ป
QA
212
อ911ก
2551.
- 6 ต.ค. 2551
1 4 256315
สำนักหอสมุด

บทที่ 3

วิธีดำเนินงานวิจัย

ในการวิจัยการประยุกต์ใช้วิธีการยิงคำตอบเชิงตัวเลขในการแก้ปัญหาศักย์คู่กำลังสี่ (Quartic Double-well Potential Problem) ครั้งนี้เริ่มจากการศึกษาเอกสาร ตำรา ทฤษฎีและงานวิจัยที่เกี่ยวข้องกับปัญหาอนุภาคในบ่อศักย์คู่กำลังสี่ 1 มิติ การหาผลเฉลยเชิงตัวเลขโดยใช้กระบวนการยิงคำตอบ ตลอดจนศึกษาโปรแกรมคอมพิวเตอร์สำหรับคำนวณทางคณิตศาสตร์ที่ใช้ในงานวิจัยนี้ซึ่งได้แก่ โปรแกรม Mathemetica 5.1 และได้ดำเนินการวิจัยโดยมีลำดับขั้นตอนดังต่อไปนี้

วิเคราะห์ค่าพลังงานและฟังก์ชันคลื่นของอนุภาคในปัญหาบ่อศักย์คู่กำลังสี่ใน 1 มิติ

พิจารณาสมการชเรอดิงเงอร์ที่ไม่ขึ้นกับเวลาสำหรับอนุภาคเดี่ยวใน 1 มิติ

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+V(x)\psi(x) = E(x)\psi(x) \tag{12}$$

คูณสมการ (12) ด้วย $-\frac{2m}{\hbar^2}$ ทั้งสองข้างพร้อมทั้งจัดข้างขวาเป็นศูนย์จะได้

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+\left(\frac{2m}{\hbar^2}E(x)-\frac{2m}{\hbar^2}V(x)\right)\psi(x) = 0\frac{-b\pm\sqrt{b^2-4ac}}{2a} \tag{13}$$

ปัญหาบ่อศักย์คู่กำลังสี่ 1 มิติ ที่พิจารณาในงานวิจัยนี้เป็นดังนี้

$$V(x) = -kx^2+\lambda x^4 \tag{14}$$

แทนค่าสมการ (14) ลงในสมการ (13) แล้วจัดสมการใหม่จะได้

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+\left(\frac{2m}{\hbar^2}E+\frac{2mk}{\hbar^2}x^2-\frac{2m\lambda}{\hbar^2}x^4\right)\psi(x) = 0 \tag{15}$$

ในการยิงคำตอบ (Shooting Method) นั้นจะต้องเปลี่ยน $\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}$ ให้อยู่ในรูปผลต่างไฟไนต์ได้ดังนี้

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} \approx \frac{\psi_{n+1}+\psi_{n-1}-2\psi_n}{(\Delta x)^2} \tag{16}$$

แทนสมการ (16) ลงในสมการ (15) และจัดสมการเพื่อให้ได้ค่า ψ_{n+1} ใหม่ในเทอม ψ_n และ ψ_{n-1} ดังนี้

$$\psi_{n+1} = 2\psi_n - \psi_{n-1} - (\Delta x)^2\left(\frac{2m}{\hbar^2}E + \frac{2mk}{\hbar^2}x^2 - \frac{2m\lambda}{\hbar^2}x^4\right)\psi_n \tag{17}$$

สมการ (17) นี้จะถูกนำไปใช้คำนวณหาค่าฟังก์ชันคลื่น (Wave Function) ที่ถูกต้องโดยโปรแกรม Mathematica 5.1 ต่อไป

การใช้โปรแกรมคอมพิวเตอร์สำหรับคำนวณทางคณิตศาสตร์ คำนวณค่าพลังงานและสร้างฟังก์ชันคลื่นของอนุภาคในปัญหาบ่อศักย์คู่กำลังสี่ 1 มิติโดยใช้วิธีการยิงคำตอบ

จากสมการ (17) เพื่อความสะดวกในการคำนวณค่าพลังงานและฟังก์ชันคลื่นของบ่อศักย์คู่กำลังสี่ 1 มิติ ที่มีค่า k และ λ ต่างกรณีกันออกไปนั้น เราจะกำหนดให้ ค่าคงที่ m และ $\hbar$ มีค่าดังนี้ $m = \frac{1}{2}$ และ $\hbar = 1$ [17] ดังนั้นสมการ (17) จะสามารถถูกเขียนใหม่ได้เป็น

$$\psi_{n+1} = 2\psi_n - \psi_{n-1} - (\Delta x)^2\left(E + kx^2 - \lambda x^4\right)\psi_n \tag{18}$$

สมการ (18) เป็นสมการแสดงฟังก์ชันคลื่นของปัญหาบ่อศักย์คู่กำลังสี่ใน 1 มิติ ที่ได้จากการวิเคราะห์ผลเฉลยด้วยวิธีการยิงคำตอบ จากนั้นแสดงผลค่าฟังก์ชันคลื่นและค่าพลังงานที่ระดับพลังงานต่างๆ ของบ่อศักย์คู่กำลังสี่ที่มีค่า k และ λ ที่แตกต่างกันด้วยโปรแกรมคอมพิวเตอร์สำหรับคำนวณทางคณิตศาสตร์ Mathemetica 5.1 โดยมีขั้นตอนดังต่อไปนี้

1. กำหนด Range ที่ใช้ในการวิจัยครั้งนี้ คือ Range = 5 ซึ่งเป็นค่าที่ได้จากการทบทวนวิจัยที่มีการศึกษามาแล้วพบว่าเป็นค่าที่เหมาะสมที่สุด

2. กำหนดค่า k และ λ ที่ใช้ในการคำนวณ โดยจะใช้ค่า k และ λ จากวิธีการฮิลล์ดีเทอร์มิแนนท์ (Hill determinant approach) [17] ซึ่งใช้ทั้งหมดเป็น 12 กรณี ดังนี้

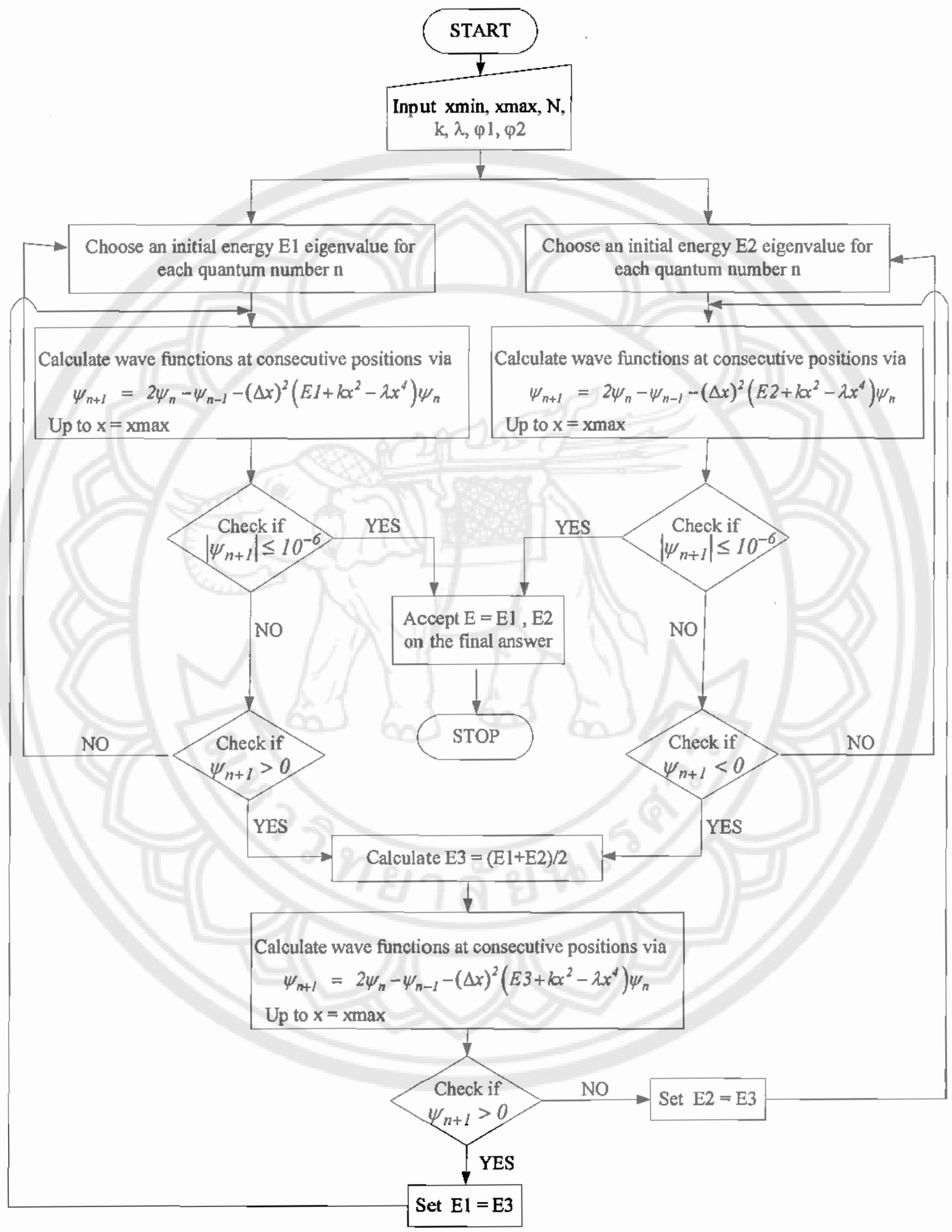
กรณี 1	$k = 2.5,\ \lambda = 1.0$	กรณี 7	$k = 5.0,\ \lambda = 0.5$
กรณี 2	$k = 5.0,\ \lambda = 1.0$	กรณี 8	$k = 15.0,\ \lambda = 1.5$
กรณี 3	$k = 7.0,\ \lambda = 1.0$	กรณี 9	$k = 30.0,\ \lambda = 5.0$
กรณี 4	$k = 5.0,\ \lambda = 1.0$	กรณี 10	$k = 50.0,\ \lambda = 10.0$
กรณี 5	$k = 25.0,\ \lambda = 1.0$	กรณี 11	$k = 100.0,\ \lambda = 15.0$
กรณี 6	$k = 40.0,\ \lambda = 6.0$	กรณี 12	$k = 150.0,\ \lambda = 25.0$

3. กำหนดจำนวน Element ที่จะใช้ในการคำนวณครั้งนี้จะคำนวณโดยใช้จำนวนช่วงจุด (Element) สองค่า กำหนดให้เป็น N = 800 และ N = 20,000

4. เขียนโปรแกรมการคำนวณเพื่อแสดงค่าพลังงานและค่าฟังก์ชันคลื่นในรูปของกราฟ เนื่องจากบ่อศักย์คู่กำลังสี่เป็นบ่อศักย์สมมาตรดังนั้นโดยธรรมชาติแล้วฟังก์ชันคลื่นที่เกิดขึ้นในบ่อศักย์คู่จะเป็นฟังก์ชันคู่และฟังก์ชันคี่ซึ่งขึ้นอยู่กับค่าพลังงานที่ระดับใดๆ ที่ระดับพลังงานคู่ (n = 0, 2, 4, 6 ...) ฟังก์ชันคลื่นที่ได้จะเป็นฟังก์ชันคู่ ส่วนที่ระดับคี่ (n = 1, 3, 5 ...) ฟังก์ชันคลื่นที่ได้จะเป็นฟังก์ชันคี่ ดังนั้นในโปรแกรมการคำนวณจะแสดงการคำนวณค่าฟังก์ชันคลื่นเพียงบ่อเดียวซึ่งใช้จำนวนช่วงจุด เป็น N = 10,000 แต่ในการแสดงฟังก์ชันคลื่นในรูปของกราฟจะแสดงฟังก์ชันคลื่นเต็มบ่อคู่

5. ค่าพลังงานจากสมการ (18) ในแต่ละระดับพลังงาน (ที่ n เป็นระดับพลังงานใดๆ) จะเริ่มต้นโดยพิจารณาจากค่าพลังงานที่ได้โดยวิธีการฮิลล์ดีเทอร์มิแนนท์ ในแต่ละกรณีของ k และ λ แล้วใช้วิธีการยิงคำตอบของพลังงานที่มีค่าใกล้เคียงด้วยวิธีการ Binary Search

แผนผังการทำงานโปรแกรมคอมพิวเตอร์สำหรับการแก้ปัญหาวิธีการเชิงตัวเลข



ภาพ 15 แผนผังทำงานโปรแกรมคอมพิวเตอร์สำหรับการหาค่าพลังงานและฟังก์ชันคลื่นในปัญหาบ่อศักย์คู่กำลังสี่ 1 มิติ

ตัวอย่างการเขียนโปรแกรมการคำนวณค่าพลังงานและแสดงภาพของฟังก์ชันคลื่น

ตัวอย่างการเขียนโปรแกรมการคำนวณค่าพลังงานและแสดงภาพของฟังก์ชันคลื่นนี้ เป็นการแสดงค่าพลังงานที่ระดับสถานะพื้น (n=0) และสถานะกระตุ้นที่หนึ่ง (n=1) ภายใต้เงื่อนไขดังต่อไปนี้

1. บ่อศักย์คู่กำลังสี่ใน 1 มิติ

$$V(x) = -kx^2 + \lambda x^4$$

2. ค่า k = 2.5, λ = 1.5
3. ขอบเขตในการคำนวณ (Range) = 5
4. จำนวนช่วงจุดที่ใช้ในการคำนวณ N = 10,000
5. ค่าไอเก้นพลังงานจากวิธีการฮิลล์ดีเทอร์มิแนนท์ ในกรณีนี้ ที่สถานะพื้น (n=0) เท่ากับ 0.220459072372129 และที่สถานะกระตุ้นแรก (n=1) เท่ากับ 2.08829711228774

กรณีฟังก์ชันคู่ (Even Function) **พิจารณาที่สถานะพื้น** (Ground State n=0)

โปรแกรม	**คำอธิบาย**
In[1]:= xmin = 0;	กำหนดขอบเขตล่างของการคำนวณเป็น 0
xmax = 5;	กำหนดขอบเขตบนของการคำนวณเป็น 5
n = 10000;	กำหนดจำนวนช่วงจุด
$\Delta x = (xmax - xmin)/n$;	คำนวณช่วงของการคำนวณเป็น Δx
$\psi_1 = 1$; $\psi_2 = 1$;	ที่สถานะพื้น (n=0) กำหนดค่า $\psi_1 = 1$ และ $\psi_2 = 1$
k = 2.5 ; λ = 1.5 ;	กำหนดค่า k และ λ
x_1 = 0 ; $x_2 = x_1 + \Delta x$;	กำหนดจำนวนช่วงจุดที่ 1 เป็น 0 (x_1 = 0) และจำนวนช่วงจุดที่ 2 เท่ากับจำนวนช่วงจุดที่ 1 บวกค่าช่วงของการคำนวณโดยไม่แสดงค่า ในโปรแกรมจะมีเครื่องหมาย ;
In[2]:= e = **0.21**	**เลือกค่าพลังงานค่าแรกในการยิงคำตอบ** (E1) **เป็น** 0.21
Out[2]: 0.21	**(ในการเลือกค่าพลังงานในการยิงคำตอบนั้นเราจะเลือกค่าที่ใกล้เคียงกับค่าพลังงานที่ได้จากวิธีการฮิลล์ดีเทอร์มิแนนท์ ซึ่งจะเห็นจากค่า** 0.220459072372129)

In[3]:= N[Table[$\psi_{i+1} = 2\psi_i - \psi_{i-1} - (\Delta x)^2 * (e + k(x_{i+1} = x_i + \Delta x)^2 - \lambda(x_{i+1} = x_i + \Delta x)^4 * \psi_i$, {i, 2, 9999}]]]	ให้โปรแกรมคำนวณค่า ψ_{i+1}, ψ_i และ ψ_{i-1} ตั้งแต่ i =2 ถึง i = 9999
Out[3]: {1.,1.,1.,0.999999,0.999999, ...1.161189×10^{17}}	ได้ค่า ψ_i จำนวน 9998 ค่า ให้สังเกตที่ค่า ψ_i ตัวสุดท้าย มีค่าเป็นบวก

1. ลำดับต่อไปให้เลือกค่าพลังงานตัวที่จะใช้ในการยิงคำตอบต่อไปเป็น E2 = 0.23 แล้วทำการยิงคำตอบอีกครั้งหนึ่ง จะทำให้ได้ค่า ψ_i ตัวสุดท้ายมีค่าเป็น -1.40952×10^{17} ซึ่งมีค่าเป็นลบ

2. นำค่า E1 และ E2 มาหาค่าเฉลี่ย แล้วนำค่าเฉลี่ยครั้งที่ 1 ที่ได้ไปทำการยิงคำตอบเพื่อคำนวณค่า ψ_i แล้วดูว่าค่า ψ_i ตัวสุดท้ายมีค่าเป็นบวกหรือลบ ถ้าเป็นบวกให้นำค่าเฉลี่ยครั้งที่ 1 ไปหาค่าเฉลี่ยกับค่า E2 จะได้เป็นค่าเฉลี่ยครั้งที่ 2 แต่ถ้าเป็นลบให้นำค่าเฉลี่ยครั้งที่ 1 ไปหาค่าเฉลี่ยกับค่า E1 จะได้เป็นค่าเฉลี่ยครั้งที่ 2 กระบวนการนี้เรียกว่า Binary Search

3. นำค่าเฉลี่ยครั้งที่ 2 ที่ได้ไปคำนวณค่า ψ_i และทำเหมือนขั้นตอนที่แล้ว จนกว่าจะได้ค่า ψ_i ตัวสุดท้ายมีค่าลู่เข้าสู่ศูนย์มากที่สุด

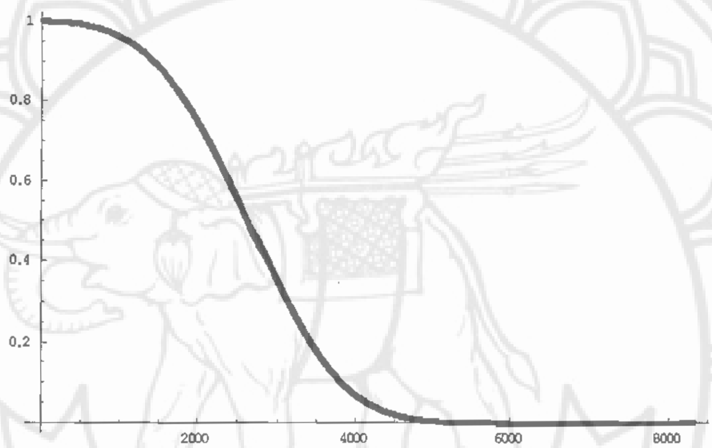
4. เมื่อได้ค่า ψ_i ตัวสุดท้ายมีค่าลู่เข้าใกล้ศูนย์แล้ว ค่าพลังงานที่ได้จะเป็นคำตอบที่ถูกต้องของกรณีนี้

ในส่วนของการแสดงกราฟฟังก์ชันคลื่นที่ได้จากการยิงคำตอบที่ถูกต้องแล้วนั้นให้ปฏิบัติตามขั้นตอนของโปรแกรมดังนี้

เมื่อได้ค่าไอเก้นพลังงานในยิงคำตอบเป็น 0.22061634409415998 ได้ค่า ψ_i เป็น { 1.,1.,1.,0.999999,0.999999, ...,926791.} ในการแสดงกราฟฟังก์ชันคลื่นจะแสดงค่าแรกจนถึงค่าที่เข้าสู่ศูนย์มากที่สุด

โปรแกรม	คำอธิบาย
In[4]:= **AA={ψ_1, ψ_2 ,1.,1.,1.,0.999999,0.999999, …,0.0009903524174770064} ;**	**กำหนดให้ AA เป็นค่า ψ_i ตั้งแต่ตัวแรกจนถึงตัวสุดท้ายและไม่แสดงค่า AA โดยในโปรแกรมจะมีเครื่องหมาย ; ต่อท้ายคำสั่ง**
In[5]:= **ListPlot [AA]**	ให้ทำการ Plot ค่า AA ทุกค่า จะได้กราฟฟังก์ชันคลื่น ดังภาพ 16

Out[5]:



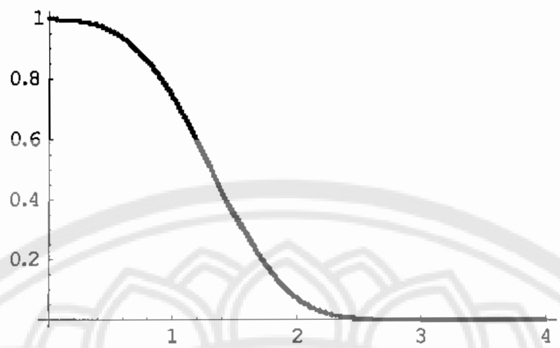
- Graphics -

ภาพ 16 กราฟฟังก์ชันคลื่นของบ่อศักย์คู่กำลังสี่ใน 1 มิติ เพียงบ่อเดียว กรณี k = 2.5, λ = 1.5 ที่สถานะพื้น (Ground State n = 0) **ที่เกิดจากการพล็อตจุด**

In[6]:= N[Table[{x = xmin+ i* Δx, ψ_i},{i,1,8000}]] Out[6]: {0.0005,1.},{0.001,1.},{0.0015,1.},…. {4.,0.0000511914}	คำสั่งให้แสดงคู่อันดับค่า x กับ ψ_i ที่ i = 1 ถึง 8000
In[7]: **=ListPlot [%]**	**คำสั่งแสดงกราฟของค่าในคำสั่งก่อนหน้านี้ ได้กราฟแสดงดังภาพ 17**

โปรแกรม **คำอธิบาย**

Out[7]:

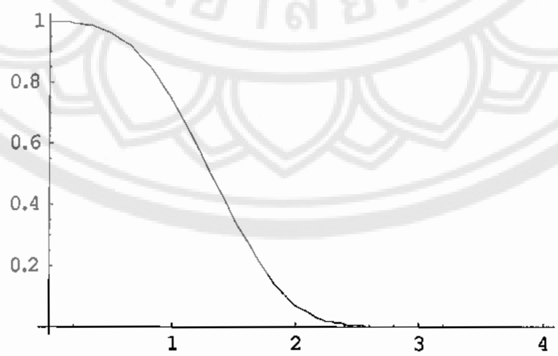


- Graphics -

ภาพ 17 กราฟฟังก์ชันคลื่นของบ่อศักย์คู่กำลังสี่ใน 1 มิติ เพียงบ่อเดียว กรณี k = 2.5, λ = 1.5 **ที่สถานะพื้น** (Ground State n = 0) **ที่เกิดจากการพล็อตคู่อันดับระหว่างค่า** x **กับ** ψ_i

In[8]:= aa=Interpolation[%%]	กำหนดให้ aa(x) เป็นฟังก์ชันที่เชื่อมต่อจุด
Out[8]: InterpolatingFunction[{{0.0005,4.}},<>]	(Interpolation) คู่อันดับจากคำสั่งก่อนหน้านี้แบบจุดต่อจุด
In[9]:=Plot[aa[x],{x,0,4.0}]	คำสั่งพล็อตกราฟที่ได้จากการเชื่อมต่อจุดที่ค่า x = 0 ถึง 4.0 ได้กราฟดังภาพ 18

Out[9]:

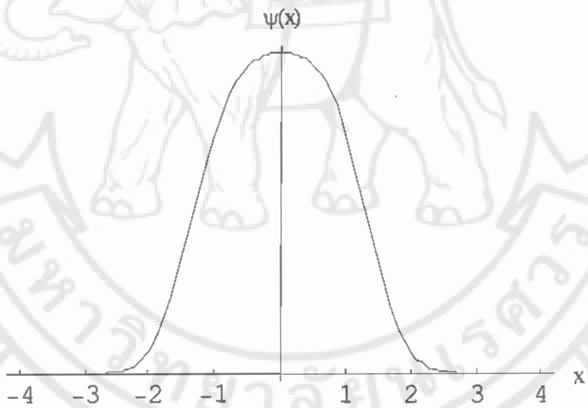


- Graphics -

ภาพ 18 กราฟฟังก์ชันคลื่นของบ่อศักย์คู่กำลังสี่ใน 1 มิติ เพียงบ่อเดียว กรณี k = 2.5, λ = 1.5 **ที่สถานะพื้น** (Ground State n = 0) **ที่เกิดจากการพล็อตค่าได้จาก** Interpolation **ที่ค่า** x = 0 **ถึง** 4.0

โปรแกรม	คำอธิบาย
In[10]:= zzz[x_]:=If[x>=0,aa[x],aa[-x]];	กำหนดให้ zzz(x) เป็นฟังก์ชันของ x เป็นไปตามเงื่อนไขว่า ถ้า x มากกว่าหรือเท่ากับ 0 ให้ zzz(x) เท่ากับ aa(x) และ aa(-x)
In[11]:= Plot[zzz[x],{x,-4.0,4.0},Ticks → {{{-4,"-4"},{-3,"-3"},{-2,"-2"},{-1,"-1"},{0,"0"},{1,"1"},{2,"2"},{3,"3"},{4,"4"}},None},AxesLabel→{FontForm["x",{"Symbol",10}],FontForm[" ψ (x)",{"Symbol",10 }]}]	คำสั่งพล็อตกราฟฟังก์ชัน zzz(x) ซึ่งเป็นฟังก์ชันคลื่นของอนุภาคในบ่อศักย์คู่กำลังสี่ใน 1 มิติ เต็มบ่อที่แสดงแกนตั้งเป็นค่าของ ψ(x) และแกนนอนเป็นค่า x ตั้งแต่ -4.0 ถึง 4.0 แสดงดังภาพ 19

Out[11]:

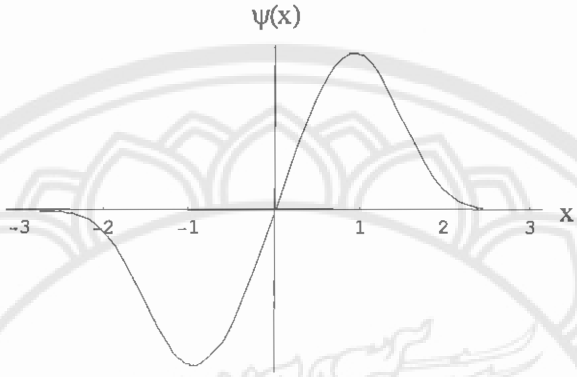


ภาพ 19 **กราฟฟังก์ชันคลื่นของอนุภาคในบ่อศักย์คู่กำลังสี่ใน 1 มิติ ทั้งสองบ่อ กรณี** k = 2.5, λ = 1.5 **ที่สถานะพื้น** (Ground State n = 0)

กรณีฟังก์ชันคี่ (Odd Function) **พิจารณาที่สถานะกระตุ้นที่** 1 (First Excited State n=1)

ในการคำนวณค่าไอเก้นพลังงานของอนุภาคในบ่อศักย์คู่กำลังสี่ใน 1 มิติ ที่สถานะกระตุ้นที่ 1 ใช้วิธีการเดียวกับกรณีที่สถานะพื้น แต่มีส่วนที่แตกต่างกันตรงการกำหนดค่า ψ_1 และ ψ_2 ที่ต่างจากกรณีที่สถานะพื้น คือ กำหนดให้ $\psi_1 = 0$ และ $\psi_2 = \Delta x = \frac{x_{max} - x_{min}}{N}$ ทั้งนี้เนื่องจากเป็นฟังก์ชันคี่

ส่วนการแสดงกราฟฟังก์ชันคลื่นมีขั้นตอนการดำเนินการเช่นเดียวกันกับกรณีที่สถานะพื้น แต่มีส่วนที่แตกต่างกันตรงการกำหนดค่า zzz(x) เป็นฟังก์ชันของ x เป็นไปตามเงื่อนไขว่า ถ้า x มากกว่าหรือเท่ากับ 0 ให้ zzz(x) เท่ากับ aa(x) และ -aa(-x) ดังนั้นจะได้กราฟฟังก์ชันคลื่น แสดงดังภาพ 20



ภาพ 20 กราฟฟังก์ชันคลื่นของอนุภาคในบ่อศักย์คู่กำลังสี่ใน 1 มิติ เต็มโดเมน กรณี k = 2.5, λ = 1.5 **ที่สถานะกระตุ้นที่** 1 (First Excited State n = 1)

เปรียบเทียบค่าไอเก้นพลังงานที่ได้จากการใช้วิธีการยิงคำตอบกับวิธีการหาผลเฉลยโดยวิธีการที่มีความแม่นยำสูง

ในการเปรียบเทียบค่าไอเก้นพลังงานของอนุภาคภายใต้บ่อศักย์คู่กำลังสี่ใน 1 มิตินั้นจะแสดงการเปรียบเทียบ 2 กรณี คือ

1. เปรียบค่าไอเก้นพลังงานที่ได้จากวิธีการยิงคำตอบเชิงตัวเลขที่ N = 800 กับค่าไอเก้นพลังงานจากวิธีการฮิลล์ดีเทอร์มิแนนท์ ทั้ง 12 กรณีที่มีค่า k และ λ ต่างกัน ที่ระดับพลังงานต่างๆ และแสดงค่าเปอร์เซ็นต์ความแตกต่าง (%Difference)

2. เปรียบเทียบค่าไอเก้นพลังงานที่ได้จากวิธีการยิงคำตอบเชิงตัวเลขที่ N = 20,000 กับค่าไอเก้นพลังงานจากวิธีการฮิลล์ดีเทอร์มิแนนท์ ทั้ง 12 กรณีที่มีค่า k และ λ ต่างกัน ที่ระดับพลังงานต่างๆ และแสดงค่าเปอร์เซ็นต์ความแตกต่าง (%Difference) โดยมีวิธีการคำนวณโดยใช้สมการดังต่อไปนี้

$$\%Difference = \frac{\left|HDA - NSM\right|}{HDA} \times 100 \qquad (19)$$

โดยที่ HDA หมายถึง ค่าไอเก้นพลังงานจากวิธีการฮิลล์ดีเทอร์มิแนนท์

NSM หมายถึง ค่าไอเก้นพลังงานจากวิธีการยิงคำตอบเชิงตัวเลข