บทที่ 4

ปรับปรุงวิธีการคำนวณของโปรกอฟยิว

เนื่องจากการคำนวณหาค่าสัมประสิทธิ์ α จากสมการ (3.3) ตามวิธีของโปรกอฟยิวมีความผิดพลาดอยู่มาก เช่น การอินทิเกรทสมการ (3.3) จาก $\rho_{ต่ำสุด}$ ถึง $\rho_{สูงสุด}$ ฟังก์ชัน Q ของ l = 2, 1, 0 มีการเลื่อมล้ำกันคือ $\rho_{ต่ำสุด}$ ถึง ρ_i ฟังก์ชัน Q ควรเป็น Q_{j+1} และจาก ρ_i ถึง $\rho_{สูงสุด}$ ฟังก์ชัน Q ควรเป็น Q_j แต่โปรกอฟยิวใช้ฟังก์ชัน Q เดียวกันตลอดช่วง $\rho_{ต่ำสุด}$ ถึง $\rho_{สูงสุด}$ ทำให้การคำนวณหาค่าสัมประสิทธิ์ α ผิดพลาดได้และสมการ (3.9) ไม่ถูกต้องนัก ดังนั้นเราจึงแก้ไขการคำนวณใหม่ดังนี้

จากสมการ (3.3) จะได้

$$n-l-\tfrac{1}{2} = \frac{\sqrt{2}}{\pi}\int_{\rho_{ต่ำสุด}}^{\rho_i}\sqrt{Q_{j+1}(\rho) - P_{nl}(\rho)}\ \frac{d\rho}{\rho} + \frac{\sqrt{2}}{\pi}\int_{\rho_i}^{\rho_{สูงสุด}}\sqrt{Q_j(\rho) - P_{nl}(\rho)}\ \frac{d\rho}{\rho} \quad (4.1)$$

ทำการคำนวณหาพลังงานศักย์ของอะตอมโซเดียมใหม่อีกครั้งและใช้ค่า ϵ_{nl} ของสเลเตอร์ในตารางที่ 2 ส่วน $\rho_{ต่ำสุด}$ ได้จาก $Q_{j+1}(\rho)$ และ $\rho_{สูงสุด}$ ได้จาก $Q_j(\rho)$ ในสมการ (4.1) และเนื่องจากการสมมติให้อะตอมโซเดียมมีรูปร่างเหมือนกับไฮโดรเจน อิเลกตรอนตัวนอกสุดก็อสถานะ 3s เราจะเรียกอิเลกตรอนนอกสุดนี้เสียใหม่เป็น 1s" ตามอะตอมไฮโดรเจน ดังนั้นสถานะต่างๆของอะตอมโซเดียมเราเรียกเสียใหม่เป็น

3s ⟶	1s"	และ 3p ⟶	2p'
4s	2s"	4p	3p'
5s	3s"	5p	4p'
6s	4s"	6p	5p'
.	.	.	.
.	.	.	.
.	.	.	.

ส่วนสถานะ d และ f..... ยังคงเหมือนเดิม จากสมการ (3.3) สำหรับ l = 3 เรา ยังคงได้ $Q_0(\rho) = \rho$ และ $\rho_i = 6.7$

สำหรับ l = 2 ใช้ช่วงอินติกราล $\rho_{\text{ต่ำสุด}}$ ถึง $\rho_i = 6.7$ สำหรับ $Q_1(\rho) = \alpha_1\rho^2 + \beta_1\rho + \gamma_1$ และ $\rho_i = 6.7$ ถึง $\rho_{\text{สูงสุด}}$ สำหรับ $Q_0(\rho) = \rho$

จากสมการ (4.1) จะได้

$$n-l-\tfrac{1}{2} = \frac{\sqrt{2}}{\pi}\int_{6.7}^{\rho_{\text{สูงสุด}}} \sqrt{Q_0(\rho) - P_{nl}(\rho)}\ \frac{d\rho}{\rho} + \int_{\rho_{\text{ต่ำสุด}}}^{6.7} \sqrt{Q_1(\rho) - P_{nl}(\rho)}\ \frac{d\rho}{\rho} \qquad (4.2)$$

จากสมการ (3.7) ในที่นี้

$$\rho_{\text{สูงสุด}} = \frac{-B_0 - \sqrt{B_0^2 - 4A_0C_0}}{2A_0} \ ; \ A_0 = -\tfrac{1}{2}\epsilon_{nl}\ ,\ B_0 = 1\ ,\ C_0 = -\tfrac{1}{2}(l+\tfrac{1}{2})^2$$

$$\rho_{\text{ต่ำสุด}} = \frac{-B_1 + \sqrt{B_1^2 - 4A_1C_1}}{2A_1} \ ; \ A_1 = \alpha_1 - \tfrac{1}{2}\epsilon_{nl}\ ,\ B_1 = \beta_1\ ,\ C_1 = \gamma_1 - \tfrac{1}{2}(l+\tfrac{1}{2})^2 \qquad (4.3)$$

จากสมการ (3.7) และ (3.8) สมการ (4.2) เขียนได้เป็น

$$n-l-\tfrac{1}{2} = \frac{\sqrt{2}}{\pi}\left[\sqrt{X_0} - \frac{B_0}{2\sqrt{-A_0}}\sin^{-1}\left(\frac{2A_0\rho + B_0}{\sqrt{B_0^2 - 4A_0C_0}}\right) - \sqrt{-C_0}\sin^{-1}\left(\frac{B_0\rho + 2C_0}{\rho\sqrt{B_0^2 - 4A_0C_0}}\right)\right]_{6.7}^{\rho_{\text{สูงสุด}}}$$

$$+\frac{\sqrt{2}}{\pi}\left[\sqrt{X_1} - \frac{B_1}{2\sqrt{-A_1}}\sin^{-1}\left(\frac{2A_1\rho + B_1}{\sqrt{B_1^2 - 4A_1C_1}}\right) - \sqrt{-C_1}\sin^{-1}\left(\frac{B_1\rho + 2C_1}{\rho\sqrt{B_1^2 - 4A_1C_1}}\right)\right]_{\rho_{\text{ต่ำสุด}}}^{6.7} \qquad (4.4)$$

เมื่อ $X_0 = Q_0(\rho) - P_{nl}(\rho)$ $\qquad X_1 = Q_1(\rho) - P_{nl}(\rho)$

และ $\sqrt{X_0}\Big|_{\rho}^{\rho} + \sqrt{X_1}\Big|_{\rho} = 0$

แทนค่าลิมิตในสมการ (4.4) จะได้

$$n-l-\tfrac{1}{2} = \frac{\sqrt{2}}{\pi}\left[-\frac{B_0}{2\sqrt{-A_0}}\sin^{-1}(-1) - \sqrt{-C_0}\sin^{-1}(1) + \frac{B_0}{2\sqrt{-A_0}}\sin^{-1}\left(\frac{13.4A_0 + B_0}{\sqrt{B_0^2 - 4A_0C_0}}\right)\right.$$

$$\left. + \sqrt{-C_0}\sin^{-1}\left(\frac{6.7B_0 + 2C_0}{6.7\sqrt{B_0^2 - 4A_0C_0}}\right) - \frac{B_1}{2\sqrt{-A_1}}\sin^{-1}\left(\frac{13.4A_1 + B_1}{\sqrt{B_1^2 - 4A_1C_1}}\right)\right.$$

$$- \left. -C_1 \sin^{-1}\left(\frac{6.7B_1+2C_1}{6.7\sqrt{B_1^2-4A_1C_1}}\right) + \frac{B_1}{2\sqrt{-A_1}} \sin^{-1}(1) + -C_1 \sin^{-1}(-1) \right]$$

$$= \frac{\sqrt{2}}{\pi}\left[\frac{B_o}{2\sqrt{-A_o}}\left\{\sin^{-1}\left(\frac{13.4A_o+B_o}{\sqrt{B_o^2-4A_oC_o}}\right)+\frac{\pi}{2}\right\}+\sqrt{-C_o}\left\{\sin^{-1}\left(\frac{6.7B_o+2C_o}{6.7\sqrt{B_o^2-4A_oC_o}}\right)-\frac{\pi}{2}\right\}\right.$$

$$\left. + \frac{B_1}{2\sqrt{-A_1}}\left\{\frac{\pi}{2} - \sin^{-1}\left(\frac{13.4A_1+B_1}{\sqrt{B_1^2-4A_1C_1}}\right)\right\} - \sqrt{-C_1}\left\{\frac{\pi}{2} + \sin^{-1}\left(\frac{6.7B_1+2C_1}{6.7\sqrt{B_1^2-4A_1C_1}}\right)\right\}\right]$$

แทนค่าสมการ (4.3) และ (3.10)

$$n-2.5 = \frac{\sqrt{2}}{\pi}\left[\frac{1}{\sqrt{2\epsilon_{n1}}}\left\{\sin^{-1}\left(\frac{1-6.7\epsilon_{n1}}{\sqrt{1-6.25\epsilon_{n1}}}\right)+\frac{\pi}{2}\right\}+\frac{2.5}{\sqrt{2}}\left\{\sin^{-1}\left(\frac{0.45}{6.7\sqrt{1-6.25\epsilon_{n1}}}\right)-\frac{\pi}{2}\right\}\right.$$

$$+ \frac{1-13.4\alpha_1}{2\sqrt{\tfrac{1}{2}\epsilon_{n1}-\alpha_1}}\left\{\frac{\pi}{2} - \sin^{-1}\left(\frac{1-6.7\epsilon_{n1}}{\sqrt{(1-13.4\alpha_1)^2-4(\alpha_1-\tfrac{1}{2}\epsilon_{n1})(6.7^2\alpha_1-3.125)}}\right)\right\}$$

$$\left. -\sqrt{3.125-6.7^2\alpha_1}\left\{\frac{\pi}{2} + \sin^{-1}\left(\frac{0.45}{6.7\sqrt{(1-13.4\alpha_1)^2-4(\alpha_1-\tfrac{1}{2}\epsilon_{n1})(6.7^2\alpha_1-3.125)}}\right)\right\}\right] \qquad (4.5)$$

กิดเทอม 6 d, $\epsilon = 0.027907$ สมการ (4.5) จะเป็น

$$3.50 = \frac{\sqrt{2}}{\pi}\left[\frac{1}{\sqrt{0.055814}}\left\{\sin^{-1}\left(\frac{0.8130231}{\sqrt{0.8255813}}\right)+\frac{\pi}{2}\right\}+\frac{2.5}{\sqrt{2}}\left\{\sin^{-1}\left(\frac{0.0671642}{\sqrt{0.8255813}}\right)-\frac{\pi}{2}\right\}\right]$$

$$+\frac{\sqrt{2}}{\pi}\left[\frac{1-13.4\alpha_1}{\sqrt{0.055814-4\alpha_1}}\left\{\frac{\pi}{2} - \sin^{-1}\frac{0.8130231}{\sqrt{0.8255813 - 11.79451\alpha_1}}\right\}\right.$$

$$\left. - \sqrt{3.125-44.89\alpha_1}\left\{\frac{\pi}{2} + \sin^{-1}\left(\frac{0.0671642}{\sqrt{0.8255813 - 11.79451\alpha_1}}\right)\right\}\right]$$

$$3.50 = 3.9130834 + \frac{\sqrt{2}}{\pi}\cdot 6.7\left[\frac{0.0746269-\alpha_1}{\sqrt{0.0139535-\alpha_1}}\left\{\frac{\pi}{2} - \sin^{-1}\left(\frac{0.2367353}{\sqrt{0.0699971-\alpha_1}}\right)\right\}\right.$$
$$\left. - \sqrt{0.0696146-\alpha_1}\left\{\frac{\pi}{2} + \sin^{-1}\left(\frac{0.0195568}{\sqrt{0.0699971-\alpha_1}}\right)\right\}\right]$$

$$0.1369612 = \frac{0.0746269-\alpha_1}{\sqrt{0.0139535-\alpha_1}}\left\{\sin^{-1}\left(\frac{0.2367353}{\sqrt{0.0699971-\alpha_1}}\right) - \frac{\pi}{2}\right\}$$
$$+ \sqrt{0.0696146-\alpha_1}\left\{\sin^{-1}\left(\frac{0.0195568}{\sqrt{0.0699971-\alpha_1}}\right) + \frac{\pi}{2}\right\}$$

ได้ $\alpha_1 = 0.0085$

คิดเทอม 5d $\epsilon = 0.040214$ จากสมการ (4.5) จะได้

$$2.50 = \frac{2}{\pi}\left[\frac{1}{\sqrt{0.080428}}\left\{\sin^{-1}\left(\frac{0.7305662}{\sqrt{0.748662}}\right) + \frac{\pi}{2}\right\} + \frac{2.5}{\sqrt{2}}\left\{\sin^{-1}\left(\frac{0.0671642}{\sqrt{0.748662}}\right) - \frac{\pi}{2}\right\}\right.$$
$$+ \frac{1-13.4\alpha_1}{\sqrt{0.080428}}\left\{\frac{\pi}{2} + \sin^{-1}\left(\frac{0.7305662}{\sqrt{0.748662-10.6895871\alpha_1}}\right)\right\}$$
$$\left. - \sqrt{3.125-44.89\alpha_1}\left\{\frac{\pi}{2} + \sin^{-1}\left(\frac{0.0671642}{\sqrt{0.748662-10.6895871\alpha_1}}\right)\right\}\right]$$

$$= 2.9009414 + \frac{\sqrt{2}}{\pi}\left[\frac{1-13.4\alpha_1}{\sqrt{0.080428-4\alpha_1}}\left\{\frac{\pi}{2} - \sin^{-1}\left(\frac{0.7305662}{\sqrt{0.748662-10.6895871\alpha_1}}\right)\right\}\right.$$
$$\left. - \sqrt{3.125-44.89\alpha_1}\left\{\frac{\pi}{2} + \sin^{-1}\frac{0.0671642}{\sqrt{0.748662-10.6895871\alpha_1}}\right\}\right\}\right]$$

$$0.1329355 = \frac{0.0746269-\alpha_1}{\sqrt{0.020107-\alpha_1}}\left\{\sin^{-1}\left(\frac{0.2234494}{\sqrt{0.0700366-\alpha_1}}\right) - \frac{\pi}{2}\right\}$$
$$+ \sqrt{0.0696146-\alpha_1}\left\{\sin^{-1}\left(\frac{0.0205427}{\sqrt{0.0700366-\alpha_1}}\right) + \frac{\pi}{2}\right\}$$

ได้ $\alpha_1 = 0.0085$

คิดเทอม 4d $\epsilon = 0.062887$ จากสมการ (4.5) จะได้

$$1.50 = \frac{\sqrt{2}}{\pi}\left[\frac{1}{\sqrt{0.125774}}\left\{\sin^{-1}\left(\frac{0.5786571}{\sqrt{0.6069563}}\right)+\frac{\pi}{2}\right\}+\frac{2.5}{\sqrt{2}}\left\{\sin^{-1}\left(\frac{0.0671642}{\sqrt{0.6069563}}\right)-\frac{\pi}{2}\right\}\right.$$
$$+\frac{1-13.4\alpha_1}{\sqrt{0.125774-4\alpha_1}}\left\{\frac{\pi}{2}-\sin^{-1}\left(\frac{0.5786571}{\sqrt{0.6069563-8.6540051\alpha_1}}\right)\right\}$$
$$\left.-\sqrt{3.125-44.89\alpha_1}\left\{\frac{\pi}{2}+\sin^{-1}\left(\frac{0.0671642}{\sqrt{0.6069563-8.6540051\alpha_1}}\right)\right\}\right]$$

$$= 1.8751564+\frac{\sqrt{2}}{\pi}\left[\frac{1-13.4\alpha_1}{\sqrt{0.125774-4\alpha_1}}\left\{\frac{\pi}{2}-\sin^{-1}\left(\frac{0.5786571}{\sqrt{0.6069563-8.6540051\alpha_1}}\right)\right\}\right.$$
$$\left.-\sqrt{3.125-44.89\alpha_1}\left\{\frac{\pi}{2}+\sin^{-1}\left(\frac{0.0671642}{\sqrt{0.6069563-8.6540051\alpha_1}}\right)\right\}\right]$$

$$0.1243863 = \frac{0.0746269-\alpha_1}{\sqrt{0.0314435-\alpha_1}}\left\{\sin^{-1}\left(\frac{0.1967038}{\sqrt{0.0701359-\alpha_1}}\right)-\frac{\pi}{2}\right\}$$
$$+\sqrt{0.0696146-\alpha_1}\left\{\sin^{-1}\left(\frac{0.0228312}{\sqrt{0.0701359-\alpha_1}}\right)+\frac{\pi}{2}\right\}$$

ได้ $\alpha_1 = 0.0087$

คิดเทอม 3d $\epsilon = 0.111877$ จากสมการ (4.5) จะได้

$$0.50 = \frac{\sqrt{2}}{\pi}\left[\frac{1}{\sqrt{0.223754}}\left\{\sin^{-1}\left(\frac{0.2504241}{\sqrt{0.3007688}}\right)+\frac{\pi}{2}\right\}+\frac{2.5}{\sqrt{2}}\left\{\sin^{-1}\left(\frac{0.0671642}{\sqrt{0.3007688}}\right)-\frac{\pi}{2}\right\}\right.$$
$$+\frac{1-13.4\alpha_1}{\sqrt{0.223754-4\alpha_1}}\left\{\frac{\pi}{2}-\sin^{-1}\left(\frac{0.2504241}{\sqrt{0.3007688-4.2556829\alpha_1}}\right)\right\}$$
$$\left.-\sqrt{3.125-44.89\alpha_1}\left\{\frac{\pi}{2}+\sin^{-1}\left(\frac{0.0671642}{\sqrt{0.3007688-4.2556829\alpha_1}}\right)\right\}\right]$$

$$= 0.7938318+\frac{\sqrt{2}}{\pi}\left[\frac{1-13.4\alpha_1}{\sqrt{0.223754-4\alpha_1}}\left\{\frac{\pi}{2}-\sin^{-1}\left(\frac{0.2504241}{\sqrt{0.3007688-4.2556829\alpha_1}}\right)\right\}\right.$$
$$\left.-\sqrt{3.125-44.89\alpha_1}\left\{\frac{\pi}{2}+\sin^{-1}\left(\frac{0.0671642}{\sqrt{0.3007688-4.2556829\alpha_1}}\right)\right\}\right]$$

$$0.0974224 = \frac{0.0746269-\alpha_1}{\sqrt{0.0559385-\alpha_1}}\left\{\sin^{-1}\left(\frac{0.1213924}{\sqrt{0.0706746-\alpha_1}}\right)-\frac{\pi}{2}\right\}$$
$$+\sqrt{0.0696146-\alpha_1}\left\{\sin^{-1}\left(\frac{0.0325577}{\sqrt{0.0706746-\alpha_1}}\right)+\frac{\pi}{2}\right\}$$

ได้ $\alpha_1 = 0.01$

ด้วยการเลือก $\alpha_1 = 0.0085$ ดังนั้นจากสมการ (3.10) ได้

$$\beta_1 = 0.8861 \quad , \quad \gamma_1 = 0.3816 \qquad (4.6)$$

หาจุดต่ำสุดของ $l = 2$ ได้จาก

$$(\tfrac{1}{2}\epsilon_{nl} - 0.0085)\rho^2 - 0.8861\rho + 3.125 - 0.3816 = 0$$

$$\rho_{\text{ต่ำสุด}} = \frac{0.8861 - \sqrt{(0.8861)^2 - 4(\tfrac{1}{2}\epsilon_{nl} - 0.0085)(2.7434)}}{2(\tfrac{1}{2}\epsilon_{nl} - 0.0085)}$$

สถานะ	พลังงาน ϵ	ระยะต่ำสุด
3d	0.111877	3.917758
4d	0.062887	3.394367
5d	0.040214	3.232948
6d	0.027907	3.157394

เราเลือก $\rho_{\text{ต่ำสุด}} = 3.15$ สำหรับ $l = 2$

จะได้ $Q_1(\rho) = 0.0085\rho^2 + 0.8861\rho + 0.3816$ ในช่วง $3.15 < \rho < 6.7$

คำนวณต่อไปสำหรับ $l = 1$ และใช้ $\rho = 3.15$ เป็นจุดต่อเนื่องด้วย

จากสมการ (4.1) เราแบ่งช่วงอินติกราลออกเป็น

$$n-l-\tfrac{1}{2} = \frac{\sqrt{2}}{\pi}\left[\int_{6.7}^{\rho_{\text{สูงสุด}}} \sqrt{Q_0(\rho) - P_{nl}(\rho)}\,\frac{d\rho}{\rho} + \int_{3.15}^{6.7} \sqrt{Q_1(\rho) - P_{nl}(\rho)}\,\frac{d\rho}{\rho} + \int_{\rho_{\text{ต่ำสุด}}}^{3.15} \sqrt{Q_2(\rho) - P_{nl}(\rho)}\,\frac{d\rho}{\rho}\right] \qquad (4.7)$$

ที่จุดต่อเนื่องระหว่าง Q_1 และ Q_2 เมื่อ $Q_2(\rho) = \alpha_2\rho^2 + \beta_2\rho + \gamma_2$

จากสมการ (3.5) $\alpha_1\rho^2 + \beta_1\rho + \gamma_1 = \alpha_2\rho^2 + \beta_2\rho + \gamma_2$

และ $2\alpha_1\rho + \beta_1 = 2\alpha_2\rho + \beta_2$

ที่ $\rho_i = 3.15$ เราได้ $\beta_2 = 0.93965 - 6.3\alpha_2$

$$\gamma_2 = 0.2972588 + 9.9225\alpha_2 \qquad (4.8)$$

เรามาพิจารณาแต่ละช่วงอินติกราลของสมการ (4.7) ดังนี้

$$\frac{\sqrt{2}}{\pi}\int_{6.7}^{\rho_{\text{สูงสุด}}} \frac{\sqrt{Q_o(\rho) - P_{nl}(\rho)}}{\rho}\, d\rho = \frac{\sqrt{2}}{\pi}\int_{6.7}^{\rho_{\text{สูงสุด}}} \frac{\sqrt{-\frac{1}{2}\epsilon_{nl}\rho^2 + \rho - \frac{1}{2}(1+\frac{1}{2})^2}}{\rho}\, d\rho$$

จากสมการ (3.8) และ (3.7) เมื่อ $A_o = -\frac{1}{2}\epsilon_{nl}$, $B_o = 1$ และ $C_o = -1.125$

$$\frac{\sqrt{2}}{\pi}\int_{6.7}^{\rho_{\text{สูงสุด}}} \frac{\sqrt{A_o\rho^2 + B_o\rho + C_o}}{\rho}\, d\rho$$

$$= \frac{\sqrt{2}}{\pi}\left[\frac{B_o}{2\sqrt{-A_o}}\cdot\frac{\pi}{2} - \sqrt{-C_o}\cdot\frac{\pi}{2} + \frac{B_o}{2\sqrt{-A_o}}\sin^{-1}\left(\frac{13.4A_o + B_o}{\sqrt{B_o^2 - 4A_oC_o}}\right) + \sqrt{-C_o}\sin^{-1}\left(\frac{2C_o + 6.7B_o}{6.7\sqrt{B_o^2 - 4A_oC_o}}\right)\right]$$

$$= \frac{1}{2}\left[\frac{1}{\sqrt{\epsilon_{nl}}} - 1.5\right] + \frac{\sqrt{2}}{\pi}\left[\frac{1}{\sqrt{2\epsilon_{nl}}}\sin^{-1}\left(\frac{1-6.7\epsilon_{nl}}{\sqrt{1-2.25\epsilon_{nl}}}\right) + 1.125\sin^{-1}\left(\frac{4.45}{6.7\sqrt{1-2.25\epsilon_{nl}}}\right)\right]$$

ส่วนเทอม $\sqrt{\chi_n}$ ในสมการ (3.8) ทางขวามือเมื่อแทนค่าลิมิตของแต่ละช่วงแล้วจะตัดกันหมดเราจึงไม่คิด

สำหรับสถานะ 5p' ϵ = 0.03784

สมการ (4.9) จะได้ = 1.8203629 + 1.8316096 = 3.6519725

4p' ϵ = 0.058393

สมการ (4.9) = 1.3191387 + 1.3163545 = 2.6354932

3p' ϵ = 0.101873

สมการ (4.9) = 0.8165363 + 0.7786138 = 1.5951501

2p' ϵ = 0.223102

สมการ (4.9) = 0.3085668 + 0.061788 = 0.3703548

$$\frac{\sqrt{2}}{\pi}\int_{3.15}^{6.7} \frac{\sqrt{Q_1(\rho) - P_{nl}(\rho)}}{\rho}\, d\rho = \frac{\sqrt{2}}{\pi}\int_{3.15}^{6.7} \frac{\sqrt{(0.0085 - \frac{1}{2}\epsilon_{nl})\rho^2 + 0.8861\rho - 0.7434}}{\rho}\, d\rho$$

จากสมการ (3.8) เมื่อ $A_1 = (0.0085-\frac{1}{2}\epsilon_{nl})$ $B_1 = 0.8861$ $C_1 = -0.7434$

$$= \frac{\sqrt{2}}{\pi}\left[\frac{-0.8861}{\sqrt{2\epsilon_{nl}-0.034}}\left\{\sin^{-1}\left(\frac{1-6.7\epsilon_{nl}}{\sqrt{(0.8861)^2-4(0.0085-\frac{1}{2}\epsilon_{nl})(-0.7434)}}\right)\right.\right.$$

$$\left. - \sin^{-1}\left(\frac{6.3(0.0085-\frac{1}{2}\epsilon_{nl}) + 0.8861}{\sqrt{(0.8861)^2-4(0.0085-\frac{1}{2}\epsilon_{nl})(-0.7434)}}\right)\right\}$$

$$- \sqrt{0.7434}\left\{\sin^{-1}\left(\frac{2(-0.7434) + 6.7(0.8861)}{6.7\sqrt{(0.8861)^2-4(0.0085-\frac{1}{2}\epsilon_{nl})(-0.7434)}}\right)\right.$$

$$\left.\left. - \sin^{-1}\left(\frac{2(-0.7434) + 3.15(0.8861)}{3.15\sqrt{(0.8861)^2-4(0.0085-\frac{1}{2}\epsilon_{nl})(-0.7434)}}\right)\right\}\right]$$

$$= \frac{\sqrt{2}}{\pi}\left[\frac{-0.8861}{2\epsilon_{nl}-0.034}\left\{\sin^{-1}\left(\frac{1-6.7\epsilon_{nl}}{\sqrt{0.8104488-1.4868\epsilon_{nl}}}\right) - \sin^{-1}\left(\frac{0.93965-3.15\epsilon_{nl}}{\sqrt{0.81404488-1.4868\epsilon_{nl}}}\right)\right\}\right.$$

$$\left. - \sqrt{0.7434}\left\{\sin^{-1}\left(\frac{0.6641896}{\sqrt{0.8104488-1.4868\epsilon_{nl}}}\right) - \sin^{-1}\left(\frac{0.4141}{\sqrt{0.8104488-1.4868\epsilon_{nl}}}\right)\right\}\right] \qquad (4.10)$$

แทนค่า ϵ_{nl} ในสมการ (4.10) จะได้

สำหรับ 5p' สมการ (4.10) = 0.250442

4p' = 0.2603207

3p' = 0.2859919

2p' = 0.4617035

$$\frac{\sqrt{2}}{\pi}\int_{\rho\text{ต่ำสุด}}^{3.15}\frac{\sqrt{Q_2(\rho)-P_{nl}(\rho)}}{\rho}\,d\rho = \frac{\sqrt{2}}{\pi}\int_{\rho\text{ต่ำสุด}}^{3.15}\frac{\sqrt{(\alpha_2-\frac{1}{2}\epsilon_{nl})\rho^2+\beta_2\rho+\gamma_2-1.125}}{\rho}\,d\rho$$

จากสมการ (3.8) เมื่อ $A_2 = (\alpha_2-\frac{1}{2}\epsilon_{nl})$ $B_2 = \beta_2$ $C_2 = \gamma_2-1.125$

$$= \frac{\sqrt{2}}{\pi}\left[\frac{-\beta_2}{2\sqrt{\frac{1}{2}\epsilon_{nl}-\alpha_2}} - \left\{\sin^{-1}\left(\frac{6.3(\alpha_2-\frac{1}{2}\epsilon_{nl})+\beta_2}{\sqrt{\beta_2^2-4(\alpha_2-\frac{1}{2}\epsilon_{nl})(\gamma_2-1.125)}}\right) - \sin^{-1}(1)\right\}\right.$$

$$\left. - \sqrt{1.125-\gamma_2}\left\{\sin^{-1}\left(\frac{2(\alpha_2-1.125)+3.15\beta_2}{3.15\sqrt{\beta_2^2-4(\alpha_2-\frac{1}{2}\epsilon_{nl})(\gamma_2-1.125)}}\right) - \sin^{-1}(-1)\right\}\right]$$

หอสมุดกลาง จุฬาลงกรณมหาวิทยาลัย

แทนค่าสมการ (4.8)

$$= \frac{\sqrt{2}}{\pi}\left[\frac{-(0.93965-6.3\alpha_2)}{2\sqrt{\tfrac{1}{2}\epsilon_{n1}-\alpha_2}} \left\{ \sin^{-1}\left(\frac{0.93965-3.15\epsilon_{n1}}{\sqrt{0.8829421-(8.5286252-19.845\epsilon_{n1})\alpha_2-1.6554824\epsilon_{n1}}} \right) - \frac{\pi}{2} \right\} \right.$$

$$\left. - \sqrt{0.8277412-9.9225\alpha_2} \left\{ \sin^{-1}\left(\frac{0.4141}{\sqrt{0.8829421-(8.5286252-19.845\epsilon_{n1})\alpha_2-1.6554824\epsilon_{n1}}} \right) + \frac{\pi}{2} \right\} \right] \quad (4.11)$$

แทนค่าสมการ (4.9) (4.10) และ (4.11) ลงในสมการ (4.7)

สำหรับ $5p'$ จะได้

$$3.5 = 3.9024145 + \frac{\sqrt{2}}{\pi}\left[\frac{-(0.93965-6.3\alpha_2)}{2\sqrt{0.01892-\alpha_2}} \left\{ \sin^{-1}\left(\frac{0.820454}{\sqrt{0.8202986-7.7776904\alpha_2}} \right) - \frac{\pi}{2} \right\} \right.$$

$$\left. - \sqrt{0.8277412-9.9225\alpha_2} \left\{ \sin^{-1}\left(\frac{0.4141}{\sqrt{0.8202986-7.7776904\alpha_2}} \right) + \frac{\pi}{2} \right\} \right]$$

$$0.4024145 = 3.15\frac{\sqrt{2}}{\pi}\left[\frac{0.1491508-\alpha_2}{\sqrt{0.01892-\alpha_2}} \left\{ \sin^{-1}\left(\frac{0.2941907}{\sqrt{0.1054681-\alpha_2}} \right) - \frac{\pi}{2} \right\} \right.$$

$$\left. + \sqrt{0.0834206-\alpha_2} \left\{ \sin^{-1}\left(\frac{0.1484841}{\sqrt{0.1054681-\alpha_2}} \right) + \frac{\pi}{2} \right\} \right]$$

$$0.2837906 = \frac{0.1491508-\alpha_2}{\sqrt{0.01892-\alpha_2}} \left\{ \sin^{-1}\left(\frac{0.2941907}{\sqrt{0.1054681-\alpha_2}} \right) - \frac{\pi}{2} \right\}$$

$$+ \sqrt{0.0834206-\alpha_2} \left\{ \sin^{-1}\left(\frac{0.1484841}{\sqrt{0.1054681-\alpha_2}} \right) + \frac{\pi}{2} \right\}$$

ได้ $\alpha_2 = -0.5319$

และจากสมการ (4.8) $\beta_2 = 4.2906$, $\gamma_2 = -4.9805$ (4.12)

สำหรับ $4p'$ สมการ (4.7) จะได้

$$2.5 = 2.8958139 + \frac{\sqrt{2}}{\pi}\left[\frac{-(0.93965-6.3\alpha_2)}{\sqrt{2\ 0.0291965-\alpha_2}}\left\{\sin^{-1}\left(\frac{0.7557121}{\sqrt{0.7862735-7.3698161\alpha_2}}\right) - \frac{\pi}{2}\right\} - \sqrt{0.8277412-9.9225\alpha_2}\left\{\sin^{-1}\left(\frac{0.4141}{\sqrt{0.7862735-7.3698161\alpha_2}}\right) + \frac{\pi}{2}\right\}\right]$$

$$0.2791357 = \frac{0.1491508-\alpha_2}{\sqrt{0.0291965-\alpha_2}}\left\{\sin^{-1}\left(\frac{0.2783736}{\sqrt{0.1066883-\alpha_2}}\right) - \frac{\pi}{2}\right\} + \sqrt{0.0834206-\alpha_2}\left\{\sin^{-1}\left(\frac{0.1525376}{\sqrt{0.1066883-\alpha_2}}\right) + \frac{\pi}{2}\right\}$$

ได้ $\alpha_2 = -0.5905$

และจากสมการ (4.8) $\beta_2 = 4.6598$, $\gamma_2 = -5.562$ (4.13)

สำหรับ $3p'$ สมการ (4.7) จะได้

$$1.5 = 1.881142 + \frac{\sqrt{2}}{\pi}\left[\frac{-(0.93965-6.3\alpha_2)}{\sqrt{2\ 0.0509365-\alpha_2}}\left\{\sin^{-1}\left(\frac{0.6187501}{\sqrt{0.7142931-6.5069555\alpha_2}}\right) - \frac{\pi}{2}\right\} - \sqrt{0.8277412-9.9225\alpha_2}\left\{\sin^{-1}\left(\frac{0.4141}{\sqrt{0.7142931-6.5069555\alpha_2}}\right) + \frac{\pi}{2}\right\}\right]$$

$$0.2687888 = \frac{0.1491508-\alpha_2}{\sqrt{0.0509365-\alpha_2}}\left\{\sin^{-1}\left(\frac{0.242564}{\sqrt{0.1097738-\alpha_2}}\right) - \frac{\pi}{2}\right\} + \sqrt{0.0834206-\alpha_2}\left\{\sin^{-1}\left(\frac{0.1623366}{\sqrt{0.1097738-\alpha_2}}\right) + \frac{\pi}{2}\right\}$$

ได้ $\alpha_2 = -0.5686$

และจากสมการ (4.8) $\beta_2 = 4.5218$, $\gamma_2 = -5.3447$ (4.14)

สำหรับ $2p'$ สมการ (4.7) จะได้

$$0.5 = 0.8320583 + \frac{\sqrt{2}}{\pi}\left[\frac{-(0.93965-6.3\alpha_2)}{\sqrt{2\ 0.111551-\alpha_2}}\left\{\sin^{-1}\left(\frac{0.2368787}{\sqrt{0.5136007-4.101166\alpha_2}}\right) - \frac{\pi}{2}\right\} - \sqrt{0.8277412-9.9225\alpha_2}\left\{\sin^{-1}\left(\frac{0.4141}{\sqrt{0.5136007-4.101166\alpha_2}}\right) + \frac{\pi}{2}\right\}\right]$$

$$0.234174 = \frac{0.1491508-\alpha_2}{0.111551-\alpha_2}\left\{\sin^{-1}\left(\frac{0.1169694}{\sqrt{0.1252328-\alpha_2}}\right)-\frac{\pi}{2}\right\} + \frac{0.0834206-\alpha_2}{}\left\{\sin^{-1}\left(\frac{0.2044803}{\sqrt{0.1252328-\alpha_2}}\right)+\frac{\pi}{2}\right\}$$

ได้ $\alpha_2 = -0.7343$

และจากสมการ (4.8) $\beta_2 = 5.5657$, $\gamma_2 = -6.9888$ (4.15)

เฉลี่ยค่า α_2 , β_2 และ γ_2 จากสมการ (4.12) , (4.13) , (4.14) และ (4.15) ได้

$$\alpha_2 = -0.6063 \ , \ \beta_2 = 4.7595 \ , \ \gamma_2 = -5.7187 \quad (4.16)$$

ดังนั้นเราหาจุด ρ ต่ำสุด ของ $l = 1$ ได้จาก

$$(\tfrac{1}{2}\epsilon_{nl}-\alpha_2)\rho^2 - \beta_2\rho + 1.125 - \gamma_2 = 0$$

หรือ $$\rho_{\text{ต่ำสุด}} = \frac{\beta_2 - \sqrt{\beta_2^2 - 4(\frac{1}{2}\epsilon_{nl}-\alpha_2)(\gamma_2 - 1.125)}}{2(\frac{1}{2}\epsilon_{nl}-\alpha_2)}$$

$$= \frac{4.7595-\sqrt{(4.7595)^2-4(\frac{1}{2}\epsilon_{nl}+0.6063)(-6.8437)}}{2(\frac{1}{2}\epsilon_{nl}+0.6063)}$$

สถานะ	พลังงาน ϵ	ระยะต่ำสุด
$2p'$	0.223102	2.108
$3p'$	0.101873	1.978
$4p'$	0.058393	1.94
$5p'$	0.037840	1.92

เราเลือก $\rho_{\text{ต่ำสุด}} = 2$ สำหรับ $l = 1$ จะได้

$$Q_2(\rho) = -0.6063\rho^2 + 4.7595\rho - 5.7187 \quad \text{ในช่วง } 2.0 < \rho < 3.15$$

คำนวณต่อไปโดยใช้ $l = 0$ และให้ต่อจากข้างในใกล้กับนิวเคลียสซึ่งมีฟังก์ชัน $Q_6(\rho) = 11\rho$ ทำเช่นเดียวกับวิธีของโปรดอยู่ในบทที่ 3 เราได้ $\rho = 0.01$ เป็นจุดต่อเนื่องและเป็นจุดต่ำสุดสำหรับ $l = 0$ เช่นเดียวกัน และได้ดังสมการ (3.14) และ (3.15)

สำหรับ $1s''$ $\epsilon = 0.377726$ แทนในสมการ (3.15) จะได้

$$0.50 = \frac{11 - 0.02\alpha_5}{\sqrt{0.377726 - 2\alpha_5}} - \sqrt{0.25 - (0.01)^2 2\alpha_5}$$

ได้ $\alpha_5 = -75.9$

และจากสมการ (3.14) $\beta_5 = 12.518$, $\gamma_5 = -0.0076$ (4.17)

หาจุด $\rho_{สูงสุด}$ สำหรับ $1s''$ ได้จาก

$$76.088863\rho^2 - 12.518\rho + 0.1326 = 0$$

$$\rho_{สูงสุด} = \frac{12.518 + \sqrt{(12.518)^2 - 4(76.088863)(0.1326)}}{2(76.088863)}$$

$$= 0.1531$$

สำหรับ $2s''$ $\epsilon = 0.143162$ จากสมการ (3.15) จะได้

$$1.50 = \frac{11 - 0.02\alpha_5}{\sqrt{0.143162 - 2\alpha_5}} - \sqrt{0.25 - (0.01)^2 2\alpha_5}$$

ได้ $\alpha_5 = -15.89$

และจากสมการ (3.14) $\beta_5 = 11.3178$, $\gamma_5 = -0.0016$ (4.18)

หาจุด $\rho_{สูงสุด}$ สำหรับ $2s''$ ได้จาก

$$15.961581\rho^2 - 11.3178\rho + 0.1266 = 0$$

$$\rho_{สูงสุด} = \frac{11.3178 + \sqrt{(11.3178)^2 - 4(15.961581)(0.1266)}}{2(15.961581)}$$

$$= 0.6977$$

สำหรับ $3s''$ $\epsilon = 0.075172$ จากสมการ (3.15)

$$2.50 = \frac{11 - 0.02\alpha_5}{\sqrt{0.075172 - 2\alpha_5}} - \sqrt{0.25 - (0.01)^2 2\alpha_5}$$

ได้ $\alpha_5 = -6.8465$

และจากสมการ (3.14) $\beta_5 = 11.1369$, $\gamma_5 = -0.0007$ (4.19)

หาจุด $\rho_{สูงสุด}$ สำหรับ $3s''$ ได้จาก

$$6.884086\rho^2 - 11.1369\rho + 0.1257 = 0$$

$$\rho_{สูงสุด} = \frac{11.1369 + \sqrt{(11.1369)^2 - 4(6.884086)(0.1257)}}{2(6.884086)}$$

$$= 1.6064$$

สำหรับ $4s''$ $\epsilon = 0.046266$ จากสมการ (3.15)

$$3.50 = \frac{11 - 0.02\alpha_5}{\sqrt{0.046266 - 2\alpha_5}} - \sqrt{0.25 - (0.01)^2 2\alpha_5}$$

ได้ $\alpha_5 = -3.8092$

และจากสมการ (3.14) $\beta_5 = 11.0762$, $\gamma_5 = -0.00038$ (4.20)

หาจุด $\rho_{สูงสุด}$ สำหรับ $4s''$ ได้จาก

$$3.832333\rho^2 - 11.0762\rho + 0.12538 = 0$$

$$\rho_{สูงสุด} = \frac{11.0762 + \sqrt{(11.0762)^2 - 4(3.832333)(0.12538)}}{2(3.832333)}$$

$$= 2.879$$

จะเห็นได้ว่า $\rho_{สูงสุด}$ สำหรับ $4s''$ อยู่เลยจากจุดต่ำสุดของ $1 = 1$ ดังนั้นจึงคำนวณ เทอม $4s''$ ใหม่โดยใช้สมการ (4.1) และ $\rho_i = 2$

$$n-1-\tfrac{1}{2} = \frac{\sqrt{2}}{\pi}\left[\int_{\rho_{ต่ำสุด}}^{\rho_{สูงสุด}} \frac{\sqrt{(\alpha_2 - \tfrac{1}{2}\epsilon)\rho^2 + \beta_2\rho + \gamma_2 - \tfrac{1}{2}(1+\tfrac{1}{2})^2}}{\rho}\,d\rho + \int_{\rho_{ต่ำสุด}}^{2} \frac{\sqrt{(\alpha_5 - \tfrac{1}{2}\epsilon)\rho^2 + \beta_5\rho + \gamma_5 - \tfrac{1}{2}(1+\tfrac{1}{2})^2}}{\rho}\,d\rho\right] \quad (4.21)$$

จากสมการ (3.8) และ $\epsilon = 0.046266$

$$\frac{\sqrt{2}}{\pi}\int_2^{\rho_{สูงสุด}} \frac{\sqrt{-0.629433\rho^2 + 4.7595\rho - 5.8437}}{\rho}\,d\rho$$

$$= \frac{\sqrt{2}}{\pi}\left[\frac{4.7595}{2\sqrt{0.629433}}\left\{\sin^{-1}\left(\frac{2.241768}{2.8177952}\right) + \frac{\pi}{2}\right\} - \sqrt{5.8437}\left\{\sin^{-1}\left(\frac{1.0842}{2.8177952}\right) + \frac{\pi}{2}\right\}\right]$$

$$= 1.2240621$$

$$\frac{\sqrt{2}}{\pi}\int_{\rho\text{ ต่ำสุด}}^{2}\sqrt{(\alpha_5 - \tfrac{1}{2}\epsilon)\rho^2 + \beta_5\rho + \gamma_5 - \tfrac{1}{2}(1+\tfrac{1}{2})^2}\ \frac{d\rho}{\rho}$$

$$= \frac{\sqrt{2}}{\pi}\left[\frac{-\beta_5}{\sqrt{2\,\tfrac{1}{2}\epsilon - \alpha_5}}\left\{\sin^{-1}\left(\frac{4(\alpha_5-\tfrac{1}{2}\epsilon) + \beta_5}{\sqrt{\beta_5^2 - 4(\alpha_5-\tfrac{1}{2}\epsilon)(\gamma_5 - 0.125)}}\right) - \sin^{-1}(1)\right\}\right.$$

$$\left. - \sqrt{0.125 - \gamma_5}\left\{\sin^{-1}\left(\frac{\gamma_5 - 0.125 + \beta_5}{\sqrt{\beta_5^2 - 4(\alpha_5-\tfrac{1}{2}\epsilon)(\gamma_5 - 0.125)}}\right) - \sin^{-1}(-1)\right\}\right]$$

แทนค่าสมการ (3.14)

$$= \frac{\sqrt{2}}{\pi}\left[\frac{-(11-0.02\alpha_5)}{2\sqrt{\tfrac{1}{2}\epsilon - \alpha_5}}\left\{\sin^{-1}\left(\frac{4(\alpha_5-\tfrac{1}{2}\epsilon) + 11 - 0.02\alpha_5}{\sqrt{(11-0.02\alpha_5)^2 - 4(\alpha_5-\tfrac{1}{2}\epsilon)(0.0001\alpha_5 - 0.125)}}\right) - \frac{\pi}{2}\right\}\right.$$

$$\left. - \sqrt{0.125 - 0.0001\alpha_5}\left\{\sin^{-1}\left(\frac{10.875 - 0.0199\alpha_5}{\sqrt{(11-0.02\alpha_5)^2 - 4(\alpha_5-\tfrac{1}{2}\epsilon)(0.01^2\alpha_5 - 0.125)}}\right) - \frac{\pi}{2}\right\}\right]$$

$$= (0.01)\frac{\sqrt{2}}{\pi}\left[\frac{\alpha_5 - 550}{\sqrt{0.023133 - \alpha_5}}\left\{\sin^{-1}\left(\frac{3.98\alpha_5 + 10.907468}{\sqrt{0.0600093\alpha_5 + 120.9884335}}\right) - \frac{\pi}{2}\right\}\right.$$

$$\left. - \sqrt{1250 - \alpha_5}\left\{\sin^{-1}\left(\frac{10.875 - 0.0199\alpha_5}{\sqrt{0.0600093\alpha_5 + 120.9884335}}\right) + \frac{\pi}{2}\right\}\right]$$

ดังนั้นสำหรับ $4s''$ สมการ (4.21) เป็น

$$505.5862834 = \frac{\alpha_5 - 550}{\sqrt{0.023133 - \alpha_5}}\left\{\sin^{-1}\left(\frac{16.2470229\alpha_5 + 44.526101}{\sqrt{\alpha_5 + 2016.161387}}\right) - \frac{\pi}{2}\right\}$$

$$- \sqrt{1250 - \alpha_5}\left\{\sin^{-1}\left(\frac{44.3935612 - 0.0812351\alpha_5}{\sqrt{\alpha_5 + 2016.161387}}\right) + \frac{\pi}{2}\right\}$$

ได้ $\alpha_5 = -4.8704$

และจากสมการ (3.14) $\beta_5 = 11.0974$, $\gamma_5 = -0.0005$ (4.22)

เฉลี่ยค่า α_5 , β_5 , γ_5 จากสมการ (4.17) , (4.18) , (4.19) และ (4.22) สำหรับช่วง $\rho = 0.01$ ถึง $\rho = 0.15$ เท่านั้นจะได้

$$\alpha_5 = -25.877 \quad , \quad \beta_5 = 11.517 \quad , \quad \gamma_5 = -0.0026 \qquad (4.23)$$

$$Q_5(\rho) = -25.877\rho^2 + 11.517\rho - 0.0026 \qquad 0.01 < \rho < 0.15$$

สำหรับช่วง $\rho = 0.15$ ถึง $\rho = 2$ เราอาจจะหาได้โดยอาศัยจากช่วง $Q_5(\rho)$ และ $Q_2(\rho)$ และเงื่อนไขขอบเขต (3.5) และแบ่งช่วงนี้ออกเป็นส่วนที่ $\rho = 1.05$ ด้วยดังนี้

ที่จุดต่อเนื่องระหว่าง Q_2 และ Q_3 $\rho_i = 2$ จากสมการ (3.5) จะได้

$$1.3751 = 4\alpha_3 + 2\beta_3 + \gamma_3$$

และ
$$2.3343 = 4\alpha_3 + \beta_3$$

$$\beta_3 = 2.3343 - 4\alpha_3$$

$$\gamma_3 = -3.2935 + 4\alpha_3 \qquad (4.24)$$

ที่จุดต่อเนื่องระหว่าง Q_5 และ Q_4 $\rho_i = 0.15$ จากสมการ (3.5) จะได้

$$1.1427 = 0.0225\alpha_4 + 0.15\beta_4 + \gamma_4$$

และ
$$3.7539 = 0.3\alpha_4 + \beta_4$$

$$\beta_4 = 3.7539 - 0.3\alpha_4$$

$$\gamma_4 = 0.5796325 + 0.0225\alpha_4 \qquad (4.25)$$

ที่จุดต่อเนื่องระหว่าง Q_3 และ Q_4 $\rho_i = 1.05$ จากสมการ (3.5) จะได้

$$1.1025\alpha_3 + 1.05\beta_3 + \gamma_3 = 1.1025\alpha_4 + 1.05\beta_4 + \gamma_4$$

และ
$$2.1\alpha_3 + \beta_3 = 2.1\alpha_4 + \beta_4$$

แทนค่าสมการ (4.24) และ (4.25)

$$0.9025\alpha_3 - 0.8425 = 0.81\alpha_4 + 4.5212$$

$$\alpha_3 = 5.9432 + 0.8975\alpha_4 \qquad (4.26)$$

และ
$$2.3343 - 1.9\alpha_3 = 1.8\alpha_4 + 3.7539$$

$$\alpha_3 = -0.9474\alpha_4 - 0.7472 \qquad (4.27)$$

จากสมการ (4.26) และ (4.27) จะได้

$$5.9432 + 0.8975\alpha_4 = -0.9474\alpha_4 - 0.7472$$

$$\alpha_4 = -3.6264$$

จากสมการ (4.27) $\alpha_3 = 2.6885$

จากสมการ (4.24) และ (4.25) เราจะได้

$$\beta_3 = -8.4194 \quad , \quad \gamma_3 = 7.46$$

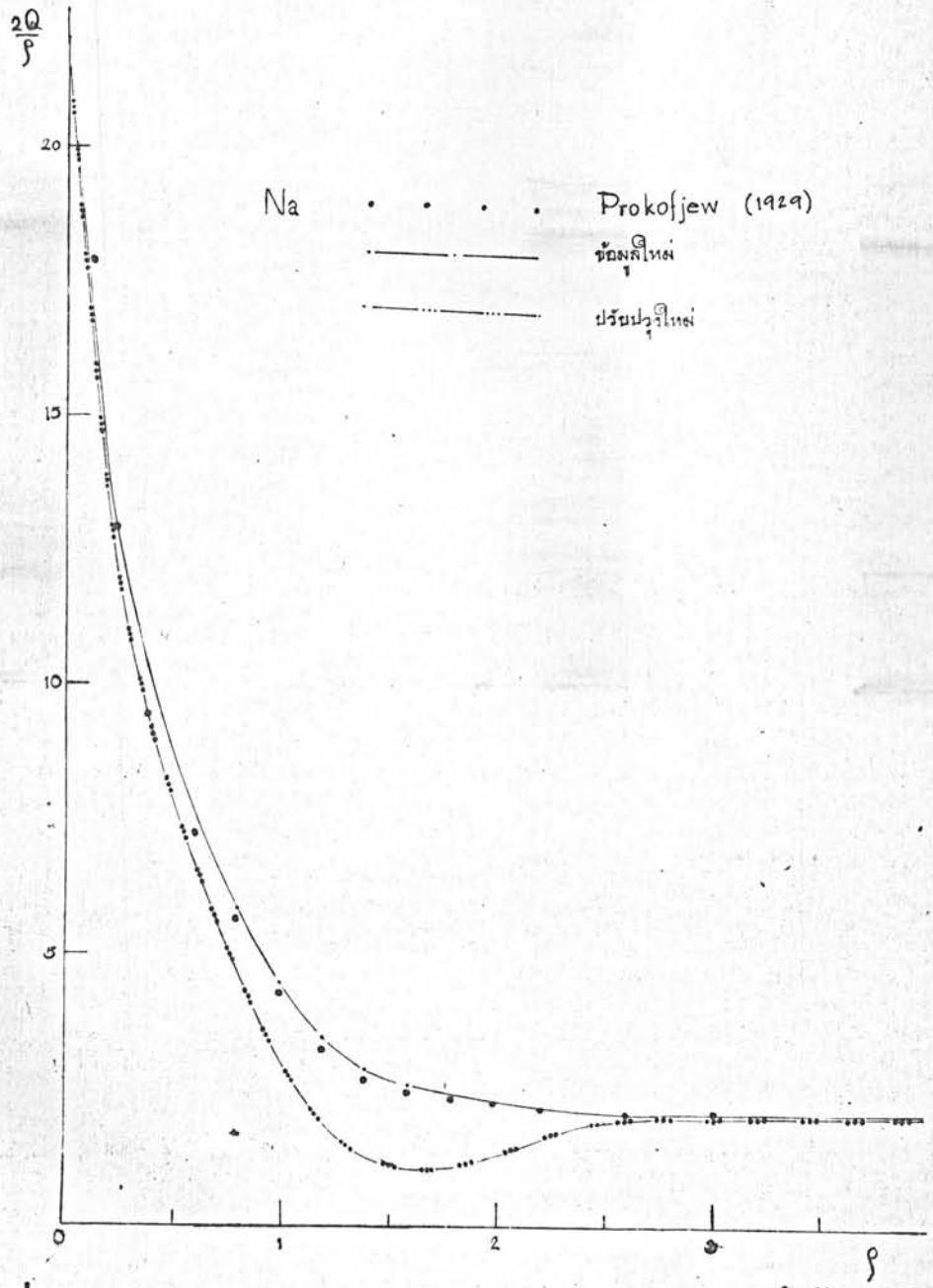
$$\beta_4 = 4.8418 \quad , \quad \gamma_4 = 0.498$$

$$Q_3(\rho) = 2.6885\rho^2 - 8.4194\rho + 7.46 \qquad 1.05 < \rho < 2$$

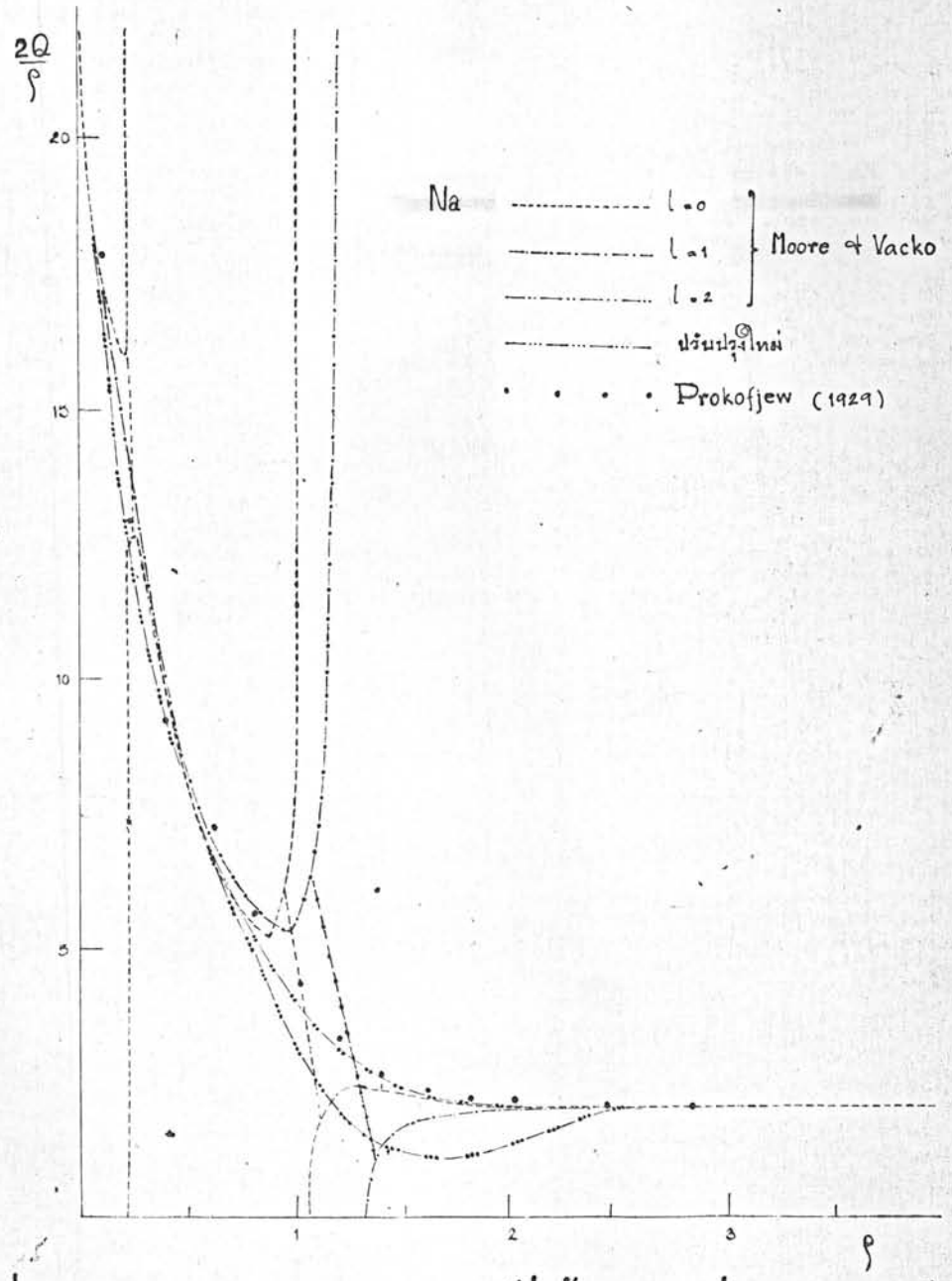
$$Q_4(\rho) = -3.6264\rho^2 + 4.8418\rho + 0.498 \qquad 0.15 < \rho < 1.05$$

ในที่สุดเราได้ $Q(\rho)$ อยู่ในช่วงต่างๆรวมทั้งส่วนปลายทั้งสองด้วย 7 ฟังก์ชัน สำหรับ ρ อยู่ระหว่าง 0 และ ∞ ดังนี้ ตารางที่ 4

ρ = 0.00	ถึง ρ = 0.01	$Q(\rho)$ =	11ρ
0.01	0.15	=	$-25.877\rho^2 + 11.517\rho - 0.0026$
0.15	1.05	=	$-3.6264\rho^2 + 4.8418\rho + 0.498$
1.05	2.00	=	$2.6885\rho^2 - 8.4194\rho + 7.46$
2.00	3.15	=	$-0.6063\rho^2 + 4.7595\rho - 5.7187$
3.15	6.70	=	$0.0085\rho^2 + 0.8861\rho + 0.3816$
6.70	∞	=	ρ



รูปที่ 3 แสดงการเปรียบเทียบพลังงานศักย์ของโปรคอฟยิวและที่ได้ปรับปรุงใหม่



รูปที่ 4 แสดงการเปรียบเทียบพลังงานศักย์ที่ได้ปรับปรุงใหม่และพลังงานศักย์ของมัวร์และโวสโก