สารบัญ

บทที่		หน้า
1	**บทนำ**	1
	ความสำคัญและที่มาของงานวิจัย	1
	วัตถุประสงค์ของงานวิจัย	2
	ขอบเขตของงานวิจัย	2
	เครื่องมือที่ใช้ในการวิจัย	2
	ขั้นตอนการดำเนินงานวิจัย	2
	ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ	3
2	**ทฤษฎีและงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง**	4
	สมการชโรดิงเจอร์ที่ไม่ขึ้นกับเวลา (Time - Independent Schrödinger Equation)	4
	วิธีการยิงคำตอบใน 1 มิติ (Shooting Method in one dimensional)	9
	การทะลุผ่านกำแพงศักย์ (Potential Barrier Penetration)	13
	งานวิจัยที่เกี่ยวข้อง	23
3	**วิธีดำเนินการวิจัย**	25
	วิเคราะห์ค่าพลังงานและฟังก์ชันคลื่นของอนุภาคในปัญหาบ่อศักย์คู่กำลังสี่ใน 1 มิติ	25
	การใช้โปรแกรมคอมพิวเตอร์สำหรับคำนวณทางคณิตศาสตร์ คำนวณค่าพลังงานและสร้างฟังก์ชันคลื่นของอนุภาคในปัญหาบ่อศักย์คู่กำลังสี่ 1 มิติ **โดยใช้วิธีการยิงคำตอบ**	26
	แผนผังการทำงานโปรแกรมคอมพิวเตอร์สำหรับการแก้ปัญหาวิธีการเชิงตัวเลข	28
	ตัวอย่างการเขียนโปรแกรมการคำนวณค่าพลังงานและแสดงภาพของฟังก์ชันคลื่น	29
	เปรียบเทียบค่าไอเก้นพลังงานที่ได้จากการใช้วิธีการยิงคำตอบกับวิธีการหาผลเฉลยโดยวิธีการที่มีความแม่นยำสูง	34

สารบัญ (ต่อ)

บทที่ **หน้า**

4 **ผลการคำนวณและวิเคราะห์** 35

ผลการเปรียบเทียบความแตกต่างค่าไอเก้นพลังงานของอนุภาคภายใต้บ่อศักย์คู่กำลังสี่ใน 1 มิติ ระหว่างค่าจากวิธีการยิงคำตอบที่ N=800 และวิธีการฮิลล์ดีเทอร์มิแนนท์..... 35

กราฟฟังก์ชันคลื่นของอนุภาคภายใต้บ่อศักย์คู่กำลังสี่ใน 1 มิติ ที่ระดับพลังงานแตกต่างกัน..... 43

5 **บทสรุป**..... 55

สรุปผลการวิจัย..... 55

อภิปรายผลการวิจัย..... 57

ข้อเสนอแนะ..... 58

บรรณานุกรม..... 60

ภาคผนวก..... 64

ประวัติผู้วิจัย..... 85

สารบัญตาราง

ตาราง **หน้า**

1 แสดงระดับพลังงานการสั่นสำหรับการเคลื่อนที่ตามแกนของอะตอมไนโตรเจนในโมเลกุลแอมโมเนียที่สัมพัทธ์กับสถานะพื้น [1]..... 23

2 แสดงการเปรียบเทียบความแตกต่างค่าไอเก้นพลังงานของอนุภาคภายใต้บ่อศักย์คู่กำลังสี่ใน 1 มิติ ระหว่างค่าจากวิธีการยิงคำตอบที่ N=800 กับวิธีการฮิลล์ดี-เทอร์มิแนนท์..... 35

3 แสดงการเปรียบเทียบความแตกต่างค่าไอเก้นพลังงานของอนุภาคภายใต้บ่อศักย์คู่กำลังสี่ใน 1 มิติ ระหว่างค่าจากวิธีการยิงคำตอบที่ N=20,000 กับวิธีการฮิลล์ดีเทอร์มิแนนท์..... 39

สารบัญภาพ

ภาพ **หน้า**

1 พลังงานศักย์สำหรับอนุภาคในกล่อง ที่ศักย์ภายในเป็นศูนย์ (V =0) ภายนอกมีศักย์เป็น V_0..... 6

2 ฟังก์ชันคลื่นสำหรับค่าไอเก้นสเตท 3 ค่าต่ำสุดของอนุภาคในกล่อง คลื่นนิ่งรูปโคไซน์ (แพริตี้คู่) จากสมการ (6) เมื่อ $A = L^{-1/2}$ เป็นค่าที่ได้จากการนอมอลไลซ์ฟังก์ชันคลื่น..... 8

3 ฟังก์ชันคลื่นสำหรับค่าไอเกนต์สเตต 3 ค่าต่ำสุดของอนุภาคในกล่องฟังก์ชันคลื่นรูปไซน์ (แพริตี้คี่) เมื่อ $A = L^{-1/2}$ เป็นค่าที่ได้จากการนอมอลไลซ์ฟังก์ชันคลื่น... 8

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 $(|x| > L)$..... 12

5 กำแพงศักย์สี่เหลี่ยมกว้าง a สูง E_0 14

6 ฟังก์ชันคลื่นที่สอดคล้องกับกำแพงศักย์จากภาพ 5 ที่ระดับพลังงานน้อยกว่าความสูงของกำแพง..... 14

7 ค่าสัมประสิทธิ์การทะลุผ่าน (Transmission Coefficient) ของกำแพงศักย์สี่เหลี่ยม.. 15

8 กำแพงศักย์กรณีทั่วไป..... 16

9 รูปร่างของฟังก์ชันคลื่นในกรณีทั่วไปของกำแพงศักย์..... 17

10 การเคลื่อนที่กลับกันของอะตอมไนโตรเจนในโลเมกุลแอมโมเนีย(a) และพลังงานศักย์สำหรับการเคลื่อนที่กลับกัน (b)..... 18

11 พลังงานศักย์ของการเคลื่อนที่กลับกันใน NH_3 19

12 ฟังก์ชันคลื่นที่สอดคล้องกับระดับพลังงานต่ำสุดสี่ระดับของการเคลื่อนที่กลับกันใน NH_3 20

13 ความหนาแน่นของความน่าจะเป็นที่สอดคล้องกับฟังก์ชันคลื่นที่แสดงในภาพ 12 21

14 ระดับพลังงานในการเคลื่อนที่กลับกันใน NH_3..... 22

15 แผนผังทำงานโปรแกรมคอมพิวเตอร์สำหรับการหาค่าพลังงานและฟังก์ชันคลื่นในปัญหาบ่อศักย์คู่กำลังสี่ 1 มิติ..... 28

สารบัญภาพ (ต่อ)

ภาพ		หน้า
16	กราฟฟังก์ชันคลื่นของบ่อศักย์คู่กำลังสี่ใน 1 มิติ เพียงบ่อเดียว กรณี k = 2.5 , λ = 1.5.....	31
17	กราฟฟังก์ชันคลื่นของบ่อศักย์คู่กำลังสี่ใน 1 มิติ เพียงบ่อเดียว กรณี k = 2.5 , λ = 1.5 ที่สถานะพื้น (Ground State n = 0) ที่เกิดจากการพล็อตคู่อันดับระหว่างค่า x กับ ψ	32
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.....	32
19	กราฟฟังก์ชันคลื่นของอนุภาคในบ่อศักย์คู่กำลังสี่ใน 1 มิติ ทั้งสองบ่อ กรณี k = 2.5 , λ = 1.5 ที่สถานะพื้น (Ground State n = 0).....	33
20	กราฟฟังก์ชันคลื่นของอนุภาคในบ่อศักย์คู่กำลังสี่ใน 1 มิติ เต็มโดเมน กรณี k = 2.5 , λ = 1.5 ที่สถานะกระตุ้นที่ 1 (First Excited State n = 1).....	34
21	ฟังก์ชันคลื่นของอนุภาคในบ่อศักย์คู่กำลังสี่ 1 มิติกรณีที่ k=2.5 , λ =1.0 ที่ระดับพลังงาน n=0 ในหน่วยไม่เจาะจง (Arbitrary Units).....	43
22	ฟังก์ชันคลื่นของอนุภาคในบ่อศักย์คู่กำลังสี่ 1 มิติกรณีที่ k=2.5 , λ =1.0 ที่ระดับพลังงาน n=1 , n=2 และ n=3 ตามลำดับ ในหน่วยไม่เจาะจง (Arbitrary Units).....	44
23	ฟังก์ชันคลื่นของอนุภาคในบ่อศักย์คู่กำลังสี่ 1 มิติกรณีที่ k=2.5 , λ =1.0 ที่ระดับพลังงาน n=4 , n=5 และ n=6 ตามลำดับ ในหน่วยไม่เจาะจง (Arbitrary Units).....	45
24	ฟังก์ชันคลื่นของอนุภาคในบ่อศักย์คู่กำลังสี่ 1 มิติกรณี k=2.5 , λ =1.0 ที่ระดับพลังงาน n = 7 , n = 8 และ n = 9 ตามลำดับ ในหน่วยไม่เจาะจง (Arbitrary Units).....	46

สารบัญภาพ (ต่อ)

ภาพ **หน้า**

25 ฟังก์ชันคลื่นของอนุภาคในบ่อศักย์คู่กำลังสี่ 1 มิติ กรณี k = 5.0 , λ =1.0 ที่ระดับพลังงาน n = 0 และ n = 1 ตามลำดับ ในหน่วยไม่เจาะจง (Arbitrary Units)..... 47

26 ฟังก์ชันคลื่นของอนุภาคในบ่อศักย์คู่กำลังสี่ 1 มิติกรณี k = 7.0 , λ = 1.0 ที่ระดับพลังงาน n = 0 , n = 1 และn = 2 ตามลำดับ ในหน่วยไม่เจาะจง (Arbitrary Units)..... 48

27 ฟังก์ชันคลื่นของอนุภาคในบ่อศักย์คู่กำลังสี่ 1 มิติกรณี k = 7.0 , λ 1.0 ที่ระดับพลังงาน n = 3 ในหน่วยไม่เจาะจง (Arbitrary Units)..... 49

28 ฟังก์ชันคลื่นของอนุภาคในบ่อศักย์คู่กำลังสี่ 1 มิติกรณี k = 10.0 , λ = 1.0 ที่ระดับพลังงาน n = 0 และ n = 1 ตามลำดับ ในหน่วยไม่เจาะจง (Arbitrary Units)..... 49

29 ฟังก์ชันคลื่นของอนุภาคในบ่อศักย์คู่กำลังสี่ 1 มิติกรณี k = 10.0 , λ = 1.0 ที่ระดับพลังงาน n = 2 , n = 3 และ n = 4 ตามลำดับ ในหน่วยไม่เจาะจง (Arbitrary Units)..... 50

30 ฟังก์ชันคลื่นของอนุภาคในบ่อศักย์คู่กำลังสี่ 1 มิติกรณี k = 10.0 , λ = 1.0 ที่ระดับพลังงาน n = 5 ในหน่วยไม่เจาะจง (Arbitrary Units)..... 51

31 ฟังก์ชันคลื่นของอนุภาคในบ่อศักย์คู่กำลังสี่ 1 มิติกรณี k=2.5 , λ =1.0 ที่ระดับพลังงาน n = 0 และ n = 1 ตามลำดับ ในหน่วยไม่เจาะจง (Arbitrary Units)..... 51

32 ฟังก์ชันคลื่นของอนุภาคในบ่อศักย์คู่กำลังสี่ 1 มิติกรณี k=2.5 , λ =1.0 ที่ระดับพลังงาน n = 2 , n = 3 และ n = 4 ตามลำดับ ในหน่วยไม่เจาะจง (Arbitrary Units)..... 52

33 ฟังก์ชันคลื่นของอนุภาคในบ่อศักย์คู่กำลังสี่ 1 มิติกรณี k=2.5 , λ =1.0 ที่ระดับพลังงาน n = 5 , n = 6 และ n = 7 ตามลำดับ ในหน่วยไม่เจาะจง (Arbitrary Units)..... 53

สารบัญภาพ (ต่อ)

ภาพ **หน้า**

34 ฟังก์ชันคลื่นของอนุภาคในบ่อศักย์คู่กำลังสี่ 1 มิติกรณี k=2.5 , λ =1.0
ที่ระดับพลังงาน n = 8 , n = 9 และ n = 10 ตามลำดับ ในหน่วยไม่เจาะจง
(Arbitrary Units) 54