10th ANNIVERSARY OF NARESUAN UNIVERSITY PUBLISHING HOUSE

กลศาสตร์ควอนตัม

ฉบับปรับปรุง

ทีปานิส ชาชิโย

สำนักพิมพ์มหาวิทยาลัยนเรศวร
Naresuan University Publishing House
www.nupress.grad.nu.ac.th

ข้อมูลทางบรรณานุกรมของสำนักหอสมุดแห่งชาติ
National Library of Thailand Cataloging in Publication Data

ทีปานิส ชาชิโย.

กลศาสตร์ควอนตัม (ฉบับปรับปรุง) = Quantum Mechanics.--พิษณุโลก : สำนักพิมพ์มหาวิทยาลัยนเรศวร, 2564.
526 หน้า.
1. ทฤษฎีควอนตัม. I. ชื่อเรื่อง.

530.12
ISBN 978-616-426-237-9
ISBN (e-book) 978-616-426-236-2
สพน. 98
ราคา **680** บาท
พิมพ์ครั้งที่ 1 ตุลาคม พ.ศ. 2564

สงวนลิขสิทธิ์ ตามพระราชบัญญัติลิขสิทธิ์ พ.ศ. 2537 โดยสำนักพิมพ์มหาวิทยาลัยนเรศวร ห้ามการลอกเลียนไม่ว่าส่วนใดส่วนหนึ่งของหนังสือเล่มนี้ ไม่ว่าในรูปแบบใด ๆ นอกจากจะได้รับอนุญาตเป็นลายลักษณ์อักษรจากสำนักพิมพ์มหาวิทยาลัยนเรศวร เท่านั้น

จัดพิมพ์โดย สำนักพิมพ์มหาวิทยาลัยนเรศวร

มีวางจำหน่ายที่ **1. ศูนย์หนังสือแห่งจุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย**
สาขา ศาลาพระเกี้ยว กรุงเทพฯ โทร. 0 2218 7000-3
สยามสแควร์ อาคารวิทยกิตติ์ กรุงเทพฯ โทร. 0 2218 9881, 0 2255 4433
มหาวิทยาลัยนเรศวร จังหวัดพิษณุโลก โทร. 0 5526 0162-5
มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีสุรนารี จังหวัดนครราชสีมา โทร. 0 4421 6131-2
มหาวิทยาลัยบูรพา จังหวัดชลบุรี โทร. 0 3839 4855-9
โรงเรียนนายร้อยพระจุลจอมเกล้า (รร.จปร.) จังหวัดนครนายก โทร. 0 3739 3023, 0 3739 3036
จัตุรัสจามจุรี กรุงเทพฯ โทร. 0 2160 5301
มหาวิทยาลัยพะเยา โทร. 0 5446 6799, 0 5446 6800
มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีราชมงคลอีสาน โทร. 0 4492 2662-3
สาขาย่อยคณะครุศาสตร์จุฬาฯ โทร. 0 2218 3979
สาขาหัวหมาก โทร. 0 2374 1378
2. ศูนย์หนังสือมหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ อาคารวิทยบริการ มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ 50 ถนนงามวงศ์วาน แขวงลาดยาว เขตจตุจักร กรุงเทพฯ 10900 โทร. 0 2579 0113
3. ศูนย์หนังสือมหาวิทยาลัยธรรมศาสตร์ อาคารอเนกประสงค์ ชั้น 1 มหาวิทยาลัยธรรมศาสตร์ ถนนพระจันทร์ แขวงพระบรมมหาราชวัง เขตพระนคร กรุงเทพฯ 10200 โทร. 0 2613 3899, 0 2623 6493
สาขา ศูนย์หนังสือมหาวิทยาลัยเชียงใหม่ จังหวัดเชียงใหม่ โทร. 0 5394 4990-1
ศูนย์หนังสือมหาวิทยาลัยสงขลานครินทร์ จังหวัดสงขลา โทร. 0 7428 2980, 0 7428 2981
ศูนย์หนังสือมหาวิทยาลัยราชภัฏยะลา จังหวัดยะลา โทร. 0 7329 9980
4. สำนักพิมพ์มหาวิทยาลัยนเรศวร บัณฑิตวิทยาลัย มหาวิทยาลัยนเรศวร อาคารมหาธรรมราชา จังหวัดพิษณุโลก 65000 โทร. 0 5596 8833 ถึง 8836

กองบรรณาธิการ กองบรรณาธิการจัดทำเอกสารสิ่งพิมพ์ทางวิชาการของสำนักพิมพ์มหาวิทยาลัยนเรศวร
ออกแบบปก สรญา แสงเย็นพันธ์
ออกแบบรูปเล่ม สรญา แสงเย็นพันธ์
พิมพ์ที่ ห้างหุ้นส่วนจำกัด พี.ดีจิตอล จำกัด 194/15 ถนนพญาลิไท ตำบลในเมือง อำเภอเมือง จังหวัดพิษณุโลก

pubat
สำนักพิมพ์นี้เป็นสมาชิกสมาคมผู้จัดพิมพ์และผู้จำหน่ายหนังสือแห่งประเทศไทย
http://www.thaibooksociety.com

Green Read
พิมพ์บน
กระดาษคุณภาพ เพื่อผลงานคุณภาพ
กระดาษถนอมสายตากรีนรีด

กรณีต้องการสั่งซื้อหนังสือปริมาณมาก หรือเข้าชั้นเรียนติดต่อได้ที่
ฝ่ายจัดจำหน่ายสำนักพิมพ์มหาวิทยาลัยนเรศวร

nuph@nu.ac.th สำนักพิมพ์มหาวิทยาลัยนเรศวร
0 5596 8833-8836 nu_publishing

คำนำ

หนังสือเล่มนี้ มาพร้อมกับการบรรยายออนไลน์และเฉลยการบ้านที่ผู้อ่านสามารถดาวน์โหลดได้ฟรี เรียบเรียงจากประสบการณ์การสอนวิชาควอนตัมระดับปริญญาโทและเอกกว่า 10 ปี ทำให้มีเนื้อหาความครบถ้วน และนำเสนอในมุมที่ลึกซึ้งหลากหลาย มีการบุกเบิกทางวิชาการ สร้างองค์ความรู้ใหม่ที่ทันสมัยจากงานวิจัยของผู้แต่งที่สำคัญ ๆ ในสาขาวิชา ยกตัวอย่างเช่น บทที่ 10 Density Functional Theory หรือบทที่ 11 สมการชาชิโย เป็นประโยชน์ในการต่อยอด และส่งผลกระทบทางวิชาการในวงกว้าง เป็นที่ยอมรับทั้งในและต่างประเทศ

ในแง่ของเนื้อหาและลักษณะของการเรียบเรียงนั้น เน้นหนักในการอธิบายความและยกตัวอย่างที่หลากหลาย โดยมีความสมบูรณ์และความเข้มของเนื้อหา อยู่ในระดับเดียวกับตำรามาตรฐาน เช่น “The Feynman Lectures on Physics” (Feynman), “A Modern Approach to Quantum Mechanics” (Townsend), และ “Modern Quantum Mechanics” (Sakurai) แต่มีลักษณะการอธิบายความที่เรียบเรียงให้เข้าใจง่ายขึ้น และตัวอย่างที่หลากหลายมากขึ้น

หนังสือเล่มนี้ยังเหมาะกับครู นิสิต และอาจารย์ ผู้ผ่านวิชากลศาสตร์ควอนตัมพื้นฐานมาแล้ว และต้องการศึกษาให้ลึกจนสามารถผนวกเอาคณิตศาสตร์มาเป็นเครื่องมือในการทำความเข้าใจทฤษฎี ทำงานวิจัย หรือประกอบการเรียนการสอนให้เข้มข้นมากยิ่งขึ้น

ในท้ายที่สุดนี้ ข้าพเจ้าต้องขอขอบคุณผู้เกี่ยวข้องทุกท่าน ที่ช่วยให้การเรียบเรียงเอกสารเป็นไปอย่างราบรื่น โดยเฉพาะอย่างยิ่ง คุณกีรติ มณีสาย และคุณอดินันท์ เจ๊ะซู ซึ่งอำนวยความสะดวกเป็นผู้ช่วยสอน และยังเป็นผู้ตรวจการบ้านประจำวิชา Quantum Mechanics I อีกด้วย

ทีปานิส ชาชิโย

ภาควิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยนเรศวร

แด่ทุกผู้คน ในชีวิตของข้าพเจ้า

Lecture Video & Homework Solution

https://sites.google.com/view/siamphysics/quantum-mechanics

Email

teepanisc@nu.ac.th

Facebook

https://www.facebook.com/teepanis.chachiyo

Youtube

https://www.youtube.com/user/teepanis

สารบัญ

1 ตัวแปรพื้นฐานของกลศาสตร์ควอนตัม 1

1.1 ธรรมชาติของอะตอม 2

1.2 สถานะของระบบ 3

1.3 Probability Amplitude 4

1.4 Probability และ Probability Amplitude 7

1.5 ตัวอย่าง : อิเล็กตรอนภายในกล่อง 8

1.6 ตัวอย่าง : การทดลอง Stern-Gerlach 13

1.7 วิเคราะห์เชิงลึก การทดลอง Stern-Gerlach 16

1.8 คณิตศาสตร์ของ Bra และ Ket 23

1.9 บทสรุป 29

1.10 ปัญหาท้ายบท 30

2 Operator และ Matrix Mechanics 31

2.1 Operator 32

2.2 Basis State 37

2.3 Matrix Mechanics 45

2.4 Expectation Value และ Uncertainty 67

2.5 Rotation Operator 77

2.6 บทสรุป 85

2.7 ปัญหาท้ายบท 87

3 Angular Momentum 89

3.1 Orbital และ Spin Angular Momentum 91

3.2 Commutation 92

3.3 $\left[\hat{J}_x, \hat{J}_y\right] = i\hbar\hat{J}_z$ 94

3.4 Commuting Operator 101

3.5 Eigenvalue ของ Angular Momentum 102

3.6 สมบัติของ Operator 104

3.7 Raising และ Lowering Operator 108

3.8 $m\hbar$ และ $\lambda\hbar^2$ 112

3.9 $\hat{J}_+\left|j,m\right\rangle$ และ $\hat{J}_-\left|j,m\right\rangle$ 117

3.10 บทสรุป 119

3.11 ปัญหาท้ายบท 122

4 Time Evolution 125

4.1 Time Evolution Operator 126

4.2 Precession ของ Spin $\frac{1}{2}$ Particle ในสนามแม่เหล็ก 131

4.3 การหมุน 360 องศาของนิวตรอน 137

4.4 Magnetic Resonance 139

4.5 Ammonia Maser 145

4.6 บทสรุป 156

4.7 ปัญหาท้ายบท 158

5 Interaction ของ Spin 159

5.1 Hyperfine Splitting 160

5.2 Two Spin $\frac{1}{2}$ Particles 167

5.3 EPR Paradox 173

5.4 การรวมกันของ Angular Momentum 177

5.5 บทสรุป 187

5.6 ปัญหาท้ายบท 189

6 Wave Mechanics in One Dimension 191

6.1 Wave Function และ Position Eigenstate 192

6.2 Generator of Translation 197

6.3 Momentum Operator 203

6.4 Free Particle และ Gaussian Wave Packet 208

6.5 Heisenberg Uncertainty Principle 218

6.6 Schrödinger Equation 222

6.7 Square Well Potential 229

6.8 Scattering in One Dimension 235

6.9 Ehrenfest Theorem 243

6.10 บทสรุป 246

6.11 ปัญหาท้ายบท 249

7 Harmonic Oscillator 251

7.1 บทนำ 252

7.2 Eigen Energy 255

7.3 Eigenstate ใน Position Space 264

7.4 Quantum Model Versus Classical Model 269

7.5 Application - Einstein's Model of Specific Heat 280

7.6 บทสรุป 287

7.7 ปัญหาท้ายบท 289

8 Central Potential 291

8.1 บทนำ 292

8.2 Orbital Angular Momentum Operator 297

8.3 เซตของ Commuting Observable 309

8.4 Position Space ในพิกัดทรงกลม 314

8.5 Eigen State ของ Hamiltonian 320

8.6 Application - Nuclear Magic Number 325

8.7 Eigen State ของ $\hat{L}_z$ และ $\hat{L}^2$ 334

8.8 Application - Coulomb Potential 344

8.9 บทสรุป 358

8.10 ปัญหาท้ายบท 363

9 Time Independent Perturbation 367

9.1 บทนำ 368

9.2 Non-Degenerate Perturbation Theory 372

9.3 Application 381

9.4 Degenerate Perturbation Theory 389

9.5 Application - Relativistic Correction 397

9.6 Application - Zeeman Effect 416

9.7 บทสรุป 420

9.8 ปัญหาท้ายบท 422

10 Density Functional Theory 425

10.1 บทนำ 426

10.2 Energy Minimization 443

10.3 Exchange-Correlation 461

10.4 บทสรุป 490

10.5 ปัญหาท้ายบท 491

11 สมการชาชิโย 493

11.1 พลังงาน Correlation กรณีพิเศษ 494

11.2 พลังงาน Correlation กรณีทั่วไป 498

11.3 พลังงาน Exchange 500

11.4 บทสรุป 503

11.5 ปัญหาท้ายบท 503

บรรณานุกรม 505

ดัชนี 510

1

ตัวแปรพื้นฐานของกลศาสตร์ควอนตัม

1.1 ธรรมชาติของอะตอม

1.2 สถานะของระบบ

1.3 Probability Amplitude

1.4 Probability และ Probability Amplitude

1.5 ตัวอย่าง : อิเล็กตรอนภายในกล่อง

1.6 ตัวอย่าง : การทดลอง Stern-Gerlach

1.7 วิเคราะห์เชิงลึก การทดลอง Stern-Gerlach

1.8 คณิตศาสตร์ของ Bra และ Ket

1.9 บทสรุป

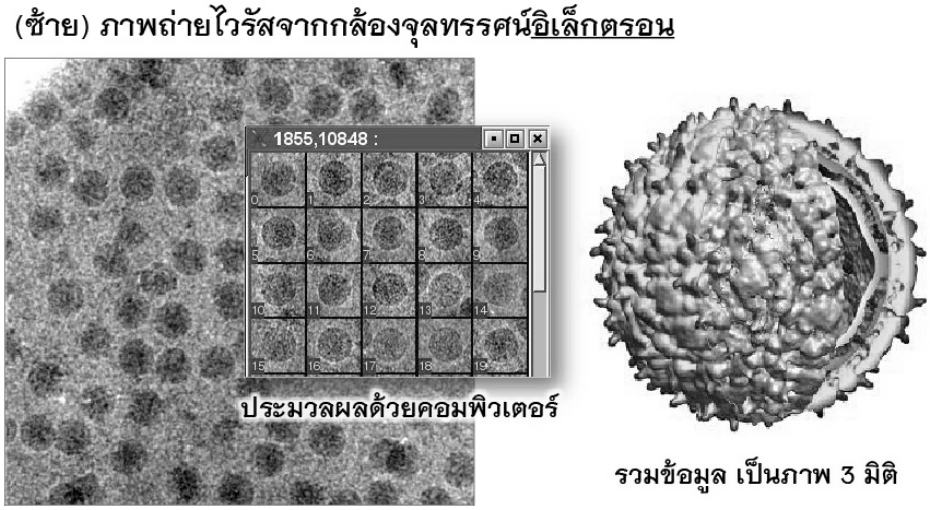
1.10 ปัญหาท้ายบท

1.1 ธรรมชาติของอะตอม

Quantum Mechanics หรือ กลศาสตร์ควอนตัม เป็นทฤษฎีทางฟิสิกส์เพื่ออธิบายพฤติกรรมของสสารที่มีขนาดเล็กในระดับอะตอม สิ่งที่มีขนาดเล็กเช่นนี้ มีคุณสมบัติและพฤติกรรมที่แตกต่างจากสิ่งที่เราพบเห็นในชีวิตประจำวันอย่างสิ้นเชิง วัตถุขนาดจิ๋วดังกล่าว จะมีสมบัติเป็น “อนุภาค” ก็ไม่ใช่ จะเป็น “คลื่น” ก็ไม่เชิง

อิเล็กตรอนที่เราเคยคิดว่าเป็น “อนุภาค” เพราะเมื่อมีอิเล็กตรอน เพียง 1 อนุภาค จะปรากฏเป็นจุด 1 จุดบนแผ่นฟิล์ม แต่เมื่อมีอิเล็กตรอนอยู่เป็นจำนวนมาก มันกลับมีสมบัติเป็น “คลื่น” คือ มีการแทรกสอด การหักเห และปรากฏบนแผ่นฟิล์มราวกับว่าเป็นคลื่นชนิดหนึ่ง

โดยทั่วไปคลื่นแสง มีการเลี้ยวเบนผ่านเลนส์ จึงสามารถประยุกต์ใช้เป็นกล้องจุลทรรศน์ สมบัติความเป็นคลื่นของอิเล็กตรอนก็เช่นเดียวกัน เราสามารถนำมาสร้างเป็นกล้องจุลทรรศน์ที่มีกำลังขยายสูงมาก เรียกว่า “กล้องจุลทรรศน์อิเล็กตรอน”



ภาพ 1.1 ภาพถ่ายจากกล้องจุลทรรศน์อิเล็กตรอน ที่อาศัยสมบัติคล้ายคลื่นของอิเล็กตรอนเลี้ยวเบนผ่านเลนส์ชนิดพิเศษ ทำให้มีกำลังขยายสูงกว่ากล้องธรรมดาที่ใช้คลื่นแสง (ภาพจากงานวิจัยของผู้เขียน)

ธรรมชาติของสิ่งที่มีขนาดเล็กในระดับอะตอม ที่มีสมบัติเป็นทั้งคลื่นและอนุภาคในขณะเดียวกันนี้เอง ได้สร้างความสงสัยให้กับนักฟิสิกส์ในยุคนั้น เป็นอย่างมาก

2

Operator และ Matrix Mechanics

2.1 Operator

2.2 Basis State

2.3 Matrix Mechanics

2.4 Expectation Value และ Uncertainty

2.5 Rotation Operator

2.6 บทสรุป

2.7 ปัญหาท้ายบท

ฟิสิกส์คงจะเป็นเรื่องที่น่าเบื่อ ถ้าสถานะของระบบที่เราต้องการศึกษานั้นหยุดนิ่งอยู่กับที่ และไม่มีการเปลี่ยนแปลงใด ๆ เลย หากแต่ในความเป็นจริงแล้วกลศาสตร์ควอนตัมเต็มไปด้วยการเปลี่ยนแปลงจากสถานะหนึ่งไปยังอีกสถานะหนึ่งอย่างไม่หยุดนิ่ง

ในบทที่ 1 ที่ได้กล่าวไปแล้วนั้น ก็เพื่อให้นักศึกษาสามารถที่จะอธิบายสถานะของระบบโดยใช้ระเบียบวิธีของกลศาสตร์ควอนตัม หากแต่การที่เราสามารถอธิบายว่าระบบอยู่ในลักษณะอย่างไรนั้น ไม่เพียงพอในการศึกษาฟิสิกส์ มีความจำเป็นที่จะต้องมีระเบียบแบบแผน ที่สามารถควบคุมหรือเปลี่ยนแปลงสถานะของระบบนั้น ๆ ได้ด้วย ในบทที่ 2 นี้ เราจะมาเริ่มศึกษา<u>กลไกหรือกระบวนการที่ทำให้เกิดการเปลี่ยนแปลงจากสถานะเริ่มต้น ไปเป็นสถานะผลลัพธ์</u> หรือที่เรียกว่า Operator นั่นเอง

2.1 Operator

เมื่อครั้งศึกษากลศาสตร์ควอนตัมเบื้องต้น นักศึกษารู้จักกับคำว่า Operator ด้วยความเข้าใจที่ว่ามันมีความเชื่อมโยงกับกระบวนการวัดหรือการทดลองในทางฟิสิกส์ ยกตัวอย่างเช่น เราแทนกระบวนการวัดโมเมนตัมของระบบด้วยสิ่งที่เรียกว่า Momentum Operator หรือแทนกระบวนการวัดพลังงานจลน์ของระบบด้วยสิ่งที่เรียกว่า Kinetic Energy Operator ซึ่ง Operator ต่าง ๆ เหล่านี้ ก็จะมีรูปแบบทางคณิตศาสตร์ที่แตกต่างกันออกไป

ถึงแม้ว่าคำนิยามของ Operator ดังที่กล่าวไว้ข้างต้น เป็นคำนิยามที่ถูกต้อง แต่มีความหมายที่แคบจนเกินไปและมีข้อจำกัดอยู่หลายประการ ดังนั้นในหัวข้อ 2.1 นี้ เราจะมาเริ่มทำความรู้จักกับ Operator ของกลศาสตร์ควอนตัมในความหมายที่กว้างมากขึ้น และในหัวข้อ 2.3 เราจึงจะตีกรอบของ Operator ให้แคบลงซึ่งมีความหมายเฉพาะเจาะจงเกี่ยวกับกระบวนการวัด หรือ Measurement ในทางฟิสิกส์

Operator คือ กลไกหรือกระบวนการที่ทำให้เกิดการเปลี่ยนแปลงจากสถานะเริ่มต้นไปเป็นสถานะผลลัพธ์

สมมุติว่าเราเตรียมอนุภาคหรืออิเล็กตรอนให้สปินของมัน ชี้ไปในทิศทางที่แทนด้วยสถานะ $|+X\rangle$ จากนั้น ไม่ว่าด้วยเหตุผลอะไรก็ตามแต่ เราต้องการที่เปลี่ยนสถานะของอิเล็กตรอน ให้กลายเป็น $|+Y\rangle$ ดังในภาพ 2.1

3 Angular Momentum

3.1 Orbital และ Spin Angular Momentum

3.2 Commutation

3.3 $\left[\hat{J}_x, \hat{J}_y\right] = i\hbar\hat{J}_z$

3.4 Commuting Operator

3.5 Eigenvalue ของ Angular Momentum

3.6 สมบัติของ Operator

3.7 Raising และ Lowering Operator

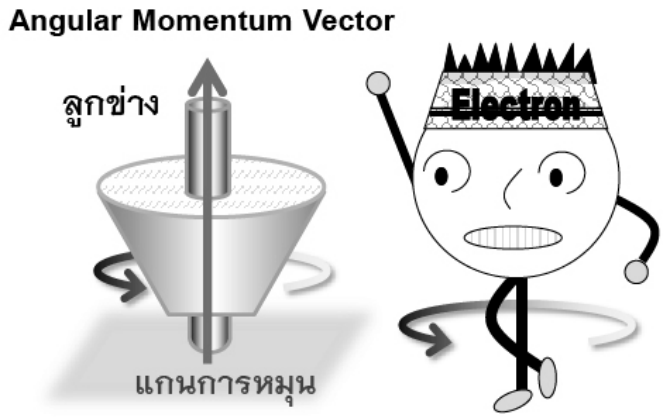
3.8 $m\hbar$ และ $\lambda\hbar^2$

3.9 $\hat{J}_+|j,m\rangle$ และ $\hat{J}_-|j,m\rangle$

3.10 บทสรุป

3.11 ปัญหาท้ายบท

ลักษณะการเคลื่อนที่ ที่สำคัญอันหนึ่งในทางฟิสิกส์ ก็คือการหมุน ปริมาณทางฟิสิกส์ที่เราใช้ในการอธิบายพฤติกรรมของอนุภาคที่เกี่ยวข้องกับการหมุนนั้น เรียกว่า Angular Momentum



ภาพ 3.1 Angular Momentum เป็นปริมาณทางฟิสิกส์ที่แสดงถึงการเคลื่อนที่แบบหมุน ในภาพจะเห็นลูกข่างกำลังหมุน และภาพการ์ตูนของอิเล็กตรอน ที่กำลังหมุนรอบตัวเอง (ตีความโดยอนุโลมว่าเป็น Spin ของมัน)

ในกลศาสตร์คลาสสิก โมเมนตัมเชิงมุม หรือ Angular Momentum เป็นปริมาณเวคเตอร์ ซึ่งหากจะตีความโดยอนุโลมแล้ว เวคเตอร์อันนี้ก็คือ *แกนของการหมุน* ดังแสดงในภาพ 3.1 ที่ลูกข่างกำลังหมุนตัวและถ้าพิจารณาทิศทางของการหมุนตามกฎมือขวา มันจะมีเวคเตอร์โมเมนตัมเชิงมุม ชี้ขึ้นในแนวดิ่งนั่นเอง

คำนิยามของ Angular Momentum อยู่ในรูปของ $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ นั่นก็หมายความว่าขนาดของมันขึ้นอยู่กับความเร็วเชิงมุมขณะที่กำลังหมุน, มวลของวัตถุ, และรัศมีของการหมุน ยกตัวอย่างเช่น ถ้ามวล 1 kg ที่มีลักษณะเป็นทรงกลมซึ่งมีรัศมี 10 cm เมื่อหมุนด้วยความเร็วเป็น 10 รอบต่อวินาที จะมีโมเมนตัมเชิงมุมประมาณ 0.25 Js

แต่ทว่าระบบอนุภาคในระดับอะตอม ซึ่งมีมวลขนาดเล็กมากและเคลื่อนที่อยู่แต่ในวงจำกัดภายในระยะทางระหว่างอะตอมนั้น มีโมเมนตัมเชิงมุมที่เมื่อเปรียบเทียบกับตัวอย่างข้างต้น เป็นค่าที่เล็กมาก ยกตัวอย่างเช่น Spin Angular Momentum ของอิเล็กตรอนที่กล่าวในบทที่ 2 มีค่าเท่ากับ $\hbar/2$ หรือ 0.5×10^{-34} Js เปรียบเทียบกับ L = 0.25 Js ในกรณีของการหมุนของลูกทรงกลมข้างต้น

นอกเหนือไปจากขนาดของ L ที่เล็กมาก ๆ โมเมนตัมเชิงมุมของอนุภาคในระดับอะตอมยังมีคุณสมบัติที่น่าทึ่ง นั่นคือ แกนของการหมุน ตลอดจนความเร็วรอบในการหมุน มิใช่จะเป็นเท่าใดก็ได้สมบัติเชิงการหมุนเหล่านี้ ไม่ใช่ปริมาณที่ต่อเนื่อง หากแต่มีค่าที่เป็นไปได้ลักษณะคล้ายกับขั้นบันได ในทำนองเดียวกัน

4 Time Evolution

4.1 Time Evolution Operator

4.2 Precession ของ Spin $\frac{1}{2}$ Particle ในสนามแม่เหล็ก

4.3 การหมุน 360 องศาของนิวตรอน

4.4 Magnetic Resonance

4.5 Ammonia Maser

4.6 บทสรุป

4.7 ปัญหาท้ายบท

วัตถุประสงค์หลักอันหนึ่งของการศึกษาฟิสิกส์ ก็คือความสามารถในการทำนายสิ่งที่จะเกิดขึ้นในอนาคต หรือการศึกษาปริมาณทางฟิสิกส์ที่เปลี่ยนแปลงไปกับเวลา เพราะฉะนั้นในบทที่ 4 นี้ เราจะกล่าวถึงระเบียบวิธีในทางกลศาสตร์ควอนตัม ที่จะเป็นกลไกในการศึกษาว่าสถานะต่าง ๆ นั้น จะมีการเปลี่ยนแปลงไปกับเวลาอย่างไร

4.1 Time Evolution Operator

สมมุติว่าเราทราบข้อมูลเกี่ยวกับสถานะของระบบ ณ เวลา $t=0$ ซึ่งอาจจะเขียนให้เป็นสัญลักษณ์โดยใช้ Ket ได้ว่า $|\Psi(t=0)\rangle$ จากนั้น ด้วยระเบียบวิธีของกลศาสตร์ควอนตัม ที่ได้กล่าวถึงในบทที่ 2 เราสามารถจินตนาการได้ว่า มี Operator ซึ่งอาจจะแทนด้วยสัญลักษณ์ $\hat{U}(t)$ โดยที่ Operator ดังกล่าวนี้สามารถที่เปลี่ยนสถานะ Ket ณ เวลา t=0 <u>ให้กลายเป็นสถานะ Ket ณ เวลา t</u> หรือเขียนในรูปของสมการได้ว่า

$$\hat{U}(t)|\Psi(t=0)\rangle = |\Psi(t)\rangle \qquad (4.1)$$

ถึงแม้ว่าในขณะนี้ เรายังไม่ทราบว่า Operator $\hat{U}(t)$ ดังกล่าวนี้ มีรูปแบบหรือเอกลักษณ์ในทางคณิตศาสตร์เป็นอย่างไร แต่ด้วยคำนิยามในสมการ (4.1) นั้น เราเรียก $\hat{U}(t)$ ว่าเป็น Time Evolution Operator แปลว่า Operator ที่ทำให้สถานะของระบบ <u>เปลี่ยนไปกับเวลา</u>นั่นเอง

ในทำนองเดียวกันกับการศึกษา Rotation Operator ในบทที่ 2 ซึ่งเริ่มด้วยศึกษาการหมุนที่เป็นมุมเล็ก ๆ รอบแกน z หรือที่เราใช้สัญลักษณ์ $\hat{R}(d\varphi\mathbf{k})$ Time Evolution Operator ก็เช่นเดียวกัน เราสามารถเริ่มด้วยการพิจารณา

$$\hat{U}(dt)|\Psi(t=0)\rangle = |\Psi(dt)\rangle \qquad (4.2)$$

สมการ (4.2) แสดงถึงมุมมองที่ว่า $\hat{U}$ เป็น Operator ที่ทำการเปลี่ยนสถานะ Ket เริ่มต้น ให้เป็นสถานะผลลัพธ์ภายหลังจากเวลาผ่านไปเพียง dt เท่านั้น และในลักษณะเดียวกันกับ Infinitesimal Rotation Operator ดังสมการ (2.122) ที่ว่า $\hat{R}(d\varphi\mathbf{k}) = 1 - \frac{i}{\hbar}\hat{J}_z\, d\varphi$ เราก็สามารถเขียน

$$\hat{U}(dt) = 1 - \frac{i}{\hbar}\hat{H}\, dt \qquad (4.3)$$

5 Interaction ของ Spin

5.1 Hyperfine Splitting

5.2 Two Spin $\frac{1}{2}$ Particles

5.3 EPR Paradox

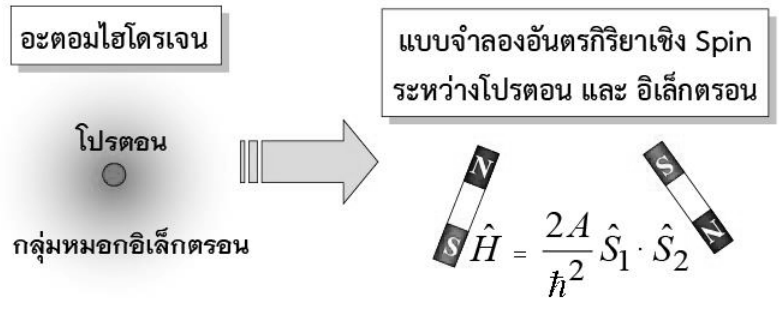
5.4 การรวมกันของ Angular Momentum

5.5 บทสรุป

5.6 ปัญหาท้ายบท

5.1 Hyperfine Splitting

ในเนื้อหาของกลศาสตร์ควอนตัมเบื้องต้น เราคุ้นเคยเป็นอย่างดีกับการศึกษาระบบของอะตอมไฮโดรเจน ซึ่งอิเล็กตรอนมีอันตรกิริยากับโปรตอน ในลักษณะของแรงดึงดูดเชิงไฟฟ้าสถิต



ภาพ 5.1 แสดง Spin-Spin Interaction ระหว่างอนุภาคอิเล็กตรอนและโปรตอนที่อยู่ใกล้เคียงกันภายในอะตอมของไฮโดรเจน

นอกจากนี้ ยังมีอันตรกิริยาอีกประเภทหนึ่งที่เกิดจาก Magnetic Moment ของอนุภาคทั้งสอง ซึ่งมีชื่อเรียกโดยทั่วไปว่า Hyperfine Interaction ทั้งนี้ เนื่องจากอิเล็กตรอนและโปรตอนต่างก็เป็นอนุภาคที่มี Spin $s = \frac{1}{2}$ ทำให้มี Magnetic Moment เป็นของตัวเอง และเมื่ออยู่ในบริเวณใกล้เคียงกันภายในอะตอม จึงมีอันตรกิริยาระหว่างกันคล้ายกับแท่งแม่เหล็กสองแท่ง ดังในภาพ 5.1 ซึ่งในกรณีดังกล่าว เราสามารถเขียน Hamiltonian ได้ว่า

$$\hat{H} = \frac{2A}{\hbar^2}\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2 \qquad (5.1)$$

สมการ (5.1) แสดงให้เห็นว่าพลังงานของระบบขึ้นอยู่กับ $\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2$ ซึ่งก็คือมุมระหว่าง Spin ของอนุภาคทั้งสอง ในภาพ 5.1 (ขวา) เราใช้ทิศทางของแม่เหล็กสองแท่งเพื่อเปรียบเทียบให้เห็นภาพพจน์ของอันตรกิริยาดังกล่าว นอกจากนี้ พลังงานของระบบยังจะต้องขึ้นอยู่กับปัจจัยอื่น ๆ เช่น ระยะห่างระหว่างอนุภาคทั้งสอง และ Magnetic Moment ของอนุภาคคู่กรณี เป็นต้น

6 Wave Mechanics in One Dimension

6.1 Wave Function และ Position Eigenstate

6.2 Generator of Translation

6.3 Momentum Operator

6.4 Free Particle และ Gaussian Wave Packet

6.5 Heisenberg Uncertainty Principle

6.6 Schrödinger Equation

6.7 Square Well Potential

6.8 Scattering in One Dimension

6.9 Ehrenfest Theorem

6.10 บทสรุป

6.11 ปัญหาท้ายบท

6.1 Wave Function และ Position Eigenstate

ระบบต่าง ๆ ที่เราได้กล่าวถึงในบทที่ผ่านมา ล้วนแต่เป็นระบบที่มี Basis State เป็นสถานะที่ไม่ต่อเนื่อง ยกตัวอย่างเช่น Spin ของอิเล็กตรอนที่มีค่าได้เพียง $+\frac{\hbar}{2}$ หรือ $-\frac{\hbar}{2}$ และจากกลไกของกลศาสตร์ควอนตัม อาทิ Matrix Mechanics, Expectation Value, หรือ Time Evolution Operator ทำให้เราสามารถวิเคราะห์ระบบที่ไม่ต่อเนื่องเหล่านี้ได้ในหลายแง่มุม ทั้งในแง่ของพลังงาน หรือแม้กระทั่งการเปลี่ยนแปลงไปตามเวลาของระบบที่เรากำลังพิจารณา อย่างไรก็ตามมีระบบในทางฟิสิกส์อยู่จำนวนมากที่มี Basis State เป็นสถานะที่ต่อเนื่อง ยกตัวอย่างเช่นอิเล็กตรอนที่ถูกขังอยู่ในบ่อพลังงานศักย์ดังที่ได้เกริ่นมาแล้วในหัวข้อ 1.5

ให้ $|\Psi\rangle$ แทนสถานะของอิเล็กตรอนในระบบ_____(6.1)

และในเมื่ออิเล็กตรอนดังกล่าวสามารถที่จะอยู่ ณ ตำแหน่งใด ๆ ก็ได้ภายในกล่อง เราจึงให้ Basis State เป็นเซตของตำแหน่งต่าง ๆ ซึ่งเขียนได้โดยสัญลักษณ์

ให้ $|x\rangle$ แทนสถานะของอิเล็กตรอนที่อยู่ ณ ตำแหน่ง x ใด ๆ_____(6.2)

จะเห็นว่า เซตของ Basis State ข้างต้นเป็นค่าที่ต่อเนื่อง และมีจำนวนสมาชิกของเซตเป็นอนันต์ ด้วยเหตุนี้เองเมื่อเราเขียนสถานะ $|\Psi\rangle$ ของระบบให้อยู่ในรูปของ Superposition ของ Basis State $|x\rangle$ จึงมีความจำเป็นจะต้องเขียนอยู่ในลักษณะของการอินทิเกรต ดังต่อไปนี้

$$|\Psi\rangle = \int dx \psi(x)|x\rangle \qquad (6.3)$$

โดยนัยสำคัญแล้ว สมการข้างต้นมิได้ต่างจากสมการ (2.22) หากแต่ซัมเมชั่น $\sum_{i=1}^{N}$ ได้ถูกเปลี่ยนให้อยู่ในรูปของการอินทิเกรต $\int dx$ ในขณะเดียวกัน เซตของสัมประสิทธิ์ c_i ที่ปรากฏในสมการ (2.22) ซึ่งเป็นค่าเฉพาะที่ผูกติดอยู่กับ Basis State $|\phi_i\rangle$ นั้น ๆ ก็ได้ถูกเปลี่ยนให้เป็นฟังก์ชัน $\psi(x)$ ซึ่งเป็นฟังก์ชันของ x เพราะเป็นสัมประสิทธิ์ที่ผูกติดกับ Basis State $|x\rangle$ นั่นเอง และในทำนองเดียวกันที่เราสามารถตีความได้ว่า c_i ก็คือ Probability Amplitude ที่ระบบจะอยู่ในสถานะ $|\phi_i\rangle$ ในระบบที่มีความต่อเนื่องเช่นนี้ ก็สามารถเขียนได้ว่า

7 Harmonic Oscillator

7.1 บทนำ

7.2 Eigen Energy

7.3 Eigenstate ใน Position Space

7.4 Quantum Model Versus Classical Model

7.5 Application - Einstein's Model of Specific Heat

7.6 บทสรุป

7.7 ปัญหาท้ายบท

7.1 บทนำ

ในบทที่ผ่านมา เราได้ศึกษาระบบใน 1 มิติโดยใช้กลศาสตร์ควอนตัม ซึ่งก็มีลักษณะของพลังงานศักย์ $V(x)$ แตกต่างกันออกไป เช่น Free Particle $V(x)=0$, บ่อพลังงานศักย์, และกำแพงศักย์ เป็นต้น ในบทที่ 7 นี้ เราจะใช้เวลาทั้งหมดกับการศึกษาพลังงานศักย์แบบซิมเปิลฮาร์มอนิกใน 1 มิติ (Harmonic Potential) ดังแสดงในภาพ 7.1a ซึ่งมีรูปแบบทางคณิตศาสตร์เป็นฟังก์ชันแบบพาราโบลา กล่าวคือ

$$V(x)=\frac{1}{2}kx^2 \qquad (7.1)$$

ในวิชากลศาสตร์คลาสสิก หรือกลศาสตร์นิวตัน บ่อพลังงานศักย์รูปทรงพาราโบลา ในสมการ (7.1) มักจะเป็นโมเดลที่ใช้แทนการเคลื่อนที่ของมวลที่ผูกติดอยู่กับสปริง โดยที่ค่าคงที่ k ซึ่งปรากฏอยู่ในสมการดังกล่าว สื่อความหมายถึงความแข็งของสปริงนั้น ๆ แน่นอนว่าการเคลื่อนที่ของมวลเมื่อผูกติดกับสปริงจะมีลักษณะของการสั่น หรือที่เรียกว่า Oscillation และการสั่นนี้เองโดยทั่วไปจะมีความถี่เชิงมุมเท่ากับ ω rad/sec ซึ่งมีความสัมพันธ์กับความแข็งของสปริงและมวลที่กำลังเคลื่อนที่คือ $\omega=\sqrt{k/m}$ ด้วยเหตุนี้ ในบางครั้งเราอาจจะเขียนพลังงานศักย์ $V(x)$ ในสมการ (7.1) ให้อยู่ในรูปของ

$$V(x)=\frac{1}{2}m\omega^2x^2 \qquad (7.2)$$

การเคลื่อนที่ ซึ่งมีลักษณะเป็นการสั่นสลับกันไปมา มิได้จำกัดอยู่แต่เพียงระบบที่มีสปริงเป็นองค์ประกอบ ยกตัวอย่างเช่น การสั่นของ Pendulum รอบ ๆ จุดสมดุล เพราะฉะนั้น การเขียนฟังก์ชันของพลังงานศักย์ดังในสมการ (7.2) มีประโยชน์คือมันสื่อความหมายครอบคลุมได้กว้างขวางกว่าในสมการ (7.1) ซึ่งผูกติดอยู่กับระบบที่มีสปริงเพียงเท่านั้น

8 Central Potential

8.1 บทนำ

8.2 Orbital Angular Momentum Operator

8.3 เซตของ Commuting Observable

8.4 Position Space ในพิกัดทรงกลม

8.5 Eigen State ของ Hamiltonian

8.6 Application - Nuclear Magic Number

8.7 Eigen State ของ $\hat{L}_z$ และ $\hat{L}^2$

8.8 Application - Coulomb Potential

8.9 บทสรุป

8.10 ปัญหาท้ายบท

8.1 บทนำ

ระบบทางฟิสิกส์จำนวนไม่น้อย ที่อยู่ภายใต้อิทธิพลของพลังงานศักย์ซึ่งมีความสมมาตรในแนวรัศมี ยกตัวอย่างเช่น อะตอมซึ่งประกอบด้วยอิเล็กตรอนและนิวเคลียส โดยที่อิเล็กตรอนจะอยู่ภายใต้อิทธิพลของแรงคูลอมบ์ระหว่างประจุลบของตัวมัน และประจุบวกของโปรตอนที่อยู่ในนิวเคลียส หรือเขียนให้อยู่ในรูปของสมการได้ว่า

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Z}{r} \text{ (SI Unit)} \qquad (8.1)$$

เมื่อ Z คือ Atomic Number ของนิวเคลียส ซึ่งแสดงถึงจำนวนของโปรตอนที่บรรจุอยู่ภายใน และ r คือระยะทางระหว่างอิเล็กตรอนและนิวเคลียส โดยที่เรากำหนดให้นิวเคลียสของอะตอมอยู่ ณ จุดกำเนิดพอดี จากสมการ (8.1) จะเห็นว่าพลังงานศักย์ดังกล่าวขึ้นอยู่กับระยะทางของอนุภาคจากจุดกำเนิดเพียงเท่านั้น เราเรียกระบบที่อยู่ภายใต้อิทธิพลของพลังงานศักย์เช่นนี้ว่า Central Potential และจะเป็นประเด็นหลักของเนื้อหาในบทนี้

$$\text{Central Potential } V(\vec{\mathbf{r}}) = V(r) \qquad (8.2)$$

ซึ่งจะส่งผลให้ Hamiltonian Operator ของระบบอยู่ในรูปของ

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(r) \qquad (8.3)$$

เนื่องจากสสารทุกชนิดที่เราพบเห็น ล้วนประกอบด้วยอะตอมทั้งสิ้น การที่เราสามารถนำกลศาสตร์ควอนตัมมาใช้ในการวิเคราะห์ให้เห็นถึงพฤติกรรมในแง่ต่าง ๆ ของอะตอม จึงมีความสำคัญยิ่ง และจะเป็นพื้นฐานที่จำเป็นในการศึกษาระบบที่ซับซ้อนมากขึ้น เช่น โมเลกุล, ผลึก, หรือสมบัติของวัสดุ เป็นต้น

ข้อมูลชิ้นสำคัญที่ได้จากการคำนวณโดยอาศัยกลศาสตร์ควอนตัม นอกจากระดับพลังงานของโมเลกุลแล้ว ก็คือการกระจายตัวของกลุ่มหมอกอิเล็กตรอน เนื่องจากความก้าวหน้าทางวิทยาการคอมพิวเตอร์ ประกอบกับงานวิจัยเชิงทฤษฎีในด้าน Quantum Chemistry ทำให้นักวิทยาศาสตร์สามารถที่จะนำสมการ Schrödinger มาศึกษาโมเลกุลขนาดใหญ่ขึ้น ซึ่งผลลัพธ์ที่ได้ ก็คือความน่าจะเป็นที่จะพบอิเล็กตรอน ณ ตำแหน่งต่าง ๆ หรือที่เรียกว่า กลุ่มหมอกอิเล็กตรอนนั่นเอง

9 Time Independent Perturbation

9.1 บทนำ

9.2 Non-Degenerate Perturbation Theory

9.3 Application

9.4 Degenerate Perturbation Theory

9.5 Application - Relativistic Correction

9.6 Application - Zeeman Effect

9.7 บทสรุป

9.8 ปัญหาท้ายบท

9.1 บทนำ

เนื้อหาในทุก ๆ กรณีที่ผ่านมา ถึงแม้บางครั้งจะเป็นไปด้วยความยากลำบากอยู่บ้าง แต่ก็สามารถนำกระบวนการทางคณิตศาสตร์เข้ามาทำการวิเคราะห์หา Eigen Energy และ Eigenstate ของระบบได้อย่างแม่นยำ ยกตัวอย่างเช่น Precession ของ Spin, Finite Potential Well, Harmonic Potential, หรือแม้กระทั่ง Central Potential ใน 3 มิติ

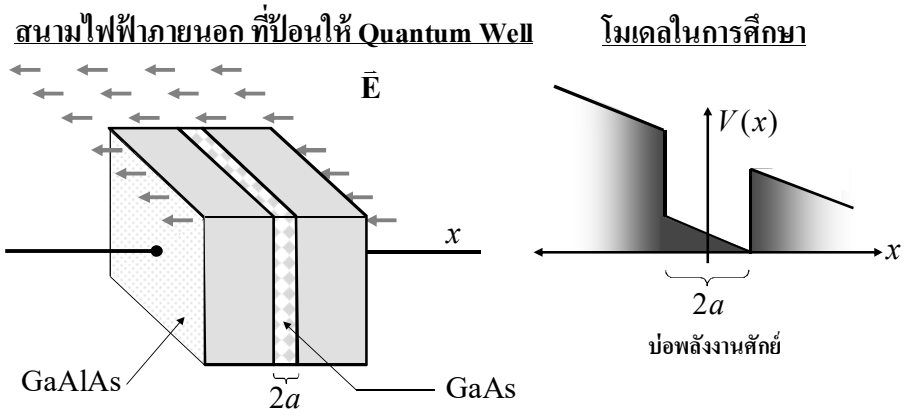
วิธีในการคำนวณระดับพลังงานของระบบที่แตกต่างกันเหล่านี้ ก็มีกลไกที่คล้ายคลึงกัน กล่าวคือ กำหนด Hamiltonian ของระบบ จากนั้นสร้างสมการ Eigen

$$\hat{H}\left|\psi_n\right\rangle = E_n\left|\psi_n\right\rangle$$

ผลเฉลยของสมการข้างต้น ก็คือเซตของ Eigen Energy $\{E_n\}$ และ Eigenstate $\{|\psi_n\rangle\}$ ของระบบที่เรากำลังศึกษานั่นเอง อย่างไรก็ตาม ในความเป็นจริงนั้น ระบบในทางฟิสิกส์มีความซับซ้อนและมีปัจจัยอื่น ๆ ที่จะมีผลกระทบต่อระบบที่เรากำลังพิจารณา ยกตัวอย่างเช่น

Quantum Well ภายใต้สนามไฟฟ้า

ในการศึกษา Quantum Well เราใช้ Finite Square Well ใน 1 มิติ เพื่อเป็นโมเดลอย่างง่ายในการวิเคราะห์หาระดับพลังงาน ตลอดจน Probability Amplitude ของระบบ ในคราวนี้สมมุติว่าเราต่อแบตเตอรี่เข้ากับขั้วทั้งสองข้างของ Quantum Well ทำให้เกิดสนามไฟฟ้า $\vec{\mathbf{E}}$



10 Density Functional Theory

10.1 บทนำ

10.2 Energy Minimization

10.3 Exchange-Correlation

10.4 บทสรุป

10.5 ปัญหาท้ายบท

10.1 บทนำ

ในหลายบทที่ผ่านมาเราได้เห็นการนำควอนตัมมาประยุกต์ใช้กับวิทยาศาสตร์สาขาต่าง ๆ เช่น สาขาดาราศาสตร์ ที่ใช้ Hyperfine Interaction ในการค้นพบรูปร่างก้นหอยของกาแลกซีทางช้างเผือก สาขาการแพทย์ที่ใช้ Magnetic Resonance ในการถ่ายภาพ MRI ในบทนี้ เราจะได้ศึกษาทฤษฎี DFT ซึ่งเป็นการนำควอนตัมมาประยุกต์ใช้กับสาขาฟิสิกส์ของสสารควบแน่น เคมี และวัสดุศาสตร์

ในช่วงแรกที่ Schrödinger เสนอสมการของเขาในปี ค.ศ. 1926 ที่ใช้ฟังก์ชันคลื่น $\psi(r,\theta,\varphi)$ เป็นปริมาณพื้นฐานในการคำนวณ และประสบความสำเร็จอย่างงดงามในการหาระดับพลังงานของไฮโดรเจน อย่างที่เราได้ศึกษามาแล้วในบทที่ 8 Central Potential แต่ด้วยความที่ฟังก์ชันคลื่น <u>เป็นจำนวนเชิงซ้อน</u> การตีความทางฟิสิกส์โดยตรงจึงกระทำไม่ได้ จำต้องอาศัยการยกกำลังสองสัมบูรณ์ หรือ $|\psi(\vec{r})|^2$ จึงจะตีความได้ว่า คือ ความน่าจะเป็น(ต่อหนึ่งหน่วยปริมาตร)ที่จะพบอิเล็กตรอนในบริเวณนั้น ๆ ในอีกมุมหนึ่ง $|\psi(\vec{r})|^2$ ก็คือ ความหนาแน่น $\rho(\vec{r})$ ของกลุ่มหมอกอิเล็กตรอนนั่นเอง

สมการ Schrödinger แม้ได้รับการยอมรับโดยดุสดีในทางทฤษฎี แต่ในทางปฏิบัติ ยากที่จะนำมาใช้กับระบบหลายอิเล็กตรอน ยกตัวอย่างเช่นอะตอมฮีเลียมซึ่งมี 2 อิเล็กตรอนที่เราได้เกริ่นไปแล้วในบทที่ผ่านมา (หัวข้อ 9.2 Applications) จากภาพ 9.3 จะเห็นว่า สมการ Schrödinger อยู่ในรูป

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Z}{|\vec{r}_1|}-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Z}{|\vec{r}_2|}+\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{|\vec{r}_1-\vec{r}_2|}\right]\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)=E\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2) \tag{10.1}$$

ซึ่งมีความซับซ้อนสูงมาก เราไม่สามารถแก้หาผลเฉลยของสมการข้างต้นได้โดยตรง ต้องใช้การประมาณแบบ Perturbation Theory ซึ่งให้ค่าพลังงานสถานะพื้นของอะตอมฮีเลียม คลาดเคลื่อนจากการทดลองไปประมาณ 5% ดังในบทที่ผ่านมา

ในความเป็นจริงแล้ว กว่า 90 ปีที่ผ่านมา จากวันที่กลศาสตร์ควอนตัมถือกำเนิดขึ้น ยังไม่มีใครสามารถหาผลเฉลยเชิงวิเคราะห์ (แม่นตรง, หรือ Exact Solution) ของอะตอมฮีเลียมออกมาได้เลย ความซับซ้อนทางคณิตศาสตร์ เกิดจากการที่ระบบมีตัวแปรเป็นจำนวนมาก เพราะเมื่อมี 2 อิเล็กตรอน ฟังก์ชันคลื่นจึงขึ้นอยู่กับตัวแปร $\{\vec{r}_1,\vec{r}_2\}$ หรือ $\psi=\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$ และเมื่อขยายออกมาทั้ง 3 แกนจึงได้ว่า $\psi=\psi(x_1,y_1,z_1,x_2,y_2,z_2)$ มีถึง 6 ตัวแปร! ด้วยกัน

11 สมการชาชิโย

11.1 พลังงาน Correlation กรณีพิเศษ

11.2 พลังงาน Correlation กรณีทั่วไป

11.3 พลังงาน Exchange

11.4 บทสรุป

11.5 ปัญหาท้ายบท

จากที่ได้อธิบายประโยชน์ และอิทธิพลทางวิชาการในวงกว้างของสมการชาชิโย ต่อสาขา Density Functional Theory ไปแล้วนั้น ในบทนี้จะเจาะลึกไปที่ตรรกะทางคณิตศาสตร์ที่ใช้สร้างสมการ ซึ่งสามารถอธิบายธรรมชาติของอิเล็กตรอนในสสารทั่วไป ได้อย่างแม่นยำ (Chachiyo, 2016; Chachiyo, 2020a; Chachiyo, 2020b) โดยจะใช้หน่วย Atomic Unit ในการบรรยาย

สมการชาชิโย ประกอบด้วย 3 ส่วน ที่อธิบายพลังงาน Exchange และ Correlation ของระบบหลายอิเล็กตรอน ส่วนแรกตีพิมพ์ในปี ค.ศ. 2016 คือ กรณีพิเศษที่อิเล็กตรอนมีความหนาแน่นคงที่ ส่วนที่สองตีพิมพ์ในปี ค.ศ. 2020 โดย T. Chachiyo และ H. Chachiyo คือ พลังงาน Correlation กรณีทั่วไป และพลังงาน Exchange กรณีทั่วไป ในปีเดียวกัน เมื่อผนวกทั้งสามส่วน จึงเกิดเป็นสมการที่คำนวณพลังงานรวมของอิเล็กตรอนได้โดยสมบูรณ์

$$E_{\text{total}} = \sum_n \langle \psi_n | -\tfrac{1}{2}\nabla^2 + \hat{v}_{\text{ext}} + \tfrac{1}{2}\hat{v}_J + \varepsilon_x \frac{3x^2+\pi^2\ln(x+1)}{(3x+\pi^2)\ln(x+1)} + \varepsilon_c (1+t^2)^{h/\varepsilon_c} | \psi_n \rangle \qquad (11.1)$$

เพื่อไม่ให้ซ้ำซ้อนกับเนื้อหาที่ได้ถูกตีพิมพ์ไปแล้ว เราจะเน้นไปที่การขยายความประเด็นทางฟิสิกส์ที่สำคัญ ๆ ซึ่งจะได้อธิบายในรายละเอียด ดังนี้

11.1 พลังงาน Correlation กรณีพิเศษ

$$\varepsilon_c = a \ln\left(1 + \frac{b}{r_s} + \frac{b}{r_s^2}\right) \qquad (11.2)$$

ข้างต้นคือพลังงาน Correlation ของก๊าซอิเล็กตรอนแบบมีอันตรกิริยา ที่ความหนาแน่นคงที่ ρ พารามิเตอร์ $r_s \equiv \frac{1}{a_0}(3/4\pi\rho)^{1/3}$ (ไม่มีหน่วย, Gell-Mann 1957) แสดงถึงรัศมีของทรงกลมที่มีอิเล็กตรอน 1 ตัวบรรจุอยู่ หาก r_s มีค่าสูง แปลว่าอิเล็กตรอนแต่ละตัว อยู่ห่างกันมาก หาก r_s มีค่าน้อยแสดงว่าอิเล็กตรอนกระจุกตัวอยู่ใกล้กัน กรณีอิเล็กตรอนเข้าคู่สปินทั้งหมด หรือ Paramagnetic ค่าคงที่ $a = (\ln 2 - 1)/2\pi^2$ และ $b = 20.4562557$ ซึ่งอันที่จริงมีรูปเชิงวิเคราะห์ $b = \exp(C/a)$ เมื่อ $C = \frac{1}{6}\ln 2 - \frac{3}{4\pi^2}\text{Zeta}(3)$

ดัชนี

A

Associate Laguerre Equ., 353

Associate Legendre Equ., 337

Adjoint Matrix, 49

Adjoint Operator, 104

Ammonia Maser, 145

Angular Momentum, 89

Eigenvalue, 102

Operator $\hat{J}_z$ 103

Operator $\hat{J}^2$ 103

Raising and Lowering, 108

Total, 167, 177

Atomic Unit, 428

B

Balmer Series, 344

Basis State, 37

Bra, 6

Bra-Ket, 5

C

Central Potential, 291

Degeneracy, 324

Eigenstate, 312

Radial Equation, 323

Clebsch-Gordan Coefficient, 178

Chachiyo Functional, 436, 493

Correlation, 498

Exchange, 500

Chachiyo-Karasiev correlation, 489

Chemist's notation, 475

Commuting Observable, 309

Commuting Operator, 101

Commutation, 92

$\left[\hat{J}_x, \hat{J}_y\right] = i\hbar\hat{J}_z$, 94

$\left[\hat{x}, \hat{p}_x\right] = i\hbar$, 200

Conjugate Transpose, 48

Correlation Energy, 482

Coulomb Potential, 344

D

Density Functional Theory, 293,425

Dirac Exchange, 477

E

Ehrenfest Theorem, 243

Eigenvalue, 50

Eigenvector, 50
Energy Minimization, 443
EPR Paradox, 173
Exchange Energy, 461
Expectation Value, 67

F

Free Particle, 208
Finite Square Well, 229
Fine Structure, 413
Funtional, 438

G

Gaussian Wave Packet, 208
Generator of Rotation, 83
Generator of Translation, 197

H

Hamiltonian Operator, 128
Hartree-Fock Exchange, 477
Hartree Product, 464
Hermitian Matrix, 49
Hermitian Operator, 107
Harmonic Potential, 252
Raising Operator, 260
Lowering Operator, 260
Eigen Energy, 255
Eigenstate, 257
Wave Function, 264
QM vs CM, 269
Hidden Variables Theory, 176
Heisenberg Uncertainty, 218
Hooke Atom, 465
Hyperfine Splitting, 160
Hydrogen Atom, 344
Wave Function, 353
Helium Atom, 385

I

Identity Operator, 42
Infinite Square Well, 8
Infinite Sphericl Well, 326
Infinitesimal Rotation, 77

K

Ket, 3
Ket-Bra, 34
Kohn-Sham Energy, 435

L

Larmor Frequency, 134

M

Magnetic Moment, 14
Magnetic Resonance, 139
Maser, 153
Matrix, 45
Matrix Mechanics, 45
Momentum Operator, 203, 295
Momentum Space, 214
Muon and Anti-Muon, 174

N

Nuclear Magic Number, 325
Nucleon, 325
Nucleous with Finite Size, 381

O

Observable, 59
Operator, 31, 57
Orbital Angular Momentum, 91, 94

P

Pauli Spin Matrix, 63
Permutation Symbol, 304
Perturbation Theory, 367
    Non-Degenerate, 372
    Degenerate, 389
Phase, 73
Planewave Model, 236
Postulate, 59
Position Eigenstate, 192
Position Operator, 295
Position Space, 214
Precession of Spin, 131
Probability, 7
Probability Amplitude, 4

Q

Quantum Monte Carlo, 486

R

Rabi Formula, 144
Relativistic Correction, 397
Rotation Operator, 77, 96
Rydberg Constant, 352

S

Scattering, 235
Schrödinger Equation, 10, 128, 222
    in Position Space, 222
    in Momentum Space, 225
Simultaneous Observable, 311
Slater Determinant, 466

Specific Heat, 280

Spherical Bessel Equation, 327

Spherical Neuman Function, 328

Spherical Harmonic, 39, 340

Spin, 13, 60

Spin Angular Momentum, 91

Spin Operator, 60

Spin-Orbit Coupling, 402

Spin-Orbital, 471

Square Well Potential, 229

State, 2, 54

Stark Effect, 393

Stern-Gerlach, 13

Superposition, 23

T

Taylor Expansion, 38

TCUP, 490

Time Evolution Operator, 125

Thomas-Fermi Model, 432

Translation Operator, 197, 296

Trial Wave Function, 444

U

Uncertainty, 67

Unitary Operator, 107

V

Variational Principle, 444

Vector, 45

W

Wave Function, 9, 191

Z

Zeeman Effect, 416

ฟังก์ชันเมทริกซ์วางนัยทั่วไป

ผู้แต่ง: รศ. ดร.กิจติ รอดเทศ

ฟังก์ชันเมทริกซ์วางนัยทั่วไปเป็นฟังก์ชันค่าจำนวนเชิงซ้อนบนปริภูมิเมทริกซ์จัตุรัส (ภาคขยายของฟังก์ชันดีเทอร์มิแนนต์) ซึ่งถูกนิยามไว้ในปีคริสต์ศักราช 1918 โดยนักคณิตศาสตร์ชาวรัสเซียนามว่า อิสไซ ชูร์ หลังจากนั้นฟังก์ชันนี้ได้ถูกศึกษาอย่างกว้างขวาง ทั้งทางทฤษฎีและทางการประยุกต์ หนังสือเล่มนี้ มุ่งเน้นอธิบายถึงสมบัติต่าง ๆ ของฟังก์ชันเมทริกซ์วางนัยทั่วไป โดยแสดงให้เห็นถึงเทคนิคการพิสูจน์ที่น่าสนใจ รวมถึงการนำสมบัติที่ได้ไปประยุกต์ใช้ในพีชคณิตเชิงหลายเส้น ทฤษฎีเมทริกซ์ ทฤษฎีการไม่แปรผัน และทฤษฎีกราฟ อีกทั้งได้เสนอข้อความ คาดการณ์ และปัญหาปลายเปิดที่เกี่ยวข้องกับฟังก์ชันเมทริกซ์วางนัยทั่วไปไว้อย่างหลากหลาย เพื่อให้ผู้อ่านนำไปวิจัยต่อยอดต่อไป

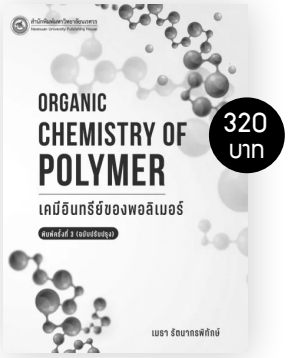
ทฤษฎีสนามควอนตัม

ผู้แต่ง: ผศ. ดร.พิเชฐ วณิชชาพงศ์เจริญ

ทฤษฎีสนามควอนตัม คือ กรอบของทฤษฎีที่อธิบายสนามที่มีสมบัติทางควอนตัม โดยที่สนามคือฟังก์ชันของตำแหน่งในกาลอวกาศ หนังสือเล่มนี้เขียนขึ้นเพื่ออธิบายหลักการ แนวคิด และการคำนวณในทฤษฎีสนามควอนตัม โดยเน้นอภิปรายประเด็นของการนำทฤษฎีสนามควอนตัมไปอธิบายหัวข้อที่เกี่ยวข้องกับฟิสิกส์อนุภาค โดยมีประเด็นหลัก ได้แก่ ความรู้เบื้องต้นที่เป็นพื้นฐานสำหรับการศึกษาทฤษฎีสนามควอนตัม การวิเคราะห์สนามอิสระ การวิเคราะห์ทฤษฎีสนามสเกลาร์ที่มีอันตรกิริยาในตัว การวิเคราะห์พลศาสตร์ไฟฟ้าเชิงควอนตัมรวมทั้งตัวอย่างทิศทางการพัฒนาของเนื้อหาที่นอกเหนือจากที่อภิปรายในส่วนหลัก หนังสือเล่มนี้เหมาะสำหรับผู้สอนระดับบัณฑิตศึกษา หรือการศึกษาค้นคว้าด้วยตนเอง เนื่องจากอธิบายแนวคิด การวิเคราะห์ และวิธีการคำนวณโดยละเอียด รวมทั้ง มีการวิจารณ์ประเด็นที่สำคัญและสรุปท้ายบทเพื่อให้ผู้อ่านตรวจสอบความเข้าใจ และทราบความเชื่อมโยงเบื้องต้นกับเนื้อหาอื่น นอกจากนี้ หนังสือเล่มนี้ยังมีโจทย์ปัญหาและเฉลย เพื่อให้ผู้อ่านได้เสริมความเข้าใจในเนื้อหา

NUPH
online store
www.nupress.grad.nu.ac.th
0 5596 8833-8836 สำนักพิมพ์มหาวิทยาลัยนเรศวร nuph@nu.ac.th

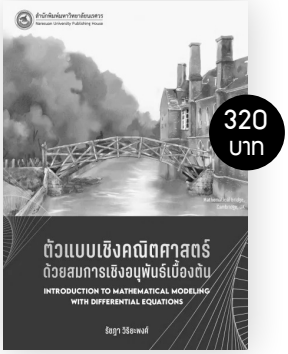
หนังสือแนะนำ



เคมีอินทรีย์ของพอลิเมอร์ (ฉบับปรับปรุง)

ผู้แต่ง: รศ. ดร.เมธา รัตนากรพิทักษ์

หนังสือเล่มนี้เหมาะสำหรับผู้อ่านทั่วไปและผู้ที่สนใจเกี่ยวกับเคมีอินทรีย์ของพอลิเมอร์ ซึ่งจะทำให้มีความเข้าใจกลไกการเกิดปฏิกิริยาทางเคมีอินทรีย์และการจำแนกประเภทปฏิกิริยาที่ใช้ ในการสังเคราะห์พอลิเมอร์ นอกจากนี้ ยังกล่าวถึงเทคนิคการเพิ่มหมู่ฟังก์ชันและการออกแบบโครงสร้างทางเคมีของพอลิเมอร์ รวมทั้งปฏิกิริยาการเชื่อมต่อโมเลกุลที่ต้องการบนโซ่พอลิเมอร์ ซึ่งเป็นการประยุกต์ใช้ความรู้ทางเคมีอินทรีย์ผนวกกับความรู้ ทางด้านปฏิกิริยาพอลิเมอไรเซชัน เพื่อให้ได้ผลิตภัณฑ์เป็นพอลิเมอร์ฟังก์ชันที่มีสมบัติตามความต้องการและสามารถประยุกต์ใช้งาน ที่เหมาะสมได้



ตัวแบบเชิงคณิตศาสตร์ด้วยสมการเชิงอนุพันธ์เบื้องต้น

ผู้แต่ง: ผศ. ดร.รัชฎา วิริยะพงศ์

ตัวแบบเชิงคณิตศาสตร์ (Mathematical model) คือ ตัวแทนสถานการณ์ หรือโจทย์ปัญหาต่าง ๆ ที่ต้องการหาคำตอบซึ่งเขียนในรูปแบบสัญลักษณ์ทางคณิตศาสตร์ ฟังก์ชันหรือสมการทางคณิตศาสตร์ ทั้งนี้เพื่อให้เกิดความเข้าใจในสถานการณ์หรือปัญหานั้น ๆ ทั้งเชิงปริมาณและเชิงคุณภาพมากขึ้น และเพื่อทำนายพฤติกรรมหรือกลไกทางพลศาสตร์ของสถานการณ์นั้น ๆ โดยในหนังสือเล่มนี้จะเน้นที่ตัวแบบเชิงคณิตศาสตร์ที่เกี่ยวข้องกับสมการเชิงอนุพันธ์

หนังสือเล่มนี้เหมาะสำหรับผู้ที่เริ่มต้นศึกษาและสนใจ ในเรื่องการประยุกต์ใช้สมการเชิงอนุพันธ์และการสร้างตัวแบบเชิงคณิตศาสตร์ โดยใช้สมการเชิงอนุพันธ์สำหรับแก้ไขปัญหาและพยากรณ์พฤติกรรมของระบบในสถานการณ์จริงต่าง ๆ ซึ่งสามารถใช้ในการเรียนการสอนในระดับปริญญาตรี หรือปริญญาโทและเป็นแนวทางในการทำวิจัยทางคณิตศาสตร์ประยุกต์

สำนักพิมพ์
มหาวิทยาลัยนเรศวร

สั่งซื้อหนังสือออนไลน์

จัดส่งถึงบ้านสะดวกรวดเร็ว

สั่งซื้อทันที

กรณีต้องการสั่งซื้อหนังสือปริมาณมาก หรือเข้าชั้นเรียนติดต่อได้ที่
ฝ่ายจัดจำหน่ายสำนักพิมพ์มหาวิทยาลัยนเรศวร

nuph@nu.ac.th
สำนักพิมพ์มหาวิทยาลัยนเรศวร
0 5596 8833-8836
nu_publishing

NUPH
online store
www.nupress.grad.nu.ac.th