

ศักร์ยั้งผลของอะตอมโตะเคียม



นายดำรงศักดิ์ มดีพงษ์สวัสดิ์

000822

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต
แผนกวิชาฟิสิกส์

บัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

พ.ศ. 2519

5 1559662X

EFFECTIVE POTENTIAL OF SODIUM ATOM

Mr. Dumrongsak Maneepongsawat

A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirement
for the Degree of Master of Science
Department of Physics.
Graduate School
Chulalongkorn University

1976

บัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย ออนุมัติให้บัณฑิตวิทยาลัยนี้เป็น
ส่วนหนึ่งของการศึกษาคามหลักสูตรปริญญามหาบัณฑิต



วิเศษ ธรรม

.....
(ศาสตราจารย์ ดร.วิเศษ ธรรม)

คณบดี

คณะกรรมการตรวจวิทยานิพนธ์..... *ไพฑูริย์ พิรานนท์* ประธานกรรมการ

(อาจารย์ชั้นพิเศษ ไพฑูริย์ พิรานนท์)

..... *วิรุฬห์ สายกณิต* กรรมการ

(ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.วิรุฬห์ สายกณิต)

..... *วิจิตร เล็งหะพันธ์* กรรมการ

(ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.วิจิตร เล็งหะพันธ์)

..... *อนันตสิน เตชะกำพุช* กรรมการ

(ดร.อนันตสิน เตชะกำพุช)

อาจารย์ผู้ควบคุมการวิจัย

ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.วิรุฬห์ สายกณิต

ลิขสิทธิ์ของบัณฑิตวิทยาลัย

จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

วิทยานิพนธ์เรื่อง

ศักยภาพของอะตอมโซเทียม

โดย

นายดำรงศักดิ์ มณีพงษ์สวัสดิ์

แผนกวิชา

ฟิสิกส์



หัวข้อวิทยานิพนธ์

ศึกษาผลของอะตอมโซเดียม

ชื่อ

นายดำรงศักดิ์ มณีพงษ์สวัสดิ์ แผนกวิชาฟิสิกส์

ปีการศึกษา

2519

บทคัดย่อ

อาศัยกฎควอนไทเซชันของบอร์-ซอมเมอร์เฟลด์ในการคำนวณหาศักย์ยังผลของอะตอมโซเดียมซึ่งเป็นอะตอมที่ง่ายที่สุดในอนุกรมแอลคาไล (Alkali Series) โดยวิธีของโปรคอฟยิว พบว่าพลังงานศักย์ดังกล่าวแม้จะให้ระดับพลังงานของอะตอมได้ก็แต่ยังมีข้อบกพร่องอยู่เนื่องจากมีบางช่วงไม่สอดคล้องกับเงื่อนไขควอนไทเซชัน

ในวิทยานิพนธ์นี้เรามุ่งศึกษาข้อบกพร่องและปรับปรุงแก้ไขให้ใช้ได้กับกฎควอนไทเซชันของบอร์-ซอมเมอร์เฟลด์ตลอดช่วง ปรากฏว่าเราได้พลังงานศักย์ที่ดีกว่า ทดสอบผลที่ได้ด้วยการนำไปใช้คำนวณหาเวฟฟังก์ชันและค่าพลังงานที่สถานะต่ำสุด (ground state) ของอะตอมโซเดียมโดยวิธีการอินทิเกรตเลขจำนวน จำกัดพลังงานที่สถานะต่ำสุดผิดพลาดประมาณ 0.02% เท่านั้นเมื่อเทียบจากการทดลอง นับได้ว่าดีกว่าพลังงานศักย์ของโปรคอฟยิว ซึ่งคำนวณพลังงานที่สถานะต่ำสุดผิดพลาดประมาณ 0.6%

หวังว่าวิธีการปรับปรุงการคำนวณนี้อาจจะใช้คำนวณหาศักย์ยังผลของอะตอมแอลคาไลตัวอื่นๆได้ในทำนองเดียวกัน

Thesis Title Effective Potential of Sodium Atom
Name Mr. Dumrongsak Maneepongsawat
Academic year 1976

ABSTRACT

The well-known effective potential of Sodium atom, the simplest atom among the Alkali Series, was first constructed by Prokofjew using the Bohr-Sommerfeld quantization conditions. Although such a potential is capable of reproducing atomic states with reasonable satisfaction, it is found that the Bohr-Sommerfeld quantization conditions are violated in certain regions.

In this thesis we propose to remove this difficulty by allowing the potential to satisfy the Bohr-Sommerfeld quantization in the entire region. We found that it is possible to construct such a Sodium atom potential. This potential is then used to calculate the ground state energy of Sodium atom. This ground state energy differs only 0.02% from the experimental value as compared to 0.6% if the Prokofjew potential is employed.

Perhaps the proposed method may be similarly used to construct the effective potential of other alkali atoms.

กิติกรรมประกาศ

วิทยานิพนธ์ฉบับนี้ สำเร็จลงได้ด้วยความช่วยเหลือจากท่านผู้ช่วยศาสตราจารย์
 ดร.วิรุทธิ์ สายคณิต อาจารย์แผนกวิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย
 ซึ่งเป็นอาจารย์ที่ปรึกษาและผู้ควบคุมการวิจัยครั้งนี้ ได้ให้คำแนะนำในการวิจัยอย่างใกล้ชิด
 ตลอดทั้งแก้ปัญหาที่เกิดขึ้นจากการวิจัยและทางค่านิชาการ รวมทั้งช่วยตรวจแก้ข้อเขียน
 ในวิทยานิพนธ์ ผู้เขียนขอกราบขอบพระคุณท่านอาจารย์ไว้เป็นอย่างสูง ณ ที่นี้

อนึ่งระหว่างการศึกษาปริญญาโทมาหัตถิต ผู้เขียนได้รับทุนการศึกษาจากโครงการ
 การพัฒนามหาวิทยาลัย สำนักคณะกรรมการการศึกษาแห่งชาติ จึงขอขอบพระคุณเป็น
 อย่างสูงไว้ ณ โอกาสนี้ด้วย

สารบัญ

หน้า

บทคัดย่อภาษาไทย	ง
บทคัดย่อภาษาอังกฤษ	จ
กิตติกรรมประกาศ	ฉ
รายการตารางประกอบ	ช
รายการภาพประกอบ	ญ

บทที่

1. บทนำ	1
1.1 การประมาณแบบโหมสต์-เฟอร์มี	2
1.2 การประมาณแบบกึ่งจักรเจิน	5
1.3 วิธีการประมาณแบบฮาร์ตรี	8
1.4 วิธีการประมาณแบบฮาร์ตรี-ฟ็อก	11
1.5 การประมาณแบบฮาร์ตรี-ฟ็อก-สเลเตอร์	12
1.6 วิธีดำเนินการวิจัย	13
2. การประมาณ WKB	16
2.1 ปัญหาการแก้อะซิมป์โตติก	16
2.2 ปัญหาการแกที่ใกล้จุดหัวเลี้ยว	18
2.3 การต่อเนื่องที่จุดหัวเลี้ยวเชิงเส้น	18
2.4 สูตรการต่อเนื่องอะซิมป์โตติก	21
2.5 เงื่อนไขควอนตัมเบอร์-รอมเมอร์-เฟลด์	22
2.6 ปัญหาการแก WKB ของสมการคลื่นตามแนวรัศมี	24
3. ศักย์ยังผลของอะตอมไฮโดรเจนโดยวิธีของโปรคอฟยิว	26

บทที่

4. ปรับปรุงวิธีการคำนวณของโปรกอฟฟิว	42
5. วิธีดำเนินการ เลขจำนวน	60
5.1 ปัญหาการแก้สมการคลื่นตามแนวรัศมีสำหรับอะตอมไฮโดรเจน	60
5.2 การอินทิเกรตเลขจำนวนของสมการตามแนวรัศมี	62
5.3 การเริ่มต้นการอินทิเกรตออกข้างนอก	63
5.4 การเริ่มต้นการอินทิเกรตเข้าข้างใน	65
6. ขอสรุปและขอเสนอแนะ	84
6.1 ขอสรุปและเปรียบเทียบผลที่ได้	84
6.2 ขอเสนอแนะ	86
บรรณานุกรม	88
ประวัติการศึกษา	90

รายการภาพประกอบ

รูปที่	หน้า
2.1 แสดงจุดหัวเลี้ยวเชิงเส้น	19
2.2 แสดงจุดหัวเลี้ยวสำหรับอนุภาคในศักย์รูปบ่อ	23
3 แสดงการเปรียบเทียบพลังงานศักย์ของโปรตอนฟิวและที่ไค่ปรับปรุงใหม่	58
4 แสดงการเปรียบเทียบพลังงานศักย์ที่ไค่ปรับปรุงใหม่และพลังงานศักย์ของมัวร์และโวลโค	59
5 แสดงเวฟฟังก์ชันที่สถานะค่าสุดของอะตอมไฮโดรเจนจากตารางที่ 5	68
6 แสดงเวฟฟังก์ชันที่สถานะค่าสุดของอะตอมไฮโดรเจนจากตารางที่ 6	69
7 แสดงเวฟฟังก์ชันที่สถานะค่าสุดของอะตอมไฮโดรเจนจากตารางที่ 7	70

รายการตารางประกอบ

ตารางที่	หน้า
1. แสดงพลังงานศักย์ของโปรคอปยิว	39
2. แสดงค่าพลังงานสถานะต่างๆของอะตอมไฮโดรเจน	40
3. แสดงพลังงานศักย์ของโปรคอปยิวข้อมูลใหม่	41
4. แสดงพลังงานศักย์ของอะตอมไฮโดรเจนที่ปรับปรุงใหม่	57
5๑ แสดงตารางอินทิเกรตเวกเตอร์ชั้นนอกข้างนอกโดยใช่พลังงานศักย์ของโปรคอปยิว	71
5๒ แสดงตารางอินทิเกรตเวกเตอร์ชั้นเข้าข้างในโดยใช่พลังงานศักย์ของโปรคอปยิว	73
6ก แสดงตารางอินทิเกรตเวกเตอร์ชั้นนอกข้างนอกโดยใช่พลังงานศักย์ของโปรคอปยิวข้อมูลใหม่	75
6ข แสดงตารางอินทิเกรตเวกเตอร์ชั้นเข้าข้างในโดยใช่พลังงานศักย์ของโปรคอปยิวข้อมูลใหม่	77
7ก แสดงตารางอินทิเกรตเวกเตอร์ชั้นนอกข้างนอกโดยใช่พลังงานศักย์ของอะตอมไฮโดรเจนที่ปรับปรุงใหม่	79
7ข แสดงตารางอินทิเกรตเวกเตอร์ชั้นเข้าข้างในโดยใช่พลังงานศักย์ของอะตอมไฮโดรเจนที่ปรับปรุงใหม่	82