

Quantum Mechanics Notes

by Ham Kittichet

June 9, 2025

► Table of Contents

บทที่ 1. ฟังก์ชันคลื่น	1
► 1.1. ฟังก์ชันคลื่น	1
► 1.2. ตำแหน่งและโมเมนตัม	1
► 1.3. หลักความไม่แน่นอนของ Heisenberg	4
บทที่ 2. สมการ Schrödinger ที่ไม่ขึ้นกับเวลา	5
► 2.1. สมการ Schrödinger ที่ไม่ขึ้นกับเวลา	5
► 2.2. บ่อศักย์อนันต์	8
► 2.3. Harmonic Oscillator เชิงควอนตัม	10

บทที่ 1 | ฟังก์ชันคลื่น

► 1.1. ฟังก์ชันคลื่น

► ฟังก์ชันคลื่นและสมการ Schrödinger

ในกลศาสตร์ดั้งเดิม เราจะอธิบายอนุภาคหนึ่ง ๆ ด้วยตำแหน่งและโมเมนตัม แต่ในกลศาสตร์ควอนตัม เราจะใช้สิ่งที่เรียกว่าฟังก์ชันคลื่น (wavefunction: $\Psi(x, t)$ ในหนึ่งมิติ) ซึ่งมีโดเมนเป็น \mathbb{C}

การเปลี่ยนแปลงของตำแหน่งและโมเมนตัมเมื่อเวลาผ่านไปในกลศาสตร์ดั้งเดิมจะถูกอธิบายด้วยกฎของนิวตัน แต่ในกลศาสตร์ควอนตัม เราจะอธิบายวิวัฒนาการของฟังก์ชันคลื่นด้วยสมการ Schrödinger:

(1.1)

สมการ Schrödinger.

อนุภาคที่มีฟังก์ชันคลื่น Ψ จะมีวิวัฒนาการเป็นไปตามสมการ

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

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

► 1.2. ตำแหน่งและโมเมนตัม

► การวัดตำแหน่งและการ Normalize

ในกลศาสตร์ควอนตัม อนุภาคไม่ได้มีตำแหน่งที่แน่นอนเหมือนกับกลศาสตร์ดั้งเดิม แต่จะถูกอธิบายด้วยความน่าจะเป็น โดยมี $|\Psi(x, t)|^2 = \Psi \cdot \Psi^*$ เป็นความหนาแน่นความน่าจะเป็นในการพบอนุภาคที่ x หรือก็คือ

(1.2)

ฟังก์ชันคลื่นกับการวัดตำแหน่ง.

$$\int_a^b |\Psi(x, t)|^2 dx = P(a \leq x \leq b)$$

โดยเมื่อมีการวัดเกิดขึ้นแล้ววัดได้ตำแหน่ง $x = d$ ที่ $t = 0$ ฟังก์ชันคลื่นจะยุบตัว (collapse) ให้ในครั้งถัดไป ถ้าวัดตำแหน่งของอนุภาคทันทีหลังจากการวัดครั้งแรก ก็จะวัดได้ตำแหน่งเดิม หรือก็คือจะได้ว่า Ψ ใหม่จะมีบริเวณที่ $|\Psi| \neq 0$ ที่เดียวคือที่ $x = d$ เป็น ∞

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

(1.3)

เงื่อนไขการ Normalize.

$$\oint |\Psi(x, t)|^2 dx = 1$$

หมายเหตุ: จะนิยามให้ \oint เป็นการอินทิเกรตทั่วทุกบริเวณ

โดยเราสามารถทำเช่นนี้ได้กับทุก ๆ ฟังก์ชันคลื่นโดยการคูณด้วยค่าคงที่เข้าไป (จริง ๆ แล้วยังมีฟังก์ชันที่ทำให้อินทิกรัลลู่ออกที่ไม่สามารถ normalize ได้ แต่เราจะสมมติว่าฟังก์ชันคลื่นเหล่านั้นไม่สามารถพบได้หรือ *non-physical*) โดยจากเงื่อนไขว่าทุก ๆ ฟังก์ชันคลื่นสามารถ normalize ได้ ทำให้ $|\Psi| \sim o(1/\sqrt{x})$ เมื่อ $x \rightarrow \infty$ เพราะมิฉะนั้นอินทิกรัลจะลู่ออก และเมื่อ normalize แล้ว ยังได้อีกว่าวิวัฒนาการของฟังก์ชันคลื่นจะไม่ทำให้อินทิกรัลใน (1.3) เปลี่ยนค่า ซึ่งพิสูจน์ได้ดังต่อไปนี้:

(1.4)

บทตั้ง.

$$\frac{d}{dt} \oint |\Psi(x, t)|^2 dx = 0$$

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

$$\frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 = \frac{\partial}{\partial t} \Psi^* \Psi = \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \Psi \quad (*)$$

แต่จากสมการ Schrödinger (1.1) จะได้

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

นำไปแทนใน (*) จะได้

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

หรือก็คือ

(1.5)

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

ดังนั้น

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

(เพราะ Ψ ที่ ∞ ต้องเป็น 0 มิฉะนั้นจะไม่สามารถ normalize ได้) ตามต้องการ \square

► โมเมนตัมและโอเปอเรเตอร์

เมื่อเวลาผ่านไป ฟังก์ชันคลื่น Ψ จะวิวัฒนาการไปเรื่อย ๆ ตามสมการ (1.1) ก็จะทำให้ $\langle x \rangle$ เปลี่ยนไปตามเวลาด้วย เราจึงอาจจะอยากทราบ “ความเร็ว” ของอนุภาคนี้:

$$\begin{aligned} \frac{d\langle x \rangle}{dt} &= \oint \frac{\partial}{\partial t} (x |\Psi|^2) dx = \oint x \frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 dx \\ &\stackrel{(1.5)}{=} \frac{i\hbar}{2m} \oint x \frac{\partial}{\partial x} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) dx \\ &\stackrel{\text{IBP}}{=} \frac{i\hbar}{2m} \left(x \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) \Big|_{-\infty}^{\infty} - \oint \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) dx \right) \\ &= -\frac{i\hbar}{2m} \oint \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) dx \\ &\stackrel{\text{IBP}}{=} -\frac{i\hbar}{m} \oint \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx \end{aligned}$$

โดยเราจะเรียกอนุพันธ์นี้เป็นค่าคาดหวังของความเร็ว $\langle v \rangle$ และจะได้โมเมนตัม

(1.6)

ค่าคาดหวังของโมเมนตัม.

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

สังเกตว่าค่าคาดหวังของตำแหน่งและโมเมนตัมอยู่ในรูปคล้าย ๆ กันคือเป็นอินทิกรัลทั่วทุกบริเวณของ Ψ^* คูณกับการกระทำบางอย่างกับฟังก์ชันคลื่น Ψ เราจึงนิยามโอเปอเรเตอร์ตำแหน่ง (\hat{x}) และโมเมนตัม (\hat{p}):

(1.7)

นิยามโอเปอเรเตอร์ตำแหน่ง (ในหนึ่งมิติ).

$$\hat{x} \equiv x$$

(1.8)

นิยามโอเปอเรเตอร์โมเมนตัม (ในหนึ่งมิติ).

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

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

(1.9)

การหาค่าคาดหวังสำหรับค่าทางกลศาสตร์.

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

► 1.3. หลักความไม่แน่นอนของ Heisenberg

► หลักความไม่แน่นอนของ Heisenberg

ในคลื่นเชือกปกติ ถ้าเราสั่นมันให้มีความยาวคลื่นที่แน่นอน เราจะไม่สามารถระบุตำแหน่งของคลื่นได้ชัดเจน แต่ในทางกลับกัน ถ้าเราสั่นมันให้เกิดลูกคลื่นลูกเดียวที่มีตำแหน่งแน่นอน เราจะไม่สามารถหาความยาวคลื่นได้ ฟังก์ชันคลื่นก็เป็นเช่นเดียวกัน โดยโมเมนตัมจะทำหน้าที่คล้ายความยาวคลื่นเพราะทั้งสองมีความสัมพันธ์กันด้วยสูตรความยาวคลื่น De Broglie:

(1.10)

ความยาวคลื่น De Broglie.

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

และ Heisenberg ก็ได้พบว่าความไม่แน่นอนของความยาวคลื่น (โมเมนตัม) และตำแหน่งนั้น มีขอบเขตล่างคือ:

(1.11)

หลักความไม่แน่นอนของ Heisenberg.

$$\Delta x \Delta p = \sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2}$$

(ซึ่งจะพิสูจน์ในบทที่ 3)

บทที่ 2 | สมการ Schrödinger ที่ไม่ขึ้นกับเวลา

► 2.1. สมการ Schrödinger ที่ไม่ขึ้นกับเวลา

► การแยกตัวแปร

พิจารณาการแก้สมการ Schrödinger โดยการแยกตัวแปร (โดยเช่นเคย เมื่อแก้สมการออกมาแล้วเราจะสามารถสร้างคำตอบในรูปแบบทั่วไปได้โดยการนำชุดของคำตอบทั้งหมดมารวมกัน เพราะสมการ Schrödinger เป็นสมการเชิงเส้น และปรากฏว่าคำตอบทั้งหมดที่ได้เป็นเซตของฟังก์ชันที่สมมูลและตั้งฉากกัน) โดยถ้าให้

$$\Psi(x, t) = \psi(x) \varphi(t)$$

เมื่อแทนใน (1.1) จะได้

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi \\ i\hbar \psi \frac{d\varphi}{dt} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \varphi \frac{d^2 \psi}{dx^2} + V\psi\varphi \\ i\hbar \frac{1}{\varphi} \frac{d\varphi}{dt} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + V \end{aligned}$$

ถ้า V เป็นฟังก์ชันที่ไม่ขึ้นกับเวลาจะได้ว่าฝั่งซ้ายและขวาต้องเท่ากัน สมมติเท่ากับ E ก็จะได้ว่า

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{1}{\varphi} \frac{d\varphi}{dt} &= E \\ \int \frac{1}{\varphi} d\varphi &= -\frac{iE}{\hbar} \int dt \end{aligned}$$

ก็จะได้ว่า

(2.1)

$$\varphi(t) = e^{-iEt/\hbar}$$

(โดยจะละค่าคงที่ไว้เพราะ absorb ไว้ในผลเฉลยของ ψ) และอีกสมการหนึ่งเราจะเรียกว่าเป็นสมการ Schrödinger ที่ไม่ขึ้นกับเวลา:

(2.2)

สมการ Schrödinger ที่ไม่ขึ้นกับเวลา.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V\psi = E\psi$$

ฟังก์ชันคลื่นที่เป็นผลเฉลยแบบแยกตัวแปรได้

(2.3)

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

จะเรียกว่าเป็นสถานะนิ่ง (stationary state) เพราะสังเกตว่า observable $Q(x, p)$ ใด ๆ ไม่ขึ้นกับเวลา:

$$\begin{aligned}\langle Q \rangle &= \oint \Psi^* \hat{Q} \Psi dx \\ &= \oint \psi^* e^{iEt/\hbar} \hat{Q} \psi e^{-iEt/\hbar} dx \\ &= \oint \psi^* \hat{Q} \psi dx\end{aligned}$$

(โอเปอเรเตอร์ \hat{Q} ขึ้นอยู่กับแค่ \hat{x} และ \hat{p} ซึ่งไม่ขึ้นกับเวลาทั้งคู่)

► Hamiltonian

ในกลศาสตร์ดั้งเดิมเราจะเรียกพลังงานรวมของระบบ (พลังงานจลน์บวกพลังงานศักย์) ว่าเป็น Hamiltonian H โดยที่

$$H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

เราจึงสร้างโอเปอเรเตอร์ Hamiltonian ได้ดังนี้:

(2.4)

นิยามโอเปอเรเตอร์ Hamiltonian.

$$\hat{H} \equiv \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

ก็จะได้สมการ (2.2) อยู่ในรูป

(2.5)

สมการ Schrödinger ที่ไม่ขึ้นกับเวลาในรูป Hamiltonian.

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

พิจารณาการหาค่าคาดหวังและส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของ H ด้วยฟังก์ชันคลื่นที่แยกตัวแปรได้:

$$\langle H \rangle = \oint \psi^* \hat{H} \psi dx = \oint \psi^* E \psi dx = E \oint |\psi|^2 dx = E \quad (\star 1)$$

และ

$$\langle H^2 \rangle = \oint \psi^* \hat{H}^2 \psi dx = E^2 \oint |\psi|^2 dx = E^2$$

ดังนั้น

$$\sigma_H^2 = \langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2 = E^2 - E^2 = 0 \quad (*)2$$

จาก (*)1 และ (*)2 จะได้ว่าคำตอบเหล่านี้อยู่ในสถานะที่มีพลังงานแน่นอน (definite energy)

ต่อมา เรามาดูสมบัติต่าง ๆ ของพลังงานผลเฉลยสมการ (2.2)

(2.6)

บทตั้ง. ค่าพลังงาน E ที่เป็นไปได้เป็นจำนวนจริง

พิสูจน์. สมมติ $E \equiv E_0 + i\Gamma$ จะได้ว่า

$$\Psi(x, t) = \psi(x) e^{-i(E_0 + i\Gamma)t/\hbar} = \psi(x) e^{-iE_0 t/\hbar} e^{-\Gamma t/\hbar}$$

ดังนั้น

$$\oint |\Psi|^2 dx = \oint \Psi^* \Psi dx = e^{2\Gamma t/\hbar} \oint \psi^*(x) \psi(x) dx$$

ซึ่งต้องเท่ากับ 1 ทุก ๆ t ดังนั้น Γ จึงต้องเท่ากับ 0 ทำให้ E ต้องเป็นจำนวนจริง ตามต้องการ \square

(2.7)

บทตั้ง. เราสามารถสร้าง $\psi(x)$ ที่เป็นฟังก์ชันจริงได้เสมอ ไม่ว่า E จะเป็นค่าเท่าใดก็ตาม

พิสูจน์. สมมติ ψ เป็นคำตอบของสมการ (2.2) เมื่อใส่ conjugate ไปทั้งสองฝั่งจะได้ว่า ψ^* ก็เป็นผลเฉลย ดังนั้น $\psi + \psi^*$ เป็นผลเฉลยด้วย (เพราะสมการ Schrödinger เป็นสมการเชิงเส้น) ซึ่งเป็นผลเฉลยจริง ตามต้องการ \square

ดังนั้นในการนำ ψ มารวมกันจะตั้งข้อสมมติเลยว่า ψ เป็นฟังก์ชันจริง

(2.8)

บทตั้ง. ค่าพลังงาน E ที่เป็นไปได้จะต้องมีค่ามากกว่า V_{\min}

พิสูจน์. สมมติว่า $E \leq V_{\min}$ และย้ายข้างสมการ (2.2) จะได้

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

เนื่องจาก $V(x) - E \geq V_{\min} - E \geq 0$ จะได้ว่าเครื่องหมายของ $\frac{d^2\psi}{dx^2}$ และ ψ จะต้องตรงกันเสมอ ต่อมาจะพิสูจน์ว่าฟังก์ชันที่มีเงื่อนไขดังกล่าวไม่สามารถ normalize ได้

สังเกตว่าถ้ามีค่า $x_0 \in \mathbb{R}$ ที่ทำให้ $\psi(x_0) > 0$ และ $\frac{d\psi}{dx}(x_0) = m \neq 0$ ในกรณี $m > 0$ จะได้ว่า ψ จะโตขึ้นเรื่อย ๆ เมื่อ $x \rightarrow \infty$ และกรณี $m < 0$ จะได้ ψ จะโตขึ้นเรื่อย ๆ เมื่อ $x \rightarrow -\infty$ ซึ่งเห็นชัดว่าไม่สามารถ normalize ได้ (กรณี $\psi(x_0) < 0$ ทำคล้ายกัน) จึงเหลือแค่กรณี $\psi(x)$ เป็นฟังก์ชันคงตัว ซึ่งก็ไม่สามารถ normalize ได้เช่นกัน \square

► ผลเฉลยรวม

เมื่อแก้สมการ เราจะมีชุดคำตอบของค่าพลังงาน E ที่ “เป็นไปได้” โดยให้เป็นลำดับ $(E_n)_{n=1}^{\infty}$ และแต่ละค่า E_n ก็จะมีคำตอบ ψ_n ที่คู่กับพลังงานค่า นั้น สอดคล้องแล้วเมื่อนำมารวมกัน จะได้ว่า

(2.9)

ผลเฉลยของสมการ Schrödinger ในหนึ่งมิติ.

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}$$

หมายเหตุ: เราจะนำชุดของ $(\psi_n)_{n=1}^{\infty}$ ให้เป็นเซตที่เป็นฟังก์ชันจริงและ orthonormal ($\int \psi_m \psi_n dx = \delta_{mn}$ เมื่อ δ คือ Kronecker delta) ซึ่งจะพิสูจน์ว่าสามารถทำได้เสมอในบทถัดไป

พิจารณาเงื่อนไขในการ normalize Ψ ที่ได้ใน (2.9):

(2.10)

$$\int \Psi^* \Psi dx = \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \int c_m^* c_n \psi_m \psi_n dx = \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} c_m^* c_n \delta_{mn} = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 = 1$$

และจะได้ค่าคาดหวังของพลังงาน:

(2.11)

$$\langle H \rangle = \int \Psi^* \hat{H} \Psi dx = \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \int c_m^* c_n E_n \psi_m \psi_n dx = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 E_n$$

โดยขนาดสัมประสิทธิ์ $|c_n|^2$ นี้มีสมบัติคือเป็นความน่าจะเป็นที่จะวัดพลังงานได้ E_n (จะพิสูจน์อีกที)

► 2.2. บ่อศักย์อนันต์

► บ่อศักย์อนันต์

กำหนดให้ในบริเวณหนึ่งมี

(2.12)

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{เมื่อ } x \in [0, a] \\ \infty & \text{เมื่อ } x \notin [0, a] \end{cases}$$

จะได้ว่าสำหรับ $x \in [0, a]$:

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

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

เมื่อ $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ เป็นจำนวนจริง (เพราะจากที่พิสูจน์ไป E ในกรณีนี้ไม่มีทางน้อยกว่า $V_{\min} = 0$) ก็จะแก้ได้ว่า

$$\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx$$

โดยเรามีเงื่อนไขที่ขอบเขต $\psi(0) = 0$ และ $\psi(a) = 0$ เพราะ ψ ต้องต่อเนื่อง (พิสูจน์ที่หลัง) ดังนั้นเมื่อแทน $x = 0$ จะได้ $B = 0$ และเมื่อแทน $x = a$ จะได้ $A = 0$ หรือ $ka \in \{0, \pm\pi, \pm2\pi, \pm3\pi, \dots\}$ แต่ A และ k ห้ามเป็น 0 เพราะมิฉะนั้นฟังก์ชันคลื่น $\Psi(x, t) = \psi(x) e^{-iEt/\hbar}$ จะไม่สามารถ normalize ได้

อย่างน่าแปลกใจ เราได้เงื่อนไขของ E ที่เป็นไปได้จากการแก้สมการ โดยเนื่องจากค่า k ที่เป็นไปได้คือ

$$k = \frac{n\pi}{a}, \quad n \in \mathbb{Z}^+$$

(เพราะถ้า n เป็นลบเราสามารถ absorb เข้าค่าคงที่ A ได้และ $n \neq 0$ เพราะ Ψ จะไม่สามารถ normalize ได้) จะได้ว่า E ที่เป็นไปได้คือ

(2.13)

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2ma^2} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}, \quad n \in \mathbb{Z}^+$$

ก็จะได้

(2.14)

พลังงานของบ่อศักย์อนันต์.

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}, \quad n \in \mathbb{Z}^+$$

ต่อมาหาชุดของ $(\phi_n)_{n=1}^\infty$ ที่ orthonormal (orthogonal จะสมมติเลยว่าจริงแต่จะหาแค่ A ที่ทำให้ ψ ถูก normalize):

$$\int_0^a A^2 \sin^2(kx) dx = A^2 \left(\frac{a}{2}\right) = 1$$

ดังนั้นได้ $A = \sqrt{2/a}$ (ถ้า A ติดลบจะถูก absorb ได้เมื่อหาสัมประสิทธิ์ c_n อยู่ดี จึงให้เป็นบวก) ก็จะได้

(2.15)

สถานะนิ่งของบ่อศักย์อนันต์.

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right), \quad n \in \mathbb{Z}^+$$

เราจะเรียกสถานะที่มีพลังงานต่ำที่สุด ($n = 1$) ว่าเป็นสถานะพื้น (ground state) และสถานะอื่นว่าสถานะกระตุ้น (excited state) และเราสามารถหาสัมประสิทธิ์ c_n สำหรับ $\Psi(x, t)$ ใด ๆ (โดยที่มีสภาวะขอบเขต $\Psi(x, 0)$) ได้โดย

(2.16)

$$c_n = \oint \Psi(x, 0) \psi_n(x) dx = \sqrt{\frac{2}{a}} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \Psi(x, 0) dx$$

► 2.3. Harmonic Oscillator เชิงควอนตัม

► Harmonic Oscillator และ Commutator

ในกลศาสตร์ดั้งเดิม ศักย์ของระบบ *simple harmonic oscillator* กำหนดด้วย

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

หรือ

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

ดังนั้นเราจะพิจารณาศักย์เดียวกันในกลศาสตร์ควอนตัม:

→
(2.17)

สมการ Schrödinger ของ Harmonic Oscillator.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\psi = \hat{H}\psi = E\psi$$

โดยก่อนที่เราจะแก้สมการด้านบน เราจะนิยาม *commutator* ของโอเปอเรเตอร์ \hat{A} และ \hat{B} ดังนี้:

→
(2.18)

นิยาม Commutator.

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

คล้ายกับการวัด “ความไม่สลับที่ได้” ของสองโอเปอเรเตอร์ พิจารณา $[\hat{x}, \hat{p}]$:

$$\begin{aligned} [\hat{x}, \hat{p}] f(x) &= \left(-i\hbar x \frac{d}{dx} + i\hbar \frac{d}{dx} x \right) f(x) \\ &= \cancel{-i\hbar x \frac{d}{dx} f(x)} + \cancel{i\hbar \frac{d}{dx} f(x)} + i\hbar f(x) \\ &= i\hbar f(x) \end{aligned}$$

ดังนั้น

→
(2.19)

Commutator ของตำแหน่งและโมเมนตัม.

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$$

► วิธีเชิงพีชคณิต

พิจารณา

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 = \frac{1}{2m}(\hat{p}^2 + (m\omega x)^2)$$

ลองพยายาม “แยกตัวประกอบ” โดยนิยาม

(2.20)

นิยามโอเปอเรเตอร์ขึ้นบันได.

$$\hat{a}_{\pm} \equiv \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(\mp i\hat{p} + m\omega x)$$

(สัมประสิทธิ์ด้านหน้ามีเพื่อให้จัดรูปสวย ๆ) จะได้ว่า

$$\begin{aligned}\hat{a}_-\hat{a}_+ &= \frac{1}{2\hbar m\omega}(\hat{p}^2 + (m\omega x)^2 - im\omega[\hat{x}, \hat{p}]) \\ &= \frac{1}{2\hbar m\omega}(\hat{p}^2 + (m\omega x)^2 + \hbar m\omega) \\ &= \frac{1}{\hbar\omega}\hat{H} + \frac{1}{2}\end{aligned}\quad (o1)$$

และในทำนองเดียวกัน

$$\hat{a}_+\hat{a}_- = \frac{1}{\hbar\omega}\hat{H} - \frac{1}{2}\quad (o2)$$

จาก (o1) และ (o2) ก็จะได้

(2.21)

$$[\hat{a}_-, \hat{a}_+] = 1$$

และสมการ Schrödinger (2.17) จะอยู่ในรูป

(2.22)

$$\hat{H}\psi = \hbar\omega\left(\hat{a}_{\pm}\hat{a}_{\mp} \pm \frac{1}{2}\right)\psi = E\psi$$

พิจารณาคำตอบหนึ่งของสมการ และนำคำตอบนั้นมา operate ด้วย \hat{a}_+ :

$$\begin{aligned}\hat{H}(\hat{a}_+\psi) &= \hbar\omega\left(\hat{a}_+\hat{a}_- + \frac{1}{2}\right)\hat{a}_+\psi = \hat{a}_+\hbar\omega\left(\hat{a}_-\hat{a}_+ + \frac{1}{2}\right)\psi \\ &= \hat{a}_+\hbar\omega\left(\hat{a}_-\hat{a}_+ - \frac{1}{2} + 1\right)\psi = \hat{a}_+(\hat{H} + \hbar\omega)\psi \\ &= (E + \hbar\omega)(\hat{a}_+\psi)\end{aligned}$$

ซึ่งเป็นคำตอบของสมการ (2.17) ที่มีพลังงาน $E + \hbar\omega$ และในทำนองเดียวกันจะได้ว่า

$$\hat{H}(\hat{a}_-\psi) = (E - \hbar\omega)(\hat{a}_-\psi)$$

ดังนั้นถ้าเรามีคำตอบหนึ่งของ (2.17) เราสามารถหาคำตอบที่มีพลังงานอื่น ๆ ได้:

(2.23)

การสร้างคำตอบใหม่ของ Harmonic Oscillator.

ถ้ามีคำตอบ ψ ของสมการ (2.17) เราจะสามารถสร้างคำตอบที่มีระดับพลังงานสูงหรือต่ำกว่าได้โดย

$$\hat{H}(\hat{a}_{\pm}\psi) = (E \pm \hbar\omega)(\hat{a}_{\pm}\psi)$$

เราจึงเรียกโอเปอเรเตอร์ \hat{a}_\pm ว่าโอเปอเรเตอร์ขั้นบันได

ต่อมาสังเกตว่าเราสามารถสร้างคำตอบที่มีพลังงานลดลงได้เรื่อย ๆ ซึ่งจะขัดแย้งกับที่เคยพิสูจน์ว่า $E > 0$ ดังนั้นจะต้องมี ψ_0 สักตัวที่เป็น “ขั้นบันไดขั้นแรก” ที่เมื่อใช้ lowering operator (\hat{a}_-) แล้วจะได้ฟังก์ชันที่ไม่สามารถ normalize ได้:

$$\hat{a}_- \psi_0 = 0$$

(สมมติไปก่อนว่าฟังก์ชันที่ไม่สามารถ normalize ได้นั้นเป็น 0 ไปเลย เพราะการมี square integral เป็น ∞ ไม่จำเป็นว่าจะไม่ต้องพิจารณา) ดังนั้น

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left(\hbar \frac{d}{dx} + m\omega x \right) \psi_0 &= 0 \\ \frac{m\omega}{\hbar} \int x dx &= - \int \frac{1}{\psi_0} d\psi_0 \\ \frac{m\omega}{2\hbar} x^2 + C &= -\log \psi_0 \\ \psi_0 &= A e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} \end{aligned}$$

จาก

$$1 = \oint \psi_0^2 dx = A^2 \oint e^{-\frac{m\omega}{\hbar} x^2} dx = A^2 \sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}}$$

จะได้ค่าคงที่ที่ทำให้ฟังก์ชันนี้ normalize คือ

$$A = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4}$$

และพิจารณาพลังงาน (E_0) ที่สถานะ ψ_0 นี้:

$$\hat{H}\psi_0 = \hbar\omega \left(\hat{a}_+ \hat{a}_- + \frac{1}{2} \right) \psi_0 = \hbar\omega \hat{a}_+ (\hat{a}_- \psi_0) + \frac{1}{2} \hbar\omega \psi_0 = \left(\frac{1}{2} \hbar\omega \right) \psi_0$$

ก็จะได้พลังงานที่สถานะพื้นนี้เท่ากับ

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega$$

สรุปก็คือ

(2.24)

สถานะพื้นของ Harmonic Oscillator.

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} \quad \text{และ} \quad E_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega$$

หมายเหตุ: คำตอบทั้งหมดของ (2.17) จะต้องมาจากการ operate \hat{a}_+ บน ψ_0 เพราะทุก ๆ คำตอบที่เราสนใจจะต้องเกิดสถานะพื้นที่มีเงื่อนไข $\hat{a}_- \psi_0 = 0$ เสมอ

และก็จะได้

(2.25)

พลังงานของ Harmonic Oscillator.

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega, \quad n \in \mathbb{Z}_0^+$$

ต่อมาพิจารณาการหาสัมประสิทธิ์ A_n ของ ψ_n โดยก่อนอื่นจะพิสูจน์ว่า \hat{a}_- และ \hat{a}_+ เป็น *adjoint* (หรือ *hermitian conjugate*) ของกันและกัน:

(2.26)

บทตั้ง.

$$\oint f^*(\hat{a}_\pm g) dx = \oint (\hat{a}_\mp f)^* g dx$$

พิสูจน์. เนื่องจาก integration by parts จะได้

$$\oint f^* \frac{dg}{dx} dx = \cancel{f^* g} \Big|_{-\infty}^{\infty} - \oint \left(\frac{df}{dx}\right)^* g dx = - \oint \left(\frac{df}{dx}\right)^* g dx$$

ดังนั้น

$$\begin{aligned} \oint f^*(\hat{a}_\pm g) dx &= \oint f^* \left(\frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left(\mp \hbar \frac{d}{dx} + m\omega x \right) \right) g dx \\ &= \oint \left(\frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left(\pm \hbar \frac{d}{dx} + m\omega x \right) f \right)^* g dx \\ &= \oint (\hat{a}_\mp f)^* g dx \end{aligned}$$

ตามต้องการ □

พิจารณาให้

$$\hat{a}_+ \psi_n = c_n \psi_{n+1}$$

จะได้ว่า

$$\begin{aligned} 1 &= \oint |\psi_{n+1}|^2 dx = \frac{1}{c_n^2} \oint (\hat{a}_+ \psi_n)^* (\hat{a}_+ \psi_n) dx \\ &= \frac{1}{c_n^2} \oint (\hat{a}_- \hat{a}_+ \psi_n)^* \psi_n dx \\ &= \frac{1}{c_n^2} \oint \left[\left(\frac{1}{\hbar\omega} \hat{H} + \frac{1}{2} \right) \psi_n \right]^* \psi_n dx \\ &= \frac{1}{c_n^2} \left(\frac{1}{\hbar\omega} E_n + \frac{1}{2} \right) \oint |\psi_n|^2 dx \\ &= \frac{1}{c_n^2} \left(\frac{1}{\hbar\omega} E_n + \frac{1}{2} \right) \end{aligned}$$

ดังนั้น

$$c_n = \sqrt{\frac{1}{\hbar\omega} \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega + \frac{1}{2}} = \sqrt{n+1}$$

ก็จะได้ว่า

(2.27)

สถานะนิ่งของ Harmonic Oscillator ในรูปโอเปอเรเตอร์ขั้นบันได.

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}_+)^n \psi_0(x), \quad n \in \mathbb{Z}_0^+$$

► วิธีเชิงวิเคราะห์

สมมติให้

$$\xi \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x$$

โดย (2.17) จะได้ว่า

(2.28)

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} = (\xi^2 - K) \psi$$

เมื่อ $K \equiv \frac{2E}{\hbar\omega}$

เราจะแก้สมการนี้โดยอาศัย power series แต่เนื่องจากโดยทั่วไปแล้ว ψ จะไม่เป็นฟังก์ชัน analytic เราจึงลองพิจารณา asymptotic behavior ของ ψ :

เมื่อ $\xi \rightarrow \pm\infty$ จะได้ว่า

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} \approx \xi^2 \psi$$

ซึ่งสามารถประมาณคำตอบได้

(2.29)

$$\psi(\xi) \approx Ae^{-\xi^2/2} + Be^{\xi^2/2}$$

แต่ส่วนหลังยังไ้ normalize ไม่ได้จึงตัดออกไป

ต่อมาเราจะกำหนดให้

(2.30)

$$\psi(\xi) = h(\xi) e^{-\xi^2/2}$$

และหวังว่าคำตอบที่ได้จะสามารถเขียนได้เป็น power series:

$$h(\xi) = a_0 + a_1\xi + a_2\xi^2 + \dots$$

เมื่อลองนำ (2.30) ไปแทนใน (2.17) จะได้ว่า

(2.31)

$$\frac{d^2 h}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dh}{d\xi} + (K - 1)h = 0$$

นำ power series ของ h ไปแทนจากนั้นเทียบสัมประสิทธิ์ ก็จะได้

$$(j + 1)(j + 2)a_{j+2} - 2ja_j + (K - 1)a_j = 0$$

หรือ

(2.32)

ความสัมพันธ์เวียนเกิดของสัมประสิทธิ์ Power Series ของ h .

$$a_{j+2} = \frac{2j + 1 - K}{(j + 1)(j + 2)} a_j$$

สำหรับทุก $j \in \mathbb{Z}^+$ โดยจะมีค่าขอบเขตที่เลือกได้คือ a_0 และ a_1 (ก็จะเห็นได้ว่า h กำลังคู่และกำลังคี่นั้น independent ต่อกันและกัน)

แต่สังเกตว่าเมื่อ $j \rightarrow \infty$ ทำให้ $a_{j+2} \approx (2/j) a_j$ หรือ $a_j \approx C/(j/2)!$ ดังนั้น

$$h(\xi) = \theta\left(\sum \frac{1}{(j/2)!} \xi^j\right) = \theta\left(\sum \frac{1}{j!} \xi^{2j}\right) = \theta(e^{\xi^2})$$

ซึ่งเห็นชัดว่าจะทำให้ ψ normalize ไม่ได้ ดังนั้นค่า K ที่สมเหตุสมผลจะต้องทำให้ความสัมพันธ์เวียนเกิดนี้จบลงที่เลขชี้กำลังค่าหนึ่ง แต่เราสามารถเลือกได้ให้เพียงกำลังคู่หรือกำลังคี่มีจุดจบเท่านั้น จึงทำให้เราจำเป็นต้องมี $a_0 = 0$ หรือ $a_1 = 0$

โดยค่า K ที่เป็นไปได้นั้นก็คือ

$$K = 2n + 1$$

สำหรับ $n \in \mathbb{Z}_0^+$ หรือก็จะได้ค่าพลังงานที่เป็นไปได้เช่นเดียวกับ (2.25)

จะเห็นว่าในแต่ละค่า n เราจะได้พหุนามดีกรี n ที่มีกำลังคู่หรือกำลังคี่อย่างใดอย่างหนึ่งเท่านั้นสำหรับ h โดยเราจะเรียกพหุนามที่ว่านี้ (เมื่อทำให้สัมประสิทธิ์พจน์สูงสุดเป็น 2^n ตาม convention) ว่าพหุนาม Hermite (H_n) โดยมี 6 ตัวแรกคือ:

$$H_1(\xi) = 2\xi$$

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

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

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

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

เราจะได้คำตอบของสมการ Schrödinger คือ

$$\psi_n(x) = C_n H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}$$

หรือเมื่อ normalize ก็จะได้

→
(2.33)

สถานะนิ่งของ Harmonic Oscillator ในรูปพหุนาม Hermite.

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}$$

ซึ่งถ้าลองใช้ความสัมพันธ์เวียนเกิดแบบโอเปอเรเตอร์ขึ้นบันไดใน (2.27) จะเห็นว่า ψ_n ทั้งหมดนี้เหมือนกัน