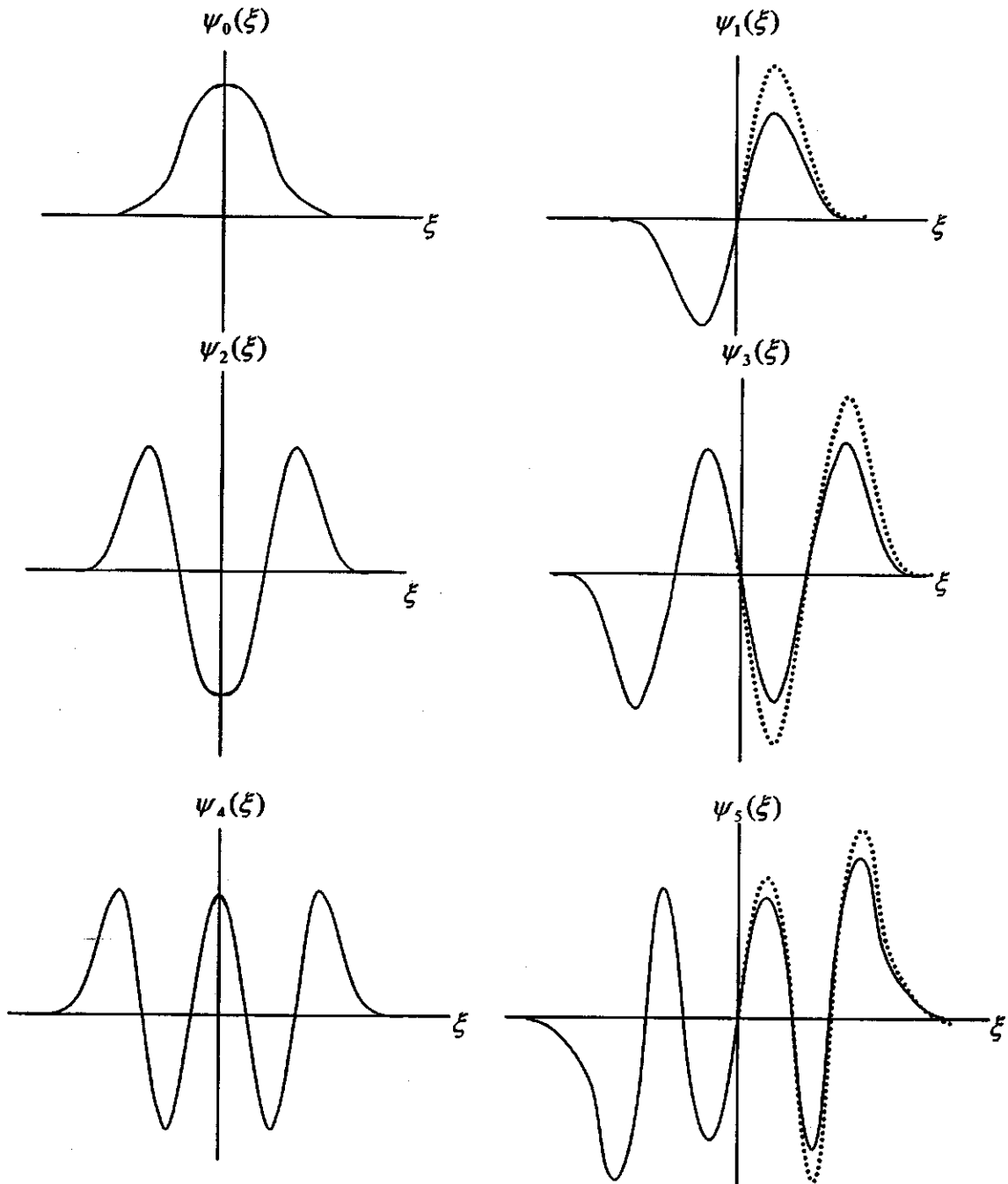
$$B_n = \left[\frac{1}{(2^{n-1})n! \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (4.78)$$

4.3 เปรียบเทียบผลการคำนวณ และกราฟที่ได้ ระหว่างฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์กับกึ่งฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์

ตารางที่ 2 เปรียบเทียบตัวแปรกระจาย ฟังก์ชันคลื่น ระดับพลังงานที่เป็นไปได้และปริมาณต่างๆ ระหว่างฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์กับกึ่งฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์

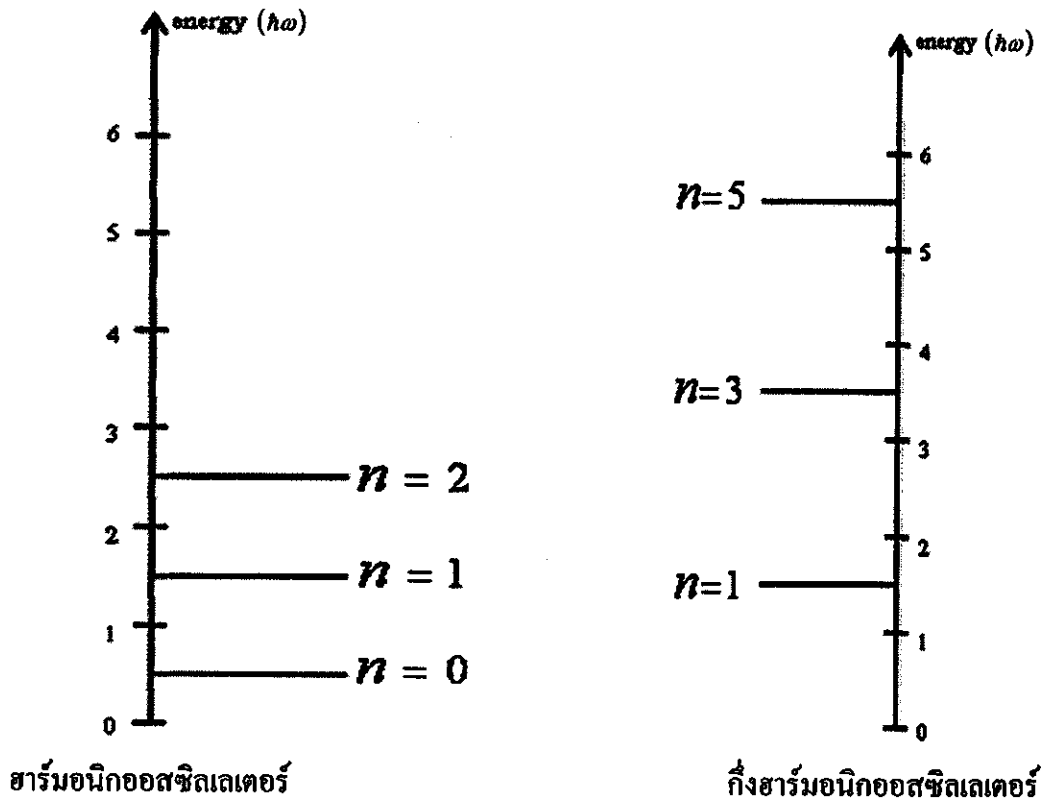
	ฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์	กึ่งฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์
ตัวแปรกระจาย $K(b, a)$	$\left(\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin \omega T}\right)^{\frac{1}{2}} \times \left\{ e^{\left(\frac{im\omega}{2\hbar \sin \omega T}(x_a^2 + x_b^2) \cos \omega T\right)} \right\} \left\{ e^{\left(\frac{im\omega x_a x_b}{\hbar \sin \omega T}\right)} \right\}$	$\left(\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin \omega T}\right)^{\frac{1}{2}} \left\{ e^{\left(\frac{im\omega}{2\hbar \sin \omega T}(x_a^2 + x_b^2) \cos \omega T\right)} \right\} \times \left\{ e^{\left(\frac{-im\omega x_a x_b}{\hbar \sin \omega T}\right)} - e^{\left(\frac{im\omega x_a x_b}{\hbar \sin \omega T}\right)} \right\}$
ฟังก์ชันคลื่น	$\psi_n(x) = A_n e^{-m\omega x^2/2\hbar} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)$	$\psi_n(x) = A_n e^{-m\omega x^2/2\hbar} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)$
เลขควอนตัม (n)	$n = 0, 1, 2, 3, \dots$	$n = 1, 3, 5, 7, \dots$
ค่าคงที่การเป็นคลื่นปกติ (A_n)	$A_n = \left[\frac{1}{2^n n!} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \right]^{1/2}$	$A_n = \left[\frac{1}{2^{n-1} n!} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \right]^{1/2}$
พลังงานที่เป็นไปได้ (E_n)	$E_n = (n+1/2)\hbar\omega$	$E_n = (n+1/2)\hbar\omega$

ภาพที่ 4.2 แสดงฟังก์ชันคลื่นอย่างคร่าวๆ 5 ลำดับแรกของฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์ (เส้นทึบ) และ 3 ลำดับแรกของกึ่งฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์ (เส้นประ) (ในที่นี้ $\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$)



แอมพลิจูดของคลื่นที่สถานะเดียวกันสำหรับปัญหาทั้งสองนั้น พบว่าแอมพลิจูดของคลื่นในปัญหาฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์มีค่ามากกว่า เนื่องจากขอบเขตของปัญหาดังกล่าวลดลงเป็นครึ่งหนึ่งของปัญหาฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์

4.4 เปรียบเทียบระดับพลังงานที่ได้ ระหว่างฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์กับกึ่งฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์



ภาพที่ 4.3 แสดงการเปรียบเทียบระดับพลังงานที่เป็นไปได้ 3 สถานะ

ระดับพลังงานของปัญหาทั้งสอง โดยเส้นล่างสุดแทนระดับพลังงานสถานะพื้น เส้นกลางแทนสถานะกระตุ้นที่หนึ่ง เส้นบนสุดแทนสถานะกระตุ้นที่สอง พบว่าระยะห่างระหว่างระดับพลังงานหรือการแยกชั้นของระดับพลังงานสำหรับปัญหากึ่งฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์แสดงได้เด่นชัดกว่าปัญหาฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์ ทั้งนี้เพราะขอบเขตของปัญหากึ่งฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์ลดลงครึ่งหนึ่ง

บทที่ 5

สรุปและอภิปรายผล

ผลเฉลยของปัญหาแก๊งฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์ เมื่อคำนวณโดยใช้ทฤษฎีของชเรอดิงเงอร์ เท่ากันทุกประการกับผลเฉลยที่ได้จากการคำนวณโดยใช้ทฤษฎีอินทิกรัลตามเส้นทางของฟายน์แมนร่วมกับวิธีจุดภาพกระจกเงา โดยที่รูปแบบทางคณิตศาสตร์ของตัวแปรกระจายที่ได้ เป็นดังนี้

$$K(b, a) = \left(\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega T} \right)^{\frac{1}{2}} \times \left\{ \exp \left(\frac{im\omega}{2\hbar \sin \omega T} (x_a^2 + x_b^2) \cos \omega T \right) \right\} \left\{ \exp \left(\frac{-im\omega x_a x_b}{\hbar \sin \omega T} \right) - \exp \left(\frac{im\omega x_a x_b}{\hbar \sin \omega T} \right) \right\}$$

โดยที่ $T = t_b - t_a$

โดยฟังก์ชันคลื่นของแก๊งฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์มีรูปแบบทางคณิตศาสตร์เป็น

$$\psi_n(x) = B_n e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right)$$

เมื่อทำการเปรียบเทียบกับปัญหาฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์จะพบว่าฟังก์ชันคลื่นมีรูปแบบทางคณิตศาสตร์เหมือนกันจะต่างกันไปที่เพียงแต่ ค่าคงที่ของการเป็นคลื่นปกติ

$$B_n = \left[\frac{1}{(2^{n-1})n!} \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} \right]^{\frac{1}{2}} \text{ เท่านั้น สำหรับระดับพลังงานพบว่าในปัญหาแก๊งฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์และฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์นั้นมีรูปแบบทางคณิตศาสตร์ของระดับพลังงาน}$$

$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega$ เหมือนกัน ทว่าต่างกันเพียงเลขควอนตัม n สำหรับปัญหาแก๊งฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์นั้น $n = 1, 3, 5, \dots$ ส่วนฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์ $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ ทำให้เราสามารถอธิบาย

ได้ว่า ในปัญหาแก๊งฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์นั้นระยะห่างระหว่างระดับพลังงานของสถานะที่ต่างกันจะกว้างหรือห่างมากกว่าระดับพลังงานในปัญหาฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์ซึ่งเป็นไปตามหลักการทางควอนตัมที่ว่า เมื่อขอบเขตของปัญหายิ่งแคบลงระดับพลังงานของแต่ละสถานะก็ยิ่งกว้างขึ้น

บรรณานุกรม

บรรณานุกรม

- นิคม ชูศิริ. (2539). อินทิกรัลตามเส้นทางของอนุภาคไฟฟ้าภายใต้แรงฮาร์มอนิกและสนามแม่เหล็ก
คงที่. รายงานการวิจัย. สงขลา : มหาวิทยาลัยศรีนครินทรวิโรฒ ภาคใต้.
- นิคม ชูศิริ. (2540). ตัวแปรกระจายของอิเล็กตรอนภายใต้อิทธิพลของแรงฮาร์มอนิก สนามแม่เหล็ก
และสนามไฟฟ้า. รายงานการวิจัย. สงขลา : มหาวิทยาลัยทักษิณ.
- นิคม ชูศิริ. (2541). อินทิกรัลตามเส้นทางของก๊าซอิเล็กตรอนในระบบสองมิติภายใต้อิทธิพลของ
แรงฮาร์มอนิก สนามแม่เหล็ก สนามไฟฟ้าและศักย์ที่ไร้ระเบียบ. รายงานการวิจัย.
สงขลา : มหาวิทยาลัยทักษิณ.
- นิคม ชูศิริ. (2548). กลศาสตร์ควอนตัม:แนวคิดและการประยุกต์ 1. ภาควิชาฟิสิกส์ คณะ
วิทยาศาสตร์. มหาวิทยาลัยทักษิณ.
- นิพนธ์ ตั้งประเสริฐ. (2542). กลศาสตร์ควอนตัม 1. ภาควิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์.
มหาวิทยาลัยรามคำแหง.
- วิรุฬห์ สายคณิต. (2525). ทฤษฎีควอนตัม. ภาควิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์. จุฬาลงกรณ์
มหาวิทยาลัย.
- อภิชาติ พัฒนวิริยะพิศาล. (2547). ฟิสิกส์แผนใหม่. ภาควิชาฟิสิกส์และวิทยาศาสตร์ทั่วไป คณะ
วิทยาศาสตร์และเทคโนโลยี. มหาวิทยาลัยราชภัฏสุราษฎร์ธานี.
- Choosiri, N. and Sayakanit, V. (1984). Path Integrals of the Hydrogen Atom. Thai Journal of
Physics., 1(1) , 1-13.
- Feynman, R.P. and Hibbs, A.R. (1965). Quantum Mechanics and Path Integrals.
New York : McGraw-Hill.
- Goodman, M. (1981). Path Integral Solution of the Square Well. Am. J. Phys., 49(9),
843-847.
- Gradshteyn, I.S. and Ryzhik, I.M. (1965). Table of Integrals, Series and Products. 4th ed.
New York : Academic Press.
- Ho, R. and Inomata, A. (1982). Phys. Rev. Lett., 48(4), 231.
- Liboff, R.L. (1993). Introductory Quantum Mechanics. Reading : Addison-Wesley.
- Messiah, A. (1961). Quantum Mechanics I. New York : Wiley.
- Pauli, W. (1952). Ausgewalte Kapitel de Feldquantisierung (Lecture note). Zurich : ETH. 139.

Sa-yakanit, V., Choosiri, N., and Robkob, U. (1987). Exact Propagator of a Two-Dimensional Random System. Physical Rev. B., 37(18), 10851-10853.

Sa-yakanit, V., Choosiri, N., and Glyde, H.R. (1988). Density of States between Landau Levels in a Two-Dimensional Electron Gas. Phys. Rev. B., 38(2), 1340-1343.

van Vleck, J.H. (1978). Proc. Natn. Acad. Sci., 14,178.

ภาคผนวก

ภาคผนวก

Hermite Polynomials

สมการเชิงอนุพันธ์ของ Hermite (Hermite's differential equation)

$$y'' - 2xy' + 2ny = 0 \quad (1)$$

ถ้า $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ ดังนั้นผลเฉลยของสมการเชิงอนุพันธ์ของ Hermite คือ พหุนาม Hermite (Hermite Polynomials) $H_n(x)$ ลำดับที่ n

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x^2}) \quad (2)$$

สามารถเขียนตัวอย่างพหุนาม Hermite ลำดับที่ $n = 1-7$ ได้ดังนี้

$$H_0(x) = 1$$

$$H_1(x) = 2x$$

$$H_2(x) = 4x^2 - 2$$

$$H_3(x) = 8x^3 - 12x$$

$$H_4(x) = 16x^4 - 48x^2 + 12$$

$$H_5(x) = 32x^5 - 160x^3 + 120x$$

$$H_6(x) = 64x^6 - 480x^4 + 720x^2 - 120$$

$$H_7(x) = 128x^7 - 1344x^5 + 3360x^3 - 1680x \quad (3)$$

ประวัติย่อผู้วิจัย

ชื่อ - ชื่อสกุล	นายเอกพันธ์ จันทอง
วัน เดือน ปีเกิด	4 พฤศจิกายน พ.ศ. 2526
สถานที่เกิด	30 หมู่ 2 ตำบลบ้านพี่ อำเภอบ้านหลวง จังหวัดน่าน รหัสไปรษณีย์ 55190
สถานที่อยู่ปัจจุบัน	140 หมู่ 4 ตำบลเขารูปช้าง อำเภอเมือง จังหวัดสงขลา รหัสไปรษณีย์ 90000
ตำแหน่งหน้าที่การงานปัจจุบัน	อาจารย์
สถานที่ทำงานปัจจุบัน	แผนกวิชาวิทยาศาสตร์ คณะศิลปศาสตร์ประยุกต์ มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีราชมงคลศรีวิชัย
ประวัติการศึกษา	
พ.ศ. 2548	หลักสูตรวิทยาศาสตรบัณฑิต สาขาวิชาฟิสิกส์ มหาวิทยาลัยทักษิณ จังหวัดสงขลา
พ.ศ. 2548	หลักสูตรประกาศนียบัตรวิชาชีพครู มหาวิทยาลัยสุโขทัยธรรมาธิราช
พ.ศ. 2551	หลักสูตรวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต สาขาวิชาฟิสิกส์ มหาวิทยาลัยทักษิณ จังหวัดสงขลา

แหล่งเผยแพร่วิทยานิพนธ์

- ร่วมเสนอผลงานประเภทโปสเตอร์ในการเสนอผลงานของสมาคมฟิสิกส์ไทย (SPC 2008) ระหว่างวันที่ 20-22 มีนาคม 2551 ณ เขาใหญ่ จังหวัดนครราชสีมา
เรื่อง Path Integral for the Semi - Harmonic Oscillator
- ร่วมเสนอผลงานประเภทบรรยายในการประชุมวิชาการและเสนอผลงานวิจัย มหาวิทยาลัยทักษิณ ครั้งที่ 18 ระหว่างวันที่ 25-26 กันยายน 2551 ณ โรงแรมกรีนเว็ลด์ จังหวัดสงขลา เรื่อง Path Integral for the Semi - Harmonic Oscillator
- ร่วมเสนอผลงานประเภทโปสเตอร์ในการประชุมวิชาการวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยีแห่งประเทศไทย ครั้งที่ 34 (วทท. 34) ระหว่างวันที่ 31 ตุลาคม - 2 พฤศจิกายน 2551 ณ ศูนย์ประชุมแห่งชาติสิริกิติ์ จังหวัดกรุงเทพมหานคร เรื่อง Path Integral for an Harmonic Oscillator in the Presence of Constant Force

4. ลงตีพิมพ์เป็นบทความวิจัยในวารสารมหาวิทยาลัยทักษิณ (Junpong, E., Thawonsuwan, A., Thipaksorn, W. and Choosiri, N. (2008). Path Integral for a Semi – Harmonic Oscillator. Thaksin J., 11(2), 24 - 29.)