Quantum Mechanics Notes

by Ham Kittichet

► Table of Contents

บทที่ 1. 🛚 ฟัง	งก์ชันคลื่น	1
▶ 1.1.	ฟังก์ชันคลื่น	1
▶ 1.2.	ตำแหน่ง	1
	โมเมนตัม	
▶ 1.4.	หลักความไม่แน่นอนของ Heisenberg	4
	ม การ Schrödinger ที่ไม่ขึ้นกับเวลา สมการ Schrödinger ที่ไม่ขึ้นกับเวลา	5
	บ่อศักย์อนันต์	
	Harmonic Oscillator เชิงควอนตัม	

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) และ V เป็นฟังก์ชันจริง

▶ 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

▶ 2.1. สมการ Schrödinger ที่ไม่ขึ้นกับเวลา

การแยกตัวแปร

พิจารณาการแก้สมการ Schrödinger โดยการแยกตัวแปร (โดยเช่นเคย เมื่อแก้สมการออกมาแล้วเราจะสามารถสร้าง คำตอบในรูปทั่วไปได้โดยการนำชุดของคำตอบทั้งหมดมารวมกัน เพราะสมการ Schrödinger เป็นสมการเชิงเส้น และ ปรากฏว่าคำตอบทั้งหมดที่ได้เป็นเซตของฟังก์ชันที่*สมบูรณ์* และ*ตั้งฉากกัน*) โดยถ้าให้

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

เมื่อแทนใน (1.1) จะได้

$$\begin{split} i\hbar\frac{\partial\varPsi}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\varPsi}{\partial x^2} + V\varPsi\\ i\hbar\psi\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}t} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\varphi\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + V\psi\varphi\\ i\hbar\frac{1}{\varphi}\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}t} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + V \end{split}$$

ถ้า V เป็นฟังก์ชันที่ไม่ขึ้นกับเวลาจะได้ว่าฝั่งซ้ายและขวาต้องเท่ากัน สมมติเท่ากับ E ก็จะได้ว่า

$$i\hbar \frac{1}{\varphi} \frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}t} = E$$

$$\int \frac{1}{\varphi} \,\mathrm{d}\varphi = -\frac{iE}{\hbar} \int \,\mathrm{d}t$$

$$\varphi(t) = e^{-iEt/\hbar} \tag{2.1}$$

(โดยจะละค่าคงที่ไว้เพราะ absorb ไว้ในผลเฉลยของ ψ) และอีกสมการหนึ่งเราจะเรียกว่าเป็น*สมการ Schrödinger ที่* ไม่ขึ้นกับเวลา:

สมการ Schrödinger ที่ไม่ขึ้นกับเวลา.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + V\psi = E\psi \tag{2.2}$$

ฟังก์ชันคลื่นที่เป็นผลเฉลยแบบแยกตัวแปรได้

$$\Psi(x,t) = \psi(x) e^{-iEt/\hbar} \tag{2.3}$$

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

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

(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:

นิยามโอเปอเรเตอร์ Hamiltonian.

$$\hat{H} \equiv \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$
(2.4)

ก็จะได้สมการ (2.2) อยู่ในรูป

สมการ Schrödinger ที่ไม่ขึ้นกับเวลาในรูป Hamiltonian.

$$\hat{H}\psi = E\psi \tag{2.5}$$

พิจารณาการหาค่าคาดหมายและส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของ H ด้วยฟังก์ชันคลื่นที่แยกตัวแปรได้:

$$\langle H \rangle = \oint \psi^* \hat{H} \psi \, \mathrm{d}x = \oint \psi^* E \psi \, \mathrm{d}x = E \oint |\psi|^2 \, \mathrm{d}x = E$$
 (*1)

และ

$$\left\langle H^{2}\right\rangle =\oint\psi^{*}\hat{H}\psi\,\mathrm{d}x=E^{2}\oint\left|\psi\right|^{2}\mathrm{d}x=E^{2}$$

ดังนั้น

$$\sigma_H^2 = \langle H^2 \rangle + \langle H \rangle^2 = E^2 - E^2 = 0 \tag{*2}$$

จาก $(\star 1)$ และ $(\star 2)$ จะได้ว่าคำตอบเหล่านี้อยู่ในสภาวะที่มีพลังงานแน่นอน (definite energy) ต่อมา เรามาดูสมบัติต่าง ๆ ของพลังงานผลเฉลยสมการ (2.2)

บทตั้ง. ค่าพลังงาน E ที่เป็นไปได้เป็นจำนวนจริง

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

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

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

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

ดังนั้นในการนำ ψ มารวมกันจะตั้งข้อสมมติเลยว่า ψ เป็นฟังก์ชันจริง

บทตั้ง. ค่าพลังงาน E ที่เป็นไปได้จะต้องมีค่ามากกว่า V_{\min}

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

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

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

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

ผลเฉลยรวม

เมื่อแก้สมการ เราจะมีชุดคำตอบของค่าพลังงาน E ที่ "เป็นไปได้" โดยให้เป็นลำดับ $(E_n)_{n=1}^\infty$ และแต่ละค่า E_n ก็จะมีคำตอบ ψ_n ที่คู่กับพลังงานค่านั้น สุดท้ายแล้วเมื่อนำมารวมกัน จะได้ว่า

ผลเฉลยของสมการ Schrödinger ในหนึ่งมิติ.

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}$$
(2.6)

หมายเหตุ: เราจะนำชุดของ $(\psi_n)_{n=1}^\infty$ ให้เป็นเซตที่เป็นฟังก์ชันจริงและ $orthonormal\ (\oint \psi_m \psi_n \,\mathrm{d} x = \delta_{mn}\$ เมื่อ δ คือ $Kronecker\ delta)$ ซึ่งจะพิสูจน์ว่าสามารถทำได้เสมอในบทถัดไป

พิจารณาเงื่อนไขในการ normalize Ψ ที่ได้ใน (2.6):

$$\oint \Psi^* \Psi \, \mathrm{d}x = \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \oint c_m^* c_n \psi_m \psi_n \, \mathrm{d}x = \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} c_m^* c_n \delta_{mn} = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 = 1$$
 (2.7)

และจะได้ค่าคาดหมายของพลังงาน:

$$\langle H \rangle = \oint \Psi^* \hat{H} \Psi \, \mathrm{d}x = \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \oint c_m^* c_n E_n \psi_m \psi_n \, \mathrm{d}x = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 E_n$$
 (2.8)

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

▶ 2.2. บ่อศักย์อนันต์

บ่อศักย์อนันต์

กำหนดให้ในบริเวณหนึ่งมี

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{เมื่อ } x \in [0, a] \\ \infty & \text{เมื่อ } x \notin [0, a] \end{cases}$$
 (2.9)

จะได้ว่าสำหรับ $x \in [0, a]$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} = E\psi$$
$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + k^2\psi = 0$$

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 (พิสูจน์ทีหลัง) ดังนั้นเมื่อแทน x=0 จะ ได้ 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 เพราะ มิฉะนั้นฟังก์ชันคลื่น $\Psi(x,t)=\psi(x)\,e^{-iEt/\hbar}$ 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) จะได้ ว่า E ที่เป็นไปได้คือ

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2ma^2} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}, \quad n \in \mathbb{Z}^+$$
 (2.10)

ก็จะได้

พลังงานที่เป็นไปได้ในบ่อศักย์อนันต์.

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}, \quad n \in \mathbb{Z}^+$$
 (2.11)

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

ชุดของฟังก์ชันคลื่น (ที่ไม่ขึ้นกับเวลา) ในบ่อศักย์อนันต์.

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right), \quad n \in \mathbb{Z}^+$$
(2.12)

เราจะเรียกสถานะที่มีพลังงานตำที่สุด (n=1) ว่าเป็นสถานะพื้น $(ground\ state)$ และสถานะอื้นว่าสถานะกระตุ้น $(excited\ state)$ และเราจะสามารถหาสัมประสิทธิ์ c_n สำหรับ $\Psi(x,t)$ ใด ๆ (โดยที่มีสภาวะขอบเขต $\Psi(x,0)$) ได้โดย

$$c_n = \oint \Psi(x,0) \,\psi_n(x) \,\mathrm{d}x = \sqrt{\frac{2}{a}} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \Psi(x,0) \,\mathrm{d}x \tag{2.13}$$

▶ 2.3. Harmonic Oscillator เชิงควอนตับ

▶ Harmonic Oscillator