

## Исследование уравнения Шрёдингера для молекулы как уравнения с малым параметром при производных

© Новосадов Борис Константинович

Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского РАН.  
ул. Косыгина, 19. г. Москва, 119991. Россия. E-mail: bk.novosadov@mail.ru

**Ключевые слова:** дифференциальные уравнения в частных производных с малым параметром при части производных, квантовая теория молекулярных структур, квантовая химия, молекулярная спектроскопия.

### Аннотация

Решения уравнения Шрёдингера для молекулы как дифференциального уравнения с малым множителем при ядерных производных, который является отношением массы электрона к атомной единице массы, обладают особыми аналитическими свойствами. Наличие малого параметра при части производных свидетельствует о резком различии масштабов электронной и ядерной плотности молекулы, что определяет структурные особенности молекулярных систем. В математической физике такие уравнения относятся к сингулярно возмущенным, и их решение требует применения асимптотических методов по отношению к малому параметру. В данной работе обсуждаются вопросы, связанные с интегрированием уравнения Шрёдингера для молекулы. Ставится задача об асимптотическом разложении волновой функции молекулы по малому параметру и проводится анализ уравнения с помощью вариационного функционала, который при обнулении малого параметра превращается в функционал вырожденной задачи. Указывается, что исследование вырожденного уравнения Шрёдингера (отвечающего приближению Борна-Оппенгеймера) позволяет дать дедуктивный метод определения химической структуры в виде вариационной геометрической задачи с варьированием не только электронной волновой функции, но и параметров ядерных координат. Экстремумы вспомогательного функционала определяют множество изомерных структур молекулы заданного атомного брутто состава. Существование такой особенности решений вырожденного (электронного) уравнения Шрёдингера дает теоретическое обоснование наблюдаемым в эксперименте химическим структурам, явное указание на которые в исходном уравнении Шрёдингера для системы разнородных кулоновских зарядов отсутствует. При анализе электронного уравнения рассмотрено строгое решение фундаментальной модельной задачи о движении одного электрона в поле фиксированных ядер и показано, что общий вид решения волнового уравнения представляется ЛКАО. Дано также релятивистское обобщение этой принципиальной модельной квантово-химической задачи и показана преобладательность точного решения с нерелятивистской МО ЛКАО. Обсуждается своеобразие закона сохранения углового момента молекул, привносящего новые детали в интерпретацию их оптических спектров. Отсутствие столкновений атомов в молекуле и наличие малого параметра при ядерных производных позволяет сформулировать локальную теорию движения ядер в пределах электронных оболочек атомов, занимающих узлы каркаса молекулярной структуры.