3. ระเบียบวิธีวิจัย

ระบบที่เราศึกษาเป็นระบบของนิวเคลียสที่มีอิเล็กตรอนอยู่รอบๆ โดยเราถือว่านิวเคลียสหยุดนิ่งกับที่ เราให้จำนวนนิวเคลียสเท่ากับ k และจำนวนอิเล็กตรอนเท่ากับ N ดังนั้นฮามิลโทเนียน (Hamiltonian) ของระบบนี้คือ

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

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

ถ้าเราหยุดสปินของอิเล็กตรอนในระบบดังกล่าว อิเล็กตรอนจะไม่มีพฤติกรรมตามหลักการกีดกันของเพาลี (Pauli's exclusion principle) เราเรียกระบบสสารนี้ว่า “สสารประเภทโบซอน (bosonic matter)” มีงานวิจัยต่างๆ [1, 6, 7] ที่พิสูจน์ว่า ระบบสสารประเภทโบซอนเป็นระบบที่ไม่เสถียร วิธีการพิสูจน์เราจะดูจากพลังงานสถานะพื้น E_N ของระบบ ถ้า $E_N \sim N^{\alpha}$ โดยที่ $\alpha > 1$ แสดงให้เห็นว่าระบบไม่เสถียร เนื่องจากถ้าเรานำสสารประเภทโบซอน 2 ระบบมารวมกัน แต่ละระบบมีอิเล็กตรอน N ก่อนรวมกันระบบรวมจะมีพลังงานสถานะพื้นแปรตาม $2N^{\alpha}$ แต่หลังจากรวมแล้วระบบรวมมีจำนวนอิเล็กตรอน $2N$ ตัว ดังนั้นพลังงานสถานะพื้นจะแปรตาม $(2N)^{\alpha}$ พลังงานที่ถูกปลดปล่อยออกมาหลังจากการรวมของระบบทั้งสองจึงแปรตาม $[(2N)^{\alpha} - 2N^{\alpha}]$ และปกติแล้วสสารที่เราพบเจอในชีวิตประจำวันจำนวนของอิเล็กตรอนจะอยู่ใน order ของ 10^{23} ตัวขึ้นไป ดังนั้นพลังงานที่มันปลดปล่อยออกมาจะมหาศาลมากระบบจึงไม่เสถียร ซึ่งจะต่างจากระบบของสสารปกติทั่วไปที่อิเล็กตรอนเป็นอนุภาคชนิดเฟอร์มิออนมีสปินครึ่ง พลังงานสถานะพื้นของระบบสสารเฟอร์มิออนนี้จะแปรตาม N นั่นคือ $\alpha = 1$ แสดงให้เห็นว่าระบบสสารปกติจะเสถียร แม้ว่าจะเอาสสารสองระบบมารวมกันพลังงานที่เพิ่มขึ้นจะเป็นสัดส่วนโดยตรงกับจำนวนอนุภาคของระบบ นอกจากนี้เรายังพบว่าเมื่อเพิ่มจำนวนอิเล็กตรอนเข้าไปเรื่อยๆ ก้อนสสารทั่วไปจะมีขนาดเพิ่มขึ้นตามจำนวนของอิเล็กตรอน ซึ่งงานวิจัยของ Manoukian และ Sirininlakul [2] ได้พิสูจน์มาแล้วว่า ก้อนสสารจะอยู่ภายในทรงกลมรัศมี R และเมื่อเราเพิ่มจำนวนอิเล็กตรอน N ตัว รัศมีนี้จะเพิ่มขึ้นในอัตราส่วนไม่น้อยกว่า $N^{1/3}$ ในกรณีที่ N มากๆ (อยู่ใน order 10^{23} ตัว) โดยบทสรุปนี้มาจากการใช้วิธีการทางคณิตศาสตร์ที่สลับซับซ้อนเพื่อพิสูจน์หาความน่าจะเป็นที่จะพบอิเล็กตรอน N ตัวบรรจุอยู่ภายในทรงกลมรัศมี R และมีปริมาตร υ_R ได้ความน่าจะเป็นในกรณี $N \to \infty$ คูณด้วยอัตราส่วนระหว่างปริมาณอิเล็กตรอนและปริมาตรจะต้องมีขอบเขตแน่นอนคือ

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

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

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

โดยเริ่มจากนิยามของความหนาแน่นของอนุภาค N ตัว สปิน 0 (โบซอน) คือ

$$\rho(\vec{x}) \;=\; N\int d^3\vec{x}_2 \cdots d^3\vec{x}_N \left|\phi(\vec{x},\vec{x}_2,\ldots,\vec{x}_N)\right|^2 \tag{3}$$

และแน่นอนเราได้ปริมาณอนุภาคมีค่าเท่ากับ

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

เราจะกำหนดให้ ϕ เป็นสถานะที่ normalized ของระบบและเป็นสถานะที่ให้ค่าคาดหวังสำหรับฮามิลโทเนียน H มีค่าน้อยกว่าศูนย์เสมอ สถานะนี้ไม่จำเป็นสถานะพื้นของระบบ นั่นคือ

$$-\varepsilon_N(m) \;\le\; \left\langle \phi \middle| H \middle| \phi \right\rangle \;<\; 0 \tag{5}$$

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

3.1 ขอบเขตบนของพลังงานจลน์

ขั้นตอนแรกของการพิสูจน์เราจะหาขอบเขตบนของพลังงานจลน์ของระบบ ระบบของเรามีค่าคาดหวังของพลังงานจลน์เท่ากับ

$$T = \left\langle \phi \;\middle|\; \sum_{i=1}^{N} \frac{\vec{p}_i^{\,2}}{2m} \;\middle|\; \phi \right\rangle \tag{6}$$

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

$$-\varepsilon_N(m) \;\le\; \left\langle \phi(m/2) \middle| H \middle| \phi(m/2) \right\rangle \tag{7}$$

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

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

จากอสมการ (5) เราได้ [2]

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

เราบวกเทอม $T/2$ ในอสมการที่ (9) โดยที่ T มีนิยามในสมการที่ (6) เราได้ด้านขวามือของอสมการคือค่าคาดหวังของพลังงานนั่นเอง และจากอสมการที่ (5) ค่าคาดหวังต้องน้อยกว่าศูนย์ นั่นคือ

$$-\varepsilon_N(2m) + \frac{T}{2} \;\le\; \left\langle \phi(m) \middle| H \middle| \phi(m) \right\rangle < 0 \tag{10}$$

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

$$T < 2\varepsilon_N(2m) \tag{11}$$

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

3.2 ขอบเขตล่างของพลังงานสถานะพื้นและพลังงานจลน์ของระบบ

พิจารณาฟังก์ชันจำนวนจริง $\upsilon(\vec{x})$ ใดๆ โดยการแปลงฟูเรียร์ของฟังก์ชันนี้คือ $\widetilde{\upsilon}(\vec{k})$ ดังนั้น

$$\widetilde{\upsilon}(\vec{k}) = \int d^3\vec{x}\, \upsilon(\vec{x}) \mathrm{e}^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} \tag{12}$$

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

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

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

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

$$\widetilde{\phi}(\vec{k}) = \int d^3\vec{x}\, \phi(\vec{x}) \mathrm{e}^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} \tag{15}$$

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

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

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

$$\ldots,$$

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

หรือ

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

คูณด้านขวามือของสมการที่ (16) ด้วย $\dfrac{\sqrt{\widetilde{\upsilon}(\vec{k})}}{\sqrt{\widetilde{\upsilon}(\vec{k})}}$ ดังนั้นเราได้

$$\sum_{j=1}^{k}A_j\phi(\vec{x}_j) = \int\frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3}\,\frac{\widetilde{\phi}(\vec{k})}{\sqrt{\widetilde{\upsilon}(\vec{k})}}\left(\sum_{j=1}^{k}A_j\sqrt{\widetilde{\upsilon}(\vec{k})}\,\mathrm{e}^{i\vec{k}\cdot\vec{x}_j}\right) \tag{17}$$

ยกกำลังสองสมการที่ (17) และใช้ Cauchy-Schwartz inequality

$$\left(\sum_{j=1}^{n}a_jb_j\right)^2 \le \sum_{j=1}^{n}|a_j|^2\sum_{j=1}^{n}|b_j|^2 \tag{18}$$

เราได้

$$\left(\sum_{j=1}^{k}A_j\phi(\vec{x}_j)\right)^2 \le \int\frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3}\left|\frac{\widetilde{\phi}(\vec{k})}{\sqrt{\widetilde{\upsilon}(\vec{k})}}\right|^2\ \int\frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3}\left|\sum_{j=1}^{k}A_j\sqrt{\widetilde{\upsilon}(\vec{k})}\,\mathrm{e}^{i\vec{k}\cdot\vec{x}_j}\right|^2 \tag{19}$$

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

$$\int\frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3}\left|\sum_{j=1}^{k}A_j\sqrt{\widetilde{\upsilon}(\vec{k})}\,\mathrm{e}^{i\vec{k}\cdot\vec{x}_j}\right|^2 = \int\frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3}\left(\sum_{i=1}^{k}A_i\sqrt{\widetilde{\upsilon}(\vec{k})}\,\mathrm{e}^{i\vec{k}\cdot\vec{x}_i}\right)\left(\sum_{j=1}^{k}A_j\sqrt{\widetilde{\upsilon}(\vec{k})}\,\mathrm{e}^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}_j}\right)$$

$$= \int\frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3}\sum_{i=1}^{k}A_i\sum_{j=1}^{k}A_j\widetilde{\upsilon}(\vec{k})\mathrm{e}^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}_i-\vec{x}_j)}$$

$$= \sum_{i,j=1}^{k} A_i A_j \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} \tilde{\upsilon}(\vec{k}) e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}_i - \vec{x}_j)}$$

$$= \sum_{i,j=1}^{k} A_i A_j \, \upsilon(\vec{x}_i - \vec{x}_j) \tag{20}$$

เมื่อ

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

ดังนั้นเราได้อสมการที่ (19) คือ

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

สำหรับเลขจำนวนจริงใดๆ a, b เมื่อ $b > 0$ เราได้

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

นั่นคือ

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

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

เราได้

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

เทียบอสมการที่ (24) กับอสมการที่ (22) เราได้

$$\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{k} A_i A_j\, \upsilon(\vec{x}_i - \vec{x}_j) \;\ge\; \sum_{j=1}^{k} A_j \phi(\vec{x}_j) - \frac{1}{2}\int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} \frac{\left|\widetilde{\phi}(\vec{k})\right|^2}{\widetilde{\upsilon}(\vec{k})} \tag{25}$$

พิจารณาเทอมด้านซ้ายของอสมการด้านบน

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

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

หรือจัดรูปใหม่เป็น

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

แทนค่าสมการที่ (26) ในอสมการที่ (25) เราได้

$$\sum_{i<j}^{k} A_i A_j\, \upsilon(\vec{x}_i - \vec{x}_j) \ge \sum_{j=1}^{k} A_j \phi(\vec{x}_j) - \frac{1}{2}\int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} \frac{\left|\widetilde{\phi}(\vec{k})\right|^2}{\widetilde{\upsilon}(\vec{k})} - \frac{\upsilon(0)}{2}\sum_{j=1}^{k} A_j^2 \tag{27}$$

ให้ $V(\vec{x})$ เป็นฟังก์ชันจำนวนจริง โดยที่ $V(\vec{x}) \ge \upsilon(\vec{x})$ และ $\rho(\vec{x})$ เป็นฟังก์ชันจำนวนจริงใด ๆ เรานิยามให้

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

และ

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

แทนค่าสมการที่ (29) ในอสมการที่ (27) เราได้

$$\sum_{i<j}^{k} A_i A_j\, \upsilon(\vec{x}_i - \vec{x}_j) \ge \sum_{j=1}^{k} A_j \int d^3\vec{x}\, \rho(\vec{x}) V(\vec{x} - \vec{x}_j) - \frac{1}{2}\int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} \frac{\left|\widetilde{\phi}(\vec{k})\right|^2}{\widetilde{\upsilon}(\vec{k})} - \frac{\upsilon(0)}{2}\sum_{j=1}^{k} A_j^2 \tag{30}$$

เราจะจัดรูปเทอมที่สองทางด้านขวามือของอสมการที่ (30) เนื่องจาก

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

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

$$\widetilde{\phi}(\vec{k}) = \int d^3\vec{x}' \int d^3\vec{x}\,\rho(\vec{x})V(\vec{x}-\vec{x}')\mathrm{e}^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}'} \tag{31}$$

และให้

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

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

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

โดยใช้นิยามของ inverse Fourier transform เราได้

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

แทนค่าสมการที่ (34) ในสมการที่ (33) เราได้

$$\widetilde{\phi}(\vec{k}) = \int d^3\vec{x}' \int d^3\vec{x}\,\rho(\vec{x})\int\frac{d^3\vec{k}'}{(2\pi)^3}\widetilde{V}^*(\vec{k}')e^{-i\vec{k}'\cdot(\vec{x}-\vec{x}')}\mathrm{e}^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}'}$$

$$= \int d^3\vec{x}\,\rho(\vec{x}) \int d^3\vec{k}'\widetilde{V}^*(\vec{k}')e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{x}} \int\frac{d^3\vec{x}'}{(2\pi)^3}e^{-i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{x}'} \tag{35}$$

จะเห็นว่าอินทีเกรดเทอมสุดท้ายในสมการที่ (35) คือ delta function ใน 3 มิตินั่นเอง

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

และโดยใช้คุณสมบัติของ delta function เราจัดรูปสมการที่ (35) ใหม่ได้เป็น

$$\widetilde{\phi}(\vec{k}) = \int d^3\vec{x}\,\rho(\vec{x}) \int d^3\vec{k}'\widetilde{V}^*(\vec{k}')e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{x}}\,\delta^3(\vec{k}'-\vec{k})$$

$$= \int d^3\vec{x}\,\rho(\vec{x})\,\widetilde{V}^*(\vec{k})e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} \tag{37}$$

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

$$\widetilde{\phi}(\vec{k}) = \int d^3\vec{x} \int \frac{d^3\vec{k}'}{(2\pi)^3} \widetilde{\rho}(\vec{k}') e^{i\vec{k}'\cdot\vec{x}} \; \widetilde{V}^*(\vec{k}) e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}}$$

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

$$= \int d^3\vec{k}' \, \widetilde{\rho}(\vec{k}') \widetilde{V}^*(\vec{k}) \delta^3(\vec{k}' - \vec{k})$$

$$= \widetilde{\rho}(\vec{k}) \widetilde{V}^*(\vec{k}) \tag{38}$$

และในทำนองเดียวกันเราได้

$$\widetilde{\phi}^*(\vec{k}) = \widetilde{\rho}^*(\vec{k}) \widetilde{V}(\vec{k}) \tag{39}$$

สิ่งที่เราได้จากสมการที่ (38) และ (39) คือ

$$\left|\widetilde{\phi}(\vec{k})\right|^2 = \widetilde{\phi}(\vec{k}) \widetilde{\phi}^*(\vec{k}) = \widetilde{\rho}(\vec{k}) \widetilde{V}^*(\vec{k}) \widetilde{\rho}^*(\vec{k}) \widetilde{V}(\vec{k}) = \left|\widetilde{\rho}(\vec{k})\right|^2 \left|\widetilde{V}(\vec{k})\right|^2 \tag{40}$$

แทนค่าที่ได้จากสมการที่ (40) ในเทอมที่สองของอสมการที่ (30) เราได้

$$\int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} \frac{\left|\widetilde{\phi}(\vec{k})\right|^2}{\widetilde{\upsilon}(\vec{k})} = \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} \frac{\left|\widetilde{\rho}(\vec{k})\right|^2 \left|\widetilde{V}(\vec{k})\right|^2}{\widetilde{\upsilon}(\vec{k})} \tag{41}$$

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

$$\varphi(\vec{y}) = \int d^3\vec{y}' \, \rho(\vec{y}') \upsilon(\vec{y}' - \vec{y}) \tag{42}$$

และ

$$\upsilon(\vec{y} - \vec{y}') = \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} \widetilde{\upsilon}(\vec{k}) e^{i\vec{k}\cdot(\vec{y}-\vec{y}')} \tag{43}$$

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

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

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

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

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

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

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

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

จากนั้นอินทีเกรตสมการด้านบนใน space ของ $\vec{k}$ เราได้

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

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

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

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

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

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

ดังนั้น

$$\int d^3\vec{x}' \int d^3\vec{x}\, \rho(\vec{x}) V(\vec{x}-\vec{x}') \rho(\vec{x}') = \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} \left|\widetilde{\rho}(\vec{k})\right|^2 \widetilde{V}(\vec{k}) \qquad (49)$$

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

$$0 \;=\; \frac{1}{2}\int\frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3}\left|\widetilde{\rho}(\vec{k})\right|^2\widetilde{V}(\vec{k}) \;-\; \frac{1}{2}\int d^3\vec{x}'\int d^3\vec{x}\,\rho(\vec{x})V(\vec{x}-\vec{x}')\rho(\vec{x}') \tag{50}$$

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

$$\sum_{i<j}^{k}A_iA_j\,\upsilon(\vec{x}_i-\vec{x}_j) \;\geq\; \sum_{j=1}^{k}A_j\int d^3\vec{x}\,\rho(\vec{x})V(\vec{x}-\vec{x}_j) - \frac{1}{2}\int\frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3}\frac{\left|\widetilde{\rho}(\vec{k})\right|^2\left|\widetilde{V}(\vec{k})\right|^2}{\widetilde{\upsilon}(\vec{k})} - \frac{\upsilon(0)}{2}\sum_{j=1}^{k}A_j^2$$

$$+\frac{1}{2}\int\frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3}\left|\widetilde{\rho}(\vec{k})\right|^2\widetilde{V}(\vec{k}) \;-\; \frac{1}{2}\int d^3\vec{x}'\int d^3\vec{x}\,\rho(\vec{x})V(\vec{x}-\vec{x}')\rho(\vec{x}') \tag{51}$$

จัดรูปอสมการที่ (51) และเนื่องจากเรากำหนดให้ $V(\vec{x}-\vec{x}')\geq\upsilon(\vec{x}-\vec{x}')$ ดังนั้นอสมการที่ (51) จะเปลี่ยนรูปเป็น

$$\sum_{i<j}^{k}A_iA_jV(\vec{x}_i-\vec{x}_j) \;\geq\; \sum_{j=1}^{k}A_j\int d^3\vec{x}\,\rho(\vec{x})V(\vec{x}-\vec{x}_j) - \frac{1}{2}\int d^3\vec{x}'\int d^3\vec{x}\,\rho(\vec{x})V(\vec{x}-\vec{x}')\rho(\vec{x}')$$

$$-\frac{1}{2}\int\frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3}\left|\widetilde{\rho}(\vec{k})\right|^2\left[\frac{\left|\widetilde{V}(\vec{k})\right|^2}{\widetilde{\upsilon}(\vec{k})}-\widetilde{V}(\vec{k})\right] - \frac{1}{2}\upsilon(0)\sum_{j=1}^{k}A_j^2 \tag{52}$$

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

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

และเราให้

$$\upsilon(\vec{x}) = \frac{e^2\left(1-e^{-\lambda|\vec{x}|}\right)}{|\vec{x}|} \tag{54}$$

เมื่อ $\lambda>0$ ดังนั้นเราได้

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

$$= \; e^2 \lim_{|\vec{x}|\to 0}\left[\lambda - \frac{1}{2!}\lambda^2|\vec{x}| + \frac{1}{3!}\lambda^3|\vec{x}|^2 - \frac{1}{4!}\lambda^4|\vec{x}|^3 + \cdots\right]$$

$$= \; e^2\lambda \tag{55}$$

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

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

และเมื่อเราให้ลิมิตของศักย์ยูคาวาที่ $\lambda \to 0$ เราจะได้ศักย์คูลอมบ์ที่เราต้องการ การแปลงฟูเรียร์ของศักย์ยูคาวาเป็นดังนี้

$$\tilde{V}_\lambda(\vec{x}) \;=\; \int d^3\vec{x}\; e^2\,\frac{\exp(-\lambda\,|\,\vec{x}\,|)}{|\vec{x}|}\,e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}}$$

$$= \; e^2\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty dx\, x^2\,\frac{e^{-\lambda x}}{x}\int_0^\pi d\theta \sin\theta\, e^{-ikx\cos\theta} \tag{57}$$

อินทีเกรตในส่วนของ θ มีค่าเท่ากับ

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

ดังนั้น

$$\tilde{V}_\lambda(\vec{x}) \;=\; \frac{2\pi e^2}{ik}\int_0^\infty dx\, e^{-\lambda x}\left(e^{ikx} - e^{-ikx}\right)$$

$$= \; \frac{2\pi e^2}{ik}(2i)\int_0^\infty dx\, e^{-\lambda x}\sin kx = \frac{4\pi e^2}{k}\left(\frac{k}{k^2+\lambda^2}\right)$$

$$= \; \frac{4\pi e^2}{k^2+\lambda^2} \tag{59}$$

ดังนั้นการแปลงฟูเรียร์ของศักย์คูลอมบ์มีค่าเท่ากับ

$$\widetilde{V}(\vec{x}) \;=\; \lim_{\lambda\to 0}\widetilde{V}_{\lambda}(\vec{x}) \;=\; \lim_{\lambda\to 0}\frac{4\pi e^2}{k^2+\lambda^2} \;=\; \frac{4\pi e^2}{k^2} \tag{60}$$

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

$$\widetilde{\upsilon}(\vec{k}) \;=\; \int d^3\vec{x}\,\upsilon(\vec{x})e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}}$$

$$=\; \int d^3\vec{x}\,\frac{e^2\left(1-e^{-\lambda|\vec{x}|}\right)}{|\vec{x}|}e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}}$$

$$=\; \int d^3\vec{x}\,\frac{e^2}{|\vec{x}|}e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} - \int d^3\vec{x}\,\frac{e^2\;e^{-\lambda|\vec{x}|}}{|\vec{x}|}e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}}$$

$$=\; \widetilde{V}(\vec{x}) - \frac{4\pi e^2}{k^2+\lambda^2} \tag{61}$$

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

$$\upsilon(\vec{x}) \;=\; \frac{4\pi e^2}{k^2} - \frac{4\pi e^2}{k^2+\lambda^2} \;=\; \frac{4\pi e^2\lambda^2}{k^2\left(k^2+\lambda^2\right)} \tag{62}$$

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

$$\sum_{i<j}^{k} A_i A_j V\left(\vec{x}_i-\vec{x}_j\right) \;\geq\; \sum_{j=1}^{k} A_j \int d^3\vec{x}\,\rho(\vec{x})V\left(\vec{x}-\vec{x}_j\right) - \frac{1}{2}\int d^3\vec{x}'\int d^3\vec{x}\,\rho(\vec{x})V\left(\vec{x}-\vec{x}'\right)\rho(\vec{x}')$$

$$-\frac{1}{2}\int\frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3}\left|\widetilde{\rho}(\vec{k})\right|^2\left[\frac{\left|\dfrac{4\pi e^2}{k^2}\right|^2}{\dfrac{4\pi e^2\lambda^2}{k^2\left(k^2+\lambda^2\right)}} - \frac{4\pi e^2}{k^2}\right] - \frac{e^2\lambda}{2}\sum_{j=1}^{k}A_j^2 \tag{63}$$

เทอมในเครื่องหมายอินทีเกรตในบรรทัดที่สองของอสมการที่ (63) มีค่าเท่ากับ

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

$$= \frac{2\pi e^2}{\lambda^2}\int\frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3}\left|\tilde{\rho}\left(\vec{k}\right)\right|^2 \qquad (64)$$

ด้านขวามือของสมการที่ (64) มีค่าเท่ากับ

$$\frac{2\pi e^2}{\lambda^2}\int\frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3}\left|\tilde{\rho}\left(\vec{k}\right)\right|^2 = \frac{2\pi e^2}{\lambda^2}\int\frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3}\int d^3\vec{x}\rho(\vec{x})e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}}\int d^3\vec{x}'\rho(\vec{x}')e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}'}$$

$$= \frac{2\pi e^2}{\lambda^2}\int d^3\vec{x}\rho(\vec{x})\int d^3\vec{x}'\rho^*(\vec{x}')\int\frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3}e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{x}')}$$

$$= \frac{2\pi e^2}{\lambda^2}\int d^3\vec{x}\rho(\vec{x})\int d^3\vec{x}'\rho^*(\vec{x}')\delta^3(\vec{x}-\vec{x}')$$

$$= \frac{2\pi e^2}{\lambda^2}\int d^3\vec{x}\rho^2(\vec{x}) \qquad (65)$$

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

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

$$- \frac{2\pi e^2}{\lambda^2}\int d^3\vec{x}\rho^2(\vec{x}) - \frac{e^2\lambda}{2}\sum_{j=1}^{k}A_j^2 \qquad (66)$$

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

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

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

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

$$\sum_{i<j}^{k}\frac{e^2 Z_i Z_j}{\left|\vec{x}_i - \vec{x}_j\right|} \geq \sum_{j=1}^{k} e^2 Z_j \int d^3\vec{x}\frac{\rho(\vec{x})}{\left|\vec{x} - \vec{R}_j\right|} - \frac{e^2}{2}\int d^3\vec{x}'\int d^3\vec{x}\,\rho(\vec{x})\frac{1}{\left|\vec{x} - \vec{x}'\right|}\rho(\vec{x}')$$

$$- \frac{2\pi e^2}{\lambda^2}\int d^3\vec{x}\rho^2(\vec{x}) - \frac{e^2\lambda}{2}\sum_{j=1}^{k}Z_j^2 \tag{68}$$

แทนค่าอสมการที่ (67) และ (68) ใน (1) เราได้ขอบเขตล่างสำหรับฮามิลโทเนียนคือ

$$H \geq \sum_{i=1}^{N}\frac{\vec{p}_i^{\,2}}{2m} + \sum_{j=1}^{N} e^2\int d^3\vec{x}\frac{\rho(\vec{x})}{\left|\vec{x} - \vec{x}_j\right|} - \frac{e^2}{2}\int d^3\vec{x}'\int d^3\vec{x}\,\rho(\vec{x})\frac{1}{\left|\vec{x} - \vec{x}'\right|}\rho(\vec{x}')$$

$$- \frac{2\pi e^2}{\lambda^2}\int d^3\vec{x}\rho^2(\vec{x}) - \frac{e^2\lambda}{2}\sum_{i=1}^{N}1 + \sum_{j=1}^{k} e^2 Z_j\int d^3\vec{x}\frac{\rho(\vec{x})}{\left|\vec{x} - \vec{R}_j\right|}$$

$$- \frac{e^2}{2}\int d^3\vec{x}'\int d^3\vec{x}\,\rho(\vec{x})\frac{1}{\left|\vec{x} - \vec{x}'\right|}\rho(\vec{x}') - \frac{2\pi e^2}{\lambda^2}\int d^3\vec{x}\rho^2(\vec{x})$$

$$- \frac{e^2\lambda}{2}\sum_{j=1}^{k}Z_j^2 - \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{k}\frac{Z_j e^2}{\left|\vec{x}_i - \vec{R}_j\right|} \tag{69}$$

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

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

$$+ \sum_{j=1}^{N} e^2\int d^3\vec{x}\frac{\rho(\vec{x})}{\left|\vec{x} - \vec{x}_j\right|} + \sum_{j=1}^{k} e^2 Z_j\int d^3\vec{x}\frac{\rho(\vec{x})}{\left|\vec{x} - \vec{R}_j\right|}$$

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

ในกรณีที่ $k \geq 2$ ดังนั้นเราได้ขอบเขตล่างของค่าคาดหวังของฮามิลโทเนียนมีค่าเท่ากับ

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

โดยการกำหนดให้ ϕ เป็นฟังก์ชันที่ normalized ของอนุภาคสปิน 0 ดังนั้น

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

เทอมอินทีเกรตเทอมแรกบรรทัดที่ 1 ในทางด้านขวามือของอสมการที่ (71) มีค่าเท่ากับ

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

ทำนองเดียวกันเราได้

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

โดยการแทนค่า ϕ และความหนาแน่นของอนุภาคที่นิยามในสมการที่ (3) เราได้

$$\left\langle \phi \left| \sum_{j=1}^{N} e^2 \int d^3\vec{x}\, \frac{\rho(\vec{x})}{\left|\vec{x}-\vec{x}_j\right|} \right| \phi \right\rangle$$

$$= \int d^3\vec{x}' d^3\vec{x}_2 \cdots d^3\vec{x}_N \phi^*(\vec{x}', \vec{x}_2, \ldots, \vec{x}_N) \sum_{j=1}^{N} e^2 \int d^3\vec{x}\, \frac{\rho(\vec{x})}{\left|\vec{x}-\vec{x}_j\right|} \phi(\vec{x}', \vec{x}_2, \ldots, \vec{x}_N)$$

$$= e^2 \sum_{j=1}^{N} \int d^3\vec{x}\, \rho(\vec{x}) \int d^3\vec{x}' \int d^3\vec{x}_2 \cdots d^3\vec{x}_N \phi^*(\vec{x}', \vec{x}_2, \ldots, \vec{x}_N) \frac{1}{\left|\vec{x}-\vec{x}_j\right|} \phi(\vec{x}', \vec{x}_2, \ldots, \vec{x}_N)$$

$$= e^2 \Bigg\{ \int d^3\vec{x}\, \rho(\vec{x}) \int d^3\vec{x}' \int d^3\vec{x}_2 \cdots d^3\vec{x}_N \phi^*(\vec{x}', \vec{x}_2, \ldots, \vec{x}_N) \frac{1}{\left|\vec{x}-\vec{x}_1\right|} \phi(\vec{x}', \vec{x}_2, \ldots, \vec{x}_N)$$

$$+ \int d^3\vec{x}\, \rho(\vec{x}) \int d^3\vec{x}' \int d^3\vec{x}_2 \cdots d^3\vec{x}_N \phi^*(\vec{x}', \vec{x}_2, \ldots, \vec{x}_N) \frac{1}{\left|\vec{x}-\vec{x}_2\right|} \phi(\vec{x}', \vec{x}_2, \ldots, \vec{x}_N)$$

$$\vdots$$

$$+ \int d^3\vec{x}\, \rho(\vec{x}) \int d^3\vec{x}' \int d^3\vec{x}_2 \cdots d^3\vec{x}_N \phi^*(\vec{x}', \vec{x}_2, \ldots, \vec{x}_N) \frac{1}{\left|\vec{x}-\vec{x}_N\right|} \phi(\vec{x}', \vec{x}_2, \ldots, \vec{x}_N) \Bigg\}$$

$$= e^2 \Bigg\{ \int d^3\vec{x} \int d^3\vec{x}'\, \rho(\vec{x}) \frac{1}{\left|\vec{x}-\vec{x}'\right|} \frac{\rho(\vec{x}')}{N} + \int d^3\vec{x} \int d^3\vec{x}_2\, \rho(\vec{x}) \frac{1}{\left|\vec{x}-\vec{x}_2\right|} \frac{\rho(\vec{x}_2)}{N}$$

$$\vdots$$

$$+ \int d^3\vec{x} \int d^3\vec{x}_N\, \rho(\vec{x}) \frac{1}{\left|\vec{x}-\vec{x}_N\right|} \frac{\rho(\vec{x}_N)}{N} \Bigg\}$$

$$= \; e^2 \int d^3\vec{x} \int d^3\vec{x}' \, \rho(\vec{x}) \frac{1}{|\vec{x}-\vec{x}'|} \rho(\vec{x}') \qquad (75)$$

เทอมที่ 5 ด้านขวามือของอสมการที่ (71) มีค่าเท่ากับ

$$\left\langle \phi \left| \sum_{j=1}^{k} e^2 Z_j \int d^3\vec{x} \frac{\rho(\vec{x})}{|\vec{x}-\vec{R}_j|} \right| \phi \right\rangle$$

$$= \int d^3\vec{x}' d^3\vec{x}_2 \cdots d^3\vec{x}_N \phi^*(\vec{x}', \vec{x}_2, \ldots, \vec{x}_N) \sum_{j=1}^{k} e^2 Z_j \int d^3\vec{x} \frac{\rho(\vec{x})}{|\vec{x}-\vec{R}_j|} \phi(\vec{x}', \vec{x}_2, \ldots, \vec{x}_N)$$

$$= \sum_{j=1}^{k} e^2 Z_j \int d^3\vec{x} \frac{\rho(\vec{x})}{|\vec{x}-\vec{R}_j|} \int d^3\vec{x}' d^3\vec{x}_2 \cdots d^3\vec{x}_N \phi^*(\vec{x}', \vec{x}_2, \ldots, \vec{x}_N) \phi(\vec{x}', \vec{x}_2, \ldots, \vec{x}_N)$$

$$= \sum_{j=1}^{k} e^2 Z_j \int d^3\vec{x} \frac{\rho(\vec{x})}{|\vec{x}-\vec{R}_j|} \int d^3\vec{x}' d^3\vec{x}_2 \cdots d^3\vec{x}_N |\phi(\vec{x}', \vec{x}_2, \ldots, \vec{x}_N)|^2$$

$$= \sum_{j=1}^{k} e^2 Z_j \int d^3\vec{x} \frac{\rho(\vec{x})}{|\vec{x}-\vec{R}_j|} \qquad (76)$$

เทอมที่ 6 ด้านขวามือของอสมการที่ (71) มีค่าเท่ากับ

$$\left\langle \phi \left| e^2 \int d^3\vec{x}' \int d^3\vec{x} \, \rho(\vec{x}) \frac{1}{|\vec{x}-\vec{x}'|} \rho(\vec{x}') \right| \phi \right\rangle$$

$$= e^2 \int d^3\vec{x}'' d^3\vec{x}_2 \cdots d^3\vec{x}_N \phi^*(\vec{x}', \vec{x}_2, \ldots, \vec{x}_N) \int d^3\vec{x}' \int d^3\vec{x} \, \rho(\vec{x}) \frac{1}{|\vec{x}-\vec{x}'|} \rho(\vec{x}') \phi(\vec{x}'', \vec{x}_2, \ldots, \vec{x}_N)$$

$$= e^2 \int d^3\vec{x}' \int d^3\vec{x} \, \rho(\vec{x}) \frac{1}{|\vec{x}-\vec{x}'|} \rho(\vec{x}') \qquad (77)$$

เทอมที่ 7 ด้านขวามือของอสมการที่ (71) มีค่าเท่ากับ

$$\left\langle \phi \left| \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{k} \frac{Z_j e^2}{|\vec{x}_i - \vec{R}_j|} \right| \phi \right\rangle$$

$$= e^2 \int d^3\vec{x}' d^3\vec{x}_2 \cdots d^3\vec{x}_N \phi^*(\vec{x}', \vec{x}_2, \ldots, \vec{x}_N) \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{k} \frac{Z_j e^2}{|\vec{x}_i - \vec{R}_j|} \phi(\vec{x}', \vec{x}_2, \ldots, \vec{x}_N)$$

$$= e^2\sum_{j=1}^{k} Z_j\left\{\int d^3\vec{x}'d^3\vec{x}_2\cdots d^3\vec{x}_N\phi^*(\vec{x}',\vec{x}_2,\ldots,\vec{x}_N)\frac{1}{|\vec{x}'-\vec{R}_j|}\phi(\vec{x}',\vec{x}_2,\ldots,\vec{x}_N)\right.$$

$$+ \int d^3\vec{x}'d^3\vec{x}_2\cdots d^3\vec{x}_N\phi^*(\vec{x}',\vec{x}_2,\ldots,\vec{x}_N)\frac{1}{|\vec{x}_2-\vec{R}_j|}\phi(\vec{x}',\vec{x}_2,\ldots,\vec{x}_N)+\cdots$$

$$\left.+ \int d^3\vec{x}'d^3\vec{x}_2\cdots d^3\vec{x}_N\phi^*(\vec{x}',\vec{x}_2,\ldots,\vec{x}_N)\frac{1}{|\vec{x}_N-\vec{R}_j|}\phi(\vec{x}',\vec{x}_2,\ldots,\vec{x}_N)\right\}$$

$$= e^2\sum_{j=1}^{k} Z_j\left\{\int d^3\vec{x}'\frac{1}{|\vec{x}'-\vec{R}_j|}\int d^3\vec{x}_2 d^3\vec{x}_3\cdots d^3\vec{x}_N|\phi(\vec{x}',\vec{x}_2,\ldots,\vec{x}_N)|^2\right.$$

$$+ \int d^3\vec{x}_2\frac{1}{|\vec{x}_2-\vec{R}_j|}\int d^3\vec{x}'d^3\vec{x}_3\cdots d^3\vec{x}_N|\phi(\vec{x}',\vec{x}_2,\ldots,\vec{x}_N)|^2+\cdots$$

$$\left.+ \int d^3\vec{x}_N\frac{1}{|\vec{x}_N-\vec{R}_j|}\int d^3\vec{x}'d^3\vec{x}_2\cdots d^3\vec{x}_{N-1}|\phi(\vec{x}',\vec{x}_2,\ldots,\vec{x}_N)|^2\right\}$$

$$= e^2\sum_{j=1}^{k} Z_j\left\{\int d^3\vec{x}'\frac{1}{|\vec{x}'-\vec{R}_j|}\frac{\rho(\vec{x}')}{N} + \int d^3\vec{x}_2\frac{1}{|\vec{x}_2-\vec{R}_j|}\frac{\rho(\vec{x}_2)}{N}+\cdots\right.$$

$$\left.+ \int d^3\vec{x}_N\frac{1}{|\vec{x}_N-\vec{R}_j|}\frac{\rho(\vec{x}_N)}{N}\right\}$$

$$= e^2\sum_{j=1}^{k} Z_j\int d^3\vec{x}\frac{\rho(\vec{x})}{|\vec{x}-\vec{R}_j|} \qquad (78)$$

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

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

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

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

$$= T - \frac{4\pi e^2}{\lambda^2} \int d^3\vec{x} \rho^2(\vec{x}) - \frac{e^2\lambda}{2}\left(N + \sum_{j=1}^{k} Z_j^2\right) \tag{79}$$

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) ได้ขอบเขตล่างของค่าคาดหวังของฮามิลโทเนียนคือ

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

$$= T - \frac{4\pi e^2}{(16\pi)^{2/3}}\left(\int d^3\vec{x}\rho^2(\vec{x})\right)^{1/3}\left(N + \sum_{j=1}^{k} Z_j^2\right)^{2/3}$$

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

ดังนั้น

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

$$= T - e^2\left(\int d^3\vec{x}\rho^2(\vec{x})\right)^{1/3}\left(N+\sum_{j=1}^{k}Z_j^2\right)^{2/3}\left(\frac{8\pi+16\pi}{\pi^{2/3}2^{11/3}}\right)$$

$$= T - \frac{3e^2\pi^{1/3}}{2^{2/3}}\left(\int d^3\vec{x}\rho^2(\vec{x})\right)^{1/3}\left(N+\sum_{j=1}^{k}Z_j^2\right)^{2/3} \qquad (81)$$

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

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

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

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

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

กำหนดให้ $p=2,\ q=1,\ s=2$ และ

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

แทนค่าสมการที่ (84) ในอสมการที่ (83) เราได้

$$\left|\int d^3\vec{x}\int d^3\vec{x}' g(\vec{x})\frac{\exp\left(-2|\vec{x}-\vec{x}'|\sqrt{2m\xi}/\hbar\right)}{|\vec{x}-\vec{x}'|^2}g(\vec{x}')\right|$$

$$\leq \left\{\int d^3\vec{x}|g(\vec{x})|^2\right\}^{1/2}\left\{\int d^3\vec{x}\left|\frac{\exp\left(-2|\vec{x}|\sqrt{2m\xi}/\hbar\right)}{|\vec{x}|^2}\right|\right\}\left\{\int d^3\vec{x}|g(\vec{x})|^2\right\}^{1/2}$$

$$= \int d^3\vec{x}|g(\vec{x})|^2\int d^3\vec{x}\left(\frac{\exp\left(-2|\vec{x}|\sqrt{2m\xi}/\hbar\right)}{|\vec{x}|^2}\right) \qquad (85)$$

อินทีเกรตเทอมที่สองทางด้านขวามือของสมการที่ (85) มีค่าเท่ากับ

$$\int d^3\vec{x}\frac{\exp\left(-2|\vec{x}|\sqrt{2m\xi}/\hbar\right)}{|\vec{x}|^2} = \int_0^{2\pi}d\varphi\int_0^{\pi}d\theta\sin\theta\int_0^{\infty}dx\,x^2\frac{\exp\left(-2x\sqrt{2m\xi}/\hbar\right)}{x^2}$$

$$= 4\pi\int_0^{\infty}dx\exp\left(-2x\sqrt{2m\xi}/\hbar\right)$$

$$= \frac{4\pi\hbar}{\sqrt{8m\xi}} \qquad (86)$$

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

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

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

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

ดังนั้น

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

หรือ

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

เราสามารถกำหนดให้สำหรับ $\delta > 0$ ที่มีค่าน้อยๆ ที่ทำให้

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

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

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

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

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

เมื่อ

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

เราได้

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

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

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

$$= T - \gamma T \frac{1}{\int d^3\vec{x}'\,\rho^{\alpha+1}(\vec{x}')} \sum_{i=1}^{N} \int d^3\vec{x}_i \rho^{\alpha}(\vec{x}_i) \frac{\rho(\vec{x}_i)}{N}$$

$$= T - \gamma T \frac{1}{\int d^3\vec{x}'\,\rho^{\alpha+1}(\vec{x}')} \sum_{i=1}^{N} \int d^3\vec{x}_i \frac{\rho^{\alpha+1}}{N}$$

$$= T - \gamma T \frac{\int d^3\vec{x}\,\rho^{\alpha+1}(\vec{x})}{\int d^3\vec{x}'\,\rho^{\alpha+1}(\vec{x}')}$$

ดังนั้น

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

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

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

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

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

พิจารณาเทอมอินทีเกรตด้านขวาของอสมการด้านบนเราได้

$$\left(\int d^3\vec{x}\, g^2(\vec{x})\right)^2 = \left(\int d^3\vec{x}\left[\gamma\frac{\rho^{\alpha}(\vec{x})}{\int d^3\vec{x}\,\rho^{\alpha+1}(\vec{x})}T\right]^2\right)\left(\int d^3\vec{x}\left[\gamma\frac{\rho^{\alpha}(\vec{x})}{\int d^3\vec{x}\,\rho^{\alpha+1}(\vec{x})}T\right]^2\right)$$

$$= \gamma^4 T^4 \frac{\left(\int d^3\vec{x}\ \rho^{2\alpha}(\vec{x})\right)^2}{\left(\int d^3\vec{x}'\,\rho^{\alpha+1}(\vec{x}')\right)^4} \tag{98}$$

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

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

แทนค่าสมการที่ (99) ในอสมการ (97) เราได้

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

หรือ

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

Optimize อสมการที่ (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 $\gamma = \dfrac{4}{3}$ ดังนั้นขอบเขตล่างของพลังงานจลน์ของระบบสสารประเภทโบซอน N อนุภาค คือ

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

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

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

$$\langle\phi|H|\phi\rangle \geq \frac{3}{(1+\varepsilon)N^{1/3}}\left(\frac{\pi}{2}\right)^{2/3}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\left(\int d^3\vec{x}\,\rho^2(\vec{x})\right)^{2/3}$$

$$- \frac{3e^2\pi^{1/3}}{2^{2/3}}\left(\int d^3\vec{x}\rho^2(\vec{x})\right)^{1/3}\left(N+\sum_{j=1}^{k}Z_j^2\right)^{2/3} \qquad (103)$$

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

$$\langle\phi|H|\phi\rangle \geq \frac{c}{N^{1/3}}A^2 - \frac{3e^2\pi^{1/3}}{2^{2/3}}\left(N+\sum_{j=1}^{k}Z_j^2\right)^{2/3} A$$

$$= \frac{c}{N^{1/3}}\left(A - \frac{3e^2\pi^{1/3}N^{1/3}}{c2^{5/3}}\left(N+\sum_{j=1}^{k}Z_j^2\right)^{2/3}\right)^2$$

$$- \frac{9}{8}\frac{e^4}{2^{1/3}}\frac{\pi^{2/3}}{c}N^{1/3}\left(N+\sum_{j=1}^{k}Z_j^2\right)^{4/3}$$

$$> - \frac{9}{8}\frac{e^4}{2^{1/3}}\frac{\pi^{2/3}}{c}N^{1/3}\left(N+\sum_{j=1}^{k}Z_j^2\right)^{4/3}$$

เมื่อแทนค่า c เราได้พลังงานของระบบสสารประเภทโบซอนมีขอบเขตล่างคือ

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

ดังนั้นพลังงานงานสถานะพื้น $-\varepsilon_N(m)$ ของระบบนี้จะต้องมากกว่าขอบเขตด้านบน นั่นคือ

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

และจากอสมการที่ (11) รวมกับอสมการที่ (102) เราสามารถหาขอบเขตบนและขอบเขตล่างของพลังงานจลน์สำหรับระบบสสารประเภทโบซอนคือ

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

4. สรุปและวิจารณ์

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

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

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

ดังนั้นเราได้ความน่าจะเป็นที่จะพบอนุภาคทั้งหมด N อนุภาคอยู่ภายในทรงกลมรัศมี R มีค่าเท่ากับ

$$\mathrm{Prob}[\,|\vec{x}_1| \le R,\ldots,|\vec{x}_N| \le R] \;=\; \int d^3\vec{x}_1\ldots d^3\vec{x}_N \left|\psi(\vec{x},\vec{x}_2,\ldots,\vec{x}_N)^2\right| \chi_R(\vec{x}_1)\cdots\chi_R(\vec{x}_N) \tag{108}$$

และแน่นอนว่าความน่าจะเป็นที่จะเจออนุภาคทั้งหมดภายในทรงกลม ควรมีค่าน้อยกว่าหรือเท่ากับความน่าจะเจออนุภาคตัวเดียวภายในทรงกลม ดังนั้นเราได้

$$\text{Prob}\left[\,|\vec{x}_1|\le R,\ldots,|\vec{x}_N|\le R\right]\le \text{Prob}\left[\,|\vec{x}_1|\le R,\ldots,|\vec{x}_j|\le R\right]\le\cdots\le \text{Prob}\left[\,|\vec{x}_1|\le R\right] \tag{109}$$

เมื่อ $j<N$ และความน่าจะเป็นที่จะพบอนุภาค 1 อนุภาคภายในทรงกลมรัศมี R คือ

$$\text{Prob}\left[\,|\vec{x}_1|\le R\right] = \int d^3\vec{x}\,d^3\vec{x}_2\ldots d^3\vec{x}_N\left|\psi(\vec{x},\vec{x}_2,\ldots,\vec{x}_N)^2\right|\chi_R(\vec{x})$$

$$= \frac{1}{N}\int d^3\vec{x}\,\rho(\vec{x})\chi_R(\vec{x}) \tag{110}$$

โดยใช้ Cauchy-Schwarz inequality เราได้

$$\int d^3\vec{x}\,\rho(\vec{x})\chi_R(\vec{x}) \le \left(\int d^3\vec{x}\rho^2(\vec{x})\right)^{1/2}\left(\int d^3\vec{x}\chi_R^2(\vec{x})\right)^{1/2} = \left(\int d^3\vec{x}\rho^2(\vec{x})\right)^{1/2}\upsilon_R^{1/2} \tag{111}$$

เมื่อ $\upsilon_R = 4\pi R^3/3$ เป็นปริมาตรของทรงกลมรัศมี R จากอสมการที่ (109) – (111) เราได้ความน่าจะเป็นที่จะพบอนุภาคทั้งหมดภายในทรงกลมเป็นไปตามอสมการด้านล่างคือ

$$\text{Prob}\left[\,|\vec{x}_1|\le R,\ldots,|\vec{x}_N|\le R\right] \le \frac{1}{N}\left(\int d^3\vec{x}\rho^2(\vec{x})\right)^{1/2}\upsilon_R^{1/2} \tag{112}$$

หรือ

$$\text{Prob}\left[\,|\vec{x}_1|\le R,\ldots,|\vec{x}_N|\le R\right]\left(\frac{N}{\upsilon_R^{1/2}}\right) \le \left(\int d^3\vec{x}\rho^2(\vec{x})\right)^{1/2} \tag{113}$$

จากอสมการที่ (106) เราได้ขอบเขตบนของอินเทเกรตกำลังสองของความหนาแน่นคือ

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

$$= 1.86489(1+\varepsilon)N^2\left(\frac{1}{a_0^2}\right)\left(1+\sum_{j=1}^{k}\frac{Z_j^2}{N}\right)^{4/3} \tag{114}$$

เมื่อ $a_0 = \hbar^2/me^2$ ดังนั้น

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

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

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

ดังนั้นสมการที่ (115) เขียนใหม่ได้เป็น

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

แทนค่า (116) ใน (113) เราได้

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

หรือ

$$\text{Prob}[\,|\vec{x}_1| \le R,\ldots,|\vec{x}_N| \le R]\frac{1}{(N\upsilon_R)^{1/2}} \ < \ \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} 1.61\,(1+Z) \tag{117}$$

จากอสมการด้านบนเราพบว่าด้านขวามือของอสมการสามารถหาค่าได้ ดังนั้นด้านซ้ายมือของอสมการนี้ก็ต้องหาค่าได้เช่นกัน พิจารณาความน่าจะเป็นด้านซ้ายมือของอสมการ ความน่าจะเป็นมีค่าอยู่ระหว่าง 0 ถึง 1 ดังนั้นเพื่อให้ด้านซ้ายของอสมการหาค่าได้เมื่อ $N \to \infty$ และหาค่าได้

$$\text{Prob}[\,|\vec{x}_1| \le R,\ldots,|\vec{x}_N| \le R]\frac{1}{(N\upsilon_R)^{1/2}} \ = \ c \tag{118}$$

เมื่อ $c \ge 0$ ดังนั้นเมื่อ $N \to \infty$ เทอมที่เป็นตัวส่วนในสมการด้านบนต้องหาค่าได้ นั่นคือ

$$\upsilon_R N \equiv \text{หาค่าได้} \tag{119}$$

ทำให้เราได้ความสัมพันธ์ระหว่างปริมาตรที่ระบบครอบครองกับจำนวน N ของอนุภาคประจุลบคือ

$$\upsilon_R \propto \frac{1}{N} \qquad (120)$$

จากความสัมพันธ์ที่ (120) ทำให้เราได้ข้อสรุปแรกคือ เมื่อเราเพิ่มปริมาณอนุภาค N ในระบบ โดยที่ N มีค่ามากๆ ปริมาตรที่ครอบครองโดยระบบจะมีค่าลดลง นั่นแสดงว่าสสารประเภทโบซอนจะยุบตัวในกรณีที่เพิ่มปริมาณของสสารมากๆ

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

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

นั่นคือการลดลงของรัศมี R ควรมีค่าสัมพันธ์กับ $N^{-1/3}$ ในกรณีที่อัตราการลดลงของรัศมี R เร็วกว่า $N^{-1/3}$ จะทำให้เทอม $\upsilon_R N \propto N^{-\beta}$ เมื่อ $\beta > 0$ ดังนั้นเมื่อ $N \to \infty$ ด้านซ้ายมือของอสมการที่ (117) จะเข้าสู่อนันต์

$$\mathrm{Prob}[\,|\vec{x}_1| \le R, \ldots, |\vec{x}_N| \le R] \frac{1}{(N\upsilon_R)^{1/2}} \;\to\; \infty \qquad (122)$$

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

ส่วนในกรณีที่อัตราการลดลงของรัศมี R ช้ากว่า $N^{-1/3}$ จะทำให้เทอม $\upsilon_R N \propto N^{\beta}$ เมื่อ $\beta > 0$ ดังนั้นเมื่อ $N \to \infty$ ทำให้ด้านซ้ายมือของอสมการที่ (117) เข้าสู่ศูนย์ ซึ่งผลลัพธ์ที่ได้ไม่ขัดแย้งกับทางด้านขวามือของอสมการที่ (117) ดังนั้นข้อสรุปที่ว่า *"ในกรณีที่เกิดการยุบตัวของสสารประเภทโบซอน การลดลงของรัศมี* R *ต้องมีอัตราการลดลงไม่เร็วไปกว่า* $N^{-1/3}$ *สำหรับ* $N \to \infty$*" นั้น จึงจำเป็นเป็นอย่างยิ่งโดยไม่มีข้อแม้* การลดลงของรัศมี R จริงๆ แล้ว อาจไม่จำเป็นต้องเกิดขึ้นก็ได้ เนื่องจากระบบสสารประเภทโบซอนนั้นเป็นระบบที่ไม่เสถียร เพราะเมื่อนำสสารสองก้อนมารวมกันพลังงานที่มันปลดปล่อยออกมามีค่ามหาศาลจนทำลายตัวมันเอง [1] ดังนั้นงานวิจัยชิ้นนี้ได้ข้อสรุปเฉพาะในเงื่อนไขที่ว่า *ถ้าระบบเกิดการยุบตัวแล้วการลดลงของรัศมีจะเป็นไปตามข้อสรุปข้างต้น*