บทที่ 2

ทฤษฎีและงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

การวิจัยการประยุกต์ใช้วิธีการยิงคำตอบในการแก้ปัญหาศักย์คู่กำลังสี่ (Quartic Double-well Potential Problem) ครั้งนี้ ได้ทำการศึกษาทฤษฎีและงานวิจัยที่เกี่ยวข้องกับการใช้วิธีการยิงคำตอบ (Shooting Method) กับแก้ปัญหาสมการชโรดิงเจอร์ที่ไม่ขึ้นกับเวลาในหนึ่งมิติ (Time-independent Schrödinger equation in one dimensional) การทะลุกำแพงศักย์ (Potential Barrier Penetration) รวมถึงงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง โดยมีรายละเอียดดังนี้

สมการชเรอดิงเงอร์ที่ไม่ขึ้นกับเวลา (Time-independent Schrödinger Equation)

สมการชเรอดิงเงอร์ที่ไม่ขึ้นกับเวลาสำหรับอนุภาคเดี่ยวในสามมิติคือ

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r}) + V(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \qquad (1)$$

เมื่อ $\hbar$ เป็นค่าคงที่ลดทอนของแพลงค์ (Reduced Planck's constant)

m คือมวลของอนุภาค

V คือพลังงานศักย์ที่ส่งผลมายังอนุภาค

E คือพลังงานรวมของอนุภาค

และ ψ คือฟังก์ชันคลื่น (Wave Function) ซึ่งเป็นที่รู้จักกันโดยทั่วไปในทฤษฎีควอนตัม ในกรณีทั่วไปส่วนใหญ่แล้ว ψ จะเป็นฟังก์ชันเชิงซ้อนของตำแหน่ง เมื่อมีการนอมอลไลซ์อย่างเหมาะสม $\psi(\vec{r})^*\psi(\vec{r})$ คือความน่าจะเป็นไปได้ต่อหน่วยปริมาตรซึ่งอนุภาคจะถูกพบที่ $\vec{r}$ โดยที่ ψ^* คือ สังยุคของจำนวนเชิงซ้อน ψ

โดยแท้จริงแล้ว ψ ที่เป็นจำนวนเชิงซ้อนจะทำได้ยากสำหรับวิธีการที่จะแสดงค่าออกมาในเชิงตัวเลข อย่างไรก็ตามอีกลักษณะหนึ่งของสมการ (1) กลายเป็นสิ่งสำคัญในการทำเชิงตัวเลขของสมการนี้ซึ่งเป็นสมการเชิงอนุพันธ์ย่อย (Partial Differential) ผลเฉลยที่สมบูรณ์เกี่ยวข้องกับการกำหนดทั้งค่า ψ และค่าพลังงานที่สอดคล้องกันซึ่งเป็นที่ทราบกันว่าคือ ฟังก์ชันไอเก้นและค่าไอเก้นของสมการ คุณสมบัติที่น่าสนใจของปัญหาค่าไอเก้นคือ ผลเฉลยที่ได้คือค่าพลังงาน E

นั่นเอง ในทฤษฎีควอนตัมมันคือจุดกำเนิดของระดับพลังงานเป็นช่วงๆ ซึ่งเป็นประโยชน์สำหรับตัวอย่างในการแก้ปัญหาเชิงวิเคราะห์ได้

พิจารณาอนุภาคกำลังเคลื่อนที่ในที่ว่างเสรี (Free Space) นั่นคือบริเวณที่ศักย์คงที่ เนื่องจากเราให้ค่าเริ่มต้นของพลังงานศักย์มีค่าเป็นศูนย์ $V = 0$ ทุกๆ บริเวณ และสมมติเป็นหนึ่งมิติดังนั้นจะได้ $\psi = \psi(x)$ และ ∇^2 ลดรูปเป็นอนุพันธ์กำลังสองคือ $\frac{d^2}{dx^2}$ สมการชเรอดิงเงอร์จะกลายเป็น

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

ผลเฉลยทั่วไปคือ

$$\psi = A\exp(\pm ikx) \qquad (3)$$

เมื่อ $i \equiv \sqrt{-1}$, A และ k เป็นค่าคงที่ ถ้าผลเฉลยจากสมการ (3) แทนลงใน (2) แล้วจะได้ค่าพลังงานออกมาคือ

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \qquad (4)$$

ฟังก์ชันคลื่นในสมการ (3) อยู่ในรูปของคลื่นระนาบที่มีเวกเตอร์คลื่นเป็น $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ เมื่อ λ เป็นความยาวคลื่นของอนุภาค k มีความสัมพันธ์อย่างใกล้ชิดกับโมเมนตัมของอนุภาค p ที่ $p = \hbar k$

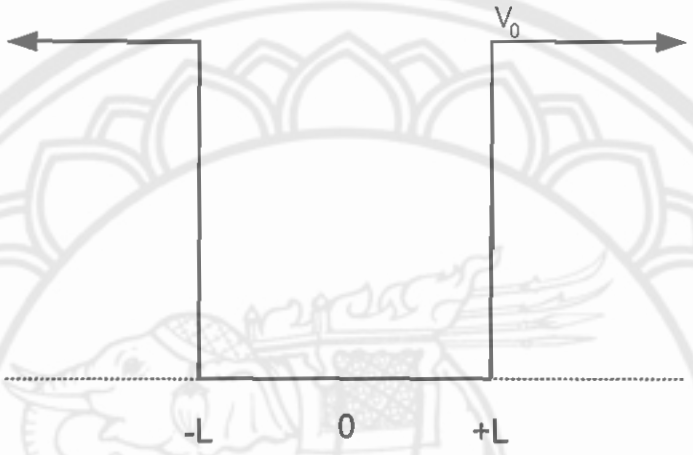
ในปัญหาระดับอนุภาคมีผลเฉลยของสมการชโรดิงเจอร์สำหรับค่า k ใดๆ ที่ทำให้ค่าของ E ไม่เป็นลบ ค่าคงที่ A ไม่ได้ถูกกำหนดโดยตรงจากสมการชโรดิงเจอร์ ผลเฉลยที่ได้เหมาะสมกับสมการคลื่นในสมการ (2) สำหรับค่า A ใดๆ ค่าคงที่ A หมายถึงขนาดของฟังก์ชันคลื่นซึ่งถูกกำหนดโดยการแปลความหมายทางกายภาพของ ψ และความสัมพันธ์ในความหนาแน่นของความน่าจะเป็นของมัน เราได้ทราบแล้วว่าความน่าจะเป็นของการพบอนุภาคในบริเวณเฉพาะของพื้นที่ว่างคือ การหาค่า $\psi^*\psi$ นั่นเอง สำหรับกรณีหนึ่งมิติ $\psi(x)^*\psi(x)dx$ คือ โอกาสความน่าจะเป็นของการพบอนุภาคภายในช่วงความยาว dx ที่ x บริเวณใกล้เคียงกัน จากนั้นเราพิจารณาพฤติกรรมของอนุภาคเดี่ยวที่ความน่าจะเป็นต้องเป็นไปตามเงื่อนไขของการนอมอลไลซ์

$$\int_{all\ x} \psi^*\psi dx = 1 \qquad (5)$$

จากสมการฟังก์ชันคลื่น (3) เรามี $\psi^*\psi = A^2$ ดังนั้นจะได้ $\int \psi^*\psi dx = A^2 \int dx$

ถ้าอนุภาคเคลื่อนที่อย่างอิสระในบริเวณกว้างๆ เราต้องทำให้ค่า A เป็นค่าที่เล็กๆ เพื่อที่จะทำให้การนอมอลไลซ์คงอยู่

เพื่อความสะดวกเราจะกำหนดว่าอนุภาคถูกจำกัดอยู่ในกล่องที่มีระยะจาก x = -L ถึง x = +L คลื่นระนาบในสมการ (3) ต้องถูกจำกัดอยู่ในกล่อง โดยที่ศักย์ภายในมีค่าเป็นศูนย์ (V =0) ภายนอกมีศักย์เป็น V_0 แสดงดังภาพ 1



ภาพ 1 พลังงานศักย์สำหรับอนุภาคในกล่อง ที่ศักย์ภายในเป็นศูนย์ (V =0) ภายนอกมีศักย์เป็น V_0

เมื่อ V(x) เป็นฟังก์ชันที่ไม่ต่อเนื่องของตำแหน่ง วิธีง่ายที่สุดในการแก้ปัญหาสำหรับการแยก ψ ในบริเวณ $|x| \leq L$ (ภายในกล่อง) และ $|x| > L$ (ภายนอกกล่อง) คือ ภายในเรามี V =0 ดังนั้น ψ ในบริเวณนี้ยังคงเป็นสมการ (3) ถ้าสมมติว่าศักย์ภายนอกเป็น $V = \infty$ พลังงานของอนุภาคจะไม่ถูกจำกัด จะได้ว่า $\psi_{outside} = 0$ และ $\frac{d^2\psi_{outside}}{dx^2} = 0$ ทำให้ทั้งสองข้างของสมการ (2) เท่ากับศูนย์ ดังนั้นจะไม่มีโอกาสพบอนุภาคในบริเวณ $V = \infty$ ฟังก์ชันคลื่นที่แผ่กระจายมาจากเขตอื่นจะหมดไปทันทีในเขตนี้

การที่จะทำให้ผลเฉลยนั้นสมบูรณ์เราใช้ประโยชน์จากข้อจำกัดข้อหนึ่งของ ψ คือมันต้องเป็นฟังก์ชันต่อเนื่องของ x เนื่องจาก ψ จะหายไปสำหรับ $x > \pm L$ ผลเฉลยสำหรับ ψ ภายในกล่องต้องหายไปที่ $x = \pm L$ เราสามารถเขียนฟังก์ชันคลื่นอยู่ในรูปของ

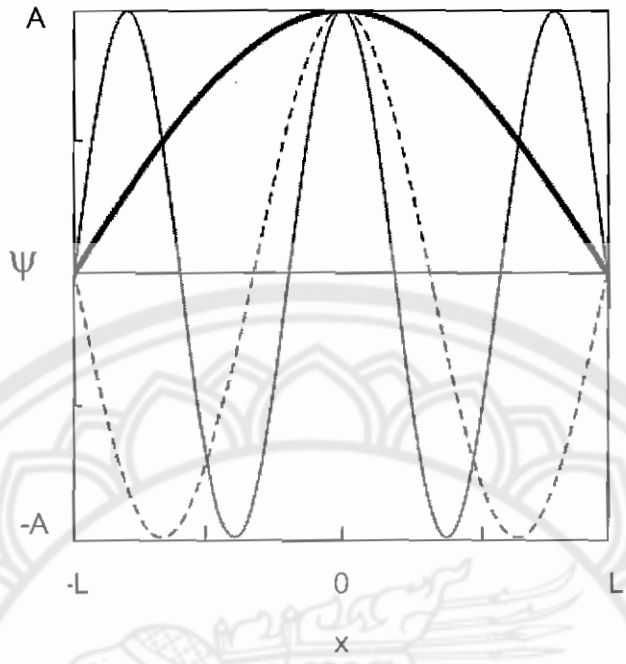
$$\left.\begin{aligned}\psi_{+} &= \frac{A}{2}\left[exp\left(ik_{+}x\right)+exp\left(-ik_{+}x\right)\right] = A\cos\left(k_{+}x\right)\\ \psi_{-} &= \frac{A}{2}\left[exp\left(ik_{-}x\right)+exp\left(-ik_{-}x\right)\right] = A\cos\left(k_{-}x\right)\end{aligned}\right\} \quad (6)$$

มีเพียงคลื่นนิ่งเท่านั้นที่พบในการสั่นในเส้นลวด เงื่อนไขของ $\psi(\pm L)$ ต้องการ

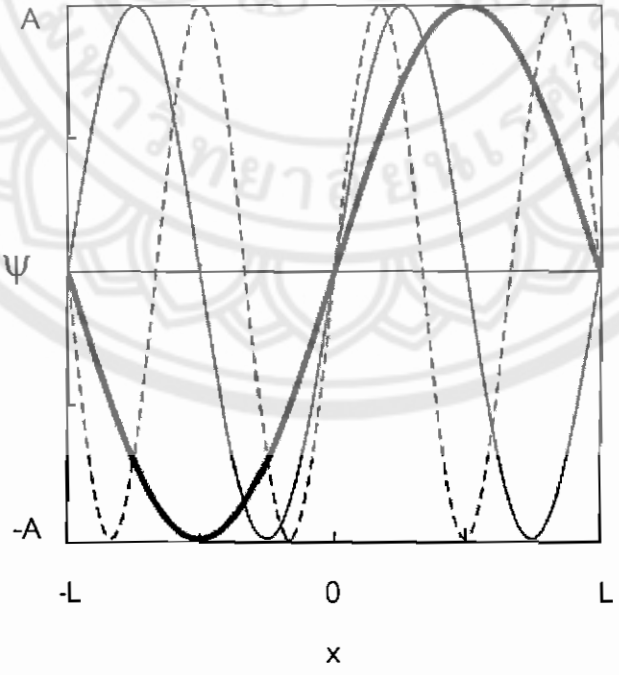
$$k_{+} = \frac{\pi}{2L}, \frac{3\pi}{2L}, \ldots = \frac{(2n-1)\pi}{2L} \quad (7)$$

$$k_{-} = \frac{\pi}{L}, \frac{2\pi}{L}, \ldots = \frac{n\pi}{L} \quad (8)$$

ข้อจำกัดของ k มีความหมายว่าเรามีระดับพลังงานที่ไม่ต่อเนื่อง มีเพียงค่าเฉพาะของเวกเตอร์คลื่นเท่านั้นที่เกิดขึ้นได้ ค่าเหล่านี้จะหมายถึงคลื่นนิ่งที่อยู่ในสภาวะกักขังของ ψ ที่ผนังของกล่องซึ่งแสดงดังภาพ 2 การควอนไทซ์ของ k มีค่าเทียบเท่ากับการควอนไทซ์ของพลังงาน $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ ข้อจำกัดดังเช่นสภาวะกักขังทั่วไปเหล่านี้นำไปสู่การควอนไทซ์ระดับพลังงาน เราจะพบว่าข้อจำกัดเหล่านี้มีบทบาทสำคัญในการสร้างผลเฉลยเชิงตัวเลขของสมการชโรดิงเจอร์



ภาพ 2 ฟังก์ชันคลื่นสำหรับค่าไอเก้นสเตท 3 ค่าต่ำสุดของอนุภาคในกล่อง คลื่นนิ่งรูปโคไซน์ (แพริตี้คู่) จากสมการ (6) เมื่อ $A = L^{-1/2}$ เป็นค่าที่ได้จากการนอมอลไลซ์ฟังก์ชันคลื่น



ภาพ 3 ฟังก์ชันคลื่นสำหรับค่าไอเกนต์สเตต 3 ค่าต่ำสุดของอนุภาคในกล่อง ฟังก์ชันคลื่นรูปไซน์ (แพริตี้คี่) เมื่อ $A = L^{-1/2}$ เป็นค่าที่ได้จากการนอมอลไลซ์ฟังก์ชันคลื่น

วิธีการยิงคำตอบใน 1 มิติ (Shooting Method in One Dimension)

พิจารณาวิธีการแก้ปัญหาเชิงตัวเลขในสมการชโรดิงเจอร์หนึ่งมิติที่ไม่ขึ้นกับเวลา เราใช้วิธีการแก้ปัญหาจากสมการเชิงอนุพันธ์สามัญ (Ordinary Differential Equation) **เริ่มต้นจากปัญหาอนุภาคในกล่องโดยการวิเคราะห์ผลเฉลย และเราจะพิจารณาปัญหาอื่นซึ่งไม่สามารถ** แก้ปัญหาโดยการวิเคราะห์ผลเฉลยได้

สมการชโรดิงเจอร์หนึ่งมิติเป็นสมการที่มีรูปคล้ายกับสมการการเคลื่อนที่ ในกรณีนี้เรามีสมการเชิงอนุพันธ์ที่ตำแหน่ง x เป็นฟังก์ชันของเวลา เริ่มด้วยค่าเริ่มต้นสำหรับ x และ $\frac{d\psi}{dx}$ เราสามารถอินทิเกรตเชิงตัวเลขให้อยู่ในรูป x(t) ได้ ขณะนี้เรามีสมการเชิงอนุพันธ์สำหรับ ψ ที่เป็นฟังก์ชันของตำแหน่ง x และต้องการวิธีการแก้ปัญหาด้วยวิธีเดียวกัน การทำเช่นนี้เราต้องการค่า ψ และ $\frac{d\psi}{dx}$ บางตำแหน่ง เราจึงจะสามารถเริ่มการหาอินทิเกรตได้

เมื่อศักย์เป็นศักย์สมมาตรสำหรับอนุภาคในกล่องเราใช้ข้อได้เปรียบของการสมมาตร เราเคยทราบแล้วว่า ถ้า V(x) เป็นฟังก์ชันคู่ของ x ซึ่งฟังก์ชันคลื่นที่สามารถเขียนเป็นฟังก์ชันคู่หรือฟังก์ชันคี่ของ x ได้ เราสามารถเลือกฟังก์ชันคลื่นให้เป็นอย่างใดอย่างหนึ่งนั่นคือ

$$\psi(+x) = \psi(-x)$$

หรือ

$$\psi(+x) = -\psi(-x)$$

โดยแท้จริงแล้วเราได้สังเกตการสมมาตรมาแล้วในการวิเคราะห์ปัญหาสำหรับบ่อศักย์อนันต์ (Infinite square well) แพริตี้คู่ได้ $\frac{d\psi}{dx} = 0$ ที่ $x = 0$ มันเป็นการปลอดภัยที่จะสมมติว่า $\psi(0) \neq 0$ เนื่องจากสมการชโรดิงเจอร์เป็นสมการเชิงเส้นเราทราบว่าผลเฉลยสามารถถูกคูณด้วยแฟคเตอร์ค่าคงที่ได้และยังคงผลเฉลยเดิม ดังนั้นเราสามรถเลือก $\psi(0) = 1$ เป็นค่าเงื่อนไขเริ่มต้นของการอินทิเกรตสมการชโรดิงเจอร์เป็นการชั่วคราว เมื่อเสร็จแล้วเราจะมีผลเฉลยเชิงตัวเลขของสมการซึ่งเราสามารถนอมอลไลซ์ผลลัพธ์นี้ด้วยแฟคเตอร์ค่าคงที่ดังนั้นเพื่อให้เป็นไปตามข้อจำกัดของความน่าจะเป็นคือ $\int \psi^* \psi dx = 1$ นี่เป็นวิธีที่จะได้ฟังก์ชันคลื่นที่สามารถยอมรับได้

ด้วยวิธีการที่คล้ายกันนี้เราจะได้ผลเฉลยของแพริตี้คี่ (Odd-Parity Solution) **คือกรณีที่** $\psi(+x) = -\psi(-x)$ **ซึ่งต้องมี** $\psi(0) = 0$ **และ** $\frac{d\psi}{dx} \neq 0$ **ที่** $x = 0$ **เรามีอิสระที่จะเลือกขนาดของ** ψ **ตราบเท่าที่เรานอมอลไลซ์มันจนกว่าจะทำการคำนวณสำเร็จ ดังนั้นเราสามารถใช้** $\psi(0) = 0$ **และ** $\frac{d\psi}{dx} = 1$ **เป็นเงื่อนไขเริ่มต้น** (Initial Condition)

จากข้อได้เปรียบของการสมมาตรเราได้ค่า ψ และ$\frac{d\psi}{dx}$ ที่ $x=0$ ค่าเหล่านี้เป็นเงื่อนไขเริ่มต้นของการอินทิเกรต ขั้นตอนต่อไปเราเขียนสมการ (2) ใหม่ในรูปผลต่างไฟไนต์ (Finite-Difference Form) ซึ่งเขียนแยกเป็นสองส่วนคือ ในรูปของสมการเชิงอนุพันธ์อันดับสองและสมการเชิงอนุพันธ์อันดับหนึ่ง เนื่องจากเราไม่สนใจพจน์ $\frac{d\psi}{dx}$ โดยปกติแล้วเราทำให้มันเป็นช่วงๆ โดยกำหนดขนาดเป็น Δx และเขียน $\psi_n \equiv \psi(n\Delta x)$ ส่วนอนุพันธ์อันดับสองในสมการ (2) สามารถเขียนใหม่ในรูปผลต่างไฟไนต์ ได้ดังนี้

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} \approx \frac{\psi_{n+1}+\psi_{n-1}-2\psi_n}{(\Delta x)^2} \tag{9}$$

ดังนั้นสมการ (2) ถูกเขียนใหม่ได้เป็น [20]

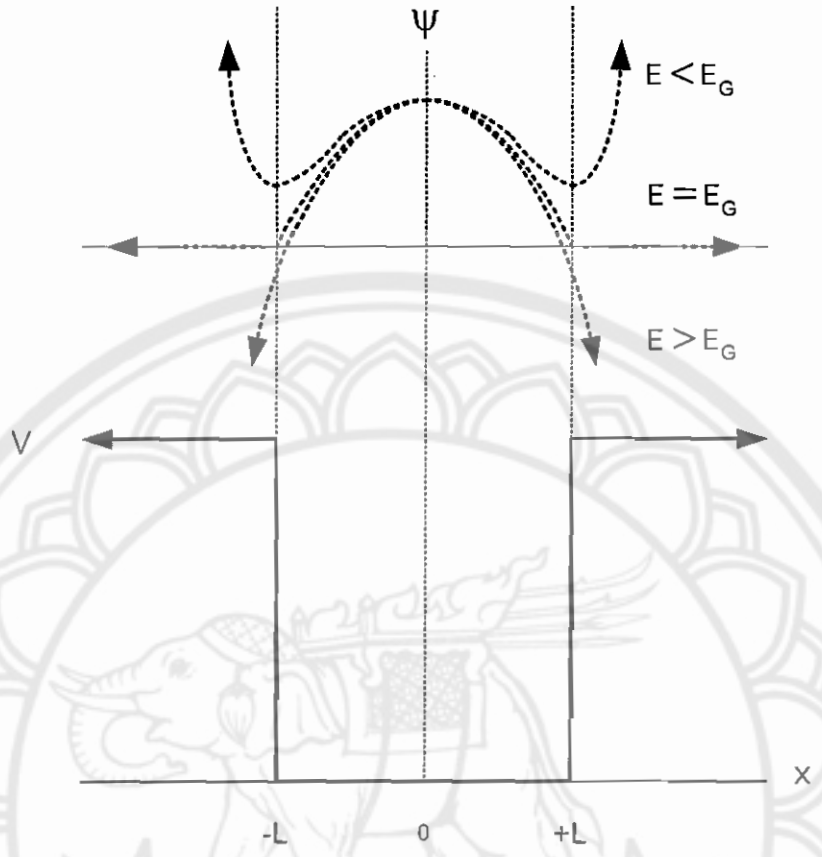
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} \approx -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\psi_{n+1}+\psi_{n-1}-2\psi_n}{(\Delta x)^2}\right] \approx (E-V_n)\psi_n \tag{10}$$

โดยที่ V_n เป็นศักย์ที่ตำแหน่ง $x=n\Delta x$ เราใช้เครื่องหมาย $\approx$ เพื่อเป็นการเน้นว่ามันเป็นค่าโดยประมาณของอนุพันธ์เท่านั้น เราสามารถจัดสมการเพื่อให้ได้ค่า ψ_{n+1} ใหม่ในเทอม ψ_n และ ψ_{n-1} เพื่อความสะดวกในการแก้ปัญหานี้เราจะให้ค่า $\hbar=1$ และ $m=1$ ซึ่งได้

$$\psi_{n+1} = 2\psi_n - \psi_{n-1} - 2(\Delta x)^2(E-V_n)\psi_n \tag{11}$$

พิจารณาผลเฉลยแพริตี้คู่ (Even-Parity Solution) เราได้ให้เหตุผลมาแล้วว่าเราสามารถใช้ $\psi(0)=1$ ดังนั้นในครั้งแรกเราจะใช้สมการ (11) ที่ $n=0$ (กล่าวคือ $x=0$) เนื่องจากเรามี $\frac{d\psi}{dx}=0$ ที่ $x=0$ เราให้ $\psi_{-1}=1$ ดังนั้น เราสามารถใช้สมการ (11) เพื่อคำนวณ $\psi_{n-1}=\psi_1$ และทำต่อไปโดยใช้ ψ_0 และ ψ_1 เพื่อให้ได้ ψ_2 กระบวนการนี้สามารถทำซ้ำเพื่อหา ψ_n ทุกๆ ค่าของ n ที่ต้องการ

ค่า ψ_n ได้มาจากการทำซ้ำในสมการ (11) ด้วยค่าพลังงาน E ที่แตกต่างกัน แผนภาพแสดงค่าที่แตกต่างกันของพลังงานที่อยู่ใกล้กับพลังงานในสถานะพื้น E_G (ซึ่งอาจเรียกว่า สถานะพื้นเป็นผลเฉลยแพริตี้คู่) แสดงในภาพ 4 เราได้ค่า E_G จากการ วิเคราะห์ผลลัพธ์ ในกรณีนี้เราเลือก $\hbar = 1$, $m = 1$ และกล่องที่มี $L = 1$ ที่สถานะพื้นมีค่าพลังงาน $E_G = \frac{\pi^2}{8} = 1.2337...$ ถ้าเราใช้สมการ (11) เพื่อคำนวณหาค่า ψ สำหรับค่าพลังงาน E จะได้ค่าที่น้อยมาก เราจะหาค่า ψ ที่มากกว่าศูนย์ เมื่อ $x = L$ จนถึง $+\infty$ ที่ x มีค่ามากๆ ดังนั้นเงื่อนไขขอบเขตจึงไม่เป็นที่น่าพอใจ ซึ่งจะเห็นได้จากด้านบนของภาพ 4 ถึงแม้ว่าจะเป็นผลเฉลยจากสมการ (2) มันก็ไม่สามารถนอมอลไลซ์ได้และไม่เป็นค่าที่ยอมรับได้ในทางฟิสิกส์ ซึ่งไม่เกิดเป็นฟังชันคลื่นของอนุภาคนี้ได้ ในทางตรงข้ามถ้าเราแสดงการคำนวณค่า E ที่มีค่าใหญ่กว่า E_G เราจะหาค่า ψ ที่ตกอย่างรวดเร็วเมื่อ x เพิ่มขึ้น ดังนั้น ในทางลบที่ $x = L$ จนถึง $-\infty$ เมื่อ x มากขึ้น ดังแสดงในภาพ 4 ถ้า E มีค่าเท่ากับ E_G ฟังชันคลื่นเข้าใกล้ศูนย์ที่ $x = L$ และยังคงเป็นศูนย์ที่ x มีค่ามากขึ้น ฟังก์ชันคลื่นนี้สามารถถูกนอมอลไลซ์ได้และที่สถานะพื้นของ ψ สำหรับอนุภาคในกล่อง



ภาพ 4 ผลการคำนวณค่า ψ จากสมการ (11) สำหรับค่า E ต่างๆ โดยที่บนสุดแสดง ψ ที่พลังงาน $E<E_G$ พลังงานที่ระดับสถานะพื้นต่ำลงมาเป็น ψ ที่ $E=E_G$ และล่างสุดเป็น ψ ที่ $E>E_G$ สมมติว่าศักย์ภายนอกมีค่าใหญ่มากๆ $(|x|>L)$

วิธีการแก้ปัญหาสมการเชิงอนุพันธ์โดยมีเงื่อนไขขอบเขตในทำนองนี้เป็นที่รู้จักกันดี เรียกว่า "**วิธีการยิงคำตอบ** (Shooting Method)" วิธีการที่คล้ายกับการพยายามขว้างลูกเบสบอลหรือยิงปืนใหญ่ไปยังเป้าที่เฉพาะเจาะจงไว้ เป็นกรณีเงื่อนไขพิเศษเท่านั้น ในกรณีนี้เงื่อนไขขอบเขต เป็นฟังก์ชันคลื่นที่ต้องหายไปที่เฉพาะสองตำแหน่ง ($x=\pm L$) ซึ่งเป็นผลมาจากการเลือก**ศักย์ภายนอกเป็นค่ามากๆ**

ลำดับต่อไปเป็นการพิจารณาการคำนวณในระดับแพริตี้คี่ (Odd-Parity Levels) **ขณะนี้เราได้มีการกล่าวถึงแล้วว่าฟังก์ชันคลื่นแพริตี้คี่ กล่าวคือผลเฉลยในสมการ** (2) **ซึ่งจะได้** $\psi(+x) = -\psi(-x)$ การประยุกต์เงื่อนไขนี้ที่ต้องการ $x=0$ ซึ่ง $\psi(0)=0$ เนื่องจากค่าที่กำหนดข้างต้นนี้เป็นค่าที่สถานะตามใจชอบ เราให้ $\frac{d\psi}{dx}=1$ ที่ $x=0$ จากนั้น คำสั่งในการ

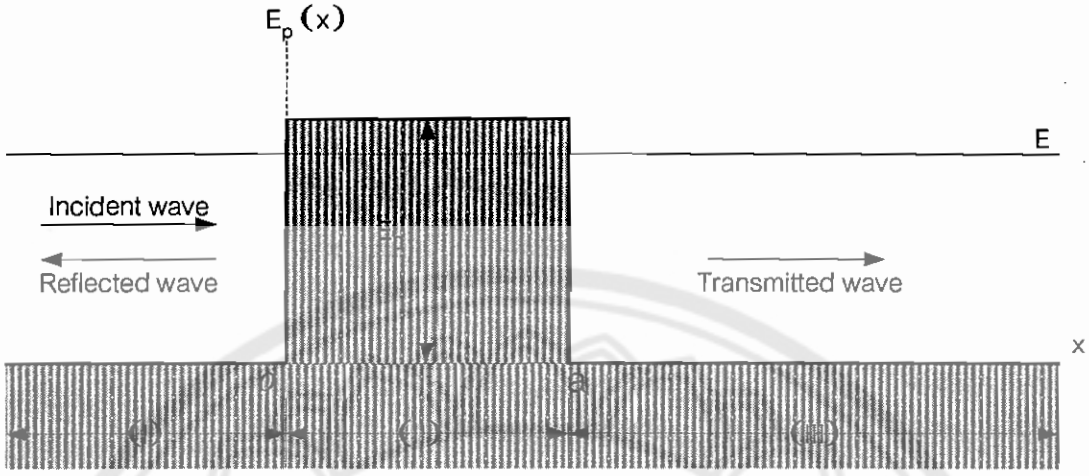
คำนวณสามารถใช้อีกครั้งหนึ่งเพื่อให้ได้ $\psi(x)$โดยการอินทิเกรต ในการหาผลต่างเราต้องกำหนดค่าเริ่มต้น $\psi_{-1} = -\Delta x$และ $\psi(0) = 0$ ส่วนที่เหลือของการคำนวณดำเนินการดังเช่นก่อนหน้านี้ ขณะที่คำสั่งดำเนินไปจนตามหาพบค่า E ซึ่งเป็นค่าที่เข้ากันได้กับสภาวะกักขังที่ $x = \pm L$

ตามทฤษฎีดั้งเดิมอนุภาคไม่สามารถเข้าไปในบริเวณที่ศักย์ V มีค่ามากกว่าพลังงานรวม เมื่อเป็นอย่างนั้นจะได้ว่าพลังงานจลน์แบบดั้งเดิมจะติดลบซึ่งไม่สามารถเป็นไปได้ อย่างไรก็ตามทฤษฎีควอนตัมได้มีการกำหนดขอบเขตให้กับอนุภาคเพื่อให้สามารถอยู่ได้ ซึ่งมีขนาดเล็กแต่ไม่ถึงกับเป็นศูนย์ โอกาสของการพบอนุภาคที่ใดก็ตามในพื้นที่ว่างยาวเท่ากับพลังงานศักย์มีขอบเขตซึ่งนำไปสู่ความน่าสนใจที่หลากหลายและผลกระทบที่สำคัญ อย่างเช่น การทะลุผ่าน (Tunneling) เป็นต้น

วิธีการยิงคำตอบเป็นวิธีที่สะดวกต่อการแก้ปัญหาค่าขอบเขต (Boundary-Value Problem) ในหนึ่งมิติ อย่างไรก็ตามมันถูกจำกัดสถานการณ์ในค่าของ ψ และ $\frac{d\psi}{dx}$ ที่บางครั้งถูกกำหนดขึ้นโดยที่เราไม่ทราบ ในปัญหาอนุภาคในกล่องศักย์สมมาตรจำเป็นสำหรับการได้ค่า ψ และอนุพันธ์ของมันที่ศูนย์กลางของกล่อง ในกรณีศักย์ไม่สมมาตร ฟังก์ชันคลื่นจะไม่มีแพริตี้ที่แน่นอน ดังนั้นเราไม่สามารถกำหนด ψ และ $\frac{d\psi}{dx}$ จากหลักการสมมาตรได้

การทะลุกำแพงศักย์ (Potential Barrier Penetration)

จากความจริงที่ว่าฟังก์ชันคลื่นอาจผ่านเข้าไปในเขตต้องห้ามในทางกลศาสตร์คลาสสิค (Classical Forbidden Region) เป็นปรากฏการณ์สำคัญที่เรียกว่า "การทะลุผ่านกำแพงศักย์" พิจารณากำแพงศักย์ในภาพ 5 ซึ่งประกอบด้วยศักย์ขั้นบันไดสลับข้างกันเกิดจากบ่อศักย์ที่เรียกว่า "กำแพงศักย์ (Potential Barrier)" ซึ่งเราแยกพิจารณาเป็นสองกรณีคือ $E < E_0$ และ $E > E_0$ ในทางกลศาสตร์ดั้งเดิมกล่าวว่า อนุภาคกำลังเคลื่อนที่มาจากทางด้านซ้ายด้วยพลังงาน $E < E_0$ ควรจะสะท้อนกลับทั้งหมดที่ $x = 0$



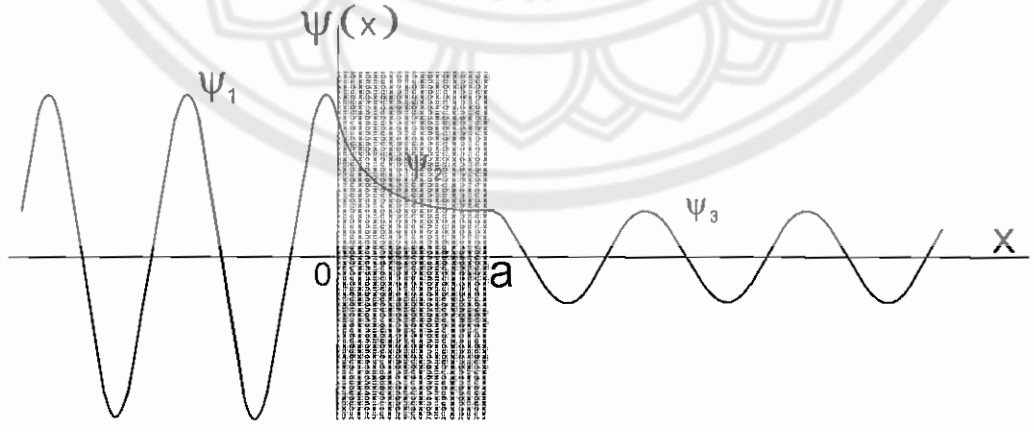
ภาพ 5 กำแพงศักย์สี่เหลี่ยมกว้าง a สูง E_0 [21]

เมื่อพิจารณาปัญหาในทางกลศาสตร์ควอนตัมจากผลเฉลยของสมการชโรดิงเจอร์ที่บริเวณ (I), (II) และ (III) เราพบว่ามีฟังก์ชันคลื่นเกิดขึ้น ดังแสดงในภาพ 6 ซึ่งในเขตต่างๆ อยู่ในรูป

$$\psi_1 = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad \psi_2 = Ce^{\alpha x} + De^{-\alpha x} \quad \text{และ} \quad \psi_3 = A'e^{ikx}$$

เมื่อ k และ α มีค่าเป็นดังนี้

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad \text{และ} \quad \alpha^2 = \frac{2m(E_0 - E)}{\hbar^2}$$



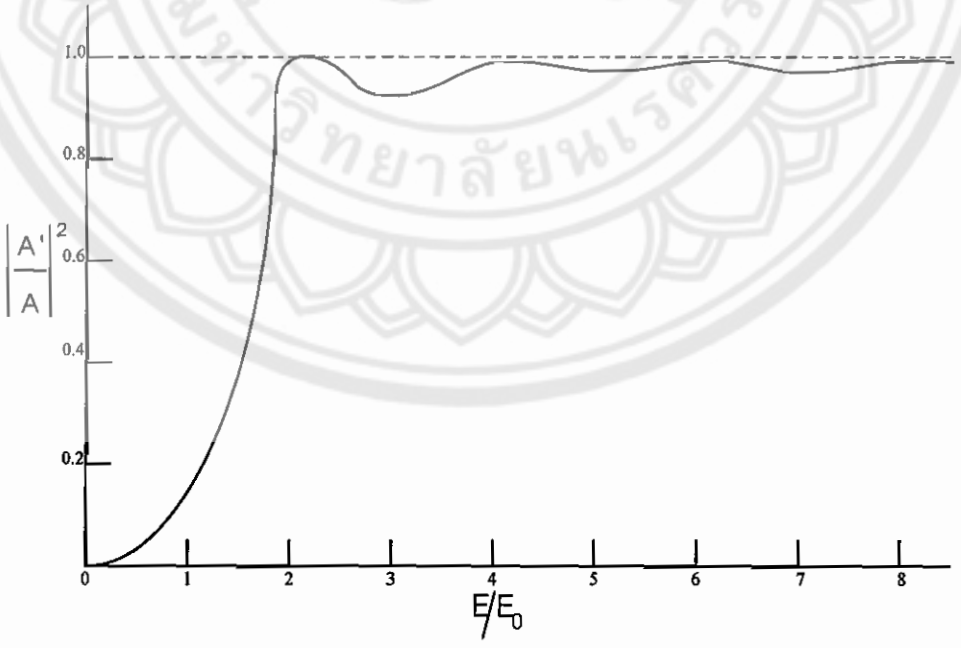
ภาพ 6 ฟังก์ชันคลื่นที่สอดคล้องกับกำแพงศักย์จากภาพ 5 ที่ระดับพลังงานน้อยกว่าความสูงของกำแพง

ฟังก์ชันคลื่น ψ_1 ประกอบด้วยอนุภาคตกกระทบและสะท้อน ψ_2 เป็นฟังก์ชันเอ็กซ์โปเนนเชียลลด (Exponential Decay) และเป็นทางบวกด้วยเนื่องจากกำแพงศักย์เพิ่มขึ้นเป็น $x = a$ เท่านั้น เมื่อเป็นกรณีศักย์ขั้นบันได ψ_2 ยังไม่เป็นศูนย์ที่ $x = a$ ดังนั้นฟังก์ชันคลื่นจะเกิดต่อเนื่องไปยังบริเวณ III ด้วยการสั่นไปมาในรูปของ ψ_3 ซึ่งแสดงในรูปของอนุภาคถูกส่งผ่านที่มีพลังงานเท่ากับคลื่นขนาดแอมปลิจูด A' โดยทั่วไปแล้วจะมีขนาดแตกต่างจาก A เนื่องจาก ψ_3 ไม่เป็นศูนย์จึงมีโอกาสของการพบอนุภาคในบริเวณ III เป็นไปได้ที่อนุภาคจะผ่านทะลุกำแพงศักย์แม้ว่าพลังงานจลน์ของมันจะน้อยกว่าความสูงของกำแพงศักย์ก็ตาม

กรณี $E > E_0$ การอธิบายแบบคลาสสิคของกระบวนการตกกระทบคืออนุภาคทั้งหมดควรจะข้ามกำแพงศักย์ได้และไปถึงยังด้านขวาได้ อย่างไรก็ตามด้วยเหตุผลเดียวกันกับศักย์ขั้นบันไดในทางกลศาสตร์ควอนตัม คลื่นบางส่วนจะถูกสะท้อนกลับที่ $x = 0$ และที่ $x = a$ ดังนั้นฟังก์ชันคลื่นในบริเวณทั้งสามนั้นจะเป็นดังนี้

$$\psi_1 = Ae^{ikx} + Be^{-ikx},\ \psi_2 = Ce^{ik'x} + De^{-ik'x} \text{ และ } \psi_3 = A'e^{ikx}$$

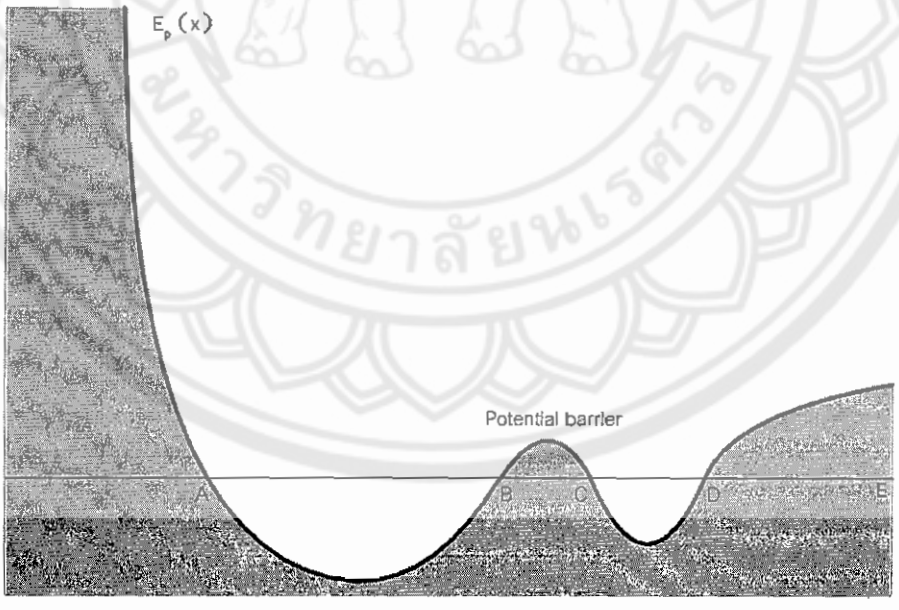
เมื่อ $k^2 = \dfrac{2m(E - E_0)}{\hbar^2}$ และ $k'\hbar$ เป็นโมเมนตัมของอนุภาคภายในเขตกำแพงศักย์



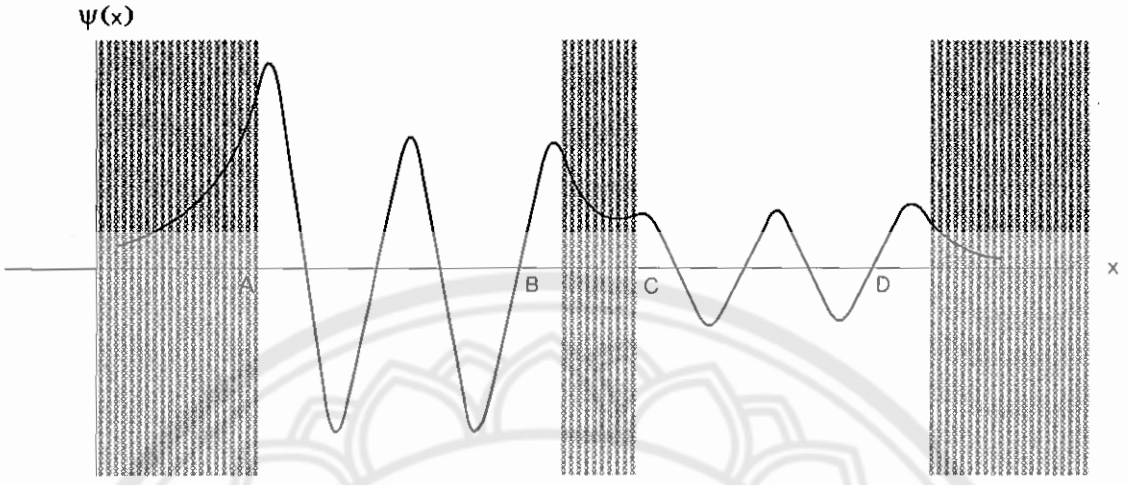
ภาพ 7 ค่าสัมประสิทธิ์การทะลุผ่าน (Transmission Coefficient) ของกำแพงศักย์สี่เหลี่ยม [18]

การประยุกต์เงื่อนไขขอบเขตที่ $x = 0$ และ $x = a$ เราสามารถกำหนดค่าสัมประสิทธิ์ B, C, D และ A' ในเทอมของ A ทั้งสองกรณีใน $E < E_0$ และ $E > E_0$ ความโปร่งใสของกำแพงศักย์ (Transparency of Barrier) ถูกกำหนดให้เป็น $T = \frac{|A'|^2}{|A|^2}$ ที่ค่าพลังงานต่างๆ แสดงดังภาพ 7 สำหรับค่า $E >> E_0$ มีความโปร่งใสสมบูรณ์ (T = 1)

ภาพ 8 แสดงกรณีทั่วไปตามแบบกลศาสตร์ดั้งเดิม ถ้าอนุภาคมีพลังงาน E มันอาจเคลื่อนที่ระหว่าง Aและ B หรือระหว่าง C และ D ถ้าอนุภาคอยู่ในระยะเริ่มต้นระหว่าง A และ B มันจะไม่ถูกพบในช่วง C และ D และเปลี่ยนไปในทางตรงกันข้าม แต่เหตุผลในทางกลศาสตร์ควอนตัมแตกต่างออกไป เมื่อเราแก้ปัญหาสมการชโรดิงเจอร์สำหรับศักย์แบบนี้เราได้ฟังก์ชันคลื่น ψ ดังแสดงในภาพ 9 เรายอมรับได้ในกรณีนี้ที่ฟังก์ชันคลื่นที่อยู่ระหว่าง A และ B จะสั่นไปมาแต่ทางด้านขวาของ B จะเปลี่ยนไปเป็นเอ็กซ์โปเนนเชียล อย่างไรก็ตามที่ตำแหน่ง C ฟังก์ชันคลื่นยังคงมีค่าไม่สิ้นสุด ช่วงระหว่าง C และ D เป็นช่วงที่สามารถเกิดคลื่นได้ ฟังก์ชันคลื่นจะเกิดการสั่นอีกครั้งหนึ่ง ส่วนทางด้านขวาของ D ฟังก์ชันคลื่นจะเป็นเอ็กซ์โปเนนเชียลมากกว่าในครั้งแรก ดังนั้นเราสรุปได้ว่า มีโอกาสของการพบอนุภาคทั้งช่วงระหว่าง A และ B



ภาพ 8 กำแพงศักย์กรณีทั่วไป

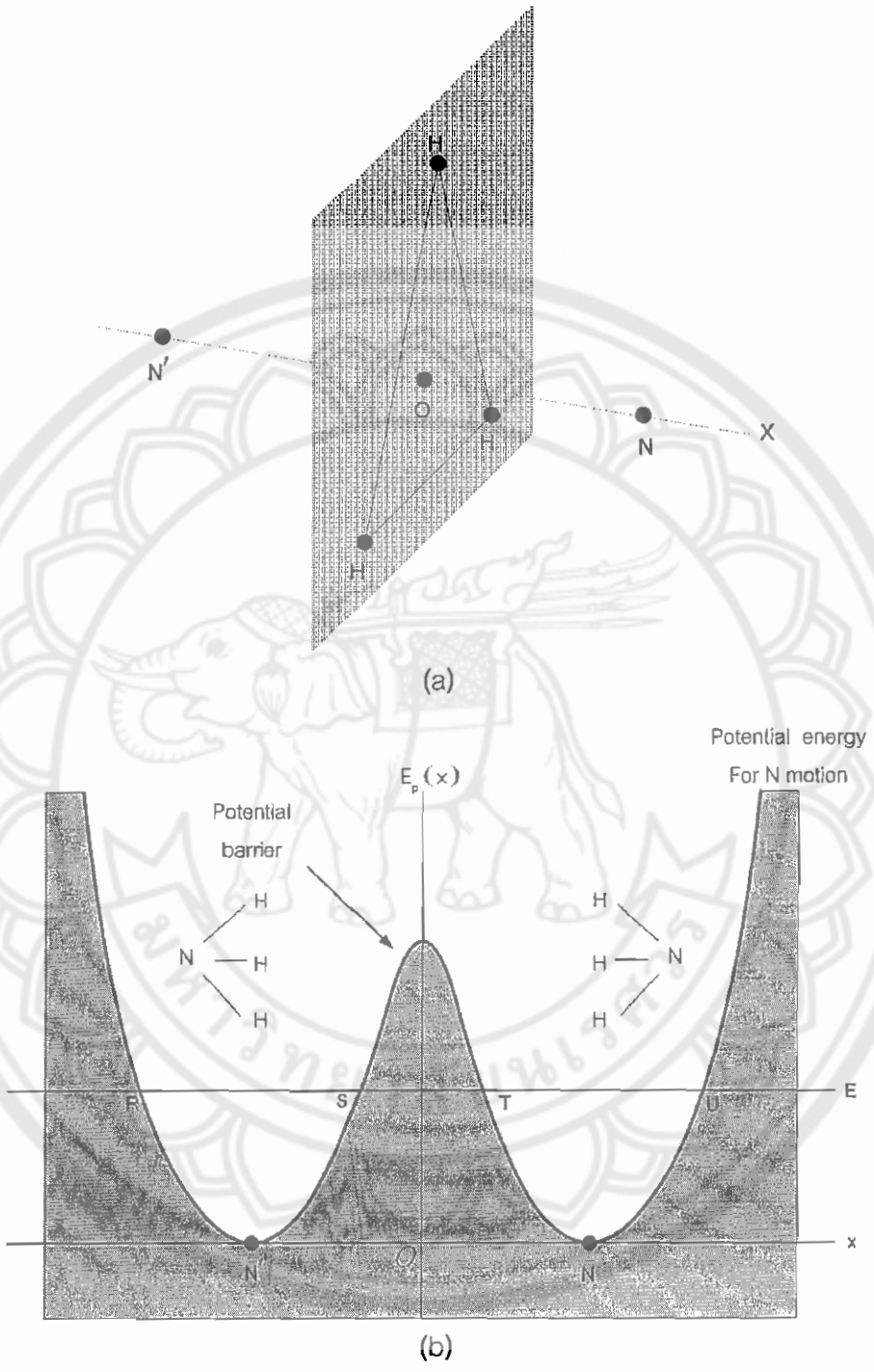


ภาพ 9 รูปร่างของฟังก์ชันคลื่นในกรณีทั่วไปของกำแพงศักย์

หรือ C และ D ในทางกลับกันถ้าอนุภาคอยู่ในระยะเริ่มต้นช่วงระหว่าง Aและ B ในเวลาต่อมามันอาจอยู่ในช่วงระหว่าง C และ D และเปลี่ยนไปในทางตรงข้าม การเกิดเหตุการณ์นี้อนุภาคต้องทะลุผ่านกำแพงศักย์ระหว่าง Bและ C

การทะลุผ่านกำแพงศักย์ไม่มีในกลศาสตร์ดั้งเดิม เนื่องจากมันสอดคล้องกับสถานการณ์ซึ่งอนุภาคมีพลังงานจลน์เป็นลบหรือโมเมนตัมจินตภาพ

ตัวอย่างในทางธรรมชาติของบ่อศักย์คู่ที่ชัดเจนอย่างหนึ่งคือ โมเลกุลแอมโมเนีย (NH_3) มีรูปร่างเป็นปิรามิดประกอบด้วยอะตอมไนโตรเจน (N) อยู่ที่มุมยอดของปิรามิด และอะตอมไฮโดรเจนสามอะตอม (H) อยู่ที่ฐานของปิรามิดแสดงดังภาพ 10 (a)

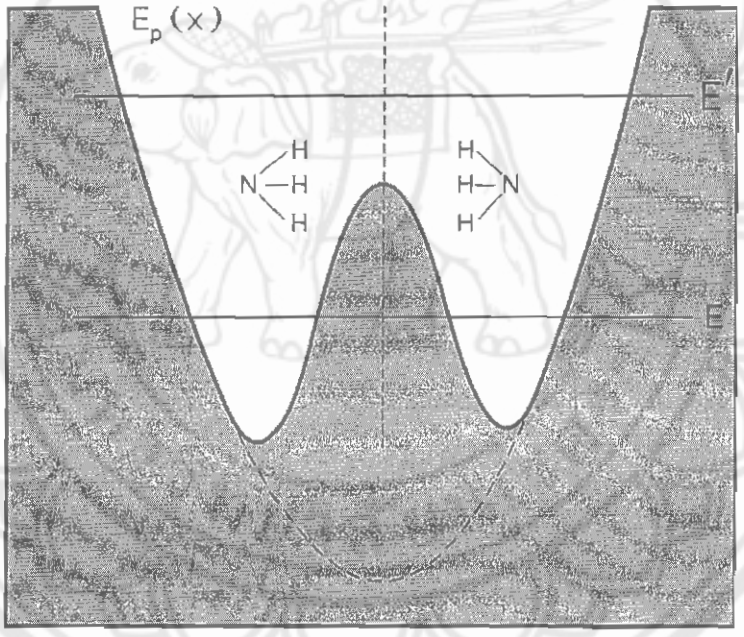


ภาพ 10 การเคลื่อนที่กลับกันของอะตอมไนโตรเจนในโลเมกุลแอมโมเนีย (a) และพลังงานศักย์สำหรับการเคลื่อนที่กลับกัน (b)

สังเกตว่า N อาจเป็นหนึ่งในสองตำแหน่งที่สมดุลเกิดการสมมาตรกันคือ N และ N′ ในแต่ละฐานของปิรามิด เนื่องจากทั้ง N และ N′ ต้องเป็นตำแหน่งที่สมดุลกัน พลังงานศักย์ในการเคลื่อน

อะตอมไนโตรเจนไปตามแกนของปิรามิดต้องมีอย่างน้อยสองข้างและมีขนาดสมมาตรกันดังจะเห็นในภาพ 10 (b) ด้วยกำแพงศักย์ระหว่าง N และ N′ ถ้าอะตอมไนโรเจนแรกเป็น N ในที่สุดมันจะรั่วไหลข้ามผ่านกำแพงศักย์และปรากฏที่ N′ ถ้าพลังงานของการเคลื่อนที่นี้น้อยกว่าความสูงของกำแพงศักย์ เช่นมีค่าเป็น E ในภาพ การเคลื่อนที่ของอะตอมไนโตรเจนจะถูกรวมเป็นการเคลื่อนที่แบบสั่นไปมาระหว่าง R และ S หรือระหว่าง T และ U ซึ่งก็ขึ้นอยู่กับว่าจะเกิดอีกด้านหนึ่งหรือไม่ เมื่อบวกการเคลื่อนที่แบบสั่นอย่างช้าๆ ระหว่างบริเวณที่ว่างผ่านกำแพงศักย์ความถี่ของการเคลื่อนที่นั้นมีค่าเท่ากับ 2.3786×10^{10} Hz สำหรับสถานะพื้นของแอมโมเนีย

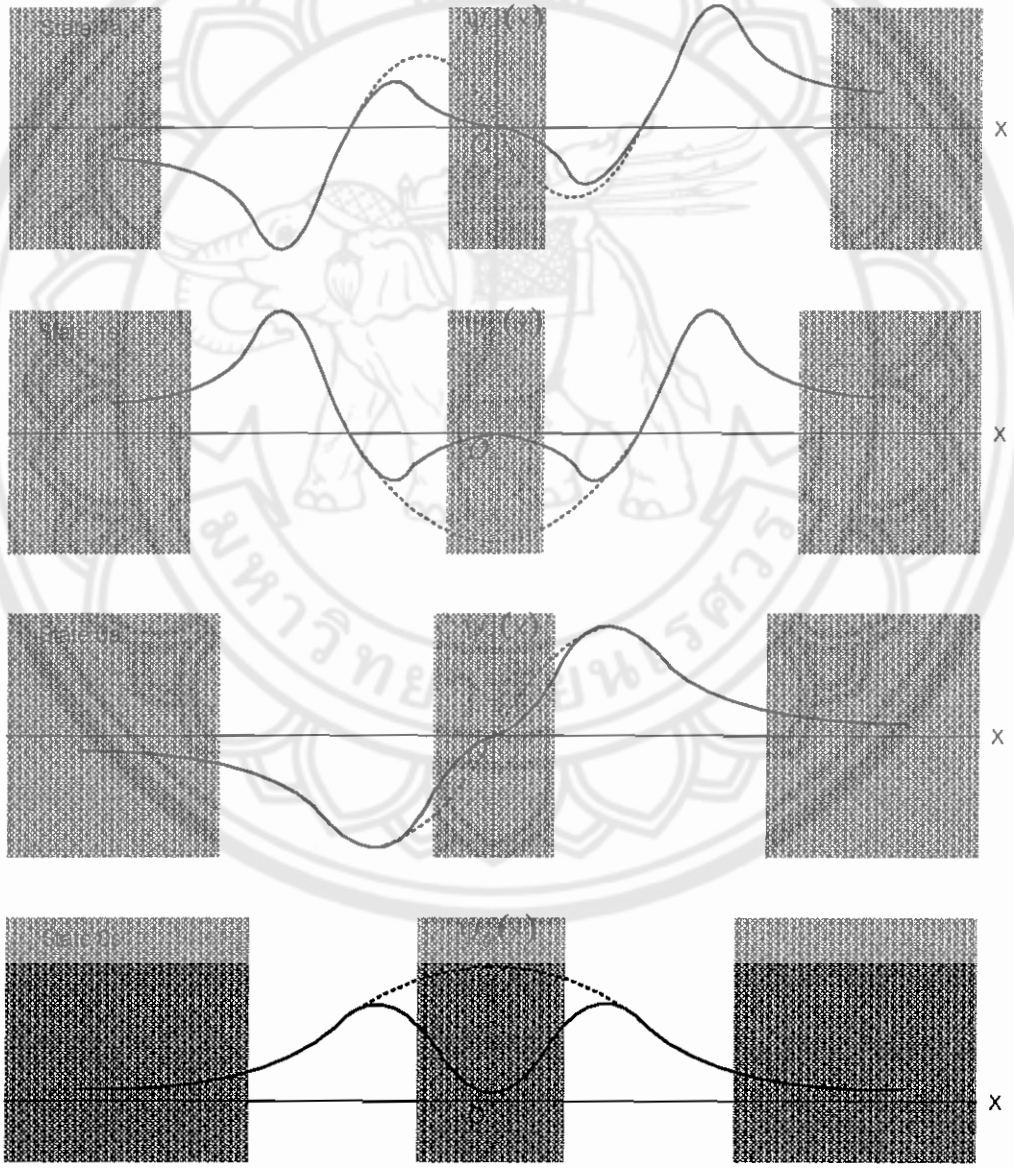
ตัวอย่างการวิเคราะห์ฟังก์ชันคลื่นและระดับพลังงานของการเคลื่อนที่กลับกันของไนโตรเจนในโมเลกุลของแอมโมเนีย



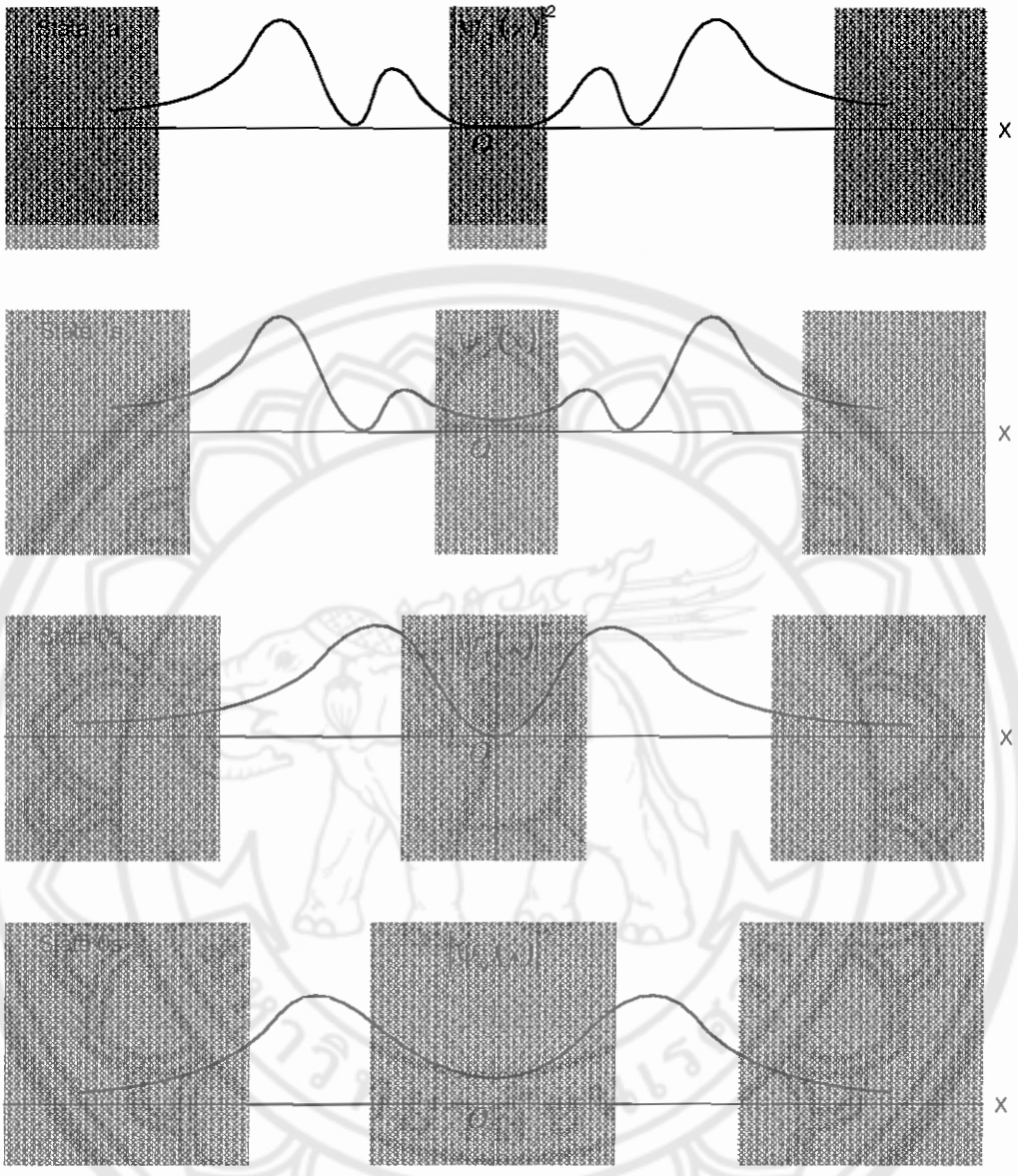
ภาพ 11 พลังงานศักย์ของการเคลื่อนที่กลับกันใน NH_3

เราสามารถได้จากวิธีการวิเคราะห์เชิงคุณภาพของฟังก์ชันคลื่นซึ่งแสดงการอภิปรายการเคลื่อนที่สลับกันของไนโตรเจนในโมเลกุลแอมโมเนียในรายละเอียดมากขึ้น ภาพ 11 แสดงผลของพลังงานศักย์ในภาพ 10 (b) อีกครั้งหนึ่ง ดูจากพลังงานศักย์ที่ถ้าเป็นพลังงานศักย์ของการสั่นแบบฮาร์โมนิคอย่างง่าย (Simple Harmonic Oscillator) ด้วยการชนหรือกำแพงศักย์ที่จุดศูนย์กลาง ผลของการชนที่ศูนย์กลางเป็นการรบกวนซึ่งมีผลต่อการเคลื่อนที่ของอนุภาค โดยส่วนใหญ่แล้วมันผ่านจุดศูนย์กลาง สิ่งที่บ่งชี้ก่อนนี้คือผลที่เกิดขึ้นสำหรับอนุภาคที่มีพลังงาน E ซึ่งมีขนาดน้อยกว่า

ความสูงของกำแพงศักย์โอกาสในการพบอนุภาคที่บริเวณศูนย์กลางลดลง เราสามารถแปลความหมายในทางกลศาสตร์ควอนตัมโดยการกล่าวว่า การชนทำให้รูปร่างบิดเบือน ฟังก์ชันคลื่นของการสั่นฮาร์โมนิคในบริเวณศูนย์กลางเป็นการลดลงของแอมปลิจูดในบริเวณนั้น ภาพ 12 แสดงสี่ฟังก์ชันคลื่นแรกในสถานะคงตัว (Stationary State) สำหรับพลังงานศักย์ของการสั่นฮาร์โมนิคปราศจากการชนแสดงเป็นเส้นประ ฟังก์ชันคลื่นที่เป็นอยู่ตามความเป็นจริง เมื่อผลกระทบจากกำแพงศักย์ศูนย์กลางถูกกระทำแสดงเป็นเส้นทึบ ภาพ 13 แสดงความสัมพันธ์ของความหนาแน่นของความน่าจะเป็น (Probability Density) , $|\psi(x)|^2$



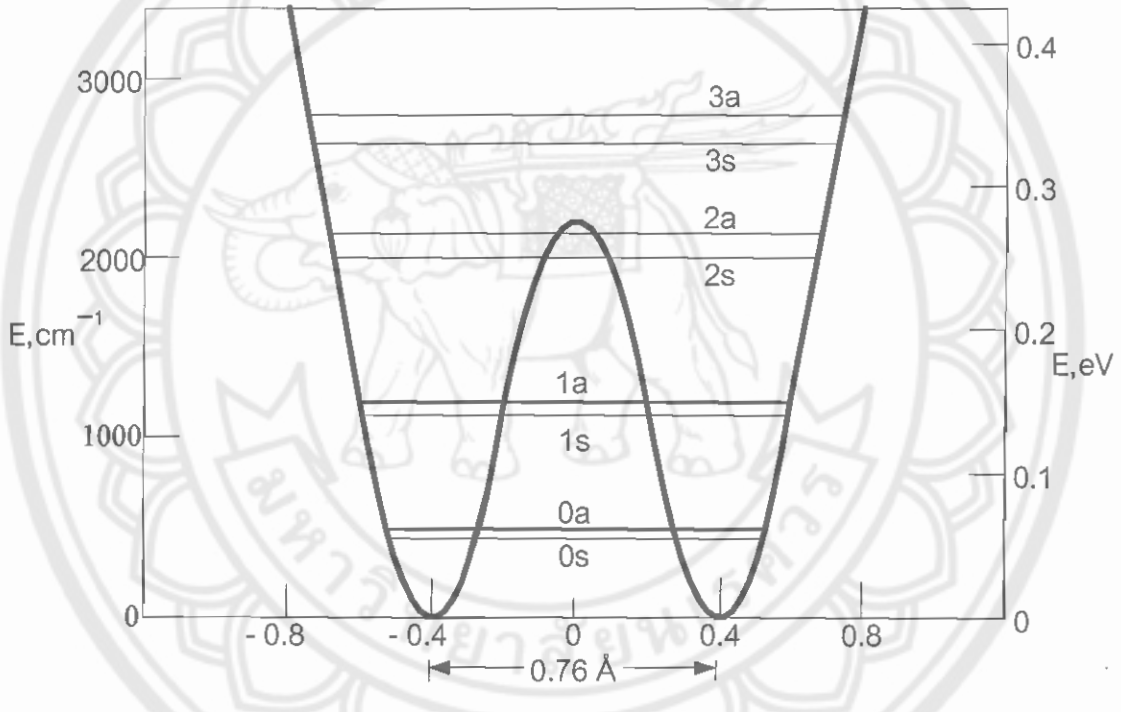
ภาพ 12 ฟังก์ชันคลื่นที่สอดคล้องกับระดับพลังงานต่ำสุดสี่ระดับของการเคลื่อนที่กลับกันใน NH_3



ภาพ 13 ความหนาแน่นของความน่าจะเป็นที่สอดคล้องกับฟังก์ชันคลื่นที่แสดงในภาพ 12

ความหนาแน่นของความน่าจะเป็นที่แสดงค่า $|\psi_0|^2$ และ $|\psi_1|^2$ เกือบจะเหมือนกัน ความแตกต่างหลักๆ คือ $|\psi_0|^2$ แสดงให้เห็นว่าโอกาสของการพบอนุภาคภายในกำแพงศักย์มากกว่า $|\psi_1|^2$ เล็กน้อย เพราะฉะนั้นพลังงาน E_0และ E_1 ที่สอดคล้องกับสถานะคงตัวต้องเกือบจะเท่ากัน สำหรับ $|\psi_2|^2$ และ $|\psi_3|^2$ ก็เกิดขึ้นเหมือนกันถึงแม้ว่าความเหมือนกันของความหนาแน่นความน่าจะเป็นของสองคลื่นนี้จะไม่ใกล้กันเท่ากับ ψ_0 และ ψ_1 ระดับพลังงาน E_2 และ E_3 ต้องอยู่ชิดกันมากด้วย แต่ไม่ชิดกันเท่ากับ E_0และ E_1 อย่างไรก็ตามสำหรับระดับพลังงานที่มีค่า

มากกว่าความสูงของกำแพงศักย์ที่ศูนย์กลาง (อย่างเช่น E' ในภาพ 11) ฟังก์ชันคลื่นกับระดับพลังงานจะมีค่าคล้ายกับกรณีการสั่นฮาร์โมนิค ระดับพลังงานแสดงในภาพ 14 ที่มีขนาดสอดคล้องกับระดับพลังงานของโมเลกุลแอมโมเนีย ความสูงของกำแพงศักย์ในแอมโมเนียมีค่าประมาณ 0.254 eV ในภาพยังแสดงการแยกระหว่างคู่ระดับพลังงาน 0s กับ 0a ที่สอดคล้องกับฟังก์ชันคลื่น ψ_0 และ ψ_1 หรือระหว่างคู่ระดับพลังงาน 1s กับ 1a ที่สอดคล้องกับฟังก์ชันคลื่น ψ_2 และ ψ_3 ที่ถูกเปรียบเทียบขนาดเล็กมาก กับอีกสองคู่พลังงานด้วย ตาราง 1 แสดงระดับพลังงานของแอมโมเนียแปดระดับแรก



ภาพ 14 ระดับพลังงานในการเคลื่อนที่กลับกันใน NH_3

ตาราง 1 ระดับพลังงานการสั่นสำหรับการเคลื่อนที่ตามแกนของอะตอมไนโตรเจนในโมเลกุลแอมโมเนียที่สัมพัทธ์กับสถานะพื้น [21]

Level	eV
3a	0.3547
3s	0.2950
2a	0.2367
2s	0.1980
1a	0.1222
1s	0.1178
0a	9.84×10^{-5}
0s	0

จากตาราง 1 แสดงระดับพลังงานการสั่นสำหรับการเคลื่อนที่ตามแกนของอะตอมไนโตรเจนในโมเลกุลแอมโมเนียที่สัมพัทธ์กับสถานะพื้น จะเห็นได้ว่าที่ระดับพลังงานสูงขึ้นค่าพลังงานมีขนาดมากขึ้นด้วย แต่ที่ระดับพลังงานเดียวกันกรณีสมมาตรและปฏิสมมาตร (เช่น 1s และ 1a ตามลำดับ) จะมีค่าพลังงานที่ใกล้เคียงกัน

งานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

ในการวิจัยการประยุกต์ใช้วิธีการยิงคำตอบในการแก้ปัญหาศักย์คู่กำลังสี่ ได้ศึกษางานวิจัยที่เกี่ยวข้องจากเอกสารและงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง พบว่ามีงานวิจัยเกี่ยวกับวิธีการวิเคราะห์และแก้ปัญหาบ่อศักย์คู่ (Double-Well) ด้วยวิธีการที่แตกต่างกัน การวิเคราะห์ปัญหาด้วยวิธีฮิลล์ดีเทอร์มิแนนท์ (Hill Determinant Approach) และการหาคำตอบกับปัญหาทางกลศาสตร์ควอนตัมด้วยวิธีการยิงคำตอบเชิงตัวเลข (Numerical Shooting Method) โดยมีรายละเอียดดังต่อไปนี้

Feng Zhou, Zhuangqi Cao และ Qishun Shen [1] ได้ทำการศึกษาการแยกระดับพลังงานในบ่อศักย์คู่แบบสมมาตร ได้ศึกษาว่า วิธีการวิเคราะห์โดยใช้การถ่ายโอนเมทริกซ์เพื่อแก้ปัญหาการแยกระดับพลังงานในบ่อศักย์คู่แบบสมมาตร ความสมนัยของสมการการ

แพร่กระจายในการแยกระดับพลังงานถูกนำเสนอในรูปแบบที่ชัดเจน การคำนวณเชิงตัวเลขแสดงวิธีที่นำเสนอนี้สามารถให้ผลลัพธ์ได้ถูกต้องอย่างยิ่งสำหรับบ่อศักย์คู่แบบสมมาตร

R. Friedberg, T.D. Lee, W.Q. Zhao และ A.Cimenser [22] ได้ศึกษาคำตอบอิทเทอเรชันที่สู่เข้าของบ่อศักย์คู่กำลังสี่ ซึ่งศึกษาการแก้ปัญหาสมการอินทิกรัลโดยใช้วิธีการวนหาคำตอบที่เป็นฟังก์ชันคลื่นที่ระดับต่ำสุดสองระดับของแฮมิลโตเนียนในบ่อศักย์คู่กำลังสี่ในหนึ่งมิติ

M.R. Witwit [17] ได้ศึกษาระดับพลังงานสำหรับบ่อศักย์คู่แบบไม่สมมาตรในหลายๆมิติ โดยวิธีการฮิลล์ดีเทอร์มิแนนท์ (Hill Determinant Approach) จากการศึกษาพบว่า ระดับพลังงานสำหรับระบบหนึ่ง สองและสามมิติถูกคำนวณโดยการใช้วิธีการฮิลล์ดีเทอร์มิแนนท์สำหรับค่าไอเก้นสเตทที่หลากหลายและพารามิเตอร์รบกวนที่มีค่ามาก (λ,k_x,k_y,k_z) ผลลัพธ์เชิงตัวเลขสำหรับบางกรณีสอดคล้องกับคนอื่นๆ ที่ได้ศึกษามาแล้ว

อริศรา วงพันคำ [23] ได้ศึกษาการประยุกต์กระบวนการยิงคำตอบในเชิงตัวเลขสำหรับปัญหาการสั่นแบบแอนฮาร์โมนิค 1 มิติ ในทางกลศาสตร์ควอนตัม ซึ่งมุ่งหาค่าไอเก้นพลังงานและฟังก์ชันคลื่นสำหรับอนุภาคภายใต้บ่อศักย์ฮาร์มอนิคและบ่อศักย์แอนฮาร์โมนิค โดยใช้โปรแกรมประมวลผลบนคอมพิวเตอร์ที่มีประสิทธิภาพ

T.Sawanee [24] ได้ศึกษาการคำนวณเชิงตัวเลขของพลังงานที่ระดับสถานะพื้นสำหรับปัญหาบ่อศักย์คู่เกาส์เซียน (Gaussian Double-Well) ด้วยวิธีกระบวนการรบกวน (Perturbation) และวิธีการยิงคำตอบ (Shooting Method)

นอกจากนี้ยังมีงานวิจัยและบทวิจารณ์เกี่ยวกับปัญหาบ่อศักย์คู่แสดงใน [22] [25,26,27,28, 29] และ [30,31,32] ส่วนงานวิจัยและบทวิจารณ์เกี่ยวกับการแก้ปัญหาด้วยวิธีการฮิลล์ดีเทอร์มิแนนท์แสดงใน [33,34,35,36,37]

จากการศึกษางานวิจัยที่เกี่ยวข้องพบว่าเป็นการศึกษาการแก้ปัญหาบ่อศักย์คู่ด้วยวิธีการที่หลากหลายและแก้ปัญหาอื่นด้วยวิธีการฮิลล์ดีเทอร์มิแนนท์ ทำให้ได้ค่าไอเก้นพลังงานและฟังก์ชันคลื่นด้วยวิธีการเชิงตัวเลขแตกต่างกันที่มีความแม่นยำสูง ดังนั้นในการวิจัยครั้งนี้จึงมีวัตถุประสงค์หลักเพื่อมุ่งศึกษาการแก้ ปัญหาบ่อศักย์คู่กำลังสี่ 1 มิติ ซึ่งเป็นบ่อศักย์คู่แบบสมมาตรด้วยวิธีการยิงคำตอบเชิงตัวเลขเพื่อให้ได้ค่าไอเก้นพลังงานและฟังก์ชันคลื่นที่มีค่าความแม่นยำใกล้เคียงกับวิธีการอื่นที่มีความแม่นยำสูงเช่นกัน