

การประมาณ WKB

วิธีนี้เป็นวิธีการประมาณสมการดิฟเฟอเรนเชียลแบบธรรมดาในรูปแบบ

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + Q(x)\Psi = 0$$

ผู้ที่แก้ปัญหของสมการนี้ในทางควอนตัมเมคคานิกส์คนแรกๆคือ เวนท์เซิล แครมเมอร์ส และ บริลโลวีน โดยอาศัยการกระจายเวฟฟังก์ชันในรูปแบบกำลังของ \hbar เมื่อพิจารณา \hbar มีค่าน้อยๆ นั้นคือการคำนึงถึงการประมาณแบบกึ่งแบบฉบับ (semi-classical approximation) ซึ่งสัมพันธ์กับ $\hbar \rightarrow 0$ และความยาวคลื่นมีค่าขึ้นกับตำแหน่งด้วย

2.1) ปัญหาการแก้อะซิมป์โตติก (The Asymptotic solution)

ครั้งแรกเราลองมาพิจารณาการเคลื่อนที่ของอนุภาคภายใต้พลังงานศักย์ $V(x)$

จากสมการไชรดิงเงอร์

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E-V)\Psi = 0 \quad (2.1.1)$$

ถ้า V มีค่าคงที่ จะได้เวฟฟังก์ชันอย่างประมาณคือ $\Psi = A \exp [i \{ 2m(E-V) \}^{1/2} x / \hbar]$ แต่โดยทั่วไปพลังงานศักย์มีค่าขึ้นกับระยะทาง x ดังนั้นเวฟฟังก์ชันต่างๆไปจึงสามารถเขียนเป็น

$$\Psi(x) = A(x) e^{iS(x)/\hbar} \quad (2.1.2)$$

ในที่นี้ $A(x)$ และ $S(x)$ เป็นฟังก์ชันแท้จริง (real functions) เมื่อดิฟเฟอเรนเชียล

สมการ (2.1.2) สองครั้งจะได้

$$\begin{aligned} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} &= A''(x) e^{iS(x)/\hbar} + 2A'(x) \frac{i}{\hbar} e^{iS(x)/\hbar} S'(x) \\ &\quad - \frac{A(x)(S'(x))^2}{\hbar^2} e^{iS(x)/\hbar} + A(x) \frac{i}{\hbar} e^{iS(x)/\hbar} S''(x) \end{aligned} \quad (2.1.3)$$

แทนค่าในสมการ (2.1.1) จะเป็น

$$A''(x) + 2A'(x) \frac{i}{\hbar} S'(x) - \frac{A(x)}{\hbar^2} S'^2(x) + A(x) \frac{i}{\hbar} S''(x) + \frac{2m(E-V)A(x)}{\hbar^2} = 0 \quad (2.1.4)$$

เมื่อแยกส่วนที่เป็นค่าแท้จริงและส่วนที่เป็นค่าจินตภาพจะได้

$$\hbar^2 A'' + [2m(E - V) - S'^2] A = 0 \quad (2.1.5)$$

และ $2AS' + AS'' = 0 \quad (2.1.6)$

สมการ (2.1.6) ให้รากของสมการเป็น $A = \text{ค่าคงที่} (S')^{-1/2}$

ส่วนสมการ (2.1.5) ไม่ให้รากของสมการที่แท้จริง ดังนั้นเราต้องกระจายเป็นอนุกรมของ

\hbar^2 คือ $A = A_0 + \hbar^2 A_2 + \dots$
 $S = S_0 + \hbar^2 S_2 + \dots \quad (2.1.8)$

แทนค่าเหล่านี้ลงในสมการ (2.1.5) และจัดเฉพาะเทอมที่ไม่มี \hbar ให้เท่ากับศูนย์จะได้

$$A_0 [2m(E - V) - S_0'^2] = 0 \quad (2.1.9)$$

$$S_0' = \pm \sqrt{2m(E - V)}$$

$$S_0 = \pm \int \sqrt{2m(E - V)} dx$$

และ $A_0 = \text{ค่าคงที่} (S_0')^{-1/2} \quad (2.1.10)$

เมื่อเราประมาณให้ $\hbar \rightarrow 0$ ดังนั้น \hbar^2 จึงมีค่าน้อยสามารถทิ้งได้ ดังนั้น $A \approx A_0$ และ $S \approx S_0$ เวทฟังก์ชันจะเป็น

$$\Psi(x) = A_0 e^{iS_0/\hbar} = c_{\pm} K^{-1/2} \exp(\pm i \int K dx) \quad (2.1.11)$$

เมื่อ c_+, c_- เป็นค่าคงที่และ A_0, S_0 เขียนอยู่ในเทอมของ $K(x)$ โดยกำหนดให้

$$K(x) = + \sqrt{2m(E - V)} / \hbar \quad (2.1.12)$$

ในที่นี้ถ้า $E - V < 0$ $K(x) \rightarrow i \chi(x)$, $\chi(x) = + \sqrt{2m(V - E)} / \hbar \quad (2.1.13)$

สำหรับ $E - V > 0$ $\hbar K(x)$ สามารถคิดได้ว่าเป็นโมเมนตัมของอนุภาคที่จุด x และถ้าหากว่ามันไม่เปลี่ยนแปลงอย่างรวดเร็วกับระยะทางแล้ว ความยาวคลื่นของอนุภาคก็คือ

$$\lambda = 2\pi / K(x) \text{ นั่นเอง} \quad \text{ดังนั้น} \quad S_0' = \hbar K = \hbar / \lambda$$

เมื่อพิจารณาที่จุดซึ่ง $E - V(x) = 0$ เรียกจุดนี้ว่าจุดหัวเฉี่ยวแบบฉบับ (classical turning point) ความยาวคลื่น λ เป็นสัดส่วนกับ $[E - V(x)]^{-1/2}$ จะมีค่าเป็นอนันต์ ทำให้เวทฟังก์ชันในสมการ (2.1.11) ดัมพลที่จุดนี้แต่จะใช้ได้ก็ต่อเมื่อห่างออกไป



และขอให้เราทราบว่าเวฟฟังก์ชันถูกแบ่งออกเป็นส่วนๆ (regions) ตามจุดหัวเลี้ยวนี้

2.2) ปัญหาการแก้ที่ใกล้จุดหัวเลี้ยว (Solution Near a Turning Point)

เรามาทพิจารณาปัญหาสำคัญที่เกิดจากจุดหัวเลี้ยวสำหรับพลังงาน E เราอาจให้จุดศูนย์กลางของพิกัด (x coordinate) อยู่ที่จุดนี้ ดังนั้น (E - V) = 0 ที่ x = 0 โดยการกระจายเทย์เลอร์ (Taylor expansion) ของ (E - V) หรือของ K²(x) ซึ่งสมมูลกันรอบจุดนี้จะได้

$$K^2(x) = \rho x^n (1 + \alpha x + \beta x^2 + \dots) \quad \text{เมื่อ } \rho > 0 \quad (2.2.1)$$

ในที่นี้ n เป็นจำนวนเต็มบวกและ ρ, α, β เป็นค่าคงที่ และกำหนดให้ (E - V)

เป็นบวกทางขวาเมื่อของจุดศูนย์กลางซึ่งตรงกับเครื่องหมายของ ρ ในสมการ (2.2.1)

ถ้าเราคิดเฉพาะเทอมแรกของการกระจาย K² สมการคลื่นสำหรับ x > 0 จะเป็น

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \rho x^n \Psi = 0 \quad (2.2.2)$$

สมการนี้มีผลปัญหาการแก้ที่ถูกต้องคือ

$$\Psi(x) = C_{\pm} Y_{\pm m}^{1/2}(Y) \quad ; \quad m = \frac{1}{n+2} \quad (2.2.3)$$

เมื่อ
$$Y = \int_0^x K dx \quad (2.2.4)$$

และ J_m(x) คือเบสเซลฟังก์ชัน (Bessel function) ของอันดับ m สมการ (2.2.3)

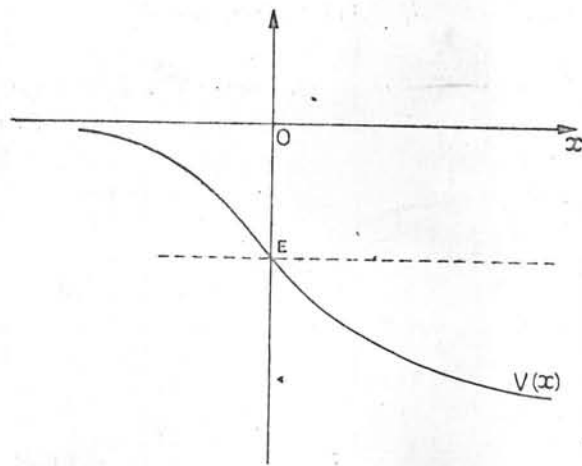
ให้ผลปัญหาการแก้ 2 ฟังก์ชันที่เป็นอิสระต่อกัน จากการสังเกตจะได้อัจฉริยะที่ว่าแต่ละรูปอะซิมป์โตติกของปัญหาการแก้ทั้งสองมาจากการรวมกันโดยตรงของสมการ (2.1.11) นั่นเอง จากความจริงนี้ทำให้ปัญหาของการต่อเนื่อง (matching) ลดลงได้มากมาย

2.3) การต่อเนื่องที่จุดหัวเลี้ยวเชิงเส้น (Matching at a Linear Turning Point)

จุดหัวเลี้ยวเชิงเส้น คือจุดหัวเลี้ยวที่ซึ่งการเปลี่ยนแปลงของ (E - V) หรือ K²

เทียบกับ x เป็นเส้นตรง (รูป 2.1) นั่นคือเราให้ n = 1 ในสมการ (2.2.1)

การพิจารณาสมการ (2.2.3) เราจะพบความจริงที่ว่า การข้ามผ่านจุดหัวเลี้ยวจากบวกไปทางลบ x นั้น (E - V) เปลี่ยนจากบวกไปเป็นลบด้วย เหตุนี้ K และ Y จะเปลี่ยนจากค่าแท้จริงกลายเป็นค่าจินตภาพ ดังนั้นเรากำหนดให้



รูปที่ 2.1 แสดงจุดหัวเลี้ยวเชิงเส้น

$$\text{สำหรับ } x > 0 \quad (E > V) \quad Y_> = Y = \int_0^x K dx \quad (2.3.1a)$$

$$x < 0 \quad (E < V) \quad K = iX \quad \text{และ} \quad Y_< = iY = \int_0^x X dx \quad (2.3.1b)$$

ทั้ง $Y_>$ และ $Y_<$ เป็นค่าแท้จริงและเป็นบวกและมีค่าเพิ่มขึ้นเมื่อห่างออกจากจุดหัวเลี้ยว จากค่าเหล่านี้สมการ (2.2.3) เมื่อ $n = 1$ เขียนได้เป็น

$$\Psi_>(\pm) = c_>(\pm) Y_>^{1/2} K^{-1/2} J_{\pm 1/3}(Y_>) \quad (x > 0) \quad (2.3.2a)$$

$$\Psi_<(\pm) = c_<(\pm) Y_<^{1/2} X^{-1/2} J_{\pm 1/3}(Y_<) \quad (x < 0) \quad (2.3.2b)$$

I_m คือสัมประสิทธิ์มาตรฐานสำหรับเบสเชลฟังก์ชันที่เป็นค่าจินตภาพ การที่จะทำให้ $Y_>$ และ $Y_<$ ที่ $x = 0$ ต่อเนื่องกันได้เราจำเป็นต้องรู้พฤติกรรมของมันที่ใกล้ๆจุดนี้สำหรับค่า x น้อยๆ เทอม K^2 จะประมาณได้เป็น ρx ดังนั้นจะได้

$$\begin{aligned} K &\approx \rho^{1/2} x^{1/2} & Y_> &\approx \frac{2}{3} \rho^{1/2} x^{3/2} \\ X &\approx \rho^{1/2} |x|^{1/2} & Y_< &\approx \frac{2}{3} \rho^{1/2} |x|^{3/2} \end{aligned} \quad (2.3.3)$$

ส่วนเบสเชลฟังก์ชันสำหรับค่า ξ เล็กๆ

$$J_m(\xi) \approx I_m(\xi) \approx \frac{(\frac{1}{2}\xi)^m}{\Gamma(1+m)} \quad (2.3.4)$$

แทนค่าเหล่านี้ลงในสมการ (2.3.2) เราพบว่าที่ใกล้ $x = 0$

$$\Psi_>(+)= \frac{c_>(+)(2/3)^{1/2}(1/3\rho^{1/2})^{1/3}}{\Gamma(4/3)} x, \quad \Psi_>(-)= \frac{c_>(-)(2/3)^{1/2}(1/3\rho^{1/2})^{-1/3}}{\Gamma(2/3)}$$

$$\Psi_<(+)= \frac{c_<(+)(2/3)^{1/2}(1/3\rho^{1/2})^{1/3}}{\Gamma(4/3)} x, \quad \Psi_<(-)= \frac{c_<(-)(2/3)^{1/2}(1/3\rho^{1/2})^{-1/3}}{\Gamma(2/3)} \quad (2.3.5)$$

จะเห็นชัดเจนได้ว่า $\Psi_>(+)$ และ $\Psi_<(+)$ เชื่อมต่อกันได้อย่างสนิทเมื่อ

$$c_>(+)= -c_<(+)= c_+ \quad (2.3.6)$$

ดังนั้นจึงเห็นสมควรกำหนดให้ Ψ_+ เป็นปัญหาการแก้ต่อเนื่องกันของสมการโดยที่

$$\Psi_+ = \Psi_>(+)\quad (x > 0) \quad \text{และ} \quad \Psi_+ = \Psi_<(+)\quad (x < 0) \quad (2.3.7)$$

เมื่อ $\Psi_>(+)$ และ $\Psi_<(+)$ เป็นไปตามสมการ (2.3.2) ในทำนองเดียวกันเรากำหนด Ψ_- เป็นปัญหาการแก้ที่ต่างกันดังนี้



$$\Psi_- = \Psi_>(-) \quad (x > 0) \quad \text{และ} \quad \Psi_- = \Psi_<(-) \quad (x < 0) \quad (2.3.8)$$

เมื่อ $\Psi_>(-)$ และ $\Psi_<(-)$ เป็นไปตามสมการ (2.3.2) ด้วย และให้

$$c_>(-) = c_<(-) \equiv c_- \quad (2.3.9)$$

2.4) สูตรการต่อเนื่องอะซิมป์โตติก (Asymptotic Connection Formulae)

พฤติกรรมของเวฟฟังก์ชัน Ψ_+ และ Ψ_- ที่ห่างไกลจากจุดหัวเลี้ยวสามารถรู้ได้โดยใช้รูปอะซิมป์โตติกของเบสเชลฟังก์ชันดังนี้

$$J_m(\xi)_{Y \rightarrow \infty} = (\frac{1}{2}\pi\xi)^{-\frac{1}{2}} \cos(\xi - \frac{m\pi}{2} - \frac{\pi}{4}) \quad (2.4.1)$$

$$I_m(\xi)_{Y \rightarrow \infty} = (2\pi\xi)^{-\frac{1}{2}} \left[e^{\xi} + e^{-\xi} \cdot e^{-(\frac{1}{2}+m)\pi i} \right] \quad (2.4.2)$$

เมื่อ $Y_> \rightarrow \infty$ ขณะที่ $x \rightarrow +\infty$ และ $Y_< \rightarrow \infty$ ขณะที่ $x \rightarrow -\infty$

จากสมการ (2.3.2) จะได้

$$\Psi_+_{x \rightarrow +\infty} = (\frac{1}{2}\pi K)^{-\frac{1}{2}} \cos(Y_> - \frac{5\pi}{12}) \quad (2.4.3)$$

$$\Psi_+_{x \rightarrow -\infty} = -(2\pi X)^{-\frac{1}{2}} \left[\exp(Y_<) + \exp(-Y_< - \frac{5\pi i}{6}) \right] \quad (2.4.4)$$

$$\Psi_-_{x \rightarrow +\infty} = (\frac{1}{2}\pi K)^{-\frac{1}{2}} \cos(Y_> - \frac{\pi}{12}) \quad (2.4.5)$$

$$\Psi_-_{x \rightarrow -\infty} = -(2\pi X)^{-\frac{1}{2}} \left[\exp(Y_<) + \exp(-Y_< - \frac{\pi i}{6}) \right] \quad (2.4.6)$$

โดยจัดให้เวฟฟังก์ชันที่ไม่ขึ้นต่อกัน Ψ_+ และ Ψ_- รวมกันอย่างเหมาะสมจะได้เวฟฟังก์ชันรายละเอียดที่สอดคล้องกันของช่วงต่างๆ ($x > 0$ หรือ $x < 0$) ตัวอย่างเช่นจากสมการ (2.4.4) และสมการ (2.4.6) ผลรวมของ $(\Psi_+ + \Psi_-)$ ลดลงอย่างเอกซ์โปเนนเชียล (decreases exponentially) เมื่อผ่านเข้าไปในบริเวณของช่วง $x \rightarrow -\infty$ ส่วนสมการ (2.4.3) และสมการ (2.4.5) จากการสังเกตรูปอะซิมป์โตติกของมันขณะที่ $x \rightarrow +\infty$ จะเห็นว่า มีพฤติกรรมคล้ายกับ $K^{-\frac{1}{2}} \cos(Y_> - 1/4 \pi)$

ดังนั้นเราจะได้สูตรการต่อจากช่วง $x \rightarrow -\infty$ ไปสู่ช่วง $x \rightarrow +\infty$ ดังนี้

$$\frac{1}{2} X^{-\frac{1}{2}} \exp(-Y_<) \longrightarrow K^{-\frac{1}{2}} \cos(Y_< - \frac{1}{4} \pi) \quad (2.4.7)$$

สูตรนี้จะไม่สมบูรณ์เมื่อที่ศลสูตรขึ้นกับ ทำนองเดียวกัน เราจะได้สูตรการต่อเนื่องจากช่วง $x \rightarrow +\infty$ ไปสู่ช่วง $x \rightarrow -\infty$ ด้วยการพิจารณาคอมรวมของ

$$(\Psi_+ + \Psi_-) \sin \frac{\pi}{6} \cos \eta + (\Psi_+ - \Psi_-) \sin \eta \cos \frac{\pi}{6}$$

โดยละทิ้งเทอม $\exp(-Y_<)$ เมื่อเปรียบเทียบกับ $\exp(Y_<)$ สูตรการต่อเนื่องคือ

$$\sin \eta \chi^{-1/2} \exp(Y_<) \longleftarrow K^{-1/2} \cos(Y_< - \frac{1}{4}\pi + \eta) \quad (2.4.8)$$

สูตรนี้จะสมบูรณ์ต่อเมื่อค่า $\sin \eta$ โดดกว่าเทอม $\exp(-Y_<)$ ขณะที่ย่านไปทางซ้ายมือและเป็นไปตามสูตรที่เท่านั้น

2.5) เงื่อนไขควอนตัมบอร์-ซอมเมอร์เฟลด์

(The Bohr-Sommerfeld Quantum Condition)

เมื่อพิจารณาสถานะปกติของอนุภาคที่อยู่ในศักย์รูปบ่อ (potential well) ขรรคมคา แสดงได้ว่าวิธีการประมาณ WKB ในกรณีสูตรการต่อเนื่องอะซิมป์โตติกนำไปสู่กฎของบอร์-ซอมเมอร์เฟลด์ได้ถูกต้องยิ่งขึ้น สมมติให้จุดหัวเลี้ยวแบบฉบับที่สัมพันธ์กับพลังงาน E ตามรูป 2.2 ในช่วง $x < x_1$ และ $x > x_2$ เป็นช่วงที่ยอมรับสำหรับปัญหาการแก้ WKB ที่ลดลงอย่างเอกซโปเนนต์ $\exp(-Y_<)$ เท่านั้นถ้าเงื่อนไขขอบเขตที่จุดอนันต์ไม่ถูกฝ่าฝืน ดังนั้นเวฟฟังก์ชันภายในช่วง $x_1 < x < x_2$ หากได้โดยใช้สูตรการต่อเนื่องของสมการ (2.4.7) เริ่มจากทั้งสองช่วงนอก คือทั้ง $Y_<$ และ $Y_>$ ถูกกำหนดเป็นค่าบวกและมีค่าเพิ่มขึ้นจากศูนย์ขณะที่เคลื่อนห่างออกจากจุดหัวเลี้ยว เปรียบเทียบกับจุดหัวเลี้ยว x_1 จะได้ว่า

$$Y_< = \int_x^{x_1} \chi \, dx \quad \text{และ} \quad Y_> = \int_{x_1}^x K \, dx \quad (2.5.1)$$

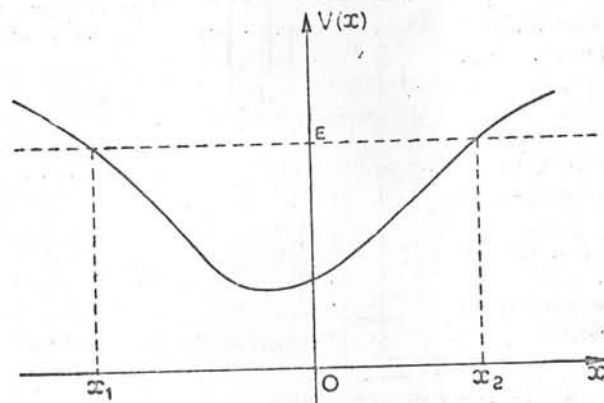
ดังนั้นใช้สูตรการต่อเนื่องอะซิมป์โตติก (2.4.7) ที่ผ่านจุด x_1 จะได้เวฟฟังก์ชันในช่วงทางขวาของ x_1 ดังนี้

$$\Psi = c K^{-1/2} \cos \left(\int_{x_1}^x K \, dx - \frac{\pi}{4} \right) \quad (2.5.2)$$

ในที่นี้ c เป็นค่าคงที่ใดๆ ทำนองเดียวกันเมื่อเปรียบเทียบกับจุดหัวเลี้ยว x_2

$$Y_< = \int_{x_2}^x \chi \, dx \quad Y_> = \int_x^{x_2} K \, dx \quad (2.5.3)$$

เราจะได้เวฟฟังก์ชันในช่วงทางซ้ายมือของ x_2 เป็น



รูปที่ 2.2 แสดงจุดหัวเลี้ยวสำหรับอนุภาคในศักย์รูปบ่อ

$$\Psi = c' k^{-1/2} \cos \left(\int_x^{x_2} k dx - \frac{\pi}{4} \right) = c' k^{-1/2} \cos \left(\frac{\pi}{4} - \int_x^{x_2} k dx \right) \quad (2.5.4)$$

เมื่อ c' เป็นค่าคงที่และอาร์กิวเมนต์ (argument) ของฟังก์ชันโคไซน์ (cosine) มีค่าเพิ่มขึ้นเมื่อ x เพิ่มขึ้นเหมือนกับสมการ (2.5.2) จะเห็นได้ว่าทั้งสองสมการ (2.5.2) และ (2.5.4) หาได้ในช่วงเดียวกัน $x_1 < x < x_2$ ดังนั้นทั้งสองเวฟฟังก์ชันจะต้องพ้องกัน (coincide) และอาร์กิวเมนต์ของฟังก์ชันโคไซน์ในสมการทั้งสองจำเป็นต้องมีค่าต่างกัน $n\pi$ เมื่อ n มีค่าเป็นจำนวนเต็มบวก และ $c' = (-)^n c$ ดังนั้นจะได้

$$\int_{x_1}^{x_2} k dx = (n+1/2)\pi \quad (2.5.5)$$

ในที่สุดเมื่อแทนค่าสมการ (2.1.12) สำหรับ k เราจะได้

$$2 \int_{x_1}^{x_2} \left\{ 2m [E - V(x)] \right\}^{1/2} dx = (n+1/2)h \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.5.6)$$

$$\text{หรือ} \quad \oint p dx = (n+1/2)h \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.5.7)$$

ทางซ้ายมือหมายถึงการอินทิเกรตตลอดครบวงของโมเมนตัมของอนุภาคที่เคลื่อนที่จาก x_1 ไป x_2 แล้วกลับมา x_1 อีกซึ่งเป็นกฎควอนตัมบอร์-ซอมเมอร์เฟลด์ที่ถูกต้อง ต่างจากเดิมคือแทนที่จะเป็นจำนวนเต็มเลขควอนตัมปรากฏเป็นจำนวนเต็มครึ่ง ($n+1/2$) แทน จากการสังเกตสมการ (2.5.2) จะเห็นได้ง่ายว่า n ในสมการ (2.5.5) ก็คือจำนวนจุดกลาง (node) ของ $\Psi(x)$ ระหว่าง x_1 และ x_2 ดังนั้นถ้าในช่วงนี้มีความยาวคลื่นจำนวนมาก n จะต้องมีค่าใหญ่และคาดว่าไปไปตามกฎควอนตัม (2.5.6) ใ้ได้อย่างดี

2.6) ปัญหาการแก้ WKB ของสมการคลื่นตามแนวรัศมี

(WKB Solution of the Radial Wave Equation)

จากสมการคลื่นตามแนวรัศมีสำหรับพลังงานศักย์ ที่มีสมมาตรเชิงกลมคือ

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E - V - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2m r^2} \right] R = 0 \quad (2.6.1)$$

กำหนดให้ $\chi(r) = rR(r)$ สมการ (2.6.1) เขียนใหม่เป็น

$$\frac{d^2\chi}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E - V(r) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \chi = 0 \quad (2.6.2)$$

สมการนี้ตัวแปรอิสระ r มีเงื่อนไขขอบเขตอยู่ที่ 0 และ $+\infty$ แทนที่จะอยู่ที่ $-\infty$ และ $+\infty$ ในกรณีหนึ่งมิติ เพื่อให้ปัญหาเงื่อนไขขอบเขตตามเส้นที่ขึ้นจึงต้องเปลี่ยนตัวแปรใหม่โดยให้

$$r = e^s, \chi(r) = e^{\frac{1}{2}s} \phi(s) \quad (2.6.3)$$

ดังนั้นเงื่อนไขขอบเขตจะเปลี่ยนไปจากจุด $r = 0$ และ $+\infty$ ไปเป็น $s = -\infty$ และ $+\infty$ ตามลำดับ โดยการคิดเฟอเรนซิเอท χ เทียบกับ r

$$\begin{aligned} \frac{d\chi}{dr} &= \frac{d\chi}{ds} \cdot \frac{ds}{dr} = \frac{1}{2} e^{-\frac{1}{2}s} \phi(s) + e^{-\frac{1}{2}s} \frac{d\phi}{ds}(s) \\ \frac{d^2\chi}{dr^2} &= e^{-\frac{3}{2}s} \left[\frac{d^2\phi}{ds^2}(s) - \frac{1}{4} \phi(s) \right] \end{aligned} \quad (2.6.4)$$

แทนค่าลงในสมการ (2.6.2) จะได้

$$\frac{d^2\phi}{ds^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[\{E - V(e^s)\} e^{2s} - \frac{\hbar^2}{2m} (l+\frac{1}{2})^2 \right] \phi = 0 \quad (2.6.5)$$

เงื่อนไขขอบเขตของ $\phi(s)$ เป็น

$$\phi(s) \longrightarrow 0 \quad \text{เมื่อ} \quad s \longrightarrow \pm \infty \quad (2.6.6)$$

จากสมการ (2.6.5) และ (2.6.6) สำหรับกรณีของศักย์รูปบ่อธรรมดาจะได้สมการที่เป็นปริภาคของสมการ (2.5.6) ดังนี้

$$2 \int_{s_1}^{s_2} \left[2m \{E - V(e^s)\} e^{2s} - \hbar^2 (l+\frac{1}{2})^2 \right]^{\frac{1}{2}} ds = (n+\frac{1}{2})\hbar \quad (2.6.7)$$

เมื่อ s_1 และ s_2 คือลิมิต (limit) ของช่วงที่ได้จากรากกำลังสองของวงเล็บที่เป็นค่าบวก เมื่อเราให้ $s = \ln r$ สามารถเขียนสมการ (2.6.7) ในเทอมของ r เป็น

$$2 \int_{r_1}^{r_2} \left[2m \{E - V(r)\} - \frac{\hbar^2}{2m} (l+\frac{1}{2})^2 \right]^{\frac{1}{2}} dr = (n+\frac{1}{2})\hbar \quad (2.6.8)$$

จะเห็นได้ว่าเราได้ $(l+\frac{1}{2})^2$ แทนที่จะเป็น $l(l+1)$ และได้ผลการคำนวณที่ขึ้น