

ผลเฉลยเฉพาะเจาะจงของสมการการเคลื่อนที่อนุภาคเดี่ยวภายใต้ศักย์ แบบเลนนาร์ด-โจนส์

The Particular Solution of the Equation of Motion of a Single Particle under Lennard-Jones Potential

สืบสกุล คณดารา, สรายุทธ์ พานเทียน*

คณะวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยี มหาวิทยาลัยราชภัฏเทพสตรี อำเภอเมืองลพบุรี จังหวัดลพบุรี 15000

Seubsakun Khondara, Sarayut Pantian*

Faculty of Science and Technology, Thepsatri Rajabhat University, Meung, Lopburi province 15000

บทคัดย่อ

งานวิจัยนี้มุ่งเน้นการหาผลเฉลยเฉพาะเจาะจงของสมการการเคลื่อนที่ของอนุภาคเดี่ยวที่อยู่ภายใต้ศักย์แบบเลนนาร์ด-โจนส์ด้วยการเปลี่ยนรูปสมการจากการกำหนดให้ $x = (r/r_e)^{-6}$ พบว่า ศักย์ของเลนนาร์ด-โจนส์ยังคงมีรูปร่างเป็นแบบพาราโบลาที่มีการเลื่อนจุดเปลี่ยนโค้งไปอยู่ที่ $r \approx 1.122r_e$ และปรากฏเงื่อนไขสองจุด คือที่ $r = 0$ และ $r = r_e$ ที่จะทำให้ศักย์เป็นศูนย์ เมื่อนำศักย์ดังกล่าวไปหาสมการการเคลื่อนที่โดยใช้สมการออยเลอร์-ลากรางจ์แล้ว พบว่า รูปสมการมีความคล้ายกับสมการการเคลื่อนที่ของการสั่นแบบฮาร์มอนิกส์ แต่เมื่อกำหนดเงื่อนไขขอบเขตเพื่อหาค่าคงที่เลือกได้พบว่าค่าคงที่เลือกได้มีความซับซ้อนพอสมควร อย่างไรก็ตาม สมการการเคลื่อนที่และผลเฉลยแบบเฉพาะเจาะจงที่ได้อยู่ในรูปที่มีความเหมาะสมกับการนำไปต่อยอดในการคำนวณกิริยาแบบดั้งเดิมเพื่อให้ในการหาตัวแปรและฟังก์ชันคลื่นด้วยวิธีการอินทิเกรตตามวิถีได้อีกด้วย

คำสำคัญ : ศักย์แบบเลนนาร์ด-โจนส์, กิริยาแบบดั้งเดิม, สมการออยเลอร์-ลากรางจ์, ผลเฉลยแบบเฉพาะเจาะจง, การสั่นแบบฮาร์มอนิกส์

* Corresponding author : sarayut.p@lawasri.tru.ac.th

Received : 12/10/2022

Revised : 29/11/2022

Accepted : 05/12/2022

Abstract

This research focuses on solving the particular solution of the equation of motion of a single particle under Leonard-Jones potential by defining the new parameter as $x = (r/r_e)^{-6}$. We found that the Leonard Jones potential becomes parabolic in shape with the turning point shifted to $r \approx 1.122r_e$. There are appear two conditions at $r = 0$ and $r = r_e$. We applied this potential to the Euler-Lagrange equation, it was found that the equation was similar to the equation of motion of harmonic oscillation. However, when defining the boundary conditions for arbitrary constants, the arbitrary constants are complicated form, meanwhile, the equation of motion and their particular solutions we got are in a form that is suitable for further application in calculated the classical action of the system to determine the propagator and the wavefunction by path integral method.

Keywords : Lennard-Jones potential, classical action, Euler-Lagrange equation, particular solution, harmonic oscillation.

ที่มาและความสำคัญ

การศึกษาพฤติกรรมการถ่ายโอนอิเล็กตรอนระหว่างอะตอมสองอะตอมที่มีอันตรกิริยาต่อกันมักกำหนดให้อิเล็กตรอนถูกกักภายใต้ศักย์ดังสมการ [1,2]

$$V(r) = u \left[\left(\frac{r_e}{r} \right)^{2k} - \left(\frac{r_e}{r} \right)^k \right] \quad (1)$$

เมื่อ $u = \hbar^2 \sigma / 2mr_e^2$ และ $\hbar$ คือ ค่าคงตัวของพลังค์ (Plank's constant) หารด้วย 2π และ m คือ มวลลดทอนของทั้งสองอะตอม และ r_e คือ ระยะสมดุล (equilibrium distance) หรือ จุดเปลี่ยนโค้งที่เกิดจากอันตรกิริยาระหว่างอะตอม และ σ คือ พารามิเตอร์แสดงความแข็งแรงของศักย์ ในการพิจารณาครั้งนี้กำหนดให้พารามิเตอร์ดังกล่าวต้องมีค่ามากกว่าศูนย์, $\sigma > 0$ ทั้งนี้ พจน์ที่หนึ่งทางขวาของสมการที่ (1) แสดงถึงการผลักกันระหว่างอะตอมในขณะที่พจน์ที่สองทางขวาของสมการแสดงถึงการดูดกันระหว่างอะตอม เมื่อเรากำหนดให้ค่า k ในสมการที่ (1) มีค่าเท่ากับ 6 เรา จะเรียกสมการนี้ว่าศักย์แบบเลนนาร์ด-โจนส์ (Lennard-Jones potential) ซึ่งเทียบเคียงได้กับศักย์แบบวานเดอร์วาลส์ (Van der Waals potential) ในการแก้สมการเบื้องต้นมักใช้วิธีการแยกตัวแปร (separation of variable) ในระบบพิกัดแบบทรงกลม จากนั้นจะใช้วิธีในการแก้สมการที่แตกต่างกันออกไป อาทิเช่น อาศัยระเบียบวิธีเชิงตัวเลขแบบผลต่างจำกัด [2] หรือวิธีการคำนวณเชิงตัวเลขอื่น ๆ

งานวิจัยนี้เราทำการกำหนดตัวแปรขึ้นมาเพื่อปรับรูปสมการที่ (1) ให้สอดคล้องกับการสั่นแบบฮาร์มอนิกส์อย่างง่ายและมุ่งเน้นหาสมการการเคลื่อนที่แบบเฉพาะเจาะจงโดยใช้สมการออยเลอร์-ลากรางจ์ (Euler-Lagrange Equation) เป็นหลัก โดยมีการกำหนดเงื่อนไขเริ่มต้นเพื่อหาค่าคงที่เลือกได้ (arbitrary constant) ที่ได้จากการแก้สมการ ทั้งนี้ งานวิจัยนี้เป็นประโยชน์ต่อผู้ฝึกฝนคำนวณที่จะนำไปต่อยอดศึกษาพฤติกรรมการถ่ายโอนอิเล็กตรอนด้วยวิธีการอินทิเกรตตามวิถีของไฟน์แมน (Feynman's path integral) เพื่อหาค่าตัวแพร่ (propagator) และฟังก์ชันคลื่น

(wavefunction) แม้กระทั่งต่อยอดด้วยการใช้ฟังก์ชันพาร์ติชัน (partition function) เพื่อศึกษาความสัมพันธ์ระหว่างระดับชั้นพลังงานของอนุภาคกับอุณหภูมิของระบบภายใต้ศักร์แบบเลนาร์ด-โจนส์ได้อีกด้วย

วิธีการดำเนินการวิจัย

การดำเนินการวิจัยแบ่งออกเป็นส่วนตัวต่าง ๆ ดังต่อไปนี้

1. กำหนดศักร์ที่จะใช้กับกับอิเล็กตรอน
2. ออกแบบการคำนวณ โดยการคำนวณมีขั้นตอนดังต่อไปนี้

(2.1) สมมติตัวแปรเพื่อแปลงรูปสมการ (1) โดยกำหนดให้

$$x = \left(\frac{r}{r_e} \right)^{-6} \quad (2)$$

(2.2) กำหนดลากรางเจียน (Lagrangian) ของระบบในรูปตัวแปร x ดังสมการ

$$L(\dot{x}, x; t) = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - V(x) \quad (3)$$

(2.3) นำศักร์ที่แปลงรูปสมการมาใส่ในสมการที่ (3) จากนั้นนำลากรางเจียนดังกล่าวมาใส่ในสมการออยเลอร์-ลากรางจ์ ในหนึ่งมิติดังสมการที่ (4)

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{dL}{d\dot{x}} \right) = \frac{dL}{dx} \quad (4)$$

(2.4) แก้สมการหาผลเฉลยทั่วไปของสมการการเคลื่อนที่ของอนุภาคภายใต้ศักร์แบบ เลนาร์ด-โจนส์ที่ได้รับ การแปลงรูปแล้ว ซึ่งสมการที่ได้จะอยู่ในรูปสมการเชิงอนุพันธ์อันดับที่สองที่ไม่เป็นเอกพันธ์ (nonhomogeneous) จึงต้องแบ่งการหาผลเฉลยออกเป็นสองส่วน คือ ผลเฉลยแบบเอกพันธ์ และแบบไม่เอกพันธ์ โดยสมมติให้คำตอบแบบไม่เอกพันธ์อยู่ในรูป $x_p = a$

(2.5) หลังจากได้ผลเฉลยทั่วไปแล้วทำการกำหนดเงื่อนไขเริ่มต้นเพื่อหาค่าคงที่เลือกได้

$$x(t_a) = x_a \quad \text{และ} \quad x(t_b) = x_b \quad (5)$$

จากนั้น จัดรูปสมการเพื่อให้ได้สมการการเคลื่อนที่ในรูปของ $x(t)$

3. วิเคราะห์และอภิปรายผลที่ได้จากการคำนวณ
4. สรุปผลการคำนวณ

ผลการวิจัยและการอภิปรายผล

ในการนำเสนอหัวข้อผลการวิจัยและอภิปรายผลการวิจัย ผู้วิจัยนำเสนอตามหัวข้อวิธีการดำเนินการวิจัย ดังต่อไปนี้

- กำหนดศักย์ที่จะใช้กับกับอิเล็กตรอน ตามสมการที่ (1) โดยกำหนดให้ค่า k เท่ากับ 6 เพื่อให้สอดคล้องกับศักย์แบบเลนาร์ด-โจนส์ จะได้

$$V(r) = u \left[\left(\frac{r_e}{r} \right)^{12} - \left(\frac{r_e}{r} \right)^6 \right] \quad (6)$$

- แสดงขั้นตอนการคำนวณ ดังต่อไปนี้

(2.1) เมื่อสมมติตัวแปรดังสมการที่ (2), $x = \left(\frac{r}{r_e} \right)^{-6}$, ทำให้สมการที่ (6) เขียนใหม่ได้ว่า

$$V(r) = u [x^2 - x] \quad (7)$$

หากสังเกตสมการที่ (7) ให้ดีจะพบว่าอยู่ในรูปสมการพาราโบลาซึ่งสอดคล้องกับกราฟของศักย์แบบเลนาร์ด-โจนส์ ด้วยเหตุนี้ จึงเป็นเหตุผลว่าเราไม่ได้เปลี่ยนรูปร่างของศักย์เลนาร์ด-โจนส์ เพียงแค่ปรับตำแหน่งเพียงเท่านั้น ดังนั้น เมื่อเราได้แทนค่าตัวแปรที่เราสมมติมาแล้วเพื่อให้สอดคล้องกับเงื่อนไขที่กล่าวว่าพารามิเตอร์แสดงความแข็งแรงของศักย์ต้องมีความมากกว่าศูนย์, $\sigma > 0$, ทำให้เราได้เงื่อนไขที่จะทำให้สมการที่ (7) ไม่สามารถพิจารณาศักย์ได้ ได้แก่

$$\begin{aligned} \text{ประการที่ 1 ;} \quad & x = 0 \quad \text{ส่งผลให้} \quad r = \text{อนันต์} \\ \text{ประการที่ 2 ;} \quad & x = 1 \quad \text{ส่งผลให้} \quad r = r_e \end{aligned} \quad (8)$$

จากเงื่อนไขดังสมการที่ (8) จะพบว่าเป็นเงื่อนไขที่ทำให้ค่าศักย์เท่ากับหรือเข้าใกล้ศูนย์ ซึ่งทำให้เราไม่สามารถพิจารณาผลของนิวเคลียสที่มีต่ออิเล็กตรอนได้ ทั้งนี้ เมื่อทำการหาจุดเปลี่ยนโค้งของศักย์สมการที่ (7) ด้วยการทำอนุพันธ์แล้วนำผลที่ได้เท่ากับศูนย์จะได้ความสัมพันธ์ดังนี้ $r \approx 1.122r_e$

- กำหนดลากรางเจียน (Lagrangian) ของระบบในรูปตัวแปร x ดังสมการที่ (4) จะได้

$$L(\dot{x}, x; t) = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - ux^2 + ux \quad (9)$$

- จากนั้นนำลากรางเจียนดังสมการที่ (9) ใส่ในสมการออยเลอร์-ลากรางจ์ ในหนึ่งมิติดังสมการที่ (4) จะได้สมการการเคลื่อนที่ ดังนี้

$$m\ddot{x} + 2ux - u = 0 \quad (10)$$

- แก้สมการหาผลเฉลยทั่วไปของสมการการเคลื่อนที่ของอนุภาคภายใต้ศักย์แบบเลนาร์ด-โจนส์ ดังสมการที่ (10) โดยแปลงรูปสมการที่ (10) ให้อยู่ในรูปที่สามารถแก้สมการได้ง่ายขึ้นกล่าวคือทำให้สัมประสิทธิ์หน้าตัวแปรที่อันดับสูงสุดกลายเป็นหนึ่ง จะได้

$$\ddot{x} + 2xv = v \quad (11)$$

เมื่อกำหนดให้ $v = u/m$ จะสังเกตได้ว่าสมการที่ (11) อยู่ในรูปสมการแบบไม่เอกพันธ์ ดังนั้นเราจึงเริ่มแก้สมการดังกล่าวในรูปแบบเอกพันธ์ก่อน, $\ddot{x} + 2xv = 0$, โดยสมมติคำตอบให้ $x_c = e^{\beta t}$ จะได้ผลเฉลยต่อไปนี้

$$x_c(t) = C_1 e^{i\sqrt{2}\sqrt{v}t} + C_2 e^{-i\sqrt{2}\sqrt{v}t} \quad (12)$$

จากนั้นใช้สูตรของออยเลอร์ (Euler's formula) ในการแปลงรูปผลเฉลยที่ได้ให้อยู่ในรูปฟังก์ชันตรีโกณมิติได้ดังสมการ

$$x_c(t) = A \cos(\sqrt{2}\sqrt{v}t) + B \sin(\sqrt{2}\sqrt{v}t) \quad (13)$$

เมื่อ $A = C_1 + C_2$ และ $B = i(-C_1 + C_2)$ จากนั้นหาผลเฉลยแบบไม่เอกพันธ์โดยการสมมติให้ $x_p = a$ และแทนค่าลงในสมการที่ (11) จะได้ว่า $a = 1/2$ เพราะฉะนั้นผลเฉลยรวมสามารถเขียนได้ว่า $x = x_c + x_p$ จะได้

$$x_c(t) = A \cos(\sqrt{2}\sqrt{v}t) + B \sin(\sqrt{2}\sqrt{v}t) + \frac{1}{2} \quad (14)$$

(2.5) หาค่าคงที่เลือกได้ A และ B โดยการใช้อนุพันธ์เริ่มต้นที่กำหนดในสมการที่ (5) จะได้

$$x_a = A \cos(\sqrt{2}\sqrt{v}t_a) + B \sin(\sqrt{2}\sqrt{v}t_a) + \frac{1}{2} \quad (15a)$$

$$x_b = A \cos(\sqrt{2}\sqrt{v}t_b) + B \sin(\sqrt{2}\sqrt{v}t_b) + \frac{1}{2} \quad (15b)$$

เปลี่ยนรูปสมการ (15a) จะได้ว่า

$$A = \frac{x_a - B \sin(\sqrt{2}\sqrt{v}t_a) - \frac{1}{2}}{\cos(\sqrt{2}\sqrt{v}t_b)} \quad (16)$$

แทนค่าสมการที่ (16) ลงในสมการที่ (15b) พร้อมจัดรูปสมการและใช้สูตรตรีโกณมิติ $\sin(M - N)$ เพื่อหาค่า B จะได้

$$B = \frac{(x_b - \frac{1}{2}) \cos(\sqrt{2}\sqrt{v}t_a) - (x_a - \frac{1}{2}) \cos(\sqrt{2}\sqrt{v}t_b)}{\sin \sqrt{2}\sqrt{v}(t_b - t_a)} \quad (17)$$

จากนั้น นำสมการที่ (17) แทนค่าลงในสมการที่ (16) เพื่อหาค่า A จะได้

$$A = \frac{x_a}{\cos(\sqrt{2}\sqrt{v}t_a)} - \frac{1}{\cos(\sqrt{2}\sqrt{v}t_a)} - \frac{x_b - \frac{1}{2} \cos(\sqrt{2}\sqrt{v}t_a)}{\sin \sqrt{2}\sqrt{v}(t_b - t_a)} + \frac{x_a - \frac{1}{2} \cos(\sqrt{2}\sqrt{v}t_b)}{\cos(\sqrt{2}\sqrt{v}t_a) \sin \sqrt{2}\sqrt{v}(t_b - t_a)} \quad (18)$$

เมื่อนำค่าคงที่เลือกได้ดังสมการที่ (18) และ (19) แทนลงในสมการที่ (14) จะได้สมการการเคลื่อนที่แบบดั้งเดิมที่เป็นผลเฉลยแบบเฉพาะเจาะจงในกรณีที่มีอนุภาคเดี่ยวเคลื่อนที่ภายใต้ศักย์แบบเลนาร์ด-โจนส์ ซึ่งเราพบว่าสมการการเคลื่อนที่ที่ได้มีรูปที่ใกล้เคียงกับสมการการเคลื่อนที่ที่ได้จากกรณีการสั่นแบบฮาร์

มอริกส์อย่างง่าย [3] ถึงแม้ว่าค่าคงที่เลือกได้จะมีความซับซ้อนแต่สามารถนำไปต่อยอดคำนวณหาค่ากิริยาแบบดั้งเดิม (classical action) สำหรับหาค่าตัวแปรและฟังก์ชันคลื่นด้วยวิธีการอินทิเกรตตามวิถีได้เป็นอย่างดีตามกระบวนการแสดงใน [4] ทั้งนี้ การเปลี่ยนรูปสมการศักย์ดังสมการ $x = \left(\frac{r}{r_e}\right)^{-6}$ ยังไม่กระทบต่อการพิจารณาเทอมพลังงานจลน์ของระบบเนื่องจากตัวแปรดังกล่าวแปรผันตรงกับคาร์มีเป็นเหตุให้เราสามารถคำนวณและแปรความลากรางจ์เจียนของระบบได้ตามปกติ

สรุปผลการวิจัย

การสมมติตัวแปรขึ้นมาเพื่อปรับรูปสมการศักย์แบบเลนาร์ต-โจนส์ดังสมการ $x = \left(\frac{r}{r_e}\right)^{-6}$ เพื่อให้มีความสอดคล้องกับสมการศักย์การสั่นแบบฮาร์มอนิกอย่างง่ายนั้น พบว่า ผลเฉลยออกมาคงรูปแบบสอดคล้องกับการสั่นแบบฮาร์มอนิกอย่างง่ายโดยรูปร่างของศักย์ยังคงเป็นแบบพาราโบลาที่มีการเลื่อนจุดเปลี่ยนโค้งมาอยู่ที่ $r \approx 1.122r_e$ และเงื่อนไขขอบเขตอยู่ที่ 0 และ r_e เมื่อเปลี่ยนรูปสมการศักย์แล้วสามารถคำนวณสมการการเคลื่อนที่ด้วยสมการออยเลอร์-ลากรางจ์ได้ง่ายขึ้น ทว่าเมื่อกำหนดเงื่อนไขขอบเขตแล้วค่าคงที่เลือกได้ออกมาความซับซ้อนพอสมควร ทั้งนี้ ยังพบอีกว่าการเปลี่ยนรูปสมการนี้ยังสามารถนำไปต่อยอดการคำนวณกิริยาแบบดั้งเดิมได้และสอดคล้องกับการคำนวณกิริยาแบบดั้งเดิมของการสั่นแบบฮาร์มอนิกอย่างง่ายอีกด้วย

กิตติกรรมประกาศ

ขอขอบคุณคณะวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยี มหาวิทยาลัยราชภัฏเทพสตรี ที่สนับสนุนสถานที่และเวลารวมถึงผลักดันให้งานวิจัยชิ้นนี้สำเร็จได้ด้วยดี

เอกสารอ้างอิง

- [1] J E. Jones, (1924). On the determination of molecular field- II. From the equation of state of a gas. Proc. R. Soc. Lond. A, 106(738), 463-477.
- [2] มฤเคนทร์ จอมเพชร, อาณาจักร พลจันทร์, ภ.พิงบุญ ปานศิลา, ณรงค์ฤทธิ์ มณีจิระปราการ และเสกสรร สุขเสนา. (2562). อนุภาคในสถานะที่ถูกกักขังภายใต้ศักย์แบบเลนาร์ต-โจนส์โดยอาศัยระเบียบวิธีเชิงตัวเลขแบบผลต่างจำกัด. J Sci Technol MSU, 38(4), 363-369.
- [3] นิคม ชูศิริ. (2541). อินทิกรัลตามเส้นทางของก๊าซอิเล็กตรอนในระบบสองมิติภายใต้อิทธิพลของแรงฮาร์มอนิกสแนมไฟฟ้า สนามแม่เหล็ก และศักย์แบบไรร์เบียบ. มหาวิทยาลัยทักษิณ.
- [4] เอกพันธ์ จันผง, อัฐชัย ถาวรสุวรรณ, วิทยา ทิพย์อักษร และ นิคม ชูศิริ. (2551). อินทิกรัลตามเส้นทางสำหรับกึ่งฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์. วารสารมหาวิทยาลัยทักษิณ. 11(2), 24-29.