$$\lambda = \frac{h}{p}$$

และ

$$v = \lambda\nu$$

$$\lambda = \frac{v}{\nu}$$

เพราะฉะนั้น

$$\frac{v}{\nu} = \frac{h}{p}$$

$$\frac{\nu}{v} = \frac{p}{h}$$

$$\frac{\nu^2}{v^2} = \frac{p^2}{h^2}$$

สมการ 22 จะเป็น

$$\nabla^2\psi = -\frac{4\pi^2 p^2}{h^2}\psi \qquad \text{.......................... 23}$$

ในกลศาสตร์แผนเดิม

$$K = \frac{p^2}{2m}$$

และพลังงานรวม(E)

$$E = K + U$$

$$K = E - U$$

$$\frac{p^2}{2m} = E - U$$

$$p^2 = 2m\,(E - U)$$

แทนค่า p^2 ลงในสมการ 23 จะได้

$$\nabla^2\psi = -\frac{8\pi^2 m}{h^2}(E-U)\psi$$

$$= \frac{-2m}{\hbar^2}(E-U)\psi$$

$$\nabla^2\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E-U)\psi = 0 \qquad \text{............................ 24}$$

สมการ 24 เรียกว่า **สมการของชเรอดิงเงอร์ที่ไม่ขึ้นกับเวลา** (Schrödinger 's time independent wave equation)

Erwin Schrödinger

เมื่อจัดเรียงเสียใหม่ จะได้

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U\right)\psi = E\psi \qquad \text{.......................................} \; 25$$

เทอมในเครื่องหมาย ( ) สมการ 25 คือ ตัวดำเนินการที่เรียกว่า **ตัวดำเนินการแฮมิลโทเนียน** (Hamiltonian operator, $\hat{H}$) นั่นคือ

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U \qquad \text{.......................................} \; 26$$

สมการ 25 จึงเป็น

$$\hat{H}\psi = E\psi \qquad \text{..............................} \; 27$$

เป็นอีกรูปหนึ่งของสมการชเรอดิงเงอร์ ลักษณะของสมการ 27 นี้เป็นสมการที่รู้จักกันทางคณิตศาสตร์ว่า **สมการค่าเจาะจง** (eigen value equation) ซึ่งมีรูปทั่วไปเป็น

$$\hat{A}\phi = a\phi$$

ซึ่ง $\hat{A}$ เป็นตัวดำเนินการเจาะจง (eigen operator)

a เป็นค่าคงตัว เรียกว่า ค่าเจาะจง (eigen value)

ϕ เป็นฟังก์ชันเจาะจง (eigen function)

ตัวอย่างที่ 2.5 จงแสดงว่า e^{ikx} หรือ cos kx ที่เป็นฟังก์ชันเจาะจงของ $\frac{d}{dx}$

วิธีทำ กรณี e^{ikx} จะได้

$$\frac{d\left(e^{ikx}\right)}{dx} = ik\,e^{ikx}$$

e^{ikx} เป็นฟังก์ชันเจาะจงของ $\frac{d}{dx}$

กรณี cos kx จะได้

$$\frac{d\left(\cos kx\right)}{dx} = -k\sin kx$$

$$\neq k\cos kx$$

cos kx จึงไม่เป็นฟังก์ชันเจาะจงของ $\frac{d}{dx}$

กรณีสมการชเรอดิงเงอร์ ฟังก์ชันคลื่น (ψ) เป็นฟังก์ชันเจาะจง (eigen function) และพลังงานรวม (E) เป็นค่าจาะจง (eigen value) ซึ่งค่าของพลังงานรวมจะต้องสามารถหาค่าออกมาได้เป็นค่าจำนวนจริง (real value) แสดงให้เห็นว่าตัวดำเนินการแฮมิลโทเนียม($\hat{H}$) นี้เป็นตัวดำเนินการชนิดหนึ่งของตัวดำเนินการ แอร์มิเทียน (Hermitian operator)

ส่วนอีกสมการหนึ่งจะเป็นสมการชเรอดิงเงอร์ที่ขึ้นกับเวลา (time - dependent Schrödinger equation) จะเป็น

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}E\psi = 0 \qquad \text{................................ 28}$$

โดยฟังก์ชันคลื่น ψ ในสมการนี้เป็น

$$\psi = \psi\,(x,y,z,t)$$

ในที่นี้จะพิจารณาเฉพาะสมการชเรอดิงเงอร์ที่ไม่ขึ้นกับเวลา

3. การประยุกต์ใช้สมการชเรอดิงเงอร์

สมการชเรอดิงเงอร์ที่ไม่ขึ้นกับเวลา คือ

$$\nabla^2\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E-U)\psi = 0$$

สมการนี้มีการนำมาใช้อธิบายการเคลื่อนที่ของอนุภาคในระดับจุลทรรศน์ (microscopic world) ได้ดี ทั้งนี้ขึ้นอยู่กับปัญหาที่ต้องการนำมาอธิบายว่าเป็นปัญหาอะไร โดยเฉพาะอนุภาคนั้นอยู่ภายใต้อิทธิพลของพลังงานศักย์ (U) แบบใด เช่น

- อนุภาคอิสระ (free particle)
- อนุภาคภายในกล่องศักย์
- อะตอมไฮโดรเจน

ฯลฯ

3.1 อนุภาคอิสระ

อนุภาคอิสระเป็นอนุภาคที่ไม่อยู่ภายใต้อิทธิพลของศักย์ใดๆ นั่นคือ พลังงานศักย์ของอนุภาคนี้มีค่าเป็นศูนย์ ดังนั้นถ้าสมมติว่า อนุภาคนี้มีการเคลื่อนที่ได้เพียง 1 มิติจะมีสมการชเรอดิงเงอร์เป็น

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi(x) = 0 \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots..\ 29$$

การที่อนุภาคอิสระไม่มีพลังงานศักย์ มีแต่พลังงานจลน์ แสดงว่า

พลังงานรวม = พลังงานจลน์ของอนุภาค

$$E = E_K = \frac{p^2}{2m}$$

จากเรื่องคลื่นสสาร

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

ให้

k เป็นเลขคลื่นเชิงมุม (angular wave number) มีค่าเท่ากับ $\frac{2\pi}{\lambda}$ เพราะฉะนั้น

$$\lambda = \frac{2\pi}{k}$$

$$\frac{2\pi}{k} = \frac{h}{p}$$

$$p = \hbar k \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \; 30$$

พลังงานรวมของอนุภาคอิสระจะเป็น

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots.... \; 31$$

แทนในสมการ 29

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2\psi = 0 \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \; 32$$

เป็นสมการอนุพันธ์อันดับสอง มีผลเฉลย (solution) เป็น

$$\psi(x) = e^{1kx} \quad \text{หรือ} \quad e^{-1kx}$$

ถ้าผลเฉลย เป็น

$$\psi(x) = e^{1kx}$$

หมายถึงอนุภาคอิสระที่มีโมเมนตัม $p = \hbar k$ เคลื่อนที่ไปในทิศทาง + x
แต่ถ้าผลเฉลย เป็น

$$\psi(x) = e^{-1kx}$$

หมายถึง อนุภาคอิสระที่มีโมเมนตัม $p = \hbar k$ เคลื่อนที่ไปในทิศทาง - x ที่น่าสังเกต คือ

ถ้า

$$\psi(x) = e^{1kx} \quad \text{จะมี} \quad \psi^*(x) = e^{-1kx}$$

แต่ถ้า

$$\psi(x) = e^{-1kx} \quad \text{จะมี} \quad \psi^*(x) = e^{1kx}$$

ทำให้

$$|\psi(x)|^2 = \psi^*(x)\ \psi(x) = e^{1kx}\ e^{-1kx} = 1$$

แสดงว่า ความน่าจะเป็นที่จะพบอนุภาค ณ จุดใดๆ บนแกน x จะเท่ากันหมดทุกจุด ดังนั้นผลเฉลยของสมการ 32 จึงสามารถเขียนในรูปผลรวมเชิงเส้น (linear combination) ของผลเฉลยทั้งสองเป็น

$$\psi(x) = A\,e^{1kx} + B\,e^{-1kx} \qquad \text{…………………. 33}$$

ถ้าเป็นอนุภาคอิสระที่เคลื่อนที่ในปริภูมิ (space) x, y, z จะมีสมการชเรอดิงเงอร์ เป็น

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi = 0 \qquad \text{…………………. 34}$$

กรณีนี้

$$\psi = \psi\,(x,y,z)$$

สมการ 34 จะมีผลเฉลยเป็น

$$\psi\,(x,y,z) = e^{1\vec{k}\cdot\vec{r}} \qquad \text{………………………….. 35}$$

เมื่อ

$\vec{k}$ เป็นเวกเตอร์คลื่น (wave vector) ซึ่ง

$$k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$$

$$\vec{k} = k_x\hat{i} + k_y\hat{j} + k_z\hat{k}$$

$\vec{r}$ เป็นเวกเตอร์บอกตำแหน่ง (positional vector) ซึ่งในระบบพิกัดฉาก

$$\vec{r} = x\hat{i} + y\hat{j} + z\hat{k}$$

เมื่อ

$\hat{i}, \hat{j}, \hat{k}$ เป็นเวกเตอร์หนึ่งหน่วย (unit vector) ในแนว x,y,z ตามลำดับ

ดังนั้น

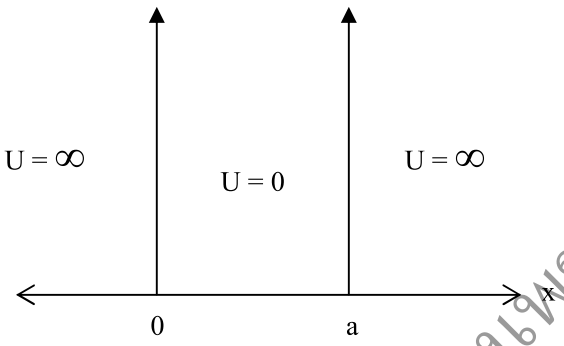
$$\vec{k}\cdot\vec{r} = k_x x + k_y y + k_z z$$

เมื่อ

k_x, k_y, k_z เป็นส่วนประกอบ (components) ของเวกเตอร์คลื่นในแนวแกน x,y,z ตามลำดับ

3.2 อนุภาคในกล่องศักย์ (Particle in a Potential Box)

เป็นปัญหาเกี่ยวกับอนุภาคที่ต่อเนื่องกับอนุภาคอิสระ โดยสมมุติว่า มีอนุภาคหนึ่งมีพลังงานศักย์เป็นศูนย์ถูกจำกัดให้อยู่แต่ภายในกล่อง 1 มิติที่มีความยาวเท่ากับ a และเพื่อให้อนุภาคอยู่แต่เฉพาะภายในกล่องเท่านั้นจึงให้พลังงานศักย์ภายนอกกล่องมีค่าอนันต์ (∞) ดังรูป 2.2



รูปที่ 2.2 อนุภาคภายในกล่องศักย์ 1 มิติ

จะเห็นว่า ความน่าจะเป็นที่จะพบอนุภาคจึงอยู่ในช่วงที่ x มีค่าระหว่าง 0 กับ a เท่านั้น ที่ $a < x < 0$ เราจะไม่มีโอกาสพบอนุภาคนี้ ดังนั้น

$$\psi(x) \quad = \quad 0 \quad \text{เมื่อ} \quad a < x < 0 \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \; 36$$

ความสัมพันธ์ตามสมการ 36 นี้ เรียกว่า **เงื่อนไขขอบเขต** (boundary condition) สำหรับอนุภาคในกล่องศักย์ 1 มิติ ส่วนสมการชเรอดิงเงอร์ของอนุภาคนี้จะเป็นเช่นเดียวกับอนุภาคอิสระคือ

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi(x) \quad = \quad 0$$

และ

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2\psi(x) \quad = \quad 0$$

$$\psi(x) \quad = \quad A\,e^{1kx} + B\,e^{-1kx}$$

จากเงื่อนไขขอบเจตในสมการ 36

ที่ x = 0

$$\psi(x) \quad = \quad 0$$

จะได้

$$0 \quad = \quad A + B$$

$$A \quad = \quad -B$$

ดังนั้น

$$\psi(x) = A\,(e^{1kx} - e^{-1kx})$$

ใช้ความสัมพันธ์ของออยเลอร์ (Euler's relation) คือ

$$e^{1kx} = \cos kx + i \sin kx$$

$$e^{-1kx} = \cos kx - i \sin kx$$

$$e^{1kx} - e^{-1kx} = 2i \sin kx$$

จะได้

$$\psi(x) = A\,2i \sin kx = C \sin kx \qquad \ldots\ldots\ldots\ 37$$

และอีกเงื่อนไขขอบเขตหนึ่ง คือ

ที่ $x = a \qquad \psi(a) = 0$

จากสมการ 37 จะได้

$$0 = C \sin ka$$

ทั้งนี้ C ต้องไม่เท่ากับ 0 แสดงว่า

$$\sin ka = 0$$

หมายความว่า

$$ka = 0,\ \pi,\ 2\pi, \ldots$$

นั่นคือ

$$ka = n\pi \qquad (n = 0,1,2,3\ldots.)$$

$$k = \frac{n\pi}{a}$$

แทนค่า k ลงในสมการ 30,31 และ 37 จะได้

$$p_n = \frac{n\pi\hbar}{a} \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ 38$$

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots..\ 39$$

และ

$$\psi(x) = C \sin \frac{n\pi x}{a} \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots..\ 40$$

การหาค่า C จะหาจากเงื่อนไขการทำให้เป็นปรกติ (สมการ 16) คือ

$$\int_o^a \left| C \quad \sin\frac{n\pi x}{a} \right|^2 dx \quad = \quad 1$$

$$C^2 \int_o^a \sin^2 \frac{n\pi x}{a} dx \quad = \quad 1$$

$$C^2\left(\frac{1}{2}a\right) \quad = \quad 1$$

$$C \quad = \quad \sqrt{\frac{2}{a}}$$

ฟังก์ชันคลื่นสมการ 40 จะเป็น normalized wave function ของอนุภาคในกล่องศักย์ 1 มิติ เป็น

$$\psi(x) \quad = \quad \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a} \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots.. \ 41$$

ถ้าเป็นกล่องศักย์รูปลูกบาศก์ 3 มิติ มีด้านแต่ละด้านยาวเท่ากับ a กรณีนี้ ฟังก์ชันคลื่นจะเป็น

$$\psi \quad = \quad \psi\,(x, y, z)$$

และสมการชเรอดิงเงอร์จะเป็น

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} + \frac{2m}{\hbar}E\psi \quad = \quad 0$$

จะมีผลเฉลยเป็น

$$\psi \quad = \quad e^{1\bar{k}.\bar{r}}$$

โดย

$$k_x \quad = \quad \frac{n_x\pi}{a}$$

$$k_y \quad = \quad \frac{n_y\pi}{a}$$

$$k_z \quad = \quad \frac{n_z\pi}{a}$$

ดังนั้น

$$\left.\begin{aligned} p_x &= n_x \frac{\pi\hbar}{a} \\ p_y &= n_y \frac{\pi\hbar}{a} \\ p_z &= n_z \frac{\pi\hbar}{a} \end{aligned}\right\} \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots 42$$

และ

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)$$

$$= \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\ (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots 43$$

ส่วนฟังก์ชันคลื่นก็จะได้

$$\psi = C \sin\frac{n_x \pi x}{a} \sin\frac{n_z \pi y}{a} \sin\frac{n_z \pi z}{a} \qquad \ldots\ldots 44$$

เมื่อ n_x , n_y และ n_z คือ จำนวนเต็มตามแนวแกน x, y, z ตามลำดับ

ให้

$$\chi^2 = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2$$

ดังนั้น χ จึงเป็นเหมือนกับเวกเตอร์ใดๆ ที่มีส่วนประกอบเป็น n_x, n_y และ n_z ตามแนวแกน x, y, z ตามลำดับ สมการ 43 จะเป็น

$$E = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\chi^2$$

$$\chi = \sqrt{\frac{2ma^2E}{\pi^2\hbar^2}}$$

เราจะสามารถหาจำนวนสถานะ (states) ที่มีค่าพลังงานตั้งแต่ 0 ถึง E ในปริภูมิ xyz ได้จากปริมาตรของหนึ่งอัฐภาค (octant) ของทรงกลมที่มีรัศมีเท่ากับ χ นั่นคือ

$$N(E) = \frac{1}{8}\left(\frac{4}{3}\pi\chi^3\right) = \frac{1}{6}\pi\chi^3$$

$$= \frac{1}{6}\pi\left(\frac{2ma^2E}{\pi^2\hbar^2}\right)^{3/2}$$

$$N(E) = \frac{1}{6}\pi a^3\left(\frac{2mE}{\pi^2\hbar^2}\right)^{3/2}$$

$$= \frac{\pi}{6}V\left(\frac{2mE}{\pi^2\hbar^2}\right)^{3/2}$$

$$= \frac{8\pi V}{3h^3}\left(2m^3\right)^{1/2} E^{3/2}$$

เมื่อ N(E) คือ จำนวนสถานะที่มีค่าพลังงาน 0 ถึง E

V คือ ปริมาตรของกลุ่มรูปลูกบาศก์ซึ่งเท่ากบ a^3

ส่วนจำนวนสถานะที่มีพลังงานระหว่าง E กับ E + dE จะได้จาก

$$dN(E) = \frac{4\pi v(2m^3)^{(1/2)}}{h^3}E^{1/2}dE \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ 45$$

ให้ g(E) คือจำนวนสถานะที่มีพลังงาน E ต่อช่วงพลังงานหนึ่งหน่วย นั่นคือ

$$g(E) = \frac{dN}{dE}$$

$$= \frac{4\pi v(2m^3)^{(1/2)}}{h^3}E^{1/2} \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ 46$$

หรืออาจกล่าวได้ว่า g(E) คือความหนาแน่นของระดับพลังงานหรือสถานะที่มีพลังงาน E นั่นเอง ซึ่งบางครั้งเราอาจจะหาความหนาแน่นของสถานะที่มีโมเมนตัมระหว่าง p กับ p + dp เป็น

$$g(p) = \frac{dN}{dp}$$

$$= \frac{4\pi v}{h^3}p^2 \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ 47$$

3.3 อะตอมไฮโดรเจน (Hydrogen Atom)

ปัญหาของอะตอมไฮโดรเจนเป็นปัญหาของอนุภาค (คืออิเล็กตรอน) อยู่ภายใต้สนามของแรงจากศูนย์กลาง (central force field) ที่เกิดจากประจุบวกของนิวเคลียส มีพลังงานศักย์เป็น

$$U = \frac{1}{4\pi\epsilon_\circ}\ \frac{Ze^2}{r}$$

จะมีสมการชเรอดิงเงอร์เป็น

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}+\frac{2m}{\hbar}\left(E+\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2}\right)\psi \quad = \quad 0$$

ซึ่งฟังก์ชันคลื่น เป็น $\psi = \psi(x, y, z)$ คือมีตัวแปร x y และ z ของระบบพิกัดฉากรวมอยู่ด้วยกัน ในการหาผลเฉลยของสมการชเรอดิงเงอร์สำหรับไฮโดรเจนนี้จะต้องทำการแปลงระบบพิกัดของตัวดำเนินการลาปลาเซียน (∇^2) จากระบบพิกัดฉากให้อยู่ในระบบพิกัดเชิงขั้ว (polar coordinate system) คือ

$$\nabla^2 \quad = \quad \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)$$

ดังนั้นสมการชเรอดิงเงอร์สำหรับอะตอมไฮโดรเจนจึงได้

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right)+\frac{2m}{\hbar^2}(E-U)\psi \quad = \quad 0 \qquad \text{……………..}\ 48$$

ให้

$$\psi(r,\theta,\varphi) \quad = \quad R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi) \qquad \text{........................}\ 49$$

เมื่อ

$R(r)$ เป็นฟังก์ชันที่ขึ้นอยู่กับระยะห่างของอิเล็กตรอนกับนิวเคลียสเท่านั้น

$\Theta(\theta)$ เป็นฟังก์ชันที่ขึ้นอยู่กับมุม θ เท่านั้น

$\Phi(\varphi)$ เป็นฟังก์ชันที่ขึ้นอยู่กับมุม φ เท่านั้น

ใช้วิธีการแยกตัวแปร (technique of separation) ด้วยการเพิ่มค่าคงตัวในการแยกตัวแปร (separation constants) จะแยกสมการ 48 ออกเป็น 3 สมการคือ

$$\frac{\partial^2\Phi}{\partial\varphi^2}+m^2\Phi \quad = \quad 0 \qquad \text{..…………………….}\ 50$$

$$\frac{m^2}{\sin^2\theta}\Theta-\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial r}\left(\sin\theta\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}\right)-1(1+1)\Theta \quad = \quad 0 \qquad \text{……………..………..}\ 51$$

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right)+\frac{2m}{\hbar^2}(E-U)R-\frac{1(1+1)}{r^2}R \quad = \quad 0 \qquad \text{………………………}\ 52$$

เมื่อ m และ 1 คือค่าคงตัวในการแยกตัวแปร สมการทั้งสามมีผลเฉลยดังนี้

สมการ 50 จะมีผลเฉลยเป็น

$$\Phi(\varphi) \quad = \quad \sqrt{\frac{1}{2\pi}}\, e^{\pm 1 m\varphi} \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \; 53$$

สำหรับสมการ 51 เมื่อให้ x = sinθ ก็จะได้สมการคณิตศาสตร์เรียกว่า สมการของเลอจองด์สมทบ (Associated Legendre's Equation) มีผลเฉลยเป็น

$$\Theta_{l,m}(\theta) \quad = \quad \sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{2(l+|m|!)}}\, p_l^{|m|}(\cos\theta) \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \; 54$$

เมื่อ

$p_l^{|m|}(\cos\theta)$ เป็นฟังก์ชันเรียกว่า ฟังก์ชันเรียกว่า ฟังก์ชันเลอจองด์สมทบ (Associated Legendre Function) ที่องศา l อันดับที่ m

สมการ 52 ถ้าให้

$$\rho \quad = \quad \left(\frac{2Z}{nr_\circ}\right) r$$

จะแปลงเป็นสมการที่เรียกว่า สมการของลาแกร์สมทบ (Associated Laguerre's Equation) มีผลเฉลยเป็น

$$R_{n,l}(r) \quad = \quad \sqrt{\left(\frac{2Z}{nr_\circ}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}}\, e^{-\rho/2}\, \rho^l\, L_{n+l}^{2l+1}(\rho) \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \; 55$$

เมื่อ

$L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$ เป็นฟังก์ชันเรียกว่าฟังก์ชันลาแกร์สมทบ (Associated Laguerre's Equation) และเมื่อแทนผลเฉลยต่างๆ ของสมการทั้งสามนี้ลงในสมการ 49 ก็จะได้ normalized wave functions ($\psi_{n,l,m}$) ของอะตอมไฮโดรเจน ดังตารางที่ 2.1

ตารางที่ 2.1 Normalized Wave fuctions ($\psi_{n,1,m}$) ของอะตอมไฮโดรเจน

$\psi_{1,0,0}$	$= \dfrac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\dfrac{Z}{a_{\circ}}\right)^{3/2} e^{-6}$
$\psi_{2,0,0}$	$= \dfrac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\dfrac{Z}{a_{\circ}}\right)^{3/2} (2-\sigma)e^{-6/2}$
$\psi_{2,1,0}$	$= \dfrac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\dfrac{Z}{a_{\circ}}\right)^{3/2} \sigma e^{-6/2}\cos\theta$
$\psi_{2,1,1}$	$= \dfrac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\dfrac{Z}{a_{\circ}}\right)^{3/2} \sigma e^{-6/2}\sin\theta \quad \cos\varphi$
$\psi_{2,1,-1}$	$= \dfrac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\dfrac{Z}{a_{\circ}}\right)^{3/2} \sigma e^{-6/2}\sin\theta \quad \sin\varphi$
	ฯลฯ
เมื่อ σ	$= \left(\dfrac{Z}{a_{\circ}}\right)r$

ฟังก์ชันคลื่นต่างๆ เหล่านี้จะเห็นว่า เป็นฟังก์ชันที่เกิดจากปริภูมิในพิกัดเชิงขั้ว (r,θ,φ) เราจึงจัดเป็นฟังก์ชันคลื่นเชิงปริภูมิ (spatial wave functions) เราเรียกฟังก์ชันเหล่านี้ว่า **ออร์บิทัลเชิงอะตอม** (atomic orbitals) ส่วนค่าคงตัวที่ถูกเพิ่มเข้าไปในการแยกตัวแปรคือ n, 1 และ m นั้นเป็นเลขที่มีนัยสำคัญต่อออร์บิทัลเชิงอะตอม เราเรียกว่า **เลขควอนตัม** (quantum numbers) ดังนี้

n เรียกว่า principal quantum number เป็นจำนวนเต็มแสดงถึงระดับพลังงาน (energy level) ของอิเล็กตรอน โดย n = 1, 2, 3 ....

1 เรียกว่า orbital quantum number เป็นจำนวนเต็มที่มีค่า

$$1 = 0, 1, 2, \ldots, n-1$$

ค่า 1 จะบอกถึงชนิดของระดับพลังงานย่อย (subenergy level หรือ subshell) เช่น

1	=	0 หมายถึง s – subshell
1	=	1 หมายถึง p – subshell
1	=	2 หมายถึง d – subshell
1	=	3 หมายถึง f – subshell
1	=	4 หมายถึง g – subshell

m เรียกว่า magnetic quantum number เป็นค่าแสดงถึงภาวะการวางทิศ (orientations) ของระดับพลังงานย่อยในปริภูมิพิกัดฉาก ซึ่งก็คือ ออร์บิทัลเชิงอะตอมนั่นเอง เช่น ใน p - subshell

ถ้า m = 0 แสดงถึงออร์บิทัลนั้นอยู่ในแนวแกน z

ถ้า m = 1 แสดงถึงออร์บิทัลนั้นอยู่ในแนวแกน x

ถ้า m = -1 แสดงถึงออร์บิทัลนั้นอยู่ในแนวแกน y

ดังนั้น

$\psi_{1,0,0}$ หมายถึง 1s – orbital

$\psi_{2,0,0}$ หมายถึง 2s – orbital

$\psi_{2,1,1}$ หมายถึง $2p_x$ – orbital

$\psi_{2,1,-1}$ หมายถึง $2p_y$ – orbital

$\psi_{2,1,0}$ หมายถึง $2p_z$ – orbital

จะเห็นว่า ค่าของ m จึงมีค่าเป็น

$$m = 0, \pm 2, \ldots\ldots \pm 1$$

จำนวนค่าของ m จึงมีได้ 21 + 1 ค่า เรียกว่า **สภาพซ้อนสถานะ** (degeneracy)

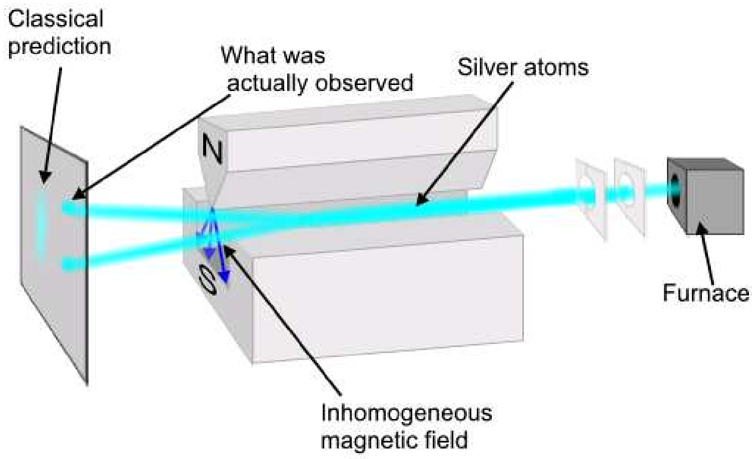
4. อิเล็กตรอนสปิน (Electron Spin)

ระบบมหาทรรศน์ ไม่ว่าจะเป็น ดาวฤกษ์ ดาวเคราะห์ แกแลกซี จะพบว่า มีการเคลื่อนที่ 2 แบบ คือ

- การโคจรรอบจุดศูนย์กลางของระบบ (orbital motion)
- การหมุนรอบแกนตัวเอง (spin motion)

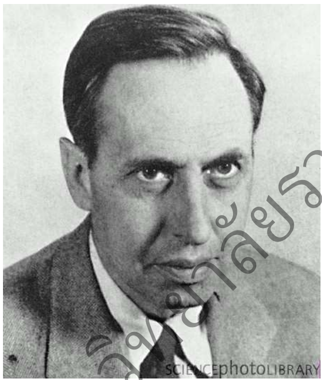
ในระบบจุลทรรศน์ เช่น โมเลกุล อะตอม นิวเคลียส อิเล็กตรอน ฯลฯ ก็จะต้องมีการเคลื่อนที่ทั้งสองแบบเช่นกัน นิวเคลียสก็ต้องมีทั้ง orbital motion และnuclear spin อิเล็กตรอนก็ต้องมีทั้ง orbital motion และอิเล็กตรอนสปิน เป็นต้น

แนวความคิดของการเกิดอิเล็กตรอนสปินนั้น เป็นผลมาจากการทดลองของสเติร์น - เจอลาช (Stern-Gerlach's experiment) ในปี พ.ศ. 2467 ซึ่งได้ทดลองผ่านลำ (beam) ของไอเงินเข้าไปในสนามแม่เหล็กไม่เป็นเอกพันธุ์ (inhomogeneous magnetic field) ปรากฏว่า หลังจากผ่านสนามแม่เหล็กนี้แล้วลำของไอเงินเกิดการแตกออก (split) เป็น 2 ลำ ดังรูปที่ 2.3

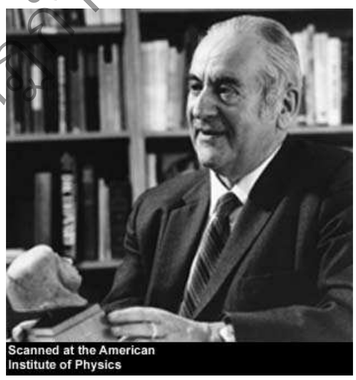


รูปที่ 2.3 การทดลองของสเติร์น – เจอลาช
(ที่มา Wikimedia Commons)

ต่อมาปี พ.ศ. 2469 อูห์เลนเบก (G. Uhlenbeck) และเกาด์สมิท (S. Goudsmit)



George Uhlenbeck



Samuel Goudsmit

ได้อธิบายการเกิดสเปกตรัมของพวกอะตอมที่เหมือนไฮโดรเจนด้วยอิเล็กตรอนสปิน และการทดลองของสเติร์น-เจอลาชก็สามารถอธิบายได้ด้วยอิเล็กตรอนสปินเช่นกัน โดยพวกเขาอธิบายว่า เมื่ออิเล็กตรอนเกิดการสปินย่อมต้องมีโมเมนตัมเชิงมุมของสปิน (spin angular momentum, $\vec{S}$) แต่ว่าอิเล็กตรอนเป็นอนุภาคที่มีประจุไฟฟ้าเมื่อเกิดการสปินก็ย่อมจะเกิดโมเมนต์แม่เหล็กขั้วคู่ของสปิน (spin magnetic dipole moment, $\vec{M}_s$) โดยมีความสัมพันธ์กับโมเมนตัมเชิงมุมของสปินเป็น

$$\vec{M}_s = -g_s \frac{e}{2m^2} \vec{S} \qquad \text{..................................... } 56$$

เมื่อ g_s คือ gyromagnetic ratio ของอิเล็กตรอนซึ่งมีค่าเท่ากับ 2.0024

m_s คือ มวลของอิเล็กตรอน

จากการทดลองของ สเติร์น – เจอลาชที่สนามแม่เหล็กไม่เป็นเอกพันธุ์สามารถแตกลำอะตอม (atomic beams) ออกเป็น 2 ลำ แสดงว่า การสปินของอิเล็กตรอนมี 2 ภาวะการวางทิศ (orientations) ซึ่งจำนวนภาวะการวางทิศ จะหาได้จาก

$$g = 2s + 1$$

เมื่อ g คือ จำนวนภาวะการวางทิศ ซึ่งเท่ากับ 2
จะได้

$$s = \frac{1}{2}$$

ซึ่ง

s คือ เลขควอนตัมชนิดหนึ่งเรียกว่า spin quantum number ซึ่งเลขควอนตัมนี้สัมพันธ์กับโมเมนตัมเชิงมุมของสปิน ($\bar{S}$) ด้วย

$$S^2 = s(s+1)\hbar^2$$

$$= \frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1)\hbar^2 = \frac{3}{4}\hbar^2 \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots .. \; 57$$

แต่ว่าโมเมนตัมเชิงมุมของสปิน ($\bar{S}$) เป็นปริมาณเวกเตอร์ซึ่งมีส่วนประกอบตามแกนต่างๆ ในพิกัดฉากเป็น S_x, S_y, S_z โดย

$$S^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2$$

ถ้า

$$S_x^2 = S_y^2 = S_z^2$$

$$S^2 = 3S_z^2$$

จากสมการ 57 ก็จะได้

$$S_z^2 = \frac{1}{4}\hbar^2$$

$$S_z = \pm\frac{1}{2}\hbar$$

ให้

$$m_s = \pm\frac{1}{2}$$

นั่นคือ m_s คือ เลขควอนตัมที่ตรงกับโมเมนตัมเชิงมุมของสปินในแนวแกน Z (S_z) โดย

$$m_s \quad = \quad +\frac{1}{2}$$ เป็นเลขควอนตัมของการสปินที่มีทิศทางในแนวชี้ขึ้น (spin-up)

และ

$$m_s \quad = \quad -\frac{1}{2}$$ เป็นเลขควอนตัมของการสปินที่มีทิศทางในแนวชี้ลง (spin-down)

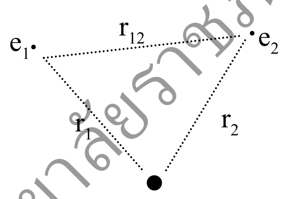
เมื่อเป็นเช่นนี้จึงเกิดฟังก์ชันคลื่นอีกชนิดหนึ่งคือ ฟังก์ชันคลื่นเชิงสปิน (spin wave function, χ_{m_s}) และฟังก์ชันคลื่นที่สมบูรณ์ก็จะต้องมีทั้งฟังก์ชันคลื่นเชิงปริภูมิและฟังก์ชันคลื่นเชิงสปิน เป็น

$$\psi \quad = \quad \psi_{n.1.m}\ \chi_{m_s} \qquad \text{.............................. } 58$$

โดย $\psi_{n.1.m}$ เป็นฟังก์ชันคลื่นเชิงออร์บิทัล χ_{m_s} เป็นฟังก์ชันคลื่นเชิงสปิน

5. อะตอมฮีเลียม (Helium atom)

อะตอมฮีเลียมเป็นระบบอะตอมที่มี 2 อิเล็กตรอน 1 นิวเคลียส ดังรูป 2.3



รูป 2.3 อะตอมฮีเลียม

จะต้องมีพลังงานศักย์ (U) ถึง 2 ส่วนคือ

1. ส่วนที่เกิดจากการดึงดูดกันระหว่างนิวเคลียสกับอิเล็กตรอนทั้งสองคือ $\dfrac{Ze^2}{4\pi\in_\circ r_1}$ กับ $\dfrac{Ze^2}{4\pi\in_\circ r_2}$

2. ส่วนที่เกิดจากการผลักกันของอิเล็กตรอนทั้งสองคือ $\dfrac{Ze^2}{4\pi\in_\circ r_{12}}$

ดังนั้น

$$U = \frac{Ze^2}{4\pi \in_\circ}\left[\frac{1}{r_1}+\frac{1}{r_2}-\frac{1}{r_{12}}\right] \qquad \text{..............................} \; 59$$

ทำให้การแก้สมการชเรอดิงเงอร์ของอะตอมฮีเลียมยุ่งยาก ไม่สามารถแก้สมการออกมาได้อย่างแม่นตรง จะต้องแก้สมการโดยการทำการประมาณ (approximation)

นอกจากนี้ ยังมีปัญหาเกี่ยวกับฟังก์ชันคลื่นของอะตอมฮีเลียมเราก็ต้องนำมาพิจารณาโดยให้

a เป็นเลขควอนตัม n, l, m_l ที่สถานะหนึ่ง

b เป็นเลขควอนตัม n, l, m_l อีกสถานะหนึ่ง

ดังนั้น ฟังก์ชันคลื่นเชิงออร์บิทัล (ψ) ของอิเล็กตรอนก็จะเป็น

$\psi_a(1)$ เป็นฟังก์ชันคลื่นของอิเล็กตรอน (1) ที่สถานะ a

$\psi_b(1)$ เป็นฟังก์ชันคลื่นของอิเล็กตรอน (1) ที่สถานะ b

$\psi_a(2)$ เป็นฟังก์ชันคลื่นของอิเล็กตรอน (2) ที่สถานะ a

$\psi_b(2)$ เป็นฟังก์ชันคลื่นของอิเล็กตรอน (2) ที่สถานะ b

ฟังก์ชันคลื่นเชิงออร์บิทัลของอะตอม (ψ_{atom}) จะได้จากฟังก์ชันคลื่นของอิเล็กตรอนรวมกันคือ

$\psi_a(1) \;\; \psi_b(2)$ และ $\psi_a(2) \;\; \psi_b(1)$ 60

จากการตีความของบอร์น เราทราบว่า $|\psi|^2$ จะบอกถึงความน่าจะเป็นที่จะพบอนุภาค (คืออิเล็กตรอน) และสมมาตรของการสลับที่อิเล็กตรอนทำให้ได้ว่า ฟังก์ชันคลื่นเชิงออร์บิทัลของอะตอมฮีเลียมได้จากผลรวมเชิงเส้นของฟังก์ชันคลื่นทั้งสองในสมการ 60 คือ

$$\psi_{atom} = \psi_a(1)\psi_b(2) \pm \psi_a(2)\psi_b(1) \qquad \text{............................} \; 61$$

โดยฟังก์ชันคลื่น

$$\psi(1,2) = \psi_a(1)\psi_b(2) + \psi_a(2)\psi_b(1)$$

เมื่อเกิดการสลับที่อิเล็กตรอนจะเป็น

$$\psi(2,1) = \psi_a(2)\psi_b(1) + \psi_a(1)\psi_b(2)$$

ฟังก์ชันที่ได้ยังคงเหมือนเดิม แสดงว่า ฟังก์ชันคลื่นนี้เป็นฟังก์ชันคลื่นที่สมมาตร (symmetric) ต่อการสลับที่อิเล็กตรอน จึงเรียกว่า **ฟังก์ชันคลื่นสมมาตร** (ψ_s)

$$\psi_s = \psi_a(1)\psi_b(2) + \psi_a(2)\psi_b(1) \qquad \text{....................} \; 62$$

ส่วนฟังก์ชันคลื่นที่เป็น

$$\psi(1,2) \quad = \quad \psi_a(1)\psi_b(2) - \psi_a(2)\psi_b(1)$$

เมื่อสลับที่อิเล็กตรอนจะได้เป็น

$$\begin{aligned} \psi(2,1) &= \psi_a(2)\psi_b(1) - \psi_a(1)\psi_b(2) \\ &= -\left[\psi_a(1)\psi_b(2) - \psi_a(2)\psi_b(1)\right] \\ &= -\psi(1,2) \end{aligned}$$

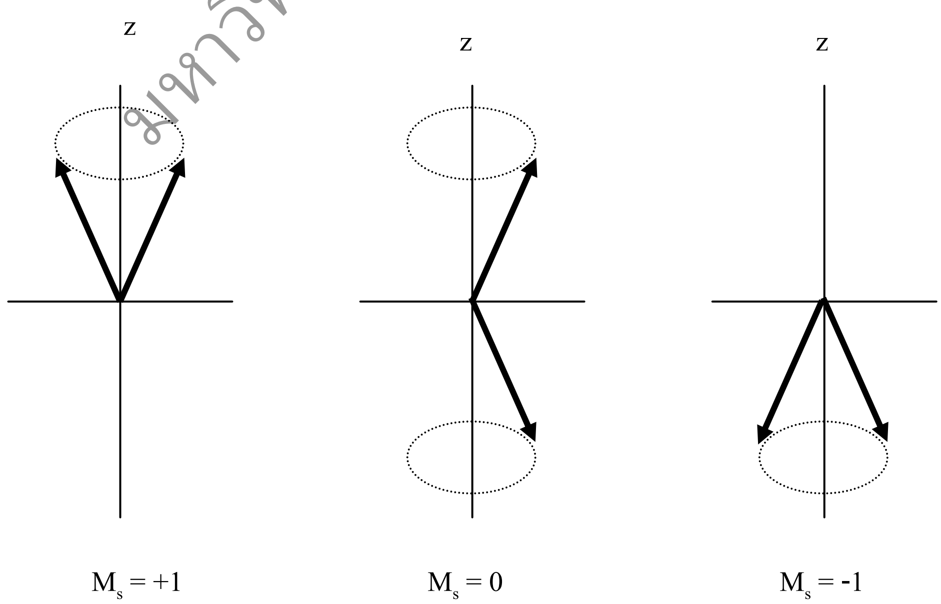
ฟังก์ชันคลื่นนี้เป็นปฏิสมมาตร (antisymmetric) ต่อการสลับที่อิเล็กตรอน เราเรียกว่า **ฟังก์ชันคลื่นปฏิสมมาตร** (ψ_A)

$$(\psi_A) \quad = \quad \psi_a(1)\psi_b(2) - \psi_a(2)\psi_b(1) \qquad \text{……………………} \; 63$$

จะเห็นว่า ฟังก์ชันคลื่นเชิงออร์บิทัลของอะตอมฮีเลียมมีได้ 2 รูปตามสมการ 62 กับ 63 ส่วนฟังก์ชันคลื่นเชิงสปิน (χ) นั้นเราจะพิจารณาดังนี้

เนื่องจากแต่ละอิเล็กตรอนมีค่าสปิน (s) เท่ากับ $\pm\frac{1}{2}$ สำหรับอะตอมฮีเลียมซึ่งมี 2 อิเล็กตรอน จะได้สปินรวม (S) ที่เป็นไปได้ 2 ค่า คือ S = 1,0 เพราะว่า ภาวะการวางทิศของเวกเตอร์สปินของอิเล็กตรอนมีได้ 2 แบบคือ

1. แบบขนาน (parallel) ซึ่งให้ S = 1 จะมีเวกเตอร์สปินลัพธ์ (resultant vector spin, M_s) ได้ 3 ภาวการณ์วางทิศทาง คือ M_s = 1, 0, −1 ดังรูป 2.4



รูปที่ 2.4 สปินแบบขนานในอะตอมฮีเลียม

เราเรียกสถานะสปิน (spin state) นี้ว่า **ชุดสาม** (triplet) จะมีฟังก์ชันคลื่นเชิงสปินที่เป็นสมมาตรมีได้ 3 ฟังก์ชันคลื่นคือ

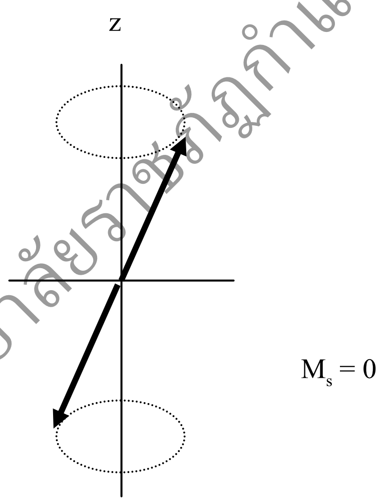
$$\chi_s = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\chi_+(1)\chi_-(2) + \chi_+(2)\chi_-(1)\right] & M_s = 0 \\ \chi_+(1)\chi_+(2) & M_s = 1 \\ \chi_-(1)\chi_-(2) & M_s = -1 \end{cases}$$

เมื่อ

χ_+ คือฟังก์ชันคลื่นเชิงสปินของอิเล็กตรอนที่มี m_s เป็นบวก

χ_- คือฟังก์ชันคลื่นเชิงสปินของอิเล็กตรอนที่มี m_s เป็นลบ

2. แบบขนานสวน (antiparallel) จะให้ S = 0 จะมีเวกเตอร์สปินลัพธ์ได้เพียง 1 ภาวะการวางทิศ คือมี $M_s = 0$ ดังรูป 2.5



รูปที่ 2.5 สปินแบบขนานสวนในอะตอมฮีเลียม

เราเรียกสถานะสปินนี้ว่า **ชุดเดี่ยว** (singlet) มีฟังก์ชันคลื่นเชิงปฏิสมมาตร (antisymmetric) มี 1 ฟังก์ชันคลื่น คือ

$$\chi_A = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\chi_+(1)\chi_-(2) - \chi_+(2)\chi_-(1)\right]$$

เมื่อรวมฟังก์ชันคลื่นเชิงออร์บิทัลกับฟังก์ชันคลื่นเชิงสปินเป็นฟังก์ชันคลื่นรวม จากสมการ 58

$$\psi = \psi_{nlm} \; \chi_{m_s}$$

จะสามารถจัดหมู่ได้ 4 แบบ คือ $\psi_s\chi_s$, $\psi_s\chi_A$, $\psi_A\chi_s$ และ $\psi_A\chi_A$

แต่จากการตรวจสอบระดับพลังงานของอะตอมฮีเลียมพบว่าถ้าฟังก์ชันคลื่นเชิงออร์บิทัล (ψ) เป็นฟังก์ชันคลื่นสมมาตร (ψ_s) ฟังก์ชันคลื่นเชิงสปิน (χ) จะต้องเป็นฟังก์ชันคลื่นปฏิสมมาตร (χ_A) แต่ถ้าฟังก์ชันคลื่นเชิงออร์บิทัลเป็นฟังก์ชันคลื่นปฏิสมมาตร (ψ_A) ฟังก์ชันคลื่นเชิงสปินจะต้องเป็นฟังก์ชันคลื่นสมมาตร (χ_s) นั่นก็แสดงว่า ฟังก์ชันคลื่นรวมของอะตอมฮีเลียมมี 2 รูปแบบ คือ

1) $\psi \quad = \quad \psi_s\chi_A$ จะมีเพียง 1 ฟังก์ชันเพราะ χ_A มี 1 ฟังก์ชันเป็นชุดเดี่ยว อะตอมฮีเลียมของฟังก์ชันคลื่นนี้คือ <u>parahelium</u>

2) $\psi \quad = \quad \psi_A\chi_s$ จะมีได้ 3 ฟังก์ชันเพราะ χ_s มี 3 ฟังก์ชันเป็นชุดสาม อะตอมฮีเลียมของฟังก์ชันนี้เราเรียกว่า <u>orthohelium</u>

ฟังก์ชันคลื่นของ parahelium มี 1 ฟังก์ชันคือ

$$\begin{aligned}\psi &= \psi_s\chi_A \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\Big[\psi_a(1)\psi_b(2)+\psi_a(2)\psi_b(1)\Big]\Big[\chi_+(1)\chi_-(2)-\chi_+(2)\psi_-(1)\Big]\end{aligned}$$

ฟังก์ชันคลื่นของ orthohelium มี 3 ฟังก์ชันคือ

1) $$\frac{1}{\sqrt{2}}\Big[\psi_a(1)\psi_b(2)-\psi_a(2)\psi_b(1)\Big]\Big[\chi_+(1)\chi_-(2)+\chi_+(2)\psi_-(1)\Big]$$

2) $$\Big[\psi_a(1)\psi_b(2)-\psi_a(2)\psi_b(1)\Big]\chi_+(1)\chi_+(2)$$

3) $$\Big[\psi_a(1)\psi_b(2)-\psi_a(2)\psi_b(1)\Big]\chi_-(1)\chi_-(2)$$

สรุปแล้ว "**ฟังก์ชันคลื่นรวมของอะตอมฮีเลียมจะมีลักษณะเป็นปฏิสมมาตร**" (เพราะเกิดจากสมมาตรคูณกับปฏิสมมาตร) จากข้อสรุปนี้เอง นักฟิสิกส์ชาวสวิสชื่อ เพาลี (Wolfgang Pauli)

Wolfgang Pauli

ได้นำไปตั้งเป็นหลักการเรียกว่า **หลักกีดกันของเพาลี** (Pauli's exclusion principle) มีใจความว่า "**ในอะตอมหนึ่งจะต้องไม่มีอิเล็กตรอน 2 อิเล็กตรอนที่มีชุดของเลขควอนตัม (n, l, m_l, m_s) ซ้ำกันครบทั้ง 4 ค่า**"

จากหลักกีดกันเพาลีแสดงว่า ที่ n, l, m_l, และ m_s หนึ่งก็คือสถานะหนึ่งแต่พอ n หรือ 1 หรือ m_l หรือ m_s เปลี่ยนไปเพียงค่าใดค่าหนึ่งสถานะก็จะเปลี่ยนไป ดังนั้นอิเล็กตรอนหนึ่งๆ จะบรรจุอยู่ได้เพียง 1 สถานะ และทุกอิเล็กตรอนจะต้องอยู่ในสถานะที่ต่างกันแสดงว่าในออร์บิทัลหนึ่งซึ่งมีเลขควอนตัม n, l, และ m_l เพียง 1 ค่า ก็จะมีค่า m_s ได้ 2 ค่า นั่นหมายความว่าในออร์บิทัลหนึ่งๆ สามารถมีได้ 2 สถานะ จึงสามารถบรรจุอิเล็กตรอนอยู่ได้อย่างมาก 2 อิเล็กตรอน

บทสรุป

การอธิบายพฤติกรรมของระบบจุลทรรศน์ด้วยฟิสิกส์แผนเดิมประสบความล้มเหลว จึงเกิดทฤษฎีควอนตัม ที่มองลักษณะของคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้า เป็นระบบที่ไม่ต่อเนื่อง เรียกว่า ควอนตัม ได้ความสัมพันธ์ ที่สำคัญ คือ $E = h\nu$ สามารถใช้อธิบายปรากฏการณ์บางอย่างได้เป็นอย่างดี เช่น การแผ่รังสีของวัตถุสีดำ ปรากฏการณ์โฟโตอิเล็กทริก ต่อมาได้มีการนำเอาทฤษฎีควอนตัมร่วมกับทฤษฎีคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าของแมกซเวลล์ เกิดแนวคิดใหม่ เรียกว่า กลศาสตร์คลื่น ซึ่งมีสมการสำคัญ คือ สมการของชเรอดิงเงอร์ ที่นำมาใช้อธิบายพฤติกรรมของระบบจุลทรรศน์ได้เป็นอย่างดีในปัจจุบัน

แบบฝึกหัด

1. โลหะชนิดหนึ่งมีค่าฟังก์ชันงาน 1.5×10^{-19} J ถ้าฉายรังสีชนิดหนึ่งมีความถี่ 1×10^{15} s^{-1} ไปยังโลหะชนิดนี้จะเกิดปรากฏการณ์โฟโตอิเล็กทริก หรือไม่ ถ้าเกิดความเร็วมากที่สุดของโฟโตอิเล็กตรอนเป็นเท่าใด
2. จงหารัศมีอะตอมไฮโดรเจนความเร็วของอิเล็กตรอนที่ระดับพลังงานที่ 2
3. จงหาความยาวคลื่นสสารของโปรตอน ที่มีพลังงานจลน์ 2.5 kJ.
4. จงอนุพัทธ์ไปสู่สมการ

$$(\Delta p_x)(\Delta x) \geq \frac{\hbar}{2}$$

เป็น

$$(\Delta E)(\Delta t) \geq \frac{\hbar}{2}$$

5. จากสมการชเรอดิงเงอร์ที่ไม่ขึ้นกับเวลา

$$\nabla^2\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E-U)\psi = 0$$

จงแสดงว่า โมเมนตัมเชิงเส้นในกลศาสตร์ควอนตัมเป็นตัวดำเนินการโดย

$$\hat{p} = -i\hbar\nabla$$

6. จงหาความไม่แน่นอนโมเมนตัมของอิเล็กตรอนในกล่องศักย์ 1 มิติ มีความกว้าง 10^{-10} เมตร
7. จากสมการ

$$\frac{m^2}{\sin^2\theta}\Theta - \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial r}\left(\sin\theta\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}\right) - 1(1+1)\Theta = 0$$

ถ้าให้ $x = \sin\theta$ จงอนุพัทธ์ให้เป็นสมการเลอจองด์สมทบ คือ

$$(1-x^2)y'' - 2xy + \left[1(1+1) - \frac{m^2}{1-x^2}\right]y = 0$$

8. จงอธิบายความหมายคำต่างๆ ต่อไปนี้

ก. ออร์บิทัลเชิงอะตอม ข. สปิน

ค. หลักกีดกันเพาลี ง. ฟังก์ชันสมมาตร

จ. คลื่นสสาร ฉ. Parahelium