ว.วิทย. มข. 41(1) 101-111 (2556) KKU Sci. J. 41(1) 101-111 (2013)

วิธีการทางคณิตศาสตร์สำหรับสมการชเรอดิงเงอร์ และวิธีประมาณค่าแบบดับเบิลยูเคบี

Mathematical Methods for Schrödinger Equation and the WKB Approximation Method

เพชรอาภา บุญเสริม[1]

บทคัดย่อ

สมการชเรอดิงเงอร์เป็นสมการพื้นฐานของฟิสิกส์ที่อธิบายถึงพฤติกรรมเชิงกลศาสตร์ควอนตัม สมการนี้เป็นสมการเชิงอนุพันธ์ย่อยซึ่งบรรยายระบบทางกลศาสตร์ควอนตัมที่ขึ้นกับตำแหน่งและเวลา สามารถนำมาใช้อธิบายและวิเคราะห์สมบัติของฟังก์ชันคลื่น สมการชเรอดิงเงอร์เชื่อมโยงกับพลังงานรวมของอนุภาคโดยเกิดจากผลรวมของพลังงานจลน์และพลังงานศักย์ ในบทความนี้ใช้วิธีการทางคณิตศาสตร์เพื่ออธิบายสมการชเรอดิงเงอร์ นอกจากนี้ได้สาธิตวิธีการประมาณแบบดับเบิลยูเคบีซึ่งเป็นวิธีการที่สำคัญในการหาคำตอบแบบประมาณของฟังก์ชันคลื่น พร้อมทั้งแสดงวิธีการหาค่าความน่าจะเป็นในการส่งผ่านและสะท้อนในปัญหาควอนตัมหนึ่งมิติ ปัญหาที่สนใจศึกษาในหัวข้อนี้คือปัญหาการขุดอุโมงค์โดยในทางกลศาสตร์ควอนตัมอนุภาคสามารถทะลุผ่านในกรณีที่พลังงานศักย์มากกว่าค่าพลังงานรวมได้โดยปรากฏการณ์นี้เรียกว่า ปรากฏการณ์ขุดอุโมงค์ วิธีการดับเบิลยูเคบีสามารถใช้เป็นพื้นฐานสำหรับการหาคำตอบอย่างแม่นยำ นอกจากนี้วิธีการประมาณแบบดับเบิลยูเคบียังเหมาะสมกับปัญหาการแผ่กระจายของคลื่นที่มีความถี่สูงมากหรือความยาวคลื่นสั้นมาก

[1]ภาควิชาคณิตศาสตร์และวิทยาการคอมพิวเตอร์ คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย กรุงเทพมหานคร 10330

*E-mail: Petarpa.Boonserm@gmail.com

ABSTRACT

The Schrödinger equation is a fundamental equation in physics for describing quantum mechanical behavior. It is a partial differential equation that shows how a wave function of a physical system evolves over time. In addition, it is associated with the kinetic energy and the potential energy, both of which contribute towards the total energy. This paper explains mathematical aspect of the Schrödinger equation. The concept of the WKB approximation has also been reviewed, which is an important method in finding the approximate solutions for the wave function. In addition, the paper also shows how to derive the transmission and reflection probabilities in relation to a one-dimensional quantum problem, called a “tunneling problem”, which occurs when a classical particle passes through a region where total energy is less than its potential energy. The WKB approximation can be used as a basis for formally writing down the exact solutions. Furthermore, it gives a high accuracy for the propagation of waves with high frequency or short wavelength.

คำสำคัญ: สมการชเรอดิงเงอร์ การประมาณแบบดับเบิลยูเคบี ปรากฏการณ์ขุดอุโมงค์

Keywords: Schrödinger equation, WKB approximations, Tunneling phenomena

บทนำ

กลศาสตร์ควอนตัมเป็นทฤษฎีรากฐานของฟิสิกส์ที่มีความสำคัญมากทฤษฎีหนึ่ง ใช้อธิบายปรากฏการณ์ในระดับจุลภาคที่กลศาสตร์คลาสสิกไม่สามารถอธิบายได้ เช่น พลศาสตร์ของอนุภาคในระดับอะตอม โมเลกุล กลศาสตร์ควอนตัมสามารถอธิบายปรากฏการณ์ดังกล่าวได้และสามารถทำนายผลการทดลองได้อย่างถูกต้องแม่นยำ

ในปี 1925 เออร์วิน ชเรอดิงเงอร์ นักฟิสิกส์ชาวออสเตรียเชื้อสายไอริชได้ค้นพบสมการชเรอดิงเงอร์ ซึ่งนำมาใช้อธิบายและวิเคราะห์ปรากฏการณ์ของกลศาสตร์ควอนตัมได้อย่างถูกต้อง สมการชเรอดิงเงอร์เป็นสมการเชิงอนุพันธ์ย่อยที่เชื่อมโยงกับสมมติฐานของเดอบรอยล์ ที่ว่า อนุภาคสามารถแสดงสมบัติของคลื่นได้ ชเรอดิงเงอร์ได้วิเคราะห์ว่าสมการการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนควรจะคล้ายกับสมการคลื่น และเรียกสมบัติคลื่นของอิเล็กตรอนหรือของอนุภาคอื่นว่า ฟังก์ชันคลื่น โดยสามารถแก้สมการชเรอดิงเงอร์ เพื่อหาพฤติกรรมการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนได้ และพบว่าสมการชเรอดิงเงอร์สามารถทำนายสมบัติของอะตอมไฮโดรเจนได้ด้วยอย่างแม่นยำ นอกจากนั้นสามารถใช้สมการชเรอดิงเงอร์ได้อย่างกว้างขวางทั้งในฟิสิกส์อะตอม ฟิสิกส์นิวเคลียร์ และฟิสิกส์สถานะของแข็ง

นอกจากชเรอดิงเงอร์แล้ว ยังมี เวอร์เนอร์ ไฮเซนเบิร์ก นักวิทยาศาสตร์ชาวเยอรมัน ที่พยายามพัฒนารูปแบบของทฤษฎีควอนตัมสมัยใหม่ โดยใช้เมทริกซ์ที่มีจำนวนมิติเป็นอนันต์ และนำวิธีการของพีชคณิตเมทริกซ์

แสดงตำแหน่งหรือสมบัติของระบบ ดังเช่น อิเล็กตรอนในอะตอมซึ่งเมื่อแก้สมการเมทริกซ์แล้วจะได้คำตอบที่อธิบายสมบัติของระบบได้

ชเรอดิงเงอร์ได้พิสูจน์ว่าแท้จริงแล้ว สมการคลื่นของชเรอดิงเงอร์และสมการเมทริกซ์ของไฮเซนเบิร์กเป็นสมการที่ให้ผลลัพธ์เหมือนกัน แต่แสดงออกมาด้วยวิธีการและรูปแบบที่ต่างกัน ซึ่งรูปแบบของสมการหลักนั้นเหมือนกัน โดยภาพรวมสมการคลื่นของชเรอดิงเงอร์ใช้อธิบายปรากฏการณ์จริงในธรรมชาติที่ให้ผลทางรูปธรรมกว่าและเข้าใจได้ง่ายกว่า แต่มีขีดจำกัดในการใช้สำหรับระบบที่เกี่ยวข้องกับอนุภาคจำนวนมาก ส่วนสมการเมทริกซ์ของไฮเซนเบิร์กนั้นมีความซับซ้อนกว่า แสดงให้เกิดเป็นภาพได้ยากกว่า แต่เหมาะสมกับสำหรับกรณีที่ระบบเกี่ยวข้องประกอบด้วยหน่วยย่อยเป็นจำนวนมาก (สิทธิชัย, 2553)

สมการชเรอดิงเงอร์

สมการชเรอดิงเงอร์แบ่งออกได้เป็น สมการชเรอดิงเงอร์ที่ไม่ขึ้นกับเวลา และสมการชเรอดิงเงอร์ที่ขึ้นกับเวลา

1.1 สมการชเรอดิงเงอร์ที่ไม่ขึ้นกับเวลา

เริ่มต้นโดยพิจารณาสมการคลื่นแบบดั้งเดิมในหนึ่งมิติ

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{1}{\upsilon^2}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \tag{1.1.1}$$

ที่มาของสมการคลื่นแบบดั้งเดิมนี้เกิดจากการนำกฎข้อที่สองของนิวตันมาอธิบายการสั่นของเส้นลวดพจน์ทางฝั่งขวาของสมการ (1.1.1) เป็นปริมาณบอกถึงความเร่งที่ปรากฏในกฎข้อสองของนิวตัน ($F = ma$) และความเร่ง (a) คืออนุพันธ์อันดับสองของตำแหน่งเทียบกับเวลา (พยงค์, 2525; วรนุช, 2547)

ในการหาผลเฉลยของสมการ (1.1.1) จะใช้วิธีแยกตัวแปร ซึ่งเป็นวิธีพื้นฐานที่สำคัญในการหาผลเฉลยของสมการเชิงอนุพันธ์ย่อยเชิงเส้น เริ่มต้นด้วยการสมมุติผลเฉลยให้อยู่ในรูปของผลคูณของฟังก์ชันของตัวแปรต้น (พรชัย, 2550)

พิจารณาเมื่อผลเฉลยของ (1.1.1) เขียนได้เป็นผลคูณของฟังก์ชันของ x กับ t

$$u(x,t) = \psi(x) f(t) \tag{1.1.2}$$

แทนสมการ (1.1.2) ลงในสมการ (1.1.1) จะได้

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left[\psi(x) f(t)\right] = \frac{1}{\upsilon^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\left[\psi(x) f(t)\right]$$

$$\upsilon^2 f(t)\frac{\mathrm{d}^2\psi(x)}{\mathrm{d}x^2} = \psi(x)\frac{\mathrm{d}^2 f(t)}{\mathrm{d}t^2} \tag{1.1.3}$$

หารตลอดทั้งสมการด้วย $\psi(x) f(t)$

$$\frac{\upsilon^2}{\psi(x)}\frac{\mathrm{d}^2\psi(x)}{\mathrm{d}x^2}=\frac{1}{f(t)}\frac{\mathrm{d}^2 f(t)}{\mathrm{d}t^2}$$

จากสมการข้างต้นพบว่าทางฝั่งซ้ายของสมการเป็นฟังก์ชันของ x เท่านั้นและทางฝั่งขวาเป็นฟังก์ชันของ t เท่านั้น การที่ทั้งสองฝั่งมีค่าเท่ากัน ฉะนั้นทั้งสองข้างจึงต้องเป็นค่าคงตัว และจากการคำนวณพบว่าเป็นค่าลบ ซึ่งจะเรียกว่า $-\omega^2$

$$\frac{1}{f(t)}\frac{\mathrm{d}^2 f(t)}{\mathrm{d}t^2}=-\omega^2$$

$$\frac{1}{f(t)}\frac{\mathrm{d}^2 f(t)}{\mathrm{d}t^2}+\omega^2=0$$

สมการข้างต้นนี้เป็นสมการอนุพันธ์สามัญอันดับสอง ซึ่งมีผลเฉลยเป็น

$$f(t)=a\exp(i\omega t)+b\exp(-i\omega t) \tag{1.1.4}$$

แทนสมการ (1.1.4) ไปในสมการ (1.1.3) จะได้

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi(x)}{\mathrm{d}x^2}=-\frac{\omega^2}{\upsilon^2}\psi(x) \tag{1.1.5}$$

สมการข้างต้นเป็นสมการเชิงอนุพันธ์สามัญซึ่งใช้บรรยายคลื่นสสารด้วยฟังก์ชันของตำแหน่ง

จากกลศาสตร์แบบฉบับ พลังงานรวมของอนุภาคจะเท่ากับผลรวมของพลังงานจลน์และพลังงานศักย์

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

สำหรับกรณีที่ไม่คิดผลของสัมพัทธภาพ เมื่อแก้สมการข้างต้น จะสามารถเขียนโมเมนตัมในรูป

$$p=\sqrt{2m[E-V(x)]} \tag{1.1.6}$$

จากนั้นใช้สูตรของเดอบรอยล์เพื่อหาความยาวคลื่นที่ขึ้นกับตำแหน่ง

$$\lambda=\frac{h}{p}=\frac{h}{\sqrt{2m[E-V(x)]}}$$

เมื่อ $\omega=2\pi f$ และ $f\lambda=\upsilon$ สามารถเขียนพจน์ ω^2/υ^2 ในสมการ (1.1.5) ในรูปของ λ ได้ดังนี้

$$\frac{\omega^2}{\upsilon^2}=\frac{4\pi^2 f^2}{\upsilon^2}=\frac{4\pi^2}{\lambda^2}=\frac{2m[E-V(x)]}{\hbar^2}$$

เมื่อแทนผลลัพธ์นี้ลงในสมการ (1.1.5) จะได้สมการชเรอดิงเงอร์ที่ไม่ขึ้นกับเวลา

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi(x)}{\mathrm{d}x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}[E-V(x)]\psi(x)=0$$

สมการข้างต้นสามารถจัดให้อยู่ในรูปแบบมาตรฐาน ดังนี้

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

นอกจากนี้ยังสามารถขยายสมการจากกรณีหนึ่งมิติสำหรับอนุภาคเดี่ยวไปยังกรณีสามมิติโดยใช้เทคนิคในทำนองเดียวกับกรณีหนึ่งมิติ ดังนั้นสมการชเรอดิงเงอร์ที่ไม่ขึ้นกับเวลาในสามมิติ คือ

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

โดยที่ $\nabla^2=\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}$

นอกจากนั้นในพิกัดคาร์ทีเซียน ฟังก์ชันคลื่นสามารถเขียนได้ในรูป $\psi(x,y,z,t)$ ซึ่งอธิบายคุณสมบัติคลื่นของอนุภาค ปริมาณ $|\psi|^2\,\mathrm{d}V$ ใช้บอกความน่าจะเป็นที่จะพบอนุภาคอยู่ในปริมาตร $\mathrm{d}V=\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z$ ที่เวลา t แต่วิธีการนี้ไม่สามารถหาสมการชเรอดิงเงอร์ที่ขึ้นกับเวลาได้ หากปราศจากสมมติฐานเพิ่มเติมอื่น ๆ

1.2 สมการชเรอดิงเงอร์ที่ขึ้นกับเวลา

จากหัวข้อที่ผ่านมาการหาสมการชเรอดิงเงอร์ที่ไม่ขึ้นกับเวลาสำหรับอนุภาคเดี่ยว เริ่มจากสมการคลื่นแบบดั้งเดิมและอาศัยความสัมพันธ์ของเดอบรอยล์ แต่ในกรณีของการหาสมการชเรอดิงเงอร์ที่ขึ้นกับเวลานั้นไม่สามารถใช้วิธีการพื้นฐานอย่างหัวข้อ 1.1 ในการหาได้ สมการชเรอดิงเงอร์ที่ขึ้นกับเวลานั้น จะต้องสอดคล้องกับเงื่อนไขสามข้อ ดังนี้ คือ

$$E=hf,\;\;\lambda=\frac{h}{p},\;\;E=\frac{p^2}{2m}+V$$

พบว่าสมการชเรอดิงเงอร์ที่ขึ้นกับเวลาในสามมิติสำหรับอนุภาคเดี่ยวคือ

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\bar{r},t)}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\bar{r},t)+V(\bar{r})\psi(\bar{r},t) \tag{1.2.1}$$

ซึ่งเป็นไปตามหลักการควอนไทเซชันแบบบัญญัติ (canonical quantization)

สมการชเรอดิงเงอร์ที่ขึ้นกับเวลามีความสำคัญและเป็นประโยชน์อย่างมาก สามารถอธิบายผลการทดลองได้อย่างชัดเจน เช่น อธิบายการกระจายตัวของอิเล็กตรอนในอะตอมของไฮโดรเจน นอกจากนั้นยังอธิบายระยะห่างระหว่างอิเล็กตรอนกับนิวเคลียส ความเร็วในการเคลื่อนที่ เป็นต้น (นรา, 2553; สิทธิชัย, 2552)

ในกรณีที่พลังงานศักย์ V ของระบบ เป็นฟังก์ชันค่าจริง จะพบว่าสามารถใช้สมการที่ขึ้นกับเวลาเพื่อหาสมการที่ไม่ขึ้นกับเวลาได้ ถ้าจัดฟังก์ชันคลื่นให้เป็นผลคูณของพจน์ที่ขึ้นกับตำแหน่งและพจน์ที่ขึ้นกับเวลา

$$\psi(\bar{r},t)=\psi(\bar{r})f(t) \tag{1.2.2}$$

แทนสมการ (1.2.2) ในสมการ (1.2.1) จะได้

$$\psi(\bar{r})i\hbar\frac{\mathrm{d}f(t)}{\mathrm{d}t}=f(t)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\bar{r})\right]\psi(\bar{r})$$

หรือ

$$\frac{i\hbar}{f(t)}\frac{\mathrm{d}f(t)}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\psi(\bar{r})}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\bar{r})\right]\psi(\bar{r})$$

จากสมการข้างต้นพบว่าทางด้านซ้ายของสมการเป็นฟังก์ชันของ t เท่านั้นและทางด้านขวาเป็นฟังก์ชันของ $\bar{r}$ เท่านั้น การที่ทั้งสองด้านมีค่าเท่ากัน แสดงว่าแต่ละด้านของสมการต้องเท่ากับค่าคงตัว B ทำให้ได้สมการเชิงอนุพันธ์สามัญสองสมการ ดังนี้

$$\frac{1}{f(t)}\frac{\mathrm{d}f(t)}{\mathrm{d}t}=-\frac{iB}{\hbar} \tag{1.2.3}$$

และ

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\bar{r})+V(\bar{r})\psi(\bar{r})=B\psi(\bar{r}) \tag{1.2.4}$$

ซึ่งสมการ (1.2.4) คือสมการชเรอดิงเงอร์ที่ไม่ขึ้นกับเวลา และคำตอบของสมการ (1.2.3) คือ

$$f(t)=\exp\left(-\frac{iBt}{\hbar}\right)$$

ซึ่งพบว่าฟังก์ชัน $f(t)$ เป็นฟังก์ชันของคลื่นที่มีความถี่เชิงมุม $\omega=B/\hbar$
เนื่องจาก $\omega=2\pi f$ และ $E=hf$ ดังนั้น

$$B=\hbar\omega=hf=E$$

ฉะนั้น $B=E$ และเนื่องจาก E คือพลังงานรวมของอนุภาค จึงได้ว่า B เป็นจำนวนจริง
เมื่อแทน $f(t)$ ลงในสมการ (1.2.2) จะได้

$$\psi(\bar{r},t)=\psi(\bar{r})\exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) \tag{1.2.5}$$

ความน่าจะเป็นในการพบอิเล็กตรอนสามารถคำนวณได้โดยใช้ฟังก์ชันคลื่น $\psi(\bar{r},t)$ ค่าของฟังก์ชันคลื่นเองนั้นไม่มีนัยสำคัญเพราะสามารถเป็นจำนวนเชิงซ้อนได้ ปริมาณที่มีความหมายในทางกายภาพนั้นจะต้องเป็นจำนวนจริง เนื่องจาก $|\psi(\bar{r},t)|^2$ เป็นจำนวนจริงเสมอ ดังนั้น $|\psi(\bar{r},t)|^2$ มีความหมายในทางกายภาพด้วย ซึ่งปริมาณ $|\psi(\bar{r},t)|^2$ ระบุถึงความน่าจะเป็นที่จะพบอนุภาคต่อหนึ่งหน่วยปริมาตรที่เวลาใดๆ นอกจากนั้นสามารถแสดงว่า ปริมาณ $|\psi(\bar{r},t)|^2$ ไม่ขึ้นกับเวลา ดังนี้

$$|\psi(\bar{r},t)|^2 = \psi^*(\bar{r},t)\psi(\bar{r},t) = \exp\left(\frac{iEt}{\hbar}\right)\psi^*(\bar{r})\exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right)\psi(\bar{r}) = \psi^*(\bar{r})\psi(\bar{r})$$

ในทางกลศาสตร์ควอนตัม จะไม่สามารถระบุตำแหน่งของอนุภาคได้อย่างแม่นยำ เพียงแต่ระบุถึงความน่าจะเป็นในการพบอนุภาค ดังนั้นจึงนิยมที่จะหาค่าเฉลี่ยของจุดพิกัดของอนุภาคแทน นอกจากค่าเฉลี่ยของตำแหน่งแล้ว ยังสามารถหาค่าเฉลี่ยของปริมาณอื่น ๆ ได้ด้วย เช่น โมเมนตัม พลังงานรวมของอนุภาค เป็นต้น

ในการหาค่าเฉลี่ยของโมเมนตัมจะไม่สามารถหาได้อย่างตรงไปตรงมา เนื่องจากหลักความไม่แน่นอนของไฮเซนเบิร์ก ซึ่งกล่าวไว้ว่า ไม่สามารถหาตำแหน่งและโมเมนตัมพร้อม ๆ กันได้ ดังนั้นการหาค่าเฉลี่ยของโมเมนตัมจึงจำเป็นต้องใช้วิธีอื่นแทน เช่น เทคนิคของตัวดำเนินการ

การหาคำตอบของสมการชเรอดิงเงอร์ที่ขึ้นกับเวลาจำเป็นต้องทราบฟังก์ชันของพลังงานศักย์ $V(\bar{r},t)$ ซึ่งคำตอบนั้นจะมีลักษณะออกมาต่างๆกัน ขึ้นอยู่กับชนิดของพลังงานศักย์

ในหัวข้อถัดไปจะแสดงวิธีแก้สมการชเรอดิงเงอร์ เพื่อหาคำตอบ $\psi(x,t)$ โดยกล่าวถึงหนึ่งในวิธีที่สำคัญและน่าสนใจคือ วิธีการประมาณแบบดับเบิลยูเคบี ซึ่งเป็นวิธีการประมาณค่าที่เหมาะกับปัญหาการแผ่กระจายของคลื่นที่มีความถี่สูงมากหรือความยาวคลื่นสั้นมาก

1.3 วิธีการประมาณแบบดับเบิลยูเคบี (WKB Approximations)

วิธีการประมาณแบบดับเบิลยูเคบี (Wentzel-Kramers-Brillouin) หรือเรียกอีกอย่างหนึ่งว่า การประมาณแบบดับเบิลยูเคบีเจ (Wentzel-Kramers-Brillouin-Jeffreys) มีแนวคิดพื้นฐานคือ สามารถประมาณฟังก์ชันคลื่นชเรอดิงเงอร์ได้ด้วยฟังก์ชันซายน์ การประมาณแบบดับเบิลยูเคบีได้นำมาใช้อธิบายคลื่นในทางทัศนศาสตร์ สวนศาสตร์ และอุทกพลศาสตร์มาก่อน และหลังจากปี 1925 ได้มีการนำการประมาณแบบดับเบิลยูเคบีมาใช้กับฟังก์ชันคลื่นชเรอดิงเงอร์ (Boonserm, 2009)

การประมาณแบบดับเบิลยูเคบีเหมาะกับระบบที่พลังงานศักย์มีค่าเกือบจะคงที่ เป็นวิธีการที่สำคัญในการหาคำตอบแบบประมาณ เช่น ปัญหาการแผ่กระจายของคลื่นที่มีความถี่สูงมากหรือความยาวคลื่นสั้นมาก (เมื่อเปรียบเทียบกับระยะทางที่ศักย์มีการเปลี่ยนแปลง) ถึงแม้ว่า คำตอบโดยวิธีการนี้เป็นคำตอบแบบประมาณ แต่ในบางกรณีมีความถูกต้องและแม่นยำมาก เริ่มต้นด้วยสมการชเรอดิงเงอร์ที่ไม่ขึ้นกับเวลาหนึ่งมิติ

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \tag{1.3.1}$$

สามารถจัดสมการใหม่ได้เป็น

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x) = \frac{2m}{\hbar^2}[V(x) - E]\psi(x) \tag{1.3.2}$$

โดยที่ $\psi(x)$ คือฟังก์ชันคลื่นชเรอดิงเงอร์ E คือพลังงานรวม และ V คือพลังงานศักย์ ซึ่งสามารถเขียนฟังก์ชันคลื่นในรูปของฟังก์ชันเอกซ์โพเนนเชียลดังนี้

$$\psi(x) = A(x)\exp\left[\frac{iS(x)}{\hbar}\right] \tag{1.3.3}$$

จากนั้นสามารถหาอนุพันธ์อันดับสองของ $\psi(x)$ ได้ดังนี้

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi(x)}{\mathrm{d}x^2} = \left[-A(x)\frac{S'(x)^2}{\hbar^2} + A(x)\frac{iS''(x)}{\hbar} + 2A'(x)\frac{iS'(x)}{\hbar} + A''(x)\right]\exp\left[\frac{iS(x)}{\hbar}\right]$$

แทนค่า $\psi(x)$ และ $\mathrm{d}^2\psi(x)/\mathrm{d}x^2$ ลงไปในสมการ (1.3.2) จะได้

$$\begin{aligned}\left[-A(x)\frac{S'(x)^2}{\hbar^2} + A(x)\frac{iS''(x)}{\hbar} + 2A'(x)\frac{iS'(x)}{\hbar} + A''(x)\right]\exp\left[\frac{iS(x)}{\hbar}\right] \\ = \frac{2m}{\hbar^2}(V(x) - E)A(x)\exp\left[\frac{iS(x)}{\hbar}\right]\end{aligned} \tag{1.3.4}$$

โดยการพิจารณาส่วนจริงของสมการ (1.3.4) จะได้ว่า

$$S'(x)^2 = 2m(E - V(x)) + \hbar^2\frac{A''(x)}{A(x)} \tag{1.3.5}$$

ส่วนจินตภาพของสมการ (1.3.4) คือ

$$-S''(x) = 2S'(x)\frac{A'(x)}{A(x)}$$

$$(A^2(x)S'(x))' = 0 \tag{1.3.6}$$

จะพบว่า

$$A(x) = \frac{C}{\sqrt{S'(x)}} \tag{1.3.7}$$

โดยที่ C เป็นค่าคงตัว

เมื่อทำการประมาณให้

$$\frac{A''(x)}{A(x)} \ll \frac{(S'(x))^2}{\hbar^2} \quad \text{และ} \quad \frac{A''(x)}{A(x)} \ll \frac{p^2}{\hbar^2} \tag{1.3.8}$$

ในสมการ (1.3.5) จะได้

$$S'(x)^2 = 2m[E - V(x)]$$

การประมาณที่ปรากฏในสมการ (1.3.8) เป็นการประมาณที่ทำให้สมการ (1.3.5) ลดรูปมาสู่สมการแฮมินตัน-จาโคบี ซึ่งเป็นสมการการเคลื่อนที่ในกลศาสตร์คลาสสิก

จากสมการ (1.1.6) จะเห็นว่า $p(x) = \sqrt{2m\left[E - V(x)\right]}$ ดังนั้น

$$S'(x)^2 = p(x)^2$$

ฉะนั้น

$$S(x) = \pm\int p(x)\,\mathrm{d}x \tag{1.3.9}$$

แทนสมการ (1.3.7) และ (1.3.9) ลงไปในสมการ (1.3.3) จะได้

$$\psi(x) = \frac{C_+}{\sqrt{p(x)}}\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int p(x)\mathrm{d}x\right] + \frac{C_-}{\sqrt{p(x)}}\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int p(x)\mathrm{d}x\right]$$

โดยนิยาม

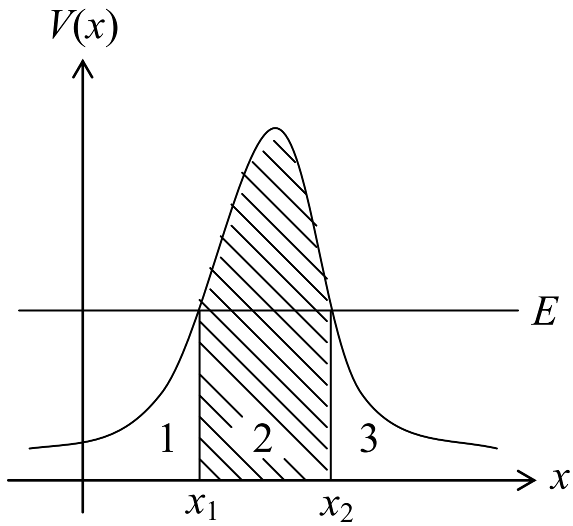
$$k^2(x) = \frac{2m[E - V(x)]}{\hbar^2} = \frac{p^2(x)}{\hbar^2}$$

เมื่อทำการประมาณแบบดับเบิลยูเคบี จะได้

$$\psi(x) \approx A\frac{\exp\left[i\int k(x)\mathrm{d}x\right]}{\sqrt{k(x)}} + B\frac{\exp\left[-i\int k(x)\mathrm{d}x\right]}{\sqrt{k(x)}}$$

วิธีการประมาณแบบดับเบิลยูเคบีในปัญหาปรากฏการณ์ขุดอุโมงค์ (tunneling phenomena)

เริ่มต้นจากพิจารณาพลังงานศักย์ V ดังรูปที่ 1.1 ซึ่งในบริเวณที่ 2 พบว่าค่าพลังงานศักย์มากกว่าค่าพลังงานรวมของอนุภาค $(V > E)$ ดังนั้นในทางกลศาสตร์แบบดั้งเดิม อนุภาคจะไม่สามารถอยู่ในบริเวณที่ 2 ได้ แต่ในทางกลศาสตร์ควอนตัมอนุภาคสามารถทะลุผ่านจากบริเวณที่ 1 มายังบริเวณที่ 2 และ 3 ได้ ปรากฏการณ์นี้เรียกว่า ปรากฏการณ์ขุดอุโมงค์ (tunneling phenomena)



รูปที่ 1.1 ค่าพลังงานศักย์ V ในบริเวณที่ 1, 2 และ 3

โดยวิธีการประมาณแบบดับเบิลยูเคบีพบว่า ฟังก์ชันคลื่นในแต่ละบริเวณมีค่าดังต่อไปนี้

$$\psi_1(x) = A\frac{\exp\left[i\int k(x)\,\mathrm{d}x\right]}{\sqrt{k(x)}} + B\frac{\exp\left[-i\int k(x)\,\mathrm{d}x\right]}{\sqrt{k(x)}}$$

$$\psi_2(x) = C\frac{\exp\left[\int |k(x)|\,\mathrm{d}x\right]}{\sqrt{|k(x)|}} + D\frac{\exp\left[-\int |k(x)|\,\mathrm{d}x\right]}{\sqrt{|k(x)|}}$$

$$\psi_3(x) = E\frac{\exp\left[i\int k(x)\,\mathrm{d}x\right]}{\sqrt{k(x)}}$$

เมื่อ $\psi_1(x)$, $\psi_2(x)$ และ $\psi_3(x)$ คือฟังก์ชันคลื่นในบริเวณที่ 1, 2 และ 3 ตามลำดับ

ความน่าจะเป็นที่จะพบอนุภาคบริเวณที่ 3 โดยสนใจว่าอนุภาคสามารถทะลุผ่านมาบริเวณที่ 3 ได้มากน้อยเพียงใด จะมีค่าดังต่อไปนี้

$$T = \frac{|E|^2}{|A|^2} = \exp\left[-2\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{V(x)-E}\,\mathrm{d}x\right]$$

เมื่อ T คือสัมประสิทธิ์ของการส่งผ่าน ซึ่งเป็นปริมาณที่บอกถึงความน่าจะเป็นที่อนุภาคจะทะลุผ่านออกมายังบริเวณที่ 3 (Ngampitipan and Boonserm, 2012)

บทสรุป

ในบทความนี้ได้ใช้วิธีการทางคณิตศาสตร์อธิบายสมการชเรอดิงเงอร์ซึ่งเป็นสมการเชิงอนุพันธ์ย่อยที่ใช้ในการพัฒนาทฤษฎีควอนตัมสมัยใหม่ สมการชเรอดิงเงอร์ถูกค้นพบโดย เออร์วิน ชเรอดิงเงอร์ ในปี 1925 ซึ่งบรรยายระบบทางกลศาสตร์ควอนตัมที่ขึ้นกับตำแหน่งและเวลา นอกจากนั้น ได้แสดงวิธีการประมาณแบบดับเบิลยูเคบีมาประยุกต์กับฟังก์ชันคลื่นชเรอดิงเงอร์ ถึงแม้ดับเบิลยูเคบีจะเป็นเทคนิคการประมาณค่า แต่เป็นการประมาณค่าที่ให้ความแม่นยำสูงใกล้เคียงกับผลเฉลยแม่นตรง และเหมาะสมในกรณีของปัญหาการแผ่กระจายของคลื่นที่มีความถี่สูงมากหรือความยาวคลื่นสั้นมากรวมถึงปัญหาขุดอุโมงค์ด้วย

เอกสารอ้างอิง

นรา จิรภัทรมล. (2553). กลศาสตร์ควอนตัม. พิมพ์ครั้งที่ 1. กรุงเทพฯ: สำนักพิมพ์แห่งจุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย.หน้า 19-31

พยงค์ ตันศิริ. (2525). คลื่นและฟิสิกส์ควอนตัมเบื้องต้น. กรุงเทพฯ: ภาควิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย. หน้า 231-241

พรชัย สาตรวาหา. (2550). สมการเชิงอนุพันธ์. พิมพ์ครั้งที่ 3. กรุงเทพฯ: พิทักษ์การพิมพ์. หน้า 11-1–11-8

วรนุช ทองพูล. (2547). ฟิสิกส์ 2. มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีราชมงคลธัญบุรี, แหล่งข้อมูล: http://www.rmutphysics.com /charud/scibook/wachara/Physics2ForEn_2_47.textbook/C08.PDF. ค้นเมื่อวันที่ 20 กันยายน 2555.

สิทธิชัย โภไคยอุดม. (2552). กลศาสตร์ควอนตัมพื้นฐาน. พิมพ์ครั้งที่ 1. กรุงเทพฯ. มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีมหานคร. หน้า 5-18-5-23

Boonserm, P. (2009). Rigorous Bounds on Transmission, Reflection, and Bogoliubov Coefficients, Ph. D. Thesis, Victoria University of Wellington [arXiv:0907.0045 [math-ph]]. 347 pages.

Ngampitipan, T. and Boonserm, P. (2012), Reflection and Transmission Resonances and Accuracy of the WKB Method, In: Proceedings of 2nd Regional Conference on Applied and Engineering Mathematics, Universiti Malaysia Perlis 30-31 May (2012). 116-123.