# บทที่ 6

## ข้อสรุปและข้อเสนอแนะ

การศึกษาศักย์ยังผลของอะตอมมีหลายวิธีตามที่ได้กล่าวไว้แล้วในบทที่ 1 วิธีที่ง่ายและให้ผลดีคือวิธีการประมาณแบบกึ่งจัดเจน แต่สามารถใช้ได้เฉพาะกับอะตอมแอลคาไลเท่านั้น สรุปผลของการคำนวณและเปรียบเทียบผลที่ได้พร้อมทั้งข้อเสนอแนะต่างๆ และประโยชน์ที่ได้จากการวิจัยครั้งนี้จะได้พูดถึงต่อไป

6.1 ) <u>ข้อสรุปและเปรียบเทียบผลที่ได้</u>

ในบทที่ 3 เราได้เสนอวิธีการคำนวณพลังงานศักย์ยังผลของอะตอมโซเดียมตามโปรคอฟยิวอย่างละเอียดจนได้ฟังก์ชันศักย์ตรงกัน และได้คำนวณเวฟฟังก์ชันโดยวิธีเลขจำนวนและพลังงานที่สถานะต่ำสุด (3s) ในบทที่ 5 ปรากฏว่าได้ค่าพลังงานที่สถานะต่ำสุด $\epsilon = 0.381775$ ริดเบอร์ก์ส พลังงานที่ได้จากการทดลองคือ 0.378 ผิดพลาดไปประมาณ 1 % ก่อนหน้านี้ได้มีผู้นำพลังงานศักย์ของโปรคอฟยิวไปคำนวณหาเวฟฟังก์ชันคือวิกเนอร์และไซทซ์ [1] ( Wigner and Seitz ) โดยวิธีการอินติเกรทเลขจำนวนออกข้างนอกอย่างเดียว ปรากฏว่าได้ค่าพลังงานที่สถานะต่ำสุดมีค่าอยู่ระหว่าง 0.3800 และ 0.3820

สำหรับวิธีการคำนวณพลังงานศักย์ตามเทคนิคของโปรคอฟยิวมีข้อบกพร่องอยู่บ้าง ดังจะเห็นได้จากการคำนวณหาค่าสัมประสิทธิ์ของฟังก์ชัน $Q(\rho)$ ในสมการ (3.3) การอินติเกรทจาก $\rho_{\text{ต่ำสุด}}$ ถึง $\rho_{\text{สูงสุด}}$ ซึ่งเป็นช่วงที่โมเมนตัมของอนุภาคมีค่าแท้จริง ฟังก์ชัน Q ของวงโคจร l = 2,1 และ 0 มีการเหลื่อมล้ำกันอยู่ ฟังก์ชัน Q ควรใช้ต่างกันคือ ช่วง $\rho_{\text{ต่ำสุด}}$ ถึง $\rho_i$ เป็น $Q_{j+1}$ และจาก $\rho_i$ ถึง $\rho_{\text{สูงสุด}}$ เป็น $Q_j$

---

[1] E. Wigner, and F. Seitz, "On the Constitution of Metallic Sodium", Phys. Rev., 43,(1933) p. 804.

แต่โปรคอฟยิวมิได้คำนึงถึงข้อนี้คงใช้ฟังก์ชัน Q เดียวกันตลอดช่วง $\rho$ ต่ำสุด ถึง $\rho$ สูงสุด ทำให้การคำนวณหาค่าสัมประสิทธิ์ผิดพลาดได้ เช่นในวงโคจร $l = 2$ โปรคอฟยิวคำนวณสัมประสิทธิ์ $\alpha = 0.0005$ แต่เมื่อเราแบ่งการอินติเกรทออกเป็นช่วงคือ $\rho$ ต่ำสุด ถึง $\rho_i = 6.7$ ใช้ฟังก์ชัน $Q_1(\rho)$ และช่วง $\rho_i = 6.7$ ถึง $\rho$ สูงสุด ใช้ฟังก์ชัน $Q_0(\rho) = \rho$ ปรากฏว่าคำนวณได้ $\alpha = 0.0085$ จะเห็นได้ว่ามีค่าต่างกัน และเนื่องจากโปรคอฟยิวใช้ค่า $\epsilon_{nl}$ ของซูกิอุระซึ่งเป็นข้อมูลเก่าและค่าไม่ดีนัก เราจึงได้ทำการคำนวณใหม่โดยใช้ค่า $\epsilon_{nl}$ ของสเลเตอร์ในตารางที่ 2 แต่ยังคงใช้เทคนิคของโปรคอฟยิว ปรากฏว่าได้ฟังก์ชันศักย์มีค่าใกล้เคียงกันตามรูปที่ 3 และได้คำนวณเวฟฟังก์ชันและพลังงานของสถานะต่ำสุดตามรูปที่ 6 ได้พลังงาน $\epsilon = 0.379247$ ริดเบอร์กส พลังงานที่แท้จริงคือ $\epsilon = 0.377726$ ผิดพลาดประมาณ 0.6% ซึ่งดีกว่าเก่าเล็กน้อย ในบทที่ 4 จึงได้ทำการคำนวณหาพลังงานศักย์ใหม่ แบ่งช่วงการอินติเกรทดังสมการ (4.1) เริ่มคำนวณจาก $l = 2$ และ $\rho_i = 6.7$ สำหรับ $l = 3$ ยังคงเหมือนเดิม และเรียกสถานะของอะตอมโซเดียมใหม่คือ จาก $3s$ เป็น $1s''$ ปรากฏว่าได้ค่าสัมประสิทธิ์ $\alpha$ ของแต่ละสถานะของวงโคจร $l = 2$ มีค่าใกล้เคียงกันมากนับว่าวิธีนี้ให้ค่าสัมประสิทธิ์แน่นอน คำนวณต่อสำหรับ $l = 1$ ต่อจากจุดหัวเลี้ยวต่ำสุดของ $l = 2$ ที่ $\rho_i = 3.15$ ปรากฏว่าให้ผลในทำนองเดียวกัน และเมื่อคำนวณต่อโดยใช้ $l = 0$ ทำเช่นเดียวกันอีกปรากฏว่าสัมประสิทธิ์ที่ได้เป็นค่าจินตภาพนับว่าไม่ถูกต้อง จึงได้คำนวณหาจุดหัวเลี้ยวสูงสุดและต่ำสุดของสถานะวงโคจร $l = 0$ ได้ค่าอยู่ต่ำกว่าจุดหัวเลี้ยวต่ำสุดของ $l = 1$ ดังนั้นเราจะให้ฟังก์ชัน Q ของวงโคจร $l = 0$ ต่อจากฟังก์ชัน Q ของวงโคจร $l = 1$ ไม่ได้ จึงให้ต่อจากฟังก์ชัน $Q(\rho) = 11\rho$ ซึ่งเป็นเงื่อนไขขอบเขตเมื่อ $\rho \longrightarrow 0$ ปรากฏว่าสามารถหาค่าสัมประสิทธิ์ได้ให้ผลสุดท้ายตามตารางที่ 4 จากรูปที่ 3 จะเห็นได้ว่าพลังงานศักย์ใหม่มีบุ๋มที่ช่วงระหว่าง $1.2 < \rho < 2.5$ ต่างจากพลังงานศักย์ของโปรคอฟยิวซึ่งเส้นโค้งลดลงสม่ำเสมอ

แต่มีส่วนคล้ายกับพลังงานศักย์ของมัวร์และโวสโก [2] ( Moore and Vosko ) ทั้งสองได้ทำการคำนวณพลังงานศักย์ของอะตอมโซเดียมขึ้นกับแต่ละวงโคจร 1 ( 1 dependent ) โดยวิธีการประมาณแบบสารท์รี–ฟ็อค และคิดรวมถึงเทอมปริวัฏด้วยตามรูปที่ 4 การคล้ายกันนี้อาจเป็นไปได้ว่าพลังงานศักย์ (ตารางที่ 4) ได้รวมถึงการเกิดอันตรกริยาปริวัฏ ( exchange interaction ) ด้วย การเกิดบุ่มของพลังงานศักย์เชื่อว่าเกิดจากการกระทำอันตรกริยาของอิเลกตรอนวงโคจรในด้วยกันเอง ซึ่งเป็นผลดีทำให้การคำนวณพลังงานถูกต้องมากคือได้ $\epsilon$ = 0.37765 ตามรูปที่ 7 ผิดพลาดไปคิดเป็นเปอร์เซ็นประมาณ 0.02 % เท่านั้น

วิธีการอินติเกรทเลขจำนวน จุดเริ่มต้นของการอินติเกรทมีความสำคัญมาก เราต้องเลือกฟังก์ชันของเวฟฟังก์ชันให้ถูกต้อง ในบทที่ 5 ได้พูดถึงอะซิมปโตติกเวฟฟังก์ชันสำหรับ $\rho \longrightarrow 0$ และ $\rho \longrightarrow \infty$ และช่วงห่างของระยะผลต่าง $\delta\rho$ มีความสำคัญเช่นกัน คือขณะที่ $\rho$ มีค่าน้อย $\delta\rho$ ควรจะมีค่าน้อยด้วยเพื่อให้การประมาณผลต่างอันตะมีการผิดพลาดน้อย แต่เมื่อ $\rho$ มีค่าใหญ่ขึ้นเราสามารถให้ $\delta\rho$ ใหญ่ขึ้นด้วยการอินติเกรทจะเร็วขึ้น ความผิดพลาดถึงมีก็เพียงเล็กน้อยเท่านั้น สำหรับกรณีที่ใช้การอินติเกรทเวฟฟังก์ชันออกข้างนอกอย่างเดียว ผลต่างอันตะตามสมการ (5.2.2) จำเป็นต้องใช้ถึงอันดับหกหรืออย่างน้อยอันดับสี่ แต่ในบทที่ 5 ใช้เพียงอันดับสองได้นั้นเพราะว่าการอินติเกรทเวฟฟังก์ชันใช้ทั้งการอินติเกรทออกข้างนอกและเข้าข้างในพร้อมกัน และต้องปรับค่า $\epsilon_{nl}$ จนกระทั่งเวฟฟังก์ชันต่อกันอย่างสนิท ดังนั้นความผิดพลาดที่อาจเกิดขึ้นได้เนื่องจากการอินติเกรทออกข้างนอกขณะที่ $\rho$ มีค่ามากขึ้น ถูกลดให้น้อยลงด้วยการบังคับของการอินติเกรทเข้าข้างใน นับว่าผลต่างอันตะอันดับสองในกรณีนี้เป็นการประมาณที่ดีได้

6.2 ) ข้อเสนอแนะ

การคำนวณหาพลังงานศักย์ในบทที่ 3 และบทที่ 4 เราสมมติให้ $\rho$ อยู่ในรูป

---

[2] R.A. Moore, and S.H. Vosko, "The Dependence of the Hyperfine Interaction on the Cellular Potential in Na and K.II", **Canadian Journal of Physics**, 47,(1969) p.1331.

กำลังสอง พลังงานศักย์ $V(r)$ จะแปรผกผันกับระยะทางกำลังสอง โดยทั่วไปอะตอมแอลคาไลมักจะเกิดโพลาไรเซชัน ( polarization ) เสมอ โพลาไรเซชันเกิดจากแกนกลางของไอออนมีประจุของนิวเคลียสและเมฆประจุอิเลกตรอน เมื่ออิเลกตรอนตัวนอกสุดดูดประจุของนิวเคลียสเข้าหาขณะเดียวกันจะผลักเมฆประจุอิเลกตรอนออกห่างจากตำแหน่งเดิม ดังนั้นแกนกลางของไอออนเกิดเป็นไดโพล ( dipole ) สนามของไดโพลถูกส่งไปรบกวนอิเลกตรอนตัวนอกสุดเกิดโพลาไรเซชันขึ้นพลังงานศักย์แปรผกผันกับระยะทางกำลังสี่ ถ้าหากการคำนวณพลังงานศักย์เราบวกเทอมโพลาไรเซชันเข้าไปด้วย คิดว่าจะได้พลังงานดีกว่าที่เราหาได้ในบทที่ 4 แต่เนื่องจากการคำนวณมีความยุ่งยากและต้องใช้เวลามาก สำหรับวิทยานิพนธ์นี้มีเวลาทำจำกัด ดังนั้นจึงคิดว่าจะเป็นแนวทางสำหรับผู้ที่สนใจทำการวิจัยต่อไป ซึ่งขณะนี้คุณวิชิต ศรีตระกูล นิสิตปริญญาโทกำลังทำวิทยานิพนธ์ตามที่ได้เสนอแนะไว้ต่อจากวิทยานิพนธ์นี้อยู่

อนึ่ง ประโยชน์ที่ได้จากการทำวิจัยศักย์ยังผลของอะตอมโซเดียม สามารถนำพลังงานศักย์ของอะตอมโซเดียมนี้ไปคำนวณหาแถบพลังงาน ( energy band ) ทางฟิสิกส์สถานะของแข็ง ( solid state physics ) ส่วนการคำนวณต่างๆยังสามารถใช้กับอะตอมแอลคาไลตัวอื่นๆได้เช่น ลิเธียม [1] ( Li ) และโปตัสเซียม [2] ( K ) ซึ่งมีผู้ได้ทำการคำนวณหาพลังงานศักย์ตามวิธีของโปรคอฟยิวปรากฏว่าให้ค่าไม่ค่อยดี

---

[1] F. Seitz, "The Theoretical Constitution of Metallic Lithium", Phys. Rev., 47, (1935) p. 400.

[2] K.E. Gorin, Physik, Z. Sowj., 9 (1936) p. 328.