

ハートリーフォックエネルギー汎関数は電子のハミルトニアン固有値の上界評価を変分法に基づいて与えるときに有用な試験関数を求めるために使われる汎関数である。その際、汎関数の臨界値と臨界点を求める必要があるが、対応するオイラーラグランジュ方程式であるハートリーフォック方程式は連立非線形固有値問題となっているため線形作用素のスペクトル理論が使えない。臨界値が密に存在している区間では、そのうちの一つの臨界値を正確に評価することは困難と考えられるので、臨界値が孤立しているかどうかは重要な問題となる。本講演では電子が1個少ない場合の汎関数の最小値（第一閾値）より小さい定数以下の臨界値は有限個しか存在しないという結果について説明する。第一閾値より小さい臨界値は無限個存在することが知られているので、この結果と合わせることで第一閾値が臨界値の最小の集積点であることがわかる。