УДК 517.956+539.37

МЕТОД СИНГУЛЯРНОГО ПСЕВДОПОТЕНЦИАЛА ДЛЯ МОДЕЛИ ТИПА ХАРТРИ-ФОКА-СЛЕЙТЕРА

© 2001 г. Ю. В. Засорин

Воронежский государственный университет

Аннотация

Для модельной задачи типа Хартри-Фока-Слейтера, описываемой (нелинейным) стационарным уравнением Шредингера с нелокальным (интегральным) краевым условием, строится сингулярный псевдопотенциал, с помощью которого строится в явном виде решение задачи. Преимущество предлагаемого метода состоит в том, что он не предполагает знания явного вида исходного потенциала.

Введение

Ряд вопросов теоретической физики (например, теория слабых взаимодействий, расчет ЯМР в плазме или энергетических зон в ФТТ), приводящих к моделям типа Хартри-Фока-Слейтера (см., например, [1]–[3]), зачастую приводят и к необходимости решения следующих неклассических краевых задач для стационарного уравнения Шредингера (см. [3]–[6]):

$$(\Delta + k_0^2)u(x) - q(x,u,Du) = 0,\ x \in R^n; \qquad (1)$$

$$(D_r + ik_0)u(x) = o(r^{(1-n)/2}),\ r = |x| \to \infty \qquad (2)$$

с нелокальным краевым условием:

$$\int\limits_{R^n} \exp[ik_0(\theta\cdot x)]q(x,u(x),Du(x))\,dx = F(\theta),\ \theta \in \omega \qquad (3)$$

Здесь $x = \{x_1;\ldots;x_n\}$ — вектор евклидова пространства R^n, $r = |x|$ — его евклидова длина; θ — точка единичной сферы $\omega = \{|x| = 1\}$; $D = \{D_1,\ldots,D_n\}$, $D_j = \partial/\partial x_j$, $D_r = \partial/\partial r$, $\Delta = D\cdot D$ — оператор Лапласа в R^n; $k_0 = \omega/c$ — волновое число. Потенциал q предполагается бесконечно дифференцируемым по совокупности переменных и короткодействующим.

$$supp\, q(\cdot,\cdot,\cdot) \in V_0 = \{|x| \le R_0\}, \qquad R_0 > 0 \qquad (4)$$

Нелокальное условие (3) означает, что амплитуда рассеяния $F(\theta)$ задается по всем направлениям $\theta \in \omega$, но при фиксированном уровне энергии, соответствующем k_0.

Однако из-за нелокального условия (3) задача (1)–(3) не может быть решена стандартными методами теории уравнений в частных производных (в частности, если потенциал q не зависит явно от u, Du, то его решение неединственно). Что же касается неклассических методов, то наиболее эффективным из последних является так называемый "метод псевдопотенциала"или "метод перенормировки потенциала", суть которого вкратце состоит в следующем:

Требуется построить псевдопотенциал $\hat{q}$, также удовлетворяющий условиям (3), (4), не создающий связанных состояний, локализованных внутри данного остова (т.е., не содержащих нелинейности по u, Du), и такой, что:

1) задача

$$(\Delta + k_0^2)\hat{u}(x) - \hat{q}(x,\hat{u},D\hat{u}) = 0, \qquad x \in R^n; \quad (5)$$

$$(D_r + ik_0)\hat{u} = o(r^{(1-n)/2}); \qquad r = |x| \to \infty, \quad (6)$$

была бы корректно разрешима в каком-либо классе распределений;

2) выполнялось бы тождество:

$$\hat{u}(x) \equiv u(x), \qquad |x| \ge R_0. \qquad (7)$$

Равенство (7), в свою очередь, подразумевает

1) разрешимость задачи (1)–(3);

2) однозначность сужения всех ее решений $u(x)$ на область$R^n \setminus V_0$.

Метод псевдопотенциалов имеет несколько разновидностей (см., например, [4]–[6]), однако все они обладают рядом недостатков:

1) затруднено построение решения $\hat{u}(x)$;

2) необходимо знать явный вид потенциала q;

3) сравнительная узость класса потенциалов q, для которых эти методы применимы.

Предлагаемый ниже метод лишен этих недостатков. Он предполагает известными лишь:

1) Радиус R_0 действия потенциала q;

2) амплитуду рассеяния (3).

Кроме того, потенциал q вообще явно не зависит от u, Du, что немедленно превращает уравнение (5) в легко решаемое уравнение Гельмгольца.

Основные идеи этого метода изложены в работах [3]–[6].

§1. Обозначения и основные результаты

Через $Y_m(x)$, как обычно, будем обозначать однородный гармонический полином степени m, а его сужение $Y_m(\theta)$ на единичную сферу ω называть сферической гармоникой порядка m. Зональной гармоникой $\mathcal{Z}_m(\theta_1, \theta_2)$, $(\theta_1, \theta_2 \in \omega)$ будем называть сужение на $\omega \times \omega$ однородного полинома $\mathcal{Z}_m(x, y)$, $(x, y \in R^n)$, такого, что:

$$\mathcal{Z}_m(\lambda x, y) = \mathcal{Z}_m(x, \lambda y) = \lambda^m \mathcal{Z}_m(x, y); \tag{8}$$

$$\int\limits_{\omega} \mathcal{Z}_m(\theta, \theta') Y_k(\theta')\, d\omega(\theta') = \begin{cases} 0; & k \neq m \\ Y_m(\theta); & k = m \end{cases} \tag{9}$$

Наконец, через $D'(R^n)$, $S'(R^n)$ и $Z'(R^n)$ будем обозначать шварцевские классы распределений (последнее из них, являющееся Фурье-образом пространства $D'(R^n)$, будем в дальнейшем называть пространством аналитических функционалов).

Теорема 1. *1) Псевдопотенциал $\hat{q}(x)$ и соответствующее ему решение $\hat{u}(x)$ могут быть представлены в виде формальных рядов:*

$$\hat{q}(x) = \sum_m Y_m(ik_0^{-1} D)\delta(x); \tag{10}$$

$$\hat{u}(x) = \sum_m Y_m(\theta) \hat{w}_m(z), \tag{11}$$

$$\hat{w}_m(z) = 4^{-1}(-i)^{m+1}(k_0/2\pi r)^\nu H^{(1)}_{\nu+m}(k_0 r); \tag{12}$$

где $\nu = (n-2)/2$; $\delta(x)$ — "дельтафункция Дирака; $H^{(1)}_\nu(z) = J_\nu(z) + iN_\nu(z)$ — функция Бесселя 3-го рода; $J_\nu(z)$, $N_\nu(z)$ — функции Бесселя 1-го и 2-го рода соответственно, а гармоники $Y_m(\theta)$ берутся из разложения:

$$F(\theta) = \sum_m Y_m(\theta); \tag{13}$$

$$Y_m(\theta) = \int\limits_{\omega} \mathcal{Z}_m(\theta, \theta') F(\theta')\, d\omega(\theta') \tag{14}$$

2) Частичные суммы $\hat{f}_N(x)$, $\hat{u}_N(x)$ рядов (10), (11) *есть распределения класса $S'(R^n)$, причем:*

$$\langle \hat{u}_N; \varphi \rangle = v.p. \int\limits_{R^n} \hat{u}_N(x)\varphi(x)\, dx, \tag{15}$$

где $\varphi \in S'(R^n)$, а интеграл $v.p. \int$ понимается в смысле главного значения по Коши:

$$v.p. \int\limits_{R^n} h(x)\, dx \stackrel{\Delta}{\equiv} \int\limits_0^\infty r^{n-1}\, dr \int\limits_{\omega} h(r\theta)\, d\omega(\theta). \tag{16}$$

3) Ряды (10), (11) *сходятся в слабой топологии пространства $Z'(R^n)$.*

4) Задача (5), (6) *с псевдопотенциалом $\hat{q}$, определнным равенствами* (10), (13), (14), *корректно разрешима в классе $Z'(R^n)$.*

Доказательство: Равенство (3) для псевдопотенциала $\hat{q}(x)$ проверяется тривиально.

Покажем справедливость равенств (10), (11). Фиксируем произвольное решение $u_0(x)$ задачи (1)–(3) и положим:

$$f_0(x) \stackrel{\Delta}{\equiv} q(x, u_0(x), Du_0(x)), \tag{17}$$

после чего уравнение (1) превращается в уравнение Гельмгольца:

$$(\Delta + k_0^2) u_0(x) = f_0(x), \qquad x \in R^n \tag{18}$$

а задача (18), (2) становится корректно разрешимоа, причем:

$$u_0(x) = \int\limits_{V_0} E(x-y) f_0(y)\, dy \tag{19}$$

где

$$E(x) = -i4^{-1}(k_0/2\pi r)^\nu H^{(1)}_\nu(k_0 r), \quad \nu = (n-1)/2, r = |x| \tag{20}$$

— фундаментальное решение уравнения Гельмгольца:

$$(\Delta + k_0^2) E(x) = \delta(x). \tag{21}$$

Воспользуемся известными свойствами функций Бесселя (см. [7]: стр. 116, формулы (7.15.28), (7.15.29); стр. 176, формулы (10.9.3), (10.9.5); стр. 230, формула (11.2.8)). Объединяя их с равенствами (8), (20), получаем, что:

$$E(x-y) =$$

$$= -i\pi 2^{-1} r^{-\nu} \rho^{-\nu} \sum_m \mathcal{Z}_m(\theta, \theta') J_{\nu+m}(k_0\rho) H^{(1)}_{\nu+m}(k_0 r),$$

$$r = |x| > \rho = |y|,\ \theta = x/r,$$

$$\theta' = y/\rho,\ \nu = (n-2)/2. \quad (22)$$

Вернемся к формуле (19). Пусть $x \in R^n \setminus V_0$, тогда $|x| > R_0 \geq |y|$. На основании формул (8), (19), (22) получаем, что:

$$u_0(x) = \sum_m w_m(r) \hat{Y}_m(\theta), \quad (23)$$

$$w_m(r) = -i4^{-1}(k_0/2\pi r)^{\nu} H^{(1)}_{\nu+m}(k_0 r),$$

$$r = |x| > R_0; \quad (24)$$

$$\hat{Y}_m(\theta) \equiv r^{-m} \hat{Y}_m(x) = (2\pi)^{\nu+1} k_0^{-\nu} r^{-m} \times$$

$$\times \int\limits_{V_0} \mathcal{Z}_m(x,y) J_{\nu+m}(k_0|y|) f_0(y) |y|^{-\nu}\, dy, \quad x = r\theta. \quad (25)$$

Определим теперь функцию $\hat{u}(x)$ равенствами:

$$\hat{u}(x) = \sum_m \hat{Y}_m(\theta) \hat{\omega}_m(r); \quad (26)$$

$$\hat{w}_m(r) = -i4^{-1}(k_0/2\pi r)^{\nu} H^{(1)}_{\nu+m}(k_0 r),$$

$$r = |x| \geq 0, \quad (27)$$

где гармоники $\hat{Y}_m(\theta)$ определены равенствами (25).

Сравнивая формулы (23), (24) и (26), (27), немедленно получаем справедливость тождества (7). Следовательно, для доказательства равенств (11), (12) достаточно установить справедливость равенства:

$$\hat{Y}_m(\theta) = Y_m(\theta), \quad (28)$$

где гармоника $Y_m(\theta)$ определяется формулами (8), (9).

Воспользуемся формулой (см. [8], [9]):

$$\exp[ik_0(\theta \cdot y)] =$$

$$(2\pi)^{\nu+1}(k_0\rho)^{-\nu} \sum_m (i\rho)^{-m} \mathcal{Z}_m(\theta; y) J_{\nu+m}(k_0\rho),$$

$$\rho = |y|. \quad (29)$$

Меняя теперь в формуле (3) x на y, на основании формул (8), (9), (13), (14), (17), (25) и (28) немедленно доказываем равенство (28).

Равенство (10) следует из равенств (11), (12), (20), (21) и формул (см. [9]):

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

$$= (-1)^m z^{-\nu-m} H^{(1)}_{\nu+m}(z), \quad (30)$$

$$Y_m(x)(z^{-1}D_r)^m \delta(x) = Y_m(D)\delta(x), r = |x|. \quad (31)$$

Утверждения 2)–4) Теоремы фактически доказаны в работах [8], [9].

Теорема доказана.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Немошкаленко В. В., Антонов В. Н. Методы вычислительной физики в теории твердого тела. Киев: Наукова Думка. 1985. — 480 с.

2. Слейтер Дж. Методы согласованного поля для молекул и твердых тел. М.: Мир. 1978. — 658 с.

3. Weinert M. Solutions of Poisson's equation: Beyond Evald-type method.// J. Math. Phis. 1981. V. 22, № 11. P. 2433—2439.

4. Rasolt M., Naylor R. Pseudopotential from the variable phase approach to scattering theory.// J. Phis. F. 1972. V. 2, № 2. P. 270—276.

5. Новиков Р. Г., Хенкин Г. М. $\bar{\partial}$-уравнение в многомерной обратной задаче рассеяния.// Успехи мат. наук. 1987. Т. 42, № 3. С. 93—151.

6. Альбеверио С., Гестези Ф., Хеэг-Крон Р., Хольден К. Решаемые модели в квантовой механике. М.: Мир. 1991. — 568 с.

7. Бейтмен Г., Эрдейи А. Высшие трансцендентные функции. М.: Наука. 1974. Т. 2. — 296 с.

8. Засорин Ю. В. О принципе Ньютона для уравнения Гельмгольца.// Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1997. Т. 37, № 7. С. 828—840.

9. Засорин Ю. В. Гармонический анализ в шварцевских пространствах и некоторые приложения к неклассическим задачам математической физики.// Сиб. мат. журнал. 1997. Т. 38, № 6. С. 1282—1299.