Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

А. В. Перескоков, Асимптотика спектра оператора Хартри вблизи верхних границ спектральных кластеров. Асимптотические решения, локализованные вблизи окружности, *ТМФ*, 2015, том 183, номер 1, 78–89

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf8761>

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

Параметры загрузки:

IP: 54.198.55.26

26 апреля 2023 г., 17:42:59

© 2015 г.

А. В. Перескоков^{*†}

АСИМПТОТИКА СПЕКТРА ОПЕРАТОРА ХАРТРИ ВБЛИЗИ ВЕРХНИХ ГРАНИЦ СПЕКТРАЛЬНЫХ КЛАСТЕРОВ. АСИМПТОТИЧЕСКИЕ РЕШЕНИЯ, ЛОКАЛИЗОВАННЫЕ ВБЛИЗИ ОКРУЖНОСТИ

Рассмотрена задача на собственные значения для оператора Хартри с малым параметром перед нелинейностью. Найдены асимптотические собственные значения и асимптотические собственные функции вблизи верхних границ спектральных кластеров, которые образуются около уровней энергии невозмущенного оператора. Вблизи окружности, где локализовано решение, главный член разложения является решением задачи о двумерном осцилляторе.

Ключевые слова: самосогласованное поле, спектральный кластер, асимптотические собственные значения и собственные функции, двумерный осциллятор, логарифмическая особенность.

DOI: 10.4213/tmf8761

1. ВВЕДЕНИЕ

Рассмотрим задачу на собственные значения для нелинейного оператора Хартри в пространстве $L^2(\mathbb{R}^3)$ с кулоновским взаимодействием:

$$\left(-\Delta_q - \frac{1}{|q|} + \varepsilon \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\psi(q')|^2}{|q - q'|} dq'\right) \psi = \lambda \psi, \quad \|\psi\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} = 1, \quad (1)$$

где Δ_q – оператор Лапласа, $\varepsilon > 0$ – малый параметр. Уравнение самосогласованного поля во внешнем поле, содержащее интегральную нелинейность типа Хартри, играет фундаментальную роль в квантовой теории и нелинейной оптике. В частности, такие уравнения возникают в теории полярона, который можно рассматривать как простейший пример частицы, взаимодействующей с квантовым полем [1], [2], в теории конденсата Бозе–Эйнштейна [3], при нахождении электронных орбиталей

^{*}Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования Национальный исследовательский университет МЭИ, Москва, Россия. E-mail: pereskokov62@mail.ru

[†]Национальный исследовательский университет Высшая школа экономики – Московский институт электроники и математики, Москва, Россия

в многоэлектронных атомах [4], а также при рассмотрении сред с пространственной дисперсией [5].

Хорошо известно, что при $\varepsilon = 0$ собственные значения $\lambda = \lambda_n(\varepsilon)$ задачи (1) равны

$$\lambda_n(0) = -\frac{1}{4n^2}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (2)$$

Здесь n – главное квантовое число. Для задачи (1) имеются теоремы существования, в частности для нижней точки спектра, которая отвечает основному состоянию [6], [7]. В работе [8] при $n = 2$ было доказано существование состояний, не обладающих сферической симметрией, а также найдены пять ветвей собственных значений, выходящих из невозмущенной точки спектра.

Вопрос о существовании состояний, отличных от основного, является исходным при исследовании процессов, связанных с возбуждением электронов в поляронных средах [9]. В настоящее время, помимо чисто теоретического интереса, проблема возбужденных поляронных состояний вызывает интерес в связи с проблемой электронного переноса возбуждений в самых различных конденсированных средах. В частности, проблема электронного переноса на большие расстояния является одной из центральных в молекулярной биологии при описании коллективных возбуждений в молекулярных цепочках и в молекулах ДНК [10].

Рассмотрим случай, когда квантовое число n , задающее невозмущенное собственное значение, велико (для определенности будем считать, что λ имеет порядок ε). Сформулируем основной результат.

Пусть $p = n - m - 1$, где m – магнитное квантовое число. В настоящей работе для каждого $p = 0, 1, 2, \dots$ найдены собственные значения

$$\lambda_{n,i}^{(p)}(\varepsilon) = -\frac{1}{4n^2} + \varepsilon \left(\frac{\ln n}{4\pi n^2} + \frac{E_{1,i}^{(p)}}{n^2} \right) + O\left(\frac{\varepsilon \ln n}{n^{5/2}}\right), \quad n \rightarrow \infty, \quad (3)$$

где $i = 0, 1, \dots, I_p$, которые расположены вблизи верхних границ спектральных кластеров. Эти кластеры образуются вокруг уровней энергии (2) невозмущенного оператора $-\Delta_q - 1/|q|$ при добавлении к нему интегральной нелинейности Хартри. В частности, при $p = 0, 1, 2$ числа $E_{1,i}^{(p)}$ представимы в виде

$$E_{1,i}^{(p)} = \frac{1}{4\pi} \left(5 \ln 2 + \gamma - \frac{\sigma_i^{(p)}}{128} \right), \quad (4)$$

где $\gamma \approx 0.57$ – постоянная Эйлера. При $p = 0$ существует одно значение

$$\sigma_0^{(0)} = 0, \quad (5)$$

при $p = 1$ – два значения

$$\sigma_0^{(1)} = 80, \quad \sigma_1^{(1)} = 96, \quad (6)$$

а при $p = 2$ – шесть значений

$$\begin{aligned} \sigma_0^{(2)} &= 123 + \frac{19}{39}, & \sigma_1^{(2)} &= 142, & \sigma_2^{(2)} &= 144, \\ \sigma_3^{(2)} &= 145 - \frac{1}{33}, & \sigma_4^{(2)} &= 145 - \frac{1}{81}, & \sigma_5^{(2)} &= 147 + \frac{5}{9}. \end{aligned} \quad (7)$$

Соответствующие (3) асимптотические собственные функции локализованы вблизи окружности Γ в пространстве $\mathbb{R}^3$, на которой кулоновское ядро самодействия в (1) имеет логарифмическую особенность. Поэтому поправка в формуле (3) содержит $\ln n$, а числа $\lambda_{n,i}^{(p)}(\varepsilon)$ расположены вблизи верхних границ кластеров. Отметим, что на нижней границе кластера

$$\lambda_n(\varepsilon) \sim -\frac{1}{4n^2} + \frac{\varepsilon E_{\min}}{n^2}, \quad n \rightarrow \infty,$$

где число $E_{\min}$ удовлетворяет неравенству

$$E_{\min} \leq \frac{1}{2\pi^3} \int_0^\pi \int_0^\pi K\left(\frac{\sqrt{\sin \theta \sin \theta'}}{\sin((\theta + \theta')/2)}\right) \frac{d\theta' d\theta}{\sin((\theta + \theta')/2)}.$$

Здесь $K(\kappa)$ – полный эллиптический интеграл первого рода.

Теории квазиклассического приближения для уравнения Хартри, а также асимптотическим решениям уравнений типа Хартри, локализованным вблизи маломерных инвариантных подмногообразий в фазовом пространстве, посвящено большое число работ (см., например, [11]–[20]). В настоящей работе главный член асимптотического разложения вблизи окружности, где локализовано решение, оказывается решением другой классической задачи квантовой механики – задачи о двумерном осцилляторе:

$$\mathbf{L}g_{0,i}^{(p)}(\tau, s) = 0, \quad \|g_{0,i}^{(p)}\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} = 1. \quad (8)$$

Здесь оператор $\mathbf{L}$ задается как

$$\mathbf{L} = -\frac{\partial^2}{\partial s^2} - \frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + [s^2 + \tau^2 - 2(p+1)]. \quad (9)$$

В результате функция $g_{0,i}^{(p)}$ представима в виде линейной комбинации базисных собственных функций задачи (8), отвечающих собственному значению $p+1$. Коэффициенты разложения находятся из системы нелинейных уравнений одновременно с нахождением чисел $E_{1,i}^{(p)}$. Отметим, что эта система выводится из условий разрешимости уравнений для последующих приближений.

Аналогичные (1) задачи на собственные значения для возмущенного двумерного резонансного осциллятора, возбуждающий потенциал которого задается интегральной нелинейностью типа Хартри с гладким потенциалом самодействия, рассматривались ранее в работах [21]–[23]. В них в случае, когда потенциал самодействия является многочленом, были найдены асимптотические собственные значения и асимптотические собственные функции вблизи верхних границ спектральных кластеров.

Метод построения квазиклассических асимптотик в гладком случае основан на алгебраическом усреднении возмущения, последующем переходе в алгебру симметрий и когерентном преобразовании исходного представления этой алгебры в ее неприводимое представление в пространстве функций над лагранжевым подмногообразием в симплектическом листе [24]. Кроме того, при нахождении асимптотического решения использовалось новое интегральное представление. Если сравнить серии асимптотических собственных значений, полученные в работах [21]–[23], с собственными значениями (3), то они не содержат логарифмических поправок, а расщепление спектра в них происходит в следующем приближении.

2. ПОСТРОЕНИЕ АСИМПТОТИЧЕСКОГО РЕШЕНИЯ

Пользуясь растяжением $q = x/\varepsilon$, $\psi = \varepsilon^{3/2}v$, $\lambda = \varepsilon E$, приведем задачу (1) к стандартному для теории квазиклассических приближений виду

$$\left(-\varepsilon\Delta_x - \frac{1}{|x|} + \varepsilon \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|v(x')|^2}{|x - x'|} dx'\right)v(x) = Ev(x), \quad \|v\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} = 1. \quad (10)$$

Хорошо известно, что дискретным собственным значениям

$$E_n = -\frac{1}{4\varepsilon n^2}, \quad n = 1, 2, \dots,$$

невозмущенной задачи

$$\left(-\varepsilon\Delta_x - \frac{1}{|x|}\right)v(x) = Ev(x), \quad \|v\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} = 1,$$

в сферических координатах (r, θ, φ) , где $0 \leq r \leq \infty$, $0 \leq \theta \leq \pi$, $0 \leq \varphi \leq 2\pi$, отвечают собственные функции

$$v_{n,k,n_r} = Y_{\ell m}(\theta, \varphi) R_{n\ell}(r). \quad (11)$$

Здесь ℓ , n_r – орбитальное и радиальное квантовые числа, $n = \ell + 1 + n_r$, $k = \ell - m$, а функции $Y_{\ell m}$ и $R_{n\ell}$ выражаются через присоединенные полиномы Лежандра и полиномы Лагерра [25].

Пусть

$$a = 2\ell^2\varepsilon, \quad (12)$$

а число ℓ имеет порядок $\varepsilon^{-1/2}$. Введем новые переменные

$$\tau = \left(\theta - \frac{\pi}{2}\right)\sqrt{\ell}, \quad s = \left(\frac{r}{a} - 1\right)\sqrt{\ell}.$$

Справедлива

ТЕОРЕМА 1. *При $\ell \rightarrow \infty$ и небольших $n_r = 0, 1, 2, \dots$ и $k = 0, 1, 2, \dots$ функции v_{n,k,n_r} по модулю $O(\ell^{-\infty})$ сосредоточены вблизи окружности*

$$\Gamma_a = \{(r, \theta, \varphi) \mid r = a, \theta = \pi/2\} \subset \mathbb{R}^3.$$

Кроме того, при $s^6 + \tau^4 \ll \ell$ справедлива асимптотика

$$\begin{aligned} v_{n,k,n_r} &= \frac{(-1)^p \sqrt{\ell}}{a^{3/2} 2^{(p+1)/2} \pi \sqrt{n_r!} \sqrt{k!}} e^{im\varphi} e^{-(s^2 + \tau^2)/2} H_{n_r}(s) H_k(\tau) \times \\ &\times [1 + O(\ell^{-1/2}(|s|^3 + 1)H_{n_r}(s)) + O(\ell^{-1/2}(s^2 + 1)H'_{n_r}(s)) + \\ &+ O(\ell^{-1}(\tau^4 + 1)H_k(\tau)) + O(\ell^{-1}(|\tau|^3 + 1)H'_k(\tau))]. \end{aligned}$$

Здесь H_n – полином Эрмита.

Ниже для квантовых чисел ℓ , n , m порядка $\varepsilon^{-1/2}$ и, следовательно, для небольших чисел n_r , k и $p = n_r + k$ построены асимптотические решения задачи (10), по

модулю $O(\ell^{-1})$ локализованные вблизи окружности Γ_a . Переходя в сферическую систему координат, а также делая подстановку

$$v(x) = \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}} g(r, \theta),$$

преобразуем задачу (10) к виду [18]

$$\left\{ -\varepsilon \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right) \right] - \frac{1}{r} + \right. \\ \left. + \varepsilon \int_0^\pi \int_0^\infty W(r, r', \theta, \theta') |g(r', \theta')|^2 (r')^2 \sin \theta' dr' d\theta' - E \right\} g(r, \theta) = 0, \quad (13)$$

$$\int_0^\pi \int_0^\infty |g(r, \theta)|^2 r^2 \sin \theta dr d\theta = 1, \quad (14)$$

где ядро имеет вид

$$W(r, r', \theta, \theta') = \frac{2}{\pi \sqrt{r^2 + (r')^2 - 2rr' \cos(\theta + \theta')}} K \left(\frac{2\sqrt{rr' \sin \theta \sin \theta'}}{\sqrt{r^2 + (r')^2 - 2rr' \cos(\theta + \theta')}} \right). \quad (15)$$

Асимптотические решения задачи (13), (14) будем искать в виде

$$g = a^{-3/2} \left[\sqrt{\ell} g_0(\tau, s) + g_1(\tau, s) + \frac{g_2(\tau, s)}{\sqrt{\ell}} \right] + O \left(\frac{g_3(\tau, s)}{\ell} \right), \quad (16)$$

$$E = -\frac{1}{2a(1 + (n_r + 1)/\ell)^2} + \frac{E_0 \ln \ell}{\ell^2} + \frac{E_1}{\ell^2} + O \left(\frac{\ln \ell}{\ell^{5/2}} \right). \quad (17)$$

В этих формулах $\ell \rightarrow \infty$, функции $g_j(\tau, s)$, $j = 0, 1, 2, 3$, экспоненциально убывают при $\tau^2 + s^2 \rightarrow \infty$; E_0, E_1 – некоторые константы (для упрощения обозначений индексы i и p у g_0 и E_1 опущены).

Разложим входящие в соотношения (13), (14) функции с помощью формулы Тейлора по степеням τ и s . Поскольку функция $K(\kappa)$ имеет логарифмическую особенность при $\kappa \rightarrow 1$ [26],

$$K(\kappa) = \ln \frac{4}{\sqrt{1 - \kappa^2}} + O((1 - \kappa^2) \ln(1 - \kappa^2)), \quad (18)$$

непосредственно к W формула Тейлора неприменима. Пусть $u = (\tau - \tau')^2 + (s - s')^2$. Тогда из соотношений (15), (18) вытекает

ЛЕММА 1. При $\ell \rightarrow \infty$, $u \ll \ell$ имеет место асимптотика

$$W(r, r', \theta, \theta') = \frac{1}{\pi a} \ln \frac{8\sqrt{\ell}}{\sqrt{u}} + O \left(\frac{s + s'}{\sqrt{\ell}} \ln \frac{\sqrt{\ell}}{\sqrt{u}} \right) + O \left(\frac{u}{\ell} \ln \frac{\sqrt{\ell}}{\sqrt{u}} \right). \quad (19)$$

Далее разложим $(1 + (n_r + 1)/\ell)^{-2}$ по степеням ℓ и подставим асимптотики (16), (17) в уравнения (13), (14). В силу формул (12), (17), (19), (14) для отсутствия в левой части (13) слагаемых порядка $\ell^{-2} \ln \ell$ достаточно положить $E_0 = 1/4\pi$. Приравнявая к нулю слагаемые порядков ℓ^{-1} , $\ell^{-3/2}$ и ℓ^{-2} , получаем задачи для определения g_0, g_1 и g_2 . Справедлива

ЛЕММА 2. Функция g_0 является решением задачи о двумерном осцилляторе,

$$\begin{aligned} \mathbf{L}g_0 &= 0, \\ \int_{\mathbb{R}^2} |g_0|^2 d\tau ds &= 1, \end{aligned} \quad (20)$$

а функции g_1 и g_2 – решениями задач

$$\begin{aligned} \mathbf{L}g_1 &= F_1, \\ \int_{\mathbb{R}^2} (g_0 \bar{g}_1 + \bar{g}_0 g_1) d\tau ds &= -2 \int_{\mathbb{R}^2} s |g_0|^2 d\tau ds, \end{aligned} \quad (21)$$

и

$$\begin{aligned} \mathbf{L}g_2 &= F_{2,1} + F_{2,2}, \\ \int_{\mathbb{R}^2} (g_0 \bar{g}_2 + \bar{g}_0 g_2) d\tau ds &= - \int_{\mathbb{R}^2} [|g_1|^2 + 2s(g_0 \bar{g}_1 + \bar{g}_0 g_1) + (s^2 - \tau^2/2)|g_0|^2] d\tau ds. \end{aligned} \quad (22)$$

Здесь оператор $\mathbf{L}$ задан формулой (9), а функции $F_1, F_{2,1}, F_{2,2}$ имеют вид

$$\begin{aligned} F_1(\tau, s) &= 2 \left[\frac{\partial g_0}{\partial s} - s \frac{\partial^2 g_0}{\partial \tau^2} + (s^3 - 2ks + s\tau^2)g_0 \right], \\ F_{2,1}(\tau, s) &= -2s \frac{\partial g_0}{\partial s} + 3s^2 \frac{\partial^2 g_0}{\partial \tau^2} - \tau \frac{\partial g_0}{\partial \tau} - \\ &\quad - \left[\frac{2}{3}\tau^4 - 2k\tau^2 + k^2 - 6ks^2 + 3s^2\tau^2 + 3s^4 + 3(n_r + 1)^2 \right] g_0 + \\ &\quad + 2 \left[\frac{\partial g_1}{\partial s} - s \frac{\partial^2 g_1}{\partial \tau^2} + (s^3 - 2ks + s\tau^2)g_1 \right], \\ F_{2,2}(\tau, s) &= \frac{1}{2\pi} \left(4\pi E_1 - 6 \ln 2 + \int_{\mathbb{R}^2} \ln((\tau - \tau')^2 + (s - s')^2) |g_0(\tau', s')|^2 d\tau' ds' \right) g_0. \end{aligned}$$

Решениями уравнения (20) в пространстве $L^2(\mathbb{R}^2)$ являются собственные функции двумерного осциллятора, которые отвечают собственному значению $p + 1$ (здесь $p = 0, 1, 2, \dots$). Они образуют подпространство $\mathcal{H}_p \subset L^2(\mathbb{R}^2)$, ортонормированный базис в котором состоит из функций $\beta_{j,p-j}(\tau, s)$, $j = 0, 1, \dots, p$, где

$$\beta_{j,i}(\tau, s) = \theta_{j,i} e^{-(s^2 + \tau^2)/2} H_j(s) H_i(\tau), \quad \theta_{j,i} = \frac{(-1)^{j+i}}{2^{(j+i)/2} \sqrt{\pi} \sqrt{j!} \sqrt{i!}}.$$

Следовательно,

$$g_0 = \sum_{j=0}^p c_j \beta_{j,p-j}, \quad (23)$$

где c_j – некоторые константы, удовлетворяющие условию нормировки

$$\sum_{j=0}^p |c_j|^2 = 1.$$

Они находятся из условий разрешимости для последующих приближений. Используя (20), преобразуем правую часть уравнения (21) к виду

$$\begin{aligned} F_1 &= 2 \left[s \frac{\partial^2 g_0}{\partial s^2} + \frac{\partial g_0}{\partial s} + 2s(n_r + 1)g_0 \right] = \\ &= 2 \sum_{j=0}^p c_j \theta_{j,p-j} e^{-(s^2 + \tau^2)/2} H_{p-j}(\tau) \left\{ \frac{H_{j+3}(s)}{8} + \left(\frac{3-j}{4} + n_r \right) H_{j+1}(s) + \right. \\ &\quad \left. + j \left(-\frac{j}{2} + 2n_r + 2 \right) H_{j-1}(s) + j(j-1)(j-2)H_{j-3}(s) \right\}. \end{aligned} \quad (24)$$

Поскольку выражение (24) не содержит функций из $\mathcal{H}_p$, уравнение (21) разрешимо. Его решение имеет вид

$$g_1 = -\frac{1}{3} \frac{\partial^3 g_0}{\partial s^3} - 2(n_r + 1) \frac{\partial g_0}{\partial s} + \sum_{j=0}^p c_j^* \beta_{j,p-j},$$

где c_j^* – некоторые константы.

Аналогично доказывается, что $F_{2,1}$ также не содержит функций из $\mathcal{H}_p$. Поэтому условия разрешимости уравнения (22) принимают вид

$$\int_{\mathbb{R}^2} F_{2,2} \beta_{j,p-j} d\tau ds = 0, \quad j = 0, \dots, p. \quad (25)$$

При выполнении этих условий функция $g_2 \in L^2(\mathbb{R}^2)$ может быть представлена в виде суммы ряда [27], [28]

$$\begin{aligned} g_2 &= \sum_{\substack{j,i=0, \\ j+i \neq p}}^{\infty} \frac{1}{2(j+i-p)} \times \\ &\times \int_{\mathbb{R}^2} (F_{2,1}(\tau', s') + a F_{2,2}(\tau', s')) \beta_{j,i}(\tau', s') d\tau' ds' \beta_{j,i}(\tau, s) + \sum_{j=0}^p c_j^{**} \beta_{j,p-j}, \end{aligned} \quad (26)$$

где c_j^{**} – некоторые константы.

Условия (25) позволяют найти входящие в (23) коэффициенты:

$$c_j = \frac{1}{6 \ln 2 - 4\pi E_1} \int_{\mathbb{R}^4} \ln((\tau - \tau')^2 + (s - s')^2) |g_0(\tau', s')|^2 g_0(\tau, s) \beta_{j,p-j}(\tau, s) d\tau' ds' d\tau ds,$$

где $j = 0, \dots, p$. Справедлива

ЛЕММА 3. Функция $g_0 \in \mathcal{H}_p$ и число E_1 являются решением следующей задачи на собственные значения:

$$\begin{aligned} (6 \ln 2 - 4\pi E_1) g_0 &= \\ &= \int_{\mathbb{R}^2} \Omega(\tau, s, \tau'', s'') \int_{\mathbb{R}^2} \ln((\tau' - \tau'')^2 + (s' - s'')^2) |g_0(\tau', s')|^2 d\tau' ds' g_0(\tau'', s'') d\tau'' ds'', \end{aligned} \quad (27)$$

$$\int_{\mathbb{R}^2} |g_0(\tau, s)|^2 d\tau ds = 1. \quad (28)$$

Здесь

$$\Omega(\tau, s, \tau'', s'') = \frac{e^{-(s^2 + \tau^2 + (s'')^2 + (\tau'')^2)/2}}{2^p \pi} \sum_{j=0}^p \frac{H_j(s) H_j(s'') H_{p-j}(\tau) H_{p-j}(\tau'')}{j!(p-j)!}.$$

Из соотношений (27), (28) следует, что число E_1 может быть представлено в виде

$$\begin{aligned} E_1 &= \frac{3 \ln 2}{2\pi} - \frac{1}{4\pi} \int_{\mathbb{R}^2} \int_{\mathbb{R}^2} \Omega(\tau, s, \tau'', s'') g_0(\tau'', s'') \bar{g}_0(\tau, s) d\tau ds \times \\ &\times \int_{\mathbb{R}^2} \ln((\tau' - \tau'')^2 + (s' - s'')^2) |g_0(\tau', s')|^2 d\tau' ds' d\tau'' ds''. \end{aligned} \quad (29)$$

ЗАМЕЧАНИЕ 1. Уравнение (27) является нелинейным интегральным уравнением. Ранее нелинейное интегральное уравнение на сфере возникало в работе [15]. Оно использовалось для нахождения серии асимптотических собственных функций оператора Хартри.

ЗАМЕЧАНИЕ 2. Для ядра Ω имеет место интегральное представление

$$\begin{aligned} \Omega(\tau, s, \tau'', s'') &= \frac{(-1)^{p2p}}{p! \pi^3} e^{-(s^2 + \tau^2 + (s'')^2 + (\tau'')^2)/2} \times \\ &\times \int_{\mathbb{R}^4} (\tilde{s}\tilde{s}' + \tilde{\tau}\tilde{\tau}')^p e^{(i\tilde{s}-s)^2 + (i\tilde{\tau}-\tau)^2 + (i\tilde{s}'-s')^2 + (i\tilde{\tau}'-\tau')^2} d\tilde{\tau} d\tilde{s} d\tilde{\tau}' d\tilde{s}'. \end{aligned}$$

Пусть при некотором $p = 0, 1, 2, \dots$ число $E_1 = E_{1,i}^{(p)}$ и функция $g_0 = g_{0,i}^{(p)}$ являются решением задачи (27), (28). Определим число $\lambda_{n,i}^{(p)}$ по формуле (3), а также функцию

$$\psi_{n,i}^{(p)} = \varepsilon^{3/2} \sum_{j=0}^p c_j v_{n,p-j,j}(\varepsilon q),$$

где v_{n,k,n_r} задается формулой (11), коэффициенты $c_j = c_{j,i}^{(p)}$ совпадают с коэффициентами разложения функции g_0 согласно равенству (23) (см. теорему 1). Отметим, что в отличие от g_0 функция $\psi_{n,i}^{(p)}$ выражается через присоединенные полиномы Лежандра от $\cos \theta$ и, следовательно, удовлетворяет граничным условиям по θ . Справедлива

ТЕОРЕМА 2. При $\varepsilon \rightarrow 0$ и n порядка $\varepsilon^{-1/2}$ число $\lambda_{n,i}^{(p)}$ является асимптотическим собственным значением, а функция $\psi_{n,i}^{(p)}$ — главным членом разложения соответствующей собственной функции задачи (1) в пространстве $L^2(\mathbb{R}^3)$. Число $\lambda_{n,i}^{(p)}$ расположено вблизи верхней границы спектрального кластера, образующегося вокруг числа (2), а функция $\psi_{n,i}^{(p)}$ по модулю $O(n)$ локализована вблизи окружности

$$\Gamma = \{(r, \theta, \varphi) \mid r = 2n^2, \theta = \pi/2\} \subset \mathbb{R}^3.$$

ЗАМЕЧАНИЕ 3. Поправка к $\psi_{n,i}^{(p)}$ строится аналогично (26), однако имеет весьма громоздкий вид.

3. ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ СПЕКТРАЛЬНОЙ ЗАДАЧИ НА ПОДПРОСТРАНСТВАХ $\mathcal{H}_p$

Найдем решение задачи (27), (28) при $p = 0$. Будем искать $g_{0,0}^{(0)}$ в виде

$$g_{0,0}^{(0)} = c_0^{(0)} \beta_{0,0}. \quad (30)$$

В силу условия нормировки (28) константа $c_0^{(0)}$ удовлетворяет равенству

$$c_0^{(0)} = 1. \quad (31)$$

ЗАМЕЧАНИЕ 4. Формулы для асимптотических собственных функций в настоящей статье приводятся с точностью до произвольного множителя вида $e^{i\varphi}$, где $\varphi \in \mathbb{R}$.

Подставляя (30) в соотношение (29), имеем

$$\begin{aligned} E_{1,0}^{(0)} &= \frac{3 \ln 2}{2\pi} - \frac{1}{4\pi^3} \int_{\mathbb{R}^4} \ln((\tau' - \tau'')^2 + (s' - s'')^2) e^{-s'^2 - \tau'^2 - (s'')^2 - (\tau'')^2} d\tau' ds' d\tau'' ds'' = \\ &= \frac{5 \ln 2 + \gamma}{4\pi}. \end{aligned}$$

Напомним, γ — постоянная Эйлера.

При $p = 1$ решение будем искать в виде

$$g_{0,i}^{(1)} = c_{0,i}^{(1)} \beta_{0,1} + c_{1,i}^{(1)} \beta_{1,0}, \quad (32)$$

где $c_{0,i}^{(1)}$, $c_{1,i}^{(1)}$ — константы. Вычисляя входящие в (27), (28) интегралы, приходим к системе уравнений (индекс i для краткости обозначений опущен)

$$\begin{aligned} \left(4\pi E_1^{(1)} - 5 \ln 2 - \gamma + \frac{5}{8}\right) c_0^{(1)} + (c_0^{(1)} \bar{c}_1^{(1)} - \bar{c}_0^{(1)} c_1^{(1)}) \frac{c_1^{(1)}}{8} &= 0, \\ \left(4\pi E_1^{(1)} - 5 \ln 2 - \gamma + \frac{5}{8}\right) c_1^{(1)} - (c_0^{(1)} \bar{c}_1^{(1)} - \bar{c}_0^{(1)} c_1^{(1)}) \frac{c_0^{(1)}}{8} &= 0, \\ |c_0^{(1)}|^2 + |c_1^{(1)}|^2 &= 1. \end{aligned}$$

Данная система при

$$E_{1,0}^{(1)} = \frac{1}{4\pi} \left(5 \ln 2 + \gamma - \frac{5}{8}\right)$$

имеет однопараметрическое семейство вещественных решений

$$c_{0,0}^{(1)} = \cos \alpha, \quad c_{1,0}^{(1)} = \sin \alpha, \quad \alpha \in \mathbb{R}, \quad (33)$$

а при

$$E_{1,1}^{(1)} = \frac{1}{4\pi} \left(5 \ln 2 + \gamma - \frac{3}{4}\right)$$

— комплексные решения

$$c_{0,1}^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad c_{1,1}^{(1)} = \pm \frac{i}{\sqrt{2}}. \quad (34)$$

Наконец, при $p = 2$ будем искать решение задачи (27), (28) в виде

$$g_{0,i}^{(2)} = c_{0,i}^{(2)}\beta_{0,2} + c_{1,i}^{(2)}\beta_{1,1} + c_{2,i}^{(2)}\beta_{2,0}. \quad (35)$$

Значительно более громоздкие вычисления приводят к следующей нелинейной системе:

$$\begin{aligned} & -\sigma^{(2)}c_0^{(2)} + |c_0^{(2)}|^2 \left(\frac{247}{2}c_0^{(2)} + \frac{c_2^{(2)}}{2} \right) + |c_1^{(2)}|^2(153c_0^{(2)} - c_2^{(2)}) + \\ & + |c_2^{(2)}|^2 \left(\frac{343}{2}c_0^{(2)} + \frac{c_2^{(2)}}{2} \right) - 15(c_0^{(2)}\bar{c}_1^{(2)} + \bar{c}_0^{(2)}c_1^{(2)})c_1^{(2)} - \\ & - 9(c_2^{(2)}\bar{c}_1^{(2)} + \bar{c}_2^{(2)}c_1^{(2)})c_1^{(2)} + (c_0^{(2)}\bar{c}_2^{(2)} + \bar{c}_0^{(2)}c_2^{(2)}) \left(\frac{c_0^{(2)}}{2} - \frac{9}{2}c_2^{(2)} \right) = 0, \\ & -\sigma^{(2)}c_1^{(2)} + 153|c_0^{(2)}|^2c_1^{(2)} + 142|c_1^{(2)}|^2c_1^{(2)} + 153|c_2^{(2)}|^2c_1^{(2)} - \\ & - (c_0^{(2)}\bar{c}_2^{(2)} + \bar{c}_0^{(2)}c_2^{(2)})c_1^{(2)} - (c_0^{(2)}\bar{c}_1^{(2)} + \bar{c}_0^{(2)}c_1^{(2)})(15c_0^{(2)} + 9c_2^{(2)}) - \\ & - (c_2^{(2)}\bar{c}_1^{(2)} + \bar{c}_2^{(2)}c_1^{(2)})(9c_0^{(2)} + 15c_2^{(2)}) = 0, \\ & -\sigma^{(2)}c_2^{(2)} + |c_0^{(2)}|^2 \left(\frac{c_0^{(2)}}{2} + \frac{343}{2}c_2^{(2)} \right) + |c_1^{(2)}|^2(-c_0^{(2)} + 153c_2^{(2)}) + \\ & + |c_2^{(2)}|^2 \left(\frac{c_0^{(2)}}{2} + \frac{247}{2}c_2^{(2)} \right) - 9(c_0^{(2)}\bar{c}_1^{(2)} + \bar{c}_0^{(2)}c_1^{(2)})c_1^{(2)} - \\ & - 15(c_2^{(2)}\bar{c}_1^{(2)} + \bar{c}_2^{(2)}c_1^{(2)})c_1^{(2)} + (c_0^{(2)}\bar{c}_2^{(2)} + \bar{c}_0^{(2)}c_2^{(2)}) \left(-\frac{9}{2}c_0^{(2)} + \frac{c_2^{(2)}}{2} \right) = 0, \\ & |c_0^{(2)}|^2 + |c_1^{(2)}|^2 + |c_2^{(2)}|^2 = 1, \end{aligned}$$

где $\sigma^{(2)} = 128(-4\pi E_1^{(2)} + 5 \ln 2 + \gamma)$, а индекс i снова опущен. Данная система имеет собственные значения $E_{1,i}^{(2)}$, $i = 0, 1, 2, 3, 4, 5$. Они задаются формулами (4), (7). Числам $E_{1,0}^{(2)}$, $E_{1,1}^{(2)}$ отвечают однопараметрические семейства решений (35), коэффициенты которых имеют вид

$$\begin{aligned} c_{0,0}^{(2)} &= \frac{1}{\sqrt{39}} \left(\frac{\sqrt{38}}{2} + \sqrt{10} \cos \alpha \right), \\ c_{1,0}^{(2)} &= \frac{2\sqrt{5}}{\sqrt{39}} \sin \alpha, \quad c_{2,0}^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{39}} \left(\frac{\sqrt{38}}{2} - \sqrt{10} \cos \alpha \right), \\ c_{0,1}^{(2)} &= \frac{\sin \alpha}{\sqrt{2}}, \quad c_{1,1}^{(2)} = \cos \alpha, \quad c_{2,1}^{(2)} = -\frac{\sin \alpha}{\sqrt{2}}. \end{aligned} \quad (36)$$

Здесь $\alpha \in \mathbb{R}$. Для $E_{1,2}^{(2)}$ имеется вещественное решение с коэффициентами

$$c_{0,2}^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad c_{1,2}^{(2)} = 0, \quad c_{2,2}^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{2}}. \quad (37)$$

Наконец, для $E_{1,3}^{(2)}$, $E_{1,4}^{(2)}$, $E_{1,5}^{(2)}$ существуют комплексные решения $g_{0,i}^{(2)}$, коэффициенты которых таковы: при $j = 3$

$$\begin{aligned} c_{0,3}^{(2)} &= \frac{\sqrt{10} \pm \sqrt{8}}{2\sqrt{33}}i, & c_{1,3}^{(2)} &= \frac{\sqrt{8}}{\sqrt{11}}, & c_{2,3}^{(2)} &= \frac{\sqrt{10} \mp \sqrt{8}}{2\sqrt{33}}i, \\ c_{0,3}^{(2)} &= -\frac{\sqrt{10} \pm \sqrt{8}}{2\sqrt{33}}i, & c_{1,3}^{(2)} &= \frac{\sqrt{8}}{\sqrt{11}}, & c_{2,3}^{(2)} &= -\frac{\sqrt{10} \mp \sqrt{8}}{2\sqrt{33}}i, \\ c_{0,3}^{(2)} &= \frac{\pm\sqrt{5} + \sqrt{24}i}{\sqrt{66}}, & c_{1,3}^{(2)} &= \frac{\sqrt{8}}{\sqrt{66}}, & c_{2,3}^{(2)} &= \frac{\pm\sqrt{5} - \sqrt{24}i}{\sqrt{66}}, \\ c_{0,3}^{(2)} &= \frac{\pm\sqrt{5} - \sqrt{24}i}{\sqrt{66}}, & c_{1,3}^{(2)} &= \frac{\sqrt{8}}{\sqrt{66}}, & c_{2,3}^{(2)} &= \frac{\pm\sqrt{5} + \sqrt{24}i}{\sqrt{66}}; \end{aligned} \quad (38)$$

при $j = 4$

$$\begin{aligned} c_{0,4}^{(2)} &= \pm \frac{\sqrt{22}i}{9}, & c_{1,4}^{(2)} &= \frac{\sqrt{59}}{9}, & c_{2,4}^{(2)} &= 0, \\ c_{0,4}^{(2)} &= 0, & c_{1,4}^{(2)} &= \frac{\sqrt{59}}{9}, & c_{2,4}^{(2)} &= \pm \frac{\sqrt{22}i}{9}; \end{aligned} \quad (39)$$

при $j = 5$

$$\begin{aligned} c_{0,5}^{(2)} &= \frac{1 \pm 4\sqrt{5}i}{9\sqrt{2}}, & c_{1,5}^{(2)} &= 0, & c_{2,5}^{(2)} &= \frac{1}{\sqrt{2}}, \\ c_{0,5}^{(2)} &= \pm \frac{\sqrt{5}i}{3\sqrt{2}}, & c_{1,5}^{(2)} &= \frac{2}{3}, & c_{2,5}^{(2)} &= \pm \frac{\sqrt{5}i}{3\sqrt{2}}. \end{aligned} \quad (40)$$

Справедлива

ТЕОРЕМА 3. При $p = 0, 1, 2$ собственные значения задачи (27), (28) имеют вид, заданный формулами (4)–(7), а соответствующие собственные функции при $p = 0$ определяются равенствами (30), (31), при $p = 1$ – равенствами (32) и (33), (34), а при $p = 2$ – равенствами (35) и (36)–(40).

Таким образом, мы нашли асимптотические собственные значения и асимптотические собственные функции для оператора Хартри вблизи верхних границ спектральных кластеров. Отметим, что использованные в работе методы носят общий характер. Они применимы не только в случае оператора Хартри, но и при изучении более сложных нелинейных уравнений с сингулярными ядрами.

Благодарности. Автор благодарен М. В. Карасеву за привлечение внимания к данной задаче, а также за ценные вопросы и замечания. Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 14-11-00306) и при частичной финансовой поддержке Программы поддержки ведущих научных школ (грант НШ-2081.2014.1).

Список литературы

- [1] N. N. Bogolyubov, *Украинск. матем. журн.*, **2:2** (1950), 3–24.
- [2] С. И. Пекар, *Исследования по электронной теории кристаллов*, Гостехиздат, М., 1951.
- [3] Л. П. Питаевский, *УФН*, **168:6** (1998), 641–653.
- [4] Д. Р. Хартри, *Расчеты атомных структур*, ИЛ, М., 1960.

- [5] S. A. Achmanov, R. V. Hocklov, A. P. Suchorukov, “Self-defocusing and self-modulation in nonlinear media”, *Laserhandbuch*, **2**, North-Holland, Amsterdam, 1972, 5–108.
- [6] E. H. Lieb, B. Simon, *Commun. Math. Phys.*, **53**:3 (1977), 185–194.
- [7] P. L. Lions, *Commun. Math. Phys.*, **109**:1 (1987), 33–97.
- [8] М. В. Карасев, Ю. В. Осипов, *ТМФ*, **52**:2 (1982), 263–269.
- [9] V. D. Lakhno, *Возбужденные поляронные состояния в конденсированных средах*, ОНТИ НЦБИ АН СССР, Пущино, 1990.
- [10] А. С. Давыдов, *Солитоны в молекулярных системах*, Наукова думка, Киев, 1984.
- [11] М. В. Карасев, В. П. Маслов, *Итоги науки и техн. Сер. Современ. пробл. матем.*, **13** (1979), 145–267.
- [12] С. И. Черных, *ТМФ*, **52**:3 (1982), 491–494.
- [13] В. П. Маслов, *Комплексный метод ВКБ в нелинейных уравнениях*, Наука, М., 1977.
- [14] И. В. Сименюк, *ТМФ*, **30**:3 (1977), 408–414.
- [15] М. В. Карасев, *Квантовая редукция на орбиты алгебр симметрий и задача Эренфеста*, Препринт ИТФ-87-157Р, ИТФ АН УССР, Киев, 1987.
- [16] С. А. Вакуленко, В. П. Маслов, И. А. Молотков, И. А. Шафаревич, *Докл. РАН*, **345**:6 (1995), 743–745.
- [17] М. В. Карасев, А. В. Перескоков, *Изв. РАН. Сер. матем.*, **65**:5 (2001), 33–72.
- [18] М. В. Карасев, А. В. Перескоков, *Изв. РАН. Сер. матем.*, **65**:6 (2001), 57–98.
- [19] А. В. Перескоков, *ТМФ*, **131**:3 (2002), 389–406.
- [20] В. В. Белов, Ф. Н. Литвинец, А. Ю. Трифонов, *ТМФ*, **150**:1 (2007), 26–40.
- [21] А. В. Перескоков, *ТМФ*, **178**:1 (2014), 88–106.
- [22] А. В. Перескоков, *Наноструктуры. Матем. физ. и моделирование*, **10**:1 (2014), 77–112.
- [23] А. В. Перескоков, *Вестн. МЭИ*, 2013, №6, 180–190.
- [24] M. V. Karasev, “Noncommutative algebras, nano-structures, and quantum dynamics generated by resonances. I”, *Quantum Algebras and Poisson Geometry in Mathematical Physics*, American Mathematical Society Translation Series 2, **216**, AMS, Providence, RI, 2005, 1–17; *Adv. Stud. Contemp. Math.*, **11**:1 (2005), 33–56; *Russ. J. Math. Phys.*, **13**:2 (2006), 131–150.
- [25] Л. Шифф, *Квантовая механика*, ИЛ, М., 1957.
- [26] Г. Бейтмен, А. Эрдейи, *Высшие трансцендентные функции*, т.3: *Эллиптические и автоморфные функции, функции Ламе и Маттье*, Наука, М., 1967.
- [27] Г. Сегё, *Ортогональные многочлены*, Физматлит, М., 1962.
- [28] Г. Бейтмен, А. Эрдейи, *Высшие трансцендентные функции*, т.2: *Функции Бесселя, функции параболического цилиндра, ортогональные многочлены*, Наука, М., 1974.

Поступила в редакцию 1.07.2014,
после доработки 25.09.2014