Quantum Mechanics Notes

by Ham Kittichet

► Table of Contents

บทที่ 1. ฟังก์ชันคลื่น	1
▶ 1.1. ฟังก์ชันคลื่น	1
▶ 1.2. ตำแหน่ง	1
▶ 1.3. โมเมนตัม	3
▶ 1.4. หลักความไม่แน่นอนของ Heisenberg	4
บทที่ 2. สมการ Schrödinger ที่ไม่ขึ้นกับเวลา	5
▶ 2.1. สมการ Schrödinger ที่ไม่ขึ้นกับเวลา	5

บทที่ 1 | ฟังก์ชันคลื่น

▶ 1.1. ฟังก์ชันคลื่น

▶ ฟังก์ชันคลื่นและสมการ Schrödinger

ในกลศาสตร์ตั้งเดิม เราจะอธิบายอนุภาคหนึ่ง ๆ ด้วยตำแหน่งและโมเมนตัม แต่ในกลศาสตร์ควอนตัม เราจะใช้สิ่งที่เรียก ว่าฟังก์ชันคลื่น (wavefunction: $\Psi(x,t)$ ในหนึ่งมิติ) ซึ่งมีโคโดเมนเป็น $\mathbb C$

การเปลี่ยนแปลงของตำแหน่งและโมเมนตัมเมื่อเวลาผ่านไปในกลศาสตร์ดั้งเดิมจะถูกอธิบายด้วยกฎของนิวตัน แต่ใน กลศาสตร์ควอนตัม เราจะอธิบายวิวัฒนาการของฟังก์ชันคลื่นด้วย*สมการ Schrödinger*:

สมการ Schrödinger. อนุภาคที่มีฟังก์ชันคลื่น Ψ จะมีวิวัฒนาการเป็นไปตามสมการ

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V\Psi \tag{1.1}$$

เมื่อ $\hbar=h/2\pi\approx 1.055\times 10^{-34}\,\mathrm{J\,s}$ คือค่าคงที่ของ Planck แบบลดรูป (และ $h\approx 6.626\times 10^{-34}\,\mathrm{J\,s}$ คือค่าคงที่ ของ Planck)

▶ 1.2. ตำแหน่ง

การวัดตำแหน่งและการ Normalize

ในกลศาสตร์ควอนตัม อนุภาคไม่ได้มีตำแหน่งที่แน่นอนเหมือนกับกลศาสตร์ดั้งเดิม แต่จะถูกอธิบายด้วยความน่าจะเป็น โดยที่มี $|\Psi(x,t)|=\Psi\cdot\Psi^*$ เป็นความหนาแน่นความน่าจะเป็นในการพบอนุภาคที่ x หรือก็คือ

ฟังก์ชันคลื่นกับการวัดตำแหน่ง.

$$\int_{a}^{b} |\Psi(x,t)|^{2} dx = P(a \le x \le b)$$

$$\tag{1.2}$$

โดยเมื่อมีการวัดเกิดขึ้นแล้ววัดได้ตำแหน่ง x=d ที่ t=0 ฟังก์ชันคลื่นจะ*ยุบตัว* (collapse) ให้ในครั้งถัดไป ถ้าวัด ตำแหน่งของอนุภาคทันทีหลังจากการวัดครั้งแรก ก็จะวัดได้ตำแหน่งเดิม หรือก็คือจะได้ว่า Ψ ใหม่จะมีปริเวณที่ $|\Psi| \neq 0$ ที่เดียวคือที่ x=d เป็น ∞

สังเกตว่าจาก (1.2) ถ้าอยากให้ $|\Psi(x,t)|^2$ มีความหมายเชิงสถิติ เราจะต้องทำให้การอินทิเกรตฟังก์ชันนี้ทั่วทุก บริเวณเป็น 1 ซึ่งเรียกว่าเป็นการ normalize ฟังก์ชันคลื่น:

เงื่อนไขการ Normalize.

$$\oint |\Psi(x,t)|^2 \, \mathrm{d}x = 1 \tag{1.3}$$

หมายเหตุ: จะนิยามให้ ∮ เป็นการอินทิเกรตทั่วทุกบริเวณ

โดยเราสามารถทำเช่นนี้ได้กับทุก ๆ ฟังก์ชันคลื่นโดยการคูณด้วยค่าคงที่เข้าไป (จริง ๆ แล้วยังมีฟังก์ชันที่ทำให้อิน ทิกรัลลู่ออกที่ไม่สามารถ normalize ได้ แต่เราจะสมมติว่าฟังก์ชันคลื่นเหล่านั้นไม่สามารถพบได้หรือ non-physical) โดยจากเงื่อนไขว่าทุก ๆ ฟังก์ชันคลื่นสามารถ normalize ได้ ทำให้ $|\Psi|\sim o(1/\sqrt{x})$ เมื่อ $x\to\infty$ เพราะมิฉะนั้นอิน ทิกรัลจะลู่ออก และเมื่อ normalize แล้ว ยังได้อีกว่าวิวัฒนาการของฟังก์ชันคลื่นจะไม่ทำให้อินทิกรัลใน (1.3) เปลี่ยน ค่า ซึ่งพิสูจน์ได้ดังต่อไปนี้:

บทตั้ง.

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \oint |\Psi(x,t)|^2 \,\mathrm{d}x = 0 \tag{1.4}$$

พิสูจน์. เริ่มจากการหา $\frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2$:

$$\frac{\partial}{\partial t} |\varPsi|^2 = \frac{\partial}{\partial t} \varPsi^* \varPsi = \varPsi^* \frac{\partial \varPsi}{\partial t} + \frac{\partial \varPsi^*}{\partial t} \varPsi \tag{\star}$$

แต่จากสมการ Schrödinger (1.1) จะได้

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{i}{\hbar} V \Psi$$
$$\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} + \frac{i}{\hbar} V \Psi^*$$

นำไปแทนใน (*) จะได้

$$\begin{split} \frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 &= \Psi^* \left(\frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{i}{\hbar} V \Psi \right) + \Psi \left(-\frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} + \frac{i}{\hbar} V \Psi^* \right) \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \left(\Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} \Psi \right) \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial}{\partial x} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) \end{split} \tag{1.5}$$

ดังนั้น

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \oint |\Psi|^2 \, \mathrm{d}x = \oint \frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 \, \mathrm{d}x = \frac{i\hbar}{2m} \oint \frac{\partial}{\partial x} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) \mathrm{d}x = 0$$

(เพราะ Ψ ที่ ∞ ต้องเป็น 0 มิฉะนั้นจะไม่สามารถ $\operatorname{normalize}$ ได้) ตามต้องการ

▶ 1.3. โมเมนตัม

เมื่อเวลาผ่านไป ฟังก์ชันคลื่น Ψ จะวิวัฒน์ไปเรื่อย ๆ ตามสมการ (1.1) ก็จะทำให้ $\langle x \rangle$ เปลี่ยนไปตามเวลาด้วย เราจึง อาจจะอยากทราบ "ความเร็ว" ของอนุภาคนี้:

$$\frac{\mathrm{d}\langle x\rangle}{\mathrm{d}t} = \oint \frac{\partial}{\partial t} \left(x|\Psi|^2\right) \mathrm{d}x = \oint x \frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 \, \mathrm{d}x$$

$$\stackrel{(1.5)}{=} \frac{i\hbar}{2m} \oint x \frac{\partial}{\partial x} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi\right) \, \mathrm{d}x$$

$$\stackrel{\mathrm{IBP}}{=} \frac{i\hbar}{2m} \left(x \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi\right) \right|_{-\infty} - \oint \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi\right) \, \mathrm{d}x$$

$$= -\frac{i\hbar}{2m} \oint \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi\right) \, \mathrm{d}x$$

$$\stackrel{\mathrm{IBP}}{=} -\frac{i\hbar}{m} \oint \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \, \mathrm{d}x$$

โดยเราจะเรียกอนุพันธ์นี้ว่าเป็น*ค่าคาดหมายของความเร็ว* $\langle v
angle$ และจะได้โมเมนตัม

ค่าคาดหมายของโมเมนตัม.

$$\langle p \rangle = m \frac{\mathrm{d}\langle x \rangle}{\mathrm{d}t} = -i\hbar \oint \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) \mathrm{d}x$$
 (1.6)

สังเกตว่าค่าคาดหมายของตำแหน่งและโมเมนตัมอยู่ในรูปคล้าย ๆ กันคือเป็นอินทิกรัลทั่วทุกบริเวณของ Ψ^* คูณกับ การกระทำบางอย่างกับฟังก์ชันคลื่น Ψ เราจึงนิยามโอเปอเรเตอร์ ตำแหน่ง (\hat{x}) และโมเมนตัม (\hat{p}) :

นิยามโอเปอเรเตอร์ตำแหน่ง (ในหนึ่งมิติ).

$$\hat{x} \equiv x \tag{1.7}$$

นิยามโอเปอเรเตอร์โมเมนตัม (ในหนึ่งมิติ).

$$\hat{p} \equiv -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \tag{1.8}$$

เราสามารถหาโอเปอเรเตอร์ของค่าทางกลศาสตร์ต่าง ๆ (เช่น Q(x,p)) ได้โดยการนำโอเปอเรเตอร์ \hat{p} และ \hat{x} มา ประกอบกัน จึงจะตั้งข้อสมมติไปก่อนว่า

การหาค่าคาดหมายสำหรับค่าทางกลศาสตร์.

$$\langle Q(x,p)\rangle = \oint \Psi^* \hat{Q}\Psi \,dx = \oint \Psi^* (Q(\hat{x},\hat{p}))\Psi \,dx$$
 (1.9)

▶ 1.4. หลักความไม่แน่นอนของ Heisenberg

ในคลื่นเชือกปกติ ถ้าเราสั่นมันให้มีความยาวคลื่นที่แน่นอน เราจะไม่สามารถตำแหน่งของคลื่นได้ชัดเจน แต่ในทางกลับ กัน ถ้าเราสั่นมันให้เกิดลูกคลื่นลูกเดียวที่มีตำแหน่งแน่นอน เราจะไม่สามารถหาความยาวคลื่นได้ ฟังก์ชันคลื่นก็เป็น เช่นเดียวกัน โดยโมเมนตัมจะทำหน้าที่คล้ายความยาวคลื่นเพราะทั้งสองมีความสัมพันธ์กันด้วยสูตร*ความยาวคลื่น De* Broglie:

ความยาวคลื่น De Broglie.

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{2\pi\hbar}{\lambda} \tag{1.10}$$

และ Heisenberg ก็ได้พบว่าความไม่แน่นอนของความยาวคลื่น (โมเมนตัม) และตำแหน่งนั้น มีขอบเขตล่างคือ:

หลักความไม่แน่นอนของ Heisenberg.

$$\Delta x \, \Delta p = \sigma_x \sigma_p \ge \frac{\hbar}{2} \tag{1.11}$$

(ซึ่งจะพิสูจน์ในบทที่ 3)

บทที่ 2 | สมการ Schrödinger ที่ไม่ขึ้นกับเวลา

- ▶ 2.ไ. สมการ Schrödinger ที่ไม่ขึ้นกับเวลา
- การแยกตัวแปร