รูปนัยนิยมของ กลศาสตร์ควอนตัม

จรัญ พรหมสุวรรณ

ภาควิชาฟิสิกส์ มหาวิทยาลัยนเรศวร

รูปนัยนิยมของ
กลศาสตร์ควอนตัม

FORMALISM OF QUANTUM MECHANICS

จรัญ พรมสุวรรณ

ภาพปกหน้า : Paul A.M. Dirac
วาดโดย Iutta Waloschek
ภาพจาก : http://www-history.mcs.st-and.ac.uk/PictDisplay/Dirac.html

รูปนัยนิยมของกลศาสตร์ควอนตัม
พิมพ์ครั้งที่ 1 พ.ศ. 2556

ผู้เรียบเรียง และพิมพ์ จรัญ พรมสุวรรณ
ที่ทำงาน ภาควิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยนเรศวร
ตำบลท่าโพธิ์ อำเภอเมือง จังหวัดพิษณุโลก 65000
โทรศัพท์ 0-5596-3501, 3502 โทรสาร 0-5596-3501
บ้าน เลขที่ 441/6 ถนนบรมไตรโลกนารถ ซอย 13
ตำบลในเมือง อำเภอเมือง จังหวัดพิษณุโลก 65000, โทร (055) 217536
ภูมิลำเนา 806 ถนนเขาน้ำตก ตำบลศรีพนมมาศ อำเภอลับแล จังหวัดอุตรดิตถ์

คำนำ

รูปนัยนิยมของกลศาสตร์ควอนตัม ถูกพัฒนาขึ้นมาในช่วงหลังของประวัติการพัฒนากลศาสตร์ควอนตัม และเป็นที่นิยมแพร่หลายกันในปัจจุบัน เพราะมีการนำไปใช้กันอย่างกว้างขวางในการศึกษาทางทฤษฎีนิวเคลียร์ฟิสิกส์ และฟิสิกส์ของอนุภาค

รูปนัยนิยมของกลศาสตร์ควอนตัมนี้ จะแทนอนุภาคด้วยฟังก์ชันสถานะที่วางอยู่ในปริภูมิฮิลเบิร์ตซึ่งเป็นปริภูมิเวกเตอร์ และแทนฟังก์ชันสถานะด้วยเวกเตอร์สถานะ หรือเวกเตอร์เฉพาะ จะแทนด้วยสัญลักษณ์วงเล็บ " บรา - เคต " ตามแบบของดิแรก ซึ่งเป็นที่นิยมกันแพร่หลายหลังจากหนังสือ Principles of Quantum Mechanics ของดิแรกถูกพิมพ์ขึ้นครั้งแรกใน ค.ศ. 1930 ทั้งเวกตอร์เฉพาะ และตัวดำเนินการ ก็จะสามารถแทนได้ด้วยเมทริกซ์ ซึ่งให้ความสะดวกต่อการนำไปใช้เป็นอย่างมาก

เนื้อหาเกือบทั้งหมดที่อยู่ในหนังสือรูปนัยนิยมของกลศาสตร์ควอนตัมเล่มนี้ เรียบเรียงมาจากหนังสือ Quantum Mechanics ของ B. H. Bransden and C. J. Joachain พิมพ์ครั้งที่ 2 ค.ศ. 2000 ซึ่งผู้เรียบเรียงเห็นว่ากล่าวเรื่องนี้ได้ละเอียดและบริบูรณ์กว่าในหนังสือเล่มอื่น ๆ

ศัพท์ภาษาไทยที่ใช้ในตำราเล่มนี้ ผู้เรียบเรียงยึดตามแบบหนังสือศัพท์วิทยาศาสตร์อังกฤษ-ไทย ไทย-อังกฤษ ฉบับราชบัณฑิตยสถาน ฉบับพิมพ์ครั้งที่ 5 แก้ไขเพิ่มเติม พ.ศ. 2546 และพจนานุกรมศัพท์คณิตศาสตร์ ฉบับราชบัณฑิตสถาน ฉบับพิมพ์ครั้งที่ 10 พ.ศ. 2553 ซึ่งจะมีข้อดีตรงที่จะได้ใช้คำศัพท์ภาษาไทยให้เหมือนกัน และสะดวกต่อการสืบค้นย้อนกลับไปหาคำภาษาอังกฤษเดิมที่แปลมา แต่อย่างไรก็ตาม ยังมีศัพท์อีกเป็นจำนวนมากมาย ที่ยังไม่ได้บัญญัติไว้ในพจนานุกรมดังกล่าว ผู้เรียบเรียงจึงขอบัญญัติขึ้นใช้เองในตำราเล่มนี้ไปพลางก่อน

หนังสือเล่มนี้อาจยังมีข้อบกพร่องอยู่มาก เพราะนอกจากเป็นการพิมพ์ครั้งแรกแล้ว ยังต้องรีบเร่งพิมพ์ให้เสร็จภายในเวลาจำกัด 1 ปี ด้วย ซึ่งปรกติการเรียบเรียงและจัดพิมพ์หนังสือฟิสิกส์ ต้องใช้ทั้งเวลา และความอุตสาหะ มากพอสมควร

ตลอดเวลาของการสอนวิชากลศาสตร์ควอนตัม ในระดับปริญญาตรีและโท อยู่ที่มหาวิทยาลัยนเรศวร ได้ระลึกอยู่เสมอมา ถึงพระคุณของอาจารย์ท่านที่เคยสอนวิชากลศาสตร์ควอนตัมให้แก่ข้าพเจ้าขณะที่ยังศึกษาอยู่ที่จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย คือ ศาสตราจารย์วิชัย หโยดม และผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. กอปร กฤตยากีรณ โดยเฉพาะอย่างยิ่งอาจารย์ผู้มีคุณูปการที่ช่วยให้คำปรึกษา ตลอดจนชี้แนะแนวทางการทำงาน และการดำเนินชีวิต ให้ผู้เรียบเรียงเสมอมา คือ ศาสตราจารย์ ดร. สุทัศน์ ยกส้าน

กุศลใดที่บังเกิดจากการเรียบเรียงหนังสือเล่มนี้ ขออุทิศให้แก่ พ่อพา พรมสุวรรณ พ่อผู้สร้างชีวิตและอนาคตให้แก่ผู้เรียบเรียง และอาจารย์เจริญ พรมสุวรรณ พี่ชาย ผู้คอยห่วงใย ดูแล และช่วยเหลือผู้เรียบเรียงมาตลอดชีวิต และหากหนังสือเล่มนี้มีความดีอยู่บ้าง ก็ขอมอบให้แม่ ภรรยา และลูก ๆ

จรัญ พรมสุวรรณ

สารบัญ

ตอนที่ 1

สถานะของระบบ

(The State of a System)

ในวิชาฟิสิกส์แบบฉบับ (classical physics) สถานะเชิงพลวัต (dynamical state) ของระบบที่เวลาใด ๆ จะบอกได้จากการปริมาณเชิงฟิสิกส์ที่เป็นตัวแปรเชิงพลวัต (dynamical variable) ของอนุภาคที่เป็นส่วนประกอบของระบบนั้น เช่นเวกเตอร์ตำแหน่ง (position vector) และโมเมนตัม เป็นต้น ซึ่งตามสัจพจน์ (postulate) ที่กล่าวมานี้ ตัวแปรเชิงพลวัตทั้งหมดจะต้องถูกวัดพร้อมกัน และต้องเป็นการวัดที่มีความถูกต้องแม่นยำที่สุด

แต่การวัดดังกล่าวในทางฟิสิกส์ควอนตัม (quantum physics) จะทำได้ยากมาก ซึ่งสาเหตุหลักมาจากกระบวนการวัด เพราะในทางเป็นจริงเมื่อใดที่ตัวแปรเชิงพลวัตตัวหนึ่งถูกวัดได้ สถานะเชิงพลวัตของระบบก็เปลี่ยนแปลงไปอีกในทางไม่อาจคาดเดาได้ และความถูกต้องแน่นอนของตัวแปรเชิงพลวัตที่วัดได้ก็จะถูกจำกัดด้วยความสัมพันธ์ความไม่แน่นอนของไฮเซนเบิร์ก (Heisenberg uncertainty relation) ด้วยเหตุนี้สัจพจน์ตามแบบฟิสิกส์แบบฉบับดังกล่าวจึงใช้ไม่ได้ วิชากลศาสตร์ควอนตัมจึงทำนายได้เฉพาะกับผลลัพธ์ของการวัด n ครั้ง ที่วัดจากระบบเชิงฟิสิกส์ของอนุภาคจำนวนมาก N อนุภาค และต้องเป็นระบบที่อนุภาคที่อยู่ในระบบมีความเหมือนกันและเป็นอิสระต่อกันด้วย ซึ่งเราจะเรียกว่าระบบเช่นนี้ว่าชุดเชิงสถิติ (statistical ensemble) หรือต่อไปจะเรียกสั้นๆว่าชุด หรือเอนเซมเบิล (ensemble) ดังนั้นจึงอาจกล่าวได้อีกอย่างหนึ่งว่าวิชากลศาสตร์ควอนตัมเป็นการทำนายในแบบความถี่เชิงสถิติ n / N หรือเป็นความน่าจะเป็น (probability) ของเหตุการณ์ ซึ่งการทำนายนี้จะเกี่ยวข้องกับสัจพจน์ที่นำเสนอเป็นลำดับในต่อไปนี้

สัจพจน์ 1

ในกรณีเฉพาะ ชุดของระบบอนุภาคสามารถโยงเขากับฟังก์ชันคลื่น (wave function) หรือฟังก์ชันสถานะ (state function) ที่บรรจุสารสนเทศ (information) ทั้งหมด ของชุดระบบอนุภาคนั้น

โดยทั่วไปฟังก์ชันดังกล่าวจะเป็นฟังก์ชันแบบเชิงซ้อน (complex) ซึ่งฟังก์ชันอาจถูกคูณอยู่ด้วยจำนวนเชิงซ้อน โดยไม่ได้ทำให้มีการเปลี่ยนแปลงอย่างมีนัยสำคัญเชิงฟิสิกส์ของมัน

ให้เราพิจารณาข้อสังเกตสองข้อ ที่อยู่ในสัจพจน์นี้

(1) การใช้คำว่า "ในกรณีเฉพาะ" ก็แสดงว่าชุดของระบบบางชุด ไม่อาจอธิบายได้ด้วยฟังก์ชันสถานะเดี่ยว (single state function)

(2) แม้ว่าโดยหลักแล้ว เราควรจะใช้คำว่าชุดหรือเอ็นเซมเบิลกับชุดระบบของอนุภาค แต่เพื่อความสะดวก เราจะกล่าวเป็นฟังก์ชันคลื่นของระบบเฉพาะ (particular system) นั้นแทน

ให้เราพิจารณาระบบเชิงฟิสิกส์ ที่ประกอบด้วยอนุภาคเดี่ยว (single particle) ที่อยู่ในศักย์ที่กำหนดให้ $V(\mathbf{r},t)$ และสมมุติให้อนุภาคนี้ไม่มีโครงสร้าง ฟังก์ชันสถานะที่เกี่ยวพันกับชุดของระบบเช่นนี้เป็นฟังก์ชันคลื่น $\Psi(\mathbf{r},t)$ ที่ขึ้นกับเวกเตอร์ตำแหน่ง (position vector) $\mathbf{r}$ และเวลา t และถ้าฟังก์ชันคลื่น $\Psi(\mathbf{r},t)$ นี้เป็นไปตามปริพันธ์การทำให้เป็นบรรทัดฐาน (normalization integral) คือ

$$I = \int \left|\Psi(\mathbf{r},t)\right|^2 d\mathbf{r} \tag{1.1}$$

ซึ่งเมื่อหาปริพันธ์ทั่วปริภูมิแล้วได้ค่าออกมาเป็นอันตะ (finite) เราก็จะเรียก $\Psi(\mathbf{r},t)$ นี้ว่าเป็นฟังก์ชันที่หาปริพันธ์ได้ในเชิงยกกำลังสอง (square integrable function) หรือยกกำลังสองแล้วหาปริพันธ์ได้ ตามสัจพจน์ 1 นี้ สองฟังก์ชันคลื่น Ψ และ $c\Psi$ ที่แตกต่างกันตรงค่าคงตัวเชิงซ้อนของการคูณ (complex multiplication constant) c สามารถใช้เป็นตัวแทนของสถานะเดียวกันได้ และเพื่อความสะดวกต่อการใช้งานของ $\Psi(\mathbf{r},t)$ นี้ เราจะเลือกค่าคงตัว c นี้ให้เป็นค่าในทางที่ทำให้ฟังก์ชันคลื่นเป็นบรรทัดฐานกับ 1

$$\int \left|\Psi(\mathbf{r},t)\right|^2 d\mathbf{r}=1 \tag{1.2}$$

ปริมาณ

$$P(\mathbf{r},t) = \int \left|\Psi(\mathbf{r},t)\right|^2 \tag{1.3}$$

ก็จะแปลความได้ว่า เป็นความหนาแน่นของความน่าจะเป็นของตำแหน่ง (position probability density) เราหมายเหตุในที่นี้ด้วยว่าฟังก์ชันคลื่น Ψ และ $\exp(i\alpha)\Psi$ ซึ่งแตกต่างกันที่ตัว

ประกอบเฟส (phase factor) (เมื่อ α เป็นจำนวนจริง) ไม่เฉพาะแต่จะใช้อธิบายสถานะเดียวกันได้เท่านั้น แต่ยังทำให้เป็นบรรทัดฐานอันเดียวกันได้อีกด้วย

เพื่อทำให้อยู่ในแบบนัยทั่วไป (generalization) การพิจารณาของเราจะกระทำกับกรณีของระบบเชิงฟิสิกส์ที่มีอนุภาคไร้โครงสร้าง N อนุภาค ซึ่งฟังก์ชันสถานะ (state function) ที่เกี่ยวพันกับชุดของระบบดังกล่าวในปริภูมิโครงแบบ (configuration space) ก็จะเขียนได้เป็น $\Psi(\mathbf{r}_1,...,\mathbf{r}_N,t)$ ที่ขึ้นกับเวกเตอร์ตำแหน่ง $\mathbf{r}_1,...,\mathbf{r}_N$ และเวลา t ถ้าฟังก์ชันคลื่นนี้ถ้าเป็นไปตามปริพันธ์การทำให้เป็นบรรทัดฐาน

$$I = \int \left|\Psi(\mathbf{r}_1,...,\mathbf{r}_N,t)\right|^2 d\mathbf{r}_N \tag{1.4}$$

ก็อาจกล่าวได้ว่าเป็นฟังก์ชันคลื่นที่สามารถหาปริพันธ์ได้ในเชิงยกกำลังสอง ที่ได้ค่าเป็นค่าอันตะ และค่าคงตัวเชิงซ้อนของการคูณ c ก็จะเลือกให้เป็นค่าในทางที่ทำให้ฟังก์ชันคลื่นเป็นบรรทัดฐานกับ 1 เช่นเดิม คือ

$$\int \left|\Psi(\mathbf{r}_1,...,\mathbf{r}_N,t)\right|^2 d\mathbf{r}_N = 1 \tag{1.5}$$

และปริมาณ

$$P(\mathbf{r}_1,...,\mathbf{r}_N,t) = \left|\Psi(\mathbf{r}_1,...,\mathbf{r}_N,t)\right|^2 \tag{1.6}$$

ก็จะตีความได้ว่าเป็นความหนาแน่นของความน่าจะเป็นของตำแหน่ง อันเนื่องมาการรับรู้ที่ว่า $P(\mathbf{r}_1,...,\mathbf{r}_N,t)d\mathbf{r}_1..d\mathbf{r}_N$ เป็นความน่าจะเป็น ณ เวลา t ที่จะพบอนุภาค 1 ในส่วนย่อยปริมาตร $d\mathbf{r}_1$ รอบ $\mathbf{r}_1$ และ อนุภาค 2 ในชิ้นประกอบปริมาตร (volume element) $d\mathbf{r}_2$ รอบ $\mathbf{r}_2$ เช่นนี้ต่อไปเรื่อย ๆ เราจะหมายเหตุในที่นี้ด้วยว่า

$$P_1(\mathbf{r}_1,t) \equiv \int P(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2...,\mathbf{r}_N,t)d\mathbf{r}_2...d\mathbf{r}_N \tag{1.7}$$

นั่นก็คือ ความหนาแน่นของความน่าจะเป็นของตำแหน่งของอนุภาค 1 ที่จุด $\mathbf{r}_1$ ณ เวลา t ไม่ขึ้นกับตำแหน่งของอนุภาคตัวอื่น ๆ และกับอนุภาคตัวอื่น ๆ ก็เป็นทำนองเดียวกันนี้ด้วย

สัจพจน์ 2

หลักการซ้อนทับ (superposition principle)

ตามหลักการซ้อนทับ (superposition principle) ถ้าฟังก์ชันสถานะ Ψ_1 สมนัยกับสถานะหนึ่งของชุดเชิงสถิติของระบบเชิงฟิสิกส์ และฟังก์ชันสถานะ Ψ_2 สมนัยกับอีกสถานะหนึ่ง แล้วการรวมเชิงเส้น (linear combination) ของมันจะเป็น

$$\Psi = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2 \tag{1.8}$$

เมื่อ c_1 และ c_2 เป็นค่าคงตัวเชิงซ้อน (complex constant) และฟังก์ชันคลื่น Ψ สมนัยกับชุดทั้งหมด เฟสสัมพัทธ์ (relative phase) ในสมการ (1.8) มีความสำคัญ เพราะมีผลกระทบต่อปริมาณเชิงฟิสิกส์ $|\Psi|^2$

ฟังก์ชันคลื่นปริภูมิโมเมนตัม (Momentum Space Wave Function)

การอธิบายสถานะของชุดของระบบหนึ่งอนุภาค นอกจากเราจะใช้ฟังก์ชันคลื่นปริภูมิโครงแบบ $\Psi(\mathbf{r},t)$ มาอธิบาย เราสามารถใช้ฟังก์ชันคลื่นปริภูมิโมเมนตัม $\Phi(\mathbf{p},t)$ ซึ่งเป็นผลการแปลงฟูเรียร์ (Fourier transform) ของ $\Psi(\mathbf{r},t)$ มาอธิบายแทนได้ด้วย และถ้าฟังก์ชันคลื่นปริภูมิโครงแบบ $\Psi(\mathbf{r},t)$ ถูกทำให้เป็นบรรทัดฐานกับ 1 ฟังก์ชันคลื่นปริภูมิโมเมนตัม $\Phi(\mathbf{p},t)$ ก็สามารถทำเป็นบรรทัดฐานกับ 1 ได้เช่นเดียวกันได้ในปริภูมิโมเมนตัม

$$\int|\Phi(\mathbf{p},t)|^2\, d\mathbf{p} = 1 \tag{1.9}$$

ดังนั้นปริมาณ

$$\Pi(\mathbf{p},t) = \left|\Phi(\mathbf{p},t)\right|^2 \tag{1.10}$$

ก็จะแปลความได้ว่าเป็นความหนาแน่นของความน่าจะเป็นในปริภูมิโมเมนตัม ที่จะพบโมเมนตัมของอนุภาคในชิ้นประกอบปริมาตร $d\mathbf{p}$ ที่อยู่รอบ $\mathbf{p}$ ฟังก์ชันสถานะที่สมนัยกับทั้งชุดของระบบเชิงฟิสิกส์ N อนุภาค ก็สามารถแทนได้ด้วยฟังก์ชันคลื่นในปริภูมิโมเมนตัม $\Phi(\mathbf{p}_1,\ldots,\mathbf{p}_N,t)$ ซึ่งเป็นผลการแปลงฟูเรียร์ของฟังก์ชันคลื่นปริภูมิโครงแบบ $\Psi(\mathbf{r}_1,\ldots,\mathbf{r}_N,t)$ ได้เช่นเดียวกัน คือ

$$\Phi(\mathbf{p}_1,\ldots,\mathbf{p}_N,t) = (2\pi\hbar)^{-3N/2}\int\exp\left[-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}_1.\mathbf{r}_1+\ldots+\mathbf{p}_N.\mathbf{r}_N)\right] \times\Psi(\mathbf{r}_1,\ldots,\mathbf{r}_N,t)\,d\mathbf{r}_1\ldots d\mathbf{r}_N \tag{1.11}$$

และทำให้เป็นบรรทัดฐานกับ 1 ได้เป็น

$$\int |\Phi(\mathbf{p}_1,...,\mathbf{p}_N,t)|^2 \, d\mathbf{p}_1...d\mathbf{p}_N = 1 \tag{1.12}$$

ดังนั้นปริมาณ

$$\Pi(\mathbf{p}_1,...,\mathbf{p}_N,t) = |\Phi(\mathbf{p}_1,...,\mathbf{p}_N,t)|^2 \tag{1.13}$$

ก็จะแปลความได้ว่าเป็นความหนาแน่นความน่าจะเป็นในปริภูมิโมเมนตัม ที่จะพบโมเมนตัมของอนุภาค 1 ในชิ้นประกอบปริมาตร $d\mathbf{p}_1$ ที่อยู่รอบ $\mathbf{p}_1$ และอนุภาค 2 ในชิ้นประกอบปริมาตร $d\mathbf{p}_2$ ที่อยู่รอบ $\mathbf{p}_2$ เช่นนี้ไปเรื่อย ๆ

สัญกรณ์วงเล็บแบบดิแรก (Dirac Bracket Notation)

สัญกรณ์วงเล็บแบบดิแรกที่จะนำมาใช้ต่อไปนี้ ให้ความสะดวกอย่างมากต่อการศึกษาวิชากลศาสตร์ควอนตัม โดยจะกำหนดให้ผลคูณเชิงสเกลาร์ (scalar product) ของสองฟังก์ชัน ที่หาปริพันธ์ได้ในเชิงยกกำลังสอง คือฟังก์ชัน $\Psi_1(\mathbf{r})$ และ $\Psi_2(\mathbf{r})$ อยู่ในรูปสัญลักษณ์ $\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle$ โดย

$$\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle \equiv \int \Psi_1^*(\mathbf{r}) \Psi_2(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \tag{1.14}$$

และถ้าทำให้อยู่ในแบบนัยทั่วไป (generalization) โดยเปลี่ยนเป็นฟังก์ชัน $\Psi_1(\mathbf{r}_1,...,\mathbf{r}_N,t)$ และ $\Psi_2(\mathbf{r}_1,...,\mathbf{r}_N,t)$ สมการ (1.14) ก็สามารถเขียนใหม่ได้เป็น

$$\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle \equiv \int \Psi_1^*(\mathbf{r}_1,...,\mathbf{r}_N,t) \Psi_2(\mathbf{r}_1,...,\mathbf{r}_N,t) d\mathbf{r}_1...d\mathbf{r}_N \tag{1.15}$$

สัญลักษณ์ $|\Psi_2\rangle$ เรียกว่า **เกต** (ket) และ $\langle \Psi_1 |$ เรียกว่า **บรา** (bra) จากบทนิยามในสมการ (1.7) ก็สามารถเขียนได้ว่า

$$\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle = \langle \Psi_2 | \Psi_1 \rangle^* \tag{1.16}$$

นอกจากนี้ ถ้าหาก c เป็นจำนวนเชิงซ้อน (complex number) และเป็นฟังก์ชันที่สาม เราก็จะเขียนได้อีกว่า

$$\langle\Psi_1|c\Psi_2\rangle = c\langle\Psi_1|\Psi_2\rangle, \tag{1.17}$$

$$\langle c\Psi_1|\Psi_2\rangle = c^*\langle\Psi_1|\Psi_2\rangle, \tag{1.18}$$

$$\langle\Psi_3|\Psi_1+\Psi_2\rangle = \langle\Psi_3|\Psi_1\rangle + \langle\Psi_3|\Psi_2\rangle, \tag{1.19}$$

ถ้าสองฟังก์ชัน Ψ_1 และ Ψ_2 ที่ผลคูณเชิงสเกลาร์ของมันเป็นศูนย์ (หรือหายไป) เราจะเรียกว่าสองฟังก์ชันนี้ว่าเป็นเชิงตั้งฉาก (orthogonal) กัน

$$\langle\Psi_1|\Psi_2\rangle = 0 \tag{1.20}$$

และถ้าสองฟังก์ชันคลื่นนี้เหมือนกัน ผลคูณเชิงสเกลาร์ของมันที่ให้ค่าเป็น 1 ก็จะเรียกว่าเป็นเงื่อนไขการทำให้เป็นบรรทัดฐาน (normalisation condition) ซึ่งเขียนได้เป็น

$$\langle\Psi|\Psi\rangle = 1 \tag{1.21}$$

หมายเหตุ : สัญกรณ์นี้ใช้กับฟังก์ชันคลื่นในปริภูมิโมเมนตัมได้ด้วย ตัวอย่างเช่นเขียนเป็นแบบ $\langle\Phi|\Phi\rangle = 1$

แบบฝึกหัด

1.1 ให้พิสูจน์สมการ (1.17)

1.2 ให้พิสูจน์สมการ (1.18)

1.3 ให้พิสูจน์สมการ (1.19)

1.4 ให้พิสูจน์ว่า $\int(\Psi_1+\Psi_2)^*(\Phi_1+\Phi_2)d\mathbf{r} = \langle\Psi_1|\Phi_1\rangle + \langle\Psi_1|\Phi_2\rangle + \langle\Psi_2|\Phi_1\rangle + \langle\Psi_2|\Phi_2\rangle$

1.5 ให้เขียนสมการของเวกเตอร์สถานะ f, g ,... ดังนี้ไปเรื่อย ๆ ในแบบสัญกรณ์ดิแรก

(a) $f(\mathbf{r}) = g(\mathbf{r})$

(b) $c = \int g^*(\mathbf{r}')h(\mathbf{r}')d\mathbf{r}'$

(c) $f(\mathbf{r}) = \sum_n \varphi_n(\mathbf{r}) \int \varphi_n^*(\mathbf{r}') f(\mathbf{r}')d\mathbf{r}'$

(d) $O \equiv \psi(\mathbf{r}) \int d\mathbf{r}' \varphi^*(\mathbf{r}')$

(e) $\dfrac{\partial}{\partial r} f(\mathbf{r}) = h(\mathbf{r}) \int h^*(\mathbf{r}')g(\mathbf{r}')d\mathbf{r}'$

1.6 พิจารณาตัวดำเนินการ $O = |\varphi\rangle\langle\psi|$ และฟังก์ชันสถานะที่กำหนดขึ้นมา $f(\mathbf{r})$ ให้อธิบายรูปแบบต่อไปนี้

(a) $\langle f|O$

(b) $O|f\rangle$

(c) $\langle f|O|f\rangle$

(d) $\langle f|O|\varphi\rangle$

ตัวอย่างคำตอบของข้อ (a) $\langle f|O$ คือบรา $c\langle\psi|$ เมื่อค่าคงตัว $c \equiv \langle f|\varphi\rangle = \int f^* \varphi d\mathbf{r}$

บรรณานุกรม

1. Ballentine, L. E. (1998) *Quantum Mechanics : A Modern Development.* World Scientific, Massachusetts.

2. Bransden, B. H. and Joachain, C. J. (2000) *Quantum Mechanics.* Pearson Education, 2nd Edn, London.

3. Dirac, P. A. (1958) *The Principles of Quantum Mechanics*, 4th Edn. Oxford University Press, New York.

4. Liboff, R. L. (1997) *Introductory Quantum Mechanics* , 3nd Edn. Addison – Wesley, Massachusetts.

5. Townsend, J. S. (1992) *A Modern Approach to Quantum Mechanics*. McGraw-Hill, New York.

ตอนที่ 2

ตัวแปรเชิงพลวัตและตัวดำเนินการ

(Dynamical Variable and Operator)

เนื่องจากในวิชากลศาสตร์คลื่น (wave mechanics) เราพบว่าแต่ละตัวแปรเชิงพลวัต มีความเกี่ยวพันกับตัวดำเนินการ (operator) เราจึงสร้างสัจพจน์ใหม่ขึ้นมา ดังต่อไปนี้

สัจพจน์ 3

ตัวแปรเชิงพลวัตทุกตัวแปร มีความเกี่ยวโยงกับตัวดำเนินการเชิงเส้น (linear operator)

คำว่าตัวดำเนินการเชิงเส้นจะดูได้จากสมบัติดังต่อไปนี้ ตัวดำเนินการ A จะเรียกว่าเป็นตัวดำเนินการเชิงเส้น ถ้าหากมีสมบัติดังต่อไปนี้

$$A(c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2) = c_1(A\Psi_1) + c_2(A\Psi_2) \tag{2.1}$$

เมื่อ Ψ_1 และ Ψ_2 เป็นสองฟังก์ชัน, c_1 และ c_2 เป็นค่าคงตัวเชิงซ้อน

ในรูปแบบนัยทั่วไป ถ้าระบบเชิงพลวัตอธิบายได้โดยฟังก์ชันคลื่น $\Psi(\mathbf{r}_1,\ldots,\mathbf{r}_N,t)$ ในปริภูมิโครงแบบ ความเกี่ยวโยงระหว่างตัวแปรเชิงพลวัต $\mathcal{A} = A(\mathbf{r}_1,\ldots,\mathbf{r}_N,\mathbf{p}_1,\ldots,\mathbf{p}_N,t)$ กับตัวดำเนินการเชิงเส้น

$$A(\mathbf{r}_1,\ldots,\mathbf{r}_N,-i\hbar\nabla_1,\ldots,-i\hbar\nabla_N,t) \tag{2.2}$$

จะทำได้ด้วยการแทน $\mathbf{p}_i \to -i\hbar\nabla_i$ ($i = 1,2,\ldots,N$) ลงในโมเมนตัม $\mathbf{p}_i$ ในทางตรงข้าม ถ้าระบบเชิงพลวัตอธิบายได้โดยฟังก์ชันคลื่น $\Phi(\mathrm{p}_1,\ldots,\mathrm{p}_N,t)$ ในปริภูมิโมเมนตัม ความเกี่ยวโยงระหว่างตัวแปรเชิงพลวัต $\mathcal{A} = A(\mathbf{r}_1,\ldots,\mathbf{r}_N,\mathbf{p}_1,\ldots,\mathbf{p}_N,t)$ กับตัวดำเนินการเชิงเส้น

$$A(i\hbar\nabla_{\mathbf{p}_1},\ldots,i\hbar\nabla_{\mathbf{p}_N},\mathbf{p}_1,\ldots,\mathbf{p}_N,t) \tag{2.3}$$

ก็หาได้ด้วยการแทน $\mathbf{r}_i \rightarrow i\hbar\nabla_i$ ($i=1,2,\ldots,N$) ลงในเวกเตอร์ตำแหน่ง $\mathbf{r}_i$ ซึ่งกฎสำหรับหาความเกี่ยวพันของตัวแปรเชิงพลวัตกับตัวดำเนินการเชิงเส้นนี้ เรียกว่ากฎการแทน (substitution rule)

ค่าเฉพาะและฟังก์ชันเฉพาะ (Eigenvalue and Eigenfunction)

ถ้าหากว่าดำเนินการบนฟังก์ชัน ψ_n ด้วยตัวดำเนินการ A แล้ว ได้เป็นผลลัพธ์เป็นการคูณของ ψ_n ด้วยตัวเลข a_n ดังสมการ

$$A\psi_n = a_n\psi_n \tag{2.4}$$

ก็จะกล่าวได้ว่า ψ_n เป็นฟังก์ชันเฉพาะ (eigenfunction) ของตัวดำเนินการ A และ a_n เป็นค่าเฉพาะ (eigenvalue) ของตัวดำเนินการ A

สัจพจน์ 4

ผลลัพธ์ของการวัดที่แน่นอนของตัวแปรเชิงพลวัต $\mathcal{A}$ จะได้เป็นค่าหนึ่งที่อยู่ในค่าเฉพาะ a_n ของตัวดำเนินการเชิงเส้น A ที่เกี่ยวโยงกับอยู่กับ $\mathcal{A}$

ค่าเฉพาะของตัวดำเนินการ A ทั้งหมด จะเรียกว่าเป็นสเปกตรัม (spectrum) ของ A เนื่องจากผลลัพธ์ของการวัดได้ค่าเป็นจำนวนจริง (real number) จึงมีผลทำให้สเปกตรัมจะต้องเป็นจำนวนจริงด้วย ในบางกรณีสเปกตรัมของตัวดำเนินการจะประกอบไปด้วยค่าเฉพาะที่ไม่ต่อเนื่องเท่านั้น บางกรณีก็จะประกอบไปด้วยค่าเฉพาะที่ต่อเนื่อง บางกรณีก็จะประกอบไปด้วยค่าเฉพาะทั้งสองแบบ หรือเป็นการผสมของทั้งสองแบบ

ตัวดำเนินการเฮอร์มิเทียน (Hermitian operator)

ต่อไปนี้เราจะอภิปรายถึงข้อกำหนด ที่จะทำให้ตัวดำเนินการของตัวแปรเชิงพลวัตจะต้องมีค่าเฉพาะเป็นจำนวนจริง

ตัวดำเนินการ A จะถูกเรียกได้ว่าเป็นตัวดำเนินการเฮอร์มิเทียน (Hermitian operator) ถ้าหากว่าเป็นไปตามนิยามซึ่งอยู่ในรูปเงื่อนไขต่อไปนี้

$$\langle \mathrm{X}|(A\Psi)\rangle = \langle (A\mathrm{X})|\Psi\rangle \tag{2.5}$$

เมื่อ Ψ และ X เป็นฟังก์ชันที่เมื่อยกกำลังสองแล้วสามารถหาปริพันธ์ได้ และถ้า $\Psi = \mathrm{X}$ ก็จะได้ว่า

$$\langle \Psi|(A\Psi)\rangle = \langle (A\Psi)|\Psi\rangle \tag{2.6}$$

แม้ว่านิยามตามสมการ (2.5) จะดูเป็นนัยทั่วไปมากกว่าสมการ (2.6) แต่ความจริงแล้วทั้งสองสมการสมมูล (equivalent) กัน สมาชิกเมทริกซ์ (matrix element) $\langle \mathrm{X}|(A\Psi)\rangle$ ปรกติจะเขียนในแบบสัญกรณ์ดิแรก เป็น

$$\langle \mathrm{X}|(A\Psi)\rangle \equiv \langle \mathrm{X}|A|\Psi\rangle \tag{2.7}$$

และจากสมการ (2.6) เราจะเห็นว่า ถ้า A เป็นเฮอร์มิเทียน สมาชิกเมทริกซ์ $\langle \Psi|A|\Psi\rangle$ จะเป็นจำนวนจริง

ถ้า ψ_n เป็นฟังก์ชันเฉพาะของตัวดำเนินการ A ที่สอดคล้องกับค่าเฉพาะ a_n แล้ว จากสมการ (2.4) เราก็จะได้เป็น

$$\langle \psi_n|A|\psi_n\rangle = a_n\langle \psi_n|\psi_n\rangle \tag{2.8}$$

ยังมีอีกว่า เนื่องจาก

$$(A\psi_n)^* = a_n^*\psi_n^* \tag{2.9}$$

และยังมีอีกด้วยว่า

$$\langle (A\psi_n)|\psi_n\rangle = a_n^*\langle \psi_n|\psi_n\rangle \tag{2.10}$$

ถ้า A เป็นเฮอร์มิเทียนแล้ว ส่วนทางซ้ายมือของสมการ (2.8) และ (2.10) จะต้องเท่ากัน ดังนั้น $a_n = a_n^*$ ซึ่งก็คือจะได้ค่าเฉพาะ a_n เป็นจำนวนจริง เพราะฉะนั้นเงื่อนไขของการเป็นเฮอร์มิเทียนเพียงเท่านี้ก็เพียงพอ (แต่ไม่จำเป็น) ที่จะทำให้ค่าเฉพาะเป็นจำนวนจริง ซึ่งนับต่อแต่นี้ไป ตัวดำเนินการเชิงเส้น A ที่เกี่ยวโยงกับตัวแปรเชิงพลวัต $\mathcal{A}$ จะต้องทำให้เป็นเฮอร์มิเทียนทั้งหมด

สัจพจน์ 5

ถ้าหากการวัดตัวแปรเชิงพลวัตร A กระทำอย่างต่อเนื่องแบบอนุกรมบนชุดของระบบที่อธิบายด้วยฟังก์ชันคลื่น Ψ แล้ว ค่าคาดหมาย (expectation value) หรือค่าเฉลี่ยของตัวแปรเชิงพลวัตของระบบนี้ จะเป็น

$$\langle A \rangle = \frac{\langle \Psi | A | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \tag{2.11}$$

เนื่องจากว่า A เป็นเฮอร์มิเทียน ส่งผลให้ $\langle A \rangle$ เป็นจำนวนจริง ถ้าฟังก์ชันคลื่นถูกทำให้เป็นบรรทัดฐานกับหนึ่ง แล้วก็จะได้ว่า $\langle \Psi | \Psi \rangle = 1$ และสมการ (2.11) ก็จะเป็น

$$\langle A \rangle = \langle \Psi | A | \Psi \rangle \tag{2.12}$$

ขอย้ำในที่นี้ว่า $\langle A \rangle$ ไม่ใช่ค่าเฉลี่ยของการแจกแจงในเชิงสถิติแบบฉบับของตัวแปรเชิงพลวัต A ระหว่างระบบที่วัดได้ ทุกระบบที่เหมือนกันและอยู่ในสถานะเดียวกันจะอธิบายด้วยฟังก์ชันคลื่น Ψ ค่าแท้จริงของ A ที่หาได้ในการทดลองบนระบบเดี่ยวไม่อาจทำนายได้ (เว้นแต่ Ψ เป็นฟังก์ชันเฉพาะของ A) เพราะว่า Ψ จะบรรจุสารสนเทศของระบบไว้มากที่สุดเท่าที่จะเป็นไปได้ ดังนั้นจึงไม่มีทางที่จะระบุสถานะได้อย่างบริบูรณ์ไปกว่าการใช้ A ระบุ

ตัวดำเนินการผูกพัน (Adjoint operator)

จะขอแนะนำตัวดำเนินการผูกพัน (adjoint operator) ที่มีประโยชน์ ตัวดำเนินการ $A^\dagger$

จะเรียกว่าเป็น "ผูกพัน (adjoint)" หรือสังยุคเฮอร์มิเทียน (Hermitian conjugate) ของตัวดำเนินการเชิงเส้น A โดยความสัมพันธ์

$$\begin{aligned}\langle \mathrm{X}|A^{\dagger}|\Psi\rangle &= \langle (A\mathrm{X})|\Psi\rangle \\ &= \langle \Psi|A|\mathrm{X}\rangle^{*}\end{aligned} \tag{2.13}$$

เมื่อ X และ Ψ เป็นฟังก์ชันคลื่นที่หาปริพันธ์ได้ในเชิงยกกำลังสอง

ถ้าเราจะนิยามบรา $\langle\Phi|$ โดยความสัมพันธ์

$$\langle\Phi| = \langle \mathrm{X}|A^{\dagger} \tag{2.14}$$

เมื่อตัวดำเนินการ $A^{\dagger}$ กระทำที่ด้านซ้ายมือของ บรา $\langle \mathrm{X}|$ ดังนั้นตามสมการ (2.13) ความสัมพันธ์ของ เคท $|\Phi\rangle$ และ $|\mathrm{X}\rangle$ จะเป็น

$$|\Phi\rangle = A|\mathrm{X}\rangle \tag{2.15}$$

ตัวดำเนินการเชิงเส้น A ที่สอดคล้องกับ

$$A = A^{\dagger} \tag{2.16}$$

จะกล่าวว่าเป็นผูกพันในตัว (self - adjoint) และจากสมการ (2.5) เราจะเห็นว่าตัวดำเนินการผูกพันในตัว (self-adjoint operator) เป็นเฮอร์มิเทียน ตัวดำเนินการผูกพันจะอยู่ในรูปสังยุคเชิงซ้อน (complex conjugate) ของตัวดำเนินการ และตัวดำเนินการผูกพันในตัว (self – adjoint operator) เป็นตัวดำเนินการจะอยู่ในรูปจำนวนจริง เราอยากจะหมายเหตุในที่นี้ด้วยว่า ตัวดำเนินการ $A^{\dagger}$ โดยทั่วไปจะไม่เท่ากับตัวดำเนินการ A^{*} (ที่ได้มาจากแทน ทุกค่า i ที่ปรากฏด้วย $-i$) ตัวอย่างเช่น ตัวดำเนินการปริภูมิโครงร่าง $p_x = -i\hbar\partial/\partial x$ เนื่องจากมันเป็นเฮอร์มิเทียน ดังนั้น $p_x^{\dagger} = p_x$ แต่ขณะเดียวกัน $p_x^{*} = i\hbar\partial/\partial x = -p_x$ ดังนั้น $p_x^{\dagger} \neq p_x^{*}$

สมบัติที่สำคัญ 3 ประการ ของตัวดำเนินการผูกพันคือ

$$(cA)^{\dagger} = c^{*}A^{\dagger} \tag{2.17}$$

เมื่อ c เป็นจำนวนเชิงซ้อน

$$(A+B)^{\dagger} = A^{\dagger} + B^{\dagger} \tag{2.18}$$

และ

$$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger \tag{2.19}$$

ฟังก์ชันของตัวดำเนินการ (Functions of Operator)

ถ้าฟังก์ชัน $f(z)$ สามารถกระจายเป็นอนุกรมกำลัง (power series) ได้ คือ

$$f(z) = \sum_{l=0}^{\infty} c_i z^i \tag{2.20}$$

แล้วฟังก์ชันตัวดำเนินการ $f(A)$ ก็จะให้นิยามได้เป็น

$$f(A) = \sum_{l=0}^{\infty} c_i A^i \tag{2.21}$$

ถัดมา ถ้า ψ_n เป็นสถานะฟังก์ชันหนึ่งของตัวดำเนินการ A ที่สมนัยกับค่าเฉพาะ a_n ดังสมการ $A^i\psi_n = (a_n)^i \psi_n$ แล้ว เราก็จะเขียนได้อีกว่า

$$f(A)\psi_n = f(a_n)\psi_n \tag{2.22}$$

ตัวดำเนินการผูกพันกับ $f(A)$ สามารถหาได้ดังต่อไปนี้ โดยใช้สมการ (2.17) – (2.19)

$$\begin{aligned}\left[f(A)\right]^\dagger &= \sum_{l=0}^{\infty} c_i^* (A^i)^\dagger = \sum_{l=0}^{\infty} c_i^* (A^\dagger)^i \\ &= f^*(A^\dagger)\end{aligned} \tag{2.23}$$

โดยเฉพาะอย่างยิ่ง ถ้า A เป็นดำเนินการในตัว เราจะได้ว่า

$$[f(A)]^\dagger = f^*(A) \tag{2.24}$$

ตัวดำเนินการผกผันและตัวดำเนินการยูนิแทรี (Inverse and Unitary Operator)

ตัวดำเนินการหนึ่งหน่วย (unit operator) I เป็นตัวดำเนินการที่เมื่อดำเนินการบนฟังก์ชันใดแล้ว จะเหลือเป็นฟังก์ชันเดิม โดยไม่เปลี่ยนแปลง คือ

$$I\Psi = \Psi \tag{2.25}$$

ถ้ากำหนดตัวดำเนินการ A ขึ้นมา และมีตัวดำเนินการอื่น B อยู่ด้วย และเป็นตามต่อไปนี้

$$BA = AB = I \tag{2.26}$$

แล้วจะกล่าวได้ว่า B ผกผัน (inverse) กับ A หรือเขียนได้อีกแบบหนึ่งว่า

$$B = A^{-1} \tag{2.27}$$

ตัวดำเนินการเชิงเส้น U จะเรียกว่าเป็นยูนิแทรี (unitary) ถ้า

$$U^{-1} = U^{\dagger} \tag{2.28a}$$

หรือ

$$UU^{\dagger} = U^{\dagger}U = I \tag{2.28b}$$

ตัวดำเนินการเช่นนี้ อาจมีนิพจน์อยู่ในรูปแบบ

$$U = e^{iA} \tag{2.29}$$

เมื่อ A เป็นเฮอร์มิเทียน เมื่อใช้สมการ (2.23) เข้าด้วยแล้ว ก็จะเห็นได้ยิ่งขึ้นว่า

$$U^{\dagger} = (e^{iA})^{\dagger} = e^{-iA} \tag{2.30}$$

ซึ่งเป็นไปตามสมการ (2.28b)

ตัวดำเนินการภาพฉาย (Projection Operator)

ตัวดำเนินการ Λ จะเรียกว่าเป็นนิจพล (idempotent) ถ้า

$$\Lambda^2 = \Lambda \tag{2.31}$$

แถมถ้า Λ เป็นเฮอร์มิเทียนอีกด้วย เราก็จะเรียกมันว่าเป็นตัวดำเนินการภาพฉาย (projection operator)

ฟังก์ชันใด ๆ Ψ อาจกำหนดให้อยู่ในพจน์ของสองฟังก์ชัน Φ และ X ที่อยู่ในเชิงตั้งฉากกันอยู่โดยช่องทางของตัวดำเนินการภาพฉาย ดังจะเห็นดังต่อไปนี้ เริ่มต้นด้วยการเขียน

$$\Psi = \Phi + X \tag{2.32}$$

โดย $\Phi = \Lambda\Psi$ และ $X = (I - \Lambda)\Psi$ คราวนี้ผลคูณเชิงสเกลาร์ของมัน

$$\begin{aligned} \langle \Phi | \Psi \rangle &= \langle \Lambda\Psi | (I-\Lambda)\Psi \rangle \\ &= \langle \Psi | (\Lambda - \Lambda^2) | \Psi \rangle \\ &= 0 \end{aligned} \tag{2.33}$$

เมื่อบรรทัดที่สอง เราใช้ความจริงที่ว่า Λ เป็นเฮอร์มิเทียน และในบรรทัดที่สามเราใช้สมการ (2.31) มาช่วย ขอบันทึกในที่นี้ว่า $(I - \Lambda)$ เป็นตัวดำเนินการภาพฉายด้วยเช่นกัน เพราะมันเป็นเฮอร์มิเทียน และ

$$\begin{aligned} (I-\Lambda)^2 &= I - 2\Lambda + \Lambda^2 \\ &= I - \Lambda \end{aligned} \tag{2.34}$$

แบบฝึกหัด

2.1 ตัวดำเนินการ $A_i (i = 1, \ldots, 6)$ นิยามตามต่อไปนี้

$$A_1\psi(x) = [\psi(x)]^2 \qquad A_4\psi(x) = x^2\psi(x)$$

$$A_2\psi(x) = \frac{d}{dx}\psi(x) \qquad A_5\psi(x) = \sin[\psi(x)]$$

$$A_3\psi(x) = \int_a^x \psi(x')dx' \qquad A_6\psi(x) = \frac{d^2}{dx^2}\psi(x)$$

ตัวดำเนินการ A_i ใดเป็นตัวดำเนินการเชิงเส้น ? และเป็นตัวดำเนินการใดเป็นเฮอร์มิเทียน ?

2.2 เมื่อกำหนดนิพจน์ของฟังก์ชันคลื่น Ψ ให้อยู่ในรูปแบบ $\Psi = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$ เมื่อคู่ของ Ψ_1 และ Ψ_2 เป็นฟังก์ชันยกกำลังสองแล้วหาปริพันธ์ได้ และ c_1, c_2 เป็นค่าคงตัวเชิงซ้อน ให้ใช้บทนิยามของความเป็นเฮอร์มิเทียน (Definition of Hermicity) ตามสมการ

$$\int \Psi^* A\Psi d\mathbf{r} = \int (A\Psi)^* \Psi d\mathbf{r}$$

แสดงให้เห็นว่า

$$\int \Psi_1^* A\Psi_2 d\mathbf{r} = \int (A\Psi_1)^* \Psi_2 d\mathbf{r}$$

เหมือนกันกับบทนิยามนัยทั่วไปของความเป็นเฮอร์มิเทียน ในสมการ (2.5)

2.3 ถ้า A และ B ต่างก็เป็นตัวดำเนินการเฮอร์มิเทียน (a) ให้แสดงว่า AB และ BA อาจจะไม่เป็นเฮอร์มิเทียน แต่ถ้า $AB+BA$ และ $i(AB+BA)$ แล้วทั้งสองจะเป็นเฮอร์มิเทียน (b) ให้พิสูจน์ว่าค่าคาดหมาย A^2 เป็นจำนวนจริงเสมอ และจะไม่เป็นลบ (c) ถ้า A^2 ให้หาค่าเฉพาะ (eigenvalue) ของ A

2.4 ให้พิสูจน์ว่า (a) ถ้า A เป็นตัวดำเนินการเชิงเส้น และ c เป็นจำนวนเชิงซ้อนแล้ว

$$(cA)^\dagger = c^* A^\dagger$$

(b) ถ้า A และ B เป็นตัวดำเนินการเชิงเส้นแล้ว

$$(A+B)^\dagger = A^\dagger + B^\dagger, \quad \text{และ} \quad (AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$$

บรรณานุกรม

1. Ballentine, L. E. (1998) *Quantum Mechanics : A Modern Development*. World Scientific, Massachusetts.

2. Bransden, B. H. and Joachain, C. J. (2000) *Quantum Mechanics*. Pearson Education, 2nd Edn, London.

3. Dirac, P. A. (1958) *The Principles of Quantum Mechanics*, 4th Edn. Oxford University Press, New York.

4. Liboff, R. L. (1997) *Introductory Quantum Mechanics* , 3nd Edn. Addison – Wesley, Massachusetts.

5. Townsend, J. S. (1992) *A Modern Approach to Quantum Mechanics*. McGraw-Hill, New York.

ตอนที่ 3

ขยายความฟังก์ชันเฉพาะ

(Expansions in Eigenfunctions)

เราจะศึกษารายละเอียดของสมบัติของผลเฉลยของค่าเฉพาะให้มากยิ่งขึ้น เราจะสมมุติว่าในสมการ (2.4) ตัวดำเนินการ A เป็นเชิงเส้น และเป็นตัวดำเนินการเป็นเฮอร์มิเทียน ดังนั้นค่าเฉพาะ a_n จะเป็นจำนวนจริง ในลำดับแรกของการพิจารณา จะพิจารณาในกรณีที่ฟังก์ชันเฉพาะเป็นฟังก์ชันที่หาปริพันธ์ได้ในเชิงยกกำลังสอง ดังนั้นจึงทำให้เป็นบรรทัดฐานกับหนึ่งได้

$$\langle \psi_n | \psi_n \rangle = 1 \tag{3.1}$$

ภาวะเชิงตั้งฉาก (Orthogonality)

ถ้า ψ_i และ ψ_j เป็นสองฟังก์ชันเฉพาะที่สมนัยกับค่าเฉพาะ a_i และ a_j แล้ว

$$A\psi_i = a_i \psi_i \tag{3.2}$$

และ

$$A\psi_j = a_j \psi_j \tag{3.3}$$

ดังนั้น

$$\begin{aligned}(a_i - a_j)\langle \psi_i | \psi_j \rangle &= \langle a_i \psi_i | \psi_j \rangle - \langle \psi_i | a_j \psi_j \rangle \\ &= \langle A\psi_i | \psi_j \rangle - \langle \psi_i | A\psi_j \rangle \\ &= 0\end{aligned} \tag{3.4}$$

ซึ่งการที่ด้านขวามือของสมการ (3.4) เป็นศูนย์ได้เพราะ A เป็นเฮอร์มิเทียน แต่เมื่อพิจารณาทางด้านซ้ายมือ เนื่องจาก $a_i \neq a_j$ ดังนั้นจะต้อง

$$\langle \psi_i | \psi_j \rangle = 0, \qquad i \neq j \tag{3.5}$$

ดังนั้นฟังก์ชันเฉพาะ ตามแต่ละค่าเฉพาะ จะเป็นเชิงตั้งฉากกัน

สภาพซ้อนสถานะ (Degeneracy)

ค่าเฉพาะ a_n จะเรียกว่าเป็นสภาพซ้อนสถานะ (degeneracy) ถ้าหากฟังก์ชันเฉพาะอิสระอย่างเชิงเส้น (linearly independent eigenfunction) ของค่าเฉพาะนั้นมีมากกว่าหนึ่งฟังก์ชัน และระดับขั้นของสภาพซ้อนสถานะ (degree of degeneracy) ก็จะเป็นจำนวนของฟังก์ชันเฉพาะเหล่านั้น

สมมุติว่า α เป็นระดับของสภาพซ้อนสถานะของค่าเฉพาะ a_n ดังนั้นจึงใส่ฉลากให้กับฟังก์ชันเฉพาะเป็น ψ_{nr} (โดย $r = 1, 2, ..., \alpha$) และ

$$A\psi_{nr} = a_n \psi_{nr}, \qquad r = 1, 2, ..., \alpha \tag{3.6}$$

จากการใช้วิธีการทำให้อยู่ในเชิงตั้งฉากของชมิดต์ (Schmidt orthogonalisation procedure) เราสามารถจัดให้ฟังก์ชันเฉพาะ ψ_{nr} เป็นเชิงตั้งฉากร่วมกัน และแต่ละฟังก์ชันสามารถทำให้เป็นบรรทัดฐานกับหนึ่งได้ด้วย โดยเขียนให้ฟังก์ชันเฉพาะให้สอดคล้องกับความสัมพันธ์ภาวะเชิงตั้งฉากปรกติ (orthonormality relation)

$$\langle \psi_{ir} | \psi_{js} \rangle = \delta_{ij} \delta_{rs} \tag{3.7}$$

เมื่อ δ_{mn} เป็นสัญลักษณ์โครเนคเคอร์เดลตา (Kronecker delta symbol)

$$\delta_{mn} = \begin{cases} 1, & m = n \\ 0, & m \neq n \end{cases} \tag{3.8}$$

เพื่อหลีกเลี่ยงดัชนีล่างที่รกรุงรัง (เว้นแต่จำเป็นต้องแยกแยะให้เห็นเด่นชัดถึงการเป็นไปตามค่าเฉพาะของฟังก์ชันเฉพาะ) ดังนั้นเราจะใส่ดัชนีของฟังก์ชันเฉพาะให้เป็นดัชนีเดี่ยว เป็น

$$\langle \psi_m | \psi_n \rangle = \delta_{mn} \tag{3.9}$$

สัจพจน์ 6

ฟังก์ชันคลื่นที่เป็นตัวแทนสถานะเชิงพลวัตใด ๆ สามารถกำหนดให้มีนิพจน์เป็นแบบการรวมเชิงเส้น (linear combination) ของฟังก์ชันเฉพาะของ A เมื่อ A เป็นตัวดำเนินการที่สอดคล้องกับตัวแปรเชิงพลวัต

สำหรับกรณีของค่าเฉพาะเป็นค่าเฉพาะวิยุตแท้ (purely discrete eigenvalue) ซึ่งเราจะพิจารณาเป็นลำดับแรก เรามีว่า

$$\Psi = \sum_n c_n \psi_n \tag{3.10}$$

จำนวนฟังก์ชันเฉพาะในเซต (set) $\{\psi_n\}$ บางกรณีมีจำนวนอันตะ บางกรณีมีจำนวนอนันต์ เพราะว่าฟังก์ชันคลื่นทั้งหมดสามารถขยายอยู่ในเซตของฟังก์ชันเฉพาะ $\{\psi_n\}$ ได้ เราจึงเรียกเซต $\{\psi_n\}$ ว่า **บริบูรณ์ (complete)** หรือเซตบริบูรณ์ (complete set) ความบริบูรณ์(completeness) ของเซตสามารถพิสูจน์ได้ แต่โดยทั่วไปจะให้เป็นสัจพจน์ ดังที่กล่าวมาข้างต้น

สัมประสิทธิ์ (coefficient) ของการกระจายในสมการ (3.10) สามารถหาได้โดยใช้ความสัมพันธ์ภาวะเชิงตั้งฉากปรกติ (orthonormality relation) ตามสมการ (3.9) จากสมการ (3.10) เมื่อเอาฟังก์ชันเฉพาะ ψ_n คูณเชิงสเกลาร์เข้ากับทั้งสองด้านของสมการ (3.10) จะได้

$$\begin{aligned} \langle \psi_m | \Psi \rangle &= \sum_n c_n \langle \psi_m | \psi_n \rangle \\ &= \sum_n c_n \delta_{mn} \\ &= c_m \end{aligned} \tag{3.11}$$

แสดงให้เห็นมากยิ่งขึ้นอีก ในกรณีระบบหนึ่งอนุภาค เรามี

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{r},t) &= \sum_n \Big[\int \psi_n^*(\mathbf{r}')\Psi(\mathbf{r}',t)\mathrm{d}\mathbf{r}' \Big] \psi_n(\mathbf{r}) \\ &= \int \Big[\sum_n \psi_n^*(\mathbf{r}')\psi_n(\mathbf{r}) \Big] \Psi(\mathbf{r}',t)\mathrm{d}\mathbf{r}' \end{aligned} \tag{3.12}$$

และดังนั้น

$$\sum_n \psi_n^*(\mathbf{r}')\psi_n(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \tag{3.13}$$

เมื่อเอาสมบัติของดิแรกเดลตาฟังก์ชัน (Dirac delta function) มาใช้ด้วย สมการ (3.13) จะเรียกว่า ความสัมพันธ์การปิด (closure relation) โดยสมการนี้อยู่ในรูปแบบความบริบูรณ์ของเซต $\{\psi_n\}$ และอาจทำให้ความสัมพันธ์นี้อยู่ในรูปแบบนัยทั่วไปกับระบบ N อนุภาค ได้เป็น

$$\sum_n \psi_n^*(\mathbf{r}_1',\ldots,\mathbf{r}_N')\psi_n(\mathbf{r}_1,\ldots,\mathbf{r}_N) = \delta(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_1'),\ldots,\delta(\mathbf{r}_N-\mathbf{r}_N') \tag{3.14}$$

ใช้ความสัมพันธ์การปิดในสมการ (3.13) เราจะเขียนผลคูณเชิงสเกลาร์ของสองฟังก์ชันคลื่นได้เป็น

$$\begin{aligned}\langle \mathrm{X}|\Psi\rangle &= \int \mathrm{X}^*(\mathbf{r},t)\Psi(\mathbf{r},t)d\mathbf{r}\\ &= \int \mathrm{X}^*(\mathbf{r},t)\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\Psi(\mathbf{r}',t)d\mathbf{r}d\mathbf{r}'\\ &= \sum_n \int \mathrm{X}^*(\mathbf{r},t)\psi_n(\mathbf{r})d\mathbf{r}\int \psi_n^*(\mathbf{r}')\Psi(\mathbf{r}',t)d\mathbf{r}'\\ &= \sum_n \langle \mathrm{X}|\psi_n\rangle\langle\psi_n|\Psi\rangle \end{aligned} \tag{3.15}$$

เมื่อเราพิจารณาในระบบหนึ่งอนุภาค เพราะจะทำให้ง่ายต่อการทำสัญกรณ์ ในสมการ (3.15) เราจะเห็นว่าความสัมพันธ์การปิดในแบบสัญกรณ์ดิแรกสามารถเขียนได้อย่างกระทัดรัดเป็น

$$\sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n| = I \tag{3.16}$$

เมื่อ I เป็นตัวดำเนินการหนึ่งหน่วย

แอมพลิจูดความน่าจะเป็น (Probability Amplitudes)

ในสถานะที่อธิบายโดยฟังก์ชันคลื่น ψ ที่เป็นบรรทัดฐานอยู่กับ 1 ค่าคาดหมายของปริมาณที่สังเกตได้ A กำหนดให้ด้วยสมการ (2.12) กระจาย Ψ ในเซตของฟังก์ชันเฉพาะเชิงตั้งฉากปรกติบริบูรณ์ $\{\psi_n\}$ ตามสมการ (3.10) รวมทั้งทำกับ ψ^* ด้วย

$$
\begin{aligned}
\langle A\rangle &= \langle\Psi|A|\Psi\rangle \\
&= \sum_m\sum_n c_m^* c_n \langle\psi_m|A|\psi_n\rangle \\
&= \sum_m\sum_n c_m^* c_n a_n \langle\psi_m|\psi_n\rangle \\
&= \sum_n |c_n|^2 a_n
\end{aligned}
\qquad (3.17)
$$

เมื่อความสัมพันธ์ภาวะเชิงตั้งฉากปรกติตามสมการ (3.9) ถูกนำใช้กับบรรทัดสุดท้าย แต่เนื่องจาก Ψ ถูกทำให้เป็นบรรทัดฐานกับ 1, $\langle\Psi|\Psi\rangle = 1$, เราจึงได้อีกว่า

$$\sum_n |c_n|^2 = 1 \qquad (3.18)$$

เมื่อพิจารณาถึงความจริงที่ว่าผลลัพธ์ของการวัด A จะเป็นค่าเฉพาะ a_n และด้วยเหตุที่ว่าค่าเฉลี่ยที่ได้จากอนุกรมของการวัดของระบบที่มีเหมือนกัน (อธิบายได้ด้วย Ψ เดียวกัน) และมีจำนวนมาก ก็คือค่าเฉพาะ $\langle A\rangle$ จึงเป็นเหตุผลที่ เอ็ม. บอร์น (M. Born) นำไปแปลความว่าได้ว่า

$$P_n = |c_n|^2 = |\langle\psi_n|\Psi\rangle|^2 \qquad (3.19)$$

เป็นความน่าจะเป็นของการได้ค่าเฉพาะ a_n (ในการวัดที่กำหนดให้) ด้วยเหตุนี้เงื่อนไขตามสมการ (3.18) จึงเป็นการแสดงให้เห็นว่า ความน่าจะเป็นของบางผลลัพธ์ของการวัด มีค่าเป็น 1 และสัมประสิทธิ์ $a_n = \langle\psi_{nr}|\Psi\rangle$ เรียกว่าแอมพลิจูดความน่าจะเป็น (probability amplitude)

จากผลลัพธ์ที่เราได้มาในข้างต้น เราจะใส่ดัชนีสภาพซ้อนสถานะให้ปรากฏรวมอยู่ด้วย ถ้าค่าเฉพาะ a_n คือการซ้อนสถานะ α ครั้ง และ $\psi_{nr}(r = 1,\ldots,\alpha)$ เป็นฟังก์ชันเฉพาะเชิงตั้งฉากปรกติที่สมนัยกัน สมการ (3.10) ก็จะถูกทำให้อยู่ในรูปการกระจายที่ชัดแจ้งขึ้นเป็น

$$\Psi = \sum_n\sum_{r=1}^{\alpha} c_{nr}\psi_{nr} \qquad (3.20)$$

กับ

$$c_{nr} = \langle\psi_{nr}|\Psi\rangle \qquad (3.21)$$

และนำมาใช้เปลี่ยนสมการ (3.17) ได้อย่างง่าย ๆ เป็น

$$\langle A\rangle = \sum_n\sum_{r=1}^{\alpha} |c_{nr}|^2 a_n \qquad (3.22)$$

ดังนั้นโอกาสของการได้ค่าเฉพาะ a_n ที่ได้จากการวัด A ที่เขียนในแบบมีสภาพซ้อนสถานะด้วยก็จะเป็น

$$P_n \doteq \sum_{r=1}^{\alpha} |c_{nr}|^2 = \sum_{r=1}^{\alpha} \left|\langle \psi_{nr} | \Psi \rangle\right|^2 \tag{3.23}$$

ภายหลังการวัดทีนำไปสู่การได้ค่า a_n ระบบก็จะถูกอธิบายด้วยฟังก์ชันคลื่น (ไม่ทำให้เป็นบรรทัดฐาน) คือ

$$\Psi_n = \sum_{r=1}^{\alpha} c_{nr}\psi_{nr} \tag{3.24}$$

และถ้าการวัดถูกทำซ้ำแล้วซ้ำเล่าติด ๆ กัน ก็จะได้ค่า a_n ที่มีความแน่นอน

สเปกตรัมต่อเนื่อง (Continuous Spectrum)

ที่ผ่านมา เราได้พิจารณามาเฉพาะในกรณีสิ่งที่สังเกตได้ A มีสเปกตรัมของค่าเฉพาะ a_n เป็นแบบสเปกตรัมวิยุต (discrete spectrum) หรือสเปกตรัมแบบไม่ต่อเนื่องกันเท่านั้น ซึ่งยังไม่เป็นแบบนัยทั่วไปเพียงพอ เราควรรวมเอากรณีที่สเปกตรัมของค่าเฉพาะเป็นแบบต่อเนื่อง (discrete spectrum) a เข้ามาไว้ด้วย

พิจารณาสิ่งที่สังเกตได้ A ที่สเปกตรัมทั้งหมดประกอบไปสเปกตรัมสองช่วง คือช่วงของสเปกตรัมที่ค่าเฉพาะเป็นแบบไม่ต่อเนื่อง a_n และช่วงของสเปกตรัมที่ค่าเฉพาะแบบต่อเนื่อง a และสอดคล้องกับฟังก์ชันเฉพาะ ψ_n และ ψ_a ตามลำดับ โดยเราจะไม่ใส่ดัชนีที่แสดงสภาพซ้อนสถานะเข้าไว้เพื่อให้ดูง่ายไม่ยุ่งเหยิง เพราะฉะนั้นเราจะได้ว่า

$$A\psi_n = a_n\psi_n, \qquad A\psi_a = a\psi_a \tag{3.25}$$

ค่าเฉพาะของสเปกตรัมต่อเนื่องก็จะต้องเป็นจำนวนจริง เหมือนกับที่ค่าเฉพาะของสเปกตรัมไม่ต่อเนื่องเป็น ฟังก์ชันเฉพาะไม่ต่อเนื่องก็จะต้องทำให้เป็นเชิงตั้งฉากปรกติดังเช่นที่ผ่านมา

ตามส่วนขยายของสัจพจน์ 6 ฟังก์ชันคลื่นที่กำหนดให้ Ψ จะต้องกระจายอยู่ในเซตบริบูรณ์ $\{\psi_n, \psi_a\}$ กล่าวคือ

$$\Psi = \sum_n c_n\psi_n + \int c(a)\psi_a \mathrm{d}a \tag{3.26}$$

เมื่อปริพันธ์ (integral) จะทำตลอดช่วงของ a กรณีที่ Ψ ถูกทำให้เป็นบรรทัดฐานกับหนึ่ง ค่าคาดหมายของสิ่งที่สังเกตได้ A ก็จะกำหนดให้ได้จากสมการ (2.12) และ (3.26)

$$
\begin{aligned}
\langle A\rangle &= \langle\Psi|A|\Psi\rangle \\
&= \sum_m\sum_n c_m^* c_n \langle\psi_m|A|\psi_n\rangle + \sum_m \int \mathrm{d}a\, c_m^* c(a)\langle\psi_m|A|\psi_a\rangle \\
&\quad + \sum_n \int \mathrm{d}a' c^*(a') c_n \langle\psi_{a'}|A|\psi_n\rangle + \int \mathrm{d}a \int \mathrm{d}a' c^*(a') c(a)\langle\psi_{a'}|A|\psi_a\rangle \\
&= \sum_m\sum_n c_m^* c_n a_n \langle\psi_m|\psi_n\rangle + \sum_m \int \mathrm{d}a\, c_m^* c(a) a \langle\psi_m|\psi_n\rangle \\
&\quad + \sum_n \int \mathrm{d}a' c^*(a') c_n a_n \langle\psi_{a'}|\psi_n\rangle \\
&\quad + \int \mathrm{d}a \int \mathrm{d}a' c^*(a') c(a) a \langle\psi_{a'}|\psi_a\rangle
\end{aligned}
\tag{3.27}
$$

การเขียนสมการสองบรรทัดสุดท้าย ใช้สมการ (3.25) มาช่วย

เพื่อคงคำแปลความของสัมประสิทธิ์ c_n และ $c(a)$ ให้เป็นแอมพลิจูดความน่าจะเป็นเอาไว้เอาไว้ เราจึงต้องใช้รูปแบบนัยทั่วไปของสมการ (3.17) มาใช้กับในกรณีด้วย

$$
\langle A\rangle = \sum_n |c_n|^2 a_n + \int |c(a)|^2 a\mathrm{d}a \tag{3.28}
$$

เปรียบเทียบสมการ (3.27) กับ (3.28) และนึกถึงว่า $\langle\psi_m|\psi_n\rangle = \delta_{mn}$ เราจะลงความเห็นได้ดังต่อไปนี้

(1) ฟังก์ชันเฉพาะทั้งหมดที่เป็นของสเปกตรัมต่อเนื่อง จะต้องเป็นเชิงตั้งฉากกับฟังก์ชันเฉพาะทั้งหมดที่เป็นของสเปกตรัมไม่ต่อเนื่องกัน

$$
\langle\psi_m|\psi_a\rangle = 0 \tag{3.29}
$$

(2) ฟังก์ชันเฉพาะทั้งหมดที่เป็นของสเปกตรัมต่อเนื่อง จะต้องสอดคล้องกับเงื่อนไขภาวะเชิงตั้งฉากปรกติ

$$
\langle\psi_{a'}|\psi_a\rangle = \delta(a-a') \tag{3.30}
$$

เมื่อใช้ผลลัพธ์เหล่านี้ร่วมกับสมการ (3.26) เราก็ได้ว่าสัมประสิทธิ์ c_n และ $c(a)$ ดังต่อไปนี้ตามลำดับ

$$
c_n = \langle\psi_n|\Psi\rangle, \qquad c(a) = \langle\psi_a|\Psi\rangle \tag{3.31}
$$

คราวนี้ความสัมพันธ์ปกปิดในสมการ (3.13) สำหรับระบบหนึ่งอนุภาค ก็จะอ่านได้เป็น

$$\sum_n \psi_n^*(\mathbf{r}')\psi_n(\mathbf{r}) + \int \psi_a^*(\mathbf{r}')\psi_a(\mathbf{r})\mathrm{d}a = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \tag{3.32}$$

และผลลัพธ์ที่สมนัยกันสำหรับระบบ N อนุภาคก็จะได้เป็น

$$\sum_n \psi_n^*(\mathbf{r}_1',...,\mathbf{r}_N')\psi_n(\mathbf{r}_1,...,\mathbf{r}_N) + \int \psi_a^*(\mathbf{r}_1',...,\mathbf{r}')\psi_a(\mathbf{r}_1,...,\mathbf{r}_N)\mathrm{d}a$$
$$= \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')...\delta(\mathbf{r}_N-\mathbf{r}_N') \tag{3.33}$$

ถ้าเราหยิบการทำบรรทัดฐานของเราทำกับกล่องขึ้นมาใช้งาน (ดังนั้นสเปกตรัมทั่วย่านจะเป็นแบบไม่ต่อเนื่องกัน) และกำหนดให้ฟังก์ชันเฉพาะที่เป็นบรรทัดฐาน ψ_i สมนัยกับค่าเฉพาะไม่ต่อเนื่อง $a_i (i=1,2,...)$ แล้ว ความเกี่ยวข้องกันระหว่างฟังก์ชันเฉพาะไม่ต่อเนื่อง ψ_i และฟังก์ชันเฉพาะต่อเนื่อง ψ_a ก็จะสามารถสร้างขึ้นได้ดังต่อนี้ สมมุติว่ากล่องสำหรับทำให้เป็นบรรทัดฐานมีขนาดใหญ่มาก ค่าเฉพาะ a_i จะอยู่กันอย่างหนาแน่น (หรือทึบ) มาก และค่าเฉพาะที่มีดัชนี i เหล่านี้จึงถือว่าได้ว่าเป็นตัวแปรต่อเนื่อง ดังนั้นถือว่า $i \equiv i(a)$ และขอแนะนำความหนาแน่นของสถานะ (density of state)

$$\rho(a) = \frac{\mathrm{d}i}{\mathrm{d}a} \tag{3.34}$$

ซึ่งเท่ากับจำนวนของสถานะไม่ต่อเนื่องที่อยู่ภายในช่วงหนึ่งหน่วยของ a เรามีว่า

$$\sum_i c_i\psi_i \to \int c_i\psi_i \mathrm{d}i = \int \rho(a)c_i\psi_i \mathrm{d}a \tag{3.35}$$

กำหนดว่า

$$\int \rho(a)c_i\psi_i \mathrm{d}a = \int c(a)\psi_a \mathrm{d}a \tag{3.36}$$

และยังกำหนดอีกด้วยว่า (จากความสัมพันธ์การปิด และ $\sum_i \to \int \rho(a)\mathrm{d}a$)

$$\int \rho(a)\psi_i^*(\mathbf{r}')\psi_i(\mathbf{r})\mathrm{d}a = \int \psi_a^*(\mathbf{r}')\psi_a(\mathbf{r})\mathrm{d}a \tag{3.37}$$

เราก็จะสามารถทำการระบุได้ว่า

$$\psi_a = [\rho(a)]^{1/2}\psi_i \tag{3.38}$$

และ

$$c_a = [\rho(a)]^{1/2} c_i \tag{3.39}$$

ซึ่งสูตรที่เขียนขึ้นจากวิธีทำให้เป็นบรรทัดฐานด้วยกล่องนี้ สามารถเปลี่ยนย้ายไปเป็นสูตรที่เขียนขึ้นจากการใช้วิธีทำให้เป็นบรรทัดฐานด้วยเดลตาฟังก์ชันได้

แบบฝึกหัด

3.1 พิจารณาอนุภาคอิสระมวล m เคลื่อนที่ใน 1 มิติ ดังนั้นแฮมิลทันเนียน (Hamiltonian) ของมันคือ $H = p_x^2 / 2m$ ให้แสดงว่าค่าเฉพาะ (eigenvalue) ของ H เป็นสภาพซ้อนสถานะแบบสองโฟลด์ (two- fold degeneracy) (หมายถึงมีสองระดับย่อยที่พับแล้วทับกันได้)

3.2 ให้แสดงว่าสภาพซ้อนสถานะตามข้อ 1 นั้น สามารถกำจัดได้โดยการพิจารณาฟังก์ชันเฉพาะหลายชั้น (simultaneous eigenfunction) ของ H และ p_x

บรรณานุกรม

1. Ballentine, L. E. (1998) *Quantum Mechanics : A Modern Development*. World Scientific, Massachusetts.

2. Bransden, B. H. and Joachain, C. J. (2000) *Quantum Mechanics*. Pearson Education, 2nd Edn, London.

3. Dirac, P. A. (1958) *The Principles of Quantum Mechanics*, 4th Edn. Oxford University Press, New York.

4. Liboff, R. L. (1997) *Introductory Quantum Mechanics* , 3nd Edn. Addison – Wesley, Massachusetts.

5. Townsend, J. S. (1992) *A Modern Approach to Quantum Mechanics*. McGraw-Hill, New York.

ตอนที่ 4

สิ่งที่สังเกตได้ที่สลับที่กันได้, สภาพใช้แทนกันได้, และความสัมพันธ์ความไม่แน่นอนของไฮเซนเบิร์ก (Commuting Observables, Compatibility and the Heisenberg Uncertainty Relation)

ตัวทำสลับที่ (commutator) ของสองตัวดำเนินการ A และ B นิยามเป็น

$$[A,B] = AB - BA \tag{4.1}$$

ถ้าตัวทำสลับที่กระทำกับฟังก์ชันคลื่นใด ๆ แล้วหายไป (ได้ผลลัพธ์เป็นศูนย์) ก็จะกล่าวว่าตัวดำเนินการ A และ B สลับที่ (commute) กันได้, $AB = BA$, คู่ของตัวดำเนินการที่เป็น "คู่มาตรฐาน" อยู่ในความสัมพันธ์การสลับที่พื้นฐาน ได้แก่ตัวดำเนินการของตัวแปรที่เป็นตำแหน่งและโมเมนตัมของอนุภาค ดังต่อไปนี้

$$[x, p_x] = [y, p_y] = [z, p_z] = i\hbar \tag{4.2}$$

ซึ่งสลับที่กันไม่ได้ (ผลลัพธ์ไม่เป็นศูนย์) ส่วนตัวดำเนินการคู่อื่น ๆ ทั้งหมด (ตัวอย่างเช่น y และ p_y) จะสลับที่กันได้ (ผลลัพธ์เป็นศูนย์) ถ้าระบบมีหลายอนุภาค และอนุภาคมีเวกเตอร์ตำแหน่ง $\mathbf{r}_i$ และโมเมนตัม $\mathbf{p}_i$ $(i = 1,2,\ldots,N)$ ก็จะเป็นที่ชัดเจนว่า ทุกตัวดำเนินการของอนุภาคตัวหนึ่งจะสลับที่กันได้กับทุกตัวดำเนินการของอนุภาคตัวอื่น ๆ ในคู่ของตัวดำเนินการ (x_1, y_1, z_1), $(x_2, y_2, z_2), \ldots,$ กับ (p_{1x}, p_{1y}, p_{1z}), $(p_{2x}, p_{2y}, p_{2z}), \ldots,$ คู่ที่สลับที่กันไม่ได้ก็มีเฉพาะคู่ของ **(x_i, p_{ix}), (x_i, p_{iy}) และ (x_i, p_{iz}) เท่านั้น สมการ (4.2) จึงปรับปรุงใหม่เป็น**

$$[x_i, p_{ix}] = [y_i, p_{iy}] = [z_i, p_{iz}] = i\hbar \qquad (i = 1,2,\ldots,N) \tag{4.3}$$

สิ่งที่สังเกตได้ที่สลับที่กันได้ (Commuting Observables)

เราสมมุติว่า A และ B ต่างก็เป็นสิ่งที่สังเกตได้ และถ้ามีเซตบริบูรณ์ของฟังก์ชัน ψ_n ที่แต่ละฟังก์ชันเป็นฟังก์ชันเฉพาะของ A และ B พร้อมกันแล้ว เราจะพูดว่าสิ่งที่สังเกตได้ A และ B เข้ากันได้ (compatible) (หรืออยู่ร่วมกันได้) และถ้าค่าเฉพาะของ A และ B ที่สมนัยกับฟังก์ชันเฉพาะ ψ_n มีค่าเป็น a_n และ b_n ตามลำดับแล้ว ก็จะเขียนว่า

$$A\psi_n = a_n\psi_n, \qquad B\psi_n = b_n\psi_n \tag{4.4}$$

ในสถานะที่อธิบายโดย ψ_n การวัด A จะก่อให้ได้ผลลัพธ์ที่แน่นอน (หมายถึงมีความเที่ยงตรงหรือแม่นยำ) เป็น a_n และการวัด B จะก่อให้ได้ผลลัพธ์ที่แน่นอนเป็น b_n การไม่ให้มีขีดจำกัดของความแน่นอนทำได้โดยการวัด A และ B ไปพร้อม ๆ กัน ตัวอย่างของสิ่งที่สังเกตได้ที่เข้ากันได้เช่นนั้นก็คือส่วนประกอบคาร์ทีเซียน (Cartesian component) x, y และ z ของเวกเตอร์ตำแหน่ง $\mathbf{r}$ ของอนุภาค และตัวอย่างอื่นก็คือส่วนประกอบคาร์ทีเซียน p_x, p_y และ p_z ของโมเมนตัม $\mathbf{p}$ ในทางตรงกันข้าม x และ p_x อยู่ร่วมกันไม่ได้ เพราะตามความสัมพันธ์ของความไม่แน่นอนแล้ว ปริมาณทั้งสองไม่สามารถวัดพร้อมกันเพื่อให้ผลการวัดมีความแน่นอนได้ ซึ่งถ้าจะกล่าวแบบนัยทั่วไปยิ่งขึ้น ก็กล่าวเป็นว่าสิ่งที่สังเกตได้ทั้งหลาย $A, B, C, \ldots$ เข้ากันได้ถ้าหากพวกมันเป็นเจ้าของเซตร่วม (common set) ของฟังก์ชันเฉพาะ ในกรณีนี้สิ่งที่สังเกตได้ทั้งหมดจะสามารถวัดพร้อมกันเพื่อให้ได้ผลลัพธ์ที่มีความแน่นอนได้

ถ้า A และ B เป็นสองสิ่งที่สังเกตได้ ที่เข้ากันได้ และ ψ_n เป็นฟังก์ชันเฉพาะร่วม (common eigenfunction) เราจะได้ว่า

$$\begin{aligned} AB\psi_n &= a_n b_n \psi_n \\ &= b_n a_n \psi_n \\ &= BA\psi_n \end{aligned} \tag{4.5}$$

เนื่องจาก Ψ สามารถกระจายอยู่ในเซตบริบูรณ์ของฟังก์ชันเฉพาะ จากสมการ (4.5) และใช้สมการ (3.10) ด้วย เราจะพบว่า

$$(AB - BA)\Psi = \sum_n c_n (AB - BA)\psi_n = 0 \tag{4.6}$$

ดังนั้น

$$[A,B]=0 \tag{4.7}$$

และสิ่งที่สังเกตได้ที่เข้าได้ A และ B สลับที่กันได้

เราจะพิสูจน์ย้อนกลับผลลัพธ์อันนี้ กล่าวคือ ถ้าสองตัวดำเนินการสลับที่กันได้ ก็จะเป็นเจ้าของเซตบริบูรณ์ของฟังก์ชันเฉพาะร่วม โดยจะพิจารณาในกรณีของค่าเฉพาะ a_n ไม่เป็น สภาวะเชิงซ้อนเป็นลำดับแรก ดังต่อไปนี้ ถ้าในขณะนั้น A และ B สลับที่กันได้ เราก็จะเขียนได้ว่า

$$A(B\psi_n)=BA\psi_n=a_n(B\psi_n) \tag{4.8}$$

และเพราะฉะนั้น $B\psi_n$ ก็จะเป็นฟังก์ชันเฉพาะของ A ที่ให้ค่าเฉพาะเป็น a_n เนื่องจากว่า a_n เป็นฟังก์ชันเฉพาะไม่เป็นสภาพซ้อนสถานะ (non-degenerate) $(B\psi_n)$ จึงแตกต่างจาก ψ_n เฉพาะค่าคงตัวการคูณซึ่งเราเรียกว่า b_n เท่านั้น

$$B\psi_n=b_n\psi_n \tag{4.9}$$

เพราะฉะนั้น เราจะเห็นว่า ψ_n เป็นฟังก์ชันเฉพาะของตัวดำเนินการ A และ B ไปพร้อมกันในเวลาเดียวกัน และให้ค่าเฉพาะเป็น a_n และ b_n ตามลำดับ

ทีนี้เราจะพิจารณาในกรณีที่ a_n เป็นค่าเฉพาะที่มีสภาพซ้อนสถานะ ของ A ที่มีระดับขั้นสภาพซ้อนสถานะเป็น α และสมนัยกับฟังก์ชันเฉพาะอิสระเชิงเส้น $\psi_{nr}\,(r=1,2,3,...,\alpha)$ เพราะว่า A และ B สลับที่กันได้ ดังนั้น $(B\psi_{nr})$ ก็จะเป็นฟังก์ชันเฉพาะของ A ที่เป็นของค่าเฉพาะ a_n ได้ด้วย เมื่อเป็นตามนี้ $(B\psi_n)$ ก็จะสามารถกระจายในพจน์ของฟังก์ชันเฉพาะเชิงเส้น $\psi_{n1},\psi_{n2},...,\psi_{n\alpha}$

$$B\psi_{nr}=\sum_{s=1}^{\alpha}c_{rs}\psi_{ns} \tag{4.10}$$

เมื่อ c_{rs} เป็นสัมประสิทธิ์การกระจาย (expansion coefficient) ถ้าเราทำให้ ψ_{nr} อยู่ในรูปจัดหมู่เชิงเส้นกับค่าคงตัว d_r จำนวน α จะได้ว่า

$$B\sum_{r=1}^{\alpha}d_r\psi_{nr}=\sum_{r=1}^{\alpha}\sum_{s=1}^{\alpha}d_rc_{rs}\psi_{ns} \tag{4.11}$$

$\sum_r d_r\psi_{nr}$ **จะเป็นฟังก์ชันเฉพาะของ B ที่เป็นของค่าเฉพาะ b_n เพราะฉะนั้นจะได้ว่า**

$$\sum_{r=1}^{\alpha} d_r c_{rs} = b_n d_s , \qquad s = 1, 2, ..., \alpha \tag{4.12}$$

นี้คือระบบของสมการเชิงเส้นเอกพันธุ์ (homogeneous linearly equation) จำนวน α สมการ กับค่าคงตัว d_r จำนวน α ค่า ระบบนี้จะมีผลเฉลยไม่ชัด (non-trivial solution) ถ้า

$$\det | c_{rs} - b_n \delta_{rs} | = 0 \tag{4.13}$$

เมื่อ det หมายถึงดีเทอร์มิแนนต์ (determinant) สมการนี้ก็คือสมการอันดับ α สำหรับ b_n มี α ราก ผลเฉลย $d_r^{(k)}$ ของสมการ (4.12) จะสมนัยกับแต่ละราก, $b_n = b_n^{(k)}$ เมื่อ $k = 1, 2, 3, ..., \alpha$ และเราจะเห็นได้ (โดยการสร้างสมการขึ้นมา) ว่า

$$\phi_n^{(k)} = \sum_{r=1}^{\alpha} d_r^{(k)} \psi_{nr} \tag{4.14}$$

เป็นฟังก์ชันเฉพาะของ A ที่เป็นของค่าเฉพาะ a_n และของ B ที่เป็นของค่าเฉพาะ b_n ไปพร้อมกัน ค่าเฉพาะ a_n ร่วมด้วยกับค่าเฉพาะ b_n^k จะกำหนดฟังก์ชันเฉพาะ ϕ_n^k ของ A และ B ได้อย่างบริบูรณ์ ดังนั้นเมื่อใดที่ตัวดำเนินการทั้งสองอยู่ในสภาพซ้อนสถานะด้วยกัน ก็จะถูกยกเลิก

คำวิเคราะห์ที่กล่าวมาข้างต้นนั้น อาจจะนำมาขยายความเพื่อแสดงได้อีกว่า ถ้า $A, B, C, ...,$ เป็นเซตของสิ่งที่สังเกตได้ที่สลับที่กันได้แล้ว เซตบริบูรณ์ของฟังก์ชันเฉพาะหลายชั้น (simultaneous eigenfunction) ของสิ่งที่สังเกตได้เหล่านี้ก็จะมีจริง (exist) เซตที่ใหญ่ที่สุดของสิ่งที่สังเกตได้ที่สลับที่กันได้ ที่หามาได้ (จากระบบที่กำหนดให้) จะเรียกว่า **เซตบริบูรณ์ของสิ่งที่สังเกตได้ที่สลับที่กันได้** (complete set of commuting observable) ในกรณีนี้ค่าเฉพาะ a_n, b_n, c_n ,..., จะกำหนดฟังก์ชันเฉพาะหลายชั้น ψ_n ของ $A, B, C, ...,$ ได้อย่างบริบูรณ์ (ต่างจากค่าคงตัวการคูณ) ดังนั้นสภาพซ้อนสถานะก็จะถูกยกเลิกอย่างบริบูรณ์

พีชคณิตตัวทำสลับที่ (Commutator Agebra)

ความสัมพันธ์ที่กำหนดโดยตัวทำสลับที่ต่อไปนี้มีประโยชน์อย่างมาก และสามารถพิสูจน์ได้ (อยู่ในแบบฝึกหัด)

$$[A, B] = -[B, A] \tag{4.15a}$$

$$[A, B+C] = [A,B] + [A,C] \tag{4.15b}$$

$$[A, BC] = [A,B]C + B[A,C] \tag{4.15c}$$

$$[A,[B,C]] + [B,[C,A]] + [C[A,B]] = 0 \tag{4.15d}$$

ความสัมพันธ์ความไม่แน่นอนของไฮเซนเบิร์ก

(The Heisenberg Uncertainty Relations)

ต่อไปนี้ เราจะหารูปแบบที่แท้จริงของความสัมพันธ์ของความไม่แน่นอน ที่ใช้กับ Δx และ Δx, $\Delta p_x, \ldots,$ รวมทั้งหานิพจน์ที่เป็นแบบทั่วไปมากยิ่งขึ้นของความสัมพันธ์ความไม่แน่นอนของไฮเซนเบิร์กของคู่สิ่งที่สังเกตได้ A และ B ที่เป็นคู่ตามแบบบัญญัติ (canonically conjugate) $[A,B] = ih$

ให้เราพิจารณาสองสิ่งที่สังเกตได้ A และ B ให้ $\langle A \rangle \equiv \langle \Psi | A | \Psi \rangle$ เป็นค่าคาดหมายของ A ในสถานะที่กำหนดให้ Ψ (ทำให้เป็นบรรทัดฐานกับหนึ่ง) และให้ $\langle B \rangle \equiv \langle \Psi | B | \Psi \rangle$ เป็นค่าคาดหมายของ B ในสถานะสถานะที่กำหนดให้ Ψ เรานิยามความไม่แน่นอน ΔA ให้เป็น

$$\Delta A = \left[\left\langle \left(A - \langle A \rangle \right)^2 \right\rangle \right]^{1/2} \tag{4.16}$$

ดังนั้น

$$(\Delta A)^2 = \left\langle \left(A - \langle A \rangle \right)^2 \right\rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \tag{4.17}$$

เป็นค่าเบี่ยงเบนจากค่าเฉลี่ยยกกำลังสองรอบค่าคาดหมาย $\langle A \rangle$ ทำนองเดียวกันเราก็จะนิยามความไม่แน่นอน ΔB ให้เป็น

$$\Delta B = \left[\left\langle \left(B - \langle B \rangle \right)^2 \right\rangle \right]^{1/2} \tag{4.18}$$

เราจะพิสูจน์เดี๋ยวนี้ว่า

$$\Delta A\Delta B \geq \frac{1}{2}\left|\langle [A,B]\rangle\right| \tag{4.19}$$

เริ่มต้นเราจะแนะนำตัวดำเนินเฮอร์มิเทียนเชิงเส้น

$$\overline{A} = A - \langle A\rangle, \qquad \overline{B} = B - \langle B\rangle \tag{4.20}$$

ซึ่งการทำเช่นนี้ทำให้ค่าคาดหมายหายไป ดังนั้นเราจะได้ $(\Delta A)^2$ และ $(\Delta B)^2$ ในพจน์ของตัวดำเนินการทั้งสองเป็น

$$(\Delta A)^2 = \langle \overline{A}^2\rangle, \qquad (\Delta B)^2 = \langle \overline{B}^2\rangle \tag{4.21}$$

และเราจะหมายเหตุในที่นี้ด้วยว่า

$$\left[\overline{A},\overline{B}\right] = \left[A-\langle A\rangle, B-\langle B\rangle\right] = \left[A,B\right] \tag{4.22}$$

ต่อไปเราจะพิจารณาว่า ตัวดำเนินการเชิงเส้น (แต่ไม่เป็นเฮอร์มิเทียน)

$$C = \overline{A} + i\lambda\overline{B} \tag{4.23}$$

เมื่อ λ เป็นค่าคงตัวจำนวนจริง และผูกพันของ C คือตัวดำเนินการ $C^\dagger = \overline{A} - i\lambda\overline{B}$ และเราบันทึกในที่นี้ว่าค่าคาดหมายของ $CC^\dagger$ เป็นจำนวนจริงและไม่เป็นลบ เพราะว่า

$$\langle CC^\dagger\rangle = \langle \Psi|CC^\dagger|\Psi\rangle = \langle C^\dagger\Psi|C^\dagger\Psi\rangle \geq 1 \tag{4.24}$$

จากสมการ (4.23) และ (4.24) ทำตามนั้นก็จะได้ค่าคาดหมาย

$$\left\langle \left(\overline{A}+i\lambda\overline{B}\right)\left(\overline{A}-i\lambda\overline{B}\right)\right\rangle = \left\langle \overline{A}^2 + \lambda^2\overline{B}^2 - i\lambda[\overline{A},\overline{B}]\right\rangle \tag{4.25}$$

เป็นจำนวนจริงและไม่เป็นลบ ใช้สมการ (4.25), (4.21) และ (4.22) เราจะเห็นว่าฟังก์ชัน

$$\begin{aligned} f(\lambda) &= \langle \overline{A}^2\rangle + \lambda^2\langle \overline{B}^2\rangle - i\lambda\langle [\overline{A},\overline{B}]\rangle \\ &= (\Delta A)^2 + \lambda^2(\Delta B)^2 - i\lambda\langle [A,B]\rangle \end{aligned} \tag{4.26}$$

เป็นจำนวนจริง และเป็นลบด้วย ซึ่งบ่งชี้เป็นนัยว่า $\langle [A,B]\rangle$ เป็นจำนวนจินตภาพอย่างบริสุทธิ์ (purely imaginary) เวลานี้ฟังก์ชัน $f(\lambda)$ จะมีค่าต่ำสุด (minimum) สำหรับ

$$\lambda_0 = \frac{i}{2} \frac{\langle [A,B] \rangle}{(\Delta B)^2} \tag{4.27}$$

และฟังก์ชัน $f(\lambda)$ ที่มีค่าต่ำสุดคือ

$$f(\lambda_0) = (\Delta A)^2 + \frac{1}{4} \frac{\left(\langle [A,B] \rangle\right)^2}{(\Delta B)^2} \tag{4.28}$$

เพราะว่าค่านี้ไม่เป็นลบ เราจะได้

$$(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 \geq -\frac{1}{4} \left(\langle [A,B] \rangle\right)^2 \tag{4.29}$$

สำหรับสองสิ่งที่สังเกตได้ที่เป็นคู่ตามแบบบัญญัติ (canonically conjugate) $[A,B] = i\hbar$ เราจะได้ $\langle [A,B] \rangle = i\hbar$ เพราะฉะนั้นจะไปลดรูปจากสมการ (4.29) ลงเหลือเป็น

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{\hbar}{2} \tag{4.30}$$

โดยเฉพาะอย่างยิ่งคู่ของ $(x, p_x), (y, p_y)$ และ (z, p_z) เราสามารถแถลงความสัมพันธ์ของความไม่แน่นอนตำแหน่ง-โมเมนตัมในรูปแบบที่กระชับได้เป็น

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}, \qquad \Delta y \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2}, \qquad \Delta z \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2} \tag{4.31}$$

โดยที่

$$\Delta x = \left[\left\langle \left(x - \langle x \rangle \right)^2 \right\rangle \right]^{1/2}, \qquad \Delta p_x = \left[\left\langle \left(p_x - \langle p_x \rangle \right)^2 \right\rangle \right]^{1/2} \tag{4.32}$$

และนิยามของ Δx, Δp_x, Δy และ Δp_z ก็คล้ายกัน

กลุ่มคลื่นที่มีความไม่แน่นอนต่ำสุด (Minimum Uncertainty Wave Packet)

จะเห็นได้ชัดเจนว่าเครื่องหมายเท่ากับในสมการ (4.19) กำหนดให้ผลคูณของความไม่

แน่นอนมีค่าต่ำสุดเมื่อ $\lambda = \lambda_0$ และ $C^\dagger \psi = 0$ [ดูสมการ (4.24) และ (4.28)] ดังนั้น

$$(\overline{A} - i\lambda_0 \overline{B})\psi = 0 \tag{4.33}$$

สมการนี้ใช้หาฟังก์ชันคลื่น ψ ในทางที่ทำให้ผลคูณ $\Delta A \Delta B$ ได้ค่าต่ำสุด

ดังตัวอย่าง ให้พิจารณาการเคลื่อนที่ของอนุภาคในหนึ่งมิติ จัดให้ $A = x$ และ $B = p_x$ ค่าต่ำสุดของผลคูณ ความไม่แน่นอน $\Delta x \Delta p_x$ ณ เวลาใด ๆ ที่กำหนด (ถือเสียว่าที่ $t = 0$) จะกำหนดให้โดย

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \tag{4.34}$$

เขียน $\psi(x) \equiv \psi(x, t=0)$ และใช้สมการ (4.33) กับ $\overline{A} = x - \langle x \rangle$ และ $\overline{B} = p_x - \langle p_x \rangle$ และ $\lambda_0 = i\langle [x, p_x] \rangle / [2(\Delta p_x)^2] = -\hbar / [2(\Delta p_x)^2]$ เราจะพบว่า

$$\left(-i\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} - \langle p_x \rangle\right)\psi(x) = \frac{2i(\Delta p_x)^2}{\hbar}\big(x - \langle x \rangle\big)\psi(x) \tag{4.35}$$

สมการเชิงอนุพันธ์อันดับแรกนี้ เมื่อหาปริพันธ์แล้วจะได้

$$\psi(x) = C \exp\left(\frac{i}{\hbar}\langle p_x \rangle x\right) \exp\left[-\frac{(\Delta p_x)^2 (x - \langle x \rangle)^2}{\hbar^2}\right] \tag{4.36}$$

เมื่อ C เป็นค่าคงตัวของการทำบรรทัดฐาน (normalisation constant) ฟังก์ชันคลื่นที่เห็นอยู่นี้เป็นหมู่คลื่นแบบเกาส์เซียน (Gaussian wave packet)

แบบฝึกหัด

4.1 ให้แสดงว่าความสัมพันธ์ของตัวทำสลับที่ตามสมการ (4.15) เป็นจริง

4.2 (ก) พิสูจน์โดยวิธีอุปนัยว่า

$$[x^n, p_x] = i\hbar n x^{n-1}$$

และ

$$[x, p_x^n] = i\hbar n p_x^{n-1}$$

เมื่อ n เป็นจำนวนเต็มบวก

(ข) ใช้ผลลัพธ์เหล่านี้แสดงว่า ถ้า $f(x)$ สามารถกระจายในรูปพหุนาม (polynomial) ที่มีตัวแปร x และ $f(p_x)$ สามารถกระจายในรูปพหุนามที่มีตัวแปร p_x แล้ว

$$[f(x), p_x] = i\hbar \mathrm{d}f / \mathrm{d}x$$

และ

$$[x, g(p_x)] = i\hbar \mathrm{d}g / \mathrm{d}p_x$$

4.3 ถ้า A และ B เป็นสองตัวดำเนินการในทางที่ $[A,B] = \lambda$ เมื่อ λ เป็นเลขเชิงซ้อน และถ้า μ เป็นเลขเชิงซ้อนตัวที่สอง ให้พิสูจน์ว่า

$$\exp[\mu(A+B)] = \exp(\mu A)\exp(\mu B)\exp(-\mu^2 \lambda / 2)$$

บรรณานุกรม

1. Ballentine, L. E. (1998) *Quantum Mechanics : A Modern Development.* World Scientific, Massachusetts.

2. Bransden, B. H. and Joachain, C. J. (2000) *Quantum Mechanics*. Pearson Education, 2nd Edn, London.

3. Dirac, P. A. (1958) *The Principles of Quantum Mechanics*, 4th Edn. Oxford University Press, New York.

4. Liboff, R. L. (1997) *Introductory Quantum Mechanics* , 3nd Edn. Addison – Wesley, Massachusetts.

5. Townsend, J. S. (1992) *A Modern Approach to Quantum Mechanics*. McGraw-Hill, New York.

ตอนที่ 5

การแปลงยูนิแทรี

(Unitary Transformation)

ต่อไปนี้เราจะแสดงว่า หากเอาตัวดำเนินการยูนิแทรีกระทำบนฟังก์ชันคลื่นที่อธิบายสถานะของระบบ จะได้ฟังก์ชันคลื่นใหม่ที่ให้รายละเอียดสมมูลของระบบได้อย่างบริบูรณ์ ซึ่งการประยุกต์ตัวดำเนินการยูนิแทรีเข้ากับทุก ๆ ฟังก์ชันคลื่นที่สมนัยกับระบบเช่นนี้ จะเรียกว่าการแปลงยูนิแทรี (unitary transformation)

ให้ Ψ และ X เป็นสองฟังก์ชันคลื่น และให้ตัวดำเนินการ A เป็นแบบเชิงเส้น ก็จะทำให้เขียนได้ว่า

$$A\Psi = \mathrm{X} \tag{5.1}$$

ให้เราประยุกต์การแปลงยูนิแทรี U ดังนั้น

$$\Psi' = U\Psi\,, \qquad \mathrm{X}' = U\mathrm{X} \tag{5.2}$$

เมื่อเขียน

$$A'\Psi' = \mathrm{X}' \tag{5.3}$$

แทนสมการ (5.2) ลงใน (5.3) จะได้

$$A'U\Psi = U\mathrm{X} = UA\Psi \tag{5.4}$$

ดังนั้น

$$A'U = UA \tag{5.5}$$

เพราะว่า $UU^{\dagger} = U^{\dagger}U = I$ [ดูสมการ (2.28b)] เมื่อใช้กับสมการ (5.5) จะได้ผลลัพธ์ตามมา

$$A' = UAU^{\dagger}, \qquad A = U^{\dagger} A' U \tag{5.6}$$

มีผลลัพธ์จำนวนมาก ที่เราจะทำการพิสูจน์ต่อไปนี้

(1) ถ้า A เป็นเฮอร์มิเทียนแล้ว A' จะเป็นเฮอร์มิเทียนด้วย

จากสมการ (5.6) เราจะได้

$$A'^{\dagger} = (UAU^{\dagger})^{\dagger} = UA^{\dagger}U^{\dagger} \tag{5.7}$$

และเพราะว่า $A = A^{\dagger}$ เราจะได้ว่า

$$A'^{\dagger} = UAU^{\dagger} = A' \tag{5.8}$$

(2) สมการของตัวดำเนินการ ยังคงรูปแบบเดิมไม่เปลี่ยนแปลง

พิจารณาสมการของตัวดำเนินการ ที่ยกมาเป็นตัวอย่าง

$$A = c_1 B + c_2 CD \tag{5.9}$$

เมื่อ c_1 และ c_2 เป็นค่าคงตัวเชิงซ้อน และ A, B, C เป็นตัวดำเนินการ จากการใช้ความจริงที่ว่า $UU^{\dagger} = U^{\dagger}U = I$ ก็จะได้

$$UAU^{\dagger} = c_1 UBU^{\dagger} + c_2 UCU^{\dagger}UDU^{\dagger} \tag{5.10}$$

หรือ

$$A' = c_1 B' + c_2 C'D' \tag{5.11}$$

เมื่อ A', B', C' และ D' เป็นการแปลง A, B, C และ D ตามลำดับ เราจะบันทึกในที่นี้ด้วยว่า ถ้า A และ B เป็นสองตัวดำเนินการในทางที่ $[A, B] = c$ เมื่อ c เป็นค่าคงตัวเชิงซ้อน และ A' และ B' เป็นการแปลงแล้ว

$$[A, B] = [A', B'] = c \tag{5.12}$$

นั่นก็หมายความตามมาว่า ความสัมพันธ์พื้นฐานของตัวทำสลับที่ [สมการ (4.2)] ยังคงไม่เปลี่ยนแปลงภายใต้การแปลงยูนิแทรี

(3) ค่าเฉพาะของ A เหมือนกับของ A'

ในความเป็นจริง เราสามารถเขียนสมการค่าเฉพาะ (2.4) ใหม่ เป็น

$$AU^\dagger U\psi_n = a_n U^\dagger U\psi_n \tag{5.13}$$

ดำเนินการด้วย U จากทางซ้ายมือตลอดสมการ เราจะได้

$$AU^\dagger U(U\psi_n) = a_n U^\dagger U(U\psi_n) \tag{5.14}$$

ดังนั้น ด้วยการให้ $\psi_n' = U\psi_n$ จะได้

$$A'\psi_n' = a_n\psi_n' \tag{5.15}$$

เพราะฉะนั้น $A' = UAU^\dagger$ มีค่าเฉพาะเหมือนกับค่าเฉพาะของ A

(4) ปริมาณ $\langle \mathrm{X}|A|\Psi\rangle$ ไม่เปลี่ยนแปลงโดยการแปลงยูนิแทรี เราจะพิสูจน์ดังต่อไปนี้

$$\begin{aligned}\langle \mathrm{X}|A|\Psi\rangle &= \langle \mathrm{X}|U^\dagger UAU^\dagger U|\Psi\rangle \\ &= \langle (U\mathrm{X})|UAU^\dagger|U\Psi\rangle \\ &= \langle \mathrm{X}'|A'|\Psi'\rangle\end{aligned} \tag{5.16}$$

เมื่อในบรรทัดที่สองเราใช้สมการ (2.13) เข้ามาช่วย จะเห็นว่าการแทรกในสมการ (5.16) นั้น ค่าคาดหมายยังคงเหมือนเดิมไม่เปลียนแปลง หรือก็คือค่าคาดหมายไม่เปลี่ยนแปลงภายใต้ยูนิแทรี

$$\langle \mathrm{X}|A|\Psi\rangle = \langle \mathrm{X}'|A'|\Psi'\rangle \tag{5.17}$$

โดยการเลือก $A = I$ ในสมการ (5.16) เราจะได้อีกด้วยว่า

$$\langle \mathrm{X}|\Psi\rangle = \langle \mathrm{X}'|\Psi'\rangle \tag{5.18}$$

ดังนั้น ผลคูณเชิงสเกลาร์ยังคงยืนยง (invariant) (หรือไม่แปรเปลี่ยน) ภายใต้การแปลงยูนิแทรี ลำดับถัดมาก็จะได้อีกด้วยว่าการทำเป็นบรรทัดฐานยังคงอยู่ภายใต้การแปลงยูนิแทรี เพราะ

$$\langle \Psi|\Psi\rangle = \langle \Psi'|\Psi'\rangle \tag{5.19}$$

จากผลลัพธ์ที่กล่าวมาแล้วข้างต้น เราจะเห็นว่าประมาณเชิงฟิสิกส์ เช่นค่าเฉพาะ และค่าคาดหมาย สามารถคำนวณหาได้จากฟังก์ชันคลื่น Ψ', X',..., และตัวดำเนินการ A', B',..., ที่แปลงมาได้ดีพอ ๆ กันกับที่คำนวณหามาจากฟังก์ชันคลื่นเริ่มต้น เป็นการเพิ่มความเป็นไปได้ของการแก้ปัญหาเชิงพลวัตรให้ง่ายขึ้น โดยใช้การแปลงยูนิแทรีหาชุดของฟังก์ชันคลื่นและตัวดำเนินการใหม่ออกมาก่อน เราจะบันทึกในที่นี้ด้วยว่า แต่ละการแปลงยูนิแทรีต่าง ๆ จะนำไปสู่รูปแบบใหม่ของตัวดำเนินการที่สมนัยกับตัวแปรเชิงพลวัตพื้นฐาน x, y, z;..., และ p_x, p_y, p_z,..., ขณะที่ความสัมพันธ์การสลับที่หลักมูล [สมการ (4.2)] ยังคงยืนยง ไม่เปลี่ยนแปลง ใคร่ขอเสนอแนะในที่นี้ว่า ทางเลือกหนึ่งของการสร้างวิชากลศาสตร์ควอนตัม อาจพัฒนาขึ้นมาโดยการพิจารณาให้สมการ (4.2) เป็นสัจพจน์พื้นฐานของทฤษฎี

ตัวอย่าง พิจารณาอนุภาคเคลื่อนที่ในหนึ่งมิติ ซึ่งฟังก์ชันคลื่นของตำแหน่งคือ $\Psi(x,t)$ ตัวดำเนินการของตำแหน่งและโมเมนตัม กำหนดให้โดย $x_{op} = x$ และ $(p_x)_{op} = -i\hbar\partial/\partial x$ ตามลำดับ การแปลงฟูเรียร์ของ $\Psi(x,t)$ จะได้เป็นนิยามของฟังก์ชันคลื่นปริภูมิโมเมนตัม $\Phi(p_x,t)$ และการแปลงนี้เป็นการแปลงยูนิแทรี ตามที่ว่ามานี้ เราสามารถเขียน

$$\begin{aligned}\Phi(p_x,t) &= U\Psi(x,t) \\ &= (2\pi\hbar)^{-1/2}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ip_x x/\hbar}\Psi(x,t)\mathrm{d}x\end{aligned} \qquad (5.20)$$

การแปลงผกผัน (inverse transformation) ของมันคือ

$$\begin{aligned}\Psi(x,t) &= U^{-1}\Phi(p_x,t) \\ &= (2\pi\hbar)^{-1/2}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ip_x x/\hbar}\Phi(p_x,t)\mathrm{d}p_x \\ &= U^{\dagger}\Phi(p_x,t)\end{aligned} \qquad (5.21)$$

ดังนั้น

$$U^{\dagger}U\Psi(x,t) = U^{\dagger}\Phi(p_x,t) = \Psi(x,t) \qquad (5.22)$$

และอีกด้วยคือ

$$UU^{\dagger}\Phi(p_x,t) = U\Psi(x,t) = \Phi(p_x,t) \qquad (5.23)$$

ซึ่งเราจะเห็นได้ว่า $U^{\dagger}U = UU^{\dagger} = I$ ดังนั้นตัวดำเนินการเชิงปริพันธ์ (integral operator) ที่นิยามโดยสมการ (5.20) จึงเป็นยูนิแทรี และตามทฤษฎีบทปาร์เซอวาล (Parseval's theorem)

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,t)|^2 \, dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |\Phi(p_x,t)|^2 \, dp_x \tag{5.24}$$

ก็จะเป็นกรณีเฉพาะของสมการ (5.19) อย่างพอดิบพอดี

การแปลงยูนิแทรีน้อยยิ่ง (Infinitesimal Unitary Transformation)

ถ้าตัวดำเนินการยูนิแทรี ใกล้เคียงตัวดำเนินการหนึ่งหน่วย แล้วการแปลงยูนิแทรีจะเรียกว่าการแปลงน้อยยิ่ง (infinitesimal transformation) หรือเป็นการแปลงเล็กน้อยมาก ดังนั้นเราอาจเขียน

$$U = I + i\varepsilon F \tag{5.25}$$

เมื่อ ε เป็นจำนวนจริง และเป็นพารามิเตอร์ที่มีค่าน้อย และ F เป็นตัวดำเนินการซึ่งจะต้องเป็นเฮอร์มิเทียน จากสมการ (2.28) และ (5.25) เราจะตัดเอาเฉพาะอันดับแรกของ ε

$$I = U^\dagger U = (I - i\varepsilon F^\dagger)(I + i\varepsilon F) \simeq I - i\varepsilon F^\dagger + i\varepsilon F \tag{5.26}$$

ซึ่งจะได้ว่า $\varepsilon(F - F^\dagger) = 0$ และ

$$F = F^\dagger \tag{5.27}$$

ตัวดำเนินการ F เรียกว่า ตัวก่อกำเนิด (generator) ของการแปลงยูนิแทรีน้อยยิ่ง เราให้ข้อสังเกตในที่นี้ว่าถ้าการแปลงยูนิแทรีเป็นแบบน้อยยิ่ง ฟังก์ชันคลื่นที่มีการแปลงก็จะเขียนได้เป็น

$$\Psi' \equiv \Psi + \delta\Psi = (I + i\varepsilon F)\Psi \tag{5.28}$$

ดังนั้น

$$\delta\Psi = i\varepsilon F\Psi \tag{5.29}$$

ขณะที่เมื่อใช้สมการ (5.6), (5.25) และ (5.27) ตัวดำเนินการการแปลง

$$\begin{aligned} A' = A + \delta A &= (I + i\varepsilon F)A(I - i\varepsilon F) \\ &= A + i\varepsilon FA - i\varepsilon AF + O(\varepsilon^2) \\ &= A + i\varepsilon[F, A] + O(\varepsilon^2) \end{aligned} \tag{5.30}$$

เมื่อเราทางด้านซ้ายมือของสมการ คิดเฉพาะพจน์อันดับแรกใน ε (พจน์ที่สอง) ก็จะได้ว่า

$$\delta A = i\varepsilon[F, A] \tag{5.31}$$

แบบฝึกหัด

ให้พิสูจน์ว่าตัวดำเนินการเฮอร์มิเทียนแทนได้โดยเฮอร์มิเทียนเมทริกซ์, ตัวดำเนินการยูนิแทรีแทนได้โดยเมทริกซ์ยูนิแทรี และผลบวกตัวดำเนินการ $A + B$ แทนได้ด้วยผลบวกเมทริกซ์ $A + B$

บรรณานุกรม

1. Ballentine, L. E. (1998) *Quantum Mechanics : A Modern Development*. World Scientific, Massachusetts.

2. Bransden, B. H. and Joachain, C. J. (2000) *Quantum Mechanics*. Pearson Education, 2nd Edn, London.

2. Dirac, P. A. (1958) *The Principles of Quantum Mechanics*, 4th Edn. Oxford University Press, New York.

4. Liboff, R. L. (1997) *Introductory Quantum Mechanics* , 3nd Edn. Addison – Wesley, Massachusetts.

5. Townsend, J. S. (1992) *A Modern Approach to Quantum Mechanics*. McGraw-Hill, New York.

ตอนที่ 6

ตัวแทนแบบเมทริกซ์ของฟังก์ชันคลื่นและตัวดำเนินการ

(Matrix Representations of Wave Functions and Operators)

ให้เราพิจารณาเซตบริบูรณ์ของฟังก์ชันคลื่นเชิงตั้งฉากปรกติ $\{\psi_n\}$ สมมุติให้ดรรชนี n เป็นค่าอันตะ (ไม่ต่อเนื่อง) ฟังก์ชันคลื่นเชิงฟิสิกส์ใด ๆ Ψ จะสามารถกระจายอยู่ในเซตนี้ได้ตามสมการ (3.10) เมื่อสัมประสิทธิ์ c_n ที่เคยได้มาคือ $c_n = \langle \psi_n | \Psi \rangle$ [ดูสมการ (3.11)] สำหรับเซตของฟังก์ชันที่กำหนดให้ $\{\psi_n\}$ จำนวน c_n จะกำหนดฟังก์ชันคลื่น Ψ ได้อย่างบริบูรณ์ และเราจะพูดว่าสัมประสิทธิ์ c_n คือตัวแทน (หรือแทน) Ψ ใน $\{\psi_n\}$ ฐานหลัก เราอาจจะคิดแบบนี้ว่าเซตของฟังก์ชัน $\{\psi_n\}$ คล้ายกับเซตของแกน (axis) ในพิกัด และจำนวน c_n ก็คล้ายกับองค์ประกอบของเวกเตอร์ตามแต่ละแนวแกนเหล่านี้

การกระทำของตัวดำเนินการที่เป็นเชิงเส้นและเฮอร์มิเทียนบนฟังก์ชันคลื่นหนึ่ง จะทำให้ได้ฟังก์ชันคลื่นอีกฟังก์ชันหนึ่งตามมา คือ

$$\mathrm{X} = A\Psi \tag{6.1}$$

ฟังก์ชันคลื่น X สามารถกระจายในพจน์ของเซตฐานหลัก (basis set) $\{\psi_n\}$ ได้เป็น

$$\mathrm{X} = \sum_m d_m \psi_m \tag{6.2}$$

เมื่อสัมประสิทธิ์ของการกระจาย d_m กำหนดให้โดย $d_m = \langle \psi_m | \mathrm{X} \rangle$ โดยการใช้สมการ (6.1) และ (3.10) เข้ามาร่วมด้วย เราจะได้

$$\begin{aligned} d_m &= \langle \psi_m | \mathrm{X} \rangle \\ &= \langle \psi_m | A | \Psi \rangle \\ &= \sum_n \langle \psi_m | A | \psi_n \rangle c_n \end{aligned} \tag{6.3}$$

ปริมาณ

$$A_{mn} = \langle \psi_m | A | \psi_n \rangle \tag{6.4}$$

เรียกว่าสมาชิกเมทริกซ์ (matrix element) ของตัวดำเนินการ A ใน $\{\psi_n\}$ ดังนั้นสมการ (6.3) เขียนใหม่ได้เป็น

$$d_m = \sum_n A_{mn} c_n \tag{6.5}$$

ซึ่งเป็นความสัมพันธ์ระหว่างสัมประสิทธิ์ c_n ซึ่งนิยาม Ψ กับสัมประสิทธิ์ d_m ซึ่งนิยาม X และสมการนี้สมมูล (equivalent) กับสมการ (6.1) ดังนั้นเซตของสมาชิกเมตริกซ์ A_{mn} จะเป็นตัวกำหนดตัวดำเนินการ A อย่างบริบูรณ์ เราจะหมายเหตุไว้ด้วยว่า สมการ (6.5) สามารถเขียนเป็น **สมการเมทริกซ์** (matrix equation) ได้เป็น

$$\mathbf{d} = \mathbf{A}\mathbf{c} \tag{6.6}$$

หรือ

$$\begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{6.7}$$

เมื่อ **d** และ **c** เป็นเวกเตอร์แนวตั้ง (column vector) และ **A** เป็นเมทริกซ์จัตุรัส (square matrix) ซึ่งถ้าฐานหลัก $\{\psi_n\}$ บรรจุฟังก์ชันไว้ด้วยจำนวนจำกัด เมทริกซ์ **A** ก็จะมีมิติจำกัดตามไปด้วย ถ้าเป็นตรงกันข้าม **A** ก็จะมีมิติเป็นอนันต์ จึงเป็นที่กระจ่างได้ว่ามีฟังก์ชันคลื่นและตัวดำเนินการต่าง ๆ ได้อย่างมากมาย อยู่ในเซตฐานหลักของฟังก์ชัน $\{\psi_n\}$

จากการใช้สมการ (3.15) และความจริงที่ว่า $c_n = \langle \psi_n | \Psi \rangle$ และ $d_n^* = \langle \mathrm{X} | \psi_n \rangle$ ผลคูณเชิงสเกลาร์ $\langle \mathrm{X} | \Psi \rangle$ จะมีนิพจน์เป็น

$$\langle \mathrm{X} | \Psi \rangle = \sum_n d_n^* c_n = \mathbf{d}^\dagger . \mathbf{c} \tag{6.8}$$

เมื่อ c เป็นเวกเตอร์แนวตั้ง ที่มีสมาชิก c_n และ $\mathbf{d}^\dagger$ เป็นเวกเตอร์แนวนอน (row vector) ที่มีสมาชิก d_n^* เพราะฉะนั้นสมการ (6.8) สามารถเขียนใหม่เป็น

$$\langle \mathrm{X} | \Psi \rangle = \begin{pmatrix} d_1^* & d_2^* & \cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{6.9}$$

สมบัติของเมทริกซ์และคำจำกัดความ (Matrix Properties and Definition)

เมทริกซ์ **A** และ **B** สามารถบวกกันได้ถ้าหากว่ามีจำนวนแถว (row) และจำนวนหลัก (column) เท่ากัน การบวกเป็นการสลับที่ (commutative)

$$\mathbf{A}+\mathbf{B}=\mathbf{B}+\mathbf{A} \tag{6.10}$$

และถ้า $\mathbf{C}=\mathbf{A}+\mathbf{B}$ เป็นผลบวกเมทริกซ์ แล้ว

$$C_{mn}=A_{mn}+B_{mn} \tag{6.11}$$

ถ้า $\mathbf{C}=\mathbf{AB}$ เป็นผลคูณของสองเมทริกซ์ **A** และ **B** แล้ว

$$C_{mn}=\sum_k A_{mk}B_{kn} \tag{6.12}$$

ซึ่งกำหนดว่าจำนวนแถวของ **B** เท่ากับจำนวนหลักของ **A** จากสมการ (6.11) และ (6.12) มีผลตามมาอีกคือการคูณเป็นการแจกแจง (distributive)

$$\mathbf{A}(\mathbf{B}+\mathbf{C})=\mathbf{AB}+\mathbf{AC} \tag{6.13}$$

และการเปลี่ยนหมู่ (association)

$$\mathbf{A}(\mathbf{BC})=(\mathbf{AB})\mathbf{C} \tag{6.14}$$

ในสมการ (6.12) ปรากฏให้เห็นด้วยว่าโดยทั่ว ๆ ไป **AB** ไม่จำเป็นต้องเท่ากับ **BA** แต่ถ้า $\mathbf{AB}=\mathbf{BA}$ เราจะพูดว่าเมทริกซ์ **A** และ **B** สลับที่กันได้

ผกผัน (inverse) $\mathbf{A}^{-1}$ ของเมทริกซ์ **A** เป็นไปตามต่อไปนี้

$$\mathbf{AA}^{-1}=\mathbf{A}^{-1}\mathbf{A}=\mathbf{I} \tag{6.15}$$

เมื่อ I เป็นสมาชิกหนึ่งหน่วย (unit matrix) **มีสมาชิก** $I_{mn}=\delta_{mn}$ **เมทริกซ์ใด ๆ ที่มีผกผันของมันจะเรียกว่าเมทริกซ์นั้นว่า ไม่เอกฐาน** (non-singular)

เมทริกซ์ $\mathbf{A}^T$ **เป็นสลับเปลี่ยน** (transpose) **ของ A ถ้า**

$$(A^T)_{mn}=A_{nm} \tag{6.16}$$

และ $\mathbf{A}^\dagger$ เป็นผูกพัน (adjoint) ของ $\mathbf{A}$ ถ้า

$$(A^\dagger)_{mn} = A^*_{nm} \tag{6.17}$$

เมทริกซ์ใด ๆ จะเป็นเฮอร์มิเทียน ถ้าหากมันเท่ากับผูกพันของมัน

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}^\dagger \tag{6.18}$$

ดังนั้น

$$A_{mn} = A^*_{nm} \tag{6.19}$$

ถ้าผกผันของเมทริกซ์ใด ๆ เท่ากับผูกผันของมันแล้ว เมทริกซ์นี้จะเรียกว่าเป็นยูนิแทรี

$$\mathbf{U}^{-1} = \mathbf{U}^\dagger \tag{6.20}$$

หรือ

$$\mathbf{U}\mathbf{U}^\dagger = \mathbf{U}^\dagger\mathbf{U} = \mathbf{I} \tag{6.21}$$

รอย (trace) ของเมทริกซ์เป็นผลบวกของสมาชิกที่อยู่ในแนวเส้นทแยงมุมของมัน

$$\mathrm{Tr}\mathbf{A} = \sum_m A_{mm} \tag{6.22}$$

ด้วยการใช้บทนิยามเหล่านี้ ก็จะพิสูจน์ได้อย่างง่าย ๆ ว่า ตัวดำเนินการเฮอร์มิเทียนแทนได้ด้วยเมทริกซ์เฮอร์มิเทียน ตัวดำเนินการยูนิแทรีแทนได้ด้วยเมทริกซ์ยูนิแทรี ผลบวกของตัวดำเนินการ $A+B$ แทนได้ด้วยผลรวมของเมทริกซ์ $\mathbf{A}+\mathbf{B}$ ผลคูณของตัวดำเนินการ $C = AB$ แทนได้ด้วยผลคูณของเมทริกซ์ $\mathbf{C} = \mathbf{AB}$ ดังนั้นสมบัติเชิงพีชคณิตของตัวดำเนินการจึงเป็นสมบัติของเมทริกซ์ของมันด้วย สำหรับตัวอย่าง ให้พิจารณาผลคูณของตัวดำเนินการ $C = AB$ เรามี

$$\begin{aligned} C_{mn} &= \langle \psi_m | AB | \psi_n \rangle \\ &= \sum_k \langle \psi_m | A | \psi_k \rangle \langle \psi_k | B | \psi_n \rangle \\ &= \sum_k A_{mk} B_{kn} \end{aligned} \tag{6.23}$$

ในบรรทัดที่สอง เรานำเอาความสัมพันธ์การปิดตามสมการ (3.16) มาใช้ เมื่อย้อนกลับไปดู

สมการ (6.12) ก็จะเห็นได้ว่าเมทริกซ์ **C** เท่ากับผลคูณของเมทริกซ์ **A** และ **B**

เมทริกซ์จัตุรัส **A** จะเรียกว่าเป็นทแยงมุม (diagonal) ถ้าหากสมาชิกของมันมีแต่สมาชิก A_{mn} ที่มี $m=n$ ส่วนสมาชิกอื่น ๆ หายไป และถ้าเซตบริบูรณ์ของฟังก์ชันเฉพาะเชิงตั้งฉากปรกติ $\{\psi_n\}$ ของสิ่งที่สังเกตได้ A ถูกใช้เป็นฐานหลักแล้ว สมาชิกที่อยู่ในแนวเส้นทแยงมุมก็จะเป็นค่าเฉพาะ a_n ของ A และสมาชิกเมทริกซ์ของ A ใน $\{\psi_n\}$ ก็จะเป็น

$$\begin{aligned} A_{mn} &= \langle \psi_m | A | \psi_n \rangle \\ &= a_n \langle \psi_m | \psi_n \rangle \\ &= a_n \delta_{mn} \end{aligned} \tag{6.24}$$

การแปลงบรรทัดแรกเป็นบรรทัดที่สอง ใช้ความจริงที่ว่า $A\psi_n = a_n\psi_n$

ให้ **A** เป็นเมทริกซ์ที่แทนสิ่งที่สังเกตได้ A ในฐานหลักที่กำหนดให้ สมการค่าเฉพาะ $A\psi_n = a_n\psi_n$ สำหรับตัวดำเนินการ A ก็จะแทนได้ด้วยสมการค่าเฉพาะเมทริกซ์

$$\mathbf{A}\mathbf{u}_n = a_n\mathbf{u}_n \tag{6.25}$$

เมื่อ $\mathbf{u}_n$ เรียกว่าเวกเตอร์เฉพาะ (eigenvector) ของเมทริกซ์ A ซึ่งให้ค่าเฉพาะเป็น a_n เพื่อความสะดวก มีอยู่บ่อย ๆ ที่เราเขียนเวกเตอร์เฉพาะ $\mathbf{u}_n$ ด้วยสัญกรณ์แบบดิแรกตามค่าเฉพาะ a_n เป็นเคตเฉพาะ หรือไอเกนเคต (eigenket) $|a_n\rangle$ และเขียนเวกเตอร์แถว $\mathbf{u}_n^\dagger$ เป็นบรา $\langle a_n|$ การเขียนในแบบนัยทั่วไปยิ่งขึ้น สำหรับเวกเตอร์เฉพาะของเมทริกซ์ **A, B, C,...,** ที่สมนัยกับค่าเฉพาะ $a_n, b_m, c_j, \ldots,$ ก็จะเขียนเป็น $|a_n, b_m, c_j, \ldots\rangle$

ค่าเฉพาะ a_n ของสมการเมทริกซ์ [สมการ (6.25)] เป็นจำนวนจริง เพราะ A เป็นเฮอร์มิเทียน และค่าเฉพาะ a_n เหล่านี้ เป็นผลเฉลยของสมการเซคิวลาร์ (secular equation)

$$\det |\mathbf{A} - a_n\mathbf{I}| = 0 \tag{6.26}$$

สมบัติของฟังก์ชันเฉพาะ ψ_n ของ A ก็จะสะท้อนไปเป็นสมบัติของเวกเตอร์เฉพาะ $\mathbf{u}_n$ ของ **A** ด้วย ในกรณีที่มีสองเวกเตอร์เฉพาะ ที่ต่างก็มีค่าเฉพาะคนละค่ากัน มันก็จะอยู่ในเชิงตั้งฉากกัน [ดูสมการ (3.5)] ทั้งเมื่อใช้วิธีการทำให้อยู่ในเชิงตั้งฉากกันของชมิดท์ (Schmidt orthogonalisation procedure) ด้วย ก็แน่ใจได้ว่าเหล่าบรรดาเวกเตอร์เฉพาะทั้งหลายที่คู่กับค่าเฉพาะแบบซ้อนสถานะ a_i ก็จะอยู่ในเชิงตั้งฉากร่วมกันอยู่ และเวกเตอร์เฉพาะทั้งหมดนี้ก็สามารถทำให้เป็นบรรทัดฐานกับหนึ่งได้ด้วย ดังนั้นเราจึงเขียนได้ว่า [เปรียบเทียบกับสมการ (3.7)]

$$\mathbf{u}_{ir}^{\dagger}.\mathbf{u}_{js} = \delta_{ij}\delta_{rs} \tag{6.27}$$

เมื่อดรรชนี r และ s บ่งบอกถึงสภาพซ้อนสถานะ และตอนท้ายนี้เราหมายเหตุไว้ว่า ในฐานหลัก $\{\psi_n\}$ ของฟังก์ชันเฉพาะของ A ถ้าถือว่าเมทริกซ์ $\mathbf{A}$ เป็นเมทริกซ์ทแยงมุม [สมการ (6.24)] แล้วทุกสมาชิกของเวกเตอร์เฉพาะ $\mathbf{u}_n$ (ที่ทำให้เป็นบรรทัดฐานแล้ว) จะมีค่าเป็นศูนย์ ยกเว้นแต่สมาชิกที่ n เท่านั้น ซึ่งจะมีค่าเป็น 1

การเปลี่ยนตัวแทนและการแปลงยูนิแทรี (Change of Representation and Unitary Transformation)

เราเคยแสดงมาแล้วว่า ตัวดำเนินการและฟังก์ชันคลื่นสามารถหาได้โดยใช้การแปลงยูนิแทรี ต่อไปนี้จะแสดงการแปลงตัวดำเนินการที่อยู่ในรูปเมทริกซ์โดยใช้ยูนิแทรีเมทริกซ์ (unitary matrix) เริ่มต้นเราสมมุติว่าฐานหลัก $\{\psi_n\}$ และ $\{\phi_m\}$ อยู่ในเชิงตั้งฉากปรกติกัน แต่ละสมาชิกของเซต $\{\psi_n\}$ สามารถกระจายในอยู่ในฐานหลัก $\{\phi_m\}$ ได้เป็น

$$\psi_n = \sum_m U_{mn}\phi_m \tag{6.28}$$

เมื่อสัมประสิทธิ์การกระจาย U_{mn} หาได้จากการคูณสเกลาร์ทั้งสองข้างของสมการด้วย ϕ_m ซึ่งจะได้เป็น

$$U_{mn} = \langle \phi_m | \psi_n \rangle \tag{6.29}$$

เราจะพิสูจน์ในตอนนี้ว่า เซตของ U_{mn} เป็นสมาชิกของยูนิแทรีเมทริกซ์ เริ่มด้วยจากตามความเป็นจริง

$$\begin{aligned}(UU^{\dagger})_{mn} &= \sum_k U_{mk}(U^{\dagger})_{kn} \\ &= \sum_k U_{mk}U^{*}_{nk} \\ &= \sum_k \langle \phi_m | \psi_k \rangle \langle \psi_k | \phi_n \rangle \\ &= \langle \phi_m | \phi_n \rangle = \delta_{mn}\end{aligned} \tag{6.30}$$

ซึ่งใช้ความสัมพันธ์การปิดในสมการ (3.16) เข้ามาช่วย จากการทำในทำนองเดียวกันจะได้อีกว่า

$$(U^{\dagger}U)_{mn} = \delta_{mn} \tag{6.31}$$

ดังนั้น $\mathbf{UU^{\dagger} = U^{\dagger}U = I}$ และ $\mathbf{U}$ เป็นยูนิแทรีเมทริกซ์

สมมุติว่าฟังก์ชันคลื่น Ψ เป็นตัวแทน $\{\psi_n\}$ โดยสัมประสิทธิ์ c_n (ก่อรูปเป็นเวกเตอร์แนวตั้ง $\mathbf{c}$) และเป็นตัวแทน $\{\phi_m\}$ โดยสัมประสิทธิ์ c'_m (ก่อรูปเป็นเวกเตอร์แนวตั้ง $\mathbf{c}'$) นั่นคือ

$$\Psi = \sum_n c_n \psi_n = \sum_m c'_m \phi_n \tag{6.32}$$

ด้วย

$$c_n = \langle \psi_n | \Psi \rangle, \qquad c'_m = \langle \phi_m | \Psi \rangle \tag{6.33}$$

เมื่อใช้ความสัมพันธ์การปิดในสมการ (3.16) และสมการ (6.29) จะได้ว่า

$$\begin{aligned} c'_m &= \langle \phi_m | \Psi \rangle \\ &= \sum_n \langle \phi_m | \psi_n \rangle \langle \psi_n | \Psi \rangle \\ &= \sum_n U_{mn} c_n \end{aligned} \tag{6.34}$$

ซึ่งผลลัพธ์ที่ได้ ก็จะเขียนในรูปเมทริกซ์เป็น

$$\mathbf{c}' = \mathbf{Uc} \tag{6.35}$$

ทำนองเดียวกัน ถ้า $\mathbf{A}$ เป็นเมทริกซ์ที่เป็นตัวแทนของตัวดำเนินการ A ในฐานหลัก $\{\psi_n\}$ และ $\mathbf{A}'$ เป็นเมทริกซ์ที่เป็นตัวแทนของตัวดำเนินการในฐานหลัก $\{\phi_m\}$ แล้ว

$$\begin{aligned} A'_{mn} &= \langle \phi_m | A | \phi_n \rangle \\ &= \sum_k \sum_l \langle \phi_m | \psi_k \rangle \langle \psi_k | A | \psi_l \rangle \langle \psi_l | \phi_n \rangle \\ &= \sum_k \sum_l U_{mk} A_{kl} (U^{\dagger})_{ln} \end{aligned} \tag{6.36}$$

ดังนั้น

$$\mathbf{A}' = \mathbf{UAU^{\dagger}} \quad \text{และ} \quad \mathbf{A} = \mathbf{U^{\dagger}A'U} \tag{6.37}$$

เราได้เห็นมาก่อนแล้วว่า ถ้าสองตัวดำเนินการเฮอร์มิเทียนเชื่อมโยงกันอยู่ด้วยการแปลงยูนิแทรีแล้ว ตัวดำเนินการทั้งสองนั้นจะมีค่าเฉพาะเป็นค่าเดียวกัน สมบัตินี้นำมาใช้ได้กับเฮอร์มิเทียนเมทริกซ์ ดังนั้นปัญหาของการถอดสมการ (6.25) อาจพิจารณาเหมือนว่าเป็นการหาการแปลงยูนิแทรีซึ่งเปลี่ยนเฮอร์มิเทียนเมทริกซ์ $\mathbf{A}$ ไปเป็น $\mathbf{A}' = \mathbf{U}\mathbf{A}\mathbf{U}^{\dagger}$ ซึ่งเป็นเมทริกซ์ทแยงมุม (diagonal) มันจึงเป็นทฤษฎีบทพื้นฐานว่าเฮอร์มิเทียนเมทริกซ์ใด ๆ สามารถทำให้เป็นเมทริซ์ทแยงมุมได้โดยใช้การแปลงยูนิแทรี ทฤษฎีบทที่สำคัญอีกอันหนึ่งกล่าวว่า เพื่อให้สองเมทริกซ์ $\mathbf{A}$ และ $\mathbf{B}$ สามารถทำให้เป็นทแยงมุมโดยการแปลงยูนิแทรีเดียวกัน จำเป็นจะต้องให้มันสลับที่กันได้ ($\mathbf{AB} = \mathbf{BA}$)

สมบัติที่สำคัญของการแปลงยูนิแทรีคือรอย (trace) ของเมทริกซ์ไม่เปลี่ยน ดังจะเห็นได้ในต่อไปนี้ ถ้าเมทริกซ์ $\mathbf{A}$ และ $\mathbf{A}'$ เชื่อมโยงการแปลงยูนิแทรี ดังนั้น $\mathbf{A}' = \mathbf{U}\mathbf{A}\mathbf{U}^{\dagger}$ และจะได้ว่า

$$
\begin{aligned}
\mathrm{Tr}\,\mathbf{A}' &= \sum_m A'_{mm} \\
&= \sum_k \sum_l \sum_m U_{mk} A_{kl} (U^{\dagger})_{lm} \\
&= \sum_k \sum_l \sum_m [(U^{\dagger})_{lm} U_{mk}] A_{kl} \\
&= \sum_k \sum_l \delta_{lk} A_{kl} \\
&= \sum_k A_{kk} = \mathrm{Tr}\,\mathbf{A}
\end{aligned}
\tag{6.38}
$$

ดูตามสมการ (6.38) และทฤษฎีบทของการเป็นเมทริกซ์ทแยงมุม ก็จะได้ว่ารอยของเฮอร์มิเทียนเมทริกซ์เท่ากับผลรวมของค่าเฉพาะของมัน

เวกเตอร์สถานะ (State Vector)

ที่ผ่านมาจะเห็นว่าฟังก์ชันคลื่นและตัวดำเนินการในทางกลศาสตร์ควอนตัมอาจจะถูกแทนได้ด้วยตัวแทนหลายแบบ ซึ่งสิ่งที่เป็นตัวแทนเหล่านี้มีความเชื่อมโยงกันและกันด้วยการแปลงยูนิแทรี และความจริงดังกล่าวนี้นำไปสู่คำกล่าวของดิแรกที่ว่าสถานะของระบบ สามารถ

แทนได้ด้วยปริมาณที่นามธรรมมากขึ้น เรียกว่า**สถานะเวกเตอร์** (state vector) ซึ่งกำหนดสัญลักษณ์เป็นเคต $|\Psi\rangle$ และมีปริมาณสังยุคเชิงซ้อนของมันกำหนดสัญลักษณ์เป็นบรา $\langle\Psi|$ โดยผลคูณสเกลาร์ $\langle\Psi|\Psi\rangle$ จะได้ค่าเป็นจำนวนจริงที่เป็นค่ายกกำลังสองของความยาว หรือนอร์ม (norm) ของ $|\Psi\rangle$ และที่ผ่านมาเราจะเห็นด้วยว่า $|\Psi\rangle$ มีองค์ประกอบของมันในแต่ละทิศทางในปริภูมิ ต่อไปนี้เราจะแสดงวิธีการของดิแรกในการหาระดับพลังงานของการแกว่งกวัดฮาร์มอนิกเชิงเส้น

การแกว่งกวัดฮาร์มอนิกเชิงเส้นชำระใหม่ (The Linear Harmonic Oscillator Revised)

ให้เราพิจารณาการแกว่งกวัดฮาร์มอนิกเชิงเส้นในหนึ่งมิติ ซึ่งแฮมิลทันเนียนของมัน คือ

$$H=\frac{p_x^2}{2m}+\frac{1}{2}kx^2=\frac{p_x^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2 \tag{6.39}$$

เมื่อ $\omega=(k/m)^{1/2}$ ต่อไปนี้เราจะหาค่าเฉพาะของ H โดยใช้วิธีการของดิแรก

เราจะสร้างตัวดำเนินการขึ้นมาคือ

$$a_\pm=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2}x\mp i\frac{p_x}{(m\hbar\omega)^{1/2}}\right] \tag{6.40}$$

เนื่องจาก x และ p_x เป็นตัวดำเนินการเฮอร์มิเทียน ดังนั้น a_+ และ a_- ผูกพันกันและกัน คือ $a_+=a_-^\dagger$ และ $a_-=a_+^\dagger$ จากการใช้ความสัมพันธ์การสลับที่ $[x,p_x]=i\hbar$ เข้าช่วย ก็จะหาได้ว่า a_+ และ a_- สอดคล้องกับความสัมพันธ์การสลับที่

$$[a_-,a_+]=1 \tag{6.41}$$

และแฮมิทันเนียนในสมการ (6.39) ก็เขียนใหม่ในพจน์ของตัวดำเนินการ a_+ และ a_- คือ

$$H=\frac{\hbar\omega}{2}(a_-a_++a_+a_-)=\hbar\omega(a_-a_+-\tfrac{1}{2})=\hbar\omega(a_+a_-+\tfrac{1}{2})=\hbar\omega(N+\tfrac{1}{2}) \tag{6.42}$$

เมื่อ

$$N = a_+ a_- \tag{6.43}$$

นอกจากนี้เรายังจะได้อีกว่า

$$[H, a_\pm] = \pm\hbar\omega_\pm \tag{6.44}$$

ถ้า $|E\rangle$ เป็นเวกเตอร์เฉพาะ (eigenvector) [ไอเกนเคต (eigenket)] ของ H ที่มีค่าเฉพาะ E ดังนั้น

$$H|E\rangle = E|E\rangle \tag{6.45}$$

จากสมการ (6.44) เมื่อใช้สมการ (6.45) เข้าช่วยเราจะได้ว่า

$$\begin{aligned} Ha_\pm|E\rangle &= (a_\mp H \pm \hbar\omega a_\pm)|E\rangle \\ &= (E \pm \hbar\omega)a_\mp|E\rangle \end{aligned} \tag{6.46}$$

ตามสมการนี้เคต $a_\pm|E\rangle$ จะเป็นเวกเตอร์เฉพาะของ H และมีค่าเฉพาะเป็น $E \pm \hbar\omega$ เมื่อ a_+ และ a_- เป็นตัวเพิ่มและตัวลดค่าเฉพาะ E และเรียกว่า **ตัวดำเนินการเพิ่มค่า** (raising operator) และ **ตัวดำเนินการลดค่า** (lowering) ตามลำดับ เนื่องจากภายใน H มี p_x และ x เป็นค่ายกกำลังสอง ดังนั้น H ของสถานะใด ๆ จึงไม่มีทางเป็นค่าลบ รวมทั้งค่าเฉพาะของมันก็ไม่มีทางเป็นค่าลบด้วย ถ้าให้ E_0 เป็นค่าที่เล็กสุด (ค่าต่ำสุด)ของค่าเฉพาะเหล่านี้ และมีเคตเฉพาะของมันเป็น $|E_0\rangle$ เราก็จะได้ว่า

$$a_-|E_0\rangle = 0 \tag{6.47}$$

หากไม่เช่นนั้นแล้ว $a_-|E_0\rangle$ ซึ่งเป็นเคตที่มีค่าเฉพาะเป็น $E_0 - \hbar\omega$ จะขัดแย้งกับที่ให้ E_0 เป็นค่าที่เล็กสุด (ค่าต่ำสุด) ค่าที่น้อยกว่านี้ E_0 อีกจึงไม่มีอีก จากสมการ (6.47) นี้ หากดำเนินการบนสมการนี้ด้วย $\hbar\omega a_+$ และใช้สมการ (6.42) และ (6.43) เข้าช่วย จะได้

$$\hbar\omega a_+ a_-|E_0\rangle = \hbar\omega N|E_0\rangle = (H - \tfrac{1}{2}\hbar\omega)|E_0\rangle = 0 \tag{6.48}$$

ซึ่งสมการที่ได้นี้ทำให้เราสรุปได้ว่าค่าเฉพาะ E_0 ซึ่งเป็นค่าต่ำสุด มีค่า $E_0 = \hbar\omega/2$ จากการใช้สมการ (6.46) เราจะเห็นว่าหาดำเนินการซ้ำแล้วซ้ำอีกด้วย a_+ บน $|E_0\rangle$ เราจะได้ลำดับ (ที่ยังไม่บรรทัดฐาน) ของไอเกนเคต ดังนี้

$$|E_0\rangle,\ a_+|E_0\rangle,\ a_+^2|E_0\rangle,\ \ldots \tag{6.49}$$

และค่าไอเกนเคต $a_+^n|E_n\rangle$ ก็จะสอดคล้องกับค่าเฉพาะ

$$E_n = (n+\tfrac{1}{2})\hbar\omega, \qquad n = 0,\ 1,\ 2,\ \ldots \tag{6.50}$$

ให้ $|E_n\rangle$ เป็นไอเกนเคตที่เป็นบรรทัดฐานซึ่งสอดคล้องกับค่าเฉพาะ E_n และ $|E_{n+1}\rangle$ สอดคล้องกับค่าเฉพาะ E_{n+1} จากสมการ (6.49) เราจะได้ว่า

$$|E_{n+1}\rangle = C_{n+1}a_+|E_n\rangle \tag{6.51}$$

เมื่อ C_{n+1} เป็นสัมประสิทธิ์ของการเป็นบรรทัดฐาน (normalisation coefficient) ด้วยเหตุที่ $\langle E_{n+1}|E_{n+1}\rangle = 1$ และ $a_- = a_+^\dagger$ ดังนั้นเราจะพบว่า

$$|C_{n+1}|^2\langle E_n|a_-a_+|E_n = 1\rangle \tag{6.52}$$

ทีนี้ เนื่องจากว่า $a_-a_+ = (H/\hbar\omega) + 1/2$ และ $H|E_n\rangle = E_n|E_n\rangle$ กับ $E_n = (n+1/2)\hbar\omega$ และคงจำได้ว่า $\langle E_n|E_n\rangle = 1$ เราจะได้ว่า

$$C_{n+1} = (n+1)^{-1/2} \tag{6.53}$$

จากการที่เราทำให้ C_{n+1} ให้เป็นจำนวนจริง จากสมการ (6.51) และ (6.52) เราก็จะเห็นได้ว่า

$$a_+|E_n\rangle = (n+1)^{1/2}|E_{n+1}\rangle \tag{6.54}$$

โดยการเริ่มต้นจาก $n = 0$ และใช้สมการ (6.54) ซ้ำแล้วซ้ำอีก เว็กเตอร์เฉพาะทั้งหมด $|E_n\rangle$ ที่ได้จาก $|E_0\rangle$ ก็จะเป็น

$$|E_n\rangle = (n!)^{-1/2}a_+^n|E_0\rangle \tag{6.55}$$

ให้ $|E_{n-1}\rangle$ เป็นไอเกนเคตที่เป็นบรรทัดฐาน ที่สอดคล้องกับค่าเฉพาะ E_{n-1} จากสมการ (6.51) และ (6.53) เราจะได้ว่า

$$|E_n\rangle = C_n a_+|E_{n-1}\rangle \tag{6.56}$$

โดยค่า $C_n = n^{-1/2}$ ดำเนินการทั้งสองข้างของสมการนี้ด้วย a_- จะได้ว่า

$$a_-|E_n\rangle = n^{-1/2}a_-a_+|E_{n-1}\rangle \tag{6.57}$$

เพราะว่า $a_-a_+ = (H/\hbar\omega)+1/2$ และ $H\left|E_{n-1}\right\rangle = (n-1/2)\hbar\omega\left|E_{n-1}\right\rangle$ เราจะได้ว่า

$$a_-\left|E_n\right\rangle = n^{1/2}\left|E_{n-1}\right\rangle \tag{6.58}$$

ตัวดำเนินการ a_+ และ a_- สามารถใช้คำนวณหาสมบัติของระบบใดๆได้ ดังตัวอย่าง ให้หาค่าคาดหมายของ x^4 ในสถานะพื้น (ground state) $\left|E_0\right\rangle$ ของการแกว่งกวัดแบบฮาร์มอนิกเชิงเส้น จากสมการ (6.40) เราจะเขียนใหม่ได้ว่า

$$x = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{1/2}(a_+ + a_-) \tag{6.59}$$

และเพราะฉะนั้น

$$\begin{aligned}\left\langle E_0\right|x^4\left|E_0\right\rangle = \frac{\hbar^2}{4m^2\omega^2}\Big\langle E_0\Big| & a_+^4 + a_+^3a_- + a_+^2a_-a_+ + a_+^2a_-^2 \\ & + a_+a_-a_+^2 + a_+a_-a_+a_- + a_+a_-^2a_+ + a_+a_-^3 \\ & + a_-a_+^3 + a_-a_+^2a_- + a_-a_+a_-a_+ + a_-a_+a_-^2 \\ & + a_-^2a_+^2 + a_-^2a_+a_- + a_-^3a_+ + a_-^4\Big|E_0\Big\rangle\end{aligned} \tag{6.60}$$

เมื่อสังเกตดูในสมการข้างบน เนื่องจาก $a_-\left|E_0\right\rangle = 0$ และ $\left\langle E_0\right|a_+ = \left\langle E_0\right|a_-^\dagger = \left\langle a_-E_0\right| = 0$ ดังนั้นสมการ (6.60) จะลดรูปเป็น

$$\left\langle E_0\right|x^4\left|E_0\right\rangle = \frac{\hbar^2}{4m^2\omega^2}\left\langle E_0\right|a_-a_+^3 + a_-a_+a_-a_+ + a_-^2a_+^2 + a_-^3a_+\left|E_0\right\rangle \tag{6.61}$$

เนื่องจากเรากำลังหาสมาชิกของเมทริกซ์ทแยงมุม ดังนั้นพจน์ใดที่มีจำนวนของตัวดำเนินการ a_+ และ a_- ไม่เท่ากันจะถูกแยกทิ้งไป และสมการ (6.61) จะเหลือเป็น

$$\left\langle E_0\right|x^4\left|E_0\right\rangle = \frac{\hbar^2}{4m^2\omega^2}\left\langle E_0\right|a_-a_+a_-a_+ + a_-^2a_+^2\left|E_0\right\rangle \tag{6.62}$$

ใช้ความสัมพันธ์ตามสมการ (6.54) และ (6.58) จะได้

$$\begin{aligned}a_-a_+a_-a_+\left|E_0\right\rangle &= a_-a_+a_-\left|E_1\right\rangle \\ &= a_-a_+\left|E_0\right\rangle \\ &= a_-\left|E_1\right\rangle \\ &= \left|E_0\right\rangle\end{aligned} \tag{6.63}$$

และในทำนองเดียวกันก็จะได้

$$\begin{aligned} a_-^2 a_+^2 |E_0\rangle &= a_-^2 a_+ |E_1\rangle \\ &= a_-^2 \sqrt{2} |E_2\rangle \\ &= a_- 2 |E_1\rangle \\ &= 2|E_0\rangle \end{aligned} \tag{6.64}$$

เมื่อใช้สมการ (6.63) และ (6.64) กับสมการ (6.62) ดังนั้นก็จะได้ว่า

$$\langle E_0 | x^4 | E_0 \rangle = \frac{3\hbar^2}{4m^2\omega^2} \tag{6.65}$$

การแทนเมทริกซ์ในแบบฐานหลัก $\{|E_n\rangle\}$ (Matrix Representation in the $\{|E_n\rangle\}$ Basis

ในพจน์ของเซตเชิงตั้งฉากปรกติ (orthonormal set) $\{|E_n\rangle\}$ ที่ $n = 0, 1, 2, \ldots$ เมทริกซ์ของ H จะแทนด้วยเมทริกซ์ทแยงมุมที่มีสมาชิก $E_n = (n+1/2)\hbar\omega$ และตัวดำเนินการ N จะแทนด้วยเมทริกซ์ทแยงมุมที่มีสมาชิก n นั่นคือ

$$\mathbf{H} = \hbar\omega \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 & \ldots \\ 0 & \frac{3}{2} & 0 & \ldots \\ 0 & 0 & \frac{5}{2} & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{N} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \ldots \\ 0 & 1 & 0 & \ldots \\ 0 & 0 & 2 & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix} \tag{6.66}$$

จากสมการ (6.51) และการเป็นเชิงตั้งฉากของเวกเตอร์เฉพาะ จะได้ว่า

$$\langle E_k | E_{n+1} \rangle = C_{n+1} \langle E_k | a_+ | E_n \rangle = \delta_{k,n+1} \tag{6.67}$$

เมื่อดัชนีล่าง k และ n มีค่า 0, 1, 2,... ดังนั้นเมื่อใช้สมการ (6.53) ก็จะได้สมาชิกเมทริกซ์ของ a_+ เป็น

$$(a_+)_{kn} = (n+1)^{1/2} \delta_{k,n+1} \tag{6.68}$$

เราจะเห็นว่า $\mathbf{a}_+$ เป็นเมทริซ์จำนวนจริง ที่สมาชิกเมทริกซ์ไม่เป็นศูนย์ก็เฉพาะแต่สมาชิกที่อยู่ใต้

แนวทแยงมุมเท่านั้น ด้วยเหตุที่ $\mathbf{a}_- = \mathbf{a}_+^\dagger$ และ $\mathbf{a}_+$ เป็นเมทริกซ์จำนวนจริง เราก็จะยังได้อีกว่า สมาชิกของเมทริกซ์ $\mathbf{a}_-$ คือ

$$(a_-)_{kn} = (k+1)^{1/2}\delta_{k+1,n} \tag{6.69}$$

ดังนั้น $\mathbf{a}_-$ เป็นเมทริกซ์จำนวนจริง ที่สมาชิกเมทริกซ์ของมันไม่เป็นศูนย์ก็เฉพาะแต่สมาชิกที่อยู่ เหนือแนวทแยงมุมเท่านั้น

$$\mathbf{a}_+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \quad \mathbf{a}_- = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \tag{6.70}$$

คราวนี้ก็จะสามารถหาสมาชิกเมทริกซ์ของ x และ p_x ได้โดยใช้สมการ (6.40)

การเปลี่ยนตัวแทนในแบบ $\{|E_n\rangle\}$ ไปเป็นตัวแทนในแบบตำแหน่ง

Transition from the $\{|E_n\rangle\}$ to the Position Representation

ต่อไปนี้เราจะแสดงว่าฟังก์ชันเฉพาะของการแกว่งกวัดฮาร์มอนิกเชิงเส้นในแบบของตำแหน่ง สามารถหาได้จาก a_+ และ a_- ในวิชากลศาสตร์คลื่น ตัวดำเนินการของตำแหน่ง x จะแทนได้ด้วยตัวคูณ x และตัวดำเนินการ p_x จะแทนได้ด้วย $-i\hbar\partial/\partial x$ (ในกรณีที่กำลังพิจารณาอยู่นี้ $\partial/\partial x \equiv d/dx$) ซึ่งเมื่อแทนในสมการ (6.40) ของตัวดำเนินการ $a_\pm$ แล้วก็จะกลายเป็น

$$a_\pm = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} x \mp \frac{1}{(m\hbar\omega)^{1/2}}\frac{d}{dx}\right] \tag{6.71}$$

หรือเขียนในพจน์ของตัวแปร $\xi = (m\omega/\hbar)^{1/2}x = \alpha x$ เป็น

$$a_\pm = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi \mp \frac{d}{d\xi}\right) \tag{6.72}$$

เพราะฉะนั้น สมการ (6.47) ก็จะกลายเป็นสมการในแบบตำแหน่ง คือ

$$\left(\xi+\frac{d}{d\xi}\right)\psi_0(\xi)=0 \tag{6.73}$$

ผลเฉลยของสมการนี้ คือ

$$\psi_0(\xi)=N_0e^{-\xi^2/2} \tag{6.74}$$

เมื่อ N_0 เป็นค่าคงตัว

$$\psi_0(x)=N_0e^{-\alpha^2x^2/2} \tag{6.75}$$

ถ้าเลือกให้ N_0 เป็นจำนวนจริง และ ξ เป็นไปในทางเป็นบรรทัดฐานกับ 1 เราก็จะได้ว่า

$$N_0=\left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} \tag{6.76}$$

ฟังก์ชันเฉพาะทั้งหมดสามารถหาได้โดยใช้สมการ (6.55) ซึ่งจะได้เป็นฟังก์ชันเฉพาะในแบบตำแหน่งเป็น

$$\psi_n(\xi)\doteq(n!)^{-1/2}\left[\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi-\frac{d}{d\xi}\right)\right]^n\psi_0(\xi) \tag{6.77}$$

ใช้พหุนามแอร์มิต (Hermite polynomial) $H_n(\xi)=(-1)^ne^{\xi^2}\dfrac{d^ne^{-\xi^2}}{d\xi^n}=e^{\xi^2/2}\left(\xi-\dfrac{d}{d\xi}\right)^n e^{-\xi^2/2}$ ที่อยู่ในเรื่องการถอดสมการการแกว่งกวัดแบบฮาร์มอนิกตามแบบของกลศาสตร์คลื่น ร่วมกับสมการ (6.74) และ (6.76) ก็จะได้สมการ (6.77) เป็น

$$\psi_n(\xi)=\left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}\,2^n n!}\right)^{-1/2}e^{-\xi^2/2}H_n(\xi) \tag{6.78}$$

แบบฝึกหัด

6.1 ตัวดำเนินการเฮอร์มิเทียน H สำหรับระบบทางฟิสิกส์ แทนได้ด้วยเมทริกซ์

$$\mathbf{H} = \hbar\omega \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

ขณะที่อีกสองสิ่งที่ได้จากการสังเกต A และ B แทนได้ด้วยเมทริกซ์

$$\mathbf{A} = \hbar\omega \begin{pmatrix} 0 & \lambda & 0 \\ \lambda & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2\lambda \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{B} = \hbar\omega \begin{pmatrix} 2\mu & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mu \\ 0 & \mu & 2 \end{pmatrix}$$

เมื่อ λ และ μ เป็นจำนวนจริง (ไม่ใช่ศูนย์)

(a) ให้หาค่าเฉพาะ และเวกเตอร์เฉพาะของ **A** และ **B**

(b) ถ้าระบบอยู่ในสถานะที่อธิบายโดยเวกเตอร์สถานะ

$$\mathbf{u} = c_1\mathbf{u}_1 + c_2\mathbf{u}_2 + c_3\mathbf{u}_3$$

เมื่อ c_1, c_2 และ c_3 เป็นค่าคงตัวเชิงซ้อน และ

$$\mathbf{u}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{u}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{u}_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

(i) ให้หาสัมพันธภาพระหว่าง c_1, c_2 และ c_3 ในทางที่ **u** เป็นบรรทัดฐานกับหนึ่ง และ

(ii) ให้หาค่าคาดหมายของ H, A และ B

(iii) อะไรเป็นค่าพลังงานที่สามารถหาได้จากการวัด เมื่อระบบอธิบายโดยเวกเตอร์สถานะ **u** ? และจากผลลัพธ์ที่ได้ไปหาเมทริกซ์ที่เป็นตัวแทนของฟังก์ชันคลื่น ทันทีที่วัดได้

6.2 ให้พิสูจน์ความสัมพันธ์ของตัวทำสลับที่ตามสมการ (6.41) และสมการ (6.44)

6.3 ให้คำนวณหาสมาชิกเมทริกซ์ของการแกว่งกวัดฮาร์มอนิก $(x^i)_{nm}$, เมื่อ $i = 2, 3, 4, \ldots$

(a) โดยการใช้การคูณเมทริกซ์ ด้วยการใช้นิพจน์สำหรับ x_{nm} ที่ให้ไว้ดังนี้

$$x_{nm} = \begin{cases} 0\,, & m \neq n \pm 1 \\ \dfrac{1}{\alpha}\left(\dfrac{n+1}{2}\right)^{1/2}, & m = n+1 \\ \dfrac{1}{\alpha}\left(\dfrac{n}{2}\right)^{1/2}, & m = n-1 \end{cases}$$

(b) โดยการใช้ตัวดำเนินการเพิ่มค่า a_+ และตัวดำเนินการลดค่า a_-

6.4 ให้หาสมาชิกเมทริกซ์ของ x และ p_x สำหรับการแกว่งกวัดฮาร์มอนิกเชิงเส้น โดยใช้ $(a_+)_{kn}$ และ $(a_-)_{kn}$ ที่ให้มาในสมการ (6.68) และ (6.69) ตามลำดับ

บรรณานุกรม

1. Ballentine, L. E. (1998) *Quantum Mechanics : A Modern Development.* World Scientific, Massachusetts.

2. Bransden, B. H. and Joachain, C. J. (2000) *Quantum Mechanics.* Pearson Education, 2nd Edn, London.

3. Dirac, P. A. (1958) *The Principles of Quantum Mechanics*, 4th Edn. Oxford University Press, New York.

4. Liboff, R. L. (1997) *Introductory Quantum Mechanics* , 3nd Edn. Addison – Wesley, Massachusetts.

5. Townsend, J. S. (1992) *A Modern Approach to Quantum Mechanics.* McGraw-Hill, New York.

ตอนที่ 7

สมการชเรอดิงเงอร์และวิวัฒนาการตามเวลาของระบบ

(The Schrödinger Equation and the Time Evolution of a System)

สัจพจน์ในต่อไปนี้ จะกล่าวถึงวิวัฒนาการของระบบควอนตัม และอาจแสดงได้ในรูปสูตร ดังต่อไปนี้

สัจพจน์ 7

วิวัฒนาการตามเวลาของฟังก์ชันคลื่นของระบบ หาได้โดยใช้สมการชเรอดิงเงอร์แบบขึ้นกับเวลา (time dependent Schrödinger equation)

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(t) = H\Psi(t) \tag{7.1}$$

เมื่อ H เป็นแฮมิลทันเนียน หรือตัวดำเนินการพลังงานรวม

สมมุติให้ระบบมีความคล้ายคลึงกับระบบเชิงแบบฉบับ ตัวดำเนินการแฮมิลทันเนียนของมันสามารถหาได้จากกฎการแทนตำแหน่ง [สมการ (2.2)] หรือโมเมนตัม [สมการ (2.3)]

ตัวอย่างแรก ให้เราพิจารณาระบบอนุภาคไร้สปิน (spinless particle) ที่มี N อนุภาค อนุภาคมีมวล m_i, ตำแหน่ง $\mathbf{r}_i$, และโมเมนตัม $\mathbf{p}_i$ และพลังงานศักย์ $V(\mathbf{r}_1,...,\mathbf{r}_N,t)$ ขึ้นกับทั้งตำแหน่ง $\mathbf{r}_i$ และเวลา t ตัวดำเนินการแฮมิลทันเนียน (ในเชิงไม่สัมพัทธภาพ) ของระบบจะกำหนดให้โดย

$$H = \sum_{i=1}^{N}\frac{\mathbf{p}_i^2}{2m_i} + V(\mathbf{r}_1,...,\mathbf{r}_N,t) \tag{7.2}$$

เมื่อ $\mathbf{p}_i = -i\hbar\nabla_i$

ตัวอย่างที่สอง ให้เราพิจารณาอนุภาคที่มีมวล m และประจุ q เคลื่อนที่ในสนามแม่เหล็กไฟฟ้า ที่พรรณาด้วยศักย์เวกเตอร์ (vector potential) $\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$ และ ศักย์สเกลาร์ (scalar potential) $\phi(\mathbf{r},t)$ แฮมิลทันเนียนในเชิงแบบฉบับ (และไม่เชิงสัมพัทธภาพ) สามารถหาได้โดยเริ่มจากนิพจน์ของอนุภาคอิสระ $E = \mathbf{p}^2/2m$ ระหว่างพลังงานและโมเมนตัมของอนุภาค และแทนลงไปในนิพจน์ด้วย

$$E \to E - q\phi\,, \qquad \mathbf{p} \to \mathbf{p} - q\mathbf{A} \tag{7.3}$$

ก็จะผลลัพธ์เป็นแฮมิลทันเนียน

$$H = \frac{1}{2m}(\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2 + q\phi \tag{7.4}$$

และสามารถทำให้อยู่ในเชิงกลศาสตร์ควอนตัม (ไม่เชิงสัมพัทธภาพ) โดยเปลี่ยนโมเมนตัมในรูปทั่วไป $\mathbf{p}$ ให้อยู่ในรูปตัวดำเนินการโมเมนตัมแบบตำแหน่ง $\mathbf{p}_{\mathrm{op}} = -i\hbar\nabla$ และใช้การเป็นเฮอร์มิตไตเซชัน (Hermitisation) กับ $-(q/m)\mathbf{A}.\mathbf{p}$ ตัวดำเนินการแฮมิลทันเนียนจะเขียนได้เป็น

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{q}{2m}(\mathbf{A}.\mathbf{p} + \mathbf{p}.\mathbf{A}) + \frac{q^2}{2m}\mathbf{A}^2 + q\phi \tag{7.5}$$

เราไม่ได้ใส่ดรรชนีล่างในตัวดำเนินการโมเมนตัม ทั้งนี้เพื่อให้สัญกรณ์ดูง่าย

ตัวดำเนินการวิวัฒนาการ (The Evolution Operator)

เนื่องจากสมการชเรอดิงเงอร์ในเชิงเวลาตามสมการ (7.1) เป็นสมการเชิงอนุพันธ์อันดับแรก สถานะเวกเตอร์ $\Psi(t)$ ที่เวลาใด ๆ ของเวลาทั้งหมด อาจหาได้จากสถานะเว็กเตอร์ที่ระบุเวลาไว้เป็น t_0 เพราะฉะนั้นเราจะกำหนดตัวดำเนินการวิวัฒนาการ (evolution operator) $U(t,t_0)$ ขึ้นมาใช้งานในทางที่

$$\Psi(t) = U(t,t_0)\Psi(t_0) \tag{7.6}$$

โดยที่

$$U(t_0,t_0) = I \tag{7.7}$$

ถ้าแบ่งการกระทำตามนิยามในสมการ (7.6) เป็นสองครั้ง ก็จะได้ว่า

$$U(t,t_0) = U(t,t')U(t',t_0) \tag{7.8}$$

และ

$$U^{-1}(t,t_0) = U(t_0,t) \tag{7.9}$$

ดังนั้น ตัวดำเนินการวิวัฒนาการแสดงสมบัติกลุ่ม (group property)

แทนสมการ (7.6) ลงในสมการ (7.1) ก็จะเห็นว่าตัวดำเนินการวิวัฒนาการ $U(t,t_0)$ สอดคล้องกับ

$$ih\frac{\partial}{\partial t}U(t,t_0) = HU(t,t_0) \tag{7.10}$$

ซึ่งยังรับกันกับสมการ (7.7) สมการเชิงอนุพันธ์ (7.10) ที่ได้นี้ เมื่อนำสมการ (7.7) มาช่วย ก็จะสามารถเปลี่ยนให้อยู่ในรูปสมการปริพันธ์

$$U(t,t_0) = I - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} HU(t',t_0)dt' \tag{7.11}$$

การอนุรักษ์โอกาส (conservation of probability) กำหนดว่า

$$\langle\Psi(t)|\Psi(t)\rangle = \langle\Psi(t_0)|\Psi(t_0)\rangle \tag{7.12}$$

อย่างไรก็ดี จากสมการ (7.6)

$$\begin{aligned}\langle\Psi(t)|\Psi(t)\rangle &= \langle U(t,t_0)\Psi(t_0)|U(t,t_0)\Psi(t_0)\rangle \\ &= \langle\Psi(t_0)|U^{\dagger}(t,t_0)U(t,t_0)|\Psi(t_0)\rangle\end{aligned} \tag{7.13}$$

จากสมการนี้ ก็จะได้ว่า

$$U^{\dagger}(t,t_0)U(t,t_0) = I \tag{7.14}$$

ถ้าทำเช่นเดียวกัน แต่เริ่มจาก $\langle\Psi(t_0)|\Psi(t_0)\rangle$ ก็จะได้ว่า

$$U(t,t_0)U^{\dagger}(t,t_0) = I \tag{7.15}$$

จากสองสมการที่ได้นี้ เราสามารถสรุปได้ว่า $U(t,t_0)$ เป็นตัวดำเนินการยูนิแทรี

ลักษณะการเป็นยูนิเทรีของตัวดำเนินการวิวัฒนาการ เกี่ยวโยงกับความเป็นเฮอร์มิเทียนของแฮมิลทันเนียนอย่างเห็นชัด เราสามารถแสดงความเกี่ยวโยงนี้โดยการศึกษาการเปลี่ยนแปลงในตัวดำเนินการวิวัฒนาการที่เกิดขึ้นเมื่อกำหนดให้เวลาเปลี่ยนไปเป็นค่าน้อยๆ δt ซึ่งจากสมการ (7.10) ที่มีในตอนแรก ก็สามารถเขียนได้ว่า

$$i\hbar[U(t_0+\delta t,t_0)-U(t_0,t_0)] = HU(t_0+\delta t,t_0)\delta t \tag{7.16}$$

ดังนั้น เมื่อใช้อันดับแรกของ δt และสมการ (7.7) เราก็จะได้

$$U(t_0+\delta t,t_0) = I - \frac{i}{\hbar}H\delta t \tag{7.17}$$

เพราะฉะนั้น H เป็นตัวก่อกำเนิดหรือเจเนอเรเตอร์ (generator) ของการแปลงยูนิเทรีแบบน้อยยิ่ง [ดูสมการ (5.25)] ในความเป็นจริงการเลื่อนของเวลาไปอย่างน้อยยิ่ง อธิบายโดยตัวดำเนินการวิวัฒนาการ $U(t_0+\delta t,t_0)$

ให้เราพิจารณากรณีเฉพาะ ซึ่งแฮมิลทันเนียน H เป็นแบบไม่ขึ้นกับเวลา ผลเฉลยของสมการ (7.10) ที่สอดคล้องกับสมการ (7.7) กำหนดให้โดย

$$U(t,t_0) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)\right] \tag{7.18}$$

ฟังก์ชันของตัวดำเนินการ สามารถนิยามในแบบการกระจายอนุกรม [ดูสมการ (2.21)] ดังนั้น

$$\exp\left[-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)\right] = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n H^n(t-t_0)^n \tag{7.19}$$

ดังนั้น ผลเฉลยรูปนัย (formal solution) ของสมการชเรอดิงเงอร์ที่ไม่ขึ้นกับเวลาสำหรับแฮมิลทันเนียนที่ไม่ขึ้นกับเวลา H ก็จะกำหนดให้โดย

$$\Psi(t) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)\right]\Psi(t_0) \tag{7.20}$$

ดังตัวอย่าง สมมุติว่าเรากำลังพิจารณาการเคลื่อนที่ของอนุภาคที่ไร้โครงสร้างในศักย์ $V(\mathbf{r})$ จากสมการ (7.20) เราอาจเขียนฟังก์ชันคลื่น $\Psi(\mathbf{r},t)$ ได้เป็น

$$\Psi(\mathbf{r},t) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)\right]\Psi(\mathbf{r},t_0)$$
$$= \int \exp\left[-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)\right]\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\Psi(\mathbf{r}',t_0)d\mathbf{r}' \qquad (7.21)$$

คราวนี้ ตามความสัมพันธ์การปิด เราได้ว่า

$$\sum_E \psi_E^*(\mathbf{r}')\psi_E(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \qquad (7.22)$$

ดังนั้นเราจะเขียนสมการ (7.21) เสียใหม่ ในรูปแบบ

$$\Psi(\mathbf{r},t) = \sum_E \int \exp\left[-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)\right]\psi_E^*(\mathbf{r}')\psi_E(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}',t_0)d\mathbf{r}' \qquad (7.23)$$

ด้วยเหตุที่ $H\psi_E = E\psi_E$. ผลตามมาคือได้สมการเป็น

$$\Psi(\mathbf{r},t) = \sum_E \left[\int \psi_E^*(\mathbf{r}')\Psi(\mathbf{r}',t_0)d\mathbf{r}'\right]\exp\left[-iE(t-t_0)/\hbar\right]\psi_E(\mathbf{r}) \qquad (7.24)$$

การแปรผันตามเวลาของค่าคาดหมาย (Time Variation of Expectation Value)

ให้เราพิจารณาสิ่งที่ได้จากการสังเกต A ค่าคาดหมาย $\langle A\rangle$ ของสิ่งที่สังเกตได้ในสถานะ Ψ ที่เป็นบรรทัดฐานกับหนึ่ง จะกำหนดให้โดย $\langle\Psi|A|\Psi\rangle$ เพราะฉะนั้นอัตราการเปลี่ยนของค่าคาดหมายนี้จะเป็น

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle = \frac{d}{dt}\langle\Psi|A|\Psi\rangle$$
$$= \left\langle\frac{\partial\Psi}{\partial t}|A|\Psi\right\rangle + \left\langle\Psi\left|\frac{\partial A}{\partial t}\right|\Psi\right\rangle + \left\langle\Psi|A|\frac{\partial\Psi}{\partial t}\right\rangle$$
$$= -(i\hbar)^{-1}\langle H\Psi|A|\Psi\rangle + \left\langle\Psi\left|\frac{\partial A}{\partial t}\right|\Psi\right\rangle + (i\hbar)^{-1}\langle\Psi|AH|\Psi\rangle \qquad (7.25)$$

เมื่อบรรทัดสุดท้าย ได้จากการใช้สมการเชอดิงเงอร์ [สมการ (7.1)] และสังยุคเชิงซ้อนของมัน เนื่องจาก H เป็นเฮอร์มิเทียน สมาชิกเมทริกซ์แรกที่อยู่ทางขวามือของสมการ (7.25) จึงสามารถ

เขียนได้เป็น $\langle\Psi|HA|\Psi\rangle$ ดังนั้น

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle = (i\hbar)^{-1}\langle[A,H]\rangle + \left\langle\frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle \tag{7.26}$$

เมื่อ

$$\langle[A,H]\rangle = \langle\Psi\,|[A,H]|\,\Psi\rangle = \langle\Psi\,|\,AH - HA\,|\,\Psi\rangle \tag{7.27}$$

และ

$$\left\langle\frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle = \left\langle\Psi\left|\frac{\partial A}{\partial t}\right|\Psi\right\rangle \tag{7.28}$$

ในกรณีจำเพาะ ถ้าหากว่าตัวดำเนินการไม่ขึ้นกับเวลาอย่างชัดแจ้ง (นั่นคือถ้า $\partial A/\partial t = 0$) สมการ (7.26) ก็จะลดรูปลงเหลือ

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle = (i\hbar)^{-1}\langle[A,H]\rangle \tag{7.29}$$

ดังนั้นถ้า $\partial A/\partial t = 0$ และ A สลับที่กันได้กับ H แล้ว ค่าคาดหมายของมันจะไม่ขึ้นกับเวลา และเราอาจพูดได้ว่าสิ่งที่สังเกตได้ A นั้นเป็น ค่าคงตัวของการเคลื่อนที่

แฮมิลทันเนียนไม่ขึ้นกับเวลา (Time-Independent Hamiltonian)

ตัวอย่างของสิ่งที่อภิปรายมาข้างบนนี้ ให้เราพิจารณาระบบที่แฮมิลทันเนียนไม่ขึ้นกับเวลา ($\partial H/\partial t = 0$) จากการใช้สมการ (7.29) และให้ $A = H$ เราจะเห็นว่า

$$\frac{d}{dt}\langle H\rangle = (i\hbar)^{-1}\langle[H,H]\rangle = 0 \tag{7.30}$$

ดังนั้นพลังงานรวมจะเป็นค่าคงตัวของการเคลื่อนที่ คล้ายกับการอนุรักษ์พลังงานของระบบอนุรักษ์ในวิชากลศาสตร์แบบฉบับ

ให้ ψ_E เป็นฟังก์ชันเฉพาะของแฮมิลทันเนียนแบบไม่ขึ้นกับเวลา H ที่สอดคล้องกับพลังงานเฉพาะ E สำหรับกับสถานะคงที่ (stationary state) $\Psi_E = \psi_E \exp(-iEt/\hbar)$) และตัวดำเนินการไม่ขึ้นกับเวลา A จะเห็นชัดเจนว่า $\langle\Psi_E|A|\Psi_E\rangle = \langle\psi_E|A|\psi_E\rangle$ ไม่ขึ้นกับเวลา ดังนั้นสมการ (7.29) จะลดรูปเป็น

$$\langle \psi_E | [A,H] | \psi_E \rangle = 0 \tag{7.31}$$

ทฤษฎีบทเวอร์เอียล (Virial Theorem)

ทีนี้เราจะใช้ผลลัพธ์ข้างบนกับกรณีจำเพาะ ที่อนุภาคมวล m เคลื่อนที่ในศักย์ $V(\mathbf{r})$ ซึ่งดังนั้นแฮมิลทันเนียน คือ

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \tag{7.32}$$

เราเลือกให้ A ในตัวดำเนินการไม่ขึ้นกับเวลา $\mathbf{r.p}$ ดังนั้นสมการ (7.21) ก็จะกลายเป็น

$$\langle \psi_E | [\mathbf{r.p}, H] | \psi_E \rangle = 0 \tag{7.33}$$

ใช้สมบัติทางพีชคณิตของตัวสลับที่ตามสมการ (4.15) ร่วมกับความสัมพันธ์การสลับที่พื้นฐานในสมการ (4.2) และแทน $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$ เราจะได้ว่า

$$\begin{aligned}
[r.p, H] &= \left[(xp_x + yp_x + zp_x),\ \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_x^2) + V(x,y,z) \right] \\
&= \frac{i\hbar}{m}(p_x^2 + p_y^2 + p_x^2) - i\hbar\left(x\frac{\partial V}{\partial x} + y\frac{\partial V}{\partial y} + z\frac{\partial V}{\partial z} \right) \\
&= 2i\hbar T - i\hbar\left(\mathbf{r}.\nabla V\right)
\end{aligned} \tag{7.34}$$

เมื่อ $T = \mathbf{p}^2 / 2m = -(\hbar^2 / 2m)\nabla^2$ เป็นตัวดำเนินการพลังงานจลน์ เพราะฉะนั้นจากสมการ (7.33) และสมการ (7.34) เราจะได้สรุปได้ว่า (สำหรับสถานะคงที่)

$$2\langle T \rangle = \langle \mathbf{r}.\nabla V \rangle \tag{7.35}$$

ซึ่งรู้จักกันดีว่าคือ **ทฤษฎีบทเวอร์เอียล**[1] **(Virial Theorem)** เราจะบันทึกในที่นี้ว่าสมการ (7.35)

---

[1] ในกลศาสตร์แบบฉบับ เวอร์เอียลของอนุภาคนิยามโดยปริมาณ $-(1/2)\overline{\mathbf{F.r}}$ เมื่อ $\mathbf{F}$ เป็นแรงที่กระทำต่ออนุภาค และเครื่องหมายบาร์กำหนดให้เป็นค่าเฉลี่ยทางเวลา ถ้าการเคลื่อนที่เป็นคาบ (หรือไม่เป็นคาบ แต่มีพิกัดของความเร็วเป็นค่าจำกัด) และกำหนดให้ $\overline{T}$ เป็นค่าเฉลี่ยทางเวลาของพลังงานจลน์ของอนุภาค จะได้ $\overline{T} = -(1/2)\overline{\mathbf{F.r}}$ และความสัมพันธ์นี้เป็นรู้จักกันว่าคือทฤษฎีบทเวอร์เอียล หรือเขียนในรูปศักย์ V ของแรง ก็จะเป็น $2\overline{T} = \overline{\mathbf{r}.\nabla V}$ ซึ่งก็คล้ายกับสมการ (7.35)

ที่ได้นี้ อาจจะหาได้อีกด้วยการแทนตัวดำเนินการ A ด้วย **r.p** แทนการแทนด้วย **p.r** เพราะใน ในทางเป็นจริง **r.p** และ **p.r** จะต่างกันที่ค่าคงตัว ดังนั้นจึงสลับที่ได้กับ H ทั้งคู่ และเราจะบันทึกไว้อีกด้วยว่า ถ้าหากศักย์อันตรกิริยา V เป็นสมมาตรทรงกลม และเป็นสัดส่วนกับ r^s ก็จะได้สมการ (7.35) ในอีกรูปแบบหนึ่ง คือ

$$\begin{aligned} 2\langle T\rangle &= \left\langle r\frac{\partial V}{\partial r}\right\rangle \\ &= s\langle V\rangle \end{aligned} \tag{7.36}$$

สมการคลื่นชเรอดิงเงอร์สำหรับระบบสองวัตถุ (The Schrödinger Equation for a Two-Body System

ตัวอย่างของวิวัฒนาการตามเวลาของระบบ เราจะพิจารณากรณีของสองอนุภาคที่มีมวล m_1 และ m_2 อนุภาคทั้งสองมีอันตรกิริยาแบบไม่ขึ้นกับเวลาต่อกัน ซึ่งแทนอันตรกิริยานี้ด้วยศักย์ $V(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)$ ที่ขึ้นเฉพาะกับพิกัดสัมพัทธ์เพียงเท่านั้น เพราะฉะนั้นแฮมิลทันเนียนเชิงแบบฉบับ H ของระบบ ก็จะกำหนดให้เป็น

$$H=\frac{p_1^2}{2m_1}+\frac{p_2^2}{2m_2}+V(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2) \tag{7.37}$$

เมื่อแทน $\mathbf{p}_1 \to -i\hbar\nabla_{\mathbf{r}_1}$ และ $\mathbf{p}_2 \to -i\hbar\nabla_{\mathbf{r}_2}$ ลงไป ก็จะได้ตัวดำเนินการแฮมิลทันเนียนในทางกลศาสตร์ควอนตัมที่สอดคล้องกับสมการคลื่นชเรอดิงเงอร์ไม่ขึ้นกับเวลาในปริภูมิโครงร่าง (configuration space)

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,t)=\left[-\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla^2_{\mathbf{r}_1}-\frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla^2_{\mathbf{r}_2}+V(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)\right]\Psi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,t) \tag{7.38}$$

สมการที่ได้นี้เป็นสมการเชิงอนุพันธ์ย่อยแบบ 7 มิติ และเราจะสามารถลดทอนลงโดยการใช้พิกัดสัมพัทธ์

$$\mathbf{r}=\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2 \tag{7.39}$$

และเวกเตอร์

$$\mathbf{R} = \frac{m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2}{m_1 + m_2} \tag{7.40}$$

ซึ่งเป็นเวกเตอร์ตำแหน่งของศูนย์กลางมวล (center of mass),CM, ของระบบ เปลี่ยนตัวแปรจากพิกัด $(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ ให้เป็นพิกัดใหม่ $(\mathbf{r}, \mathbf{R})$ ซึ่งในทางการคำนวณจะสามารถทำออกมาได้ว่า (อยู่ในแบบฝึกหัด 7.4)

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla^2_{\mathbf{r}_1} - \frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla^2_{\mathbf{r}_2} = -\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2_{R} - \frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2_{\mathbf{r}} \tag{7.41}$$

เมื่อ

$$M = m_1 + m_2 \tag{7.42}$$

เป็นมวลรวมของระบบ

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \tag{7.43}$$

เป็นมวลลดทอน (reduce mass) ของสองอนุภาค เพราะฉะนั้นสมการชเรอดิงเงอร์ [สมการ (7.28)] ก็จะกลายเป็น

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{R},\mathbf{r},t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2_{\mathbf{R}} - \frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2_{\mathbf{r}} + V(\mathbf{r})\right]\Psi(\mathbf{R},\mathbf{r},t) \tag{7.44}$$

สมการ (7.44) นี้อาจหามาได้อีกวิธีหนึ่ง โดยการใช้ โมเมนตัมสัมพัทธ์ (relative momentum)

$$\mathbf{p} = \frac{m_2\mathbf{p}_1 - m_1\mathbf{p}_2}{m_1 + m_2} \tag{7.45}$$

ร่วมกับโมเมนตัมรวม

$$\mathbf{P} = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 \tag{7.46}$$

เนื่องจาก

$$\frac{\mathbf{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m_2} = \frac{\mathbf{P}^2}{2M} + \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} \tag{7.47}$$

แฮร์มิลทันเนียนแบบฉบับตามสมการ (7.37) ก็สามารถเขียนได้เป็น

$$H = \frac{\mathbf{P}^2}{2M} + \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + V(\mathbf{r}) \tag{7.48}$$

ซึ่งเมื่อแทน $\mathbf{P} \to -i\hbar\nabla_{\mathbf{R}}$ และ $\mathbf{p} \to -i\hbar\nabla_{\mathbf{r}}$ ลงไปในสมการ (7.38) ก็จะได้แฮร์มิลทันเนียนใหม่ในแบบกลศาสตร์ควอนตัมเป็น

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_{\mathbf{R}}^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_{\mathbf{r}}^2 + V(\mathbf{r}) \tag{7.49}$$

ซึ่งก็จะทำให้ได้สมการชเรอดิงเงอร์เหมือนกันกับสมการ (7.44)

การแยกตัวแปรที่จะทำกับสมการ (7.44) จะมีสองตัวแปรคือ $\mathbf{R}$ และ $\mathbf{r}$ ส่วนตัวแปรของเวลา t นั้นมีผลเฉลยที่แน่นอนอยู่แล้วเพราะศักย์ $V(\mathbf{r})$ ไม่ขึ้นกับเวลา คือ $\exp[-i(E_{CM}+E)t/\hbar]$ ดังนั้นเราจะเขียน

$$\Psi(\mathbf{R},\mathbf{r},t) = \Phi(\mathbf{R})\psi(\mathbf{r})\exp[-i(E_{CM}+E)t/\hbar] \tag{7.50}$$

เมื่อฟังก์ชัน $\Phi(\mathbf{R})$ และ $\psi(\mathbf{r})$ สอดคลองกับสมการต่อไปนี้ ตามลำดับ

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_{\mathbf{R}}^2\Phi(\mathbf{R}) = E_{\mathrm{CM}}\Phi(\mathbf{R}) \tag{7.51}$$

และ

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_{\mathbf{r}}^2 + V(\mathbf{r})\right]\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \tag{7.52}$$

เราจะเห็นว่าสมการแรก [สมการ (7.51)] เป็นสมการชเรอดิงเงอร์ไม่ขึ้นกับเวลาที่อธิบายศูนย์กลางเหมือนเป็นอนุภาคอิสระที่มีมวล M และพลังงาน E_{CM} ส่วนสมการชเรอดิงเงอร์ไม่ขึ้นกับเวลาถัดมา [สมการ (7.52)] อธิบายการเคลื่อนที่สัมพัทธ์ของสองอนุภาคเหมือนกับเป็นการเคลื่อนที่อนุภาคเดี่ยวที่มีมวลลดทอน μ ในศักย์ $V(\mathbf{r})$ พลังงานรวมของระบบก็จะเป็น

$$\mathbf{E}_{tot} = \mathbf{E}_{CM} + \mathbf{E} \tag{7.53}$$

เพราะฉะนั้นเป็นการแยกปัญหาสองวัตถุที่มีอยู่ในตอนเริ่มต้น ออกเป็นปัญหาหนึ่งวัตถุสองปัญหา คือปัญหาของอนุภาคอิสระ(ศูนย์กลางมวล) และปัญหาของอนุภาคเดี่ยวที่มีมวล μ ในศักย์ $V(\mathbf{r})$

แบบฝึกหัด

7.1 พิจารณาอนุภาคมวล m เคลื่อนที่ในศักย์ $V(\mathbf{r},t)$ ดังนั้นแฮมินทันเนียนกำหนดให้โดย

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r},t)$$

ใช้สมการ (7.29) และพีชคณิตของตัวทำสลับที่ พิสูจน์ว่า

$$\frac{d}{dt}\langle x\rangle^2 = \frac{1}{m}\left(\langle xp_x\rangle + \langle p_x x\rangle\right)$$

7.2 แปลงทฤษฎีบทเวอร์เอียลตามสมการ (7.35) ให้อยู่ในรูปทั่วไปกับระบบ N อนุภาค ที่มีแฮมิลทันเนียนตามแบบสมการ (7.2)

7.3 พิจารณาระบบหนึ่งอนุภาคที่แฮมิลทันเนียนไม่ขึ้นกับ x ใช้สมการ (7.29) แสดงว่าโมเมนตัมในแนวแกน x เป็นค่าคงตัวของการเคลื่อนที่

7.4 พิสูจน์สมการ (7.41)

บรรณานุกรม

1. Ballentine, L. E. (1998) *Quantum Mechanics : A Modern Development.* World Scientific, Massachusetts.

2. Bransden, B. H. and Joachain, C. J. (2000) *Quantum Mechanics.* Pearson Education, 2nd Edn, London.

3. Dirac, P. A. (1958) *The Principles of Quantum Mechanics*, 4th Edn. Oxford University Press, New York.

4. Liboff, R. L. (1997) *Introductory Quantum Mechanics* , 3nd Edn. Addison – Wesley, Massachusetts.

4. Townsend, J. S. (1992) *A Modern Approach to Quantum Mechanics*. McGraw-Hill, New York.

ตอนที่ 8

ภาพชเรอดิงเงอร์และไฮเซนเบิร์ก

The Schrödinger and Heisenberg Pictures

ถึงแม้ว่าเราจะมีตัวแทนของฟังก์ชันคลื่นและสิ่งที่สังเกตได้อยู่หลายตัว ที่เชื่อมโยงกันด้วยการแปลงยูนิแทรี แต่จะเป็นประโยชน์มากหากเราจะจำแนกเอาตัวแทนประเภทหนึ่งขึ้นมาและเรียกว่า **ภาพ** (picture) ซึ่งจะเป็นแนวทางแตกต่างจากวิธีปฏิบัติในหัวข้อวิวัฒนาการตามเวลาที่ผ่านมา

ภาพชเรอดิงเงอร์ (Schrödinger picture) ซึ่งเราใช้กันมาอยู่กระทั่งทุกวันนี้ (ทั้งที่อยู่ในรูปแบบเชิงอนุพันธ์และเมทริกซ์) เป็นหนึ่งในตัวดำเนินการ ที่เป็นตัวแทนของตัวแปรของตำแหน่ง $\mathbf{r}_i$ และโมเมนตัม $\mathbf{p}_i$ ที่ขึ้นกับเวลา การหาวิวัฒนาการตามเวลาของระบบตามภาพนี้กระทำโดยให้ฟังก์ชันคลื่นที่ขึ้นกับเวลา $\psi(t)$ สอดคล้องตามสมการ (7.1) และตามสมการ (7.6) ฟังก์ชันคลื่น $\psi(t)$ จะสัมพันธ์กับค่าของมันขณะอยู่ที่เวลา t_0 โดยใช้การแปลงยูนิแทรีเป็นตัวทำ คือ $\Psi(t) = U(t_0,t)\Psi(t_0)$ เมื่อ $U(t_0,t)$ เป็นตัวดำเนินการวิวัฒนาการ การขึ้นกับเวลาของค่าคาดหมายของตัวดำเนินการที่ขึ้นกับเวลา $\mathbf{r}_i$ และ $\mathbf{p}_i$ กำหนดให้โดยสมการ (7.29) และในอีกทางหนึ่งอัตราการเปลี่ยนของค่าคาดหมายของตัวดำเนินการซึ่งขึ้นกับเวลาชัดเจน (เช่นศักย์ไม่ขึ้นกับเวลา $V(\mathbf{r},t)$) หาโดยใช้สมการ (7.26)

ภาพไฮเซนเบิร์ก (Heisenberg pictures) ได้มาจากภาพชเรอดิงเงอร์ โดยการใส่ฟังก์ชันคลื่นชเรอดิงเงอร์ $\Psi(t)$ ลงในตัวดำเนินการยูนิแทรี $U^\dagger(t,t_0) = U(t_0,t)$ ซึ่งจะได้ผลลัพธ์เป็นฟังก์ชันคลื่นไฮเซนเบิร์ก (Heisenberg wave function) (หรือฟังก์ชันสถานะ) Ψ_H ตามนี้

$$\Psi_H = U^\dagger(t,t_0)\Psi(t) = U(t_0,t)\Psi(t) = \Psi(t_0) \tag{8.1}$$

ดังนั้นในภาพไฮเซนเบิร์ก ฟังก์ชันคลื่น Ψ_H จึงไม่ขึ้นกับเวลา เพราะพ้องกันกับฟังก์ชันคลื่นชเรอดิงเงอร์ที่ตรึงเวลาอยู่ที่ t_0 จากการใช้สมการ (8.1) และ (5.2) เราจะเห็นว่า ถ้า A เป็นตัวดำเนินการในภาพชเรอดิงเงอร์ และ A_H เป็นตัวดำเนินการที่สอดคล้องกัน ในภาพไฮเซนเบิร์กเราจะได้

$$A_H(t) = U^\dagger(t,t_0)AU(t,t_0)$$
$$= U(t_0,t)AU^\dagger(t_0,t) \tag{8.2}$$

และหมายเหตุด้วยว่า $A_H(t)$ ขึ้นกับเวลาแม้ว่า A จะไม่ขึ้นกับเวลาก็ตาม การแปรเปลี่ยนตามเวลาของ $A_H(t)$ สามารถหาได้ดังต่อนี้ เราเขียน $U \equiv U(t_0,t)$ จากสมการ (8.2) เราจะได้ว่า

$$\frac{d}{dt}A_H(t) = \frac{\partial U}{\partial t}AU^\dagger + U\frac{\partial A}{\partial t}U^\dagger + UA\frac{\partial U^\dagger}{\partial t} \tag{8.3}$$

ใช้สมการ (7.10) และความจริงที่ว่า H เป็นเฮอร์มิเทียน และ U เป็นยูนิแทรี แล้วเราจะได้ว่า

$$\frac{d}{dt}A_H(t) = (i\hbar)^{-1}(-UHAU^\dagger + UAHU^\dagger) + U\frac{\partial A}{\partial t}U^\dagger$$
$$= (i\hbar)^{-1}(-UHU^\dagger UAU^\dagger + UAU^\dagger UHU^\dagger) + U\frac{\partial A}{\partial t}U^\dagger \tag{8.4}$$

เรานิยามตัวดำเนินการไฮเซนเบิร์ก (Heisenberg operator)

$$H_H = UHU^\dagger \tag{8.5}$$

และ

$$\left(\frac{\partial A}{\partial t}\right)_H = U\frac{\partial A}{\partial t}U^\dagger \tag{8.6}$$

เราก็จะได้ว่า

$$\frac{\partial}{\partial t}A_H(t) = (i\hbar)^{-1}[A_H, H_H] + \left(\frac{\partial A}{\partial t}\right)_H \tag{8.7}$$

ซึ่งคือสมการการเคลื่อนที่ไฮเซนเบิร์ก (Heisenberg equation of motion) สำหรับตัวดำเนินการ A_H

ตัวอย่าง ถ้าเราพิจารณากรณีของส่วนประกอบในทางแกน x ของตำแหน่ง และโมเมนตัม x และ p_x เนื่องจากว่าตัวดำเนินการเหล่านี้ไม่ขึ้นกับเวลาในภาพชเรอดิงเงอร์ ($\partial x / \partial t = \partial p_x / \partial t = 0$) เราจะเห็นจากสมการ (8.6) และ (8.7) ว่า

$$\frac{dx_H}{dt} = (i\hbar)^{-1}[x_H, H_H] \tag{8.8a}$$

และ

$$\frac{d(p_x)H}{dt} = (i\hbar)^{-1}[(p_x)_H, H_H] \tag{8.8b}$$

ใช้ความจริงที่ว่า ความสัมพันธ์การสลับที่ [สมการ (4.2)] ไม่เปลี่ยนแปลงโดยการแปลงยูนิทรี รวมทั้งจากแบบฝึกหัด 4.1 ก็จะได้

$$\frac{dx_H}{dt} = \frac{\partial H_H}{\partial (p_x)_H} \tag{8.9a}$$

และ

$$\frac{d(p_x)_H}{dt} = -\frac{\partial H_H}{\partial x_H} \tag{8.9b}$$

ซึ่งมีรูปแบบเหมือนกับสมการแบบบัญญัติของแฮมิลทัน (Hamilton's canonical equations) ในกลศาสตร์แบบฉบับ เพราะฉะนั้นเราจะเห็นว่าภาพไฮเซนเบิร์กในพลศาสตร์ควอนตัมมีรูปแบบใกล้เคียงกับในกลศาสตร์แบบฉบับมาก

ก็เป็นที่ประจักษ์ว่า เนื่องจากภาพของชเรอดิงเงอร์และภาพของไฮเซนเบิร์กสัมพันธ์กันโดยการแปลงยูนิแทรี ดังนั้นปริมาณทางฟิสิกส์ทั้งหมด เช่น ค่าเฉพาะ และค่าคาดหมาย ไม่ว่าจะคำนวณในภาพใด ก็ได้ค่าเหมือนกัน

เราจะหมายเหตุว่า ถ้าตัวดำเนินการแฮมิลทันเนียน H ในภาพชเรอดิงเงอร์เป็นแบบไม่ขึ้นกับเวลา ตัวดำเนินการวิวัฒนาการในภาพนั้นก็จะกำหนดให้โดยสมการ (7.8) และก็จะได้ต่อมาว่าฟังก์ชันคลื่นไฮเซนเบิร์กสัมพันธ์กับฟังก์ชันคลื่นชเรอดิงเงอร์โดย

$$\Psi_H \equiv \Psi(t_0) = \exp\left[\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)\right]\Psi(t) \tag{8.10}$$

และเราจะเห็นจากสมการ (8.5) ว่า $H_H = H$

ในบางครั้งเราก็นิยามภาพอื่นขึ้นมาใช้ประโยชน์ ซึ่งการแปลงยูนิแทรีของมันจะทำกับฟังก์ชันคลื่น $\Psi(t)$ ที่ไม่มีแฮมิลทันเนียนอยู่เต็มเหมือนกับที่เห็นในสมการ (8.11) แต่มีเป็นบางส่วน ภาพเช่นนั้นเรียกว่า **ภาพอันตรกิริยา** (interaction picture)

แบบฝึกหัด

จงแสดงว่าในกรณีการแกว่งกวัดในหนึ่งมิติ ที่อธิบายในภาพไฮเซนเบิร์กโดยแฮมิลทันเนียน

$$H_H = \frac{1}{2m} p_H^2(t) + \frac{1}{2} k x_H^2(t)$$

เมื่อ $p_H \equiv (p_x)_H$ มีผลเฉลยทั่วไปของสมการ (8.9) เป็น

$$x_H = x_H(0)\cos\omega t + \frac{1}{m\omega} p_H(0)\sin\omega t,$$
$$p_H(t) = -m\omega x_H(0)\sin\omega t + p_H(0)\cos\omega t$$

เมื่อ $\omega = (k/m)^{1/2}$

และแฮมิลทันเนียน H_H ไม่ขึ้นกับเวลาใช่หรือไม่ ?

บรรณานุกรม

1. Ballentine, L. E. (1998) *Quantum Mechanics : A Modern Development.* World Scientific, Massachusetts.

2. Bransden, B. H. and Joachain, C. J. (2000) *Quantum Mechanics*. Pearson Education, 2nd Edn, London.

3. Dirac, P. A. (1958) *The Principles of Quantum Mechanics*, 4th Edn. Oxford University Press, New York.

4. Liboff, R. L. (1997) *Introductory Quantum Mechanics* , 3nd Edn. Addison – Wesley, Massachusetts.

5. Townsend, J. S. (1992) *A Modern Approach to Quantum Mechanics*. McGraw-Hill, New York.

ตอนที่ 9

ปริพันธ์ตามวิถี

(Path Integrals)

ถ้าหากได้ผ่านศึกษากลศาสตร์ควอนตัมเบื้องต้นมาแล้ว คงจะเคยได้พบมาว่าสมการคลื่นชเรอดิงเงอร์สามารถสร้างมาได้จากแฮมิลทันเนียนแบบฉบับ เพียงแต่แทนพิกัดและโมเมนตัมที่อยู่ในแฮมิลทันเนียนด้วยตัวดำเนินการของมันเท่านั้น แต่มีการสร้างกลศาสตร์ควอนตัมอีกแนวทางหนึ่ง ที่พัฒนาขึ้นมาโดย อาร์. พี. ไฟยน์แมน (R. P. Feynman) ซึ่งสัมพันธ์อย่างใกล้ชิดกับฟังก์ชันลากรานเจียนแบบฉบับ (classical Lagrangian function) แนวทางที่พัฒนาขึ้นมานี้ทำให้เกิดการหยั่งเห็นใหม่เกี่ยวกับโครงสร้างของกลศาสตร์ควอนตัมและขีดจำกัดในเชิงแบบฉบับของมัน อีกทั้งทำให้ได้กรอบความคิดที่เป็นประโยชน์อย่างมากต่อการศึกษาปัญหาขนาดใหญ่ต่างๆในฟิสิกส์พลังงานสูง และฟิสิกส์เชิงสถิติ เพื่อเป็นการหลีกเลี่ยงการใช้สัญกรณ์ที่ยุ่งยากในสร้างสูตรของไฟยน์แมนที่อยู่บนฐานของปริพันธ์ตามวิถี (path integrals) การศึกษาของเราจะศึกษาการเคลื่อนที่ในหนึ่งมิติของอนุภาคมวล m ในศักย์ที่ไม่ขึ้นกับเวลา $V(x)$ ซึ่งฟังก์ชันลากรานเจียนแบบฉบับของมันจะเป็น

$$L = T - V(x) \tag{9.1}$$

เมื่อ T เป็นพลังงานจลน์

$$T = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 \tag{9.2}$$

เครื่องหมายจุด กำหนดให้เป็นอนุพันธ์เทียบกับเวลา สมการการเคลื่อนที่เขียนในพจน์ของ L เรียกว่าสมการออยเลอร์-ลากรานจ์ (Euler-Lagrange equation) คือ

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right) - \frac{\partial L}{\partial x} = 0 \tag{9.3}$$

และผลเฉลยของสมการอันดับสองนี้พร้อมกับเงื่อนไขขอบ (boundary condition) $x(t_0) = a$,

$\dot{x}(t_0) = b$, หาได้จากวิถีแบบฉบับ

$$x = x(t) \tag{9.4}$$

สมการของการเคลื่อนที่ [สมการ (9.3)] มาจากหลักของแฮมิลทัน (Hamilton's principle) ซึ่งกล่าวว่าการเคลื่อนที่ของระบบจากเวลา t_0 ถึง t เป็นไปในทางที่ **แอกชัน** (action) I คงที่ (stationary) เมื่อนิยาม I โดย

$$I(t_1, t_0) = \int_{t_0}^{t} L(\dot{x}(t), x(t))dt \tag{9.5}$$

และการหาปริพันธ์จะทำตามวิถีแบบฉบับ ตามสมการ (9.4)

เงื่อนไขคงที่ (stationary condition) หมายความว่า ถ้าหากปริพันธ์ตามเส้น [สมการ (9.5)] กระทำตามวิถีข้างเคียงกับสมการ (9.4) ดังนั้น

$$x = x(t) + \varepsilon\eta(t) \tag{9.6}$$

เมื่อ ε เป็นปริมาณที่มีค่าน้อย และ $\eta(t)$ เป็นฟังก์ชันที่กำหนดให้ในทางที่

$$\eta(t_0) = \eta(t) = 0 \tag{9.7}$$

แล้ว การเปลี่ยนใน I จะเป็นอันดับ ε^2

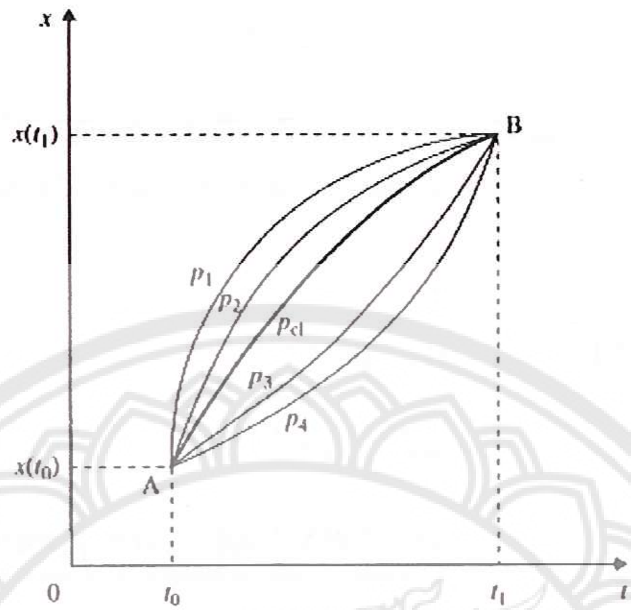
ฟังก์ชันคลื่นชเรอดิงเงอร์ $\Psi(x, t_1)$ ของการเคลื่อนที่ในหนึ่งมิติ เขียนให้อยู่ในแบบ

$$\Psi(x, t_1) = \int_{-\infty}^{\infty} K(x, t_1; x', t_0)\Psi(x', t_0)dx' \tag{9.8}$$

ไฟยน์แมนแสดงนิพจน์ของ **ตัวแผ่** (propagator) K ว่ามีนิพจน์เป็น

$$K(x, t_1; x', t_0) = \sum_p W_p \exp[iI_p(t_1, t_0)/\hbar] \tag{9.9}$$

เมื่อ $I_p(t_1, t_0)$ คือตัวกระทำแบบฉบับ [สมการ (9.5)] ซึ่งการหาปริพันธ์กระทำตามวิถี $x = x_p(t)$ การรวมทั่วทั้ง p ก็คือการรวมทั้งหมดทุกวิถี $x = x_p$ ซึ่งเชื่อมต่ออยู่ระหว่าง $x(t_1)$ และ $x(t_0)$ และ W_p เป็นตัวประกอบถ่วงน้ำหนัก (weighting factor) (ดูรูป 9.1 ประกอบ) ด้วยเหตุที่แต่ละวิถีอยู่อย่างความต่อเนื่อง (continuum) กัน การรวมทั่ว p จึงแทนชนิดของปริพันธ์ที่เรียกว่า **ปริพันธ์ตามวิถี** (path integral)



รูป 9.1 วิถีต่าง ๆ $p_1, p_2, \ldots$ ที่เชื่อมอยู่ระหว่างจุดปลาย A และ B สำหรับการเคลื่อนที่ระหว่างเวลา t_0 และ t สำหรับวิถีแบบฉบับ จะใส่ตัวห้อยเป็น p_{cl} (จาก B. H. Bransden and C. J. Joachain, *Quantum Mechanics*, Pearson Education, 2nd Edn, London, 2000, p. 242)

สำหรับอนุภาคที่มีความยาวคลื่นสั้นเมื่อเทียบกับพิสัยของศักย์ ค่า $I/\hbar$ จะมีค่าใหญ่มาก การเปลี่ยนใน I ระหว่างวิถีที่อยู่ใกล้เคียงกันก็จะมากด้วย ดังนั้นค่าเลขชี้กำลัง (exponential) ที่อยู่ในสมการ (9.9) จะแกว่งกวัดอย่างรวดเร็วตามลำดับ (sequence) ของการรวมทั่ววิถี โดยค่าเฉลี่ยอยู่ที่ศูนย์ ยกเว้นแต่ในกรณีหาก I คงที่ การเปลี่ยนใน I ระหว่างวิถีใกล้เคียงจะเป็นศูนย์ และผลการรวมจะได้ค่าเป็นค่าจำกัด (finite) สิ่งที่กล่าวมาเหล่านี้จะปรากฏกับวิถีแบบฉบับ (classical path) p_{cl} ซึ่งเป็นวิถีที่มีนัยสำคัญเฉพาะกับในระบบมหภาค (macroscopic system) เท่านั้น ในทางตรงข้าม ถ้าเป็นระบบจุลภาค (macroscopic system) เช่นการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนในศักย์ที่มีติขนาดอะตอม ค่า $I/\hbar$ จะมีค่าไม่มาก ดังนั้นค่าตัวแผ่ K ที่ได้จะไม่เด่นชัดมาก

เมื่อทำกับสมการ (9.9) ต่อ เราก็จะเขียนตัวแผ่อยู่ในรูปแบบ K

$$K(x,t_1;x',t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H(t_1-t_0)\right)\delta(x-x') \tag{9.10}$$

ซึ่งได้มาจากการเปรียบเทียบสมการ (7.20) กับสมการ (9.8) ในกรณีที่เป็นอยู่นี้ จะมีแฮมิลทันเนียน H เป็น

$$H = \frac{p_x^2}{2m} + V(x) \tag{9.11}$$

ช่วงเวลา $(t-t_0)$ อาจแบ่งออกเป็น N ส่วนเท่า ๆ กัน ที่แต่ละส่วนมีส่วนกว้าง $\Delta t = (t-t_0)/N$ ดังนั้น ตัวดำเนินการวิวัฒนาการ $\exp[-iH(t_1-t_0)]/\hbar$ สามารถเขียนให้นิพจน์อยู่ในรูปผลคูณของ N พจน์ คือ

$$\begin{aligned}
\exp\left(-\frac{i}{\hbar}H(t_1-t_0)\right) &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar}HN\Delta t\right) \\
&= \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H\Delta t\right)^N \\
&= \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H\Delta t\right)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}H\Delta t\right)...\exp\left(-\frac{i}{\hbar}H\Delta t\right)
\end{aligned} \tag{9.12}$$

ใช้กับสมการ (9.10) และแทรกฟังก์ชันเดลตาเข้าไประหว่างแต่ละตัวประกอบของ $\exp(-iH\Delta t/\hbar)$ ตัวแผ่ K ก็จะอยู่ในรูป

$$\begin{aligned}
K(x_N,t_1;x_0,t_0) = \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 ... \int_{-\infty}^{\infty} dx_{N-1} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H\Delta t\right)\delta(x_N - x_{N-1}) \\
\times \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H\Delta t\right)\delta(x_{N-1}-x_{N-2})... \\
\times \delta(x_2-x_1)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}H\Delta t\right)\delta(x_1-x_0)
\end{aligned} \tag{9.13}$$

โดยเราเปลี่ยนใช้สัญกรณ์ $x = x_N$ และ $x' = x_0$ เพื่อความสะดวก

โดยการทำให้ N มีค่ามาก ดังนั้น Δt ก็จะมีค่าน้อย และ $(\Delta t)^2 \ll \Delta t$ ก็จะเห็นสมการ (7.19) เป็น

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar}H\Delta t\right) \simeq \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\frac{p_x^2}{2m}\Delta t\right)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}V(x)\Delta t\right) \tag{9.14}$$

ความสัมพันธ์นี้เลือกถึงพจน์อันดับสอง $(\Delta t)^2$ และให้อยู่ในขีดจำกัด $N \to \infty$ นั่นคือ $\Delta t \to 0$ แต่ละฟังก์ชันเดลตาในสมการ (9.13) สามารถทำให้มีนิพจน์อยู่ในรูปแบบ

$$\delta(x_n - x_{n-1}) = (2\pi)^{-1}\int_{-\infty}^{\infty} dk \exp[ik(x_n - x_{n-1})], \quad n = 1,2,...N \tag{9.15}$$

เนื่องจากคลื่นระนาบ $\exp[ik(x_n - x_{n-1})]$ เป็นฟังก์ชันเฉพาะของตัวดำเนินการพลังงานจลน์ $p_x^2/2m$ ที่สอดคล้องกับค่าเฉพาะ $\hbar^2k^2/2m$ เราจะได้สมการ (9.14) ในขีดจำกัดที่ Δt น้อย ๆ เป็น

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar}H\Delta t\right)\delta(x_n - x_{n-1})$$
$$= (2\pi)^{-1}\int_{-\infty}^{\infty} dk \exp\left(-i\frac{\hbar k^2}{2m}\Delta t + ik(x_n + x_{n-1})\right)$$
$$\times \exp\left(-\frac{i}{\hbar}V(x_{n-1})\Delta t\right) \tag{9.16}$$

เมื่อใช้ปริพันธ์ $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha u^2} e^{-\beta u} du = \left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{1/2} e^{\beta^2/4\alpha}$ ซึ่ง α และ β เป็นค่าจินตภาพ และให้ $\alpha = i\hbar\Delta t/(2m)$ และ $\beta = i(x_n - x_{n-1})$ เราจะได้ว่า

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar}H\Delta t\right)\delta(x_n - x_{n-1})$$
$$= \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}\right)^{1/2} \exp\left[\frac{im(x_n - x_{n-1})^2}{2\hbar\Delta t}\right] \exp\left[-\frac{i}{\hbar}V(x_{n-1})\Delta t\right] \tag{9.17}$$

เราจะหมายเหตุว่า เมื่อ $V = 0$ นิพจน์นี้จะลดรูปกลายไปเป็นตัวแผ่ของอนุภาคอิสระ ซึ่งแถลง $\Psi(x_n, t_0 + \Delta t)$ ในพจน์ของ $\Psi(x_{n-1}, t_0)$

จากสมการ (9.13), (9.16) และ (9.17) และใส่ขีดจำกัด $N \to \infty$ จะได้นิพจน์ที่แท้จริงของตัวแผ่ K เป็น

$$K(x_N, t_1; x_0, t_0) = \lim_{N\to\infty}\left[\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}\right]^{N/2} \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \ldots \int_{-\infty}^{\infty} dx_{N-1}$$
$$\times \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\Delta t \sum_{n=1}^{N}\left[\frac{m(x_n - x_{n-1})^2}{2(\Delta t)^2} - V(x_{n-1})\right]\right\} \tag{9.18}$$

จุด x_n เป็นค่าของ x ที่เวลา $t_0 + n\Delta t$ และชุดของจุด x_n, $n = 1, 2, 3, \ldots N$ จะนิยามวีถีที่อยู่ระหว่างจุดปลาย (x_0, t_0) และ (x_N, t_N) ดังในรูป 9.2 การปริพันธ์ทั่ววิถีจะส่งผลให้ได้เป็นผลรวมของวิถีทั้งหมด จากการที่เรานิยามปริพันธ์ตามวิถีในขีดจำกัด $N \to \infty$ ในพิกัดเช่นนี้จะได้ว่า

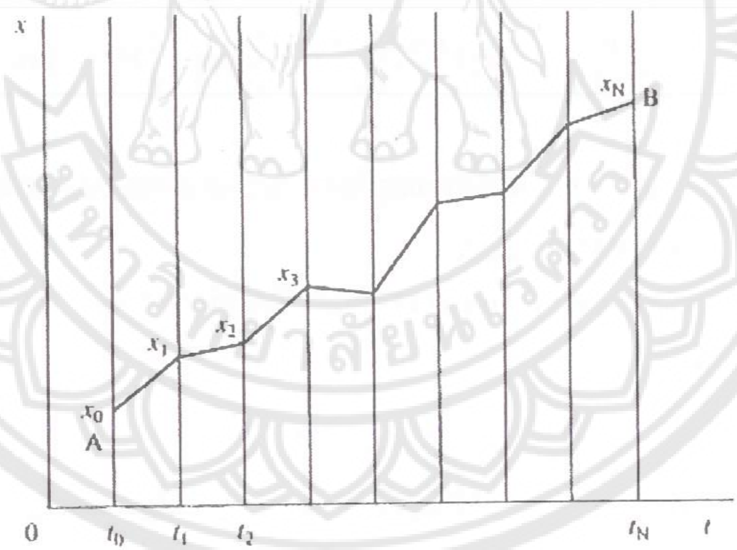
$$\lim_{\Delta t\to 0}\frac{(x_n - x_{n-1})^2}{(\Delta t)^2}\to (\dot{x}(t))^2 \tag{9.19}$$

และ

$$\Delta t\sum_{n=1}^{N}\to \int dt \tag{9.20}$$

ดังนั้นพจน์เลขชี้กำลังในสมการ (9.18) สามารถเขียนในพจน์ของแอกชันแบบฉบับ

$$\begin{aligned}&\lim_{N\to\infty}\frac{i}{\hbar}\Delta t\sum_{n=1}^{N}\left[\frac{m(x_n - x_{n-1})^2}{2(\Delta t)^2}-V(x_{n-1})\right]\\&=\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\left[\frac{1}{2}m(\dot{x}(t))^2 - V(x(t))\right]dt\\&=\frac{i}{\hbar}I(t_1,t_0)\end{aligned} \tag{9.21}$$



รูป 9.2 วิถีระหว่าง $A(x_0,t_0)$ และ $B(x_N,t_N)$ ถูกนิยามโดยอนุกรมของจุด x_n ที่เวลา $t_0 = t_0 + n\Delta t$ การหาปริพันธ์ทั่ววิถีจะทำให้ได้ผลรวมทั่วของวิถีทั้งหมด (จาก B. H. Bransden and C. J. Joachain, *Quantum Mechanics*, Pearson Education, 2nd Edn, London, 2000, p. 252)

ถ้าปริพันธ์ในสมการ (9.18) เขียนในรูปสัญลักษณ์เป็น

$$\int \mathcal{D}(x(t)) = \lim_{N\to\infty}\left[\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}\right]^{N/2} \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \ldots \int_{-\infty}^{\infty} dx_{N-1} \tag{9.22}$$

รูปแบบปริพันธ์ตามวิธีของ K ก็จะเขียนได้เป็น

$$K(x_N, t_1; x_0, t_0) = \int \mathcal{D}(x(t)) \exp\left(\frac{i}{\hbar} I(t_1, t_0)\right) \tag{9.23}$$

ถึงแม้ว่าจะเป็นการสะดวกในการแสดงผลรวมทั่วทุกวิถีโดยสัญลักษณ์ปริพันธ์ แต่ก็ต้องไม่ลืมว่าปริพันธ์ตามวิถีนิยามอยู่ในขีดจำกัด $N \to \infty$ ของนิพจน์ที่ไม่ต่อเนื่องในสมการ (9.18)

จากที่ได้อภิปรายตัวแผ่มานี้ ต่อไปนี้ฟังก์ชันคลื่นที่เคยทำให้อยู่ในรูปแบบปริพันธ์ตามวิถีโดยใช้ตัวดำเนินการวิวัฒนาการ (สมการ 7.18) ซึ่งได้มาจากสมการชเรอดิงเงอร์ ก็เป็นไปได้ที่จะเปลี่ยนมาให้อยู่ในนิพจน์สมการ (9.23) เมื่อ I เป็นแอกชันแบบฉบับ และอาจพัฒนากลศาสตร์ควอนตัมขึ้นมาใหม่จากตรงนี้

แต่ก็มีข้อยกเว้นกับศักย์อยู่สองสามศักย์ รวมทั้งตัวแกว่งกวัดฮาร์มอนิกซึ่งตัวแผ่ไม่อาจหามาได้อย่างแท้จริงจากสมการ (9.23) ดังนั้นนิพจน์ของปริพันธ์ตามวิถีก็ยังมีข้อจำกัดในการใช้คำนวณอยู่ แต่อย่างไรก็ตาม ปริพันธ์ตามวิถีก็นำพาไปสู่ความเข้าใจปรากฏการณ์ทางฟิสิกส์ทั้งในกลศาสตร์ควอนตัมไม่เชิงสัมพัทธภาพ และในทฤษฎีสนามควอนตัมเชิงสัมพันธภาพ

บรรณานุกรม

1. Ballentine, L. E. (1998) *Quantum Mechanics : A Modern Development*. World Scientific, Massachusetts.

2. Bransden, B. H. and Joachain, C. J. (2000) *Quantum Mechanics*. Pearson Education, 2nd Edn, London.

3. Feynman, R. P. and Hibbs, R. A. (1965) *Quantum Mechanics and Path Integrals*. McGraw-Hill. New York.

4. Townsend, J. S. (1992) *A Modern Approach to Quantum Mechanics*. McGraw-Hill, New York.

ตอนที่ 10

หลักสมมาตรและกฎการอนุรักษ์

(Symmetry Principles and Conservation Laws)

ในหัวข้อนี้ เราจะอภิปรายการการเชื่อมโยงกันระหว่างหลักสมมาตร (Symmetry Principles) กับกฎการอนุรักษ์ (Conservation Laws) โดยการทำสมมาตรที่เรากล่าวถึงอยู่นี้ เป็นการแปลงตัวแปรทางพลศาสตร์ ในทางที่ทำให้ได้ตัวดำเนินการแฮมิลทันเนียนที่ไม่ขึ้นกับเวลา ที่แสดงความยืนยง (invariant) ไม่เปลี่ยนแปลงของระบบเอกเทศ (isolated system)

การเลื่อนที่ปริภูมิและกฎการอนุรักษ์ของโมเมนตัม

(Spatial Translations and Conservation of Momentum)

เราจะเริ่มต้นวิเคราะห์ความเชื่อมโยงกันระหว่างสมบัติทางการเลื่อนที่ของระบบ กับการอนุรักษ์โมเมนตัม เราจะตั้งข้อสมมุติว่าสมบัติทางฟิสิกส์ของระบบเอกเทศ ไม่เปลี่ยนสลับไปตามการเลื่อนที่ (translation) ของระบบไปเป็นจำนวน **a** กล่าวคือปรากฏการณ์ที่เกิดอยู่ในระบบเลื่อนที่ (ที่ไม่ถูกรบกวน) จะยังเหมือนเดิม เพียงแต่ย้ายที่[2] จุดกำเนิดไปอยู่ที่ $-\mathbf{a}$ เท่านั้น ดังนั้นในการเลื่อนที่ไป **a** นี้ เวกเตอร์ตำแหน่งตัวใหม่ $\mathbf{r}'$ จะสัมพันธ์กับเวกเตอร์ตำแหน่งตัวเก่า $\mathbf{r}$ โดย

$$\mathbf{r}' = T(a)\mathbf{r} \equiv \mathbf{r} + \mathbf{a} \tag{10.1}$$

เมื่อ $T(\mathbf{a})$ เป็นตัวดำเนินการที่ทำให้เกิดการแปลง และการเลื่อนที่ผกผัน (inverse translation) $T^{-1}(\mathbf{a})$ ของมันนิยามเป็น

---

[2] การแปลงในระบบที่มีการเคลื่อนที่สัมพัทธกับอีกระบบพิกัดหนึ่ง จะเรียกว่าเป็นการแปลงแอ็กทีฟ (active transformation) ในทางกลับกัน ถ้าพิจารณาเป็นว่าให้ระบบที่เคลื่อนที่นั้นตรึงอยู่กับที่ แต่ระบบพิกัดเป็นตัวเคลื่อนที่ออกไป ก็จะเรียกว่าเป็นการแปลงพาสซีฟ (passive transformation)

$$\mathbf{r} = T^{-1}(\mathbf{a})\mathbf{r}' \equiv \mathbf{r}' - \mathbf{a} \tag{10.2}$$

ทีนี้ให้เราพิจารณากรณีง่าย ๆ ของระบบที่ประกอบด้วยอนุภาคที่ไร้โครงสร้างภายใน ที่แทนระบบ (ณ เวลาที่กำหนดให้) ด้วย $\psi(\mathbf{r})$ และหลังจากระบบเลื่อนที่ไปแล้ว $\mathbf{a}$ ก็แทนด้วยฟังก์ชันคลื่น $\psi(\mathbf{r}')$ และนิยามให้ฟังก์ชันคลื่น $\psi(\mathbf{r})$ และ $\psi(\mathbf{r}')$ เชื่อมโยงกันด้วยตัวดำเนินการ $U_{\mathrm{T}}(\mathbf{a})$

$$\psi(\mathbf{r}') = U_{\mathrm{T}}(\mathbf{a})\psi(\mathbf{r}) \tag{10.3}$$

เนื่องจากการเลื่อนที่ไปเป็นจำนวน $\mathbf{a}$ สมมูลได้กับการเลื่อนของจุดกำเนิดของพิกัดไป $-\mathbf{a}$ จึงเขียนได้ว่า

$$\begin{aligned}\psi'(\mathbf{r}+\mathbf{a}) &= \psi'(T\mathbf{r}) \\ &= \psi(\mathbf{r})\end{aligned} \tag{10.4}$$

หรือเขียนสลับกันกัน

$$\begin{aligned}\psi'(\mathbf{r}) &= U_{\mathrm{T}}(\mathbf{a})\psi(\mathbf{r}) = \psi(T^{-1}\mathbf{r}) \\ &= \psi(\mathbf{r}-\mathbf{a})\end{aligned} \tag{10.5}$$

เนื่องจากสมบัติทางฟิสิกส์ของระบบจะไม่กลับกันตามการแปลง ดังนั้น $U_{\mathrm{T}}(\mathbf{a})$ จะต้องเป็นยูนิแทรี (ดูในหัวข้อตอนที่ 5) รูปแบบที่ชัดแจ้ง (explicite form) ของ $U_{\mathrm{T}}(\mathbf{a})$ อาจหาได้โดยการพิจารณาจากผลปรากฏของการแปลงน้อยยิ่ง (infinitesimal transformation) ไป $\delta\mathbf{a}$ ซึ่งฟังก์ชันคลื่นที่เกิดจากการแปลงน้อยยิ่ง $\delta\mathbf{a}$ นี้ เขียนได้จากสมการ (10.5) แต่รักษาไว้เฉพาะพจน์อันดับแรกใน $\delta\mathbf{a}$

$$\begin{aligned}\psi'(\mathbf{r}) &= \psi(\mathbf{r}-\delta\mathbf{a}) \\ &= \psi(\mathbf{r}) - \delta a_x \frac{\partial\psi(\mathbf{r})}{\partial x} - \delta a_y \frac{\partial\psi(\mathbf{r})}{\partial y} - \delta a_z \frac{\partial\psi(\mathbf{r})}{\partial z} \\ &= (I - \delta\mathbf{a}.\nabla)\psi(\mathbf{r})\end{aligned} \tag{10.6}$$

เปรียบเทียบสมการ (10.6) กับ (10.3) ก็จะเห็นว่าการแปลงยูนิแทรีน้อยยิ่ง $U_T(\delta\mathbf{a})$ คือ

$$\begin{aligned}U_{\mathrm{T}}(\delta\mathbf{a}) &= I - \delta\mathbf{a}.\nabla \\ &= I - \frac{i}{\hbar}\delta\mathbf{a}.\mathbf{p}_{\mathrm{op}}\end{aligned} \tag{10.7}$$

เมื่อ $\mathbf{p}_{op} \to -i\hbar\nabla$ เป็นตัวดำเนินการโมเมนตัมของอนุภาคในแบบพิกัดทางตำแหน่ง เพราะฉะนั้นเราจะเห็นว่า $\mathbf{p}_{op}$ เป็นตัวก่อกำเนิด หรือเจเนอเรเตอร์ ในรูปแบบโมเมนตัมของการเลื่อนที่น้อยยิ่ง

การเลื่อนที่ (อย่างจำกัด) $\mathbf{a}$ เกิดจากการขยับของการเคลื่อนที่น้อยยิ่งไปทีละก้าว $\delta\mathbf{a}$ ดังนั้นเมื่อเราให้ $\delta\mathbf{a} = \mathbf{a}/n$ เมื่อ n เป็นจำนวนเต็ม และ $n \to \infty$ เราจะได้ว่า

$$\begin{aligned} U_{\mathrm{T}}(\mathbf{a}) &= \lim_{n\to\infty}\left(I - \frac{i}{\hbar}\frac{\mathbf{a}.\mathbf{p}_{op}}{n}\right)^n \\ &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\mathbf{a}.\mathbf{p}_{\mathrm{op}}\right) \end{aligned} \tag{10.8}$$

ถ้าฟังก์ชันคลื่น $\psi(\mathbf{r})$ เป็นสถานะเฉพาะของตัวดำเนินการโมเมนตัม $\mathbf{p}_{\mathrm{op}}$ ที่สอดคล้องกับค่าเฉพาะ $\mathbf{p}$ คือ

$$\mathbf{p}_{\mathrm{op}}\psi = \mathbf{p}\psi \tag{10.9}$$

ก็จะได้ตามมาว่า

$$U_{\mathrm{T}}(\mathbf{a})\psi = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\mathbf{a}.\mathbf{p}\right)\psi \tag{10.10}$$

เพราะฉะนั้นบทบาทของ $U_{\mathrm{T}}(\mathbf{a})$ จึงเป็นตัวทำให้ ψ สลับเปลี่ยนกันทางตัวประกอบเฟส (phase factor) เพียงเท่านั้น โดยไม่ไปเปลี่ยนสถานะของระบบเลย หรือพูดในทางกลับกันได้ว่า ถ้าเราเห็นสถานะของระบบไม่สลับกันจากการเลื่อนที่ ก็แสดงว่าสถานะนั้นเป็นสถานะเฉพาะของโมเมนตัม

ผลลัพธ์ที่ได้นี้ สามารถทำให้อยู่ในรูปทั่วไปกับระบบ N อนุภาค โดยเปลี่ยนการแปลงยูนิแทรีน้อยยิ่งให้เป็น

$$U_{\mathrm{T}}(\delta\mathbf{a}) = I - \frac{i}{\hbar}\delta\mathbf{a}.\mathbf{P}_{\mathrm{op}} \tag{10.11}$$

เมื่อตัวก่อกำเนิด (เจเนอเรเตอร์) ของการแปลง, $\mathbf{P}_{\mathrm{op}}$, เป็นตัวดำเนินการโมเมนตัมรวม

$$\mathbf{P}_{\mathrm{op}} = (\mathbf{p}_1)_{\mathrm{op}} + (\mathbf{p}_2)_{\mathrm{op}} + \ldots + (\mathbf{p}_N)_{\mathrm{op}} \tag{10.12}$$

นอกจากนี้ ตัวดำเนินการยูนิแทรีที่สอดคล้องกับการเลื่อนที่ (อย่างจำกัด) ของระบบ N อนุภาค ก็กำหนดให้โดย

$$U_{\mathrm{T}}(\mathbf{a}) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\mathbf{a}.\mathbf{P}_{\mathrm{op}}\right) \tag{10.13}$$

ด้วยเหตุที่ว่า แฮมิทันเนียน H ของระบบเอกเทศ ยืนยง ไม่แปรเปลี่ยนภายใต้การเลื่อนที่ใด ๆ จึงได้ตามมาว่า

$$H' = U_{\mathrm{T}}(\mathbf{a})HU_{\mathrm{T}}^{\dagger}(\mathbf{a}) = H \tag{10.14}$$

ในกรณีการเลื่อนที่น้อยยิ่ง เราจะได้จากสมการ (10.11) ที่อันดับขนาด $\delta\mathbf{a}$ ว่า

$$U_{\mathrm{T}}(\delta\mathbf{a})HU_{\mathrm{T}}^{\dagger}(\delta\mathbf{a}) = H - \frac{i}{\hbar}\delta\mathbf{a}.[\mathbf{P}_{\mathrm{op}}, H] \tag{10.15}$$

เพราะฉะนั้น เมื่อเปรียบเทียบสมการ (10.15) กับ (10.14) ก็จะได้ว่า

$$[\mathbf{P}_{\mathrm{op}}, H] = 0 \tag{10.16}$$

ดังนั้น โมเมนตัมรวมของการเคลื่อนที่จะคงตัว เราจะเห็นได้ว่า การอนุรักษ์ของโมเมนตัมรวมของระบบเอกเทศ เป็นผลมาจากความยืนยงของแฮมิลทันเนียนของมันภายใต้การเลื่อนที่

กฎการอนุรักษ์และการแปลงสมมาตรแบบต่อเนื่อง (Conservation Laws and Continuous Symmetry Transformation)

การอภิปรายต่อจากนี้ไป จะเป็นแบบทั่วไปมากขึ้น โดยจะอภิปรายที่การแปลงสมมาตรแบบต่อเนื่อง ให้แฮมิลทันเนียน H ของระบบเอกเทศยืนยงภายใต้การแปลงสมมาตร S ถ้าให้เป็นตัวดำเนินการยูนิแทรีที่ทำให้เกิดผลการแปลงนี้ การกระทำของมันบนฟังก์ชั่นคลื่นของระบบกำหนดให้โดย

$$\Psi' = U_S\Psi \tag{10.17}$$

ให้ A เป็นสิ่งที่ได้จากการสังเกต และ A' เป็นการแปลงของมันโดยใช้ตัวดำเนินการสมมาตร เพราะว่าค่าคาดหมายของการวัด A' ที่ทำบนระบบที่มีสถานะเชิงพลวัต Ψ' จะต้องเท่ากับค่าคาดหมายของการวัด A ที่ทำบนระบบที่มีสถานะเชิงพลวัต Ψ เราจึงได้ว่า

$$\begin{aligned}\langle\Psi|A|\Psi\rangle &= \langle\Psi'|A'|\Psi'\rangle \\ &= \langle U_S\Psi|A'|U_S\Psi\rangle\end{aligned} \tag{10.18}$$

ดังนั้น

$$A' = U_S A U_S^\dagger, \qquad A = U_S^\dagger A' U_S \tag{10.19}$$

ในกรณีเฉพาะ ที่แฮมิลทันเนียน H ยืนยงภายใต้การดำเนินการสมมาตร S, ก็จะเขียนได้ว่า

$$H' = U_S H U_S^\dagger = H \tag{10.20}$$

ถ้าการแปลงสมมาตรเป็นแบบต่อเนื่อง ตัวดำเนินการใด ๆ U_S ก็สามารถแสดงให้อยู่ในรูปของตัวดำเนินการ $U_{\delta S}$ ซึ่งสอดคล้องกับการแปลงสมมาตรน้อยยิ่ง ดังเช่น

$$U_{\delta S} = I + i\varepsilon F_S \tag{10.21}$$

เมื่อ ε เป็นจำนวนจริงและเป็นพารามิเตอร์เล็ก ๆ และ F_S เป็นเจเนอเรเตอร์ (ตัวก่อกำเนิด) ของการแปลงยูนิแทรีน้อยยิ่ง และเป็นตัวดำเนินการเฮอร์มิเทียน ถ้าคิดเฉพาะถึงอันดับแรกของ ε จะได้ว่า

$$H' = U_{\delta S}(\varepsilon) H U_{\delta S}^\dagger(\varepsilon) = H + i\varepsilon[F_S, H] \tag{10.22}$$

เปรียบเทียบสมการ (10.22) และ (10.20) จะเห็นว่า

$$[F_S, H] = 0 \tag{10.23}$$

และจากสมการ (7.29) และถ้า F_S ไม่ขึ้นกับเวลา ค่าคาดหมายของมัน $\langle F_S\rangle$ ก็จะไม่แปรตามเวลา ดังนั้น F_S เป็นตัวคงที่ของการเคลื่อนที่

สมการ (10.23) ที่ได้มาสำหรับกรณีการแปลงสมมาตรแบบต่อเนื่อง จะเป็นรูปแบบที่อยู่ในรูปทั่วไปของสมการ (10.16) ที่มาจากการแปลงปริภูมิ

คราวนี้เราจะขอพิจารณาของการเลื่อนเวลา (time translation) อย่างย่อ ๆ จากที่เราเคยเห็นมาแล้วในตอนที่ 7 ว่าแฮมิลทันเนียนไม่ขึ้นกับเวลา H มีผลต่อตัวดำเนินการวิวัฒนาการ $U(t_0,t)$ ในแบบ

$$U(t_0,t) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)\right] \tag{10.24}$$

ซึ่งสมการนี้ เจเนอเรเตอร์ของการแปลงน้อยยิ่งคือแฮมิลทันเนียน ดังนั้น จะสลับที่กันได้กับตัวมันเอง ซึ่งถ้า H ไม่ขึ้นกับเวลาผลตามมาก็คือพลังงานถูกอนุรักษ์ เพราะฉะนั้นจึงกล่าวได้ว่า**การอนุรักษ์พลังงานของระบบเอกเทศ เป็นผลถัดมาจากการยืนยงของแฮมิลทันเนียนของมันเทียบกับการเลื่อนที่เวลา**

การสะท้อนปริภูมิและการอนุรักษ์แพริตี
(Space Reflection and Parity Conservation)

เราอภิปรายการแปลงสมมาตรแบบต่อเนื่องมาจนถึงตรงนี้ ต่อไปเราจะขอย้อนกลับไปพิจารณาการแปลงสมมาตรแบบไม่ต่อเนื่อง โดยสนใจการสะท้อนผ่านจุดกำเนิด 0 ของระบบพิกัด การดำเนินการสะท้อนนี้เป็นที่รู้จักกันว่าเป็นการดำเนินการเปลี่ยนผัน (inversion operation) หรือการดำเนินการแพริตี (parity operation) ตัวดำเนินการแพริตีเช่นนั้นและเป็นยูนิแทรีด้วยปรกติจะกำหนดเป็น $\mathcal{P}$ และเรียกว่า ตัวดำเนินการแพริตี (parity operator) ซึ่งถ้า $\psi(\mathbf{r})$ เป็นฟังก์ชั่นคลื่น (ปริภูมิ) ของอนุภาคเดี่ยว:

$$\mathcal{P}\psi(\mathbf{r}) = \psi(-\mathbf{r}) \tag{10.25a}$$

และสำหรับกับหลายอนุภาค

$$\mathcal{P}\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_N) = \psi(-\mathbf{r}_1, -\mathbf{r}_2, \ldots, -\mathbf{r}_N) \tag{10.25b}$$

เพราะว่าตัวดำเนินการ $\mathcal{P}$ เป็นเฮอร์มิเทียน ($\mathcal{P}^\dagger = \mathcal{P}$) ดังนั้นสำหรับกับสองฟังก์ชันคลื่นใดๆ $\psi(\mathbf{r})$ และ $\phi(\mathbf{r})$ เราจะมีว่า

$$\begin{aligned} \int \phi^*(\mathbf{r})\mathcal{P}\psi(\mathbf{r})d\mathbf{r} &= \int \phi^*(\mathbf{r})\psi(-\mathbf{r})d\mathbf{r} \\ &= \int \phi^*(-\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})d\mathbf{r} \\ &= \int [\mathcal{P}\phi(\mathbf{r})]^*\psi(\mathbf{r})d\mathbf{r} \end{aligned} \tag{10.26}$$

และถ้าจะทำให้อยู่ในรูปแบบทั่วไปกับฟังก์ชันคลื่นหลายอนุภาค ก็สามารถทำได้

จากคำจำกัดความตามสมการ (10.25) จะทำให้ได้ว่า

$$\mathcal{P}^2 = I \tag{10.27}$$

ดังนั้นค่าเฉพาะของมันคือ $\mathcal{P} = +1$ หรือ -1 ถ้าเป็น $+1$ ก็จะพูดว่าสถานะเฉพาะ $\psi(\mathbf{r})$ เป็นคู่ (even) ถ้าเป็น -1 ก็จะพูดว่าเป็นคี่ (odd) เพราะฉะนั้นถ้าเราให้ $\psi(\mathbf{r})_+$ เป็นสถานะคู่ของ $\mathcal{P}$ และ $\psi(\mathbf{r})_-$ เป็นสถานะคี่ของ $\mathcal{P}$ จะเขียนได้ว่า

$$\mathcal{P}\psi_+(\mathbf{r}) = \psi_+(-\mathbf{r}) = \psi_+(\mathbf{r}) \tag{10.28}$$

และ

$$\mathcal{P}\psi_-(\mathbf{r}) = \psi_-(-\mathbf{r}) = -\psi_-(\mathbf{r}) \tag{10.29}$$

เราบันทึกไว้ด้วยว่า

$$\begin{aligned}\int \psi_+^*(\mathbf{r})\psi_-(\mathbf{r})d\mathbf{r} &= \int \psi_+^*(-\mathbf{r})\psi_-(-\mathbf{r})d\mathbf{r} \\ &= -\int \psi_+^*(\mathbf{r})\psi_-(\mathbf{r})d\mathbf{r}\end{aligned} \tag{10.30}$$

เนื่องจากว่า

$$\int \psi_+^*(\mathbf{r})\psi_-(\mathbf{r})d\mathbf{r} = 0 \tag{10.31}$$

ดังนั้นสถานะ $\psi_+(\mathbf{r})$ และ $\psi_-(\mathbf{r})$ เป็นเชิงตั้งฉาก (orthogonal) กัน ซึ่งสอดคล้องกับที่ว่ามันให้ค่าเฉพาะของ $\mathcal{P}$ ที่แตกต่างกัน สถานะ $\psi_+(\mathbf{r})$ และ $\psi_-(\mathbf{r})$ ยังก่อรูปเป็นเซตบริบูรณ์ (complete set) ได้อีกด้วย โดยฟังก์ชันใดๆ $\psi(\mathbf{r})$ สามารถเขียนได้เป็น

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_+(\mathbf{r}) + \psi_-(\mathbf{r}) \tag{10.32}$$

เมื่อ

$$\psi_+(\mathbf{r}) = \tfrac{1}{2}[\psi(\mathbf{r}) + \psi(-\mathbf{r})] \tag{10.33}$$

มีแพริตีคู่ ขณะที่

$$\psi_-(\mathbf{r}) = \tfrac{1}{2}[\psi(\mathbf{r}) - \psi(-\mathbf{r})] \tag{10.34}$$

มีแพริตีคี่ และถ้าจะทำให้อยู่ในรูปทั่วไปกับ N อนุภาคก็สามารถทำได้เช่นเดียวกัน

การกระทำของตัวดำเนินการแพริตี $\mathcal{P}$ บนสิ่งที่สังเกตได้ $\mathbf{r}$ และ $\mathbf{p}_{op}$ กำหนดให้โดย

$$\mathcal{P}\mathbf{r}\mathcal{P}^{\dagger} = -\mathbf{r} \tag{10.35}$$

และ

$$\mathcal{P}\mathbf{p}_{op}\mathcal{P}^{\dagger} = -\mathbf{p}_{op} \tag{10.36}$$

และเราต้องระลึกว่า $\mathcal{P}^{\dagger} = \mathcal{P}$

การดำเนินการแพริตี สมมูลได้กับการแปลงของระบบที่อยู่ทางขวามือของพิกัด ไปเป็นระบบที่อยู่ทางซ้ายมือของพิกัด และจากการอภิปรายทั่วไปที่ผ่านมาของเรา เราทราบว่าถ้าตัวดำเนินการแพริตีของเราสลับที่กันได้กับแฮมิลทันเนียนของระบบแล้ว แพริตีก็จะอนุรักษ์ ถ้าเราละเว้นไม่นับกรณีอันตรกิริยาอย่างอ่อน (ที่เกิดขึ้นในการสลายบีตาของนิวคลีไอ) เข้ามาพิจาณาด้วยแล้ว ตัวดำเนินการแพริตีกับแฮมิลทันเนียนของระบบอะตอมและนิวเคลียสจะสลับที่กันได้ คือ

$$[\mathcal{P}, H] = 0 \tag{10.37}$$

และแพริตีก็จะอนุรักษ์

การยืนยงย้อนกลับเวลา (Time-Reversal Invariance)

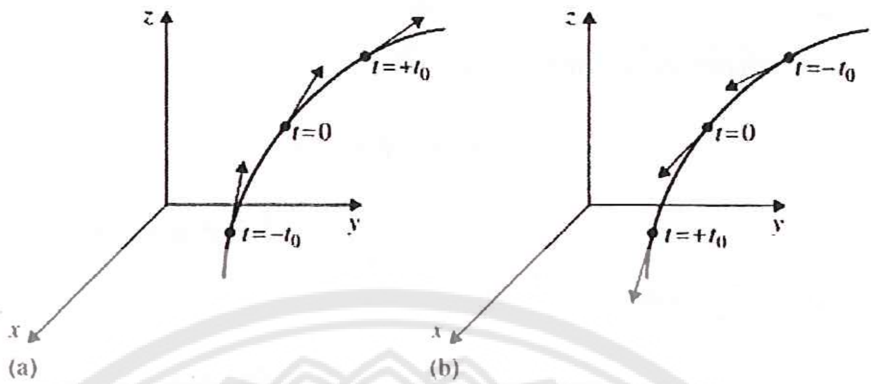
การแปลงแบบไม่ต่อเนื่องที่สำคัญเป็นลำดับสองก็คือ การแปลงทางการย้อนกลับเวลา $t = t'$ แต่ก่อนที่เราจะทำการตรวจสอบผลกระทบของการแปลงแบบนี้ในทางกลศาสตร์ ให้เรารำลึกถึงการยืนยงในการย้อนกลับเวลาที่ปรากฏอยู่ในกลศาสตร์แบบฉบับ เราจะเริ่มต้นจากกฎการเคลื่อนที่ของนิวตันของจุดมวล

$$m\frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2} = \mathbf{F} \tag{10.38}$$

และสมมุติว่าแรง $\mathbf{F}$ ขึ้นแจ้งกับพิกัดตำแหน่ง เพราะว่าสมการของนิวตันเป็นสมการอันดับสองของเวลา t ดังนั้นเราสามารถเชื่อมโยงทุก ๆ ผลเฉลย $\mathbf{r}(t)$ ของสมการ (10.38) เข้ากับอีกผลเฉลยหนึ่ง คือ

$$\mathbf{r}'(t) = \mathbf{r}(-t) \tag{10.39}$$

การสอดคล้องกันระหว่างสองผลเฉลยนี้ แสดงในรูป 10.1 เรามีข้อสังเกตว่าตำแหน่งของอนุภาค



รูป 10.1 สองวิถีแบบฉบับ (a) และ (b) ที่สอดคล้องกับการย้อนเวลา (จาก B. H. Bransden and C. J. Joachain, *Quantum Mechanics*, Pearson Education, 2nd Edn, London, 2000, p. 252)

ที่เวลา t_0 ในกรณี (a) เหมือนกันกับตำแหน่งของอนุภาคที่เวลา $-t_0$ ในกรณี (b) ขณะที่ความเร็ว (และโมเมนตัมด้วย) ย้อนกลับกัน กล่าวคือ

$$\mathbf{v}'(t_0)=\left[\frac{d\mathbf{r}'(t)}{dt}\right]_{t=t_0}=-\left[\frac{d\mathbf{r}(-t)}{d(-t)}\right]_{t=t_0}=-\left[\frac{d\mathbf{r}(t')}{dt'}\right]_{t'=-t_0}=-\mathbf{v}(-t_0) \qquad (10.40)$$

ทีนี้ให้เราพิจารณาผลของการแปลงย้อนเวลา $t\to -t$ ในทางในกลศาสตร์ควอนตัม เราเริ่มต้นโดยการพิจารณากรณีของอนุภาคไร้สปินที่เคลื่อนที่อยู่ในศักย์ไม่ขึ้นกับเวลา $V(\mathbf{r})$ สมการคลื่นชเรอดิงเงอร์ของมันจะเป็น

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{r},t)=\left[-\frac{\hbar}{2m}\nabla^2+V(\mathbf{r})\right]\Psi(\mathbf{r},t) \qquad (10.41)$$

เมื่อเปลี่ยน t เป็น $-t$ จะได้

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{r},-t)=\left[-\frac{\hbar}{2m}\nabla^2+V(\mathbf{r})\right]\Psi(\mathbf{r},-t) \qquad (10.42)$$

โดยการทำสังยุคเชิงซ้อน ก็จะได้รูปแบบของสมการกลับคืนไปเหมือนกันกับที่มีอยู่ในตอนแรก [คือสมการ (10.41)] ตามเดิม คือ

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi^*(\mathbf{r},-t)=\left[-\frac{\hbar}{2m}\nabla^2+V(\mathbf{r})\right]\Psi^*(\mathbf{r},-t) \qquad (10.43)$$

ทำให้ได้ตามมาว่า ถ้า $\Psi(\mathbf{r},t)$ เป็นผลเฉลยของสมการคลื่นชเรอดิงเงอร์ขึ้นกับเวลาในสมการ (10.41) แล้ว จะมีฟังก์ชันคลื่น "ย้อนกลับเวลา" เป็น

$$\Psi'(\mathbf{r},t) = \Psi^*(\mathbf{r},-t) \tag{10.44}$$

ผลลัพธ์นี้ขึ้นกับรูปแบบที่เลือกของฟังก์ชันคลื่น สำหรับตัวอย่าง ถ้าเราเขียนฟังก์ชันคลื่นในรูปแบบหมู่คลื่น (wave packet) ในกลศาสตร์คลื่น เป็น

$$\Psi(\mathbf{r},t) = (2\pi\hbar)^{-3/2}\int e^{i\mathbf{p}.\mathbf{r}/\hbar}\Phi(\mathbf{p},t)d\mathbf{p} \tag{10.45}$$

และ

$$\Psi'(\mathbf{r},t) = (2\pi\hbar)^{-3/2}\int e^{i\mathbf{p}.\mathbf{r}/\hbar}\Phi'(\mathbf{p},t)d\mathbf{p} \tag{10.46}$$

เราจะเห็นจากสมการ (10.44) ว่าฟังก์ชันคลื่นในปริภูมิโมเมนตัม $\Phi(\mathbf{p},t)$ และ $\Phi'(\mathbf{p},t)$ สัมพันธ์กันโดย

$$\Phi'(\mathbf{p},t) = \Phi^*(-\mathbf{p},-t) \tag{10.47}$$

เพราะฉะนั้น ในปริภูมิโมเมนตัม เมื่อเราเปลี่ยน t เป็น $-t$ ก็ยังไม่พอที่จะทำให้ฟังก์ชันคลื่นเป็นสังยุคเชิงซ้อน แต่ต้องเปลี่ยน $\mathbf{p}$ เป็น $-\mathbf{p}$ ด้วย ซึ่งจะเห็นผลในตอนท้ายนี้ว่าสอดคล้องกับสมการ (10.40)

ทีนี้ให้เราพิจารณาในกรณีทั่วไปยิ่งขึ้น เริ่มจากสมการคลื่นชเรอดิงเงอร์ขึ้นกับเวลา

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(t) = H\Psi(t) \tag{10.48}$$

และสมมุติว่าแฮมิลทันเนียน H ไม่ขึ้นกับเวลา เมื่อเปลี่ยน t เป็น t' และทำสังยุคเชิงซ้อน จะได้

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi^*(-t) = H^*\Psi^*(-t) \tag{10.49}$$

ในลำดับแรกนี้ ถ้าสมมุติว่าแฮมิลทันเนียน H เป็นจำนวนจริง ($H^* = H$) และฟังก์ชันคลื่น $\Psi(t)$ เป็นผลเฉลยของสมการชเรอดิงเงอร์ขึ้นกับเวลาแล้ว สถานะเวกเตอร์ย้อนเวลาก็จะเป็นดังนี้

$$\Psi'(t) = \Psi^*(-t) = K\Psi(-t) \tag{10.50}$$

เมื่อ K กำหนดให้เป็นตัวดำเนินการสังยุคเชิงซ้อน และตั้งข้อสังเกตไว้ด้วยว่าตัวดำเนินการนี้เป็น

แอนติยูนิแทรี[3] (anti-unitary) ดังนี้ $K^2 = I$ หรือ $K = K^\dagger$

อย่างไรก็ตาม โดยทั่วไป H ไม่ใช่จำนวนจริง ในกรณีนี้เราจะสมมุติให้มีตัวดำเนินการยูนิแทรี[4] U_τ ขึ้นมา ดังนี้

$$U_\tau H^* U_\tau^\dagger = H \tag{10.51}$$

จะเห็นว่าตัวดำเนินการ U_τ นี้จะลดรูปเป็นตัวดำเนินการหนึ่งหน่วย I เมื่อ H เป็นจำนวนจริง ดำเนินการด้วย U_τ บนสองข้างของสมการ (10.49) และใช้สมการ (10.51) ก็จะพบว่า

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U_\tau \Psi^*(-t) = H U_\tau \Psi^*(-t) \tag{10.52}$$

ดังนั้น ถ้า $\Psi(t)$ เป็นผลเฉลยของสมการชเรอดิงเงอร์ขึ้นกับเวลานี้แล้ว ก็จะเป็นดังนี้ด้วย

$$\begin{aligned} \Psi'(t) &= U_\tau \Psi^*(-t) = U_\tau K \Psi(-t) \\ &= \mathcal{T}\Psi(-1) \end{aligned} \tag{10.53}$$

เมื่อ

$$\mathcal{T} = U_\tau K \tag{10.54}$$

$\mathcal{T}$ คือ**ตัวดำเนินการย้อนกลับเวลา** (time-reversal operator) คล้ายคลึงกับที่เราเคยอภิปรายมาก่อนว่า $\Psi'(t)$ เป็นเวกเตอร์สถานะย้อนกลับเวลาที่สอดคล้องกับ $\Psi(t)$ เราตั้งข้อสังเกตไว้ด้วยว่า เนื่องจาก K เป็นแอนติยูนิแทรี และ U_τ เป็นยูนิแทรี ดังนั้น $\mathcal{T}$ เป็นแอนติยูนิแทรี

---

[3] ตัวดำเนินการ B จะกล่าวว่าเป็นแอนติลิเนียร์ (anti-linear) หรือปฏิเชิงเส้น ถ้า

$$B(c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2) = c_1^*(B\Psi_1) + c_2^*(B\Psi_2)$$

เมื่อ Ψ_1 และ Ψ_2 เป็นสองฟังก์ชัน c_1 และ c_1 เป็นค่าคงตัวเชิงซ้อน นอกจากนั้นตัวดำเนินการ V จะกล่าวว่าเป็น แอนติยูนิแทรี ถ้าเป็นแอนติลิเนียร์ และสอดคล้องกับความสัมพันธ์

$$VV^\dagger = V^\dagger V = I$$

[4] เงื่อนไขที่กำหนดให้ U_τ เป็นตัวดำเนินการยูนิแทรี ก็เพื่อการรักษาการเป็นบรรทัดฐานของเวกเตอร์สถานะไว้

เราเห็นมาแล้วจากข้างบนว่า เมื่อแฮมิลทันเนียน H เป็นจำนวนจริง ตัวดำเนินการ U_τ จะลดรูปเป็นตัวดำเนินการหนึ่งหน่วย ดังนั้นในกรณีนี้ ตัวดำเนินการย้อนกลับเวลา $\mathcal{T}$ จึงถูกจัดให้อยู่กับตัวดำเนินการ K ซึ่งเป็นตัวดำเนินการสังยุคเชิงซ้อน แต่เมื่อใดที่ $H^* \neq H$ ดังที่เห็นอยู่ตามปรกติ การหาดำเนินการ U_τ ที่เหมาะสม (รวมทั้ง $\mathcal{T}$ ด้วย) ออกมาก็จะง่ายเข้า โดยใช้การพิจารณาตามต่อไปนี้ แรกสุด เรากำหนดว่าตัวดำเนินการตำแหน่ง $\mathbf{r}$ ยังคงอยู่ไม่เปลี่ยนแปลงภายใต้การย้อนกลับเวลา

$$\mathbf{r}' = \mathcal{T}\mathbf{r}\mathcal{T}^\dagger = \mathbf{r} \tag{10.55}$$

ด้วยเหตุนี้ ถ้าหากเราทำอยู่กับตัวแทนตำแหน่ง (เมื่อ $\mathbf{r}$ เป็นตัวดำเนินการจำนวนจริงอย่างบริสุทธิ์) เราก็จะได้ว่า

$$\mathcal{T}\mathbf{r}\mathcal{T}^\dagger = U_\tau K\mathbf{r}K^\dagger U_\tau^\dagger = U_\tau \mathbf{r} U_\tau^\dagger = \mathbf{r} \tag{10.56}$$

ดังนั้น U_τ จะต้องสลับที่กันได้กับ $\mathbf{r}$ เราต้องกำหนดอีกด้วยว่าตัวดำเนินการโมเมนตัมต้องเปลี่ยนเครื่องหมายภายใต้การดำเนินการย้อนกลับเวลา คือ

$$\mathbf{p}'_{\mathrm{op}} = \mathcal{T}\mathbf{p}_{\mathrm{op}}\mathcal{T}^\dagger = -\mathbf{p}_{\mathrm{op}} \tag{10.57}$$

เนื่องจาก $\mathbf{p}_{\mathrm{op}} \to -i\hbar\nabla$ เป็นตัวดำเนินการจินตภาพอย่างบริสุทธิ์ ที่อยู่ในรูปตำแหน่ง เราจึงได้อีกว่า

$$\mathcal{T}\mathbf{p}_{\mathrm{op}}\mathcal{T}^\dagger = U_\tau K(-i\hbar\nabla)K^\dagger U_\tau^\dagger = U_\tau(i\hbar\nabla)U_\tau^\dagger = -\mathbf{p}_{\mathrm{op}} = i\hbar\nabla \tag{10.58}$$

ซึ่งก็ส่อความว่า U_τ จะต้องสลับที่กันได้กับ $\mathbf{p}_{\mathrm{op}} \to -i\hbar\nabla$ อีกด้วย

ให้เราย้อนกลับไปพิจารณาสมการคลื่นชเรอดิงเงอร์ไม่ขึ้นกับเวลา [สมการ(10.48)] อีกครั้งหนึ่ง เมื่อเปลี่ยน t เป็น $-t$ และแทรก $\mathcal{T}\mathcal{T}^\dagger(=I)$ เข้าไประหว่าง H และ Ψ เราจะได้ว่า

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(-t) = H\mathcal{T}^\dagger\mathcal{T}\Psi(-t) \tag{10.59}$$

และเพราะฉะนั้น

$$-\mathcal{T}i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(-t) = \mathcal{T}H\mathcal{T}^\dagger\mathcal{T}\Psi(-t) \tag{10.60}$$

คราวนี้ใช้สมการ (10.53) กับ (10.54) เราจะได้

$$-U_\tau K i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi(-t) = -U_\tau (-i)\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi^*(-t) = \mathcal{T}H\mathcal{T}^\dagger \Psi'(-t) \tag{10.61}$$

หรือ

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi'(t) = \mathcal{T}H\mathcal{T}^\dagger \Psi'(-t) \tag{10.62}$$

และเราต้องการจัดสมการนี้ให้เหมือนกับสมการชเรอดิงเงอร์ในตอนเริ่มต้น (สมการ 10.48) ดังนั้น กำหนดให้ U_τ สอดคล้องกับสมการ (10.51) ที่มีอยู่ ก็จะได้ข้อกำหนดว่า

$$\mathcal{T}H\mathcal{T}^\dagger = H \tag{10.63}$$

หรือ

$$[\mathcal{T}, H] = 0 \tag{10.64}$$

ซึ่งก็เป็นเงื่อนไขที่จำเป็น และเพียงพอสำหรับให้สมการชเรอดิงเงอร์ยืนยงย้อนกลับเวลา เวลาใดที่เราสมมุติให้แฮมิทันเนียนพื้นฐานทั้งหมดสอดคล้องกับเงื่อนไขของความยืนยงย้อนกลับเวลา ก็ต้องรู้ตัวอยู่ด้วยว่า แฮมิลทันเนียนที่สอดคล้องกับอันตรกิริยาอย่างอ่อนจะไม่ยืนยงย้อนกลับเวลา เช่นเดียวกันกับการไม่ยืนยงภายใต้การดำเนินการแพริตี

การแปลงกาลิเลียน (Galilean Transformation)

ให้พิจารณากรอบอ้างอิง (frame of reference) S ที่กำหนดด้วยแกนคาร์ทีเซียน OX, OY, OZ และกรอบอ้างอิงที่สอง S' ที่กำหนดด้วยแกน $O'X$, $O'Y$, $O'Z$ โดยแกนของกรอบทั้งสองขนานกัน แต่จุดกำเนิด O' เคลื่อนที่ด้วยความเร็วคงตัว $\mathbf{v}$ เทียบกับ O ถ้า $\mathbf{r}$ เป็นเวกเตอร์ตำแหน่งของอนุภาคในกรอบ S ที่เวลา t และ $\mathbf{r}'$ เป็นเวกเตอร์ตำแหน่งของอนุภาคเดียวกัน ที่เวลาเดียวกัน ในกรอบ S' แล้ว

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} - \mathbf{v}t \tag{10.65}$$

เมื่อ O และ O' ซ้อนกันอยู่ที่เวลา $t = 0$ การแปลงตามสมการ (10.65) เป็นที่รู้จักกันว่า คือ

การแปลงกาลิเลียน (Galilean Transformation) ในกลศาสตร์แบบฉบับเชิงไม่สัมพันธภาพ ถ้ากฎการเคลื่อนที่ของนิวตันใช้ได้อยู่ในกรอบ S [กรอบเฉื่อย (inertial frame)] แล้ว กฎการเคลื่อนที่นี้ในทุกกรอบ S' ซึ่งได้มาโดยการแปลงกาลิเลียนจากกรอบ S ก็จะยังคงใช้ได้เช่นเดียวกัน

ทีนี้เราจะไต่สวนดูว่าสมการคลื่นชเรอดิงเงอร์ของอนุภาคเดี่ยวที่มีมวล m เคลื่อนที่อยู่ในศักย์ $V(\mathbf{r},t)$ จะมีการเปลี่ยนแปลงอย่างไรภายใต้การแปลงกาลิเลียนในสมการ (10.65) ถ้า $\Psi(\mathbf{r},t)$ เป็นฟังก์ชันคลื่นในกรอบ S มันก็จะสอดคล้องกับสมการชเรอดิงเงอร์

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{r},t)=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_{\mathbf{r}}^2+V(\mathbf{r},t)\right]\Psi(\mathbf{r},t) \tag{10.66}$$

เขียนสมการนี้เสียใหม่ ให้อยู่ในพจน์ของ $\mathbf{r}'$ โดยให้

$$\Psi(\mathbf{r},t)=\Psi(\mathbf{r}'+\mathbf{v}t,t) \tag{10.67a}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{r},t)=\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{r}'+\mathbf{v}t,t)-\mathbf{v}.\nabla_{\mathbf{r}'}\Psi(\mathbf{r}'+\mathbf{v}t,t) \tag{10.67b}$$

$$\nabla_{\mathbf{r}}\Psi(\mathbf{r},t)=\nabla_{\mathbf{r}'}\Psi(\mathbf{r}'+\mathbf{v}t,t) \tag{10.67c}$$

ดังนั้นสมการ (10.66) สามารถเขียนได้เป็น

$$\begin{aligned}&i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{r}'+\mathbf{v}t,t)-i\hbar\mathbf{v}.\nabla_{\mathbf{r}'}\Psi(\mathbf{r}'+\mathbf{v}t,t)\\&\qquad=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_{\mathbf{r}'}^2+V(\mathbf{r}'+\mathbf{v}t,t)\right)\Psi(\mathbf{r}'+\mathbf{v}t,t)\end{aligned} \tag{10.68}$$

สมการนี้แม้จะถูกต้อง แต่ก็ไม่ใช่รูปแบบของสมการชเรอดิงเงอร์ เพราะมีพจน์ $\mathbf{v}.\nabla_{\mathbf{r}'}$ อยู่ทางด้านซ้ายมือของสมการ ฟังก์ชันคลื่น $\Psi'(\mathbf{r}',t)$ ซึ่งสอดคล้องกับสมการชเรอดิงเงอร์มาตรฐานในกรอบ S' สามารถทำให้อยู่ในรูปการแปลงยูนิแทรี

$$\Psi(\mathbf{r}'+\mathbf{v}t,t)=\exp[i(m\mathbf{v}.\mathbf{r}'+mv^2t/2)/\hbar]\Psi'(\mathbf{r}',t) \tag{10.69}$$

ตัวประกอบเลขชี้กำลังในรูปแบบคลื่นระนาบ ได้มาจากความจริงที่ว่าอนุภาคที่อยู่นิ่งในกรอบ S' เมื่อมองจากกรอบ S จะมีโมเมนตัม $m\mathbf{v}$ และมีพลังงานจลน์ $\frac{1}{2}mv^2$ เมื่อแทรกสมการ (10.69) เข้าไปในสมการ (10.68) จะได้ว่า (ดูแบบฝึกหัดข้อ 2)

$$i\hbar\frac{\partial\Psi'(\mathbf{r}',t)}{\partial t}=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2_{\mathbf{r}'}+V'(\mathbf{r}',t)\right)\Psi'(\mathbf{r}',t) \tag{10.70}$$

เมื่อศักย์ในกรอบ S' , $V'(\mathbf{r}',t)$, นิยามเป็น

$$V'(\mathbf{r}',t)=V(\mathbf{r}-\mathbf{v}t,t) \tag{10.71}$$

ก็จะเห็นได้ว่า $\Psi'(\mathbf{r}',t)$ สอดคล้องกับสมการชเรอดิงเงอร์ ถ้า V เป็นศูนย์ V' ก็จะเป็นศูนย์ด้วย ผลติดตามมาก็คือทั้ง Ψ และ Ψ' ต่างก็สอดคล้องกับสมการคลื่นชเรอดิงเงอร์ของอนุภาคอิสระสมการเดียวกัน นั่นคือสมการคลื่นชเรอดิงเงอร์ของอนุภาคอิสระยืนยงภายใต้การแปลงกาลิเลียน

ทีนี้เราจะแสดงว่าสมการคลื่นชเรอดิงเงอร์ของระบบเอกเทศของอนุภาคยืนยงภายใต้การแปลงกาลิเลียนด้วย ดังจะเห็นดังนี้ อันดับแรกพิจารณาสมการคลื่นชเรอดิงเงอร์ของระบบเอกเทศของสองอนุภาค ซึ่งเขียนในพจน์ของพิกัดสัมพัทธ์ $\mathbf{r}$ และพิกัดศูนย์กลางมวล $\mathbf{R}$ ได้ตามสมการ (7.44) ทั้งสองอนุภาคมีอันตรกิริยาระหว่างกันด้วยศักย์ $V(\mathbf{r})$ โดยไม่มีอันตรกิริยากับภายนอก ภายใต้การแปลงกาลิเลียน พิกัดสัมพัทธ์ $\mathbf{r}$ ไม่เปลี่ยน แต่ตำแหน่ง $\mathbf{R}'$ ของศูนย์กลางมวลในกรอบ S' จะสัมพันธ์กับ $\mathbf{R}$ โดย

$$\mathbf{R}'=\mathbf{R}-\mathbf{v}t \tag{10.72}$$

ในกรอบ S' ฟังก์ชันคลื่น $\Psi(\mathbf{R},\mathbf{r},t)$ จะกลายมาเป็น $\Psi(\mathbf{R}'+\mathbf{v}t,\mathbf{r},t)$ และเมื่อให้อยู่ในรูปการแปลงยูนิทารี

$$\Psi(\mathbf{R}'+\mathbf{v}t,t)=\exp[i(M\mathbf{v}.\mathbf{R}'+Mv^2t/2)\hbar]\Psi'(\mathbf{R}',\mathbf{r},t) \tag{10.73}$$

จะพบว่า $\Psi'(\mathbf{R}',\mathbf{r},t)$ สอดคล้องกับสมการ

$$i\hbar\frac{\partial\Psi'(\mathbf{R}',\mathbf{r},t)}{\partial t}=\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2_{\mathbf{R}'}-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2_{\mathbf{r}}+V(\mathbf{r})\right]\Psi'(\mathbf{R}',\mathbf{r},t) \tag{10.74}$$

เมื่อ $M=m_1+m_2$ เป็นมวลรวมของระบบศูนย์กลางมวล และ $\mu=m_1m_2/(m_1+m_2)$ เป็นมวลลดทอนของสองอนุภาค สมการ (10.74) มีรูปแบบเหมือนกับสมการ (7.44) ดังนั้นสมการชเรอดิงเงอร์สองวัตถุ (สำหรับระบบเอกเทศ) จึงยืนยงภายใต้การแปลงกาลิเลียน

แบบฝึกหัด

1. พิจารณาการเคลื่อนที่ในหนึ่งมิติ ของอนุภาคอิสระ และสามตัวดำเนินการ $H = p_x^2 / 2m$, p_x และ $\mathcal{P}$ (ตัวดำเนินการของแพริตี) ตัวดำเนินการเหล่านี้จะจับคู่สลับที่กันได้ทั้งหมดหรือไม่ ถ้าไม่ ให้แสดงว่าสามารถสร้างเซตบริบูรณ์ของสิ่งที่สังเกตได้ที่สลับที่ได้ ขึ้นมาได้สองเซต จากตัวดำเนินการทั้งสามนี้

2. ให้แสดงว่าฟังก์ชันคลื่น $\Psi'(\mathbf{r}',t)$ การแปลงยูนิแทรี สมการ (10.69) สอดคล้องกับสมการชเรอดิงเงอร์ขึ้นกับเวลา สมการ (10.70)

บรรณานุกรม

1. Ballentine, L. E. (1998) *Quantum Mechanics : A Modern Development*. World Scientific, Massachusetts.
2. Bransden, B. H. and Joachain, C. J. (2000) *Quantum Mechanics*. Pearson Education, 2nd Edn, London.
3. Griffiths, D. J. (1995) *Introduction to Quantum Mechanics*. Prentice Hall, New Jersey.
4. Schwabl, F. and Lahee A. (Translator) (1996) *Advanced Quantum Mechanics*, Springer-Verlag, New York.
5. Shiff, L.I. (1949) *Quantum Mechnics*, Mc Graw-Hill, New York.
6. Townsend, J. S. (1992) *A Modern Approach to Quantum Mechanics*. McGraw-Hill, New York.

ตอนที่ 11

ขีดจำกัดแบบฉบับ

(The Classical Limit)

ถ้าเราได้ศึกษากลศาสตร์เบื้องต้นมาก่อน เราคงจะเคยเห็นการแปลงจากกลศาสตร์ควอนตัมไปเป็นกลศาสตร์แบบฉบับบ้างแล้ว ในหัวข้อนี้เราจะตรวจสอบคำถามนี้ในรายละเอียดมากยิ่งขึ้น

ทฤษฎีบทอีห์รีนเฟสต์ (The Ehrenfest Theorem)

เราจะเริ่มต้นโดยการหาทฤษฎีบทอีห์รีนเฟสต์ (Ehrenfest Theorem) โดยการใช้พีชคณิตตัวทำสลับที่ พิจารณาอนุภาคมวล m เคลื่อนที่ในศักย์ $V(\mathbf{r},t)$ ดังนั้นแฮมิลทันเนียนของมันกำหนดให้โดย

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r},t) \tag{11.1}$$

ใช้สมการ (7.29) สำหรับตัวดำเนินการ x เราจะพบว่า

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\langle x\rangle &= (i\hbar)^{-1}\langle [x,H]\rangle \\ &= (i\hbar)^{-1}\left\langle \left[x, \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r},t)\right]\right\rangle \end{aligned} \tag{11.2}$$

เนื่องจาก x สลับที่ได้กับ $V(\mathbf{r},t)$ รวมทั้ง p_y และ p_z ด้วยเช่นกัน สมการข้างบนก็จะเป็น

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\langle x\rangle &= \frac{1}{2mi\hbar}\langle [x,p_x^2]\rangle \\ &= \frac{1}{2mi\hbar}\langle [x,p_x]p_x + p_x[x,p_x]\rangle \end{aligned} \tag{11.3}$$

แต่ $[x, p_x] = i\hbar$ เพราะฉะนั้นก็จะได้

$$\frac{d}{dt}\langle x \rangle = \frac{\langle p_x \rangle}{m} \tag{11.4}$$

การทำเช่นนี้ใช้ได้กับค่าคาดหมายของ y และ z เช่นเดียวกัน ดังนั้นเราก็จะได้

$$\frac{d}{dt}\langle \mathbf{r} \rangle = \frac{\langle \mathbf{p} \rangle}{m} \tag{11.5}$$

ซึ่งสมการที่ได้นี้ก็คือ **ความสัมพันธ์อีห์รีนเฟสต์** (Ehrenfest relation)

ทีนี้ใช้สมการ (7.29) สำหรับตัวดำเนินการ p_x เราก็จะมี

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle p_x \rangle &= (i\hbar)^{-1}\langle [p_x, H] \rangle \\ &= (i\hbar)^{-1}\left\langle \left[p_x, \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r},t) \right] \right\rangle \\ &= -\left\langle \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle \end{aligned} \tag{11.6}$$

ซึ่งการได้มาของสมการ (11.6) ได้จากการใช้ $[p_x, \mathbf{p}^2] = 0$ ร่วมกับสมการ

$$[p_x, V] = -i\hbar \frac{\partial V}{\partial x} \tag{11.7}$$

ทำซ้ำอีกครั้งกับ p_y และ p_z เราก็จะพบว่า

$$\frac{d}{dt}\langle \mathbf{p} \rangle = -\langle \nabla V(\mathbf{r},t) \rangle \tag{11.8}$$

ความสัมพันธ์อีห์รีนเฟสต์ที่สอง (second Ehrenfest relation)

ความสัมพันธ์อีห์รีนเฟสต์ไม่ได้ส่อความให้เห็นว่ากลศาสตร์แบบฉบับคลอบคลุมค่าคาดหมาย (ค่าเฉลี่ย) ของ $\mathbf{r}$ และ $\mathbf{p}$ เพื่อให้ถูกต้อง เราจึงจะเพิ่มเติมอีกว่า

$$\langle \nabla V(\mathbf{r},t) \rangle = \nabla V(\langle \mathbf{r} \rangle, t) \tag{11.9}$$

ซึ่งเป็นจริงโดยประมาณถ้าหากว่าส่วนกว้าง (width) ของการแจกแจงโอกาสของตำแหน่งมีค่าน้อยเมื่อเทียบกับช่วงระยะทั้งหมดที่ศักย์ใช้ในการแปรเปลี่ยน

เราจะตรวจสอบในจุดนี้ต่อไปอีก ให้เราพิจารณากรณีอย่างง่าย คือการเคลื่อนที่หนึ่งมิติในศักย์ $V(x)$ เมื่อขยาย $dV(x)/dx \equiv V'(x)$ รอบ (ขึ้นกับเวลา) ค่าคาดหมาย $\langle x \rangle$ เราก็จะมี

$$V'(x) = V'(\langle x \rangle) + (x - \langle x \rangle)V''(\langle x \rangle) + \frac{1}{2}(x - \langle x \rangle)^2 V'''(\langle x \rangle) + \ldots \qquad (11.10)$$

ดังนั้น

$$\langle V'(x) \rangle = V'(\langle x \rangle) + \frac{1}{2}\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle V'''(\langle x \rangle) + \ldots \qquad (11.11)$$

เมื่อเราได้ใช้ความจริงที่ว่า $\langle x - \langle x \rangle \rangle = 0$, ปริมาณ $-V'(\langle x \rangle)$ จัดให้เป็นแรงแบบฉบับ ที่กระทำบนจุด $\langle x \rangle$ ดังนั้นถ้าเก็บเอาไว้เฉพาะพจน์แรกของทางขวามือของสมการ (11.11) เราก็จะได้ว่า

$$\frac{d}{dt}\langle p_x \rangle = -V'(\langle x \rangle) \qquad (11.12)$$

ซึ่งแสดงว่าค่าคาดหมาย $\langle x \rangle$ และ $\langle p_x \rangle$ ยินยอมตามกฎของนิวตัน อย่างไรก็ตามเงื่อนไขที่พจน์ที่สองและพจน์ที่สูงขึ้นในส่วนขยาย [สมการ (11.11)] จะต้องมีค่าน้อยเป็นสิ่งจำเป็น แต่ยังไม่เพียงพอที่จะทำให้การเคลื่อนเป็นในเชิงแบบฉบับ ยกตัวอย่างในกรณีของการแกว่งกวัดฮาร์มอนิกที่ $V(x)$ อยู่ในรูปแบบยกกำลังสองของ x นอกจากพจน์ที่สองและพจน์ที่สูงขึ้นในขวามือของสมการ (11.11) จะต้องหายไปแล้ว ระยะห่างระหว่างพลังงานที่ไม่ต่อเนื่องจะต้องมีค่าน้อยเมื่อเทียบกับพลังงานของตัวแกว่งกวัดด้วย ซึ่งสิ่งเหล่านี้ปรากฏในขีดจำกัดของเลขควอนตัมขนาดใหญ่

สมการแฮมิลทัน-ยาโคบี (Hamilton-Jacobi Equation)

ให้เราพิจารณาสมการคลื่นชเรอดิงเงอร์ขึ้นกับเวลาของอนุภาคมวล m ในศักย์ $V(\mathbf{r},t)$ คือ

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{r},t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r},t)\right]\Psi(\mathbf{r},t) \qquad (11.13)$$

และผลเฉลยของมันให้อยู่ในรูป

$$\Psi(\mathbf{r},t) = \exp\left[\frac{i}{\hbar}W(\mathbf{r},t)\right] \tag{11.14}$$

แทนสมการ (11.14) ลงในสมการ (11.15) เราจะพบว่าฟังก์ชัน W สอดคล้องกับสมการ

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \frac{1}{2m}(\nabla W)^2 + V - \frac{i\hbar}{2m}\nabla^2 W = 0 \tag{11.15}$$

ซึ่งในลิมิต $\hbar \to 0$ สมการจะลดรูปลงเหลือเป็น

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \frac{1}{2m}(\nabla W)^2 + V = 0 \tag{11.16}$$

และสมการนี้ก็คือ สมการแฮมิลทัน-ยาโคบี (Hamilton-Jacobi equation) สำหรับฟังก์ชันสำคัญของแฮมิลทัน (Hamilton's principal function) W สมการนี้สามารถเขียนในอีกรูปแบบ คือ

$$\frac{\partial W}{\partial t} + H(\mathbf{r},\mathbf{p},t) = 0 \tag{11.17}$$

เมื่อ H เป็นแฮมิลทันแบบฉบับ, $\mathbf{r}$ และ $\mathbf{p}$ เป็นตำแหน่งและโมเมนตัมแบบฉบับตามลำดับ และ

$$\mathbf{p}(t) = \nabla W(\mathbf{r},t) \tag{11.18}$$

เพราะฉะนั้น สำหรับในปัญหาหนึ่งวัตถุ สมการแฮมิลทัน-ยาโคบีจะเป็นสมการเชิงอนุพันธ์อันดับแรกที่มีสี่ตัวแปรคือ x, y, z และ t แนววิถีแบบฉบับ $\mathbf{r}(t)$ ซึ่งขึ้นกับค่าเริ่มต้น (ที่ $t = t_0$) ของตัวแปรแบบบัญญัติ $\mathbf{r}$ และ $\mathbf{p}$ หาได้จากฟังก์ชันสำคัญแฮมิลทัน $W(\mathbf{r},t)$ ที่เรารู้จัก

ให้เราพิจารณากรณีที่ศักย์ $V(\mathbf{r})$ ไม่ขึ้นกับเวลา สมการชเรอดิงเงอร์ [สมการ (11.13)] จะมีผลเฉลยคงที่ (stationary solution) อยู่ในรูปแบบ $\Psi(\mathbf{r},t) = \Psi(\mathbf{r})\exp(-iEt/\hbar)$ กรณีเช่นนี้เราสามารถเขียน

$$W(\mathbf{r},t) = S(\mathbf{r}) - Et \tag{11.19}$$

ดังนั้น

$$\psi(\mathbf{r}) = \exp\left[\frac{i}{\hbar}S(\mathbf{r})\right] \tag{11.20}$$

แทนสมการ (11.19) ลงใน (11.15) เราก็จะได้

$$\frac{1}{2m}(\nabla S)^2 - [E - V(\mathbf{r})] - \frac{i\hbar}{2m}\nabla^2 S = 0 \qquad (11.21)$$

ในลิมิต $\hbar \to 0$ สมการนี้ลดรูปลงเป็น

$$\frac{1}{2m}(\nabla S)^2 = [E - V(\mathbf{r})] \qquad (11.22)$$

ซึ่งเป็นสมการที่ใช้หาฟังก์ชันลักษณะเฉพาะ (characteristic function) ของแฮมิลทัน $S(\mathbf{r})$ สำหรับศักย์ที่ไม่ขึ้นกับเวลา $V(\mathbf{r})$ ตามสมการ (11.18) แนววิถี $\mathbf{r}(t)$ จะอยู่ในเชิงตั้งฉากกับพื้นผิวของ W ที่คงตัว ใน ค.ศ. 1834 แฮมิลทันได้สังเกตว่า หากจะเลียนแบบทัศนศาสตร์ (เมื่อรังสีของแสงเชิงเรขาคณิตอยู่ในแนวตั้งฉากกับหน้าคลื่น (wave front) ที่มีเฟส (phase) คงตัว) เราก็อาจแปลความกลศาสตร์แบบฉบับเป็นขีดจำกัด 'ทัศนศาสตร์เชิงเรขาคณิต' ของการเคลื่อนที่ของคลื่น ที่วงโคจรแบบฉบับอยู่ในเชิงตั้งฉากกับหน้าคลื่น $W = \text{constant}$ ซึ่งแนวคิดนี้ถูกสืบสาวราวเรื่องโดย เดอ เบรย (De Broglie) และชเรอดิงเงอร์ (Schrödinger) และนำไปสู่การสร้างวิชากลศาสตร์ควอนตัมในเวลาต่อมา

บรรณานุกรม

1. Ballentine, L. E. (1998) *Quantum Mechanics : A Modern Development.* World Scientific, Massachusetts.

2. Bransden, B. H. and Joachain, C. J. (2000) *Quantum Mechanics*. Pearson Education, 2nd Edn, London.

3. Griffiths, D. J. (1995) *Introduction to Quantum Mechanics*. Prentice Hall, New Jersey.

4. Schwabl, F. and Lahee A. (Translator) (1996) *Advanced Quantum Mechanics*, Springer-Verlag, New York.

5. Shiff, L.I. (1949) *Quantum Mechnics*, Mc Graw-Hill, New York.

6. Townsend, J. S. (1992) *A Modern Approach to Quantum Mechanics*. McGraw-Hill, New York.

ดัชนี