

กลศาสตร์ควอนตัมเบื้องต้น

พิมพ์ครั้งที่ 2

Introductory
Quantum Mechanics
2nd edition



ดร. ธิติ บวรรัตนารักษ์
ดร. นคร ไพศาลกิตติสกุล

กลศาสตร์ควอนตัมเบื้องต้น
พิมพ์ครั้งที่ 2

Introductory
Quantum Mechanics
2nd edition

ดร. ธิติ บวรรัตนารักษ์
ดร. นคร ไพศาลกิตติสกุล

ข้อมูลทางบรรณานุกรมของสำนักหอสมุดแห่งชาติ

National Library of Thailand Cataloging in Publication Data

ธิตี บวรรัตนารักษ์.

กลศาสตร์ควอนตัมเบื้องต้น. -- พิมพ์ครั้งที่ 2. -- กรุงเทพฯ : โรงพิมพ์แห่ง
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย, 2559.

252 หน้า.

1. ทฤษฎีควอนตัม. I. นคร ไพศาลกิตติสกุล, ผู้แต่งร่วม. II. ชื่อเรื่อง.

530.12

ISBN 978-616-423-718-6

สงวนลิขสิทธิ์ตามพระราชบัญญัติลิขสิทธิ์ (ฉบับเพิ่มเติม) พ.ศ. 2558

ห้ามลอกเลียนแบบหรือคัดลอกส่วนหนึ่งส่วนใดของหนังสือเล่มนี้

โดยไม่ได้รับอนุญาตจากเจ้าของลิขสิทธิ์

พิมพ์ครั้งที่ 2 พฤษจิกายน 2559

จำนวนพิมพ์ 1,000 เล่ม

จัดทำโดย นคร ไพศาลกิตติสกุล

ภาควิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ถนนพญาไท แขวงวังใหม่ เขตปทุมวัน กรุงเทพฯ 10330

โทรศัพท์ 0-2218-7542 โทรสาร 0-2253-1150

พิมพ์ที่ โรงพิมพ์แห่งจุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย [6001-056/1,000]

โทร. 0-2215-3549-50 โทรสาร 0-2215-3612

นายอรรณพ หาญสืบสาย ผู้พิมพ์โฆษณา

<http://www.cuprint.chula.ac.th>

คำนำ

หลังจากที่ผู้เขียน ได้ใช้หนังสือเล่มที่พิมพ์ครั้งแรก ประกอบการเรียนการสอนในห้องเรียน ได้พบว่า มีข้อบกพร่องหลายแห่ง ผู้เขียนจึงได้ใช้โอกาสในการพิมพ์ครั้งที่ 2 นี้ ปรับปรุงแก้ไขข้อบกพร่องเหล่านั้น พร้อมกันนี้ได้เพิ่มเติมและปรับปรุง เนื้อหา ตัวอย่าง แบบฝึกหัด รวมถึงรูปภาพประกอบ เพื่อเสริมความเข้าใจของผู้อ่าน ในเนื้อหาที่มีอยู่เดิม และเพื่อความครบถ้วนของบทเรียน นอกจากนี้ ยังได้เพิ่มเฉลยแบบฝึกหัดบางข้อไว้ เพื่อประโยชน์ในการตรวจสอบวิธีทำ หรือจะใช้เป็นแนวทาง ในการเรียนรู้เพิ่มเติมของผู้อ่าน อย่างไรก็ตาม หากผู้อ่านยังพบสิ่งใดบกพร่อง หรือผิดพลาด หรือมีข้อเสนอแนะ ที่คิดว่าเป็นประโยชน์ต่อหนังสือเล่มนี้ ขอได้โปรดแจ้งให้ผู้เขียนทราบ เพื่อที่จะได้ทำการแก้ไขปรับปรุงให้เหมาะสมสำหรับการจัดพิมพ์ครั้งต่อไป จักขอบคุณยิ่ง

ดร. ธิติ บวรรัตนรักษ์

ดร. นคร ไพศาลกิตติสกุล

พฤศจิกายน พ.ศ. 2559

คำนำ (พิมพ์ครั้งที่ 1)

กลศาสตร์ควอนตัมเป็นวิชาพื้นฐานที่มีความสำคัญมากวิชาหนึ่งในสาขาวิชาฟิสิกส์ มีรากฐานมาจากการทดลองในระดับอะตอม รวมไปถึงแนวคิดของนักฟิสิกส์และนักปราชญ์มากมายหลายคน ตั้งแต่ต้นคริสต์ศตวรรษที่ 19 กลศาสตร์ควอนตัมสามารถอธิบายผลการทดลองและปรากฏการณ์ที่เกี่ยวข้องกับอะตอมหรือระบบที่มีขนาดเล็กๆ ในระดับของอะตอมได้เป็นอย่างดี นอกจากนี้ เทคโนโลยีและอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์ที่อยู่แวดล้อมตัวเราทุกวันนี้ ล้วนมีความข้องเกี่ยวกับฟิสิกส์ของอิเล็กตรอนและอะตอมทั้งสิ้น ดังนั้น ไม่เพียงแต่นักฟิสิกส์เท่านั้น ที่จำเป็นต้องมีความรู้ทางกลศาสตร์ควอนตัม นักเคมี นักวัสดุศาสตร์ วิศวกร บุคลากรที่ทำงานเกี่ยวกับเทคโนโลยีนาโน ฯลฯ ควรต้องมีความรู้ทางกลศาสตร์ควอนตัมพื้นฐานเช่นกัน

หนังสือกลศาสตร์ควอนตัมพื้นฐานเล่มนี้ มีเนื้อหาที่ได้จากการรวบรวม และเรียบเรียงมาจากการบรรยายในรายวิชากลศาสตร์ควอนตัม 1 (2304304) ของภาควิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย ซึ่งผู้เขียนได้มีโอกาสร่วมกันในหลายภาคการศึกษา รวมถึงส่วนหนึ่งของวิชากลศาสตร์ควอนตัมสำหรับวิศวกร ของสาขาวิชาวิศวกรรมนาโน หลักสูตรนานาชาติ คณะวิศวกรรมศาสตร์ อุบลราชธานีอย่างหนึ่งที่พบใน

การเรียนการสอนรายวิชาดังกล่าว คือการขาดแคลนหนังสืออ่านประกอบที่เป็นภาษาไทย ซึ่งแท้ที่จริงแล้ว มีหนังสือ กลศาสตร์ควอนตัม ที่เป็นภาษาอังกฤษ หลาย เล่ม ที่เขียนไว้ได้ดีมาก แต่อาจเนื่องมาจากอุปสรรคทางภาษาและแนวความคิดที่ซับซ้อนของวิชา อีกทั้งหนังสือเหล่านั้นมีเนื้อหาหลักซึ่งมากเกินไป หรือในบางเล่มก็ขาดเนื้อหาบางหัวข้อสำหรับรายวิชา จึงทำให้การเรียนรู้ของนิสิตจากการบรรยายในห้องเรียน ไม่ประสบผลสัมฤทธิ์อย่างเต็มที่ หนังสือเล่มนี้จึงได้ถูกจัดทำขึ้นมา โดยให้มีเนื้อหาครอบคลุมทุกๆ หัวข้อที่ระบุไว้ในรายวิชาดังกล่าว เพื่อใช้ประกอบการเรียนการสอนในหนึ่งภาคการศึกษา ซึ่งถือได้ว่าเป็นความรู้พื้นฐานของวิชากลศาสตร์ควอนตัม อย่างไรก็ตาม ผู้เขียนเห็นว่าเนื้อหาในหนังสือเล่มนี้น่าจะเป็นประโยชน์กับ นิสิตวิทยาศาสตร์ในสาขาวิชาเคมี นิสิตวิศวกรรมศาสตร์ในสาขาวิชาอิเล็กทรอนิกส์และเทคโนโลยีนาโนด้วยเช่นกัน อีกทั้งหวังว่าจะเป็นประโยชน์ต่อผู้อ่านที่ต้องการเตรียมความพร้อมในการศึกษาขั้นสูงต่อไปด้วย

ผู้เขียนขอขอบคุณ ภาควิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย ที่มอบหมายให้สอนรายวิชาดังกล่าว เป็นโอกาสให้ผู้เขียนได้เตรียมเอกสารคำสอน จนได้ถูกพัฒนาเป็นหนังสือเล่มนี้ขึ้นมา ความดีของหนังสือ หากจะมีอยู่บ้าง ขอมอบให้กับคณาจารย์ ผู้ประสิทธิ์ประสาทวิชาความรู้ให้กับผู้เขียนทุกๆ ท่าน หากผู้อ่านมีข้อเสนอแนะ คำติชมหรือคำถาม กรุณาส่งอีเมลมาได้ที่ thiti.b@chula.ac.th หรือ pnakorn@gmail.com หนังสือเล่มนี้จัดทำขึ้นด้วยโปรแกรม LaTeX โดยใช้ style file ของ ดร. ทรงเกียรติ สุ่มธกิจการ ผู้เขียนจึงขอขอบคุณด้วยความซาบซึ้งใจไว้ ณ ที่นี้ด้วย สุดท้ายนี้ ผู้เขียนขอขอบคุณครอบครัวและกัลยาณมิตรหลายท่านซึ่งไม่สามารถกล่าวชื่อได้หมดในที่นี้ ที่คอยสนับสนุน ให้กำลังใจ ให้คำติชมและแนะนำ จนหนังสือเล่มนี้เสร็จสมบูรณ์

ดร. ธิติ บวรรัตนรักษ์

ดร. นคร ไพศาลกิตติสกุล

ภาควิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์

จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

มกราคม พ.ศ. 2557



สารบัญรูป

1.1	ฟังก์ชันไอเกนและการกระจายของโอกาสของการพบนุภาคในบ่อศักย์ แบบอนันต์	24
1.2	ฟังก์ชันไอเกนและการกระจายของโอกาสในการพบนุภาคสำหรับบ่อศักย์ แบบอนันต์ที่สมมาตร	27
1.3	แผนภาพสถานะที่เป็นไปได้ของอิเล็กตรอนอิสระในปริภูมิของเวกเตอร์คลื่น	44
2.1	บ่อศักย์แบบสี่เหลี่ยมหนึ่งมิติ	48
2.2	การวิเคราะห์คำตอบแบบกราฟของสถานะกักขังในบ่อศักย์แบบสี่เหลี่ยม	51
2.3	รูปร่างฟังก์ชันไอเกนของสถานะกักขังสำหรับบ่อศักย์แบบสี่เหลี่ยม	56
2.4	บ่อศักย์อนันต์ฝั่งเดียวแบบสี่เหลี่ยม	57
2.5	บ่อศักย์เดี่ยวแบบติเรคเดลต้า	59
2.6	ฟังก์ชันไอเกนของสถานะกักขัง สำหรับบ่อศักย์แบบติเรคเดลต้า	62
2.7	บ่อศักย์คู่แบบติเรคเดลต้า	63
2.8	วิธีเชิงกราฟสำหรับคำตอบที่เป็นฟังก์ชันคู่ของบ่อศักย์คู่แบบติเรคเดลต้า	65
2.9	วิธีเชิงกราฟสำหรับคำตอบที่เป็นฟังก์ชันคี่ของบ่อศักย์คู่แบบติเรคเดลต้า	66

2.10 ฟังก์ชันไอเกนของสถานะกักขังในบ่อศักย์คู่แบบดิเรคเดลต้า	68
2.11 พลังงานศักย์แบบหวีของฟังก์ชันแบบดิเรคเดลต้า	71
2.12 การวิเคราะห์คำตอบเชิงกราฟ สำหรับพลังงานศักย์แบบหวีของฟังก์ชันดิเรคเดลต้า	73
2.13 แผนภาพพลังงานจากบ่อศักย์ที่มีลักษณะเป็นคาบ	74
2.14 ระดับพลังงานไอเกนและฟังก์ชันไอเกนของบ่อศักย์ฮาร์โมนิก	80
3.1 แผนภาพของศักย์แบบขั้น	86
3.2 ฟังก์ชันคลื่นของอนุภาคที่วิ่งผ่านศักย์แบบขั้น	89
3.3 แผนภาพของกำแพงศักย์แบบสี่เหลี่ยม	92
3.4 ฟังก์ชันคลื่นของอนุภาคที่วิ่งตกกระทบกำแพงศักย์แบบสี่เหลี่ยม	95
3.5 โอกาสของการส่งผ่านสำหรับกำแพงศักย์แบบสี่เหลี่ยม	96
3.6 แผนภาพของบ่อศักย์แบบสี่เหลี่ยม	97
4.1 ผลของตัวดำเนินการเปลี่ยนระดับ ต่อสถานะไอเกนพลังงานของตัวสั่นแบบฮาร์โมนิก	116
5.1 ผลของตัวดำเนินการเปลี่ยนระดับ $\hat{L}_\pm$ ต่อสถานะไอเกนของโมเมนตัมเชิงมุม	132
5.2 โมเมนตัมเชิงมุมของสถานะที่มีเลขควอนตัม $\ell = 2$	136
5.3 แผนภาพของ $ Y_\ell^m(\theta, \phi) ^2$ ในปริภูมิสามมิติ	145
6.1 ฟังก์ชันตามแนวรัศมีของอิเล็กตรอนในอะตอมไฮโดรเจน สำหรับ $n = 1$ ถึง 3	157
6.2 การกระจายของโอกาสในการพบอิเล็กตรอนในอะตอมไฮโดรเจนตามแนวรัศมี สำหรับ $n = 1$ ถึง 3	159
6.3 กราฟแสดงฟังก์ชันการกระจายตามแนวรัศมีสำหรับวงโคจร $3s$ $3p$ และ $3d$ ในอะตอมของไฮโดรเจน	160
7.1 แผนภาพการทดลองของ Stern-Gerlach	173
7.2 โมเมนต์แม่เหล็กที่เกิดจากกระแสไฟฟ้าไหลวนเป็นวงกลม	186

7.3 การหมุนสายของสปิน $\langle S_x \rangle$ และ $\langle S_y \rangle$	190
9.1 ภาพประกอบเฉลยแบบฝึกหัด 2.8	221
9.2 ภาพประกอบเฉลยแบบฝึกหัด 3.2	225



สารบัญ

คำนำ	i
สารบัญรูป	v
สารบัญ	viii
1 พื้นฐาน	1
1.1 กลุ่มคลื่น	3
1.2 สมการชโรดิงเงอร์	5
1.3 ฟังก์ชันคลื่น	10
1.4 หลักการพื้นฐานของกลศาสตร์ควอนตัม	15
1.5 สมมาตรของฟังก์ชันไอเกนของพลังงาน	18
1.6 บ่อศักย์แบบอนันต์	20
1.7 หลักการกระจาย	29
1.8 สมการชโรดิงเงอร์ในปริภูมิสูงขึ้น	36

1.9	แก๊สของอิเล็กทรอนิกส์	41
2	สถานะกักขังภายในบ่อศักย์แบบต่างๆ	47
2.1	บ่อศักย์แบบสี่เหลี่ยม	48
2.2	บ่อศักย์แบบอนันต์ฝั่งเดียว	56
2.3	บ่อศักย์แบบดิเรคเดลต้า	59
2.4	บ่อศักย์คู่แบบดิเรคเดลต้า	62
2.5	บ่อศักย์แบบที่มีลักษณะเป็นคาบ	68
2.6	ตัวสั้นแบบฮาร์โมนิก	76
3	ปรากฏการณ์การทะลุผ่าน	81
3.1	กระแสของโอกาส	82
3.2	ศักย์แบบขั้น	85
3.3	บ่อศักย์แบบดิเรคเดลต้า	90
3.4	กำแพงศักย์แบบสี่เหลี่ยม	92
4	วิธีตัวดำเนินการ	99
4.1	สัญลักษณ์ของดิเรค	100
4.2	ตัวสังเกตร่วม	110
4.3	การแก้ปัญหการสั้นแบบฮาร์โมนิก	113
5	โมเมนตัมเชิงมุม	123
5.1	รูปแบบตัวดำเนินการและความสัมพันธ์การสลับที่	125
5.2	ค่าไอเกนและสถานะไอเกนของโมเมนตัมเชิงมุม	129
5.3	ตัวดำเนินการเปลี่ยนระดับ	137
5.4	ฟังก์ชันไอเกนของตัวดำเนินการโมเมนตัมเชิงมุม	139
6	ระดับพลังงานของอะตอมคล้ายไฮโดรเจน	147
6.1	ศักย์ศูนย์กลาง	148

6.2	สมการแนวรัศมี	150
6.3	คำตอบของสมการแนวรัศมีของอะตอมคล้ายไฮโดรเจน	151
6.4	ฟังก์ชันไอเกนและสถานะทับซ้อน	155
6.5	การกระจายของโอกาสตามแนวรัศมี	159
7	เมตริกซ์ในกลศาสตร์ควอนตัม	161
7.1	รูปแบบของตัวดำเนินการและสถานะทางควอนตัม	162
7.2	สปิน	173
7.3	สถานะไอเกนและค่าไอเกนของตัวดำเนินการสปิน	176
7.4	การหมุนสายของสปิน	185
8	วิธีการประมาณ	191
8.1	หลักการแปรผัน	192
8.2	ทฤษฎีการรบกวนแบบไม่ขึ้นกับเวลา	197
9	เฉลยแบบฝึกหัด	209
	เอกสารอ้างอิง	237
	บรรณานุกรม	239

พื้นฐาน (Fundamentals)

ในตอนต้นคริสต์ศตวรรษ 1900 การทดลองทางวิทยาศาสตร์มีความล้าหน้าอย่างก้าวกระโดด อาจกล่าวได้ว่าเป็นยุคของการปฏิวัติทางวิทยาศาสตร์ โดยเฉพาะอย่างยิ่งสำหรับสาขาวิชาฟิสิกส์ ผลการทดลองและปรากฏการณ์หลายอย่าง ไม่สามารถอธิบายได้ด้วยความรู้ทางฟิสิกส์ที่มีมาแต่เดิม ซึ่งประกอบด้วยแขนงวิชา กลศาสตร์แบบฉบับ (Classical mechanics) ทฤษฎีคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าของแมกซ์เวล (Electromagnetic theory) กลศาสตร์สถิติและฟิสิกส์ความร้อน (Statistical mechanics and Thermal physics) รวมเรียกว่า “ฟิสิกส์แบบฉบับ” (Classical physics) แนวความคิดใหม่จึงเป็นสิ่งที่จำเป็นเพื่อใช้อธิบายและทำความเข้าใจปรากฏการณ์ฟิสิกส์ในระดับอะตอมเหล่านั้น ตัวอย่างของการทดลองที่มีความสำคัญต่อกำเนิดและแนวคิดของวิชากลศาสตร์ควอนตัม ซึ่งเป็นที่รู้จักกันดี ได้แก่¹

- การแผ่รังสีของวัตถุดำ (Blackbody radiation)
- ปรากฏการณ์โฟโตอิเล็กทริก (Photoelectric effect)
- การกระเจิงของคอมป์ตัน (Compton scattering)

¹รายละเอียดของการทดลองเหล่านี้ สามารถศึกษาเพิ่มเติมได้จากหนังสือจำพวกฟิสิกส์ยุคใหม่ (Modern Physics) ทั่วไป

- การเลี้ยวเบนและการแทรกสอดของอิเล็กตรอน
(Electron diffraction and interference)
- สเปกตรัมแบบเส้นจากอะตอม (Atomic line spectra)

ผล การสังเกต จาก ผล การทดลอง เหล่านี้ สามารถ อธิบาย ได้ ด้วย แนวคิด ใหม่ ที่ เรียกว่า “สมบัติทวิภาพของคลื่นและอนุภาค” (wave-particle duality) กล่าวคือในระดับอะตอม คลื่นประพัตต์ัวเป็นอนุภาคได้และอนุภาคสามารถประพัตต์ัวเป็นคลื่นได้เช่นกัน แพลงค์ (Planck) ไอสไตน์ (Einstein) และคอมป์ตัน (Compton) ได้ใช้แนวคิดที่ว่า เมื่อคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้ามีอันตรกิริยากับอนุภาคในระดับของอะตอม จะประพัตต์ัวเสมือนอนุภาคที่เรียกว่า “โฟตอน” (photon) ซึ่งมีพลังงานแปรผัน ตรงกับ ความถี่ ของ คลื่น แทนที่จะแปรผันตรงกับแอมพลิจูดของคลื่นยกกำลังสอง เหมือนดังในกรณีของคลื่นปกติ ในขณะที่เดอ บรอยด์ (de Broglie) เสนอว่า อนุภาคหรือวัตถุที่เคลื่อนที่ (มีโมเมนตัม) ประพัตต์ัวเป็นคลื่นด้วย โดยมีความยาวคลื่นที่แปรผกผันกับขนาดของโมเมนตัม เรียกว่า “ความยาวคลื่นของเดอ บรอยด์” (de Broglie’s wavelength) ความเป็นคลื่นของอนุภาค ยืนยันจากรีการแทรกสอด และการเลี้ยวเบนของอิเล็กตรอน เมื่อเคลื่อนที่ผ่านช่องแคบ เล็กๆ

นอกจากนี้แล้ว ผลการสังเกตพลังงานที่อะตอมปลดปล่อยออกมา ซึ่งอยู่ในรูปของคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าภายหลังที่ได้รับพลังงานจากภายนอก พบว่าความยาวคลื่น (หรือความถี่) ของคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าที่ปลดปล่อยออกมานั้น มีค่าเฉพาะบางค่า กล่าวคือ มีค่าไม่ต่อเนื่องและขึ้นกับชนิดของอะตอม จึงเรียกว่า “สเปกตรัมแบบเส้น” (Line spectra) ในขณะที่แถบสเปกตรัมจากแสงที่มาจากดวงอาทิตย์ที่เห็นจากการหักเหผ่านแท่งปริซึม แก้ว มีลักษณะต่อเนื่องคล้ายกับแถบรุ้งกินน้ำ ความไม่ต่อเนื่องของพลังงานที่ได้ ทำให้เกิดแนวคิดที่ว่าพลังงานของอิเล็กตรอนภายในอะตอมมีค่าไม่ต่อเนื่อง หรือแสดงว่าอิเล็กตรอนภายในอะตอมจะต้องมีพลังงานค่าเฉพาะ แนวคิดเช่นนี้ไม่สามารถอธิบายได้ด้วยฟิสิกส์แบบฉบับ เนื่องจากไม่มีสถานการณ์ที่พลังงานของอนุภาค จะต้องมีความจำเพาะบางค่าและมีค่าไม่ต่อเนื่อง เพื่อที่จะอธิบายผลการทดลองเหล่านี้ แนวคิดใหม่สำหรับอนุภาคและคลื่นในระดับของอะตอม จึงได้ถูกนำเสนอขึ้นมา

1.1 กลุ่มคลื่น (Wavepacket)

สมบัติทวิภาพของคลื่นและอนุภาค ให้แนวคิดว่า อนุภาคอาจแสดงด้วยปริมาณของคลื่นได้ เมื่อเริ่มพิจารณา จากคลื่นแบบระนาบที่มีเลขคลื่น

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (1.1)$$

โดย λ คือความยาวคลื่น สมการคลื่นแบบระนาบที่เคลื่อนที่ไปตามแกน $+x$ คือ

$$\psi_k(x, t) = A \sin(kx - \omega t) \quad \text{หรือ} \quad \psi_k(x, t) = B \cos(kx - \omega t) \quad (1.2)$$

โดยที่ $\omega = 2\pi\nu$ คืออัตราเร็วเชิงมุมของคลื่น และ ν คือความถี่ของคลื่น รูปแบบของสมการคลื่นแบบระนาบทั้งสองแบบ สามารถเขียนรวมได้ในรูปแบบ ที่จะใช้ต่อไปได้เป็น

$$\psi_k(x, t) = C e^{i(kx - \omega t)} \quad (1.3)$$

โดย C แทนปริมาณที่เรียกว่า “แอมพลิจูด” หรืออำนาจของคลื่น ส่วนจริงหรือส่วนจินตภาพ สำหรับ $\psi_k(x, t)$ สามารถเลือกได้ตามฟังก์ชันที่ต้องการ²

คลื่นระนาบ $\psi_k(x, t)$ มีค่าไม่ขึ้นกับพิกัด y - z บนระนาบ x ใดๆ เมื่อนำคลื่นระนาบที่มีเลขคลื่น k ต่างๆ มารวมกัน โดยมีค่าถ่วงน้ำหนักเป็นฟังก์ชันที่ขึ้นกับเลขคลื่น $A(k)$ จะได้

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} A(k) e^{i(kx - \omega t)} dk \quad (1.4)$$

ซึ่งเป็นปริมาณที่เรียกว่า “กลุ่มคลื่น” (wave packet)

เมื่อใช้สูตรความยาวคลื่นของเดอ บรอยด์

$$\lambda = h/p \quad (1.5)$$

โดยที่ความยาวคลื่น λ เป็นลักษณะของคลื่น โมเมนตัม p อธิบายการเคลื่อนที่ของอนุภาค และ h คือค่าคงที่ของพลังค์ (Planck's constant) มีค่าเป็น 6.626×10^{-34} จูล-วินาที ดังนั้น เลขคลื่นจึงสามารถเขียนได้เป็น

$$k = 2\pi / (h/p) = p/\hbar \quad (1.6)$$

²อาศัยเอกลักษณ์ของออยเลอร์ (Euler's identity) $e^{i\theta} = \cos\theta + i \sin\theta$

โดยที่ $\hbar = h/2\pi$ พิจารณาพลังงานของอนุภาคโฟตอนสำหรับคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าที่เสนอโดยไฮสไตน์ $E = h\nu$ จะได้ว่า

$$\omega = E/\hbar \quad (1.7)$$

ความสัมพันธ์ทั้งสองนี้สามารถใช้แทนค่าพารามิเตอร์ที่บอกลักษณะของคลื่นอันได้แก่เลขคลื่น k และอัตราเร็วเชิงมุม ω ด้วยปริมาณที่เป็นสมบัติของอนุภาคคือ โมเมนตัม p และ พลังงาน E ใน สมการ ของ กลุ่ม คลื่น โดย ทัวไป แล้ว พลังงาน ของ วัตถุ จะสัมพันธ์ กับ โมเมนตัม เสมอ ตัวอย่าง เช่น ใน กรณี ของ อนุภาค อิสระ (free particle) $E = p^2/2m$ เมื่อ แทนพารามิเตอร์ของคลื่น k, ω ด้วยพารามิเตอร์ของอนุภาค p, E ในสมการคลื่นระนาบจะได้

$$\psi_k(x, t) \rightarrow \psi_p(x, t) = C e^{i(px - Et)/\hbar} \quad (1.8)$$

และสมการของกลุ่มคลื่น จะกลายเป็นการรวมกันของคลื่นระนาบ ที่ขึ้นกับโมเมนตัมของอนุภาค ψ_p โดยมีฟังก์ชันถ่วงน้ำหนักเป็น $\phi(p)$

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(p) e^{i(px - Et)/\hbar} dp \quad (1.9)$$

ค่าคงที่ $1/\sqrt{2\pi\hbar}$ เป็นผลของการแปลงแบบฟูเรียร์ ระหว่างฟังก์ชันคลื่นในปริภูมิของตำแหน่ง $\psi(x)$ กับฟังก์ชันคลื่นในปริภูมิของโมเมนตัม $\phi(p)$ โดยที่

$$\phi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x, t=0) e^{-ipx/\hbar} dx \quad (1.10)$$

ค่าคงที่ดังกล่าวที่ปรากฏทั้งใน $\psi(x, t)$ และ $\phi(p)$ สามารถหาได้จากการพิจารณาเงื่อนไขออร์โธโนมอลลิตี (Orthonormality condition) ของฟังก์ชันคลื่น (ซึ่งจะแสดงให้เห็นที่มาในบทที่ 4)

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_p^*(x', t) \cdot \psi_p(x, t) dp = \delta(x - x') \quad (1.11)$$

เมื่อแทนสมการ (1.8) ลงในสมการ (1.11) จะได้ว่า

$$|C|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ip(x-x')/\hbar} dp = \delta(x - x') \quad (1.12)$$

จากรูปแบบหนึ่งของฟังก์ชันดิเรคเดลต้า³

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} dk \quad \text{หรือ} \quad \delta(x-x') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ik(x-x')} dk$$

จึงสามารถเขียนสมการ (1.12) ได้เป็น

$$\hbar|C|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ip(x-x')/\hbar} d\left(\frac{p}{\hbar}\right) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ik(x-x')} dk \quad (1.13)$$

ดังนั้นจึงได้ความสัมพันธ์

$$\hbar|C|^2 = \frac{1}{2\pi} \quad \longrightarrow \quad C = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$$

โดยได้เลือกให้ค่าคงที่ C ให้เป็นจำนวนจริงบวก

ในส่วนต่อไปจะได้แสดงให้เห็นว่า รูปแบบของกลุ่มคลื่นตามสมการ (1.9) สอดคล้องกับสมการที่สำคัญมากในกลศาสตร์ควอนตัม เรียกว่า “สมการชโรดิงเงอร์” (Schrödinger equation)

1.2 สมการชโรดิงเงอร์ (Schrödinger equation)

จากสมการของกลุ่มคลื่นที่ใช้แทนอนุภาค ซึ่งมีพารามิเตอร์ของอนุภาคปรากฏอยู่ ดังสมการ (1.9) จะพยายามหา สมการที่มีคำตอบทั่วไปเป็นสมการของกลุ่มคลื่น โดยให้มีสมบัติหรือความเป็นอนุภาครวมอยู่ด้วย เริ่มต้นจากการพิจารณาอนุภาคอิสระ หรืออนุภาคที่ไม่อยู่ภายใต้พลังงานศักย์รูปแบบใดๆ จึงได้ว่า พลังงานของอนุภาคอิสระ มีเพียงส่วนของพลังงานจลน์เท่านั้น⁴ ซึ่งเขียนได้ว่า

$$E = p^2/2m$$

³จาก R.L. Liboff, Introductory Quantum Mechanics 4th Edition, Addison Wesley, CA USA, 2003, p. 859.

⁴ในที่นี้จะไม่พิจารณาผลของทฤษฎีสัมพัทธภาพพิเศษซึ่งอนุภาคอาจมีอัตราเร็วเข้าใกล้แสง ค่าแก้ไขจากผลดังกล่าวสามารถใช้ทฤษฎีการรบกวนช่วยได้

จากการสังเกตว่าพลังงาน E ในสมการกลุ่มคลื่น อยู่ที่เราเลือกค่าของฟังก์ชันเอ็กโปเนนเชียล จึงได้ทำการหาอนุพันธ์ย่อยเทียบกับตำแหน่ง x ของ $\psi(x, t)$ ในสมการ (1.9) จะได้ว่า

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial x}\psi(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(p) \left[\frac{ip}{\hbar} \right] e^{i(px-Et)/\hbar} dp \\ \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}\psi(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(p) [p] e^{i(px-Et)/\hbar} dp \\ \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 \psi(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(p) [p^2] e^{i(px-Et)/\hbar} dp\end{aligned}$$

ในทำนองเดียวกัน เมื่อทำการหาอนุพันธ์ย่อยเทียบกับเวลา t ของ $\psi(x, t)$ และเพิ่มพจน์ $-iE/\hbar$ เข้าไปภายในการอินทิเกรตด้วย จะได้ว่า

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t}\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(p) [E] e^{i(px-Et)/\hbar} dp \quad (1.14)$$

เมื่อแทน $E = p^2/2m$ และอาศัยอนุพันธ์ย่อยเทียบกับ t จะได้ความสัมพันธ์

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(x, t) = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 \psi(x, t) \quad (1.15)$$

สมการแสดงความสัมพันธ์ของพลังงานอนุภาคอิสระนี้ ทำให้คาดการณ์สำหรับในกรณีของอนุภาคทั่วไปที่อยู่ภายใต้พลังงานศักย์ $V(x, t)$ ว่าควรมีพจน์เพิ่มเติมในส่วน of พลังงานศักย์

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(x, t) = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 \psi(x, t) + V(x, t)\psi(x, t) \quad (1.16)$$

ความสัมพันธ์ที่ได้นี้รู้จักกันในชื่อของ “สมการชโรดิงเจอร์” ถือว่าเป็นสมการพื้นฐานที่สำคัญมากที่สุดในกลศาสตร์ควอนตัม เทียบเคียงได้กับสมการการเคลื่อนที่ของนิวตัน ($\vec{F} = m\vec{a}$) ในกลศาสตร์แบบฉบับ ควรสังเกตว่า ในที่นี้ไม่มีการพิสูจน์สมการชโรดิงเจอร์ที่มาของสมการได้มาจาก การคาดการณ์สมการพลังงานจากกรณีเฉพาะสำหรับอนุภาคอิสระ และขยายต่อไปในกรณีของอนุภาคทั่วไป

สังเกตได้ว่าเมื่อใช้ $(\hbar/i)(\partial/\partial x)$ กระทำกับฟังก์ชันกลุ่มคลื่นจะได้ค่าพารามิเตอร์โมเมนตัมของอนุภาค p ออกมา ดังนั้น “ตัวดำเนินการโมเมนตัม” (momentum operator) $\hat{p}$ จึงนิยามไว้ว่า

$$\hat{p} \equiv \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad (1.17)$$

ในทำนองเดียวกันตัวดำเนินการพลังงาน (หรือรู้จักกันในชื่อ ตัวดำเนินการฮามิลโทเนียน - Hamiltonian operator หรือฮามิลโทเนียน - Hamiltonian) จึงเขียนด้วยสัญลักษณ์ $\hat{H}$ ในกรณีของอนุภาคอิสระ

$$\hat{H} = \hat{p}^2/2m$$

เพื่อให้สมการชโรดิงเงอร์ข้างต้นอยู่ในรูปแบบที่ง่ายขึ้น จะใช้เทคนิคการแยกตัวแปรสำหรับกรณีพิเศษที่พจน์ของพลังงานศักย์ไม่ขึ้นกับเวลา

$$V(x, t) = V(x)$$

โดยเขียน $\psi(x, t)$ ในรูปของผลคูณของฟังก์ชันตัวแปรเดียวสองฟังก์ชัน คือฟังก์ชันที่ขึ้นกับตำแหน่ง u กับฟังก์ชันที่ขึ้นกับเวลา T ซึ่งเขียนได้ว่า

$$\psi(x, t) = u(x)T(t)$$

เมื่อแทนกลับลงไปในสมการ (1.16) จะได้

$$u(x) \left[i\hbar \frac{d}{dt} T(t) \right] = T(t) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} u(x) + V(x)u(x) \right] \quad (1.18)$$

หลังจากการหารตลอดสมการด้วยฟังก์ชัน $u(x)T(t)$ จะได้ว่า

$$\frac{1}{T(t)} \left[i\hbar \frac{d}{dt} T(t) \right] = \frac{1}{u(x)} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} u(x) + V(x)u(x) \right] \quad (1.19)$$

จะสังเกตเห็นได้อย่างชัดเจนว่า ด้านซ้ายของสมการข้างต้น ขึ้นอยู่กับตัวแปรเวลา t เท่านั้น ในขณะที่ด้านขวาของสมการขึ้นกับตัวแปรตำแหน่ง x เท่านั้น เนื่องจากตัวแปรทั้งสองต่างเป็นตัวแปรอิสระ ที่ไม่ขึ้นต่อกัน การที่สมการ (1.19) จะเป็นจริงได้ แสดงว่าแต่ละด้านของสมการจะต้องเป็นค่าคงที่ (ที่ไม่ขึ้นกับตำแหน่งและเวลา) ไม่ใช่ฟังก์ชันของตัวแปรอิสระแต่ละตัว กำหนดให้ค่าคงที่ดังกล่าวเป็น E เมื่อพิจารณาส่วนของสมการที่เกี่ยวกับฟังก์ชัน $T(t)$ จะได้

$$i\hbar \frac{d}{dt} T(t) = ET(t) \quad (1.20)$$

ซึ่งคำตอบของสมการเชิงอนุพันธ์ดังกล่าวอยู่รูป (ละค่าคงที่ที่อาจมีคูณอยู่ด้วย)

$$T(t) = e^{-iEt/\hbar} \quad (1.21)$$

ในส่วนของฟังก์ชันที่เกี่ยวข้องกับตำแหน่งจะได้

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] u(x) = Eu(x) \quad (1.22)$$

ซึ่งไม่สามารถเขียนคำตอบทั่วไปของ $u(x)$ ได้เหมือนกับ $T(t)$ เนื่องจากมีพจน์ของ $V(x)$ ซึ่งมีรูปแบบแตกต่างกันไปตามสถานการณ์ สมการนี้เรียกว่า “สมการชโรดิงเงอร์แบบที่ไม่ขึ้นกับเวลา” (Time-independent Schrödinger equation) เป็นสมการหลักที่ใช้หาค่า E และฟังก์ชัน $u(x)$ สำหรับฟังก์ชันพลังงานศักย์ $V(x)$ ที่กำหนดให้มา เมื่อใช้การวิเคราะห์หน่วย (dimensional analysis) ของสมการ (1.21) และ (1.22) จะพบว่าค่าคงที่ E ที่สมมติขึ้นมาจากเทคนิคการแยกตัวแปรจะมีหน่วยเป็นพลังงาน ($\hbar$ มีหน่วยเป็นผลคูณระหว่างหน่วยของพลังงานกับหน่วยของเวลา) ค่าดังกล่าวจึงเป็นพลังงานของอนุภาคภายใต้พลังงานศักย์ $V(x)$ ซึ่งแน่นอนว่าจะต้องเป็นค่าคงที่ที่ไม่ขึ้นกับตำแหน่ง x

แบบฝึกหัด 1.1 ฟังก์ชันคลื่นในหนึ่งมิติของอนุภาคมวล m ภายใต้พลังงานศักย์ $V(x)$ มีรูปแบบเป็น $\psi(x) = Ce^{-\alpha x^2}$ โดยที่ C และ α เป็นค่าคงที่ จงใช้สมการชโรดิงเงอร์แบบที่ไม่ขึ้นกับเวลา หาพลังงานของอนุภาคนี้และรูปแบบของพลังงานศักย์ $V(x)$ ด้วยค่าคงที่ที่ให้มาหรือค่าคงที่ทางฟิสิกส์พื้นฐานอื่น

ตัวดำเนินการด้านซ้ายของสมการ (1.22) ภายในวงเล็บใหญ่ คือตัวดำเนินการแฮมิลโทเนียน $\hat{H}$ ซึ่งเขียนในรูปกระทัดรัดได้ว่า

$$\hat{H}u(x) = Eu(x) \quad (1.23)$$

สมการในรูปแบบข้างต้นอยู่ในรูปแบบของ “สมการค่าไอเกน” (Eigenvalue equation) ซึ่งมีลักษณะจำเพาะคือ ตัวดำเนินการกระทำกับฟังก์ชันแล้วได้ค่าคงที่คูณกับฟังก์ชันเดิมที่ถูกกระทำด้วยตัวดำเนินการ ค่าคงที่และฟังก์ชันในสมการค่าไอเกน เรียกว่า “ค่าไอเกน” (eigenvalue) และ “ฟังก์ชันไอเกน” (eigenfunction) ตามลำดับ ด้วยเหตุนี้ ในกลศาสตร์ควอนตัม พลังงาน E บางครั้งก็จะถูกเรียกว่า “พลังงานไอเกน” (eigenenergy)

สังเกตได้ว่าถ้าหากฟังก์ชัน $u(x)$ เป็นคำตอบของสมการ (1.23) แล้ว ฟังก์ชัน $cu(x)$ เมื่อ c เป็นค่าคงที่ จะเป็นคำตอบของสมการดังกล่าวด้วย ด้วยเหตุนี้ ฟังก์ชันคลื่นจึง

สามารถปรับขนาดได้จากการเลือกค่าคงที่ c (และสามารถปรับเฟสได้ ถ้าหากค่าคงที่ c เป็นจำนวนเชิงซ้อน)

แบบฝึกหัด 1.2 จงหาฟังก์ชันไอเกนของตัวดำเนินการโมเมนตัม $\hat{p}$ ที่มีค่าไอเกนเป็น $p = \hbar k$

นอกจากนั้น จะสังเกตได้ว่าตัวดำเนินการ $\hat{H}$ เป็นตัวดำเนินการเชิงเส้น (Linear operator) เพราะว่าสอดคล้องกับเงื่อนไข

$$(1) \hat{H}c_1\psi(x) = c_1\hat{H}\psi(x) \text{ และ}$$

$$(2) \hat{H}(c_1\psi_1(x) + c_2\psi_2(x)) = c_1\hat{H}\psi_1(x) + c_2\hat{H}\psi_2(x)$$

โดยที่ c_1 และ c_2 เป็นค่าคงที่ใดๆ

สมมติว่า หลังการแก้สมการชโรดิงเงอร์แบบที่ไม่ขึ้นกับเวลา ได้คำตอบค่าพลังงานไอเกน E_n โดย n มีได้หลายค่า และฟังก์ชันไอเกนสำหรับค่าพลังงานไอเกนดังกล่าวเป็น $u_n(x)$ จากการที่ $\hat{H}$ เป็นตัวดำเนินการเชิงเส้น คำตอบทั่วไปในทางคณิตศาสตร์ของสมการชโรดิงเงอร์แบบที่ไม่ขึ้นกับเวลา จึงเป็นผลรวมเชิงเส้นของฟังก์ชันไอเกน $u_n(x)$ อื่นๆ

$$\psi(x) = \sum_i c_i u_i(x) \quad (1.24)$$

โดยสัมประสิทธิ์ c_i เป็นค่าคงที่ รูปแบบข้างต้นนี้ ในกลศาสตร์ควอนตัม เรียกว่า “หลักการกระจาย” (Expansion postulate) การหาค่าสัมประสิทธิ์ดังกล่าวในการกระจายฟังก์ชันคลื่น และความหมายทางฟิสิกส์ของสัมประสิทธิ์เหล่านั้น จะได้อธิบายขยายความในส่วนตัวต่อไป อย่างไรก็ตาม รูปแบบทั่วไปของฟังก์ชันคลื่น $\psi(x)$ ข้างต้น ไม่จำเป็นต้องสอดคล้องกับสมการค่าไอเกน ดังเช่น $u(x)$ ในสมการ (1.23) หรือกล่าวอีกนัยหนึ่งได้ว่า ผลรวมเชิงเส้นของฟังก์ชันไอเกน ไม่จำเป็นต้องเป็นฟังก์ชันไอเกนนั่นเอง

จากรูปแบบทั่วไปของฟังก์ชันคลื่นตามสมการ (1.24) เมื่อรวมกับคำตอบ ในส่วนของเวลา $T(t)$ กับฟังก์ชันไอเกน $u_i(x)$ ด้วยการคูณด้วยพจน์

$$e^{-iE_i t/\hbar}$$

ในแต่ละพจน์ของการกระจายฟังก์ชันไอเกน

$$\psi(x, t) = \sum_i c_i u_i(x) e^{-iE_i t/\hbar} \quad (1.25)$$

ซึ่งมีข้อสังเกตว่าค่าพลังงานไอเกน E_i เป็นค่าคงตัวร่วม ระหว่างพจน์ของเลขชี้กำลังกับฟังก์ชันไอเกน $u_i(x)$ ของสมการชโรดิงเงอร์แบบที่ไม่ขึ้นกับเวลา

1.3 ฟังก์ชันคลื่น (Wave function)

สำหรับกลศาสตร์ควอนตัม ตำแหน่งของอนุภาคไม่ใช่ปริมาณหลักที่สนใจ ดังเช่นในกลศาสตร์แบบฉบับ กล่าวคือ ไม่ได้สนใจติดตามเส้นทางการเคลื่อนที่ของอนุภาคที่เปลี่ยนแปลงไปตามเวลา ทั้งนี้อาจเนื่องมาจากอนุภาคที่พิจารณามีขนาดเล็กมาก อีกทั้งยังมีความไม่แน่นอนของไฮเซนเบิร์กมาเกี่ยวข้องในการวัดตำแหน่งของอนุภาคด้วย ดังนั้นในกลศาสตร์ควอนตัม อนุภาคจึงถูกแทนด้วย “ฟังก์ชันคลื่น” (wave function) โดยฟังก์ชันคลื่นอาจจะเป็นฟังก์ชันของจำนวนเชิงซ้อน มีสมบัติความต่อเนื่องของตัวฟังก์ชันเอง และความชันของฟังก์ชัน ควรมีความต่อเนื่องที่ทุกๆ ตำแหน่ง อย่างไรก็ตาม มีกรณียกเว้น สำหรับจุดที่พลังงานศักย์มีค่าเป็นอนันต์ ความชันของฟังก์ชันคลื่นจะมีค่าไม่ต่อเนื่อง ตัวอย่างของพลังงานศักย์ที่มีค่าเป็นอนันต์ที่บางจุดที่จะได้ศึกษาต่อไปคือ บ่อศักย์แบบอนันต์ (infinite potential well) และบ่อศักย์แบบฟังก์ชันดิเรคเดลต้า (Dirac delta-function potential)

ฟังก์ชันคลื่นที่ใช้เป็นตัวแทนของอนุภาค สามารถตรวจสอบในทางปฏิบัติได้หรือไม่อย่างไร เป็นคำถามที่น่าสนใจหาคำตอบ เพื่อให้เชื่อมโยงได้กับผลการทดลอง

แมกซ์ บอร์น (Max Born) ให้ความหมายทางฟิสิกส์ของฟังก์ชันคลื่น โดยกล่าวไว้ว่า แท้ที่จริงแล้ว ฟังก์ชันคลื่นคือ “แอมพลิจูดของโอกาส” (Probability amplitude) กล่าวคือ

$|\psi(x, t)|^2 dx \equiv P(x, t) dx$ คือโอกาสที่จะพบอนุภาคซึ่งมีฟังก์ชันคลื่นเป็น $\psi(x, t)$ ในช่วงตำแหน่งระหว่าง x ถึง $x + dx$ ที่เวลา t ใดๆ

จากการให้ความหมายดังกล่าว จึงได้ว่าฟังก์ชันคลื่นต้องมีสมบัติ squared integrable ด้วย นั่นคือ

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x, t)|^2 dx < \infty \quad (1.26)$$

มีเช่นนั้นแล้ว ฟังก์ชันคลื่นจะไม่สามารถให้ความหมายเป็น แอมพลิจูดของโอกาสในการพบอนุภาคได้

เพื่อให้จะให้ผลรวมของโอกาสทั้งหมดมีค่าเป็นหนึ่ง ขนาดของฟังก์ชันคลื่นสามารถปรับเปลี่ยนได้ โดยการคูณค่าคงที่เข้าไป ซึ่งรู้จักกันในชื่อของ “การนอร์มอลไลซ์” (Normalization) ของฟังก์ชันคลื่น การคูณค่าคงที่ต่อฟังก์ชันคลื่น $\psi(x, t)$ ไม่มีผลเปลี่ยนแปลงผลเฉลยของสมการชโรดิงเงอร์ หลังจากที่ฟังก์ชันคลื่นผ่านการนอร์มอลไลซ์มาแล้ว จะพบว่า

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = 1 \quad (1.27)$$

และขนาดยกกำลังสองของฟังก์ชันคลื่น สามารถให้ความหมายว่าเป็นโอกาสในการพบอนุภาคที่ตำแหน่งต่างๆ ด้วยเหตุนี้ ฟังก์ชันคลื่นบางครั้งจึงถูกเรียกว่า แอมพลิจูดของโอกาส

ตัวอย่าง 1.1 ที่เวลา $t = 0$ อิเล็กตรอนถูกบรรยายโดยฟังก์ชันคลื่น

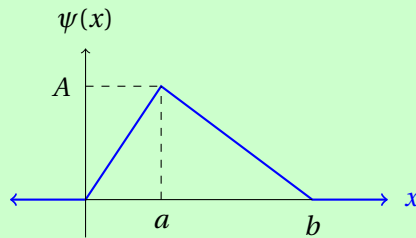
$$\psi(x, t = 0) = \begin{cases} Ax/a & \text{สำหรับ } 0 \leq x \leq a \\ A(b-x)/(b-a) & \text{สำหรับ } a \leq x \leq b \\ 0 & \text{ที่อื่นๆ} \end{cases}$$

ก) ที่เวลา $t = 0$ ที่ตำแหน่งใด ที่มีโอกาสพบอิเล็กตรอนมากที่สุด

ข) จงหาค่าคงที่ A ในพจน์ของ a และ b โดยระบุเงื่อนไขที่ใช้ด้วย

ค) กำหนดให้ $b = 2a$ จงหาโอกาสที่จะพบอิเล็กตรอนที่ตำแหน่ง $x > a$

วิธีทำ ฟังก์ชันคลื่นมีลักษณะเป็นรูปสามเหลี่ยม ซึ่งมีจุดยอดอยู่ที่ตำแหน่ง $x = a$ และมีความกว้าง b โดยเริ่มจากตำแหน่งที่ $x = 0$ ถึง $x = b$ ค่าสูงสุดของฟังก์ชันมีค่าเท่ากับค่าคงที่ A ดังแสดงในแผนภาพ



ก) ตำแหน่งที่มีโอกาสมากที่สุดในการพบอิเล็กตรอน เกิดขึ้นเมื่อ $|\psi(x, t = 0)|^2$ คือค่าสูงสุด ดังนั้น อิเล็กตรอนจะพบมากที่สุดคือที่ตำแหน่ง $x = a$

ข) ใช้เงื่อนไข normalization ค่าคงที่ A สามารถคำนวณได้จากสมการ

$$\int_0^a \frac{|A|^2}{a^2} x^2 dx + \int_a^b \frac{|A|^2}{(b-a)^2} (b-x)^2 dx = 1$$

หลังจากการคำนวณอย่างตรงไปตรงมา จะได้ $|A|^2 = 3/b$ ซึ่งสามารถเลือก A เป็น $\sqrt{3/b}$

ค) ถ้า $b = 2a$ จากนั้น โอกาสที่จะพบอิเล็กตรอนที่ตำแหน่ง $x > a$ คือ

$$P(x > a) = \int_a^{2a} |\psi(x, t = 0)|^2 dx = \int_a^{2a} \frac{3/2a}{a^2} (2a-x)^2 dx$$

หลังจากการอินทิเกรตฟังก์ชันพหุนาม จะได้โอกาสในการพบอิเล็กตรอน

$$P(x > a) = 0.5$$

วิธีคิดอีกแบบหนึ่ง ได้จากการสังเกตว่า ฟังก์ชันคลื่นมีสมมาตรซ้ายขวาที่ตำแหน่ง $x = a$ ดังนั้น โอกาสในการพบอนุภาคจะต้องมีสมมาตรซ้ายขวาด้วยเช่นกัน หรือ $P(x < a) = P(x > a) = 0.5$ เนื่องจาก ผลรวม ของโอกาสในการพบอนุภาคทั้งหมดเป็นหนึ่งเสมอ

แบบฝึกหัด 1.3 สถานะของอนุภาคตัวหนึ่งที่เวลา $t = 0$ ถูกบรรยายโดยฟังก์ชันคลื่น

$$\Psi(x, t = 0) = \begin{cases} N & \text{สำหรับ } -b \leq x \leq 0 \\ N(1 - x/b) & \text{สำหรับ } 0 \leq x \leq b \\ 0 & \text{ที่อื่นๆ} \end{cases}$$

1. จงแสดงกราฟของฟังก์ชันคลื่น $\psi(x, t = 0)$ ที่ขึ้นกับตำแหน่ง x
2. จงหาค่าคงที่ N ในพจน์ของ b โดยอาจจะเลือกค่าคงที่ N เป็นจำนวนจริง
3. โอกาสในการพบอนุภาคในช่วง $b/2 < x < \infty$ ที่เวลา $t = 0$ เป็นเท่าใด

แบบฝึกหัด 1.4 สมการชโรดิงเงอร์สำหรับอิเล็กตรอนของมวล m ในศักย์สมมาตรทรงกลม $V(r)$ คือ

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + V(r) \right] \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

เมื่อ $\psi(\vec{r})$ สามารถเขียนให้อยู่ในรูปของ $N \cdot R(r)$ ในที่นี้ จะไม่คิดสมบัติสปินของอิเล็กตรอน

1. พิจารณาอะตอมของไฮโดรเจน โดยมีศักย์ $V(r) = -e^2/r$ โดยสมมติว่าคำตอบที่ขึ้นกับรัศมี $R(r)$ อยู่ในรูปของ $e^{-\beta r}$ จงหาพลังงานไอออน E และค่าคงตัว β ในพจน์ของ $\hbar$ m และ e
2. จงหาค่าคงที่ N จากการนอร์มอลไลซ์ $\psi(\vec{r})$ (อนุพันธ์เชิงปริมาตรในพิกัดทรงกลม คือ $dV = r^2 dr \sin\theta d\theta d\phi$ และสูตรการอินทิเกรตที่อาจเป็นประโยชน์คือ $\int_0^\infty r^2 \exp(-\gamma r) dr = 2/\gamma^3$)

จากการให้ความหมายเชิงกายภาพของฟังก์ชันคลื่นของบอร์น จะได้ว่า “ค่าคาดหวัง” (expectation value) หรือค่าเฉลี่ยของตำแหน่ง $\langle x \rangle$ สามารถหาได้จากหลักพื้นฐานของทฤษฎีความน่าจะเป็น

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x |\psi(x, t)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x, t) \cdot x \cdot \psi(x, t) dx \quad (1.28)$$

สังเกตว่า ได้มีการจัดรูปแบบของสมการในผลสุดท้ายของสมการข้างต้น เพื่อที่จะแสดงนิยามของค่าคาดหวัง สำหรับตัวดำเนินการใดๆ (operator) ในกลศาสตร์คลื่น ค่าคาดหวังของตัวดำเนินการ $\hat{A}$ สำหรับฟังก์ชันคลื่น $\psi(x, t)$ คือ⁵

$$\langle A \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x, t) \hat{A} \psi(x, t) dx \quad (1.29)$$

เพราะฉะนั้น จากสมการ (1.28) จึงสามารถเขียน “ตัวดำเนินการของตำแหน่ง” (Position operator) ได้เป็น

$$\hat{x} = x \quad (1.30)$$

แบบฝึกหัด 1.5 พิจารณาฟังก์ชันคลื่นของอนุภาค

$$\psi(x, t) = Ae^{-\lambda|x|}e^{-i\beta t}$$

เมื่อ A λ และ β มีค่าเป็นจำนวนจริงบวก (จะได้เรียนรู้ชนิดของบ่อศักย์ ที่มีฟังก์ชันไอเกนเป็นแบบนี้ภายหลัง)

1. จากส่วนที่ขึ้นกับเวลาของฟังก์ชันคลื่น จงระบุพลังงานของอนุภาคนี้
2. จงหาค่าคงที่ A
3. จงหาค่าของค่าคาดหวังของตำแหน่ง x และ x^2 กล่าวคือ $\langle x \rangle$ และ $\langle x^2 \rangle$
4. จงคำนวณค่าเบี่ยงเบนมาตรฐานของตำแหน่ง x กล่าวคือ $\sigma = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$
5. ความน่าจะเป็นที่จะพบอนุภาคภายนอกช่วงระหว่าง $\langle x \rangle - \sigma$ ถึง $\langle x \rangle + \sigma$ เป็นเท่าใด

⁵ คำนิยามนี้เป็นหลักการสำคัญข้อหนึ่งในของกลศาสตร์ควอนตัม ซึ่งจะกล่าวในหัวข้อถัดไป

สำหรับกลศาสตร์ควอนตัม การใช้ตัวดำเนินการกระทำบนฟังก์ชันคลื่น สอดคล้องกับการวัด (Measurement) เมื่อพิจารณาการวัดตำแหน่ง และโมเมนตัม ในลำดับที่แตกต่างกัน กล่าวคือพิจารณา $\hat{x}\hat{p}\psi$ และ $\hat{p}\hat{x}\psi$ และเขียนตัวดำเนินการโมเมนตัมจากสมการ (1.17) $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ จะได้ว่า

$$\begin{aligned}\hat{x}\hat{p}\psi(x, t) - \hat{p}\hat{x}\psi(x, t) &= x\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right)\psi - \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right)x\psi \\ &= -i\hbar x \frac{\partial \psi}{\partial x} + \left(i\hbar x \frac{\partial \psi}{\partial x} + i\hbar \psi\right) \\ (\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x})\psi(x, t) &= i\hbar \psi(x, t)\end{aligned}$$

สิ่งที่น่าสนใจของผลที่ได้คือ ผลต่างมีค่าไม่เป็นศูนย์ และผลต่างของตัวดำเนินการตำแหน่ง และโมเมนตัม $\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x}$ บนฟังก์ชันคลื่น เท่ากับค่าคงตัว $i\hbar$ บนฟังก์ชันคลื่นนั้น ผลต่างของสองตัวดำเนินการเรียกว่า “ตัวสลับที่” (Commutator) ซึ่งนิยามโดย

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad (1.31)$$

ผลลัพธ์ที่ได้จากการพิจารณา $\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x}$ ถือว่ามีความสำคัญมาก เพราะว่าเป็นความสัมพันธ์การสลับที่พื้นฐานที่สุด ในการศึกษากลศาสตร์ควอนตัม ถูกนำไปใช้และอ้างอิงอยู่บ่อยๆ

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \quad (1.32)$$

โดยทั่วไปแล้ว ตัวสลับที่มีค่าไม่เป็นศูนย์ แสดงว่า ลำดับการวัดทางกลศาสตร์ควอนตัมมีความสำคัญอย่างยิ่ง ควรต้องใช้ความระมัดระวังเป็นพิเศษ ต่อลำดับของการดำเนินการบนฟังก์ชันคลื่นที่สนใจ หรือที่ต้องการวัด

1.4 หลักการพื้นฐานของกลศาสตร์ควอนตัม

(Postulates of quantum mechanics)

ก่อนหน้านี้ ได้กล่าวถึงสมการชโรดิงเงอร์ ตัวดำเนินการ ฟังก์ชันไอเกน ค่าไอเกน ฟังก์ชันคลื่น และความหมายของฟังก์ชันคลื่นไปบ้างแล้ว ความเชื่อมโยงของปริมาณเหล่านี้สามารถรวบรวมกันไว้ เพื่อสร้างเป็นกฎเกณฑ์พื้นฐาน ของวิชากลศาสตร์ควอนตัมได้

ในที่นี้ จะอ้างถึงหลักการพื้นฐาน 4 ข้อ ซึ่งจะยอมรับว่าเป็นจริง โดยไม่ต้องพิสูจน์ในกลศาสตร์ควอนตัม⁶

หลักการข้อที่ 1 ว่าด้วยฟังก์ชันคลื่น: ฟังก์ชันคลื่น ψ สามารถใช้ในการระบุสถานะทางควอนตัมของอนุภาคที่เวลาใดๆ ฟังก์ชันคลื่นมีค่าต่อเนื่อง และสามารถหาอนุพันธ์ได้ ข้อมูลทั้งหมดเกี่ยวกับสถานะของอนุภาคจะอยู่ในฟังก์ชันคลื่น

หลักการข้อที่ 2 ว่าด้วยตัวดำเนินการ: ปริมาณที่สังเกตหรือวัดได้ในทางกายภาพของอนุภาค เช่น ตำแหน่ง โมเมนตัมเชิงเส้น พลังงาน โมเมนตัมเชิงมุม ฯลฯ สามารถแทนได้ด้วยตัวดำเนินการในกลศาสตร์ควอนตัม

ทั้งนี้ หมายความว่าหากต้องการทราบข้อมูลอะไรสักอย่างหนึ่งของอนุภาค จะต้องใช้ตัวดำเนินการ (ทางคณิตศาสตร์) ที่เป็นตัวแทนของการวัดนั้น มากระทำกับฟังก์ชันคลื่นของอนุภาค

หลักการข้อที่ 3 ว่าด้วยผลการดำเนินการ: ผลการวัดปริมาณ A ที่สังเกตได้ คือค่าไอเกนตัวใดตัวหนึ่งของตัวดำเนินการ $\hat{A}$ ที่เป็นตัวแทนของปริมาณ A นั้น

ดังนั้น ผลของการวัดจะทำให้ฟังก์ชันคลื่นของอนุภาค กลายเป็นฟังก์ชันไอเกนที่สอดคล้องกับค่าไอเกนนั่น กล่าวคือ หากหลังจากการวัดปริมาณ A แล้วพบว่าได้ค่า a_n จะได้ว่าฟังก์ชันคลื่นของอนุภาคจะเป็น $\phi_n(x)$ เมื่อ $\phi_n(x)$ คือฟังก์ชันไอเกนของตัวดำเนินการ $\hat{A}$ โดย

$$\hat{A}\phi_n(x) = a_n\phi_n(x)$$

การเปลี่ยนแปลงของฟังก์ชันคลื่นภายหลังการวัด หรือการถูกดำเนินการนี้ รู้จักกันในชื่อ “การยุบของฟังก์ชันคลื่น” (collapse of wave function)

นอกจากนี้แล้ว เมื่อใช้ความหมายทางฟิสิกส์ของฟังก์ชันคลื่น และหลักการที่ว่าด้วยตัวดำเนินการ จะพบว่า ถ้าสถานะของอนุภาค ถูกบรรยายด้วยฟังก์ชันคลื่น $\psi(\vec{r}, t)$ ค่าเฉลี่ย

⁶ดูรายละเอียดเพิ่มเติมได้จาก R.L. Liboff, Introductory Quantum Mechanics 4th Ed, Addison Wesley, USA, 2003, Chapter 3

ของข้อมูลการสังเกตปริมาณ A ใดๆ สำหรับอนุภาคนั้นที่เวลา t หรือค่าคาดหวัง $\langle A \rangle$ จะหาได้จาก

$$\langle A \rangle = \int \psi^*(\vec{r}, t) \hat{A} \psi(\vec{r}, t) d\vec{r} \quad (1.33)$$

หลักการข้อที่ 4 ว่าด้วยพลวัตน์ของฟังก์ชันคลื่น: สถานะควอนตัมของอนุภาคจะเปลี่ยนแปลงไปตามเวลา สอดคล้องกับสมการชโรดิงเงอร์ที่ขึ้นกับเวลา

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \hat{H} \psi(\vec{r}, t) \quad (1.34)$$

เมื่อ $\hat{H}$ คือตัวดำเนินการแฮมิลโทเนียน ซึ่งเท่ากับ $\hat{p}^2/2m + \hat{V}(\vec{r})$

ถ้าตัวดำเนินการแฮมิลโทเนียน $\hat{H}$ เป็นแบบที่ไม่ขึ้นกับเวลา $\hat{H} \neq \hat{H}(t)$ จะสามารถเขียน $\psi(\vec{r}, t)$ ให้อยู่ในรูปแบบของผลคูณระหว่างฟังก์ชันตัวแปรเดียวสองตัว

$$\psi(\vec{r}, t) = \phi(\vec{r}) \cdot T(t) \quad (1.35)$$

ซึ่งจะได้สมการชโรดิงเงอร์แบบที่ไม่ขึ้นกับเวลา ดังที่ได้กล่าวมาแล้วก่อนหน้านี้คือ

$$\hat{H} \phi(\vec{r}) = E \phi(\vec{r}) \quad (1.36)$$

และได้ผลเฉลยของส่วนที่ขึ้นกับเวลา คือ

$$T(t) = e^{-iEt/\hbar} \quad (1.37)$$

เมื่อ E คือพลังงานของอนุภาค

แบบฝึกหัด 1.6 จากสมการแสดงพลวัตน์ของฟังก์ชันคลื่น ψ จงเขียนสมการแสดงพลวัตน์ของสังยุคของฟังก์ชันคลื่น ψ^*

แบบฝึกหัด 1.7 อนุภาคมูลฐานบางตัว รวมถึงนิวเคลียสบางชนิด เกิดการสลายตัวไปตามเวลา ในทำนองเดียวกันกับการทดลองการกักขังอะตอมเย็น (Cold atom trap experiment) เมื่อเวลาผ่านไป อะตอมสามารถหลุดหายไปจากบริเวณกักขังได้ วิธีการหนึ่งในการจำลองกระบวนการหายไปของอนุภาค คือการใช้บ่อศักย์จินตภาพในสมการชโรดิงเงอร์ พิจารณาในระบบหนึ่งมิติ สมการชโรดิงเงอร์ในบ่อศักย์จินตภาพคือ

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - iV(x)\psi$$

การสลายกัมมันตภาพรังสีที่สอดคล้องกับค่าคงที่บ่อศักย์จินตภาพคือ $V(x) = \hbar/2\tau$ โอกาสรวมที่จะพบอนุภาคในบริเวณที่สนใจคือ $P = \int |\psi(x, t)|^2 dx$ จงแสดงว่า

$$\frac{dP}{dt} = -\frac{1}{\tau}P$$

และ จง หา ครึ่งชีวิต (half-life) ของ การสลายกัมมันตภาพรังสีที่อธิบายด้วยบ่อศักย์จินตภาพนี้

1.5 สมมาตรของฟังก์ชันไอเกนของพลังงาน

(Symmetry of energy eigenfunction)

ตัวดำเนินการที่ควรกล่าวถึงอีกตัวหนึ่งในกลศาสตร์ควอนตัม เรียกว่า ตัวดำเนินการพาริตี (Parity operator) หรือตัวดำเนินการสะท้อน (Reflection operator) $\hat{P}$ นิยามของตัวดำเนินการนี้คือ การเปลี่ยนเครื่องหมายหน้าพิกัด (ในระบบพิกัดคาร์ทีเซียน) ของฟังก์ชัน สำหรับในปริภูมิ 1 มิติ ผลของตัวดำเนินการพาริตีกับฟังก์ชัน f ใดๆ คือ

$$\hat{P}f(x) = f(-x) \quad (1.38)$$

สมมติให้ $u(x)$ เป็นฟังก์ชันไอเกนของตัวดำเนินการ $\hat{P}$ ที่มีค่าไอเกนเป็น p (เรียกว่า พาริตี) กล่าวคือ

$$\hat{P}u(x) = pu(x)$$

เมื่อใช้ตัวดำเนินการ $\hat{P}$ กระทำซ้ำอีกครั้ง จะได้

$$\hat{P}(\hat{P}u(x)) = p \hat{P}(u(x)) = p^2 u(x) \quad (1.39)$$

อาศัยนิยามของตัวดำเนินการ $\hat{P}$ จะได้

$$\hat{P}(\hat{P}u(x)) = \hat{P}u(-x) = u(x) \quad (1.40)$$

ดังนั้น $p^2 u(x) = u(x)$ หรือ $p^2 = 1$ จึงได้ $p = \pm 1$ กล่าวอีกอย่างหนึ่งได้ว่า ค่าไอเกนของตัวดำเนินการพาริตีคือ $+1$ หรือ -1 สำหรับกรณีที่ $p = +1$ จะได้ความสัมพันธ์ $u(x) = u(-x)$ ซึ่งแสดงว่าฟังก์ชันไอเกนแบบนี้เป็นฟังก์ชันคู่ (even function) หรือกล่าวได้ว่า มีพาริตีเป็นบวก ในขณะที่ $p = -1$ จะได้ $u(x) = -u(-x)$ จึงได้ว่าฟังก์ชันไอเกนแบบนี้เป็นฟังก์ชันคี่ (odd function) หรือกล่าวได้ว่า มีพาริตีเป็นลบ

พิจารณาฟังก์ชันไอเกน $\psi(x)$ ซึ่งสอดคล้องกับสมการชโรดิงเงอร์ ที่มีค่าไอเกนของพลังงานเป็น E เมื่อแทน x ด้วย $-x$ ในสมการชโรดิงเงอร์ หรือเทียบเท่ากับการใช้ตัวดำเนินการพาริตีกระทำตลอดสมการ จะได้

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(-x) \right] \psi(-x) = E\psi(-x) \quad (1.41)$$

ในกรณีที่ส่วนของพลังงานศักย์มีสมมาตรของการสะท้อน (หรือเป็นฟังก์ชันคู่) กล่าวคือ $V(x) = V(-x)$ สมการข้างบนจะกลายเป็น

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi(-x) = E\psi(-x) \quad (1.42)$$

ผลที่ได้แสดงว่า ผลเฉลยของ $\psi(-x)$ มีได้สองแบบ ซึ่งสอดคล้องกับสมการที่แปลงมาใหม่ ในกรณีแรก คือ $\psi(-x) = \psi(x)$ (ฟังก์ชันคู่) และในกรณีที่สอง $\psi(-x) = -\psi(x)$ (ฟังก์ชันคี่) ซึ่งเป็นผลที่ได้มาจากการที่ $\psi(x)$ เป็นผลเฉลยของสมการชโรดิงเงอร์นั่นเอง (จะให้เห็นในภายหลังว่า ข้อสังเกตข้างต้น มาจากผลของความสัมพันธ์การสลับที่ $[\hat{H}, \hat{P}] = 0$ ดังนั้น จึงมีฟังก์ชันไอเกนร่วมกัน ระหว่างตัวดำเนินการทั้งสอง)

สำหรับสถานการณ์ที่พลังงานศักย์ที่ปรากฏในสมการชโรดิงเงอร์มีสมมาตร (หรือเป็นฟังก์ชันคู่) จึงสรุปได้ว่า ฟังก์ชันไอเกนของพลังงานจะต้องมีพาริตีที่แน่นอน กล่าวคือจะ

ต้องมีค่าเป็นค่าใดค่าหนึ่ง ระหว่าง $+1$ หรือ -1 ซึ่งสอดคล้องกับฟังก์ชันคู่และฟังก์ชันคี่ ตามลำดับ หรือกล่าวได้ว่า ฟังก์ชันไอเกนของศักย์แบบสมมาตร จะต้องเป็นฟังก์ชันคู่หรือฟังก์ชันคี่ เท่านั้น

นอกจากนี้ มีข้อควรสังเกตว่า ฟังก์ชันไอเกนของสถานะพื้นสำหรับพลังงานศักย์ที่มีสมมาตร จะเป็นฟังก์ชันคู่เสมอ⁷

1.6 บ่อศักย์แบบอนันต์ (An infinite potential well)

ปัญหาพื้นฐานที่สุดในกลศาสตร์ควอนตัม คือปัญหาของอนุภาคที่ถูกกักขังในบ่อศักย์แบบอนันต์ ซึ่งบางครั้งเรียกปัญหาแบบนี้ว่า “ปัญหาของอนุภาคในกล่อง” (Particle-in-a-box problem) ถึงแม้ว่าสถานการณ์ในบ่อศักย์แบบอนันต์ อาจจะไม่พบในระบบปกติบ่อยนัก แต่คำตอบที่ได้จากการแก้ปัญหาดังกล่าว สามารถใช้เป็นตัวอย่าง ในการอธิบายหลักการพื้นฐานของกลศาสตร์ควอนตัม ได้อย่างชัดเจน เนื่องจาก คำตอบของปัญหาดังกล่าว หาได้ไม่ยาก นอกจากนี้ ในบางครั้ง ยังสามารถใช้บ่อศักย์แบบอนันต์ ในการจำลองการกักขังอนุภาคแบบคร่าวๆ ได้ด้วย ยกตัวอย่างเช่น แก๊สอิเล็กตรอน อิเล็กตรอนอิสระในโลหะ นิวคลีออนในนิวเคลียส ฯลฯ

บ่อศักย์แบบอนันต์ในหนึ่งมิติ นิยามดังนี้

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{สำหรับ } 0 < x < L \\ \infty & \text{ที่บริเวณอื่น} \end{cases} \quad (1.43)$$

หรือกล่าวได้ว่า พลังงานศักย์แบบนี้แสดงถึง อนุภาคอิสระที่อยู่ในบริเวณ 0 ถึง L จะแสดงการแกว่งการชโรดิงเจอร์ สำหรับบ่อศักย์แบบนี้ เพื่อหาพลังงานของอนุภาคและฟังก์ชันคลื่นของอนุภาค

⁷ปกติแล้ว ฟังก์ชันคี่มีการกวัดแกว่งมากกว่าฟังก์ชันคู่ หรือกล่าวได้ว่าความยาวคลื่นที่เป็นองค์ประกอบของฟังก์ชันคี่ มีค่าน้อยกว่า จากสูตรความยาวคลื่นของเดอ บรอยล์ โมเมนตัมจึงมีค่ามากกว่า ดังนั้นพจน์ของพลังงานจลน์สำหรับฟังก์ชันคลื่นที่เป็นฟังก์ชันคี่จะมากกว่าที่เป็นฟังก์ชันคู่

เริ่มต้นด้วยการพิจารณาบริเวณที่อนุภาคไม่สามารถอยู่ได้ นั่นคือนอกบริเวณของบ่อศักย์ ซึ่ง $V(x) = \infty$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} u(x) + (\infty)u(x) = Eu(x)$$

จากค่าอนันต์ของพลังงานศักย์ คำตอบของสมการข้างต้นคือ $u(x) = 0$ เท่านั้น ซึ่งสอดคล้องกับแนวคิดในเบื้องต้นว่า ไม่มีอนุภาคอยู่นอกกล่อง เพราะว่าโอกาสในการพบอนุภาคหาได้จาก ขนาดของฟังก์ชันคลื่นยกกำลังสอง เมื่อโอกาสเป็นศูนย์ ย่อมบ่งชี้ว่าฟังก์ชันคลื่นจะต้องมีค่าเป็นศูนย์เช่นกัน

ภายในบริเวณบ่อศักย์หรือ $0 < x < L$ ซึ่งอนุภาคถูกกักขังอยู่ สมการชโรดิงเงอร์จึงกลายเป็น

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} u(x) = Eu(x) \quad \Rightarrow \quad \frac{d^2}{dx^2} u(x) + \frac{2mE}{\hbar^2} u(x) = 0$$

ซึ่งเป็นสมการเชิงอนุพันธ์อันดับสองพื้นฐาน มีรูปแบบคล้ายกันกับสมการคลื่น คำตอบทั่วไปของสมการเชิงอนุพันธ์ดังกล่าวคือ

$$u(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx) \quad (1.44)$$

โดยที่

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (1.45)$$

และ k จะมีค่ามากกว่าศูนย์เสมอ เนื่องจาก $E > 0$ (พลังงานของอนุภาคมีแต่ส่วนที่มาจากพลังงานจลน์ ซึ่งมีค่าเป็นบวก) เมื่อใช้เงื่อนไขความต่อเนื่องของฟังก์ชันคลื่นที่ตำแหน่ง $x = 0$

$$u(x = 0^-) = u(x = 0^+)$$

จะได้ $B = 0$ จึงทำให้ฟังก์ชันโอเกนมีเฉพาะส่วนของฟังก์ชัน $\sin$ เท่านั้น

$$u(x) = A \sin(kx) \quad (1.46)$$

และสำหรับที่ตำแหน่ง $x = L$ จะได้เงื่อนไข

$$A \sin(kL) = 0$$

ซึ่งจะได้ว่า $A = 0$ หรือ $\sin(kL) = 0$ ในกรณีแรก ไม่สามารถนำมาใช้ได้ เนื่องจากจะทำให้ $u(x) = 0$ ภายในบริเวณบ่อศักย์ ซึ่งแสดงว่าไม่มีอนุภาคอยู่ในบ่อศักย์ จึงขัดแย้งกับสถานการณ์ที่ตั้งไว้ในตอนต้น ว่ามีอนุภาคถูกกักขังในบ่อศักย์ สำหรับกรณี $\sin(kL) = 0$ จะได้ว่า

$$kL = 0, \pm\pi, \pm2\pi, \pm3\pi, \dots$$

สำหรับ $kL = 0$ จะต้องถูกตัดออกเช่นกัน เนื่องจากทำให้ $u(x) = 0$ เครื่องหมายบวกลบของค่า kL สามารถตัดออกได้ด้วย เนื่องจากให้ออกาสในการพบอนุภาคที่เหมือนกัน (ไม่ได้ให้คำตอบทางกายภาพที่แตกต่างกัน) เพราะว่า

$$|\sin(-kx)|^2 = |\sin(kx)|^2$$

ดังนั้น ค่าที่เป็นไปได้ของ k ที่สอดคล้องกับ เงื่อนไขความต่อเนื่องของฟังก์ชันคลื่น ที่บริเวณขอบคือ

$$k = \frac{n\pi}{L} \quad \text{โดยที่ } n = 1, 2, 3, \dots \quad (1.47)$$

จากสมการ (1.45) จึงได้ว่า พลังงานที่เป็นไปได้ของอนุภาคที่ถูกกักในบ่อศักย์แบบอนันต์ในหนึ่งมิติคือ

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2 \quad (1.48)$$

เลขควอนตัม n ถูกใช้ในการระบุค่าพลังงาน E เพื่อที่จะได้แสดงให้เห็นถึงความไม่ต่อเนื่องของพลังงานที่หาได้ ซึ่งเห็นได้ว่าอนุภาคที่ถูกกักในบ่อศักย์แบบอนันต์ในหนึ่งมิติ ที่มีความกว้างของบ่อเป็น L จำเป็นต้องมีพลังงานค่าเฉพาะ ซึ่งกำหนดด้วยสมการ (1.48) พลังงานที่ได้มีความไม่ต่อเนื่อง ช่องว่างระหว่างพลังงานที่หาได้ อยู่ในระดับของ $\hbar^2 \pi^2 / 2mL^2$ ซึ่งหากอนุภาคที่พิจารณาเป็นอิเล็กตรอน การแยกกันของพลังงานจะมีค่าประมาณ $10^{-19}/L^2$ อิเล็กตรอนโวลต์ สำหรับความกว้าง L ที่มีค่าอยู่ในระดับไมโครเมตร (μm) การแยกกันของพลังงานจะมีค่าน้อยมาก เมื่อคำนวณจะได้ประมาณ 10^{-6} อิเล็กตรอนโวลต์ พลังงานที่เป็นไปได้จึงประมาณได้ว่ามีค่าต่อเนื่อง หรือพลังงานของอนุภาคกลายเป็นแถบพลังงาน อย่างไรก็ตาม ถ้าหากความกว้างของบ่อศักย์อยู่ในระดับของนาโนเมตร (nm) จะพบว่าการแยกกันของพลังงานที่เป็นไปได้จะมีค่าประมาณ 0.1 อิเล็กตรอนโวลต์ ซึ่งไม่ถือว่าน้อย

สำหรับพลังงานในระดับอะตอม จึงไม่สามารถละเลย ความไม่ต่อเนื่องของพลังงานของสถานะกักขัง สำหรับบ่อศักย์ที่มีความกว้างน้อยๆ ในระดับขนาดของอะตอมได้

ย้อนกลับมา พิจารณาฟังก์ชันคลื่นหรือฟังก์ชันไอเกนในสมการ (1.46) จะได้ว่า

$$u_n(x) = A \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \quad \text{สำหรับ } 0 < x < L \quad (1.49)$$

ค่าคงที่ A หาได้จากเงื่อนไข normalization สำหรับฟังก์ชันคลื่นของอนุภาคดังนี้

$$\begin{aligned} \int_0^L |u_n(x)|^2 dx &= 1 \\ |A|^2 \int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx &= 1 \\ |A|^2 \frac{1}{2} \int_0^L 1 - \cos\left(2\frac{n\pi x}{L}\right) dx &= 1 \\ |A|^2 \frac{1}{2} \left[x - \frac{\sin(2n\pi x/L)}{2n\pi/L} \right]_{x=0}^{x=L} &= 1 \\ |A|^2 \cdot \frac{L}{2} &= 1 \end{aligned}$$

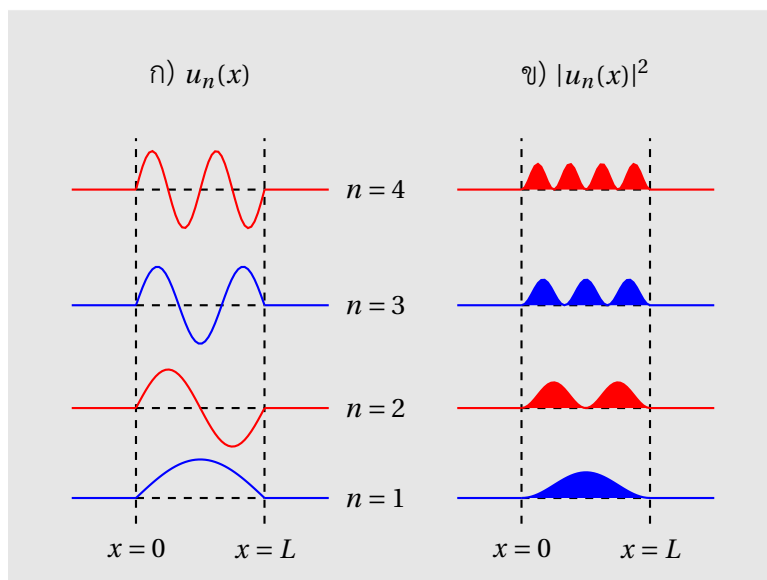
เพื่อความสะดวกและง่าย จะเลือก A ให้เป็น $\sqrt{2/L}$ ซึ่งพบว่าไม่ขึ้นกับเลขควอนตัม n ดังนั้น ฟังก์ชันไอเกนของบ่อศักย์แบบอนันต์ในหนึ่งมิติ คือ

$$u_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) & \text{สำหรับ } 0 < x < L \\ 0 & \text{ที่บริเวณอื่นๆ} \end{cases} \quad (1.50)$$

สังเกตด้วยว่าฟังก์ชันไอเกนไม่ใช่ฟังก์ชันที่ smooth กล่าวคืออนุพันธ์อันดับหนึ่งไม่ต่อเนื่องที่ตำแหน่ง $x=0$ และ $x=L$ ทั้งนี้เนื่องจากที่ตำแหน่งทั้งสองนั้น พลังงานศักย์มีค่าไม่ต่อเนื่องและมีค่าเกี่ยวข้องกับค่าอนันต์ ฟังก์ชันไอเกนบางส่วนและโอกาสการพบอนุภาคที่ตำแหน่งต่างๆ สำหรับบ่อศักย์แบบอนันต์ในหนึ่งมิติแสดงให้เห็นในรูป 1.1

พิจารณาการอินทิเกรตผลคูณระหว่างฟังก์ชันไอเกน สำหรับสถานะที่ระบุด้วยเลขควอนตัม n และ m

$$\int_{-\infty}^{+\infty} u_m(x) u_n(x) dx = \frac{2}{L} \int_0^L \sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx \quad (1.51)$$



รูปที่ 1.1: ก) ฟังก์ชันไอเกน $u_n(x)$ และ ข) การกระจายของโอกาสในการพบอนุภาคในบ่อศักย์แบบอนันต์ที่ตำแหน่งต่างๆ $|u_n(x)|^2$ สำหรับสถานะที่ระบุด้วยเลขควอนตัม $n = 1$ ถึง 4

ซึ่งจากการคำนวณ จะได้ว่าผลของการอินทิเกรตข้างต้นมีค่าเป็นศูนย์ สำหรับกรณีที่ m มีค่าไม่เท่ากับ n

$$\begin{aligned}
 \int_0^L \sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx &= \int_0^L \frac{1}{2} [\cos((m-n)\pi x/L) - \cos((m+n)\pi x/L)] dx \\
 &= \frac{1}{2} \left[\frac{\sin((m-n)\pi x/L)}{(m-n)\pi/L} - \frac{\sin((m+n)\pi x/L)}{(m+n)\pi/L} \right]_{x=0}^{x=L} \\
 &= \frac{1}{2} \left[\frac{\sin((m-n)\pi)}{(m-n)\pi/L} - \frac{\sin((m+n)\pi)}{(m+n)\pi/L} \right] \\
 \int_0^L \sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx &= 0
 \end{aligned}$$

เนื่องจาก $\sin$ ของจำนวนเต็มเท่าของ π มีค่าเป็นศูนย์เสมอ

สำหรับกรณี $m = n$ จะได้รูปแบบเงื่อนไข normalization ของฟังก์ชันไอเกน

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{+\infty} u_n^2(x) dx &= \frac{2}{L} \int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx \\ &= \frac{2}{L} \int_0^L \frac{1}{2} [1 - \cos(2n\pi x/L)] dx \\ &= \frac{1}{L} \left[x - \frac{\sin(2n\pi x/L)}{2n\pi/L} \right]_{x=0}^{x=L} \\ \int_{-\infty}^{+\infty} u_n^2(x) dx &= \frac{1}{L} (L) = 1\end{aligned}$$

จากการพิจารณาการอินทิเกรตผลคูณระหว่างฟังก์ชันไอเกนสองกรณีข้างต้น จึงได้ว่า

$$\int_{-\infty}^{+\infty} u_m(x) u_n(x) dx = \delta_{m,n}$$

โดย $\delta_{m,n}$ คือ kronecker delta function ซึ่งมีค่าเท่ากับ 1 ถ้า $m = n$ และเท่ากับ 0 ถ้า $m \neq n$ เงื่อนไขนี้ รู้จักในชื่อของ “เงื่อนไขออร์thonormalิตี้” (Orthonormality condition) อย่างไรก็ตาม โดยทั่วไปแล้ว ฟังก์ชันไอเกนตัวหนึ่งจะต้องเป็นฟังก์ชันคอนจูเกต จึงจะเข้าเงื่อนไข orthonormality ทั่วไปของฟังก์ชันไอเกน สำหรับพลังงานศักย์ $V(x)$ ใด ๆ นั่นคือ

$$\int_{-\infty}^{+\infty} u_m^*(x) u_n(x) dx = \delta_{m,n} \quad (1.52)$$

เงื่อนไขนี้ สามารถใช้ได้ กับฟังก์ชัน ไอเกน แบบ บออื่น ๆ ที่ ไม่ใช่ ผลเฉลย ของ ปัญหา อนุภาคในกล่องเพียงเท่านั้น

เมื่อพิจารณาสถานการณ์ที่บ่อศักย์ถูกย้ายมาอยู่ที่ศูนย์กลางของแกนพิกัด บ่อศักย์แบบใหม่นี้จึงเขียนได้ว่า

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{สำหรับ } -L/2 < x < +L/2 \\ \infty & \text{ที่อื่นๆ} \end{cases} \quad (1.53)$$

ในกรณีนี้ บ่อศักย์มีสมมาตรตามแกน x ดังนั้นจึงคาดได้ว่า ฟังก์ชันไอเกนสำหรับบ่อศักย์แบบนี้จะต้องมีพาริตีที่แน่นอน กล่าวคือฟังก์ชันไอเกนจะต้องเป็น ฟังก์ชันคู่หรือฟังก์ชันคี่อย่างใดอย่างหนึ่ง ในการแก้สมการชโรดิงเงอร์ จึงต้องพิจารณาคำตอบที่มีพาริตีแต่ละแบบ