Ю. В. Засорин, Метод перенормировки потенциала для одной модели типа Хартри–Фока–Слейтера, *ТМФ*, 2002, том 130, номер 3, 442–450

DOI: https://doi.org/10.4213/tmf311

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ
И МАТЕМАТИЧЕСКАЯ
ФИЗИКА
Том 130, № 3
март, 2002

 Ю. В. Засорин*

МЕТОД ПЕРЕНОРМИРОВКИ ПОТЕНЦИАЛА ДЛЯ ОДНОЙ МОДЕЛИ ТИПА ХАРТРИ–ФОКА–СЛЕЙТЕРА

Предлагается новый метод перенормировки потенциала для квазиклассической модели типа Хартри–Фока–Слейтера. Метод позволяет легко конструировать волновые функции и в отличие от большинства подобных методов не требует знания явного вида потенциала.

Ряд проблем теоретической и ядерной физики (например, теория слабоэнергетических взаимодействий, расчет ЯМР в плазме или энергетических зон в кристаллах), использующих квазиклассические модели типа Хартри–Фока–Слейтера (см. [1], [2]), а также ряд прикладных задач (например, обратная задача теории рассеяния (см. [3], [4])) часто приводят к необходимости численного (а зачастую и аналитического) решения стационарного уравнения Шредингера

$$(\vec{\nabla}\cdot\vec{\nabla}+k_0^2)\Psi(\vec{r}\,)+q(\vec{r},\Psi,\vec{\nabla}\Psi)=0$$

с короткодействующим (финитным) потенциалом q (здесь $k_0=\omega_0/c$ – волновое число, Ψ – орбиталь частицы или полная волновая функция), причем зачастую явный вид потенциала q неизвестен, а вместо классических краевых условий задаются какие-либо спектральные характеристики (например, набор мультипольных моментов, условия непроникновения частиц за энергетические барьеры или амплитуды рассеяния при уровне энергии k_0^2 и т.п.) (см. [3]–[6]). Такие задачи, некорректно поставленные с точки зрения классической теории уравнений в частных производных, иногда могут быть решены иными, неклассическими методами, к числу которых относится и *метод перенормировки потенциала* (или *метод псевдопотенциала*) (см. [3]–[6]). Суть этого метода сводится к замене потенциала q (величины ненаблюдаемой в отличие, например, от амплитуды рассеяния) псевдопотенциалом $\hat{q}$, не создающим связанных состояний, локализованных в пределах атомного остова (другими словами, не зависящим явно от Ψ и $\vec{\nabla}\Psi$), таким, что решение $\hat{\Psi}(\vec{r}\,)$ модифицированной задачи (с псевдопотенциалом $\hat{q}$) может быть найдено и совпадает с решением $\Psi(\vec{r}\,)$ исходной задачи вне зоны действия потенциала q.

---

*Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия.
E-mail: mike@math.main.vsu.ru

Однако большинство из существующих в настоящее время подходов к построению псевдопотенциалов (см. [4]–[6]), наряду с несомненными достоинствами, обладают двумя недостатками: 1) трудность нахождения волновой функции $\hat{\Psi}(\vec{r})$; 2) необходимость знать явный вид потенциала q. Крайне интересны подходы, предложенные в работах [3], [7], однако они приложимы все же для несколько иных задач (с нефинитным потенциалом).

В настоящей работе предлагается новый метод перенормировки потенциала q, суть которого сводится к тому, чтобы сделать псевдопотенциал $\hat{q}$ не гладким, как обычно (см. [3]–[6]), а "очень сингулярным". При этом подходе, во-первых, легко находится волновая функция $\hat{\Psi}(\vec{r})$ и, во-вторых, не требуется знание явного вида потенциала q, а лишь предполагается известной амплитуда рассеяния при уровне энергии k_0^2. Основные идеи этого метода изложены в работах [8]–[10].

1. ОСНОВНЫЕ ОБОЗНАЧЕНИЯ И ПРЕДВАРИТЕЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Пусть $x = \{x_1, \dots, x_n\}$ – вектор евклидова пространства $\mathbb{R}^n$ $(n \geqslant 2)$, $r = |x|$ – его евклидова длина; $\theta = x/r$ – точка единичной сферы $\omega = \{|x| = 1\}$, $|\omega|$ – ее площадь; $D = \{D_1, \dots, D_n\}$, $D_k = \partial/\partial x_k$; $\Delta = D \cdot D$ – оператор Лапласа в $\mathbb{R}^n$; $k_0 = \omega_0/c > 0$ – волновое число.

Как обычно (см., например, [11]), через $Y_m(x)$, $m = 0, 1, \dots$, будем обозначать однородный гармонический полином степени m, а его сужение $Y_m(\theta)$ на единичную сферу ω будем называть сферической гармоникой порядка m. Зональной гармоникой $Z_m(\theta_1, \theta_2)$, $(\theta_1, \theta_2) \in \omega \times \omega$, будем называть сужение на $\omega \times \omega$ однородного степени m и симметрического по каждому из наборов переменных $x \in \mathbb{R}^n$, $y \in \mathbb{R}^n$ полинома $Z_m(x, y)$ такого, что

$$\Delta_{(x)} Z_m(x, y) = \Delta_{(y)} Z_m(x, y) = 0, \tag{1.1}$$

$$Z_m(\lambda x, y) = Z_m(x, \lambda y) = \lambda^m Z_m(x, y), \tag{1.2}$$

$$\int_\omega Y_k(\theta_1) Z_m(\theta_1, \theta_2)\, d\omega(\theta_1) = \begin{cases} 0, & k \neq m, \\ Y_k(\theta_2), & k = m. \end{cases} \tag{1.3}$$

Далее через $\mathcal{D}'(\mathbb{R}^n)$ будем обозначать пространство Шварца, двойственное к $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$, через $S'(\mathbb{R}^n)$ – пространство распределений умеренного роста, через $E'(\mathbb{R}^n) \subset S'(\mathbb{R}^n)$ – пространство распределений с финитными носителями, двойственное к $C^\infty(\mathbb{R}^n)$, и, наконец, через $Z'(\mathbb{R}^n)$ – пространство аналитических функционалов (фурье-образов $\mathcal{F}T$ распределений $T \in \mathcal{D}'(\mathbb{R}^n)$) (см. [12]).

Рассмотрим в $S'(\mathbb{R}^n)$ стандартную задачу:

$$(\Delta + k_0^2) u(x) = f(x), \quad x \in \mathbb{R}^n, \tag{1.4}$$

$$(D_r - i k_0) u(x) = o\big(r^{\frac{1-n}{2}}\big), \quad r = |x| \to +\infty, \tag{1.5}$$

где $k_0 = \mathrm{const} > 0$, $i^2 = -1$; $u \in S'(\mathbb{R}^n)$, $f \in E'(\mathbb{R}^n)$, причем

$$\operatorname{supp} f \subset V_0 = \{|x| \leqslant R_0\}, \quad R_0 > 0. \tag{1.6}$$

Задача (1.4)–(1.6) корректно разрешима в классе $S'(\mathbb{R}^n)$ (равно как и в $D'(\mathbb{R}^n)$ и в $Z'(\mathbb{R}^n)$), а ее решение $u(x)$ дается формулой

$$u(x) = \langle f(y); T(x-y)\rangle, \tag{1.7}$$

где

$$T(x) = -\frac{i}{4}\left(\frac{k_0}{2\pi r}\right)^{\nu} H_\nu^{(1)}(k_0 r), \quad r = |x|, \quad \nu = \frac{n-2}{2}, \tag{1.8}$$

– фундаментальное решение уравнения Гельмгольца

$$(\Delta + k_0^2)T(x) = \delta(x), \tag{1.9}$$

удовлетворяющее условию (1.5), $T(x) \in S'(\mathbb{R}^n) \cap C^\infty(\mathbb{R}^n \setminus \{0\})$. Здесь $H_\nu^{(1)}(z) = J_\nu(z) + iN_\nu(z)$ – функция Бесселя 3-го рода (см. [13]); $\delta(\cdot) \in E'(\mathbb{R}^n)$ – дельта-функция Дирака.

В качестве вспомогательного результата сформулируем задачу о построении мультипольного псевдоисточника для задачи (1.4)–(1.6). Рассмотрим задачу

$$(\Delta + k_0^2)\hat{u}(x) = \hat{f}(x), \quad x \in \mathbb{R}^n, \tag{1.10}$$

$$(D_r - ik_0)\hat{u}(x) = o\big(r^{\frac{1-n}{2}}\big), \quad r = |x| \to +\infty, \tag{1.11}$$

где $\operatorname{supp} \hat{f} = \{x = 0\}$, причем псевдоисточник $\hat{f}$ должен быть таким, чтобы выполнялись следующие условия:

1) задача (1.10), (1.11) должна быть корректно разрешима в каком-либо классе распределений *одновременно* с задачей (1.4)–(1.6);

2) выполняется равенство

$$\hat{u}(x) \equiv u(x), \quad |x| > R_0. \tag{1.12}$$

Замечание 1. Для случая регулярного источника $f \in L^2(\mathbb{R}^n)$ задача о построении мультипольного псевдоисточника решена в работе [8], однако использованный там метод не позволяет перенести автоматически эти результаты на случай $f \in E'(\mathbb{R}^n)$.

Лемма 1. *Для любой радиальной функции $\varphi(|x|) \in C^\infty(\mathbb{R}^n)$ и любого распределения $T \in E'(\mathbb{R}^n)$ выражение $\langle T(x); Z_m(x,y)\varphi(|x|)\rangle$ либо является однородным гармоническим полиномом $Y_m(y)$, либо тождественно равно нулю.*

Доказательство немедленно следует из формул (1.1), (1.2).

Лемма 2. *Псевдоисточник* $\hat{f}(x)$ *и соответствующее ему решение* $\hat{u}(x)$ *задачи* (1.10), (1.11) *могут быть представлены в следующем виде*:

$$\hat{f}(x)=\sum_m \hat{f}_m(x)\equiv\sum_m(-1)^m A_m Y_m(D)\delta(x), \tag{1.13}$$

$$\begin{aligned}\hat{u}(x)&=\sum_m \hat{u}_m(x)=\sum_m(-1)^m A_m Y_m(D)T(x)\equiv\\ &\equiv -i\sum_m C_m Y_m(x)\left(\frac{k_0}{r}\right)^{\nu+m}H^{(1)}_{\nu+m}(k_0 r),\end{aligned} \tag{1.14}$$

$$Y_m(x)=\langle f(y);Z_m(x,y)j_{\nu+m}(k_0|y|)\rangle, \tag{1.15}$$

$$\begin{aligned}A_m&=\frac{\pi^{\nu+1}}{2^{m-1}\Gamma(\nu+m+1)},\\ C_m&=\frac{\pi}{2^{\nu+m+1}\Gamma(\nu+m+1)},\quad \nu=\frac{n-2}{2},\end{aligned} \tag{1.16}$$

где $j_\nu(z)=(2/z)^\nu\Gamma(\nu+1)J_\nu(z)$ *– нормированная функция Бесселя, а* $T(x)$ *– фундаментальное решение уравнения* (1.9), *определенное равенством* (1.8).

Доказательство. Отметим сначала, что поскольку $j_\nu(r)\in C^\infty(\mathbb{R}^n)$, $r=|x|$, то в силу леммы 1 правая часть формулы (1.15) определена корректно.

Докажем тождество (1.14). Воспользуемся известными свойствами функций Бесселя (см. [13], с. 116, формулы (7.15.28), (7.15.29), с. 176, формулы (10.9.3), (10.9.5) и с. 230, формула (11.2.8)). Объединяя их с равенством (1.8), получаем

$$\begin{gathered}T(x-y)=-i\sum_m C_m\left(\frac{k_0}{r}\right)^{\nu+m}Z_m(x,y)j_{\nu+m}(k_0|y|)H^{(1)}_{\nu+m}(k_0|x|),\\ |x|>R_0\geqslant|y|,\end{gathered} \tag{1.17}$$

где коэффициенты C_m удовлетворяют равенству (1.16).

Воспользуемся теперь формулой (1.7). Отметим, что поскольку $\operatorname{sing\,supp} T=\{|x|=0\}$, то в силу ограничения (1.6) при $|x|>R$ равенство (1.7) определяет классическую функцию $u(x)$ (поэтому, в частности, условие (1.5) корректно). Объединяя (1.7) и (1.17), получаем

$$\begin{gathered}u(x)=\sum_m u_m(x)\equiv -i\sum_m C_m\left(\frac{k_0}{r}\right)^{u+m}Y_m(x)H^{(1)}_{\nu+m}(k_0 r),\\ r=|x|>R_0,\quad \nu=\frac{n-2}{2},\end{gathered} \tag{1.18}$$

причем в силу (1.2), (1.3) полиномы $Y_m(x)$ из правой части (1.18) удовлетворяют равенству (1.15), откуда в силу (1.14), (1.18) немедленно следует выполнение равенства (1.12).

Далее, поскольку (см. [13])

$$\left(\frac{d}{z\,dz}\right)^m\bigl(z^{-\nu}H^{(1)}_\nu(z)\bigr)=(-1)^m z^{-\nu-m}H^{(1)}_{\nu+m}(z),$$

то из (1.18) получаем

$$\hat{u}_m(x) = -i(-1)^m C_m Y_m(x)\left(\frac{\partial}{r\partial r}\right)^m\left[\left(\frac{k_0}{r}\right)^\nu H_\nu^{(1)}(k_0 r)\right]. \tag{1.19}$$

Наконец, из (1.19) и того факта (см. [9]), что для всякого радиального распределения $T(|x|)$ справедливо тождество

$$Y_m(x)\left(\frac{\partial}{r\partial r}\right)^m T(r) = Y_m(D)T(|x|), \quad r = |x|,$$

немедленно вытекает справедливость равенства (1.14). Отсюда (с учетом (1.9)) следует справедливость равенства (1.13). Лемма доказана.

Отметим, что ряды (1.13) и (1.14), представляющие псевдоисточник $\hat{f}(x)$ и соответствующее ему решение $\hat{u}(x)$, носят пока еще формальный характер. Их частичные суммы $\hat{f}_N(x)$, $\hat{u}_N(x)$ суть распределения класса $S'(\mathbb{R}^n)$, причем (см. [8], [9])

$$\langle u_N(x); \varphi(x)\rangle = \text{v.p.}\int_{\mathbb{R}^n} \hat{u}_N(x)\varphi(x)\,dx, \tag{1.20}$$

где интеграл понимается в смысле главного значения Коши:

$$\text{v.p.}\int_{\mathbb{R}^n} h(x)\,dx \doteq \int_0^{+\infty} r^{n-1}\,dr\int_\omega h(r\theta)\,d\omega(\theta), \tag{1.21}$$

однако ряды (1.13), (1.14) не сходятся в слабой топологии пространства $S'(\mathbb{R}^n)$ (см. [8]). Чтобы придать им смысл, необходимо установить ряд предварительных оценок. В силу (1.6) найдутся (см. [9]) числа $M > 0$, $N \geqslant 0$ такие, что

$$|\langle f; \varphi\rangle| \leqslant M\sup_{V_0}|\Delta^N\varphi(x)| \quad \forall\varphi \in C^\infty(\mathbb{R}^n). \tag{1.22}$$

Воспользуемся известными свойствами функций Бесселя и сферических гармоник (см. [11], [13]):

$$\begin{gathered} |Z_m(x,y)| \leqslant \|Z_m\|_{2,\omega}|x|^m|y|^m = |\omega|^{-1}a_m|x|^m|y|^m, \\ a_m = \frac{n+2m-2}{2}\,\frac{n+m-3}{m-1}, \end{gathered} \tag{1.23}$$

где $\|h\|_{2,\omega}$ означает $L_2(\omega)$-норму функции $h(\theta)$,

$$|j_\nu(z)| \leqslant 1, \quad |H_\nu^{(1)}(z)| \leqslant 4\pi^{-1}\bigl(2^\nu\Gamma(\nu+1)z^{-\nu} + z^{-1/2}\bigr), \tag{1.24}$$

$$(\Delta + k_0^2)(Y_m(x)j_{\nu+m}(k_0 r)) = 0, \quad x \in \mathbb{R}^n. \tag{1.25}$$

Отсюда и из оценки (1.22) получаем

$$\begin{aligned} |\hat{u}_m(x)| \leqslant b_m(r) &\equiv 2M|\omega|^{-1}k_0^{2N}R_0^m a_m \times \\ &\times \bigl[r^{1-n-m} + k_0^{\nu+m-1/2}(2^{\nu+m}\Gamma(\nu+m+1)r^{1/2})^{-1}\bigr], \end{aligned} \tag{1.26}$$

$$|Y_m(x')| \leqslant M|\omega|^{-1}k_0^{2N}R_0^m a_m, \quad x' \in \omega. \tag{1.27}$$

На основании работ [8], [9] и оценок (1.26), (1.27) получаем, что справедливо следующее утверждение.

Лемма 3. *Задача* (1.10), (1.11) *корректно разрешима в классе аналитических функционалов* $Z'(\mathbb{R}^n)$. *При этом*:

1) *ряды* (1.13), (1.14), *представляющие псевдоисточник* $\hat{f}(x)$ *и соответствующую ему волновую функцию* $\hat{u}(x)$, *сходятся в слабой топологии пространства* $Z'(\mathbb{R}^n)$;

2) *частичные суммы* $\hat{f}_N(x)$, $\hat{u}_N(x)$ *рядов* (1.13), (1.14) *суть распределения класса* $S'(\mathbb{R}^n)$, *причем справедливы равенства* (1.20), (1.21);

3) *функциональный ряд* (1.14), *представляющий* $\hat{u}(x)$, *равномерно на каждой сфере* $\omega_r = \{|x| = r\}$ $(r > R_0)$ *сходится к решению* $u(x)$ *задачи* (1.4)–(1.6), *мажорируясь числовым рядом* $\sum_m b_m(r)$, *коэффициенты которого определяются равенством* (1.26).

2. КЛАССИЧЕСКИЙ СЛУЧАЙ (ФИНИТНЫЙ ИСТОЧНИК)

В классическом (неквантовом) случае потенциал $q(\cdot,\cdot,\cdot)$ не создает связанных состояний (см. [3]), поэтому фактически является источником, и, следовательно, модель Хартри–Фока–Слейтера сводится к задаче (1.4)–(1.6) с той лишь разницей, что явный вид источника $f(x)$ зачастую *неизвестен*. Будем считать, что известны лишь

1) радиус R_0 шара V_0, в котором локализован источник $f(x)$;

2) амплитуда рассеяния по всем направлениям $\theta \in \omega$, но при фиксированном уровне энергии k_0^2:

$$\langle f(x); e^{ik_0(x\cdot\theta)}\rangle = F(\theta), \quad \theta \in \omega, \tag{2.1}$$

или, что то же самое,

$$\operatorname{Res}|_{\lambda=k_0}\langle u(x); e^{i\lambda(x\cdot\theta)}\rangle = -(2k_0)^{-1}F(\theta), \quad \theta \in \omega. \tag{2.2}$$

Замечание 2. В эквивалентности условий (2.1) и (2.2) нетрудно убедиться, применив преобразование Фурье к уравнению (1.4).

Замечание 3. Несмотря на то что функция $F(\theta)$ из правой части равенства (2.1) должна быть вещественно-голоморфна по переменным $\theta \in \omega$, само условие (2.1) не позволяет восстановить распределение $f(x)$ (в чем легко убедиться, положив $n = 1$). Более того, существует бесконечно много источников $f(x)$, удовлетворяющих условиям (1.6), (2.1).

Рассмотрим вопрос о построении псевдопотенциала $\hat{f}(x)$ для задачи (1.4)–(1.6), (2.1). Сама постановка этой задачи формулируется так же, как и для задачи (1.4)–(1.6), с той лишь разницей, что появляется дополнительное условие:

$$\langle \hat{f}(x); e^{ik_0(x\cdot\theta)}\rangle = F(\theta), \quad \theta \in \omega. \tag{2.3}$$

Однако при этом возникает ряд дополнительных вопросов:

1. Обеспечивает ли условие (2.1) однозначность сужения на $\mathbb{R}^n \setminus V_0$ всех решений $u(x)$ задачи (1.4)–(1.6) с источниками $f(x)$, удовлетворяющими условиям (1.6), (2.1)?

2. Достаточно ли условия (2.1) для построения самого псевдопотенциала $\hat{f}(x)$?

Следующее утверждение показывает, что ответы на все эти вопросы положительны.

ТЕОРЕМА 1. *Псевдоисточник* $\hat{f}(x)$ *задачи* (1.4)–(1.6), (2.1) *и соответствующее ему решение* $\hat{u}(x)$ *задачи* (1.10), (1.11), (2.3) *имеют следующий вид*:

$$\hat{f}(x) = \sum_m \widehat{Y}_m(ik_0^{-1}D)\delta(x), \tag{2.4}$$

$$\hat{u}(x) = \frac{1}{4}\sum_m \widehat{Y}_m(\theta)(-i)^{m+1}\left(\frac{k_0}{2}\pi r\right)^{\nu} H^{(1)}_{\nu+m}(k_0 r), \tag{2.5}$$

где сферические гармоники $\widehat{Y}_m(\theta)$ *берутся из разложения*

$$F(\theta) = \sum_m \widehat{Y}_m(\theta). \tag{2.6}$$

При этом задача (1.10), (1.11), (2.3) *корректно разрешима в пространстве аналитических функционалов* $Z'(\mathbb{R}^n)$, *и справедливо утверждение*, *аналогичное лемме* 3 (*с той лишь разницей*, *что в оценке* (1.26) *следует вместо числа* M *взять* $k_0^{-2N}\|F\|_{2,\omega}$).

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Проверка условия (2.3) тривиальна. Докажем справедливость равенств (2.4), (2.5). Фиксируем произвольный источник $f(x) \in E'(\mathbb{R}^n)$, удовлетворяющий условиям (1.6), (2.1). Воспользуемся равенством (см. [9])

$$e^{i(x\cdot y)} = \sum_m A_m Z_m(ix, y) j_{\nu+m}(|x|\cdot|y|), \tag{2.7}$$

где коэффициенты A_m определены формулой (1.16). Отсюда и из формул (2.1), (2.6), (1.2), (1.3) получаем

$$\widehat{Y}_m(\theta) = (ik_0)^m A_m \langle f(x); Z_m(x,\theta) j_{\nu+m}(k_0|x|)\rangle. \tag{2.8}$$

Заменив в формуле (1.15) y на x и x на θ и сравнивая ее с (2.8), получаем

$$A_m Y_m(\theta) = (ik_0)^{-m}\widehat{Y}_m(\theta). \tag{2.9}$$

Сравнивая теперь (2.4) с (1.13), (2.5) с (1.14), немедленно устанавливаем (с учетом (2.9) и равенства $Y_m(r\theta) = r^m Y_m(\theta)$) справедливость равенств (2.4), (2.5).

Таким образом, условие (2.1) действительно оказывается достаточным для построения псевдоисточника $\hat{f}(x)$. Отсюда, в частности, вытекает, что сужения на $\mathbb{R}^n \setminus V_0$ всех решений $u(x)$ задачи (1.4)–(1.6), (2.1) совпадают между собой и с $\hat{u}(x)$.

Уточним теперь оценку (1.27). В силу (1.3), (1.23), (2.6) имеем

$$|\widehat{Y}_m(\theta)| = \left|\int_\omega \widehat{Y}_m(\theta')Z_m(\theta,\theta')\,d\omega(\theta')\right| \leqslant \|\widehat{Y}_m\|_{2,\omega}\|Z_m\|_{2,\omega} \leqslant |\omega|^{-1}a_m\|F\|_{2,\omega}. \tag{2.10}$$

Сравнивая (2.10) с (1.27), уточняем (с учетом (1.24), (1.25)) оценку (1.26):

$$\begin{aligned} |\hat{u}_m(x)| \leqslant d_m(r) = 2\|F\|_{2,\omega}|\omega|^{-1}R_0^m a_m \times \\ \times \left[r^{1-n-m} + k_0^{\nu+m-1/2}(2^{\nu+m}\Gamma(\nu+m+1)r^{1/2})^{-1}\right]. \end{aligned} \tag{2.11}$$

Отсюда, в частности, следует непрерывная зависимость $\hat{u}(x)$ (в слабой топологии $Z'(\mathbb{R}^n)$) от функции $F(\theta)$ из условия (2.3). Теорема доказана.

Следствие 1. *Если* $F(\theta)=0$, *то* $\hat{u}(x)\equiv 0$.

Замечание 4. В силу ограничения (1.6) имеет место соотношение

$$\|\widehat{Y}_m(\theta)\|_{2,\omega}=O(m^{-\infty}),\quad m\to+\infty,$$

поэтому оценки (2.10), (2.11) могут быть еще улучшены, однако такие уточнения не являются предметом исследования данной работы.

3. КВАНТОВЫЙ СЛУЧАЙ (КОРОТКОДЕЙСТВУЮЩИЙ ПОТЕНЦИАЛ)

В квантовом случае квазиклассическая модель Хартри–Фока–Слейтера уже должна учитывать связанные состояния, по крайней мере, в пределах атомного остова (см. [2], [5], [6]), внутри которого волновая функция взаимодействует "сама с собой", поэтому следует рассмотреть уравнение

$$(\Delta+k_0^2)u(x)+q(x,u,Du)=0,\quad x\in\mathbb{R}^n. \tag{3.1}$$

Большинство известных методов перенормировки потенциала (см., например, [4]–[6]) предполагают заведомо известным явный вид потенциала $q(\cdot,\cdot,\cdot)$ (т.е. зависимость от x, u, Du), однако во многих реальных ситуациях это не так. Поэтому будем предполагать, что явный вид $q(\cdot,\cdot,\cdot)$ *неизвестен*.

Наложим следующие условия на $q(\cdot,\cdot,\cdot)$:

1) потенциал $q(\cdot,\cdot,\cdot)$ бесконечно дифференцируем по совокупности переменных, причем

$$\operatorname{supp} q(x,u,Du)\subset V_0=\{|x|\leqslant R_0\}, \tag{3.2}$$

где число R_0 считается заранее известным;

2) $q(x,u(x),Du(x))\in L_{1,\mathrm{loc}}(\mathbb{R}^n)$ для всех $u(x),Du(x)\in L_{1,\mathrm{loc}}(\mathbb{R}^n)$.

Кроме того, добавим к уравнению (3.1) условия (1.5) и (2.2).

Замечание 5. В дальнейшем мы намеренно будем опускать вопросы, связанные с существованием и единственностью задачи (3.1), (1.5), (2.2), поскольку они не являются предметом рассмотрения данной работы и в то же время достаточно подробно освещены в [3], [7]. С другой стороны, в силу введенных выше предположений решения $u(x)$ уравнения (3.1) регулярны и легко могут быть интерпретированы как обобщенные решения в классах $S'(\mathbb{R}^n)$, $\mathcal{D}'(\mathbb{R}^n)$ или $Z'(\mathbb{R}^n)$ равенством

$$\langle u;(\Delta+k_0^2)\varphi\rangle+\langle q;\varphi\rangle=0 \tag{3.3}$$

для всех пробных функций $\varphi(x)$.

Рассмотрим вопрос о построении псевдопотенциала для задачи (3.1), (3.2), (1.5), (2.2). Предполагая, что эта задача разрешима, фиксируем какое-либо ее решение $u(x)$ и полагаем

$$f(x)\doteq -q(x,u(x),Du(x)), \tag{3.4}$$

причем, в силу условия (3.2) и эквивалентности равенств (2.1) и (2.2) распределение (функция) $f(x)$ удовлетворяет условиям (1.6), (2.1). Таким образом, мы немедленно приходим к задаче (1.10), (1.11), (2.3), откуда автоматически вытекает справедливость следующего утверждения.

Теорема 2. *Если задача* (3.1), (3.2), (1.5), (2.2) *разрешима, то псевдопотенциал (псевдоисточник)* $\hat{f}(x)$ *этой задачи и соответствующее ему решение* $\hat{u}(x)$ *задачи* (1.10), (1.11), (2.3) *имеют вид* (2.4)–(2.6). *При этом задача* (1.10), (1.11) *корректно разрешима (вместе с задачей* (3.1), (3.2), (1.5), (2.2)) *в классе аналитических функционалов* $Z'(\mathbb{R}^n)$, *и справедливо утверждение, аналогичное лемме* 3 *(с той лишь разницей, что вместо оценки* (1.26) *имеет место более точная оценка* (2.11)).

Следствие 2. *Если* $F(\theta) = 0$, *то* $u(x) = 0$ *в* $\mathbb{R}^n \setminus V_0$.

Замечание 6. Интересно, что даже в том случае, если исходная задача (3.1), (3.2), (1.5), (2.2) не имеет решения (т.е. потенциал $q(\cdot,\cdot,\cdot)$ "несовместим" с амплитудой рассеяния $F(\theta)$), данный метод перенормировки псевдопотенциалом $\hat{f}(x)$ (формулы (2.4)–(2.6)) также применим. Действительно, потенциал q является величиной ненаблюдаемой и его выбор есть результат нашего произвола; волновая же функция $u(x)$ в области $\mathbb{R}^n \setminus V_0$ целиком определяется амплитудой рассеяния $F(\theta)$ (и, как следует из теоремы 2, *не зависит от выбора потенциала* q).

Благодарности. Автор выражает глубокую признательность С.И. Курганскому за внимание к работе.

Список литературы

[1] *В. В. Немошкаленко, В. Н. Антонов*. Методы вычислительной физики в теории твердого тела. Киев: Наукова думка, 1985.

[2] *Дж. Слейтер*. Методы согласованного поля для молекул и твердых тел. М.: Мир, 1978.

[3] *Р. Г. Новиков, Г. М. Хенкин*. УМН. 1987. Т. 42. № 3. С. 93–151.

[4] *M. Pasolt, R. Taylor*. J. Phys. F. 1972. V. 2. № 2. P. 270–276.

[5] *M. Weinert*. J. Math. Phys. 1981. V. 22. № 11. P. 2433–2439.

[6] *С. Альбеверио, Ф. Гестези, Р. Хеэг-Крон, К. Хольден*. Решаемые модели в квантовой механике. М.: Мир, 1991.

[7] *Ф. А. Березин, М. А. Шубин*. Уравнение Шредингера. М.: МГУ, 1983.

[8] *Ю. В. Засорин*. ЖВМиМФ. 1997. Т. 37. № 7. С. 828–840.

[9] *Ю. В. Засорин*. Сиб. матем. журн. 1997. Т. 28. № 6. С. 1282–1299.

[10] *Ю. В. Засорин*. Конденсированные среды и межфазные границы. 2000. Т. 2. № 3. С. 261–262.

[11] *И. Стейн, Г. Вейс*. Введение в гармонический анализ на евклидовых пространствах. М.: Мир, 1974.

[12] *В. С. Владимиров*. Обобщенные функции в математической физике. М.: Наука, 1979.

[13] *Г. Бейтмен, А. Эрдейи*. Высшие трансцендентные функции. Т. 2. М.: Наука, 1974.

Поступила в редакцию 16.VII.2001 г.