ДОКЛАДЫ АКАДЕМИИ НАУК, 2002, том 384, № 5, с. 590–592

МАТЕМАТИКА

УДК 517.9

ПОЛЯРОН БОГОЛЮБОВА–ПЕКАРА. ТРЕХМЕРНЫЕ РЕШЕНИЯ

© 2002 г. А. М. Молчанов

Представлено академиком Т.М. Энеевым 22.01.2002 г.

Поступило 30.01.2002 г.

ВВЕДЕНИЕ

Полярон Боголюбова–Пекара описывается уравнением Шредингера

$$-\Delta\psi + W\psi = E\psi$$

с нелинейным по $\psi(X)$ интегральным потенциалом

$$W(X) = U(X) + \int_Y K(X, Y)\psi^2(Y)dY.$$

Решение этого уравнения, соответствующее основному состоянию, можно искать в виде

$$\psi(X) = C\exp\{-Z(X)\}.$$

Вычисляя лапласиан

$$\Delta\psi = [-\Delta Z + (\nabla Z)^2]\psi,$$

подставляя в уравнение и сокращая на экспоненту $e^{-Z(X)}$, получаем

$$\Delta Z - [\nabla Z]^2 + U(X) +$$

$$+ C^2\int_Y K(X, Y)\exp\{-2Z(Y)\}dY = E.$$

Рассмотрим частный случай, когда ядро заменяется его трехчленной галёркинской аппроксимацией

$$K(X, Y) = a(X)b(Y) + a_1(X)b_1(Y) + a_2(X)b_2(Y).$$

В этом случае показатель экспоненты можно представить в виде

$$Z(X) = P(X) + \alpha Q(X).$$

Институт математических проблем биологии, Пущино Московской обл.

В дальнейшем аргумент X функций $P(X)$ и $Q(X)$ явно не указывается. Уравнение приобретает вид

$$\Delta P - (\nabla P)^2 + U + \alpha(\Delta Q - 2\nabla P\nabla Q) - \alpha^2[\nabla Q]^2 +$$

$$+ C^2\int_Y K(X, Y)\exp\{-2Z(Y)\}dY = E.$$

Это уравнение допускает разделение переменных X и α, зависящее от произвольной константы A. Возникают четыре равенства для функций X:

$$U = (\nabla P)^2 - \Delta P + A, \quad a(X) = 1,$$

$$a_1(X) = \Delta Q - 2\nabla P\nabla Q, \quad a_2(X) = [\nabla Q]^2,$$

определяющие потенциал $U(X)$ внешнего поля и функции $a(X)$, $a_1(X)$, $a_2(X)$ ядра взаимодействия $K(X, Y)$. Функции $b(Y)$, $b_1(Y)$, $b_2(Y)$ остаются произвольными.

Возникают также три уравнения для параметров α, C, E:

$$C^2\int_Y b_1(Y)\exp\{-2Z(Y)\}dY = -\alpha,$$

$$C^2\int_Y b_2(Y)\exp\{-2Z(Y)\}dY = \alpha^2,$$

$$E = A + C^2\int_Y b(Y)\exp\{-2Z(Y)\}dY.$$

Исключая параметр C из первых двух уравнений, получаем уравнение для одного α

$$\int_Y [b_2(Y) + \alpha b_1(Y)]\exp\{-2Z(Y)\}dY = 0.$$

Правую часть этого уравнения естественно назвать резольвентой

$$R(\alpha) \equiv \int_Y [b_2(Y) + \alpha b_1(Y)]\exp\{-2Z(Y)\}dY.$$

Если уравнение $R(\alpha) = 0$ для параметра α решено, то C и E находятся явным образом из соотношений

$$C^2 = \frac{\alpha^2}{\int\limits_Y b_2(Y)\exp\{-2Z(Y)\}dY},$$

$$E = A + C^2\int\limits_Y b(Y)\exp\{-2Z(Y)\}dY.$$

ИЗОСИСТЕМЫ

В линейном случае, когда $K(x, y) \equiv 0$, величина E имеет смысл полной энергии. В общем случае она может иметь совершенно другой физический (или химический) смысл. Однако математически это всегда константа разделения пространственных и временных переменных. Трехмерные решения имеют подмножество изоэнергетических решений. И в этом они вполне аналогичны одномерным и сферически-симметричным решениям. Действительно, рассмотрим частный случай

$$b(y) = 0.$$

Из формулы для "энергии" E

$$E = A + C^2\int\limits_Y b(Y)\exp\{-2Z(Y)\}dY$$

вытекает, что

$$E \equiv A$$

при любом α и, следовательно, система оказывается изоэнергетической.

СКРЫТАЯ СИММЕТРИЯ

Резольвента существенно зависит от функций $b_1(Y)$ и $b_2(Y)$. Эти функции можно выбрать так, чтобы резольвента обращалась в нуль тождественно:

$$R(\alpha) \equiv 0.$$

Подобный выбор можно осуществить на основе хорошо известной формулы Остроградского

$$\iiint\limits_\Omega\left(\frac{\partial K_1}{\partial y_1} + \frac{\partial K_2}{\partial y_2} + \frac{\partial K_3}{\partial y_3}\right)dy_1dy_2dy_3 =$$

$$= \iint\limits_\Sigma K_1dy_2dy_3 + K_2dy_3dy_1 + K_3dy_1dy_2.$$

Во всех выкладках этого раздела подразумевается, конечно, что

$$Y = (y_1, y_2, y_3).$$

Выберем функции $K_i(Y)$ следующим образом:

$$K_1(Y) = A_1(Y)e^{-2Z(Y)}, \quad K_2(Y) = A_2(Y)e^{-2Z(Y)},$$

$$K_3(Y) = A_3(Y)e^{-2Z(Y)}.$$

Все эти функции обращаются в нуль на бесконечности, ибо содержат множителем $e^{-2Z(Y)}$. Поэтому формулу Остроградского можно записать в виде

$$\iiint\limits_Y\left(\frac{\partial K_1}{\partial y_1} + \frac{\partial K_2}{\partial y_2} + \frac{\partial K_3}{\partial y_3}\right)dy_1dy_2dy_3 = 0.$$

Найдем первое слагаемое подынтегральной функции

$$\frac{\partial K_1}{\partial y_1} = \left[\frac{\partial A_1}{\partial y_1} - 2A_1\left(\frac{\partial P}{\partial y_1} + \alpha\frac{\partial Q}{\partial y_1}\right)\right]e^{-2Z(Y)}.$$

Вычисляя и складывая еще два аналогичных члена, получаем полную дивергенцию

$$\frac{\partial K_1}{\partial y_1} + \frac{\partial K_2}{\partial y_2} + \frac{\partial K_3}{\partial y_3} = [b_2(Y) + \alpha b_1(Y)]\exp\{-2Z(Y)\}.$$

Таким образом, функция $b(Y)$ остается произвольной, а функции $b_1(Y)$ и $b_2(Y)$ выражаются через новые произвольные функции $A_1(Y)$, $A_2(Y)$, $A_3(Y)$ по формулам

$$b_2(Y) = \frac{\partial A_1}{\partial y_1} + \frac{\partial A_2}{\partial y_2} + \frac{\partial A_3}{\partial y_3} -$$

$$-2\left(A_1\frac{\partial P}{\partial y_1} + A_2\frac{\partial P}{\partial y_2} + A_3\frac{\partial P}{\partial y_3}\right),$$

$$b_1(Y) = -2\left(A_1\frac{\partial Q}{\partial y_1} + A_2\frac{\partial Q}{\partial y_2} + A_3\frac{\partial Q}{\partial y_3}\right).$$

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Уравнение Боголюбова–Пекара допускает трехмерные аналитические решения вида

$$\psi(X) = Ce^{-P(X) - \alpha Q(X)},$$

если потенциал $U(X)$ внешнего поля и функции $a(X)$, $a_1(X)$, $a_2(X)$ ядра взаимодействия $K(X, Y) = a(X)b(Y) + a_1(X)b_1(Y) + a_2(X)b_2(Y)$ выражаются через заданное решение по формулам

$$U = (\nabla P)^2 - \Delta P + A, \quad a(X) = 1,$$

$$a_1(X) = \Delta Q - 2\nabla P\nabla Q, \quad a_2(X) = [\nabla Q]^2.$$

Параметр α находится из условия обращения в нуль резольвенты

$$R(\alpha) = \int\limits_Y [b_2(Y) + \alpha b_1(Y)]\exp\{-2Z(Y)\}dY = 0.$$

Если, кроме того, функции $b_1(Y)$ и $b_2(Y)$ выражаются через новые произвольные функции

$$A_1(Y), \quad A_2(Y), \quad A_3(Y)$$

по формулам

$$b_2(Y) = \frac{\partial A_1}{\partial y_1} + \frac{\partial A_2}{\partial y_2} + \frac{\partial A_3}{\partial y_3} -$$

$$-2\left(A_1\frac{\partial P}{\partial y_1} + A_2\frac{\partial P}{\partial y_2} + A_3\frac{\partial P}{\partial y_3}\right),$$

$$b_1(Y) = -2\left(A_1\frac{\partial Q}{\partial y_1} + A_2\frac{\partial Q}{\partial y_2} + A_3\frac{\partial Q}{\partial y_3}\right),$$

то резольвента обращается в нуль тождественно:

$$R(\alpha) \equiv 0$$

и мы получаем однопараметрическое семейство решений

$$\psi(X) = Ce^{-P(X) - \alpha Q(X)}$$

уравнения, не содержащего никаких параметров. Следует отметить, что этот класс трехмерных решений богаче соответствующих [1] одномерных и сферически-симметричных решений. Наиболее четко различие проявляется в том, что функции $b_1(Y)$ и $b_2(Y)$ в случае трехмерных решений можно задать через три произвольные функции

$$A_1(Y), \quad A_2(Y), \quad A_3(Y).$$

В то же время для одномерных и сферически-симметричных решений функции $b_1(Y)$ и $b_2(Y)$ определяются всего двумя функциями.

Автор будет благодарен всем, кто пришлет замечания по адресу am@impb.psn.ru

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 01–01–00893).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Молчанов А.М.* // ДАН. 2000. Т. 374. № 5. С. 602–605.