H . . . n n . . . . . . . k n . . . , n . . . . . . n . . . . . n- . . . . n . . n . . . . . . . . . . . ,

$$\mathcal{H} \quad \mathcal{T} \quad \mathcal{V} \quad \mathcal{W},$$

. . . . k n . . . . n . , . . . . . . . . . $\mathcal{T}$ . . $-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}$ . . $i$ . n . . . . $i$ . . . . . . . . . . n . . . . . . . . . . n . . $i$, . . n . . . . . . -
. . n . . . . . . . . . . n . . . . . n $\mathbf{R_a}$ . . . . . . . , . . $z_a$ . . . . . . . L . . . n . . . . $\mathcal{V}$ . . $\sum_{i=1}^{N} V(\mathbf{r_i})$, r . . . $V(\mathbf{r})$
$\sum_a -z_a/\|\mathbf{r}-\mathbf{R_a}\| \mathcal{W}$ n . . . . . . . n- . . . . n n . . . . n . . . . . . . . . . . . n . . . . . $\mathcal{W}$ . $\frac{1}{2}\sum$