



รายงานวิจัยฉบับสมบูรณ์

โครงการการศึกษาเสถียรภาพและอเสถียรภาพของสสาร
ที่มีอนุภาคจำนวนมาก

โดย นายชัยพจน์ มุทาพร

ธันวาคม 2553

สัญญาเลขที่ MRG4980107

รายงานวิจัยฉบับสมบูรณ์

โครงการการศึกษาเสถียรภาพและอเสถียรภาพของสสาร
ที่มีอนุภาคจำนวนมาก

ผู้วิจัย นายชัยพจน์ มุทาพร

สังกัดคณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยขอนแก่น

สนับสนุนโดยสำนักงานกองทุนสนับสนุนการวิจัย

(ความเห็นในรายงานนี้เป็นของผู้วิจัย สกว.ไม่จำเป็นต้องเห็นด้วยเสมอไป)

บทคัดย่อ

รหัสโครงการ : MRG4980107

ชื่อโครงการ : โครงการการศึกษาเสถียรภาพและอเสถียรภาพของสสารที่มีอนุภาค
จำนวนมาก

ชื่อนักวิจัย : นายชัยพจน์ มุทาพร

ภาควิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยขอนแก่น

E-mail Address : chaiyapoj@hotmail.com

ระยะเวลาโครงการ : 1 กรกฎาคม 2549 – 31 ธันวาคม 2553

โครงการวิจัยมีจุดประสงค์เพื่อศึกษาระบบสสารประเภทโบซอนที่มีอันตรกิริยาแบบคูโลมบ์ เป็นกลางทางไฟฟ้าประกอบด้วยอนุภาคประจุลบ N อนุภาค และทุกอนุภาคของระบบอยู่ภายในทรงกลมรัศมี R ปริมาตร ν_R เราต้องการศึกษาว่าเมื่อเราเพิ่มจำนวนอนุภาคมามากๆ แล้วรัศมีของทรงกลมจะเพิ่มขึ้นหรือลดลงอย่างไร โดยการหาคำตอบจะเริ่มจากการหาขอบเขตบนและขอบเขตล่างของพลังงานจลน์ของระบบ โดยใช้วิธีการทางคณิตศาสตร์ คำตอบที่เราได้แสดงให้เห็นว่าขอบเขตบนของพลังงานจลน์เป็นปริมาณที่หาค่าได้แน่นอน และขอบเขตล่างของพลังงานจลน์มีค่าขึ้นกับความหนาแน่นของอนุภาคในทรงกลม ดังนั้นเราสามารถคำนวณความน่าจะเป็นที่จะพบทุกอนุภาคอยู่ในทรงกลมโดยใช้ความหนาแน่นดังกล่าว และได้ความสัมพันธ์ระหว่างความน่าจะเป็นและจำนวนอนุภาคดังสมการด้านล่าง

$$\text{Prob}[|\vec{x}_1| \leq R, \dots, |\vec{x}_N| \leq R] \frac{1}{(N\nu_R)^{1/2}} < \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} 1.61 (1+Z)$$

เมื่อ a_0 คือรัศมีของบอห์ร์ และ $Z|e|$ เป็นประจุบวกสูงสุดของนิวคลีไอในระบบ เราจึงได้ข้อสรุปจากสมการด้านบนว่า ถ้าสสารประเภทโบซอนมีการยุบตัวเกิดขึ้นจริงแล้ว เมื่อเราเพิ่มจำนวนอนุภาคในระบบให้มากขึ้น รัศมี R ของทรงกลมต้องลดลงในสัดส่วนไม่เร็วไปกว่า $N^{-1/3}$ มิเช่นนั้นจะทำให้ค่าทางด้านซ้ายมือของสมการด้านบนเข้าสู่อนันต์ ทำให้ขัดแย้งกับค่าที่แน่นอนทางด้านขวามือของสมการด้านบน พฤติกรรมการลดลงของรัศมีของทรงกลมสำหรับสสารประเภทโบซอนนั้นตรงข้ามกับสสารทั่วๆ ไป ซึ่งเมื่อเราเพิ่มจำนวนอนุภาคเข้าไปในระบบมากๆ รัศมี R ของทรงกลมต้องเพิ่มขึ้นในสัดส่วนไม่ช้าไปกว่า $N^{1/3}$

Keywords : ก้อนสสารประเภทโบซอน; การยุบตัวของสสารประเภทโบซอน; เสถียรภาพของสสาร

Abstract

Project Code : MRG4980107

Project Title : Contributions to Stability and Instability of Matter in Bulk

Investigator : Mr. Chaipayoj Muthaporn

Department of Physics, Faculty of Science, Khon Kaen University

E-mail Address : chaipayoj@hotmail.com

Project Period : 1 July, 2006 – 31 December, 2010

The goal of this project was to study the behavior of radius R , of a sphere of “bosonic matter” with Coulomb interaction, as a function of the number of negatively charged particles, N , as the latter is made to increase. To establish this result, we derived upper and lower bounds of the kinetic energy of such systems by rigorous mathematical techniques. The analytical results showed that the lower bound of the kinetic energy involving the density of particles as well as the upper bound are finite numbers. It was shown that the probability of finding the particles involve lying within the sphere of radius R is bounded above as follows:

$$\text{Prob}[\|\vec{x}_1\| \leq R, \dots, \|\vec{x}_N\| \leq R] \frac{1}{(N\nu_R)^{1/2}} < \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} 1.61 (1+Z)$$

where a_0 is the Bohr radius, and $Z|e|$ is the maximum of the positively charged nuclei. This result tell us, that if deflation of such matter occurs upon collapse as more and more matter is put together, then for a non vanishing probability of having the negatively charged particles within a sphere of radius R , the latter necessarily cannot decrease faster than $N^{-1/3}$ for large N . This is in clear distinction with ordinary matter (i.e., matter with the exclusion principle) which inflates and R necessarily increases not any slower than $N^{1/3}$ for large N .

Keywords : Bosonic Matter in Bulk; The Collapse of “Bosonic Matter”; Stability of Matter

สารบัญ

	หน้า
บทคัดย่อ	ก
Abstract	ข
1. ความสำคัญและที่มาของปัญหา	1
2. วัตถุประสงค์	2
3. ระเบียบวิธีวิจัย	3
3.1 ขอบเขตบนของพลังงานจลน์	5
3.2 ขอบเขตล่างของพลังงานสถานะพื้นและพลังงานจลน์ของระบบ	6
4. สรุปและวิจารณ์	30
เอกสารอ้างอิง	34
Output จากโครงการวิจัยที่ได้รับทุนจาก สกว.	34
ภาคผนวก	35

1. ความสำคัญและที่มาของปัญหา

คำถามเกี่ยวกับเสถียรภาพของสสารนั้น เป็นที่สนใจของนักฟิสิกส์มาตั้งแต่ Rutherford พบว่าสสารประกอบด้วยอนุภาคที่มีประจุบวกและประจุลบโดยมีอันตรกิริยาระหว่างกันแบบ คูลอมบ์ ในปี 1931 Paul Ehrenfest (cf. [1]) ได้ตั้งคำถามเกี่ยวกับเสถียรภาพและขนาดของ สสารขึ้นมาว่า ทำไมอิเล็กตรอนซึ่งมีประจุลบไม่ยุบตัวลงสู่นิวเคลียสของอะตอมซึ่งมีประจุบวก ทำไมเมื่อเราเพิ่มจำนวนอิเล็กตรอนเข้าไปในสสารแล้วขนาดของสสารกลับเพิ่มขึ้น แทนที่จะ ขนาดจะลดลงเนื่องจากพฤติกรรมของแรงคูลอมบ์ระหว่างนิวเคลียสและอิเล็กตรอน โดย Ehrenfest ได้ตอบคำถามนี้ว่า นั่นเป็นเพราะหลักการกีดกันของเพาลี “อิเล็กตรอนสองตัวไม่สามารถอยู่ในสถานะเดียวกันได้” คำตอบนี้ได้รับการพิสูจน์และยืนยันโดยใช้วิธีการทาง คณิตศาสตร์เป็นครั้งแรกในอีกหลายสิบปีต่อมาโดย Dyson [1] ว่าหลักการกีดกันของเพาลีเป็น สิ่งจำเป็นอย่างยิ่งสำหรับการมีเสถียรภาพของสสาร สสารที่ละทิ้งหลักการกีดกันของเพาลี เช่น ระบบของอิเล็กตรอนที่กำหนดให้สปินเท่ากับ 0 หรือเรียกอีกชื่อว่า “ระบบสสารประเภทโบซอน” จะไม่เสถียร และมิงานวิจัย [2] ได้ตอบคำถามที่ว่า ทำไมขนาดของสสารถึงได้เพิ่มขึ้นเมื่อเรา เพิ่มจำนวนของอิเล็กตรอน ซึ่งคำตอบคือ เมื่อเราเพิ่มอนุภาคเข้าไปในระบบให้มากขึ้นเรื่อยๆ โดยให้อนุภาคทั้งหมดอยู่ภายในทรงกลมรัศมี R รัศมี R ของทรงกลมจำเป็นต้องเพิ่มขึ้นใน สัดส่วนไม่น้อยกว่า $N^{1/3}$ เมื่อ N มีค่ามากๆ (N เป็นจำนวนของอิเล็กตรอน)

ในกรณีที่เราเปลี่ยนอิเล็กตรอนให้เป็นอนุภาคชนิดโบซอน นั่นคือเราได้ละทิ้งหลักการกีดกัน ของเพาลี Dyson [1] พบว่าสสารในระบบดังกล่าวจะไม่มีเสถียรภาพต่อไป โดยระบบสสารนั้นจะ เกิดการยุบตัว Dyson คำนวณขอบเขตบนของพลังงานสถานะพื้นของระบบสสารดังกล่าวมีค่า แปรผันตรงกับ $N^{7/5}$ เป็นการยืนยันว่าระบบสสารชนิดโบซอนจะเป็นระบบสสารที่เป็นแบบ อเสถียรภาพ Manoukian และ Muthaporn [3] ได้ศึกษาปัญหาเสถียรภาพของสสารชนิดนี้ ได้ ปรับปรุงค่าขอบเขตบนที่ได้ให้มีความแม่นยำมากยิ่งขึ้น นอกจากนี้ Muthaporn และ Manoukian [4, 5] พบว่าเสถียรภาพของสสารชนิดโบซอนไม่ขึ้นกับมิติของอวกาศที่ระบบ ดังกล่าวอาศัยอยู่ ทำให้เราสรุปได้ว่า ไม่ว่าอนุภาคในระบบโบซอนจะวางเรียงตัวในแนวเส้นตรง หรือเรียงตัวกันเป็นแผ่น หรือถูกบรรจุในปริมาตรใดๆ ระบบนั้นจะเป็นระบบแบบอเสถียรภาพ หรือระบบจะเกิดการยุบตัวนั่นเอง แต่ก็ยังไม่มิงานวิจัยขึ้นใดที่ศึกษาพฤติกรรมการลดลงของ รัศมี R เมื่อเทียบกับจำนวนอนุภาคโบซอน N ที่เพิ่มขึ้นเรื่อยๆ ในระบบสสารดังกล่าว

ดังนั้นความคาดหวังในตอนเริ่มต้นของโครงการวิจัย ผู้วิจัยมุ่งตอบคำถามสองข้อดังนี้

1. ถ้าเราบรรจุสารชนิดโบซอนไว้ในปริมาตรอันหนึ่ง และจากนั้นเพิ่มอนุภาคโบซอนเพิ่มขึ้นเรื่อยๆ พฤติกรรมการลดลงของรัศมี R ของระบบดังกล่าวจะขึ้นกับจำนวนของอนุภาคโบซอน N ในระบบอย่างไร
2. งานวิจัยของ Manoukian และ Sirininlakul [2005] นั้นยังไม่ได้ศึกษาในแง่สัมพัทธภาพ ดังนั้นผู้วิจัยจะศึกษาในแง่สัมพัทธภาพของระบบดังกล่าวและระบบสสารประเภทโบซอน และดูพฤติกรรมการเพิ่มและลดของรัศมี R จะยังคงเหมือนเดิมหรือแตกต่างจากเดิมหรือไม่ อย่างไร

การตอบปัญหาดังกล่าวจะทำให้เราทราบและเข้าใจลึกซึ้งเกี่ยวกับเสถียรภาพ และเสถียรภาพของสสารมากยิ่งขึ้น นอกจากนี้เราอาจสามารถนำวิธีการทางคณิตศาสตร์ ที่ใช้คำนวณหาพลังงานสถานะพื้นของระบบไปประยุกต์ใช้กับการหาพลังงานสถานะพื้นของระบบสสารบางอย่างที่มีอยู่จริงในธรรมชาติได้ และองค์ความรู้ที่ได้จากงานวิจัยเป็นองค์ความรู้พื้นฐานทางฟิสิกส์ที่จะคงอยู่ต่อไปตราบนานเท่านาน

จากผลการวิจัยเราได้คำตอบของคำถามข้อ 1 ว่าพฤติกรรมของรัศมี R จะต้องลดลงในอัตราไม่เร็วกว่า $N^{-1/3}$ เมื่อ $N \rightarrow \infty$ และหาค่าได้ แต่ผู้วิจัยยังไม่สามารถคำนวณพฤติกรรมของระบบในมิติต่างๆ ที่ไม่เท่ากับสาม และยังไม่สามารถคำนวณพฤติกรรมของระบบในกรณีที่มีทฤษฎีสัมพัทธภาพเข้ามาเกี่ยวข้องได้ ดังนั้นวัตถุประสงค์ของโครงการวิจัยจะมีเฉพาะในส่วน of คำถามข้อที่ 1 ส่วนในกรณีที่มิติไม่เท่ากับสาม และคำถามข้อ 2 นั้น เราหวังว่าในอนาคตถ้าเราศึกษาระบบของสสารในกรณีเฉพาะบางระบบเราน่าจะได้คำตอบที่เราต้องการได้

2. วัตถุประสงค์

ศึกษาความสัมพันธ์ระหว่างรัศมี R ของทรงกลมที่บรรจุสสารประเภทโบซอน กับจำนวนอนุภาคโบซอนประจุลบ N ที่ใส่เพิ่มเข้าไปในระบบ โดย N มีค่ามาก

3. ระเบียบวิธีวิจัย

ระบบที่เราศึกษาเป็นระบบของนิวเคลียสที่มีอิเล็กตรอนอยู่รอบๆ โดยเราถือว่านิวเคลียสหยุดนิ่งกับที่ เราให้จำนวนนิวเคลียสเท่ากับ k และจำนวนอิเล็กตรอนเท่ากับ N ดังนั้นแฮมิลโทเนียน (Hamiltonian) ของระบบนี้คือ

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m} + \sum_{i < j}^N \frac{e^2}{|\vec{x}_i - \vec{x}_j|} - \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^k \frac{Z_j e^2}{|\vec{x}_i - \vec{R}_j|} + \sum_{i < k}^k \frac{Z_i Z_j}{|\vec{R}_i - \vec{R}_j|} \quad (1)$$

เมื่อ $\vec{x}_i$, $\vec{R}_j$ คือเวกเตอร์บอกตำแหน่งของอิเล็กตรอนและนิวเคลียสตามลำดับ และเรายังกำหนดให้ระบบที่เราศึกษาเป็นกลางทางไฟฟ้า นั่นคือ $\sum_{j=1}^k Z_j = N$

ถ้าเราหยุดสปินของอิเล็กตรอนในระบบดังกล่าว อิเล็กตรอนจะไม่มีพฤติกรรมตามหลักการกีดกันของเพาลี (Pauli's exclusion principle) เราเรียกระบบสารนี้ว่า “สารประเภทโบซอน (bosonic matter)” มีงานวิจัยต่างๆ [1, 6, 7] ที่พิสูจน์ว่า ระบบสารประเภทโบซอนเป็นระบบที่ไม่เสถียร วิธีการพิสูจน์เราจะดูจากพลังงานสถานะพื้น E_N ของระบบ ถ้า $E_N \sim N^\alpha$ โดยที่ $\alpha > 1$ แสดงให้เห็นว่าระบบไม่เสถียร เนื่องจากถ้าเรานำสารประเภทโบซอน 2 ระบบมารวมกัน แต่ละระบบมีอิเล็กตรอน N ก่อนรวมกันระบบรวมจะมีพลังงานสถานะพื้นแปรตาม $2N^\alpha$ แต่หลังจากรวมแล้วระบบรวมมีจำนวนอิเล็กตรอน $2N$ ตัว ดังนั้นพลังงานสถานะพื้นจะแปรตาม $(2N)^\alpha$ พลังงานที่ถูกปลดปล่อยออกมาหลังจากการรวมของระบบทั้งสองจึงแปรตาม $[(2N)^\alpha - 2N^\alpha]$ และปกติแล้วสารที่เราพบเจอในชีวิตประจำวันจำนวนของอิเล็กตรอนจะอยู่ใน order ของ 10^{23} ตัวขึ้นไป ดังนั้นพลังงานที่มันปลดปล่อยออกมาจะมหาศาลมากระบบจึงไม่เสถียร ซึ่งจะต่างจากระบบของสารปกติทั่วไปที่อิเล็กตรอนเป็นอนุภาคชนิดเฟอร์มิออนมีสปินครึ่ง พลังงานสถานะพื้นของระบบสารเฟอร์มิออนนี้จะแปรตาม N นั่นคือ $\alpha = 1$ แสดงให้เห็นว่าระบบสารปกติจะเสถียร แม้ว่าจะเอาสารสองระบบมารวมกันพลังงานที่เพิ่มขึ้นจะเป็นสัดส่วนโดยตรงกับจำนวนอนุภาคของระบบ นอกจากนี้เรายังพบว่าเมื่อเพิ่มจำนวนอิเล็กตรอนเข้าไปเรื่อยๆ ก้อนสารทั่วไปจะมีขนาดเพิ่มขึ้นตามจำนวนของอิเล็กตรอน ซึ่งงานวิจัยของ Manoukian และ Sirininlakul [2] ได้พิสูจน์มาแล้วว่า ก้อนสารจะอยู่ภายในทรงกลมรัศมี R และเมื่อเราเพิ่มจำนวนอิเล็กตรอน N ตัว รัศมีนี้จะเพิ่มขึ้นในอัตราส่วนไม่น้อยกว่า $N^{1/3}$ ในกรณีที่ N มากๆ (อยู่ใน order 10^{23} ตัว) โดยบทสรุปนี้มาจากการใช้วิธีการทางคณิตศาสตร์ที่สลับซับซ้อนเพื่อพิสูจน์หาความน่าจะเป็นที่จะพบอิเล็กตรอน N ตัวบรรจุอยู่ภายในทรงกลมรัศมี R และมีปริมาตร ν_R ได้ความน่าจะเป็นในกรณี $N \rightarrow \infty$ คุณด้วยอัตราส่วนระหว่างปริมาณอิเล็กตรอนและปริมาตรจะต้องมีขอบเขตแน่นอนคือ

$$\text{Prob}[|\vec{x}_1| \leq R, \dots, |\vec{x}_N| \leq R] \left(\frac{N}{v_R} \right)^{2/5} < \left(\frac{1}{a_0} \right)^{2/5} 1.846 [1 + Z^{2/3}]^{6/5} \quad (2)$$

เมื่อ $a_0 = \hbar^2 / me^2$ คือรัศมีของบอห์ร์ และ $Z|e|$ คือประจุของนิวเคลียสที่มีจำนวนโปรตอนมากที่สุด อสมการที่ (2) บอกเราว่าเมื่อเราเพิ่มจำนวนอิเล็กตรอนในระบบไปเรื่อยๆ ปริมาตร v_R ของระบบจำเป็นต้องขยายตัวในสัดส่วนที่ไม่น้อยกว่าปริมาณของอิเล็กตรอนในระบบในกรณี $N \rightarrow \infty$ มิเช่นนั้นแล้วค่าทางด้านซ้ายมือของอสมการจะเข้าสู่อนันต์ทำให้อสมการที่ (2) ไม่เป็นจริง

โดยอาศัยหลักการเดียวกันเมื่อย้อนกลับมาที่ระบบสารประเภทโบซอน (ระบบที่อิเล็กตรอนถูกหยุดสปิน) ถ้าเราสามารถหาความน่าจะเป็นของระบบในรูปอสมการที่ (2) ได้ เราจะสามารถสรุปพฤติกรรมของระบบนี้ในกรณีที่เพิ่ม N มากๆ ได้ ต่อจากนี้ไปจะเริ่มพิสูจน์เพื่อหาความสัมพันธ์ดังกล่าว

โดยเริ่มจากนิยามของความหนาแน่นของอนุภาค N ตัว สปิน 0 (โบซอน) คือ

$$\rho(\vec{x}) = N \int d^3 \vec{x}_2 \cdots d^3 \vec{x}_N |\phi(\vec{x}, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N)|^2 \quad (3)$$

และแน่นอนเราได้ปริมาณอนุภาคมีค่าเท่ากับ

$$\int d^3 \vec{x} \rho(\vec{x}) = N \quad (4)$$

เราจะกำหนดให้ ϕ เป็นสถานะที่ normalized ของระบบและเป็นสถานะที่ให้ค่าคาดหวังสำหรับแฮมิลโทเนียน H มีค่าน้อยกว่าศูนย์เสมอ สถานะนี้ไม่จำเป็นสถานะพื้นของระบบ นั่นคือ

$$-\varepsilon_N(m) \leq \langle \phi | H | \phi \rangle < 0 \quad (5)$$

เมื่อ $-\varepsilon_N(m) = E_N < 0$ เป็นพลังงานสถานะพื้นของระบบนี้ สังเกตว่าเราให้มันมีค่าขึ้นกับมวล m ของอิเล็กตรอน

3.1 ขอบเขตบนของพลังงานจลน์

ขั้นตอนแรกของการพิสูจน์เราจะหาขอบเขตบนของพลังงานจลน์ของระบบ ระบบของเรามีค่าคาดหวังของพลังงานจลน์เท่ากับ

$$T = \left\langle \phi \left| \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m} \right| \phi \right\rangle \quad (6)$$

กำหนดให้สถานะ $|\phi(m)\rangle$ เป็นสถานะที่ขึ้นกับมวล m และเนื่องจาก $-\varepsilon_N(m)$ เป็นสถานะพื้นของระบบนี้ (พลังงานที่มีค่าน้อยที่สุดของระบบ) ดังนั้นสถานะต่างๆ ของระบบจะมีค่าคาดหวังของพลังงานมากกว่าหรือเท่ากับพลังงานสถานะพื้นเสมอ ดังนั้นถ้าเราเปลี่ยนตัวเลขของมวล m เป็น $m/2$ ในสถานะ $|\phi(m)\rangle$ เราได้สถานะ $|\phi(m/2)\rangle$ จะต้องมีความคาดหวังของพลังงานมากกว่าพลังงานสถานะพื้นของระบบเสมอ นั่นคือ

$$-\varepsilon_N(m) \leq \langle \phi(m/2) | H | \phi(m/2) \rangle \quad (7)$$

โปรดสังเกตว่าแฮมิลโทเนียน H ในสมการที่ (1) นั้น ส่วนที่ขึ้นกับมวลมีแค่ส่วนที่เป็นพลังงานจลน์ สำหรับส่วนที่เป็น interaction terms ไม่ขึ้นกับมวลเลย เรากำหนดให้ส่วนที่เป็น interaction terms คือ V ดังนั้น

$$V = \sum_{i < j}^N \frac{e^2}{|\vec{x}_i - \vec{x}_j|} - \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^k \frac{Z_j e^2}{|\vec{x}_i - \vec{R}_j|} + \sum_{i < k}^k \frac{Z_i Z_j}{|\vec{R}_i - \vec{R}_j|} \quad (8)$$

จากสมการ (5) เราได้ [2]

$$-\varepsilon_N(2m) \leq \left\langle \phi(m) \left| \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{4m} + V \right| \phi(m) \right\rangle \quad (9)$$

เราบวกเทอม $T/2$ ในสมการที่ (9) โดยที่ T มีนิยามในสมการที่ (6) เราได้ด้านขวามือของสมการคือค่าคาดหวังของพลังงานนั่นเอง และจากสมการที่ (5) ค่าคาดหวังต้องน้อยกว่าศูนย์ นั่นคือ

$$-\varepsilon_N(2m) + \frac{T}{2} \leq \langle \phi(m) | H | \phi(m) \rangle < 0 \quad (10)$$

เนื่องจาก $T \geq 0$ ดังนั้นจากสมการที่ (10) เราสรุปได้ทันทีว่า

$$T < 2\varepsilon_N(2m) \quad (11)$$

นั่นคือถ้าเราหาพลังงานสถานะพื้น $-\varepsilon_N(m)$ ของระบบ N อิเล็กตรอนมวล m ได้ ให้เราแทน $-\varepsilon_N(m)$ ด้วย $-\varepsilon_N(2m)$ ขอบเขตบนของพลังงานจลน์ของระบบสาร N อิเล็กตรอนมวล m มีค่าน้อยกว่า $2\varepsilon_N(2m)$ เสมอ ในหัวข้อถัดไปเราจะแสดงวิธีการหาพลังงานสถานะพื้นให้ได้เพื่อจะนำมาแทนในสมการที่ (11) ซึ่ง Manoukian และ Sirinilakul [8] ได้คำนวณไว้และมีรายละเอียดตั้งหัวข้อต่อจากนี้

3.2 ขอบเขตล่างของพลังงานสถานะพื้นและพลังงานจลน์ของระบบ

พิจารณาฟังก์ชันจำนวนจริง $\nu(\vec{x})$ ใดๆ โดยการแปลงฟูเรียร์ของฟังก์ชันนี้คือ $\tilde{\nu}(\vec{k})$ ดังนั้น

$$\tilde{\nu}(\vec{k}) = \int d^3\vec{x} \nu(\vec{x}) e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} \quad (12)$$

เรากำหนดให้ $\nu(\vec{x}) \geq 0$ และ $\nu(0) < \infty$ ดังนั้นการแปลงฟูเรียร์ $\tilde{\nu}(\vec{k}) \geq 0$ และเป็นจำนวนจริงด้วยเหมือนกัน กำหนดฟังก์ชัน $\phi(\vec{x})$ เป็นฟังก์ชันจำนวนจริง โดยที่

$$\phi(\vec{x}) = \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} \tilde{\phi}(\vec{k}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \quad (13)$$

$$\phi(\vec{x}_j) = \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} \tilde{\phi}(\vec{k}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}_j} \quad (14)$$

เมื่อการแปลงฟูเรียร์ของ $\phi(\vec{x})$ คือ

$$\tilde{\phi}(\vec{k}) = \int d^3\vec{x} \phi(\vec{x}) e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} \quad (15)$$

กำหนดให้ $A_1, \dots, A_k, k \geq 2$ เป็นจำนวนจริงที่มากกว่าศูนย์ ดังนั้นเราได้

$$A_1 \phi(\vec{x}_1) = A_1 \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} \tilde{\phi}(\vec{k}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}_1},$$

$$A_2 \phi(\vec{x}_2) = A_2 \int \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} \tilde{\phi}(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}_2} ,$$

....,

$$A_k \phi(\vec{x}_k) = A_k \int \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} \tilde{\phi}(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}_k}$$

หรือ

$$\sum_{j=1}^k A_j \phi(\vec{x}_j) = \int \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} \tilde{\phi}(\vec{k}) \left(\sum_{j=1}^k A_j e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}_j} \right) \quad (16)$$

คูณด้านขวามือของสมการที่ (16) ด้วย $\frac{\sqrt{\tilde{v}(\vec{k})}}{\sqrt{\tilde{v}(\vec{k})}}$ ดังนั้นเราได้

$$\sum_{j=1}^k A_j \phi(\vec{x}_j) = \int \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} \frac{\tilde{\phi}(\vec{k})}{\sqrt{\tilde{v}(\vec{k})}} \left(\sum_{j=1}^k A_j \sqrt{\tilde{v}(\vec{k})} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}_j} \right) \quad (17)$$

ยกกำลังสองสมการที่ (17) และใช้ Cauchy-Schwartz inequality

$$\left(\sum_{j=1}^n a_j b_j \right)^2 \leq \sum_{j=1}^n |a_j|^2 \sum_{j=1}^n |b_j|^2 \quad (18)$$

เราได้

$$\left(\sum_{j=1}^k A_j \phi(\vec{x}_j) \right)^2 \leq \int \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} \left| \frac{\tilde{\phi}(\vec{k})}{\sqrt{\tilde{v}(\vec{k})}} \right|^2 \int \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} \left| \sum_{j=1}^k A_j \sqrt{\tilde{v}(\vec{k})} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}_j} \right|^2 \quad (19)$$

พิจารณาเทอม $\int \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} \left| \sum_{j=1}^k A_j \sqrt{\tilde{v}(\vec{k})} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}_j} \right|^2$

$$\begin{aligned} \int \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} \left| \sum_{j=1}^k A_j \sqrt{\tilde{v}(\vec{k})} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}_j} \right|^2 &= \int \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} \left(\sum_{i=1}^k A_i \sqrt{\tilde{v}(\vec{k})} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}_i} \right) \left(\sum_{j=1}^k A_j \sqrt{\tilde{v}(\vec{k})} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}_j} \right) \\ &= \int \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} \sum_{i=1}^k A_i \sum_{j=1}^k A_j \tilde{v}(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot (\vec{x}_i - \vec{x}_j)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \sum_{i,j=1}^k A_i A_j \int \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} \tilde{v}(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot (\vec{x}_i - \vec{x}_j)} \\
 &= \sum_{i,j=1}^k A_i A_j v(\vec{x}_i - \vec{x}_j)
 \end{aligned} \tag{20}$$

เมื่อ

$$v(\vec{x}_i - \vec{x}_j) = \int \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} \tilde{v}(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot (\vec{x}_i - \vec{x}_j)} \tag{21}$$

ดังนั้นเราได้อสมการที่ (19) คือ

$$\frac{\left(\sum_{j=1}^k A_j \phi(\vec{x}_j) \right)^2}{\int \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} \frac{|\tilde{\phi}(\vec{k})|^2}{\tilde{v}(\vec{k})}} \leq \sum_{i,j=1}^k A_i A_j v(\vec{x}_i - \vec{x}_j) \tag{22}$$

สำหรับเลขจำนวนจริงใดๆ a, b เมื่อ $b > 0$ เราได้

$$\begin{aligned}
 (a-b)^2 &\geq 0 \\
 a^2 - 2ab + b^2 &\geq 0 \\
 a^2 &\geq 2ab - b^2 \\
 \frac{a^2}{2b} &\geq \frac{2ab}{2b} - \frac{b^2}{2b}
 \end{aligned}$$

นั่นคือ

$$\frac{a^2}{2b} \geq a - \frac{b}{2} \tag{23}$$

ถ้าเราให้ $a = \sum_j A_j \phi(\vec{x}_j)$, $b = \int d^3 \vec{k} |\tilde{\phi}(\vec{k})|^2 / (2\pi)^3 \tilde{v}(\vec{k})$ แทนค่าในอสมการที่ (23) ด้านบน

เราได้

$$\frac{1}{2} \frac{\left(\sum_{j=1}^k A_j \phi(\vec{x}_j) \right)^2}{\int \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} \frac{|\tilde{\phi}(\vec{k})|^2}{\tilde{v}(\vec{k})}} \geq \sum_{j=1}^k A_j \phi(\vec{x}_j) - \frac{1}{2} \int \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} \frac{|\tilde{\phi}(\vec{k})|^2}{\tilde{v}(\vec{k})} \tag{24}$$

เทียบอสมการที่ (24) กับอสมการที่ (22) เราได้

$$\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^k A_i A_j \nu(\vec{x}_i - \vec{x}_j) \geq \sum_{j=1}^k A_j \phi(\vec{x}_j) - \frac{1}{2} \int \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} \frac{|\tilde{\phi}(\vec{k})|^2}{\tilde{\nu}(\vec{k})} \quad (25)$$

พิจารณาเทอมด้านซ้ายของอสมการด้านบน

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^k A_i A_j \nu(\vec{x}_i - \vec{x}_j) &= \sum_{i<j}^k A_i A_j \nu(\vec{x}_i - \vec{x}_j) + \frac{1}{2} \sum_{i=j}^k A_i A_j \nu(\vec{x}_i - \vec{x}_j) \\ &= \sum_{i<j}^k A_i A_j \nu(\vec{x}_i - \vec{x}_j) + \frac{\nu(0)}{2} \sum_{i=j}^k A_j^2 \end{aligned}$$

หรือจัดรูปใหม่เป็น

$$\sum_{i<j}^k A_i A_j \nu(\vec{x}_i - \vec{x}_j) = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^k A_i A_j \nu(\vec{x}_i - \vec{x}_j) - \frac{\nu(0)}{2} \sum_{j=1}^k A_j^2 \quad (26)$$

แทนค่าสมการที่ (26) ในอสมการที่ (25) เราได้

$$\sum_{i<j}^k A_i A_j \nu(\vec{x}_i - \vec{x}_j) \geq \sum_{j=1}^k A_j \phi(\vec{x}_j) - \frac{1}{2} \int \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} \frac{|\tilde{\phi}(\vec{k})|^2}{\tilde{\nu}(\vec{k})} - \frac{\nu(0)}{2} \sum_{j=1}^k A_j^2 \quad (27)$$

ให้ $V(\vec{x})$ เป็นฟังก์ชันจำนวนจริง โดยที่ $V(\vec{x}) \geq \nu(\vec{x})$ และ $\rho(\vec{x})$ เป็นฟังก์ชันจำนวนจริงใดๆ เรานิยามให้

$$\phi(\vec{x}) = \int d^3 \vec{x}' \rho(\vec{x}') V(\vec{x}' - \vec{x}) \quad (28)$$

และ

$$\phi(\vec{x}_j) = \int d^3 \vec{x} \rho(\vec{x}) V(\vec{x} - \vec{x}_j) \quad (29)$$

แทนค่าสมการที่ (29) ในอสมการที่ (27) เราได้

$$\sum_{i<j}^k A_i A_j \nu(\vec{x}_i - \vec{x}_j) \geq \sum_{j=1}^k A_j \int d^3 \vec{x} \rho(\vec{x}) V(\vec{x} - \vec{x}_j) - \frac{1}{2} \int \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} \frac{|\tilde{\phi}(\vec{k})|^2}{\tilde{\nu}(\vec{k})} - \frac{\nu(0)}{2} \sum_{j=1}^k A_j^2 \quad (30)$$

เราจะจัดรูปเทอมที่สองทางด้านขวามือของอสมการที่ (30) เนื่องจาก

$$\tilde{\phi}(\vec{k}) = \int d^3 \vec{x}' \phi(\vec{x}') e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}'}$$

แทนค่า $\phi(\vec{x}') = \int d^3\vec{x} \rho(\vec{x}) V(\vec{x} - \vec{x}')$ เราได้

$$\tilde{\phi}(\vec{k}) = \int d^3\vec{x}' \int d^3\vec{x} \rho(\vec{x}) V(\vec{x} - \vec{x}') e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}'} \quad (31)$$

และให้

$$\tilde{\phi}^*(\vec{k}) = \int d^3\vec{y}' \int d^3\vec{y} \rho^*(\vec{y}) V^*(\vec{y} - \vec{y}') e^{i\vec{k} \cdot \vec{y}'} \quad (32)$$

เนื่องจาก $\rho(\vec{x})$ และ $V(\vec{x})$ เป็นฟังก์ชันจำนวนจริง ดังนั้น $\rho^*(\vec{x}) = \rho(\vec{x})$ และ $V(\vec{x} - \vec{x}') = V^*(\vec{x} - \vec{x}')$ ดังนั้นปรับรูปสมการที่ (31) ใหม่เป็น

$$\tilde{\phi}(\vec{k}) = \int d^3\vec{x}' \int d^3\vec{x} \rho(\vec{x}) V^*(\vec{x} - \vec{x}') e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}'} \quad (33)$$

โดยใช้นิยามของ inverse Fourier transform เราได้

$$V^*(\vec{x} - \vec{x}') = \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} \tilde{V}^*(\vec{k}) e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{x} - \vec{x}')} \quad (34)$$

แทนค่าสมการที่ (34) ในสมการที่ (33) เราได้

$$\begin{aligned} \tilde{\phi}(\vec{k}) &= \int d^3\vec{x}' \int d^3\vec{x} \rho(\vec{x}) \int \frac{d^3\vec{k}'}{(2\pi)^3} \tilde{V}^*(\vec{k}') e^{-i\vec{k}' \cdot (\vec{x} - \vec{x}')} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}'} \\ &= \int d^3\vec{x} \rho(\vec{x}) \int d^3\vec{k}' \tilde{V}^*(\vec{k}') e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{x}} \int \frac{d^3\vec{x}'}{(2\pi)^3} e^{-i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{x}'} \end{aligned} \quad (35)$$

จะเห็นว่าอินทิเกรตเทอมสุดท้ายในสมการที่ (35) คือ delta function ใน 3 มิติ นั่นเอง

$$\delta^3(\vec{k}' - \vec{k}) = \int \frac{d^3\vec{x}'}{(2\pi)^3} e^{-i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{x}'} \quad (36)$$

และโดยใช้คุณสมบัติของ delta function เราจัดรูปสมการที่ (35) ใหม่ได้เป็น

$$\begin{aligned} \tilde{\phi}(\vec{k}) &= \int d^3\vec{x} \rho(\vec{x}) \int d^3\vec{k}' \tilde{V}^*(\vec{k}') e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{x}} \delta^3(\vec{k}' - \vec{k}) \\ &= \int d^3\vec{x} \rho(\vec{x}) \tilde{V}^*(\vec{k}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}} \end{aligned} \quad (37)$$

และเนื่องจาก inverse Fourier transform $\rho(\vec{x}) = \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} \tilde{\rho}(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}}$ ดังนั้นสมการที่ (37)

เปลี่ยนรูปเป็น

$$\begin{aligned} \tilde{\phi}(\vec{k}) &= \int d^3\vec{x} \int \frac{d^3\vec{k}'}{(2\pi)^3} \tilde{\rho}(\vec{k}') e^{i\vec{k}' \cdot \vec{x}} \tilde{V}^*(\vec{k}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}} \\ &= \int d^3\vec{k}' \tilde{\rho}(\vec{k}') \tilde{V}^*(\vec{k}) \int \frac{d^3\vec{x}}{(2\pi)^3} e^{i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{x}} \\ &= \int d^3\vec{k}' \tilde{\rho}(\vec{k}') \tilde{V}^*(\vec{k}) \delta^3(\vec{k}' - \vec{k}) \\ &= \tilde{\rho}(\vec{k}) \tilde{V}^*(\vec{k}) \end{aligned} \quad (38)$$

และในทำนองเดียวกันเราได้

$$\tilde{\phi}^*(\vec{k}) = \tilde{\rho}^*(\vec{k}) \tilde{V}(\vec{k}) \quad (39)$$

สิ่งที่เราได้จากสมการที่ (38) และ (39) คือ

$$|\tilde{\phi}(\vec{k})|^2 = \tilde{\phi}(\vec{k}) \tilde{\phi}^*(\vec{k}) = \tilde{\rho}(\vec{k}) \tilde{V}^*(\vec{k}) \tilde{\rho}^*(\vec{k}) \tilde{V}(\vec{k}) = |\tilde{\rho}(\vec{k})|^2 |\tilde{V}(\vec{k})|^2 \quad (40)$$

แทนค่าที่ได้จากสมการที่ (40) ในเทอมที่สองของสมการที่ (30) เราได้

$$\int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} \frac{|\tilde{\phi}(\vec{k})|^2}{\tilde{v}(\vec{k})} = \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} \frac{|\tilde{\rho}(\vec{k})|^2 |\tilde{V}(\vec{k})|^2}{\tilde{v}(\vec{k})} \quad (41)$$

พิจารณาฟังก์ชันจำนวนจริง $V(\vec{y}) \geq v(\vec{y})$ ดังนั้น $V(\vec{y} - \vec{y}') \geq v(\vec{y} - \vec{y}')$ เรากำหนดให้

$$\phi(\vec{y}) = \int d^3\vec{y}' \rho(\vec{y}') v(\vec{y}' - \vec{y}) \quad (42)$$

และ

$$v(\vec{y} - \vec{y}') = \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} \tilde{v}(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot (\vec{y} - \vec{y}')} \quad (43)$$

การแปลงฟูเรียร์ของ $\varphi(\vec{y})$ คือ $\tilde{\varphi}(\vec{k}) = \int d^3\vec{y} \varphi(\vec{y}) e^{-i\vec{k}\cdot\vec{y}}$ แทนค่า $\varphi(\vec{y})$ จากสมการที่ (42) เราได้คอนจูเกตของการแปลงฟูเรียร์ของ $\varphi(\vec{y})$ คือ

$$\tilde{\varphi}^*(\vec{k}) = \int d^3\vec{y}' \int d^3\vec{y} \rho^*(\vec{y}) v^*(\vec{y} - \vec{y}') e^{i\vec{k}\cdot\vec{y}'} \quad (44)$$

จากสมการที่ (44) และเนื่องจากเรากำหนดให้ $\rho(\vec{y})$ เป็นฟังก์ชันจริง ดังนั้น

$$\begin{aligned} \tilde{\varphi}^*(\vec{k}) &= \int d^3\vec{y}' \int d^3\vec{y} \rho^*(\vec{y}) \int \frac{d^3\vec{k}'}{(2\pi)^3} \tilde{v}(\vec{k}') e^{i\vec{k}'\cdot(\vec{y}-\vec{y}')} e^{i\vec{k}\cdot\vec{y}'} \\ &= \int d^3\vec{y} \rho(\vec{y}) \int d^3\vec{k}' \tilde{v}(\vec{k}') e^{i\vec{k}'\cdot\vec{y}} \int \frac{d^3\vec{y}'}{(2\pi)^3} e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{y}'} \\ &= \int d^3\vec{y} \rho(\vec{y}) \int d^3\vec{k}' \tilde{v}(\vec{k}') e^{i\vec{k}'\cdot\vec{y}} \delta^3(\vec{k} - \vec{k}') \\ &= \int d^3\vec{y} \rho(\vec{y}) \tilde{v}(\vec{k}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{y}} \end{aligned} \quad (45)$$

คูณสมการที่ (45) ด้วย $1/\tilde{v}(\vec{k})$ ได้

$$\frac{\tilde{\varphi}^*(\vec{k})}{\tilde{v}(\vec{k})} = \int d^3\vec{y} \rho(\vec{y}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{y}} \quad (46)$$

นำสมการที่ (46) ไปคูณกับสมการที่ (33) และ $V(\vec{x} - \vec{x}')$ เป็นฟังก์ชันจริง ดังนั้นเราได้

$$\frac{\tilde{\phi}(\vec{k}) \tilde{\varphi}^*(\vec{k})}{\tilde{v}(\vec{k})} = \int d^3\vec{x}' \int d^3\vec{x} \rho(\vec{x}) V(\vec{x} - \vec{x}') e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}'} \int d^3\vec{y} \rho(\vec{y}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{y}}$$

จากนั้นอินทิเกรตสมการด้านบนใน space ของ $\vec{k}$ เราได้

$$\begin{aligned} \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} \frac{\tilde{\phi}(\vec{k}) \tilde{\varphi}^*(\vec{k})}{\tilde{v}(\vec{k})} &= \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} \int d^3\vec{x}' \int d^3\vec{x} \rho(\vec{x}) V(\vec{x} - \vec{x}') e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}'} \int d^3\vec{y} \rho(\vec{y}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{y}} \\ &= \int d^3\vec{x}' \int d^3\vec{x} \rho(\vec{x}) V(\vec{x} - \vec{x}') \int d^3\vec{y} \rho(\vec{y}) \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{y}-\vec{x}')} \\ &= \int d^3\vec{x}' \int d^3\vec{x} \rho(\vec{x}) V(\vec{x} - \vec{x}') \int d^3\vec{y} \rho(\vec{y}) \delta^3(\vec{y} - \vec{x}') \end{aligned}$$

$$= \int d^3\vec{x}' \int d^3\vec{x} \rho(\vec{x}) V(\vec{x} - \vec{x}') \rho(\vec{x}') \quad (47)$$

นอกจากนี้เรายังสามารถเขียนด้านขวามือของสมการที่ (47) ให้อยู่ในรูป $\vec{k}$ - space ได้ โดยกำหนดให้ $\rho(\vec{x})$ เป็นฟังก์ชันจำนวนจริง ดังนั้นด้านขวามือของสมการที่ (47) มีค่าเท่ากับ

$$\begin{aligned} \int d^3\vec{x}' \int d^3\vec{x} \rho(\vec{x}) V(\vec{x} - \vec{x}') \rho(\vec{x}') &= \int d^3\vec{x}' \int d^3\vec{x} \rho^*(\vec{x}) V(\vec{x} - \vec{x}') \rho(\vec{x}') \\ &= \int d^3\vec{x}' \int d^3\vec{x} \rho^*(\vec{x}) \int \frac{d^3\vec{k}''}{(2\pi)^3} \tilde{V}(\vec{k}'') e^{i\vec{k}'' \cdot (\vec{x} - \vec{x}')} \int \frac{d^3\vec{k}'}{(2\pi)^3} \tilde{\rho}(\vec{k}') e^{i\vec{k}' \cdot \vec{x}'} \\ &= \int d^3\vec{x} \rho^*(\vec{x}) \int \frac{d^3\vec{k}''}{(2\pi)^3} \tilde{V}(\vec{k}'') e^{i\vec{k}'' \cdot \vec{x}} \int d^3\vec{k}' \tilde{\rho}(\vec{k}') \int \frac{d^3\vec{x}'}{(2\pi)^3} e^{i(\vec{k}' - \vec{k}'') \cdot \vec{x}'} \\ &= \int d^3\vec{x} \rho^*(\vec{x}) \int \frac{d^3\vec{k}''}{(2\pi)^3} \tilde{V}(\vec{k}'') e^{i\vec{k}'' \cdot \vec{x}} \int d^3\vec{k}' \tilde{\rho}(\vec{k}') \delta^3(\vec{k}' - \vec{k}'') \\ &= \int d^3\vec{x} \rho^*(\vec{x}) \int \frac{d^3\vec{k}''}{(2\pi)^3} \tilde{V}(\vec{k}'') e^{i\vec{k}'' \cdot \vec{x}} \tilde{\rho}(\vec{k}'') \quad (48) \end{aligned}$$

แทนค่า $\rho^*(\vec{x}) = \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} \tilde{\rho}^*(\vec{k}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}}$ ในสมการที่ (48) เราได้

$$\begin{aligned} \int d^3\vec{x}' \int d^3\vec{x} \rho(\vec{x}) V(\vec{x} - \vec{x}') \rho(\vec{x}') &= \int d^3\vec{x} \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} \tilde{\rho}^*(\vec{k}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}} \int \frac{d^3\vec{k}''}{(2\pi)^3} \tilde{V}(\vec{k}'') e^{i\vec{k}'' \cdot \vec{x}} \tilde{\rho}(\vec{k}'') \\ &= \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} \tilde{\rho}^*(\vec{k}) \int d^3\vec{k}'' \tilde{V}(\vec{k}'') \tilde{\rho}(\vec{k}'') \int \frac{d^3\vec{x}}{(2\pi)^3} e^{i(\vec{k}'' - \vec{k}) \cdot \vec{x}} \\ &= \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} \tilde{\rho}^*(\vec{k}) \int d^3\vec{k}'' \tilde{V}(\vec{k}'') \tilde{\rho}(\vec{k}'') \delta^3(\vec{k}'' - \vec{k}) \end{aligned}$$

ดังนั้น

$$\int d^3\vec{x}' \int d^3\vec{x} \rho(\vec{x}) V(\vec{x} - \vec{x}') \rho(\vec{x}') = \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} |\tilde{\rho}(\vec{k})|^2 \tilde{V}(\vec{k}) \quad (49)$$

คูณ $\frac{1}{2}$ ตลอดสมการด้านบนแล้วย้ายเทอมด้านขวามาไว้ทางด้านซ้ายมือ เราได้

$$0 = \frac{1}{2} \int \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} |\tilde{\rho}(\vec{k})|^2 \tilde{V}(\vec{k}) - \frac{1}{2} \int d^3 \vec{x}' \int d^3 \vec{x} \rho(\vec{x}) V(\vec{x} - \vec{x}') \rho(\vec{x}') \quad (50)$$

รวมสมการที่ (50) กับสมการที่ (30) และแทนค่าจากสมการที่ (41) เราได้

$$\begin{aligned} \sum_{i < j}^k A_i A_j \nu(\vec{x}_i - \vec{x}_j) \geq & \sum_{j=1}^k A_j \int d^3 \vec{x} \rho(\vec{x}) V(\vec{x} - \vec{x}_j) - \frac{1}{2} \int \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} \frac{|\tilde{\rho}(\vec{k})|^2 |\tilde{V}(\vec{k})|^2}{\tilde{v}(\vec{k})} - \frac{\nu(0)}{2} \sum_{j=1}^k A_j^2 \\ & + \frac{1}{2} \int \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} |\tilde{\rho}(\vec{k})|^2 \tilde{V}(\vec{k}) - \frac{1}{2} \int d^3 \vec{x}' \int d^3 \vec{x} \rho(\vec{x}) V(\vec{x} - \vec{x}') \rho(\vec{x}') \end{aligned} \quad (51)$$

จัดรูปสมการที่ (51) และเนื่องจากเรากำหนดให้ $V(\vec{x} - \vec{x}') \geq \nu(\vec{x} - \vec{x}')$ ดังนั้นสมการที่ (51) จะเปลี่ยนรูปเป็น

$$\begin{aligned} \sum_{i < j}^k A_i A_j V(\vec{x}_i - \vec{x}_j) \geq & \sum_{j=1}^k A_j \int d^3 \vec{x} \rho(\vec{x}) V(\vec{x} - \vec{x}_j) - \frac{1}{2} \int d^3 \vec{x}' \int d^3 \vec{x} \rho(\vec{x}) V(\vec{x} - \vec{x}') \rho(\vec{x}') \\ & - \frac{1}{2} \int \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} |\tilde{\rho}(\vec{k})|^2 \left[\frac{|\tilde{V}(\vec{k})|^2}{\tilde{v}(\vec{k})} - \tilde{V}(\vec{k}) \right] - \frac{1}{2} \nu(0) \sum_{j=1}^k A_j^2 \end{aligned} \quad (52)$$

เนื่องจาก $V(\vec{x}) \geq \nu(\vec{x})$ เราจึงกำหนดให้

$$V(\vec{x}) = e^2 / |\vec{x}| \quad (53)$$

และเราให้

$$\nu(\vec{x}) = \frac{e^2 (1 - e^{-\lambda |\vec{x}|})}{|\vec{x}|} \quad (54)$$

เมื่อ $\lambda > 0$ ดังนั้นเราได้

$$\nu(0) = \lim_{|\vec{x}| \rightarrow 0} \frac{e^2 (1 - e^{-\lambda |\vec{x}|})}{|\vec{x}|} = e^2 \lim_{|\vec{x}| \rightarrow 0} \left[\sum_{n=1}^{\infty} -\frac{(-\lambda |\vec{x}|)^n}{|\vec{x}| n!} \right]$$

$$\begin{aligned}
 &= e^2 \lim_{|\vec{x}| \rightarrow 0} \left[\lambda - \frac{1}{2!} \lambda^2 |\vec{x}| + \frac{1}{3!} \lambda^3 |\vec{x}|^2 - \frac{1}{4!} \lambda^4 |\vec{x}|^3 + \dots \right] \\
 &= e^2 \lambda
 \end{aligned} \tag{55}$$

เนื่องจากเราไม่สามารถหาการแปลงฟูเรียร์ของศักย์คูลอมบ์ $V(\vec{x}) = e^2 / |\vec{x}|$ ได้โดยตรง ดังนั้น เราจะหาการแปลงฟูเรียร์ของศักย์ยูกาวา (Yukawa potential)

$$V_\lambda(\vec{x}) = e^2 \frac{\exp(-\lambda |\vec{x}|)}{|\vec{x}|}, \quad |\lambda| > 0 \tag{56}$$

และเมื่อเราให้ลิมิตของศักย์ยูกาวาที่ $\lambda \rightarrow 0$ เราจะได้ศักย์คูลอมบ์ที่เราต้องการ การแปลงฟูเรียร์ของศักย์ยูกาวาเป็นดังนี้

$$\begin{aligned}
 \tilde{V}_\lambda(\vec{x}) &= \int d^3\vec{x} e^2 \frac{\exp(-\lambda |\vec{x}|)}{|\vec{x}|} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}} \\
 &= e^2 \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\infty dx x^2 \frac{e^{-\lambda x}}{x} \int_0^\pi d\theta \sin \theta e^{-ikx \cos \theta}
 \end{aligned} \tag{57}$$

อินทิเกรตในส่วนของ θ มีค่าเท่ากับ

$$\int_0^\pi \sin \theta e^{-ikx \cos \theta} d\theta = - \int_{\cos 0}^{\cos \pi} d(\cos \theta) e^{-ikx (\cos \theta)} = \frac{1}{ikx} (e^{ikx} - e^{-ikx}) \tag{58}$$

ดังนั้น

$$\begin{aligned}
 \tilde{V}_\lambda(\vec{x}) &= \frac{2\pi e^2}{ik} \int_0^\infty dx e^{-\lambda x} (e^{ikx} - e^{-ikx}) \\
 &= \frac{2\pi e^2}{ik} (2i) \int_0^\infty dx e^{-\lambda x} \sin kx = \frac{4\pi e^2}{k} \left(\frac{k}{k^2 + \lambda^2} \right) \\
 &= \frac{4\pi e^2}{k^2 + \lambda^2}
 \end{aligned} \tag{59}$$

ดังนั้นการแปลงฟูเรียร์ของศักย์คูลอมบ์มีค่าเท่ากับ

$$\tilde{V}(\vec{x}) = \lim_{\lambda \rightarrow 0} \tilde{V}_\lambda(\vec{x}) = \lim_{\lambda \rightarrow 0} \frac{4\pi e^2}{k^2 + \lambda^2} = \frac{4\pi e^2}{k^2} \quad (60)$$

ดังนั้นจากสมการที่ (59) เราได้การแปลงฟูเรียร์ของ $v(\vec{x})$ คือ

$$\begin{aligned} \tilde{v}(\vec{k}) &= \int d^3\vec{x} v(\vec{x}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}} \\ &= \int d^3\vec{x} \frac{e^2(1 - e^{-\lambda|\vec{x}|})}{|\vec{x}|} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}} \\ &= \int d^3\vec{x} \frac{e^2}{|\vec{x}|} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}} - \int d^3\vec{x} \frac{e^2 e^{-\lambda|\vec{x}|}}{|\vec{x}|} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}} \\ &= \tilde{V}(\vec{x}) - \frac{4\pi e^2}{k^2 + \lambda^2} \end{aligned} \quad (61)$$

แทนค่าสมการที่ (60) ในสมการที่ (61) เราได้การแปลงฟูเรียร์ของ $v(\vec{x})$ มีค่าเท่ากับ

$$v(\vec{x}) = \frac{4\pi e^2}{k^2} - \frac{4\pi e^2}{k^2 + \lambda^2} = \frac{4\pi e^2 \lambda^2}{k^2(k^2 + \lambda^2)} \quad (62)$$

แทนค่าจากสมการที่ (55), (60) และสมการที่ (62) ในสมการที่ (52) เราได้

$$\begin{aligned} \sum_{i < j}^k A_i A_j V(\vec{x}_i - \vec{x}_j) &\geq \sum_{j=1}^k A_j \int d^3\vec{x} \rho(\vec{x}) V(\vec{x} - \vec{x}_j) - \frac{1}{2} \int d^3\vec{x}' \int d^3\vec{x} \rho(\vec{x}) V(\vec{x} - \vec{x}') \rho(\vec{x}') \\ &\quad - \frac{1}{2} \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} |\tilde{\rho}(\vec{k})|^2 \left[\frac{\left| \frac{4\pi e^2}{k^2} \right|^2}{\frac{4\pi e^2 \lambda^2}{k^2(k^2 + \lambda^2)}} - \frac{4\pi e^2}{k^2} \right] - \frac{e^2 \lambda}{2} \sum_{j=1}^k A_j^2 \end{aligned} \quad (63)$$

เทอมในเครื่องหมายอินทิเกรตในบรรทัดที่สองของสมการที่ (63) มีค่าเท่ากับ

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{2} \int \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} |\tilde{\rho}(\vec{k})|^2 \left[\frac{\frac{|4\pi e^2|^2}{k^2}}{4\pi e^2 \lambda^2} - \frac{4\pi e^2}{k^2} \right] &= \frac{1}{2} \int \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} \frac{4\pi e^2}{\lambda^2} |\tilde{\rho}(\vec{k})|^2 \\
 &= \frac{2\pi e^2}{\lambda^2} \int \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} |\tilde{\rho}(\vec{k})|^2
 \end{aligned} \tag{64}$$

ด้านขวามือของสมการที่ (64) มีค่าเท่ากับ

$$\begin{aligned}
 \frac{2\pi e^2}{\lambda^2} \int \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} |\tilde{\rho}(\vec{k})|^2 &= \frac{2\pi e^2}{\lambda^2} \int \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} \int d^3 \vec{x} \rho(\vec{x}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}} \int d^3 \vec{x}' \rho(\vec{x}') e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}'} \\
 &= \frac{2\pi e^2}{\lambda^2} \int d^3 \vec{x} \rho(\vec{x}) \int d^3 \vec{x}' \rho^*(\vec{x}') \int \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{x} - \vec{x}')} \\
 &= \frac{2\pi e^2}{\lambda^2} \int d^3 \vec{x} \rho(\vec{x}) \int d^3 \vec{x}' \rho^*(\vec{x}') \delta^3(\vec{x} - \vec{x}') \\
 &= \frac{2\pi e^2}{\lambda^2} \int d^3 \vec{x} \rho^2(\vec{x})
 \end{aligned} \tag{65}$$

แทนค่าสมการที่ (65) ในสมการที่ (63) และแทนค่า $V(\vec{x} - \vec{x}')$ เราได้

$$\begin{aligned}
 \sum_{i < j}^k \frac{e^2 A_i A_j}{|\vec{x}_i - \vec{x}_j|} &\geq \sum_{j=1}^k e^2 A_j \int d^3 \vec{x} \frac{\rho(\vec{x})}{|\vec{x} - \vec{x}_j|} - \frac{e^2}{2} \int d^3 \vec{x}' \int d^3 \vec{x} \rho(\vec{x}) \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \rho(\vec{x}') \\
 &\quad - \frac{2\pi e^2}{\lambda^2} \int d^3 \vec{x} \rho^2(\vec{x}) - \frac{e^2 \lambda}{2} \sum_{j=1}^k A_j^2
 \end{aligned} \tag{66}$$

ดังนั้นจากสมการที่ (66) ถ้าเรากำหนดให้ $A_i = A_j = 1$ และเปลี่ยน $k \rightarrow N$ เราได้ขอบเขตล่างของ interaction terms ระหว่างอิเล็กตรอนกับอิเล็กตรอนคือ

$$\sum_{i < j}^N \frac{e^2}{|\vec{x}_i - \vec{x}_j|} \geq \sum_{j=1}^N e^2 \int d^3 \vec{x} \frac{\rho(\vec{x})}{|\vec{x} - \vec{x}_j|} - \frac{e^2}{2} \int d^3 \vec{x}' \int d^3 \vec{x} \rho(\vec{x}) \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \rho(\vec{x}')$$

$$- \frac{2\pi e^2}{\lambda^2} \int d^3\vec{x} \rho^2(\vec{x}) - \frac{e^2 \lambda}{2} \sum_{i=1}^N 1 \quad (67)$$

จากสมการที่ (66) ถ้าเรากำหนดให้ $A_i = Z_i$, $A_j = Z_j$ เราได้ขอบเขตล่างของ interaction terms ระหว่างนิวเคลียสกับนิวเคลียสคือ

$$\begin{aligned} \sum_{i < j}^k \frac{e^2 Z_i Z_j}{|\vec{x}_i - \vec{x}_j|} &\geq \sum_{j=1}^k e^2 Z_j \int d^3\vec{x} \frac{\rho(\vec{x})}{|\vec{x} - \vec{R}_j|} - \frac{e^2}{2} \int d^3\vec{x}' \int d^3\vec{x} \rho(\vec{x}) \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \rho(\vec{x}') \\ &\quad - \frac{2\pi e^2}{\lambda^2} \int d^3\vec{x} \rho^2(\vec{x}) - \frac{e^2 \lambda}{2} \sum_{j=1}^k Z_j^2 \end{aligned} \quad (68)$$

แทนค่าสมการที่ (67) และ (68) ใน (1) เราได้ขอบเขตล่างสำหรับแฮมิลโทเนียนคือ

$$\begin{aligned} H &\geq \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m} + \sum_{j=1}^N e^2 \int d^3\vec{x} \frac{\rho(\vec{x})}{|\vec{x} - \vec{x}_j|} - \frac{e^2}{2} \int d^3\vec{x}' \int d^3\vec{x} \rho(\vec{x}) \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \rho(\vec{x}') \\ &\quad - \frac{2\pi e^2}{\lambda^2} \int d^3\vec{x} \rho^2(\vec{x}) - \frac{e^2 \lambda}{2} \sum_{i=1}^N 1 + \sum_{j=1}^k e^2 Z_j \int d^3\vec{x} \frac{\rho(\vec{x})}{|\vec{x} - \vec{R}_j|} \\ &\quad - \frac{e^2}{2} \int d^3\vec{x}' \int d^3\vec{x} \rho(\vec{x}) \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \rho(\vec{x}') - \frac{2\pi e^2}{\lambda^2} \int d^3\vec{x} \rho^2(\vec{x}) \\ &\quad - \frac{e^2 \lambda}{2} \sum_{j=1}^k Z_j^2 - \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^k \frac{Z_j e^2}{|\vec{x}_i - \vec{R}_j|} \end{aligned} \quad (69)$$

แทนค่า $\sum_{i=1}^N 1 = N$, สมการที่ (69) สามารถจัดรูปใหม่ได้เป็น

$$\begin{aligned} H &\geq \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m} - \frac{4\pi e^2}{\lambda^2} \int d^3\vec{x} \rho^2(\vec{x}) - \frac{e^2 \lambda}{2} \left(N + \sum_{j=1}^k Z_j^2 \right) \\ &\quad + \sum_{j=1}^N e^2 \int d^3\vec{x} \frac{\rho(\vec{x})}{|\vec{x} - \vec{x}_j|} + \sum_{j=1}^k e^2 Z_j \int d^3\vec{x} \frac{\rho(\vec{x})}{|\vec{x} - \vec{R}_j|} \end{aligned}$$

$$- e^2 \int d^3 \vec{x}' \int d^3 \vec{x} \rho(\vec{x}) \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \rho(\vec{x}') - \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^k \frac{Z_j e^2}{|\vec{x}_i - \vec{R}_j|} \quad (70)$$

ในกรณีที่ $k \geq 2$ ดังนั้นเราได้ขอบเขตล่างของค่าคาดหวังของแฮมิลโทเนียนมีค่าเท่ากับ

$$\begin{aligned} \langle \phi | H | \phi \rangle &\geq T - \left\langle \phi \left| \frac{4\pi e^2}{\lambda^2} \int d^3 \vec{x} \rho^2(\vec{x}) \right| \phi \right\rangle - \left\langle \phi \left| \frac{e^2 \lambda}{2} \left(N + \sum_{j=1}^k Z_j^2 \right) \right| \phi \right\rangle \\ &\quad + \left\langle \phi \left| \sum_{j=1}^N e^2 \int d^3 \vec{x} \frac{\rho(\vec{x})}{|\vec{x} - \vec{x}_j|} \right| \phi \right\rangle + \left\langle \phi \left| \sum_{j=1}^k e^2 Z_j \int d^3 \vec{x} \frac{\rho(\vec{x})}{|\vec{x} - \vec{R}_j|} \right| \phi \right\rangle \\ &\quad - \left\langle \phi \left| e^2 \int d^3 \vec{x}' \int d^3 \vec{x} \rho(\vec{x}) \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \rho(\vec{x}') \right| \phi \right\rangle - \left\langle \phi \left| \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^k \frac{Z_j e^2}{|\vec{x}_i - \vec{R}_j|} \right| \phi \right\rangle \end{aligned} \quad (71)$$

โดยการกำหนดให้ ϕ เป็นฟังก์ชันที่ normalized ของอนุภาคสปิน 0 ดังนั้น

$$\begin{aligned} \langle \phi | \phi \rangle &= \int d^3 \vec{x}_1 d^3 \vec{x}_2 \cdots d^3 \vec{x}_N \phi^*(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N) \phi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N) \\ &= \int d^3 \vec{x}_1 d^3 \vec{x}_2 \cdots d^3 \vec{x}_N |\phi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N)|^2 = 1 \end{aligned} \quad (72)$$

เทอมอินทิเกรตเทอมแรกบรรทัดที่ 1 ในทางด้านขวามือของสมการที่ (71) มีค่าเท่ากับ

$$\begin{aligned} \left\langle \phi \left| \frac{4\pi e^2}{\lambda^2} \int d^3 \vec{x} \rho^2(\vec{x}) \right| \phi \right\rangle &= \frac{4\pi e^2}{\lambda^2} \int d^3 \vec{x}' \int d^3 \vec{x} \rho^2(\vec{x}) \int d^3 \vec{x}_2 \cdots d^3 \vec{x}_N |\phi(\vec{x}', \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N)|^2 \\ &= \frac{4\pi e^2}{\lambda^2} \int d^3 \vec{x} \rho^2(\vec{x}) \int d^3 \vec{x}' \int d^3 \vec{x}_2 \cdots d^3 \vec{x}_N |\phi(\vec{x}', \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N)|^2 \\ &= \frac{4\pi e^2}{\lambda^2} \int d^3 \vec{x} \rho^2(\vec{x}) \langle \phi | \phi \rangle \\ &= \frac{4\pi e^2}{\lambda^2} \int d^3 \vec{x} \rho^2(\vec{x}) \end{aligned} \quad (73)$$

ทำนองเดียวกันเราได้

$$\left\langle \phi \left| \frac{e^2 \lambda}{2} \left(N + \sum_{j=1}^k Z_j^2 \right) \right| \phi \right\rangle = \frac{e^2 \lambda}{2} \left(N + \sum_{j=1}^k Z_j^2 \right) \langle \phi | \phi \rangle = \frac{e^2 \lambda}{2} \left(N + \sum_{j=1}^k Z_j^2 \right) \quad (74)$$

โดยการแทนค่า ϕ และความหนาแน่นของอนุภาคที่นิยามในสมการที่ (3) เราได้

$$\begin{aligned} & \left\langle \phi \left| \sum_{j=1}^N e^2 \int d^3 \vec{x} \frac{\rho(\vec{x})}{|\vec{x} - \vec{x}_j|} \right| \phi \right\rangle \\ &= \int d^3 \vec{x}' d^3 \vec{x}_2 \cdots d^3 \vec{x}_N \phi^*(\vec{x}', \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N) \sum_{j=1}^N e^2 \int d^3 \vec{x} \frac{\rho(\vec{x})}{|\vec{x} - \vec{x}_j|} \phi(\vec{x}', \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N) \\ &= e^2 \sum_{j=1}^N \int d^3 \vec{x} \rho(\vec{x}) \int d^3 \vec{x}' \int d^3 \vec{x}_2 \cdots d^3 \vec{x}_N \phi^*(\vec{x}', \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N) \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}_j|} \phi(\vec{x}', \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N) \\ &= e^2 \left\{ \int d^3 \vec{x} \rho(\vec{x}) \int d^3 \vec{x}' \int d^3 \vec{x}_2 \cdots d^3 \vec{x}_N \phi^*(\vec{x}', \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N) \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}_1|} \phi(\vec{x}', \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N) \right. \\ &\quad + \int d^3 \vec{x} \rho(\vec{x}) \int d^3 \vec{x}' \int d^3 \vec{x}_2 \cdots d^3 \vec{x}_N \phi^*(\vec{x}', \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N) \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}_2|} \phi(\vec{x}', \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N) \\ &\quad \vdots \\ &\quad \left. + \int d^3 \vec{x} \rho(\vec{x}) \int d^3 \vec{x}' \int d^3 \vec{x}_2 \cdots d^3 \vec{x}_N \phi^*(\vec{x}', \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N) \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}_N|} \phi(\vec{x}', \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N) \right\} \\ &= e^2 \left\{ \int d^3 \vec{x} \int d^3 \vec{x}' \rho(\vec{x}) \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \frac{\rho(\vec{x}')}{N} + \int d^3 \vec{x} \int d^3 \vec{x}_2 \rho(\vec{x}) \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}_2|} \frac{\rho(\vec{x}_2)}{N} \right. \\ &\quad \vdots \\ &\quad \left. + \int d^3 \vec{x} \int d^3 \vec{x}_N \rho(\vec{x}) \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}_N|} \frac{\rho(\vec{x}_N)}{N} \right\} \end{aligned}$$

$$= e^2 \int d^3 \bar{x} \int d^3 \bar{x}' \rho(\bar{x}) \frac{1}{|\bar{x} - \bar{x}'|} \rho(\bar{x}') \quad (75)$$

เทอมที่ 5 ด้านขวามือของสมการที่ (71) มีค่าเท่ากับ

$$\begin{aligned} & \left\langle \phi \left| \sum_{j=1}^k e^2 Z_j \int d^3 \bar{x} \frac{\rho(\bar{x})}{|\bar{x} - \bar{R}_j|} \right| \phi \right\rangle \\ &= \int d^3 \bar{x}' d^3 \bar{x}_2 \cdots d^3 \bar{x}_N \phi^*(\bar{x}', \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_N) \sum_{j=1}^k e^2 Z_j \int d^3 \bar{x} \frac{\rho(\bar{x})}{|\bar{x} - \bar{R}_j|} \phi(\bar{x}', \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_N) \\ &= \sum_{j=1}^k e^2 Z_j \int d^3 \bar{x} \frac{\rho(\bar{x})}{|\bar{x} - \bar{R}_j|} \int d^3 \bar{x}' d^3 \bar{x}_2 \cdots d^3 \bar{x}_N \phi^*(\bar{x}', \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_N) \phi(\bar{x}', \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_N) \\ &= \sum_{j=1}^k e^2 Z_j \int d^3 \bar{x} \frac{\rho(\bar{x})}{|\bar{x} - \bar{R}_j|} \int d^3 \bar{x}' d^3 \bar{x}_2 \cdots d^3 \bar{x}_N |\phi(\bar{x}', \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_N)|^2 \\ &= \sum_{j=1}^k e^2 Z_j \int d^3 \bar{x} \frac{\rho(\bar{x})}{|\bar{x} - \bar{R}_j|} \quad (76) \end{aligned}$$

เทอมที่ 6 ด้านขวามือของสมการที่ (71) มีค่าเท่ากับ

$$\begin{aligned} & \left\langle \phi \left| e^2 \int d^3 \bar{x}' \int d^3 \bar{x} \rho(\bar{x}) \frac{1}{|\bar{x} - \bar{x}'|} \rho(\bar{x}') \right| \phi \right\rangle \\ &= e^2 \int d^3 \bar{x}'' d^3 \bar{x}_2 \cdots d^3 \bar{x}_N \phi^*(\bar{x}', \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_N) \int d^3 \bar{x}' \int d^3 \bar{x} \rho(\bar{x}) \frac{1}{|\bar{x} - \bar{x}'|} \rho(\bar{x}') \phi(\bar{x}'', \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_N) \\ &= e^2 \int d^3 \bar{x}' \int d^3 \bar{x} \rho(\bar{x}) \frac{1}{|\bar{x} - \bar{x}'|} \rho(\bar{x}') \quad (77) \end{aligned}$$

เทอมที่ 7 ด้านขวามือของสมการที่ (71) มีค่าเท่ากับ

$$\begin{aligned} & \left\langle \phi \left| \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^k \frac{Z_j e^2}{|\bar{x}_i - \bar{R}_j|} \right| \phi \right\rangle \\ &= e^2 \int d^3 \bar{x}' d^3 \bar{x}_2 \cdots d^3 \bar{x}_N \phi^*(\bar{x}', \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_N) \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^k \frac{Z_j e^2}{|\bar{x}_i - \bar{R}_j|} \phi(\bar{x}', \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_N) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= e^2 \sum_{j=1}^k Z_j \left\{ \int d^3 \vec{x}' d^3 \vec{x}_2 \cdots d^3 \vec{x}_N \phi^*(\vec{x}', \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N) \frac{1}{|\vec{x}' - \vec{R}_j|} \phi(\vec{x}', \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N) \right. \\
&\quad + \int d^3 \vec{x}' d^3 \vec{x}_2 \cdots d^3 \vec{x}_N \phi^*(\vec{x}', \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N) \frac{1}{|\vec{x}_2 - \vec{R}_j|} \phi(\vec{x}', \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N) + \cdots \\
&\quad \left. + \int d^3 \vec{x}' d^3 \vec{x}_2 \cdots d^3 \vec{x}_N \phi^*(\vec{x}', \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N) \frac{1}{|\vec{x}_N - \vec{R}_j|} \phi(\vec{x}', \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N) \right\} \\
&= e^2 \sum_{j=1}^k Z_j \left\{ \int d^3 \vec{x}' \frac{1}{|\vec{x}' - \vec{R}_j|} \int d^3 \vec{x}_2 d^3 \vec{x}_3 \cdots d^3 \vec{x}_N |\phi(\vec{x}', \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N)|^2 \right. \\
&\quad + \int d^3 \vec{x}_2 \frac{1}{|\vec{x}_2 - \vec{R}_j|} \int d^3 \vec{x}' d^3 \vec{x}_3 \cdots d^3 \vec{x}_N |\phi(\vec{x}', \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N)|^2 + \cdots \\
&\quad \left. + \int d^3 \vec{x}_N \frac{1}{|\vec{x}_N - \vec{R}_j|} \int d^3 \vec{x}' d^3 \vec{x}_2 \cdots d^3 \vec{x}_{N-1} |\phi(\vec{x}', \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N)|^2 \right\} \\
&= e^2 \sum_{j=1}^k Z_j \left\{ \int d^3 \vec{x}' \frac{1}{|\vec{x}' - \vec{R}_j|} \frac{\rho(\vec{x}')}{N} + \int d^3 \vec{x}_2 \frac{1}{|\vec{x}_2 - \vec{R}_j|} \frac{\rho(\vec{x}_2)}{N} + \cdots \right. \\
&\quad \left. + \int d^3 \vec{x}_N \frac{1}{|\vec{x}_N - \vec{R}_j|} \frac{\rho(\vec{x}_N)}{N} \right\} \\
&= e^2 \sum_{j=1}^k Z_j \int d^3 \vec{x} \frac{\rho(\vec{x})}{|\vec{x} - \vec{R}_j|} \tag{78}
\end{aligned}$$

แทนค่าสมการที่ (73) – (78) ในสมการที่ (71) เราได้

$$\begin{aligned}
\langle \phi | H | \phi \rangle &\geq T - \frac{4\pi e^2}{\lambda^2} \int d^3 \vec{x} \rho^2(\vec{x}) - \frac{e^2 \lambda}{2} \left(N + \sum_{j=1}^k Z_j^2 \right) \\
&\quad + e^2 \int d^3 \vec{x} \int d^3 \vec{x}' \rho(\vec{x}) \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \rho(\vec{x}') + e^2 \sum_{j=1}^k Z_j \int d^3 \vec{x} \frac{\rho(\vec{x})}{|\vec{x} - \vec{R}_j|}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & - e^2 \int d^3 \vec{x}' \int d^3 \vec{x} \rho(\vec{x}) \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \rho(\vec{x}') - e^2 \sum_{j=1}^k Z_j \int d^3 \vec{x} \frac{\rho(\vec{x})}{|\vec{x} - \vec{R}_j|} \\
 & = T - \frac{4\pi e^2}{\lambda^2} \int d^3 \vec{x} \rho^2(\vec{x}) - \frac{e^2 \lambda}{2} \left(N + \sum_{j=1}^k Z_j^2 \right)
 \end{aligned} \tag{79}$$

Optimize อสมการด้านบนดังนี้

$$0 = \frac{\partial \langle \phi | H | \phi \rangle}{\partial \lambda} = -(-2) \frac{4\pi e^2}{\lambda^3} \int d^3 \vec{x} \rho^2(\vec{x}) - \frac{e^2}{2} \left(N + \sum_{j=1}^k Z_j^2 \right)$$

ดังนั้น λ ที่เหมาะสมคือ

$$\lambda = \frac{(16\pi)^{1/3} \left(\int d^3 \vec{x} \rho^2(\vec{x}) \right)^{1/3}}{\left(N + \sum_{j=1}^k Z_j^2 \right)^{1/3}} \tag{80}$$

แทนค่า λ ในอสมการที่ (79) ได้ขอบเขตล่างของค่าคาดหวังของแฮมิลโทเนียนคือ

$$\begin{aligned}
 \langle \phi | H | \phi \rangle & \geq T - \frac{4\pi e^2}{(16\pi)^{2/3} \left(\int d^3 \vec{x} \rho^2(\vec{x}) \right)^{2/3}} \int d^3 \vec{x} \rho^2(\vec{x}) \\
 & \quad - \frac{e^2 \frac{(16\pi)^{1/3} \left(\int d^3 \vec{x} \rho^2(\vec{x}) \right)^{1/3}}{\left(N + \sum_{j=1}^k Z_j^2 \right)^{1/3}}}{2} \left(N + \sum_{j=1}^k Z_j^2 \right) \\
 & = T - \frac{4\pi e^2}{(16\pi)^{2/3}} \left(\int d^3 \vec{x} \rho^2(\vec{x}) \right)^{1/3} \left(N + \sum_{j=1}^k Z_j^2 \right)^{2/3} \\
 & \quad - \frac{(16\pi)^{1/3} e^2}{2} \left(\int d^3 \vec{x} \rho^2(\vec{x}) \right)^{1/3} \left(N + \sum_{j=1}^k Z_j^2 \right)^{2/3}
 \end{aligned}$$

ดังนั้น

$$\begin{aligned}
 \langle \phi | H | \phi \rangle &\geq T - e^2 \left(\int d^3 \bar{x} \rho^2(\bar{x}) \right)^{1/3} \left(N + \sum_{j=1}^k Z_j^2 \right)^{2/3} \left[\frac{4\pi}{(16\pi)^{2/3}} + \frac{(16\pi)^{1/3}}{2} \right] \\
 &= T - e^2 \left(\int d^3 \bar{x} \rho^2(\bar{x}) \right)^{1/3} \left(N + \sum_{j=1}^k Z_j^2 \right)^{2/3} \left(\frac{8\pi + 16\pi}{\pi^{2/3} 2^{11/3}} \right) \\
 &= T - \frac{3e^2 \pi^{1/3}}{2^{2/3}} \left(\int d^3 \bar{x} \rho^2(\bar{x}) \right)^{1/3} \left(N + \sum_{j=1}^k Z_j^2 \right)^{2/3} \quad (81)
 \end{aligned}$$

โดยที่ $k \geq 2$ (มี 2 นิวคลีไอขึ้นไป) มิเช่นนั้นบางเทอมในสมการที่ (79) จะไม่สามารถหักล้างกันได้ พิจารณาสมการด้านขวาจะเห็นว่าขอบเขตล่างของ T ควรอยู่ในรูป ρ^2

ขั้นตอนต่อไปเราจะหาขอบเขตล่างของพลังงานจลน์ T และนำค่าที่ได้ไปแทนค่าในสมการที่ (81) เราจะได้ขอบเขตล่างของพลังงานของระบบอย่างสมบูรณ์ การหาขอบเขตล่างของพลังงานจลน์นั้น เราจะเริ่มต้นจากการนับจำนวนของ eigenvalues ทั้งหมดที่มีค่าน้อยกว่าหรือเท่ากับ $-\xi$ สำหรับแฮมิลโทเนียน $\frac{\vec{p}^2}{2m} - g(\vec{x})$ เมื่อ $\xi > 0$ และ $g(\vec{x}) \geq 0$ โดย Schwinger [9] ได้เสนอไว้คือ

$$N_{-\xi} \left(\frac{\vec{p}^2}{2m} - g(\vec{x}) \right) \leq \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^2 \int d^2 \bar{x} \int d^3 \bar{x}' g(\vec{x}) \frac{\exp(-2|\vec{x} - \vec{x}'| \sqrt{2m\xi}/\hbar)}{|\vec{x} - \vec{x}'|^2} g(\vec{x}') \quad (82)$$

เมื่อ $N_{-\xi} \left(\frac{\vec{p}^2}{2m} - g(\vec{x}) \right)$ คือจำนวนของ eigenvalues (นับ degeneracy ด้วย) ทั้งหมดที่มีค่าน้อยกว่า $-\xi$, $\xi > 0$ โดยใช้ Young's inequality

$$\left| \int d^3 \bar{x} \int d^3 \bar{x}' g(\vec{x}) f(\vec{x} - \vec{x}') h(\vec{x}') \right| \leq \left\{ \int d^3 \bar{x} |g(\vec{x})|^p \right\}^{1/p} \left\{ \int d^3 \bar{x} |f(\vec{x})|^q \right\}^{1/q} \left\{ \int d^3 \bar{x} |h(\vec{x})|^s \right\}^{1/s} \quad (83)$$

กำหนดให้ $p = 2$, $q = 1$, $s = 2$ และ

$$f(\vec{x} - \vec{x}') = \frac{\exp(-2|\vec{x} - \vec{x}'| \sqrt{2m\xi}/\hbar)}{|\vec{x} - \vec{x}'|^2} \text{ และ } h(\vec{x}') = g(\vec{x}') \quad (84)$$

แทนค่าสมการที่ (84) ในสมการที่ (83) เราได้

$$\begin{aligned}
 & \left| \int d^3\vec{x} \int d^3\vec{x}' g(\vec{x}) \frac{\exp(-2|\vec{x}-\vec{x}'|\sqrt{2m\xi}/\hbar)}{|\vec{x}-\vec{x}'|^2} g(\vec{x}') \right| \\
 & \leq \left\{ \int d^3\vec{x} |g(\vec{x})|^2 \right\}^{1/2} \left\{ \int d^3\vec{x} \left| \frac{\exp(-2|\vec{x}|\sqrt{2m\xi}/\hbar)}{|\vec{x}|^2} \right| \right\} \left\{ \int d^3\vec{x} |g(\vec{x})|^2 \right\}^{1/2} \\
 & = \int d^3\vec{x} |g(\vec{x})|^2 \int d^3\vec{x} \left(\frac{\exp(-2|\vec{x}|\sqrt{2m\xi}/\hbar)}{|\vec{x}|^2} \right) \quad (85)
 \end{aligned}$$

อินทิเกรตเทอมที่สองทางด้านขวามือของสมการที่ (85) มีค่าเท่ากับ

$$\begin{aligned}
 \int d^3\vec{x} \frac{\exp(-2|\vec{x}|\sqrt{2m\xi}/\hbar)}{|\vec{x}|^2} &= \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin\theta \int_0^\infty dx x^2 \frac{\exp(-2x\sqrt{2m\xi}/\hbar)}{x^2} \\
 &= 4\pi \int_0^\infty dx \exp(-2x\sqrt{2m\xi}/\hbar) \\
 &= \frac{4\pi\hbar}{\sqrt{8m\xi}} \quad (86)
 \end{aligned}$$

แทนค่าที่ได้จาก (84) – (86) อสมการที่ (82) เขียนใหม่ได้เป็น

$$N_{-\xi} \left(\frac{\vec{p}^2}{2m} - g(\vec{x}) \right) \leq \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^2 \int d^3\vec{x} g^2(\vec{x}) \frac{4\pi\hbar}{\sqrt{8m\xi}} = \left(\frac{m}{2\hbar^2} \right)^{3/2} \frac{1}{\pi\sqrt{\xi}} \int d^3\vec{x} g^2(\vec{x}) \quad (87)$$

ถ้าเราให้ฮามิลโทเนียนมี engenvales มีค่ามากกว่า $-\xi$ เสมอ ดังนั้นจำนวน engenvales ที่มีค่าน้อยกว่าหรือเท่ากับ $-\xi$ จะต้องมีค่าเท่ากับ 0 นั่นคือ $N_{-\xi} \left(\frac{\vec{p}^2}{2m} - g(\vec{x}) \right) < 1$ หรือ

$$N_{-\xi} \left(\frac{\vec{p}^2}{2m} - g(\vec{x}) \right) = 0 \quad \text{นั่นเอง ดังนั้น}$$

$$\left(\frac{m}{2\hbar^2} \right)^{3/2} \frac{1}{\pi\sqrt{\xi}} \int d^3\vec{x} g^2(\vec{x}) < 1 \quad (88)$$

ดังนั้น

$$\xi > \frac{1}{\pi^2} \left(\frac{m}{2\hbar^2} \right)^3 \left(\int d^3\vec{x} g^2(\vec{x}) \right)^2 \quad (89)$$

หรือ

$$-\xi < -\frac{1}{\pi^2} \left(\frac{m}{2\hbar^2} \right)^3 \left(\int d^3\vec{x} g^2(\vec{x}) \right)^2 \quad (90)$$

เราสามารถกำหนดให้สำหรับ $\delta > 0$ ที่มีค่าน้อยๆ ที่ทำให้

$$-\xi = -\frac{(1+\delta)}{\pi^2} \left(\frac{m}{2\hbar^2} \right)^3 \left(\int d^3\vec{x} g^2(\vec{x}) \right)^2 \quad (91)$$

ด้านขวามือของสมการที่ (91) คือขอบเขตล่างของฮามิลโทเนียน $\frac{\vec{p}^2}{2m} - g(\vec{x})$ นั้นเอง เราสามารถกำหนดฟังก์ชัน $g(\vec{x}) \geq 0$ ใดๆ และเพื่อให้ได้ขอบเขตล่างของพลังงานจลน์เราจะกำหนดให้ $g(\vec{x})$ อยู่ในรูป

$$g(\vec{x}) = \gamma \frac{\rho^\alpha(\vec{x})}{\int d^3\vec{x} \rho^{\alpha+1}(\vec{x})} T \quad (92)$$

โปรดเข้าใจว่าฟังก์ชัน $g(\vec{x})$ ข้างบนไม่ใช่เทอมที่เป็นพลังงานศักย์ของฮามิลโทเนียน แต่เป็นเพียงฟังก์ชันที่กำหนดขึ้นเพื่อให้เราสามารถหาขอบเขตล่างของพลังงานจลน์ได้ ดังนั้นสำหรับฟังก์ชันคลื่น ψ ที่ normalized ใดๆ สำหรับฮามิลโทเนียนของระบบ N อนุภาค

$$h = \sum_{i=1}^N \left[\frac{\vec{p}_i^2}{2m} - g(\vec{x}_i) \right] \quad (93)$$

เมื่อ

$$\rho(\vec{x}) = N \int d^3\vec{x}_2 \cdots d^3\vec{x}_N |\psi(\vec{x}, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N)|^2 \text{ และ } \int d^3\vec{x} \rho(\vec{x}) = N \quad (94)$$

เราได้

$$\left\langle \psi \left| \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m} - g(\vec{x}_i) \right| \psi \right\rangle = T - \left\langle \psi \left| \sum_{i=1}^N \gamma \frac{\rho^\alpha(\vec{x}_i)}{\int d^3\vec{x} \rho^{\alpha+1}(\vec{x})} T \right| \psi \right\rangle$$

$$\begin{aligned}
 &= T - \gamma T \frac{1}{\int d^3 \vec{x}' \rho^{\alpha+1}(\vec{x}')} \int d^3 \vec{x}_1 d^3 \vec{x}_2 \cdots d^3 \vec{x}_N \sum_{i=1}^N \rho^\alpha(\vec{x}_i) |\psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N)|^2 \\
 &= T - \gamma T \frac{1}{\int d^3 \vec{x}' \rho^{\alpha+1}(\vec{x}')} \sum_{i=1}^N \int d^3 \vec{x}_i \rho^\alpha(\vec{x}_i) \int d^3 \vec{x}_1 d^3 \vec{x}_2 \cdots d^3 \vec{x}_{i-1} d^3 \vec{x}_{i+1} \cdots d^3 \vec{x}_N |\psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N)|^2 \\
 &= T - \gamma T \frac{1}{\int d^3 \vec{x}' \rho^{\alpha+1}(\vec{x}')} \sum_{i=1}^N \int d^3 \vec{x}_i \rho^\alpha(\vec{x}_i) \frac{\rho(\vec{x}_i)}{N} \\
 &= T - \gamma T \frac{1}{\int d^3 \vec{x}' \rho^{\alpha+1}(\vec{x}')} \sum_{i=1}^N \int d^3 \vec{x}_i \frac{\rho^{\alpha+1}}{N} \\
 &= T - \gamma T \frac{\int d^3 \vec{x} \rho^{\alpha+1}(\vec{x})}{\int d^3 \vec{x}' \rho^{\alpha+1}(\vec{x}')}
 \end{aligned}$$

ดังนั้น

$$\left\langle \psi \left| \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m} - g(\vec{x}_i) \right| \psi \right\rangle = -(\gamma - 1)T \quad (95)$$

จากสมการที่ (91) ด้านขวามือของสมการคือขอบเขตล่างของสเปกตรัมพลังงานของฮามิลโทเนียน $\frac{\vec{p}^2}{2m} - g(\vec{x})$ และสำหรับในกรณีของสสารประเภทโบซอน อนุภาคทั้งหมด N อนุภาคสามารถครอบครองสถานะที่ขอบเขตล่างของพลังงานได้ ดังนั้นเราได้ค่าคาดหวังของฮามิลโทเนียน h มีขอบเขตล่างคือ

$$\left\langle \psi \left| \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m} - g(\vec{x}_i) \right| \psi \right\rangle \geq -N\xi \quad (96)$$

แทนค่า ξ จากสมการที่ (91) เมื่อเทียบสมการที่ (95) และสมการ (96) เราได้

$$-(\gamma - 1)T \geq -N \frac{(1 + \delta)}{\pi^2} \left(\frac{m}{2\hbar^2} \right)^3 \left(\int d^3 \vec{x} g^2(\vec{x}) \right)^2 \quad (97)$$

พิจารณาเทอมอินทิเกรตด้านขวาของสมการด้านบนเราได้

$$\begin{aligned}
 \left(\int d^3 \bar{x} g^2(\bar{x}) \right)^2 &= \left(\int d^3 \bar{x} \left[\gamma \frac{\rho^\alpha(\bar{x})}{\int d^3 \bar{x} \rho^{\alpha+1}(\bar{x})} T \right]^2 \right) \left(\int d^3 \bar{x} \left[\gamma \frac{\rho^\alpha(\bar{x})}{\int d^3 \bar{x} \rho^{\alpha+1}(\bar{x})} T \right]^2 \right) \\
 &= \gamma^4 T^4 \frac{\left(\int d^3 \bar{x} \rho^{2\alpha}(\bar{x}) \right)^2}{\left(\int d^3 \bar{x}' \rho^{\alpha+1}(\bar{x}') \right)^4}
 \end{aligned} \tag{98}$$

สมการด้านบนบอกเราว่า เราควรเลือกให้ $2\alpha = \alpha + 1$ นั่นคือ $\alpha = 1$ นั่นเอง ดังนั้น

$$\left(\int d^3 \bar{x} g^2(\bar{x}) \right)^2 = \gamma^4 T^4 \frac{1}{\left(\int d^3 \bar{x}' \rho^2(\bar{x}') \right)^2} \tag{99}$$

แทนค่าสมการที่ (99) ในสมการ (97) เราได้

$$-(\gamma - 1)T \geq -N \frac{(1 + \delta)}{\pi^2} \left(\frac{m}{2\hbar^2} \right)^3 \gamma^4 T^4 \frac{1}{\left(\int d^3 \bar{x} \rho^2(\bar{x}) \right)^2} \tag{100}$$

หรือ

$$T \geq \frac{(\gamma - 1)^{1/3}}{\gamma^{4/3}} \frac{4\pi^{2/3}}{(1 + \delta)^{1/3} N^{1/3}} \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right) \left(\int d^3 \bar{x} \rho^2(\bar{x}) \right)^{2/3} \tag{101}$$

Optimize สมการที่ (101) เพื่อหาค่า γ ที่เหมาะสมเราได้

$$0 = \frac{\partial}{\partial \gamma} \left[\frac{(\gamma - 1)^{1/3}}{\gamma^{4/3}} \right] = (\gamma - 1)^{1/3} \left(-\frac{4}{3} \right) \frac{1}{\gamma^{7/3}} + \frac{1}{\gamma^{4/3}} \left(\frac{1}{3} \right) \frac{1}{(\gamma - 1)^{2/3}}$$

นั่นคือ

$$(\gamma - 1)^{1/3} \left(\frac{4}{3} \right) \frac{1}{\gamma^{7/3}} = \frac{1}{\gamma^{4/3}} \left(\frac{1}{3} \right) \frac{1}{(\gamma - 1)^{2/3}}$$

หรือ $\gamma = \frac{4}{3}$ ดังนั้นขอบเขตล่างของพลังงานจลน์ของระบบสารประเภทโบซอน N อนุภาค คือ

$$T \geq \left(\frac{3}{4} \right)^{4/3} \left(\frac{4}{3} - 1 \right)^{1/3} \frac{4\pi^{2/3}}{(1 + \delta)^{1/3} N^{1/3}} \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right) \left(\int d^3 \bar{x} \rho^2(\bar{x}) \right)^{2/3}$$

$$= \frac{3}{(1+\varepsilon)N^{1/3}} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{2/3} \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right) \left(\int d^3\vec{x} \rho^2(\vec{x})\right)^{2/3} \quad (102)$$

เมื่อเราแทน $(1+\delta)^{1/3} \equiv 1+\varepsilon$ สำหรับ $\varepsilon > 0$ และมิต้าน้อยเมื่อ N มีค่ามากๆ แทนค่าขอบเขตล่างของพลังงานจลน์ในอสมการที่ (81) เราได้ขอบเขตล่างของค่าคาดหวังของ H คือ

$$\begin{aligned} \langle \phi | H | \phi \rangle &\geq \frac{3}{(1+\varepsilon)N^{1/3}} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{2/3} \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right) \left(\int d^3\vec{x} \rho^2(\vec{x})\right)^{2/3} \\ &\quad - \frac{3e^2\pi^{1/3}}{2^{2/3}} \left(\int d^3\vec{x} \rho^2(\vec{x})\right)^{1/3} \left(N + \sum_{j=1}^k Z_j^2\right)^{2/3} \end{aligned} \quad (103)$$

กำหนดให้ $\left(\int d^3\vec{x} \rho^2(\vec{x})\right)^{1/3} = A$, $\frac{3}{(1+\varepsilon)} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{2/3} \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right) = c$ ดังนั้นอสมการที่ (103) เขียนใหม่ได้เป็น

$$\begin{aligned} \langle \phi | H | \phi \rangle &\geq \frac{c}{N^{1/3}} A^2 - \frac{3e^2\pi^{1/3}}{2^{2/3}} \left(N + \sum_{j=1}^k Z_j^2\right)^{2/3} A \\ &= \frac{c}{N^{1/3}} \left(A - \frac{3e^2\pi^{1/3}N^{1/3}}{c2^{5/3}} \left(N + \sum_{j=1}^k Z_j^2\right)^{2/3} \right)^2 \\ &\quad - \frac{9}{8} \frac{e^4}{2^{1/3}} \frac{\pi^{2/3}}{c} N^{1/3} \left(N + \sum_{j=1}^k Z_j^2\right)^{4/3} \\ &> - \frac{9}{8} \frac{e^4}{2^{1/3}} \frac{\pi^{2/3}}{c} N^{1/3} \left(N + \sum_{j=1}^k Z_j^2\right)^{4/3} \end{aligned}$$

เมื่อแทนค่า c เราได้พลังงานของระบบสารประเภทโบซอนมีขอบเขตล่างคือ

$$\langle \phi | H | \phi \rangle > -1.89 \left(\frac{me^4}{2\hbar^2}\right) N^{1/3} \left(N + \sum_{j=1}^k Z_j^2\right)^{4/3} \quad (104)$$

ดังนั้นพลังงานสถานะพื้น $-\varepsilon_N(m)$ ของระบบนี้จะต้องมากกว่าขอบเขตด้านบน นั่นคือ

$$-\varepsilon_N(m) > -1.89 \left(\frac{me^4}{2\hbar^2} \right) N^{1/3} \left(N + \sum_{j=1}^k Z_j^2 \right)^{4/3} \quad (105)$$

และจากสมการที่ (11) รวมกับสมการที่ (102) เราสามารถหาขอบเขตบนและขอบเขตล่างของพลังงานจลน์สำหรับระบบสสารประเภทโบซอนคือ

$$\frac{3}{(1+\varepsilon)N^{1/3}} \left(\frac{\pi}{2} \right)^{2/3} \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right) \left(\int d^3\vec{x} \rho^2(\vec{x}) \right)^{2/3} \leq T < 3.78 \left(\frac{me^4}{\hbar^2} \right) N^{5/3} \left(1 + \sum_{j=1}^k \frac{Z_j^2}{N} \right)^{4/3} \quad (106)$$

4. สรุปและวิจารณ์

จะเห็นว่าสิ่งที่เราได้มาพร้อมๆ กับขอบเขตบนและขอบเขตล่างของพลังงานจลน์คือ “ขอบเขตบน” ของอินทิเกรตความหนาแน่นกำลังสอง, $\int d^3\vec{x} \rho^2(\vec{x})$, ซึ่งเป็นสิ่งที่สำคัญมาก เพราะเมื่อทราบความหนาแน่นของอนุภาคเราสามารถนำไปหาความน่าจะเป็นที่จะพบอนุภาคภายในปริมาตรใดๆ ได้ และนำเราไปสู่คำตอบของคำถามที่ว่า “เมื่อเพิ่มอนุภาคเข้าไปเรื่อยๆ ระบบจะขยายตัวหรือหดตัวอย่างไร?”

พิจารณาฟังก์ชันคลื่น $\psi(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N)$ ที่สมมาตรของระบบที่มีอนุภาคประจุลบ N อนุภาค และเป็นกลางทางไฟฟ้า ให้ $\vec{x}$ เป็นตำแหน่งสัมพัทธ์ของอนุภาคภายในทรงกลมรัศมี R เรานิยามฟังก์ชัน

$$\chi_R(\vec{x}) = \begin{cases} 1, & |\vec{x}| \leq R \\ 0, & |\vec{x}| > R \end{cases} \quad (107)$$

ดังนั้นเราได้ความน่าจะเป็นที่จะพบอนุภาคทั้งหมด N อนุภาคอยู่ภายในทรงกลมรัศมี R มีค่าเท่ากับ

$$\text{Prob}[|\vec{x}_1| \leq R, \dots, |\vec{x}_N| \leq R] = \int d^3\vec{x}_1 \dots d^3\vec{x}_N |\psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N)|^2 \chi_R(\vec{x}_1) \dots \chi_R(\vec{x}_N) \quad (108)$$

และแน่นอนว่าความน่าจะเป็นที่จะเจออนุภาคทั้งหมดภายในทรงกลม ควรมีค่าน้อยกว่าหรือเท่ากับความน่าจะเป็นที่จะเจออนุภาคตัวเดียวภายในทรงกลม ดังนั้นเราได้

$$\text{Prob}[|\vec{x}_1| \leq R, \dots, |\vec{x}_N| \leq R] \leq \text{Prob}[|\vec{x}_1| \leq R, \dots, |\vec{x}_j| \leq R] \leq \dots \leq \text{Prob}[|\vec{x}_1| \leq R] \quad (109)$$

เมื่อ $j < N$ และความน่าจะเป็นที่จะพบอนุภาค 1 อนุภาคภายในทรงกลมรัศมี R คือ

$$\begin{aligned} \text{Prob}[|\vec{x}_1| \leq R] &= \int d^3\vec{x} d^3\vec{x}_2 \dots d^3\vec{x}_N |\psi(\vec{x}, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N)|^2 \chi_R(\vec{x}) \\ &= \frac{1}{N} \int d^3\vec{x} \rho(\vec{x}) \chi_R(\vec{x}) \end{aligned} \quad (110)$$

โดยใช้ Cauchy-Schwarz inequality เราได้

$$\int d^3\vec{x} \rho(\vec{x}) \chi_R(\vec{x}) \leq \left(\int d^3\vec{x} \rho^2(\vec{x}) \right)^{1/2} \left(\int d^3\vec{x} \chi_R^2(\vec{x}) \right)^{1/2} = \left(\int d^3\vec{x} \rho^2(\vec{x}) \right)^{1/2} \nu_R^{1/2} \quad (111)$$

เมื่อ $\nu_R = 4\pi R^3/3$ เป็นปริมาตรของทรงกลมรัศมี R จากสมการที่ (109) – (111) เราได้ความน่าจะเป็นที่จะพบอนุภาคทั้งหมดภายในทรงกลมเป็นไปตามสมการด้านล่างคือ

$$\text{Prob}[|\vec{x}_1| \leq R, \dots, |\vec{x}_N| \leq R] \leq \frac{1}{N} \left(\int d^3\vec{x} \rho^2(\vec{x}) \right)^{1/2} \nu_R^{1/2} \quad (112)$$

หรือ

$$\text{Prob}[|\vec{x}_1| \leq R, \dots, |\vec{x}_N| \leq R] \left(\frac{N}{\nu_R^{1/2}} \right) \leq \left(\int d^3\vec{x} \rho^2(\vec{x}) \right)^{1/2} \quad (113)$$

จากสมการที่ (106) เราได้ขอบเขตบนของอินทิเกรตกำลังสองของความหนาแน่นคือ

$$\begin{aligned} \left(\int d^3\vec{x} \rho^2(\vec{x}) \right)^{2/3} &< 3.78 \frac{2(1+\varepsilon)N^{1/3}}{3} \left(\frac{2}{\pi} \right)^{2/3} \left(\frac{m^2 e^4}{\hbar^4} \right) N^{5/3} \left(1 + \sum_{j=1}^k \frac{Z_j^2}{N} \right)^{4/3} \\ &= 1.86489(1+\varepsilon)N^2 \left(\frac{1}{a_0^2} \right) \left(1 + \sum_{j=1}^k \frac{Z_j^2}{N} \right)^{4/3} \end{aligned} \quad (114)$$

เมื่อ $a_0 = \hbar^2 / me^2$ ดังนั้น

$$\left(\int d^3\vec{x} \rho^2(\vec{x}) \right)^{1/2} = (1.86489)^{3/4} (1+\varepsilon)^{3/4} N^{3/2} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{3/2} \left(1 + \sum_{j=1}^k \frac{Z_j^2}{N} \right)$$

$$= 1.59584(1+\varepsilon)^{3/4} N^{3/2} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{3/2} \left(1 + \sum_{j=1}^k \frac{Z_j^2}{N} \right) \quad (115)$$

เนื่องจากเราสามารถเลือก $\varepsilon > 0$ ที่มีค่าน้อยเมื่อ N มีค่ามาก และโดยใช้ข้อเท็จจริงที่ว่า $\sum_{i=1}^k Z_j = N$, $\sum_{i=1}^k Z_j^2 \leq Z \sum_{i=1}^k Z_j = ZN$ และ เมื่อจำนวนโปรตอนมากที่สุดที่ในนิวคลีไอคือ Z ($Z \geq Z_j$)

ดังนั้นสมการที่ (115) เขียนใหม่ได้เป็น

$$\left(\int d^3\bar{x} \rho^2(\bar{x}) \right)^{1/2} < 1.61 N^{3/2} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{3/2} (1+Z) \quad (116)$$

แทนค่า (116) ใน (113) เราได้

$$\text{Prob} [|\bar{x}_1| \leq R, \dots, |\bar{x}_N| \leq R] \left(\frac{N}{\nu_R^{1/2}} \right) < 1.61 N^{3/2} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{3/2} (1+Z)$$

หรือ

$$\text{Prob} [|\bar{x}_1| \leq R, \dots, |\bar{x}_N| \leq R] \frac{1}{(N\nu_R)^{1/2}} < \left(\frac{1}{a_0} \right)^{3/2} 1.61 (1+Z) \quad (117)$$

จากสมการด้านบนเราพบว่าด้านขวามือของสมการสามารถหาค่าได้ ดังนั้นด้านซ้ายมือของสมการนี้ก็ต้องหาค่าได้เช่นกัน พิจารณาความน่าจะเป็นด้านซ้ายมือของสมการ ความน่าจะเป็นมีค่าอยู่ระหว่าง 0 ถึง 1 ดังนั้นเพื่อให้ด้านซ้ายของสมการหาค่าได้เมื่อ $N \rightarrow \infty$ และหาค่าได้

$$\text{Prob} [|\bar{x}_1| \leq R, \dots, |\bar{x}_N| \leq R] \frac{1}{(N\nu_R)^{1/2}} = c \quad (118)$$

เมื่อ $c \geq 0$ ดังนั้นเมื่อ $N \rightarrow \infty$ เทอมที่เป็นตัวส่วนในสมการด้านบนต้องหาค่าได้ นั่นคือ

$$\nu_R N \equiv \text{หาค่าได้} \quad (119)$$

ทำให้เราได้ความสัมพันธ์ระหว่างปริมาตรที่ระบบครอบครองกับจำนวน N ของอนุภาคประจุลบคือ

$$\nu_R \propto \frac{1}{N} \quad (120)$$

จากความสัมพันธ์ที่ (120) ทำให้เราได้ข้อสรุปแรกคือ เมื่อเราเพิ่มปริมาณอนุภาค N ในระบบโดยที่ N มีค่ามากๆ ปริมาตรที่ครอบครองโดยระบบจะมีค่าลดลง นั่นแสดงว่าสารประเภทโบซอนจะยุบตัวในกรณีที่เพิ่มปริมาณของสารมากๆ

จากนี้เราจะพิจารณาว่าการยุบตัวของระบบสารนี้มีพฤติกรรมอย่างไร จากความสัมพันธ์ที่ (120) เนื่องจาก $\nu_R = 4\pi R^3/3$ ดังนั้นรัศมี R ของทรงกลมแปรผกผันกับ $N^{1/3}$:

$$R \propto N^{-1/3} \quad (121)$$

นั่นคือการลดลงของรัศมี R ควรมีความสัมพันธ์กับ $N^{-1/3}$ ในกรณีที่อัตราการลดลงของรัศมี R เร็วกว่า $N^{-1/3}$ จะทำให้เทอม $\nu_R N \propto N^{-\beta}$ เมื่อ $\beta > 0$ ดังนั้นเมื่อ $N \rightarrow \infty$ ด้านซ้ายมือของสมการที่ (117) จะเข้าสู่นันต์

$$\text{Prob}[|\bar{x}_1| \leq R, \dots, |\bar{x}_N| \leq R] \frac{1}{(N\nu_R)^{1/2}} \rightarrow \infty \quad (122)$$

ซึ่งจะขัดแย้งกับด้านขวามือ ดังนั้นเราได้ข้อสรุปที่สองคือ รัศมี R ของทรงกลมต้องลดลงในอัตราไม่เร็วไปกว่า $N^{-1/3}$

ส่วนในกรณีที่อัตราการลดลงของรัศมี R ช้ากว่า $N^{-1/3}$ จะทำให้เทอม $\nu_R N \propto N^\beta$ เมื่อ $\beta > 0$ ดังนั้นเมื่อ $N \rightarrow \infty$ ทำให้ด้านซ้ายมือของสมการที่ (117) เข้าสู่ศูนย์ ซึ่งผลลัพธ์ที่ได้ไม่ขัดแย้งกับทางด้านขวามือของสมการที่ (117) ดังนั้นข้อสรุปที่ว่า “ในกรณีที่เกิดการยุบตัวของสารประเภทโบซอน การลดลงของรัศมี R ต้องมีอัตราการลดลงไม่เร็วไปกว่า $N^{-1/3}$ สำหรับ $N \rightarrow \infty$ ” นั้น จึงจำเป็นเป็นอย่างยิ่งโดยไม่มีข้อแม้ การลดลงของรัศมี R จริงๆ แล้ว อาจไม่จำเป็นต้องเกิดขึ้นก็ได้ เนื่องจากระบบสารประเภทโบซอนนั้นเป็นระบบที่ไม่เสถียร เพราะเมื่อนำสารสองก้อนมารวมกันพลังงานที่มันปลดปล่อยออกมามีค่ามหาศาลจนทำลายตัวมันเอง [1] ดังนั้นงานวิจัยชิ้นนี้ได้ข้อสรุปเฉพาะในเงื่อนไขที่ว่า ถ้าระบบเกิดการยุบตัวแล้วการลดลงของรัศมีจะเป็นไปตามข้อสรุปข้างต้น

เอกสารอ้างอิง

- [1] F.J. Dyson, J. Math. Phys. 8(1967) 1538.
- [2] E.B. Manoukian and S. Sirininlakul, Phys. Rev. Lett. 95(2005) 190402.
- [3] E.B. Manoukian and C. Muthaporn, Prog. Theor. Phys. 107(2002) 927.
- [4] C. Muthaporn and E.B. Manoukian, Rep. Math. Phys. 53(2004) 415.
- [5] C. Muthaporn and E.B. Manoukian, Phys. Lett. A. 321(2004) 152.
- [6] E.H. Lieb, Phys. Lett. A 70(1967) 71.
- [7] E.B. Manoukian and C. Muthaporn, Prog. Theor. Phys. 110(2003) 385.
- [8] E.B. Manoukian and S. Sirininlakul, Phys. Lett. A 332(2004) 54.
E.B. Manoukian and S. Sirininlakul, Phys. Lett. A 337(2004) 496, Erratum.
- [9] J. Schwinger, Proc. Natl. Acad. Sci. USA 47(1961) 122.

Output จากโครงการวิจัยที่ได้รับทุนจาก สกว.

ผลงานตีพิมพ์ในวารสารระดับนานาชาติ

E. B. Manoukian, C. Muthaporn and S. Sirininlakul. Collapsing stage of “bosonic matter”. Physics Letter A 352(2006) 488-490.

ภาคผนวก

ผลงานตีพิมพ์ในวารสารระดับนานาชาติ





