Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

А. А. Локшин, Об одном семействе точно решаемых много-
частичных уравнений Шрёдингера с двухчастичным потен-
циалом, *Матем. заметки*, 2001, том 70, выпуск 1, 150–154

DOI: <https://doi.org/10.4213/mzm728>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подра-
зумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением
<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 54.162.85.209

26 апреля 2023 г., 18:12:01

ОБ ОДНОМ СЕМЕЙСТВЕ ТОЧНО РЕШАЕМЫХ МНОГОЧАСТИЧНЫХ УРАВНЕНИЙ ШРЁДИНГЕРА С ДВУХЧАСТИЧНЫМ ПОТЕНЦИАЛОМ

А. А. Локшин

Нахождение точных решений многочастичных уравнений Шрёдингера представляет не только чисто математический, но и практический интерес. Дело в том, что в настоящее время, например, в квантовой химии разработан ряд вариационных процедур, с помощью которых строятся приближенные решения многочастичных уравнений Шрёдингера, описывающих движение электронов в многоатомных молекулах (метод Хартри–Фока и др.). Однако погрешности, даваемые упомянутыми вариационными процедурами, численно оценить весьма сложно. В этой ситуации существенной оказывается роль точно решаемых модельных задач, которые можно использовать для тестирования уже разработанных приближенных методов. Насколько это известно автору, подобные тестовые задачи со сколько-нибудь реалистичным двухчастичным потенциалом (даже в случае “одномерных частиц”) вплоть до недавнего времени отсутствовали. Этот пробел отчасти восполняется результатом настоящей заметки.

ТЕОРЕМА 1 (подготовительная). Пусть $F(x)$, $x \in \mathbb{R}^1$, – достаточно гладкая функция, удовлетворяющая при $x \neq y$ функциональному уравнению

$$\frac{F'(x) - F'(y)}{x - y} = f(x) + f(y) + g(x - y), \quad (1)$$

где f и g – произвольные достаточно гладкие функции, причем функция g предполагается четной. Тогда если $F(x)/|x| \rightarrow -\infty$ при $|x| \rightarrow \infty$, то функция

$$\varphi(x_1, \dots, x_n) = \left(\prod_{\substack{i,j \\ 1 \leq i < j \leq n}} |x_i - x_j|^\gamma \right) e^{F(x_1) + \dots + F(x_n)} \quad (2)$$

является собственной функцией действующего в $L_2(\mathbb{R}^n)$ оператора

$$H = -\Delta + V(x_1, \dots, x_n), \quad n \geq 3, \quad (3)$$

где

$$V = F'^2(x_1) + \dots + F'^2(x_n) + (\gamma(n-1) + 1)[F''(x_1) + \dots + F''(x_n)] + 2\gamma \sum_{\substack{k,j \\ 1 \leq k < j \leq n}} \left[g(x_k - x_j) + \frac{\gamma - 1}{(x_k - x_j)^2} \right], \quad (4)$$

$$D(H) = W_2^2(\mathbb{R}^n) \cap D(V), \quad (5)$$

$$D(V) = \{\psi(x_1, \dots, x_n) \mid V\psi \in L_2(\mathbb{R}^n)\}, \quad (6)$$

причем соответствующее собственное значение E равно нулю. Здесь Δ – оператор Лапласа по переменным $x_1, \dots, x_n$; постоянная γ удовлетворяет неравенству

$$\gamma > \frac{3}{2}. \quad (7)$$

ЗАМЕЧАНИЕ. Переходя в (1) к пределу при $y \rightarrow x$, очевидно, получаем, что $F''(x) = 2f(x) + g(0)$. Таким образом, (1) может быть переписано в виде

$$\frac{F'(x) - F'(y)}{x - y} = \frac{F''(x) + F''(y)}{2} + g(x - y) - g(0).$$

В дальнейшем мы, не ограничивая общности, можем считать, что $g(0) = 0$, так что окончательно (1) приобретает вид

$$\frac{F'(x) - F'(y)}{x - y} = \frac{F''(x) + F''(y)}{2} + g(x - y), \quad g(0) = 0. \quad (8)$$

Прежде чем доказывать теорему, установим следующий вспомогательный результат.

ЛЕММА 1. Пусть $a_1, \dots, a_n$ — произвольный набор попарно различных (вообще говоря, комплексных) чисел. Тогда при $n \geq 3$

$$S(n) \equiv \sum'_{i,j,k=1}^n \frac{1}{(a_i - a_j)(a_i - a_k)} = 0. \quad (9)$$

Здесь штрих у знака суммы означает, что суммирование ведется по попарно различным индексам.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Имеем из (9)

$$\begin{aligned} S(n) &= \sum'_{i,j,k=1}^n \frac{(a_i - a_j) - (a_i - a_k)}{(a_i - a_j)(a_i - a_k)(a_k - a_j)} \\ &= \sum'_{i,j,k=1}^n \frac{1}{(a_i - a_k)(a_k - a_j)} - \sum'_{i,j,k=1}^n \frac{1}{(a_i - a_j)(a_k - a_j)} \\ &= - \sum'_{i,j,k=1}^n \frac{1}{(a_k - a_i)(a_k - a_j)} - \sum'_{i,j,k=1}^n \frac{1}{(a_j - a_i)(a_j - a_k)} \\ &= -2S(n), \end{aligned}$$

откуда, очевидно, и следует утверждение леммы.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО ТЕОРЕМЫ 1. Перепишем выражение для $\varphi(x_1, \dots, x_n)$ в виде

$$\varphi = \exp \left\{ F(x_1) + \dots + F(x_n) + \gamma \sum_{\substack{i,j \\ 1 \leq i < j \leq n}} \ln |x_i - x_j| \right\},$$

откуда, дифференцируя по x_k , имеем

$$\begin{aligned} \varphi'_{x_k} &= \varphi \cdot \left[F'(x_k) + \gamma \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^n \frac{1}{x_k - x_j} \right], \\ \varphi''_{x_k} &= \varphi \cdot \left\{ \left[F'(x_k) + \gamma \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^n \frac{1}{x_k - x_j} \right]^2 + F''(x_k) - \gamma \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^n \frac{1}{(x_k - x_j)^2} \right\} \\ &= \varphi \cdot \left\{ F'^2(x_k) + 2\gamma \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^n \frac{F'(x_k)}{x_k - x_j} + \gamma^2 \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^n \frac{1}{(x_k - x_j)^2} \right. \\ &\quad \left. + 2\gamma^2 \sum_{\substack{i,j=1 \\ i < j \\ i,j \neq k}}^n \frac{1}{(x_k - x_i)(x_k - x_j)} + F''(x_k) - \gamma \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^n \frac{1}{(x_k - x_j)^2} \right\}. \end{aligned}$$

Следовательно,

$$\begin{aligned} \Delta\varphi(x_1, \dots, x_n) = \varphi(x_1, \dots, x_n) \cdot \left\{ F'^2(x_1) + \dots + F'^2(x_n) \right. \\ \left. + 2\gamma \sum_{k=1}^n \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^n \frac{F'(x_k)}{x_k - x_j} + \gamma(\gamma - 1) \sum_{\substack{k,j=1 \\ k \neq j}}^n \frac{1}{(x_k - x_j)^2} \right. \\ \left. + F''(x_1) + \dots + F''(x_n) + 2\gamma^2 \sum_{k=1}^n \sum_{\substack{i,j=1 \\ i < j \\ i, j \neq k}}^n \frac{1}{(x_k - x_i)(x_k - x_j)} \right\}. \quad (10) \end{aligned}$$

Очевидно, что последнее слагаемое в фигурных скобках равно

$$\gamma^2 \sum'_{i,j,k=1}^n \frac{1}{(x_k - x_i)(x_k - x_j)} \quad (11)$$

(штрих у знака суммы означает, что i, j, k попарно различны). Поэтому в силу леммы 1 при попарно различных значениях координат $x_1, \dots, x_n$ это слагаемое тождественно равно нулю. Заметим, далее, что на гиперплоскостях в $\mathbb{R}^n$, на которых знаменатель функции (11) обращается в нуль, эту функцию следует доопределить по непрерывности нулем. Это утверждение становится очевидным, если вернуться к первоначальной записи функции φ в виде (2) и вспомнить, что по условию теоремы $\gamma > 3/2$.

Далее, заметим, что

$$\begin{aligned} 2\gamma \sum_{k=1}^n \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^n \frac{F'(x_k)}{x_k - x_j} &= 2\gamma \sum_{\substack{k,j=1 \\ j \neq k}}^n \frac{F'(x_k)}{x_k - x_j} = \gamma \sum_{\substack{k,j=1 \\ j \neq k}}^n \frac{F'(x_k)}{x_k - x_j} + \gamma \sum_{\substack{k,j=1 \\ j \neq k}}^n \frac{F'(x_j)}{x_j - x_k} \\ &= \gamma \sum_{\substack{k,j=1 \\ j \neq k}}^n \frac{F'(x_k)}{x_k - x_j} - \gamma \sum_{\substack{k,j=1 \\ j \neq k}}^n \frac{F'(x_j)}{x_k - x_j} = \gamma \sum_{\substack{k,j=1 \\ j \neq k}}^n \frac{F'(x_k) - F'(x_j)}{x_k - x_j} \\ &= \gamma \sum_{\substack{k,j=1 \\ j \neq k}}^n \left[\frac{F''(x_k) + F''(x_j)}{2} + g(x_k - x_j) \right] \\ &= \gamma \cdot (n-1) \sum_{k=1}^n F''(x_k) + 2\gamma \sum_{k < j} g(x_k - x_j) \end{aligned}$$

(мы воспользовались соотношением (8)). В результате (10) переписется в виде

$$\begin{aligned} \Delta\varphi(x_1, \dots, x_n) = \varphi(x_1, \dots, x_n) \left\{ F'^2(x_1) + \dots + F'^2(x_n) + \gamma(n-1)[F''(x_1) + \dots + F''(x_n)] \right. \\ \left. + 2\gamma \sum_{k < j} g(x_k - x_j) + F''(x_1) + \dots + F''(x_n) + 2\gamma(\gamma-1) \sum_{k < j} \frac{1}{(x_k - x_j)^2} \right\}, \end{aligned}$$

откуда и следует утверждение теоремы.

Теперь осталось выяснить, что функции F и g , удовлетворяющие соотношению (8), действительно существуют. Этот вопрос решается в следующей лемме, где мы переобозначаем F' через G .

ЛЕММА 2. Пусть функция $G(x)$ удовлетворяет следующим условиям:

- а) $G(x)$ вещественно-аналитична на $\mathbb{R}^1$;
- б) существует вещественно-аналитическая на $\mathbb{R}^1$ четная функция g такая, что для любых $x, y \in \mathbb{R}^1$ ($x \neq y$) справедливо соотношение

$$\frac{G(x) - G(y)}{x - y} = \frac{G'(x) + G'(y)}{2} + g(x - y), \quad g(0) = 0. \quad (12)$$

Тогда

$$G(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3, \quad a_i = \text{const}, \quad (13)$$

причем функция g имеет вид

$$g(\xi) = -\frac{a_3}{2}\xi^2. \quad (14)$$

Обратно, всякая функция вида (13) удовлетворяет соотношению (12), где $g(\xi)$ имеет вид (14).

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Достаточность. Пусть функция G имеет вид (13). Покажем, что соотношение (12) выполнено при $g(\xi) = -a_3\xi^2/2$. Имеем

$$\begin{aligned} \frac{G(x) - G(y)}{x - y} &= \frac{a_1(x - y) + a_2(x + y)(x - y) + a_3(x - y)(x^2 + xy + y^2)}{x - y} \\ &= a_1 + a_2(x + y) + a_3(x^2 + xy + y^2). \end{aligned}$$

С другой стороны, вычислим

$$\begin{aligned} \frac{G'(x) + G'(y)}{2} &= \frac{a_1 + 2a_2x + 3a_3x^2 + a_1 + 2a_2y + 3a_3y^2}{2} \\ &= a_1 + a_2(x + y) + \frac{3}{2}a_3(x^2 + y^2). \end{aligned}$$

Следовательно,

$$\frac{G(x) - G(y)}{x - y} - \frac{G'(x) + G'(y)}{2} = -\frac{a_3}{2}(x - y)^2,$$

что и требовалось установить.

Необходимость. Представим $G(x)$ в виде суммы нечетной функции $\Phi(x)$ и четной функции $\Psi(x)$. Ясно, что Φ и Ψ будут при этом вещественно аналитическими на $\mathbb{R}^1$. Тогда соотношение (13), очевидно, переписется следующим образом:

$$\frac{\Phi(x) - \Phi(y)}{x - y} + \frac{\Psi(x) - \Psi(y)}{x - y} = \frac{\Phi'(x) + \Phi'(y)}{2} + \frac{\Psi'(x) + \Psi'(y)}{2} + g(x - y), \quad g(0) = 0. \quad (15)$$

Продифференцируем (15) один раз по x , а другой раз по y и сложим получившиеся соотношения. В результате получим уравнение, не содержащее явно функции g :

$$\frac{\Phi'(x) - \Phi'(y)}{x - y} + \frac{\Psi'(x) - \Psi'(y)}{x - y} = \frac{\Phi''(x) + \Psi''(x) + \Phi''(y) + \Psi''(y)}{2}. \quad (16)$$

Полагая здесь $y = -x$, получим уравнение относительно $\Psi(x)$:

$$\Psi''(x) - \frac{\Psi'(x)}{x} = 0, \quad (17)$$

общее решение которого, очевидно, есть

$$\Psi = c_1x^2 + c_2, \quad c_i = \text{const}. \quad (18)$$

Подставим теперь найденное выражение для $\Psi(x)$ в (15). В результате получим уравнение относительно $\Phi(x)$:

$$\frac{\Phi(x) - \Phi(y)}{x - y} = \frac{\Phi'(x) + \Phi'(y)}{2} + g(x - y), \quad g(0) = 0. \quad (19)$$

Заметим, что (19) имеет в точности такой же вид, как и (12), однако новым моментом здесь является нечетность функции Φ .

Положим в (19) $y = -x$ и воспользуемся нечетностью Φ . В результате получим следующее соотношение:

$$\frac{\Phi(x)}{x} = \Phi'(x) + g(2x). \quad (20)$$

Далее, положим в (19) $y = 0$. Учитывая, что $\Phi(0) = 0$ в силу нечетности функции Φ , получим

$$\frac{\Phi(x)}{x} = \frac{\Phi'(x)}{2} + \frac{\Phi'(0)}{2} + g(x). \quad (21)$$

Теперь, исключая из (20), (21) $\Phi'(x)$, легко получаем, что

$$\Phi(x) = x\Phi'(0) + x(2g(x) - g(2x)). \quad (22)$$

С другой стороны, исключая из (20), (21) $\Phi(x)$, имеем

$$\Phi'(x) = \Phi'(0) + 2g(x) - 2g(2x). \quad (23)$$

Продифференцируем теперь (22) по x ; получим

$$\Phi'(x) = \Phi'(0) + 2g(x) - g(2x) + 2xg'(x) - 2xg'(2x). \quad (24)$$

Далее, приравнявая правые части (23) и (24), легко получаем уравнение относительно одной только функции g :

$$g'(x) - \frac{g(x)}{x} - g'\left(\frac{x}{2}\right) = 0, \quad g(0) = 0. \quad (25)$$

Представляя теперь $g(x)$ в виде ряда по четным степеням x в окрестности начала координат, легко получаем, что единственная четная вещественно-аналитическая функция, удовлетворяющая (25), есть $g(x) = cx^2$, $c = \text{const}$. Отсюда и из (22) имеем $\Phi(x) = x\Phi'(0) - 2cx^3$. Наконец, из последнего соотношения и из (18) следует утверждение леммы.

Из теоремы 1 и леммы 2, очевидно, вытекает следующий результат.

ТЕОРЕМА 2. Пусть $\gamma > 3/2$ и пусть

$$F(x) = b_0 + b_1x + b_2x^2 + b_3x^3 + b_4x^4, \quad (26)$$

где либо $b_4 < 0$, либо $b_4 = b_3 = 0$, $b_2 < 0$ (все b_i предполагаются вещественными). Тогда (2) будет собственной функцией оператора (3), где следует положить

$$V = F'^2(x_1) + \dots + F'^2(x_n) + (\gamma(n-1) + 1)[F''(x_1) + \dots + F''(x_n)] + 2\gamma \sum_{k < j} \left[-2b_4(x_k - x_j)^2 + \frac{\gamma - 1}{(x_k - x_j)^2} \right], \quad (27)$$

при этом соответствующее собственное значение оператора (3) равно нулю. (Как и в теореме 1, здесь предполагается, что $n \geq 3$.)

ЗАМЕЧАНИЕ 1. Параметр b_0 в (26) является нормировочным. Таким образом, построенное семейство двухчастичных потенциалов, для которых низшая собственная функция оператора $-\Delta + V$ находится в явном виде, содержит пять существенных непрерывных параметров $b_1, b_2, b_3, b_4, \gamma$ и один дискретный параметр $n \in \mathbb{N}$ ($n \geq 3$).

ЗАМЕЧАНИЕ 2. Несмотря на то, что лемма 1 справедлива только при $n \geq 3$, теоремы 1 и 2, очевидно, сохраняют свою силу и при $n = 2$.