*Функциональный анализ и его приложения,*
1982, т. 16, вып. 4, 10—26.

УДК 517.93+513.015.7

# МОДЕЛЬ ПАЙЕРЛСА

И. М. Кричевер

## Введение

Развитая в последние годы теория «конечнозонного» интегрирования нелинейных уравнений естественно объединяет идеи теории нелинейных уравнений, вариационные принципы для функционалов типа Крускала, спектральную теорию линейных операторов с периодическими коэффициентами и методы алгебраической геометрии (см. обзоры [1] — [4]). Особенно тесной эта связь была в начальный период, когда для построения периодических и квазипериодических решений уравнения Кортевега — де Фриза был использован алгебро-геометрический подход к спектральной теории периодического оператора Штурма — Лиувилля [1] (Любопытно отметить, что вариационные принципы, послужившие для первоначального определения конечнозонных решений [5] в некотором смысле родственны рассматриваемой ниже задаче.) Впоследствии успехи алгебро-геометрического языка (особенно для двумерных уравнений типа уравнения Кадомцева — Петвиашвили) привели к тому, что спектральная теория и вариационные принципы отошли в тень. Приблизительно полтора-два года тому назад была обнаружена возможность приложений алгебро-геометрической теории к задачам теории квазиодномерных проводников [6] — [10]. Характерные особенности квазиодномерных проводников (наличие периодических сверхструктур, волн зарядовой плотности, возникновение щели на Ферми-поверхности) объясняются обычно теорией, которая строится на основе модели Пайерлса [11].

Модель описывает самосогласованное поведение электронов и атомов ионного остова. Состояние атомов характеризуется их координатами на прямой $x_n$, $x_n < x_{n+1}$, и значением $v_n$ — «внутренней» степени свободы. Модель пренебрегает прямым межэлектронным взаимодействием, но учитывает энергию деформации решетки. Взаимодействие электронов с решеткой сводится к тому, что состояние последней определяет спектр энергии электронов. Уровни энергии электронов являются точками спектра $E_1 < \ldots < E_N$ (которые могут сливаться, но не более чем попарно) разностного оператора Шрёдингера

$$L\psi_n = c_n\psi_{n+1} + v_n\psi_n + c_{n-1}\psi_{n-1} = E\psi_n \tag{1}$$

с периодическими граничными условиями

$$\psi_n(E_i) = \psi_{n+N}(E_i).$$

Здесь $v_n = v_{n+N}$, $c_n = c_{n+N} = \exp(x_n - x_{n+1})$.

Если в системе имеется $m$ электронов (мы не будем учитывать спиновое вырождение), то при нулевой температуре, в силу принципа Паули, они займут $m$ нижних уровней энергии. Общая энергия системы состоит из энергии электронов и энергии деформации решетки. Ее величина, приходящаяся на один узел, равна

$$\mathcal{H}=\frac{1}{N}\left(\sum_{i=1}^{m} E_i+\sum_{n=0}^{N-1}\widetilde{\Phi}_1(v_n)+\widetilde{\Phi}_2(c_n^2)\right), \tag{2}$$

где $\widetilde{\Phi}_1$ и $\widetilde{\Phi}_2$ — потенциалы энергии деформации.

Задача состоит в минимизации функционала $\mathcal{H}$ по переменным $v_n$ и $c_n$ при фиксированном значении $\rho = m/N$ — плотности электронов. Основной интерес эта задача представляет в термодинамическом пределе, $N\to\infty$, $m\to\infty$, $m/N\to\rho=\text{const}$.

Если $\rho = 0$, то минимум $\mathcal{H}$ определяется тривиально и $v_n = v^0$, $c_n = c^0$, где $v^0$ и $c^0$ отвечают минимумам $\widetilde{\Phi}_1$ и $\widetilde{\Phi}_2$ соответственно. При этом $x_n = an + b$ и решетка равномерна. Спектр оператора $L$ с постоянными коэффициентами на всей прямой является отрезком. Если $\rho > 0$, то $v_n$ и $c_n$ уже не постоянны, и в спектре появляются щели. При условии малости щели на Ферми-поверхности модель допускает континуальное приближение, в котором при специальном выборе потенциала деформации она исследовалась в работах [6] — [11]. Электронная часть энергии определялась спектром либо уравнения Дирака при $\left|\rho-\frac{1}{2}\right|\ll 1$ либо спектром оператора Штурма — Лиувилля при $\rho\ll 1$.

Для специального выбора потенциалов, $\widetilde{\Phi}_1^0 = \varkappa_2 v^2/2$, $\widetilde{\Phi}_2^0 = \varkappa_2 c^2 - \varkappa_0 \ln c$, дискретная модель Пайерлса была проинтегрирована в работе [12]. Было доказано, что в термодинамическом пределе минимуму $\mathcal{H}$ отвечает оператор $L$, имеющий две разрешенные зоны спектра. При этом все уровни энергии, лежащие в нижней зоне $e_1 \leqslant E \leqslant e_2$ заполнены, а в верхней $e_3 \leqslant E \leqslant e_4$, $e_2 < e_3$, пусты. Была найдена энергия основного состояния и соответствующее значение $v_n$ и $c_n$.

Доказательство однозонности основного состояния (оператор $L$ называется $q$-зонным, если он имеет $q$ конечных лакун в спектре или $q+1$ разрешенную зону) существенно использовало тот факт, что при указанном виде потенциалов, энергия деформации является линейной комбинацией интегралов уравнений цепочки Тода: $I_0=\frac{1}{N}\sum\limits_{n=0}^{N-1}\ln c_n$, $I_2=\frac{1}{N}\sum\limits_{n=0}^{N-1}\left(c_n^2+\frac{v_n^2}{2}\right)\cdot$ Поскольку $E_i$ также являются интегралами цепочки Тода, то основное состояние системы, как и вообще все уровни функционала

$$\mathcal{H}_0=\frac{1}{N}\sum_{i=0}^{m}E_i+\varkappa_2 I_2-\varkappa_0 I_0$$

вырождены. Подобное вырождение отвечает за так называемую фрелиховскую проводимость.

В настоящей работе рассматривается общий функционал Пайерлса

$$\mathcal{H}=\mathcal{H}_0+g\mathcal{H}_1,\qquad \mathcal{H}_1=\frac{1}{N}\sum_{n=0}^{N-1}\left(\Phi_1(v_n)+\Phi_2(c_n^2)\right). \tag{3}$$

Основное внимание уделено характеру зависимости энергии основного состояния, как функции плотности $\rho$. Оказывается, что эта энергия $\mathcal{H}^*(\rho)$, которая при $g=0$ была гладкой функцией $\rho$, при $g\neq 0$ становится разрывной в рациональных точках $\rho = p/q$. Величина скачка имеет порядок $\sim ge^{-q}$. Ряд физических соображений и результаты машинного счета [13], [14], [15] указывают на то, что с рациональностью и иррациональностью $\rho$ связано вырождение основного состояния. Ниже будет доказано, что для иррациональных $\rho$ при $g < g_\rho$ основное состояние вырождено.

Указанные особенности поведения системы связаны с тем, что зависимость от $n$ коэффициентов $q$-зонных операторов является дискретным аналогом временной динамики вполне интегрируемых систем. Функционал Пайерлса имеет вид дискретного «временного» среднего. Особенности таких величин вызываются не только резонансами между частотами, как в непрерывном случае, но и резонансами с единицей.

## § 1. Периодический разностный оператор Шрёдингера

В этом параграфе будут кратко изложены основные элементы спектральной теории разностного оператора Шрёдингера. Этот оператор активно исследовался многими авторами в связи с задачей интегрирования уравнений цепочки Тода. Акцент на эту сторону деятельности, как уже говорилось выше, привел к тому, что кроме работы [1] (гл. III, § 1), положившей начало алгебро-геометрическому подходу к разностным задачам, остальные работы вопросы спектральной теории и ее связь с вариационными принципами практически не затрагивали.

Мы будем в основном следовать определениям и обозначениям работы [12], в которой указанный пробел был восполнен. Несколько подробнее мы остановимся на явных выражениях для $v_n$ и $c_n$ в терминах тэта-функции римановых поверхностей. С некоторыми неточностями такие формулы для $v_n$ были получены в [1] (гл. III, § 1). Полные формулы для всех коэффициентов оператора $L$ были получены в [16] (см. также приложение автора к обзору [4]).

Оператор сдвига на период, $\hat{T}$: $y_n \to y_{n+N}$, переводит решения уравнения (1) в решения того же уравнения. Соответствующий двумерный линейный оператор обозначим через $\hat{T}(E)$. Собственные значения $\hat{T}(E)$ определяются характеристическим уравнением

$$w^2 - 2Q(E)\, w + 1 = 0, \tag{4}$$

где $2Q(E) = \mathrm{Sp}\,\hat{T}(E)$ — полином степени $N$.

Каждой паре $(w, E)$ комплексных чисел, удовлетворяющих уравнению (4) (или, что то же самое, каждой точке кривой, заданной этим уравнением) отвечает единственное решение уравнения (1) такое, что $\psi_{n+N} = w\psi_n$ и нормированное условием $\psi_0 = 1$. Это решение будет называться блоховским.

Спектром оператора $L$ на всей прямой являются отрезки вещественной оси (в рамках настоящей работы нас интересуют лишь операторы с вещественными коэффициентами), в которых $|Q(E)| \leqslant 1$. Эти отрезки называются разрешенными зонами. Их концы $e_1, e_2, \ldots, e_{2q+2}$ являются простыми корнями уравнения $Q^2(E) = 1$. Из (4) следует, что это простые точки спектра периодической и антипериодической задач для оператора $L$. Оператор $L$, имеющий $q+1$ разрешенную зону, называется $q$-зонным. Отметим, что $q \leqslant N-1$.

При каждом значении $E$ имеются две блоховские функции $\psi_n^{\pm}(E)$, отвечающие двум корням уравнения (4). Эта двузначная функция $E$

становится однозначной на римановой поверхности Г функции $\sqrt{R(E)}$,

$$R(E)=\prod_{i=1}^{2q+2}(E-e_i). \tag{5}$$

Будем представлять Г склеенной из двух листов $E$-плоскости с разрезами вдоль разрешенных зон. Лист, на котором в бесконечности выбрана следующая ветвь функции $\sqrt{R}=E^{q+1}+O(E^q)$ будет называться верхним. Блоховская функция $\psi_n(P)$, как функция точки $P$ поверхности Г, является мероморфной. В окрестности $E=\infty$ она имеет вид

$$\psi_n^{\pm}(E)=e^{\pm x_n}E^{\pm n}\left(1+\sum_{s=1}^{\infty}\xi_s^{\pm}(n)E^{-s}\right) \tag{6}$$

(где знак $\pm$ обозначает верхний и нижний листы Г соответственно). Вне бесконечности $\psi_n(P)$ имеет $q$ полюсов. Причем из того, что $c_n>0$ следует, что эти полюса $\gamma_i$, $i=1,\ldots,q$, расположены по одному на окружностях над запрещенными зонами конечной длины.

Замечание. Точки $\gamma_i$, а вернее их проекции на $E$-плоскость, которые будут обозначаться той же буквой, имеют естественный спектральный смысл. Они являются точками спектра оператора $L$ в задаче с нулевыми граничными условиями, $\psi_0=\psi_N=0$. Остальные $N-q$ точек спектра такой задачи совпадают с вырожденными точками спектра периодической и антипериодической задач для оператора $L$, т. е. с двукратными корнями уравнения $Q^2(E)=1$.

Рассмотрим обратное утверждение. Пусть задан произвольный набор точек вещественной оси $e_1<\ldots<e_{2q+2}$. Тогда для любого набора точек $\gamma_1,\ldots,\gamma_q$, соответствующей римановой поверхности, расположенных по одной над каждой конечной запрещенной зоной, существует единственная с точностью до знака функция $\psi_n(P)$, $P\in\Gamma$, имеющая в окрестности бесконечности вид (5), а вне бесконечности имеющая $q$ полюсов в точках $\gamma_1,\ldots,\gamma_q$.

Замечание. Условие (5) означает просто, что $\psi_n(P)$ имеет на верхнем листе полюс $n$-го порядка, а на нижнем — нуль кратности $n$. Коэффициенты при старших членах нормированы так, что их произведение равно 1. Сами эти коэффициенты обозначаются через $e^{\pm x_n}$.

Доказательство этого утверждения легко следует из теоремы Римана — Роха. Чуть позже мы приведем явные выражения для $\psi_n(P)$ в терминах тэта-функций Римана.

В [16] было доказано, что построенная таким образом функция $\psi_n(P)$ удовлетворяет уравнению $L\psi_n(P)=E(P)\psi_n(P)$, где коэффициенты оператора Шрёдингера $L$ равны

$$c_n=e^{x_n-x_{n+1}}, \tag{7а}$$

$$v_n=\xi_1^+(n)-\xi_1^+(n+1). \tag{7б}$$

(Здесь $E(P)$ — обозначает проекцию точки $P\in\Gamma$ на $E$-плоскость.)

Замечание. Сделанные утверждения остаются справедливыми для произвольных, в том числе и комплексных, значений $e_i$ и $\gamma_j$. Приведенные ограничения на расположение $\gamma_j$ необходимы и достаточны для вещественности коэффициентов $c_n$, $v_n$.

Для произвольного набора точек $e_i$ построенные операторы $L$ будут квазипериодическими. Чтобы выделить чисто периодические операторы и получить явные формулы для $v_n$ и $c_n$, введем важное понятие *дифферен-*

*циала квазиимпульса.* По определению — это дифференциал вида

$$i\,dp = \frac{E^q + \sum_{k=0}^{q-1} a_k E^{q-k}}{\sqrt{R(E)}}\, dE, \tag{8}$$

нормированный условиями

$$\int_{e_{2i}}^{e_{2i+1}} dp = 0. \tag{9}$$

Система (9) эквивалентна системе неоднородных линейных уравнений на $a_k$, которые, как следствие, могут быть выражены в квадратурах.

Пусть $\Omega_j$ — голоморфные дифференциалы на $\Gamma$

$$\Omega_j = \sum_{j=0}^{q-1} d_{ij} \frac{E^j\,dE}{\sqrt{R(E)}}$$

такие, что

$$2\int_{e_{2i}}^{e_{2i+1}} \Omega_j = -\delta_{ij}.$$

(Здесь и в дальнейшем интегралы между точками ветвления берутся по нижнему листу. Если путь интегрирования захватывает разрез, то он проходит по *верхнему берегу* разреза на *нижнем листе.*)

Матрица $b$-периодов определяется равенством

$$B_{ik} = -\frac{1}{2}\int_{e_1}^{e_{2i}} \Omega_k.$$

Известно, что она симметрична и имеет положительно определенную мнимую часть.

Целочисленные комбинации векторов в $C^q$ с координатами $\delta_{ik}$ и $B_{ik}$ образуют решетку, определяющую комплексный тор $J(\Gamma)$, называемый многообразием Якоби кривой $\Gamma$. Отображением Абеля называется отображение $A\colon \Gamma \to J(\Gamma)$. Координаты $A_k(P)$ точки $A(P)$ равны

$$A_k(P) = \int_{e_1}^{P} \Omega_k.$$

По матрице $b$-периодов, как и по любой матрице с положительно определенной мнимой частью, можно построить целую функцию $q$-комплексных переменных

$$\theta(u_1, \ldots, u_q) = \sum_{k\in Z^q} \exp\{\pi i((Bk, k) + 2(k, u)),$$

где $(k, u) = k_1u_1 + \ldots + k_qu_q$. Она обладает следующими легко проверяемыми свойствами:

$$\theta(u_1, \ldots, u_j + 1, \ldots, u_q) = \theta(u_1, \ldots, u_j, \ldots, u_q), \tag{10а}$$

$$\theta(u_1 + B_{1k}, \ldots, u_q + B_{qk}) = \exp(-\pi i(B_{kk} + 2u_k))\,\theta(u_1, \ldots, u_q). \tag{10б}$$

Кроме того, для любого набора точек $\gamma_1, \ldots, \gamma_q$ общего положения найдется вектор $Z$ такой, что функция $\theta(A(P) - Z)$ имеет ровно $q$ нулей на Г, совпадающих с $\gamma_i$. При стандартном выборе циклов вектор $Z$ равен

$$Z_k = \sum_{j=1}^{q} \int_{e_{2j}}^{\gamma_j} \Omega_k + \frac{k}{2}.$$

Блоховская функция $\psi_n(P)$ имеет вид

$$\psi_n(P) = r_n \exp\left(ni \int_{e_1}^{P} dp\right) \frac{\theta(A(P) + nU - Z)}{\theta(A(P) - Z)}, \tag{11}$$

где $r_n$ — константа, а координаты вектора $U$ равны

$$U_k = \frac{1}{\pi} \int_{e_1}^{e_{2k}} dp, \quad 0 < \ldots < U_k < U_{k+1} < \ldots < 1. \tag{12}$$

Из (10) и (12) легко следует, что правая часть (11) корректно определена на Г, т. е. не зависит от выбора пути интегрирования между $e_1$ и $P$. Кроме того, $\psi_n(P)$ имеет нужные особенности в бесконечности и в точках $\gamma_i$. (Впервые формула подобного рода для блоховской функции оператора Штурма — Лиувилля была предложена Итсом [17]. Общее выражение для функций типа Бейкера — Ахиезера было получено в [18] (см. также [2], [4]).) В окрестности бесконечноудаленной точки на верхнем листе имеем

$$\exp\left(i \int_{e_1}^{E} dp\right) = Ee^{-I_0}(1 - I_1E^{-1} + O(E^{-2})),$$

где $I_1 = a_1 + \frac{s_1}{2}, \quad s_1 = \sum e_i$.

Из (5) следует, что $e^{2x_n + 2nI_0}$ равно отношению значений множителя при exp в (11), взятых в образах бесконечно удаленных точек $\pm z_0 = \pm(z_{01}, \ldots, z_{0q}), z_{0k} = \int_{e_1}^{\infty} \Omega_k$.

Значит, по (7а) имеем

$$e^{2I_0} c_n^2 = \frac{\theta(z_0 + nU - Z)\,\theta(-z_0 + (n+1)U - Z)}{\theta(-z_0 + nU - Z)\,\theta(z_0 + (n+1)U - Z)}. \tag{13а}$$

Из билинейных соотношений Римана следует [18], что

$$2z_0 = -U. \tag{14}$$

В окрестности бесконечно удаленной точки на верхнем листе

$$A(E) = z_0 + VE^{-1} + O(E^{-2}),$$

где координаты $V_k$ определяются равенством

$$\Omega_k(E) = dE^{-1}(V_k + O(E^{-1})).$$

Из определения $\Omega_k$ следует, что $V_k = -d_{k,q-1}$.

Разлагая (11) по $E^{-1}$, получим

$$v_n = \frac{d}{dt} \ln \frac{\theta(z_0 + nU - Z + Vt)}{\theta(z_0 + (n+1)U - Z + Vt)}\bigg|_{t=0} + a_1 + \frac{s_1}{2}. \tag{13б}$$

Как видно из формул (13), оператор $L$ имеет период $N$ тогда и только тогда, когда $U_k = m_k/N$, где $m_k$ — целые числа, $0 < \ldots < m_k < m_{k+1} < \ldots < N$.

Коэффициенты оператора $L$ $v_n$ и $c_n$, как видно из формул (13), помимо параметров $\theta$-функции и векторов $U$, $V$, определяемых кривой $\Gamma$, зависят и от точки $Z$ единичного тора. Как и в периодическом случае «производящей» функцией интегралов цепочки Тода, т. е. величин, не зависящих от $Z$, для любого конечнозонного оператора является квазиимпульс

$$p(E) = \int_{e_1}^{E} dp. \tag{15}$$

Если разложить $p(E)$ в окрестности бесконечности на верхнем листе

$$ip(E) = \ln E - \sum_{s=0}^{\infty} I_s E^{-s}, \tag{16}$$

то

$$I_0 = \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} \ln c_n; \quad I_1 = \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} v_n,$$

$$I_2 = \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} \left(\frac{v_n^2}{2} + c_n^2\right); \quad \text{и т. д.} \tag{17}$$

Доказательство этих формул (хорошо известных в периодическом случае) основано на том, что $i\,dp = \lim\limits_{N\to\infty} \frac{1}{N} \frac{d\psi_N}{\psi_N}$. Оно достаточно элементарно, и мы его опустим.

## § 2. «Интегрируемый» случай

Первоначально функционал Пайерлса (3) определялся для периодических операторов. Имея в виду предел $N \to \infty$, мы несколько изменим постановку задачи и определим функционал Пайерлса для произвольного $q$-зонного оператора $L$ формулой

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2\pi} \oint_{e_1}^{\mu} E\,dp + \varkappa_2 I_2 - \varkappa_0 I_0 + g\mathcal{H}_1, \tag{18}$$

$$\mathcal{H}_1 = \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} (\Phi_1(v_n) + \Phi_2(c_n^2)), \tag{19}$$

где $\mu$, называемое химпотенциалом, находится из условия

$$\frac{1}{2\pi} \oint_{e_1}^{\mu} dp = \rho. \tag{20}$$

Здесь $\varkappa_2$, $\varkappa_0$, $\rho$ — вещественные положительные константы. *Знак интеграла* $\oint_{e_1}^{\mu}$ *означает, что он берется на нижнем листе* $\Gamma$ *вдоль пути, соединяющего* $\mu^-$ *и* $\mu^+$ *и охватывающего отрезок вещественной оси* $[e_1, \mu]$. Если $\mu$ лежит в запрещенной зоне, то $\mu^- = \mu^+ = \mu$, а если $\mu$ лежит в разрешенной зоне, то $\mu^\pm$ — прообразы $\mu$ на верхнем и нижнем берегах разреза.

Для операторов с периодом $N$ и ограниченными коэффициентами $|v_n| < k_1$, $|c_n| < k_2$ функционалы (3) и (18) различаются на величину порядка $O\left(\frac{k_1 + k_2}{N}\right)$.

Как уже говорилось, во введении минимум функционала $\mathcal{H}_0$, равного (18) при $g = 0$, был найден в работе [12]. Остановимся несколько подробнее на ее результатах.

Функционал $\mathcal{H}_0$ гладко зависит от концов зон, если $\mu$ лежит в разрешенной зоне. Если $\mu$ лежит в запрещенной зоне, $e_{2k} \leqslant \mu \leqslant e_{2k+1}$, то $\mathcal{H}_0$ — гладкая функция на таких вариациях, для которых $\int\limits_{e_1}^{e_{2k}} dp = \text{const}$. И в том и другом случае доказано, что уравнения экстремалей $\delta\mathcal{H}_0 = 0$ не имеют решений среди $q$-зонных операторов при $q > 1$.

Концы зон $e_1$, $e_2$, $e_3$, $e_4$, отвечающие минимуму $\mathcal{H}_0$, определяются из уравнений

$$\varkappa_2 = \frac{i}{2\pi} \oint\limits_{e_1}^{\mu} \frac{dE}{\sqrt{R(E)}}; \tag{21}$$

$$0 = \oint\limits_{e_1}^{\mu} (2E - s_1) \frac{dE}{\sqrt{R(E)}}; \tag{22}$$

$$\varkappa_0 = \frac{1}{2\pi i} \oint\limits_{e_1}^{\mu} \left(E^2 - \frac{s_1}{2} E + \frac{s_2}{2} - \frac{s_1^2}{8}\right) \frac{dE}{\sqrt{R(E)}}; \tag{23}$$

$$\rho = \frac{1}{2\pi i} \oint\limits_{e_1}^{\mu} (E + a) \frac{dE}{\sqrt{R(E)}}, \tag{24}$$

где $e_2 \leqslant \mu \leqslant e_3$, константа $a$ определяется из условий нормировки (9).

Здесь $R(E) = \prod\limits_{i=1}^{4} (E - e_i)$, $\quad s_1 = \sum e_i$, $\quad s_2 = \sum\limits_{i<j} e_i e_j$.

Еще раз обратим внимание на то, что в соответствующей точке (поскольку $e_2 \leqslant \mu \leqslant e_3$) функционал $\mathcal{H}_0$ не является гладкой функцией всех концов зон. Если через $\mathcal{H}_0(U, \rho)$ обозначить минимум $\mathcal{H}_0$ среди однозонных операторов, при фиксированном $\rho$ и

$$\frac{1}{2\pi} \oint\limits_{e_1}^{\mu} dp = U, \tag{25}$$

то концы зон, соответствующие этому минимуму, определяются из уравнений (21) — (23), (25). При этом, если $U > \rho$, то $e_1 \leqslant \mu < e_2$, а если $U < \rho$, то $e_3 < \mu \leqslant e_4$.

Производная $\partial\mathcal{H}_0(U, \rho)/\partial U$ разрывна в точке $U = \rho$, но имеет правые и левые пределы $h(e_3) > 0$ и $h(e_2) < 0$ соответственно. Здесь $h(e)$ — функция, равная

$$h(e) = \frac{1}{2\pi i} \oint\limits_{e_1}^{e} \frac{dE}{\sqrt{R(E)}} \left(\oint\limits_{e_2}^{e_3} \frac{\sqrt{R(t)}\, dt}{E - t}\right). \tag{26}$$

Следовательно, в окрестности $U = \rho$

$$\mathcal{H}_0(U, \rho) = \mathcal{H}_0(\rho) + h_1 \mid U - \rho \mid + h_2 (U - \rho) + O((U - \rho)^2), \tag{27}$$

$$h_1 + h_2 = h(e_3), \quad h_2 - h_1 = h(e_2).$$

Функционал $\mathcal{H}$ (18) при малых $g$ мы будем рассматривать как возмущение $\mathcal{H}_0$. Для того чтобы применять обычные в таких случаях соображения, необходима строгая положительность второй вариации функционала $\delta^2\mathcal{H}_0$ для вариаций концов зон, которые удовлетворяют условию

$$\delta^2 \oint_{e_1}^{e_2} dp = 0. \tag{28}$$

(Если это условие нарушается, то главный член приращения определяется из (27) и он строго положителен.)

Функционал $\mathcal{H}_0$ определен на стратифицированном многообразии $\hat{\mathcal{E}}_N = \bigcup_{q\leqslant N} \mathcal{E}_q$, где $\mathcal{E}_q$ — наборы $\hat{e}_q = (e_1, \ldots, e_{2q+2})$ различных упорядоченных точек вещественной оси,

$$\mathcal{H}_0 = \mathcal{H}_0(\hat{e}_q).$$

Точка $\hat{e}_q \in \mathcal{E}_q \subset \hat{\mathcal{E}}_N$ будет называться $q$-зонным состоянием системы. Ее окрестность в $\hat{\mathcal{E}}_N$ образует не только наборы $\hat{e}_{q'}$, отличающиеся от $\hat{e}_q$ малым шевелением концов старых зон $e_i$, но и наборы $\hat{e}_{q'}$, $q \leqslant q' \leqslant N$, которые получаются из $\hat{e}_q$ появлением новых щелей в старых разрешенных зонах (т. е. к набору $(e_1, \ldots, e_{2q+2})$ добавляются пары $e_{2k-1} < e_- < e_+ < < e_{2k}$).

Пусть $\hat{e}^*$ — основное состояние системы, которое определяется из (21) — (24) при $e_2 \leqslant \mu \leqslant e_3$. Рассмотрим произвольную вариацию этого состояния (т. е. набор $(e_1', \ldots, e_4', e_-^j, e_+^j)$ $0 \leqslant j \leqslant N-1$, где новые щели $(e_-^j, e_+^j)$ открылись в точках $e^j$, расположенных в старых разрешенных зонах $[e_1, e_2]$ или $[e_3, e_4]$), удовлетворяющую условию (28).

Т е о р е м а 1. *Вторая вариация функционала* $\mathcal{H}_0$ *равна*

$$\delta^2\mathcal{H}_0(\hat{e}^*) = \sum_{k=1}^{4} \lambda_k (\delta e_k)^2 + \sum_{j=1}^{N-1} \lambda(e^j)(\delta e^j)^2, \tag{29}$$

*где*

$$\delta l_k = e_k' - e_k, \qquad \delta e^j = e_+^j - e_-^j,$$

$$\lambda(e) = \frac{1}{8\pi i} \oint_{e_1}^{\mu} \frac{(e+a)\, dE}{\sqrt{R}\,(E-e)} \geqslant \Lambda > 0, \tag{30}$$

$$\lambda_k = 2\lambda(e_k), \tag{31}$$

*и а определяется из условия нормировки* (9)

$$\oint_{e_2}^{e_3} \frac{E+a}{\sqrt{R}}\, dE = 0. \tag{32}$$

Утверждение теоремы означает «диагональность» второй вариации в точке минимума и ее положительность.

Д о к а з а т е л ь с т в о. По определению дифференциал $dp$, отвечающий набору $\hat{e}_1' = (e_1', \ldots, e_4')$ и $e_-^j$, $e_+^j$, имеет вид

$$i\, dp(\hat{e}_1', e_\pm^j) = \frac{P_N(E)\, dE}{\sqrt{R(E)} \prod_{j=1}^{N-1} \sqrt{(E-e_-^j)(E-e_+^j)}}, \tag{33}$$

где $P_N(E)$ полином степени $N$ со старшим коэффициентом 1, однозначно определяющийся из условий

$$\oint\limits_{e_2}^{e_3} dp = 0, \tag{34}$$

$$\oint\limits_{e_-^j}^{e_+^j} dp = 0. \tag{35}$$

Из условий (35) следует, что

$$i\, dp\,(\hat{e}_1, e_\pm^j = e^j) = \frac{E+a}{\sqrt{R(E)}}\, dE,$$

где $a$ определяется из (32).

Дифференцируя (33), получим, что $\delta^2 dp$ имеет вид

$$i\delta^2\, dp\,\Big|_{\hat{e}_1' = \hat{e}^*,\; e_\pm^j = e^j} = \frac{\widetilde{P}_{2N+6}(E)\, dE}{\sqrt{R}R_1^2 \prod\limits_{j=1}^{N-1} (E-e^j)^2}, \tag{36}$$

где $\widetilde{P}_{2N+6}$ — полином степени $2N+6$.

При этом из (35) следует, что $\delta^2 dp$ не имеет вычетов в точках $E = e^j$. В силу этого и условия (28) интегралы $\delta^2 dp$ по всем циклам на Г равны нулю. Значит, корректно определена мероморфная на Г функция

$$\delta^2 p = \int\limits_{e_1}^{E} \delta^2\, dp,$$

имеющая особенности только в точках $e_i$, $e^j$, в которых порядки полюсов равны трем и единице соответственно. Следовательно, она однозначно представима в виде

$$i\delta^2 p = \frac{\widetilde{P}_2}{\sqrt{R}} + \frac{1}{\sqrt{R}}\left(\sum_{i=1}^{4} \frac{\widetilde{A}_i}{(E-e_i)} + \sum_{j=1}^{N-1} \frac{\widetilde{B}_j}{(E-e^j)}\right). \tag{37}$$

Дифференцируя по $dE$ (37) и сравнивая с коэффициентами при старших сингулярных членах в $e_i$ и $e^j$ в (36), получим

$$\widetilde{A}_i = -\frac{1}{2}(e_i + a)(\delta e_i)^2, \tag{38}$$

$$\widetilde{B}_i = -\frac{1}{4}(e^j + a)(\delta e^j)^2. \tag{39}$$

Смешанные производные, т. е. выражения с $\delta e_i \delta e^j$ и т. д., собираются в коэффициенты полинома второй степени $\widetilde{P}_2$. Их явный вид нам не понадобится, поскольку они дают нулевой вклад в $\delta^2 \mathscr{H}_0$. Действительно,

$$\delta^2 \mathscr{H}_0 = -\frac{1}{2\pi} \oint\limits_{e_1}^{\mu} \delta^2 p\, dE + \varkappa_2 \delta^2 I_2 - \varkappa_0 \delta^2 I_0. \tag{40}$$

Разлагая (37) в окрестности бесконечности и сравнивая с разложением

$$i\delta^2 p = -\sum_{k=0}^{\infty} \delta^2 I_k E^{-k},$$

вытекающем из определения $I_k$ (16), получим, что коэффициенты полинома $\tilde{P}_2$ в (37) равны

$$P_2 = \tilde{I}_0 E^2 + \tilde{I}_1 E + \tilde{I}_2,$$

$$\tilde{I}_0 = -\delta^2 I_0, \quad \tilde{I}_1 = -\delta^2 I_1 + \frac{s_1}{2}\delta^2 I_0,$$

$$\tilde{I}_2 = -\delta^2 I_2 + \frac{s_1}{2}\delta^2 I_1 + \delta^2 I_0\left(\frac{s_1}{8} - \frac{s_2}{2}\right). \quad (41)$$

Из уравнений «самосогласования» (21) — (23) после подстановки (41) в $\tilde{P}_2$ получим, что

$$-\frac{1}{2\pi i}\oint_{e_1}^{\mu} \frac{\tilde{P}_2}{\sqrt{R}}\, dE + \varkappa_2 \delta^2 I_2 - \varkappa_0 \delta^2 I_0 = 0. \quad (42)$$

(В этом нет ничего удивительного, поскольку из подобных же выражений для $\delta p$ уравнения (21) — (23) выводились.) Таким образом,

$$\delta^2 \mathscr{H}_0(\hat{e}_1^*) = -\frac{1}{2\pi i}\oint_{e_1}^{\mu} \frac{dE}{\sqrt{R}}\left(\sum_{i=1}^{4} \frac{\tilde{A}_i}{(E - e_i)} + \sum_{j=1}^{N-1} \frac{\tilde{B}_j}{E - e^j}\right),$$

и с учетом (38), (39) мы получили выражение (29).

Чтобы найти в более явной форме коэффициенты $\lambda_k$ и $\lambda(e)$ и проверить их положительность, воспользуемся эллиптической параметризацией Г (подробности которой можно найти в [12]).

Функция

$$z = \int_{e_1}^{E} \frac{dE'}{\sqrt{R(E')}} \quad (43)$$

отображает Г на тор с периодами $2\omega$, $2\omega'$,

$$\omega = \int_{e_1}^{e_2} \frac{dE}{\sqrt{R}}; \qquad \omega' = \int_{e_2}^{e_3} \frac{dE}{\sqrt{R}}.$$

(Здесь интегралы берутся на нижнем листе Г по пути над вещественной осью.)

Обращение эллиптического интеграла (43) дается формулой

$$E(z) = \zeta(z + z_0) - \zeta(z - z_0) + h, \quad (44)$$

где $\zeta(z) = \zeta(z \mid \omega, \omega')$ — $\zeta$ — функция Вейерштрасса. (Все необходимые сведения об эллиптических функциях можно найти в [19].)

Параметры $\omega$, $\omega'$, $z_0$, $h$ заменяют $e_1, \ldots, e_4$, и в них существенно упрощаются уравнения (21) — (24). Они приобретают вид (см. [12])

$$z_0 = (\rho - 1)\,\omega', \quad (45)$$

$$\varkappa = \frac{i}{\pi}\,\omega, \quad (46)$$

$$\pi i + 2\eta z_0 = (2\zeta(2z_0) + h)\,\omega, \quad (47)$$

$$\varkappa_0 = \frac{2i}{\pi}(\eta + \wp(2z_0)\,\omega). \quad (48)$$

В новых параметрах интеграл

$$\oint_{e_1}^{e_2} \frac{dE}{\sqrt{R}\,(E - e)} = \int_{-\omega}^{\omega} dz\, \frac{\zeta(z + \gamma) - \zeta(z - \gamma) - \zeta(z_0 + \gamma) + \zeta(z_0 - \gamma)}{\wp(\gamma + z_0) - \wp(\gamma - z_0)} =$$

$$= \frac{1}{\wp(\gamma + z_0) - \wp(\gamma - z_0)}\left[4\eta\gamma - 2\omega\left(\zeta(z_0 + \gamma) - \zeta(z_0 - \gamma)\right)\right]. \quad (49)$$

Здесь $\gamma$ образ $e$ при отображении (43), т. е. $e = \zeta(\gamma + z_0) - \zeta(\gamma - z_0) + h$.

Если $e_1 \leqslant e \leqslant e_2$, то $\gamma$ — чисто мнимое и лежит на отрезке $[0, \omega]$, если $e_3 \leqslant e \leqslant e_4$, то $\mathrm{Re}\,\gamma = \omega'$ и $\gamma$ принадлежит отрезку $[\omega', \omega' + \omega]$.

Легко видеть, что числитель (49) не обращается в нуль внутри интервалов $(0, \omega)$ и $(\omega', \omega + \omega')$ потому, что он в их концах принимает значения 0 и $4\pi i$ соответственно. Значит, если бы такие нули были, то число нулей производной этого числителя было бы больше 4. Эта производная, равная $4\eta + 2\omega(\wp(z_0 + \gamma) + \wp(z_0 - \gamma))$, имеет четыре нуля.

Найдем выражение $e + a = \zeta(\gamma + z_0) - \zeta(\gamma - z_0) + h + a$.

Условие нормировки (32) дает

$$\int\limits_{\omega}^{\omega+\omega'} [\zeta(z + z_0) - \zeta(z - z_0) + h + a]\, dz = (h + a)\,\omega' + 2\eta' z_0 = 0.$$

Следовательно, с учетом (45) получим, что

$$e + a = \zeta(\gamma + z_0) - \zeta(\gamma - z_0) + 2\eta'(1 - \rho). \tag{50}$$

Отсюда «собственное значение» $\lambda(\gamma)$ второй вариации $\delta^2\mathscr{H}_0$, отвечающее раскрытию новой зоны в точке $e = E(\gamma)$, равно

$$\lambda(\gamma) = \frac{1}{8\pi i}[\zeta(\gamma + z_0) - \zeta(\gamma - z_0) + 2\eta'(1 - \rho)] \times \\ \times \frac{4\eta\gamma - 2\omega(\zeta(z_0 + \gamma) - \zeta(z_0 - \gamma))}{\wp(\gamma + z_0) - \wp(\gamma - z_0)}. \tag{51}$$

Из (30) следует, что

$$\lambda_k = 2 \lim_{\gamma \to \omega_k} \lambda(\gamma), \tag{52}$$

где $\omega_1 = 0$, $\omega_2 = \omega$, $\omega_3 = \omega + \omega'$, $\omega_4 = \omega'$.

Имеем

$$\lambda_1 = \frac{1}{2\pi i}(\eta'(1 - \rho) + \zeta(z_0))\frac{2\eta + \omega\wp(z_0)}{\wp'(z_0)}, \tag{53}$$

$$\lambda_2 = \frac{1}{2\pi i}(\eta + \eta'(1 - \rho))\frac{2\eta + \omega\wp(z_0 + \omega)}{\wp'(z_0 + \omega)}, \tag{54}$$

$$\lambda_3 = \frac{1}{2\pi i}(\eta + \eta'(2 - \rho)) - \frac{2\eta + \omega\wp(z_0 + \omega + \omega')}{\wp'(z_0 + \omega + \omega')}, \tag{55}$$

$$\lambda_4 = \frac{1}{2\pi i}\eta'(2 - \rho)\frac{2\eta + \omega\wp(z_0 + \omega')}{\wp'(z_0 + \omega)}. \tag{56}$$

Положительность $\lambda_3$ и $\lambda_4$, $\lambda(\gamma)$, $\mathrm{Re}\,\gamma = \omega'$ очевидна из их исходного выражения (30), (31). Действительно, в этом случае контур интегрирования можно стянуть к разрезу между $e_1$ и $e_2$, где при выбранном нами направлении движения $1/i\sqrt{R} < 0$. Из (32) следует, что $e + a > 0$ при $e > e_3$. Окончательно имеем, что подынтегральное выражение положительно и $\lambda_3 > 0$, $\lambda_4 > 0$, $\lambda(e) > 0$ (или, что то же самое, $\lambda(\gamma) > 0$, $\mathrm{Re}\,\gamma = \omega'$).

Выше было доказано, что $\lambda(\gamma)$ не обращается в нуль в интервале $(0, \omega)$. Его знак, как видно из (52), можно найти, определив знак $\lambda_1$.

Выражение $2\eta'(1 - \rho) + 2\zeta(z_0) = e_1 + a < 0$ — отрицательно. Так как $z_0 = (\rho - 1)\omega'$ лежит на отрезке $(-\omega', 0)$, то $\wp'(z_0) > 0$. При обходе вдоль границы прямоугольника с вершинами $\{0, \omega, \omega' + \omega, \omega'\}$ $\wp(z)$ монотонно возрастает от $-\infty$ до $+\infty$. При этом в силу

$$\int\limits_{\omega'-\omega}^{\omega'+\omega} \wp(z)\, dz = -2\eta$$

значение $-\eta/\omega$ она принимает на стороне $[\omega+\omega', \omega']$. Следовательно,

$$\frac{\eta}{\omega}+\wp(z_0)>0.$$

Так как $\operatorname{Im}\omega<0$, то окончательно получим, что $\lambda_1$, $\lambda_2$, $\lambda(\gamma)$ (при $\operatorname{Re}\gamma=0$) также строго положительны. Для завершения доказательства теоремы осталось заметить, что поскольку пределы $\lambda(\gamma)$ на границах интервалов $(0, \omega)$, $(\omega+\omega', \omega')$ существуют и положительны, то $\lambda(\gamma)$ отделены от нуля положительной константой $\Lambda$.

## § 3. Основное состояние общей модели Пайерлса

Как было показано в первом параграфе, множество $q$-зонных операторов изоморфно произведению $\mathscr{E}_q$ и $q$-мерного тора $T^q$. Для общих функций $\Phi_1$ и $\Phi_2$ (которые в дальнейшем предполагаются аналитическими) функционал

$$\mathscr{H}_1=\lim_{N\to\infty}\frac{1}{N}\sum_{n=0}^{N-1}(\Phi_1(v_n)+\Phi_2(c_n^2)) \tag{57}$$

есть функция $\mathscr{H}_1=\mathscr{H}_1(\hat{e}_q, Z)$ наборов $\hat{e}_q=(e_1,\ldots,e_{2q+2})$, $Z=(z_1,\ldots,z_q)$.

Рассмотрим характер зависимости $\mathscr{H}_1$ от $Z$.

Формула (12) сопоставляет каждому набору $\hat{e}_q$ $q$-мерный вектор $U(\hat{e}_q)$ с координатами $0<U_1<\ldots<U_q<1$. Набор $\hat{e}_q$ называется нерезонансным, если не существует целочисленного вектора $r=(r_1,\ldots,r_q)$ такого, что

$$\langle r, U(\hat{e}_q)\rangle=r_0, \tag{58}$$

где $r_0$ — целое. Для резонансных наборов через $R(\hat{e}_q)$ будет обозначаться группа, образованная теми $r\in R(\hat{e}_q)$, для которых имеет место (58) при некотором целом $r_0$.

Т е о р е м а 2. *Функционал* $\mathscr{H}_1$ *равен*

$$\mathscr{H}_1(\hat{e}_q, Z)=\sum_{r\in R(e_q)}\mathscr{F}_r\exp(2\pi i\langle r, Z\rangle+\pi i r_0), \tag{59}$$

*где*

$$\mathscr{F}_m=\int_0^1\ldots\int_0^1\mathscr{F}(z_1,\ldots,z_q)\exp\langle-2\pi i m, Z\rangle\,dz_1\ldots dz_q \tag{60}$$

— *коэффициенты Фурье функции*

$$\mathscr{F}(z)=\Phi_1(v(z))+\Phi_2(c^2(z)),$$

$$c^2(z)=\frac{\theta(z-U(\hat{e}_q))\,\theta(z+U(\hat{e}_q))}{\theta^2(z)}e^{-2I_0},$$

$$v(z)=\frac{d}{dt}\ln\frac{\theta(z+Vt)}{\theta(z+U(\hat{e}_q)+Vt)}\bigg|_{t\ 0}+a_1+\frac{s_1}{2}.$$

Из формул (12), (13) следует, что

$$\Phi_1(v_n)+\Phi_2(c_n^2)=\mathscr{F}\left(nU-\frac{1}{2}U+Z\right).$$

Предел, $N\to\infty$,

$$\frac{1}{N}\sum_{n=0}^{N-1}\mathscr{F}\left(nU-\frac{1}{2}U+Z\right)$$

легко находится, если воспользоваться разложением Фурье для $\mathscr{F}(z)$.

С л е д с т в и е 1. *Для нерезонансных наборов* $\hat{e}_q$ *функционал* $\mathcal{H}_1(\hat{e}_q, Z)$ *не зависит от* $Z$ *и равен*

$$\widetilde{\mathcal{H}}_1(\hat{e}_q) = \int \ldots \int \mathcal{F}(z)\, dz. \tag{61}$$

С л е д с т в и е 2. *Если не все частоты* $U_k$ *рациональны, то соответствующий уровень функционала* $\mathcal{H}_1$ *вырожден.*

Д о к а з а т е л ь с т в о. Если хотя бы одно $U_k$ иррационально, то все резонансные соотношения $r \in R(\hat{e}_q)$ зависимы. Значит, найдется вектор $Z_*$ такой, что $\langle r, Z_* \rangle = 0$. Из (59) тогда следует, что $\mathcal{H}_1(\hat{e}_q, Z + tZ_*)$ не зависит от $t$.

Формула (61) определяет «непрерывную» часть функционала $\mathcal{H}_1$, который для общих $\Phi_1$ и $\Phi_2$ разрывен во всех резонансных наборах. Если $|r|$ минимальный порядок резонанса, $|r| = |r_1| + \ldots + |r_q|$, $r \in R(\hat{e}_q)$, то величина скачка $|\mathcal{H}_1(\hat{e}_q, Z) - \widetilde{\mathcal{H}}_1(\hat{e}_q)|$ имеет порядок $|\mathcal{F}_r|$ и убывает с ростом $|r|$ как $e^{-|r|A}$.

Обозначим через $\mathcal{H}_1^*(\hat{e}_q)$ функцию на $\mathcal{E}_q$, равную

$$\mathcal{H}_1^*(\hat{e}_q) = \min_{Z \in T^q} \mathcal{H}_1(\hat{e}_q, Z).$$

По следствию 1 она почти всюду равна $\widetilde{\mathcal{H}}_1(\hat{e}_q)$. Из (59) следует, что $\int_{T^q} \mathcal{H}_1(\hat{e}_q, Z)\, dZ = \widetilde{\mathcal{H}}(\hat{e}_q)$. Значит, $\mathcal{H}_1^*(\hat{e}_q) \leqslant \widetilde{\mathcal{H}}(\hat{e}_q)$.

Рассмотрим произвольную вариацию в $\mathcal{E}_N$, $(e_1', \ldots, e_4'; e_-^j, e_+^j)$, однозонного состояния $\hat{e}_1 = (e_1, \ldots, e_4)$.

Т е о р е м а 3. *Вариация* $\mathcal{H}_1$ *равна*

$$|\delta\mathcal{H}_1| \leqslant |\mathcal{H}_1^*(\hat{e}_1') - \mathcal{H}_1(\hat{e}_1)| + \sum_{j=1}^{N-1} \varkappa(e^j)\, \delta e^j, \tag{62}$$

*где* $\varkappa(e) = 0$, *если*

$$\frac{1}{2\pi} \oint_{e_1}^{e^j} dp \neq r_1 U + r_0 = \frac{r_1}{2\pi} \oint_{e_1}^{e_2} dp + r_0, \tag{63}$$

*где* $r_1$, $r_0$ — *целые, в противном случае* $0 \leqslant \varkappa(e) \leqslant Ce^{-r_1 A_1}$.

Д о к а з а т е л ь с т в о. Пусть $\Omega$ — нормированный голоморфный дифференциал, отвечающий поверхности $\Gamma_1$ функции $\sqrt{R(E)}$,

$$\Omega = \alpha \frac{dE}{\sqrt{R}}, \quad -\oint_{e_2}^{e_3} \Omega = 1, \quad B_{11} = \oint_{e_1}^{e_2} \Omega.$$

Нормированные голоморфные дифференциалы $\Omega_1$ и $\Omega_2$ на поверхности $\Gamma_2$, соответствующей набору $(e_1, \ldots, e_4; e_-, e_+)$, имеют вид

$$\Omega_1 = \alpha_1 \frac{(E - s)\, dE}{\sqrt{R(E)}\sqrt{(E - e_-)(E - e_+)}},$$

$$\alpha_1 = \alpha + O((\delta e)^2), \quad s = e + O((\delta e)^2), \quad \delta e = e_+ - e_-,$$

$$2e = e_+ + e_-, \quad \Omega_2 = \frac{(\alpha_2 (E - e) + \alpha_3)\, dE}{\sqrt{R}\sqrt{(E - e_-)(E - e_+)}},$$

где

$$\alpha_3 = -\frac{1}{2\pi}\sqrt{R(e)} + O((\delta e)^2),$$

$$\frac{\alpha_2}{\alpha} = \frac{1}{2\pi} \oint_{e_2}^{e_3} \frac{\sqrt{R(e)}}{\sqrt{R(E)}(E - e)}\, dE + O((\delta e)^2), \tag{64}$$

Отсюда следует, что матрица $b$-периодов кривой $\Gamma_2$ равна

$$B'_{11} = B_{11} + O((\delta e)^2), \quad B_{12} = \frac{\alpha_2}{\alpha} B_{11} - \frac{\sqrt{R(e)}}{2\pi} \oint_{e_1}^{e_2} \frac{dE}{\sqrt{R(E)}(E-e)} + O((\delta e)^2),$$
$$\exp(\pi i B_{22}) = \delta e O(1). \tag{65}$$

Заметим, что $B_{12}$ (которые можно было бы явно выписать, используя формулы предшествующего параграфа) ограничены при всех $e$ некоторой константой $|B_{12}| < B_0$.

Для соответствующей $\theta$-функции получим

$$\theta(z_1, z_2) = \theta(z_1) + \sum_{m=-\infty}^{\infty} \exp(2\pi i(mz_1 + z_2) + \pi i(2B_{12}m + B_{11}m^2)) +$$
$$+ \exp(2\pi i(mz_1 - z_2) + \pi i(B_{11}m^2 - 2B_{12}m)) + O((\delta e)^2).$$

Следовательно,

$$\mathcal{F}(z_1, z_2) = \mathcal{F}(z_1) + \delta e(F_+(z_1)e^{2\pi i z_2} + F_-(z_1)e^{-2\pi i z_2}) + O((\delta e)^2). \tag{66}$$

Здесь $F_\pm(z_1)$ — периодические функции $z_1$, аналитически зависящие от $B_{12}(e)$. Подставляя (66) в (59), получим, что

$$|\delta\mathcal{H}_1^*| \leqslant |\mathcal{H}_1^*(\hat{e}'_1) - \mathcal{H}_1^*(\hat{e}_1)| + \sum_{j=1}^{N-1} \delta e^j \left(\sum_{k=1}^{\infty} |F^+_{kr(e)}| + |F^-_{kr(e)}|\right) + O((\delta e)^2), \tag{67}$$

где $r(e)$ — целое число такое, что

$$\frac{1}{2\pi} \oint_{e_1}^{e} dp \equiv r(e)\, U \pmod{1},$$

а $F^\pm_m$ коэффициенты Фурье функций $F_\pm(z)$. Теорема доказана.

Объединяя полученные результаты, мы приходим к следующему основному утверждению.

Теорема 4. *Пусть $\Phi_1$ и $\Phi_2$ положительны на вещественной оси и $\rho$ удовлетворяет условию*

$$\left|\rho - \frac{m}{n}\right| > \frac{\alpha}{n^2}$$

*при $n > n_0$, где $n_0$ и $\alpha$ некоторые константы. Тогда существует $g_\rho > 0$ такое, что при $g < g_\rho$ энергия основного состояния $\mathcal{H}^*(\rho) = \min(\mathcal{H}_0 + g\mathcal{H}_1)$ удовлетворяет неравенству*

$$|\mathcal{H}^*(\rho) - \mathcal{H}^*(\hat{e}_1^*)| < \frac{2g^2C}{\Lambda},$$

*где $\hat{e}_1^*$ — основное состояние для невозмущенного функционала $\mathcal{H}_0$. Кроме того*

1. *Спектр оператора $L$, отвечающего основному состоянию системы, имеет щели в точках $e^r$, определяемых из условия*

$$\frac{1}{2\pi} \int_{e_1}^{e^r} dp \equiv r\rho \pmod{1}.$$

2. *Ширина щели имеет порядок*

$$|\delta e^r| \leqslant \frac{gCe^{-rA_1}}{2\Lambda} + O(g^2).$$

3. *Основное состояние дается формулами* (13), *в которых все частоты имеют вид $U_k = r_k\rho + r'_k$, $r_k$, $r'_k$ — целые.*

4. *Если $\rho$ иррационально, то основное состояние вырождено.*

Доказательство. Обозначим через $W_h \subset \hat{\mathscr{E}}_N$ окрестность $\hat{e}_1^*$, состоящую из таких наборов $(e_1', \ldots, e_4'; e_-^j, e_+^j)$, что

$$\sum_{i=1}^{4} |\delta e_i| + \sum_{j=1}^{N-1} |\delta e^j| = \varepsilon \leqslant h, \tag{68}$$

а через $\overline{W}_h$ дополнение к этой окрестности.

В силу того, что $\mathscr{H}_0$ не имеет экстремалей кроме $\hat{e}_1^*$ и $\Phi_1$ и $\Phi_2$ положительны, для достаточно малых $h$ имеем

$$\min_{\overline{W}_h} \mathscr{H}^* \geqslant \min_{\overline{W}_h} \mathscr{H}_0 \geqslant \mathscr{H}_0(\rho) + \frac{\Lambda}{2} h^2.$$

Если $g\mathscr{H}_1^*(\hat{e}_1^*) \leqslant \frac{\Lambda}{2} h^2$, то минимум $\mathscr{H}$ $\mathscr{H}^*(\rho) \leqslant \mathscr{H}_0(\rho) + g\mathscr{H}_1(\hat{e}_1^*)$ достигается в окрестности $W_h$.

Пусть $\rho$ такое, как в условии теоремы, тогда $\mathscr{H}_1^*$ дифференцируемо в $\hat{e}_1^*$ относительно всех вариаций, в том числе и относительно вариаций, изменяющих период $\frac{1}{2\pi}\int_{e_1}^{e_2} dp = U$.

Действительно, если $|U - \rho| < \varepsilon$, $U = m/n$, то $n > \sqrt{\frac{\alpha}{\varepsilon}}$. Следовательно,

$$|\mathscr{H}_1^*(\hat{e}_1') - \tilde{\mathscr{H}}_1(\hat{e}_1')| < C_1 e^{-\sqrt{\alpha/\varepsilon}A_1}$$

и $\mathscr{H}_1^*(\hat{e}_1')$ имеет производную по $U$, равную производной $\tilde{\mathscr{H}}_1(\hat{e}_1)$. Пусть $g$ удовлетворяет условию

$$g\,\frac{\partial \mathscr{H}_1}{\partial U}(\hat{e}_1^*) \leqslant \min(h_1 \pm h_2),$$

где $h_1$, $h_2$ определены в (27). Тогда из (27) вытекает, что $\min \mathscr{H}$ достигается при $U = \rho$.

Пусть $(\hat{e}_1'; e_\pm^j)$ — основное состояние системы. Так как оно принадлежит $W_h$, то можно воспользоваться результатами теорем 1, 3. Имеем

$$\mathscr{H}_0 + g\mathscr{H}_1 \geqslant \mathscr{H}_0(\rho) + \frac{\Lambda}{2}\varepsilon^2 + g\mathscr{H}_1^*(\hat{e}_1^*) - gC\varepsilon \geqslant \mathscr{H}_0(\rho) + g\mathscr{H}_1^*(\hat{e}_1^*) - \frac{2g^2C}{\Lambda},$$

где $\varepsilon$ определено в (68). Из «диагональности» $\delta^2\mathscr{H}_0$ можно получить более точную оценку на ширину каждой новой щели

$$\delta e^j \sim g\,\frac{\varkappa(e^j)}{2\lambda(e^j)} \leqslant g\,\frac{\varkappa(e^j)}{\Lambda}.$$

Тем самым все пункты теоремы, кроме последнего, доказаны. Вырожденность основного состояния при иррациональных $\rho$ дается следствием 2 теоремы 2.

Следует отметить, что зонная структура разностного оператора Шрёдингера, отвечающего основному состоянию модели Пайерлса (которое, по доказанному, является квазипериодическим с двумя периодами $\rho$ и 1), полностью аналогична структуре спектра оператора Штурма—Лиувилля с почти периодическим потенциалом, которая была получена в работе [20] (о приложении результатов [20] в континуальных приближениях к задаче Пайерлса см. [15]).

В заключение автор считает своим долгом выразить благодарность И. Е. Дзялошинскому и С. А. Бразовскому за плодотворные обсуждения и помощь при постановке задачи.

## ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА


1. *Дубровин Б. А., Матвеев В. Б., Новиков С. П.* Нелинейные уравнения типа Кортевега — де Фриза, конечнозонные линейные операторы и абелевы многообразия.— УМН, 1976, т. 31, вып. 1, с. 55—136.
2. *Кричевер И. М.* Методы алгебраической геометрии в теории нелинейных уравнений.— УМН, 1977, т. 32, вып. 6, с. 183—208.
3. *Кричевер И. М., Новиков С. П.* Голоморфные расслоения над алгебраическими кривыми и нелинейные уравнения.— УМН, 1980, т. 35, вып. 6, с. 47—68.
4. *Дубровин Б. А.* Тэта-функции и нелинейные уравнения.—УМН, 1981, т. 36, вып. 2 с. 11—80.
5. *Новиков С. П.* Периодическая задача Кортевега — де Фриза.— Функц. анализ, 1974, т. 8, вып. 3, с. 54—66.
6. *Бразовский С. А., Гордюнин С. А., Кирова Н. Н.* Точное решение модели Пайерлса с произвольным числом электронов на элементарную ячейку.—Письма в ЖЭТФ, 1980, т. 31, вып. 8, с. 486—490.
7. *Бразовский С. А., Дзялошинский И. Е., Кирова Н. Н.* Спиновые состояния в модели Пайерлса и конечнозонные потенциалы.— ЖЭТФ, 1981, т. 81, вып. 6. с. 2279—2298.
8. *Белоколос Е. Д.* Задача Пайерлса — Фрелиха и конечнозонные потенциалы. I.— ТМФ, 1980, т. 45, вып. 2, с. 268—280.
9. *Белоколос Е. Д.* Задача Пайерлса — Фрелиха и конечнозонные потенциалы. II.— ТМФ, 1981, т. 48, вып. 1, с. 60—69.
10. *Бразовский С. А., Дзялошинский И. Е.* Динамика одномерной электрон-фононной системы при низкой температуре.— ЖЭТФ, 1976, т. 71, вып. 6, с. 2338—2348.
11. *Пайерлс Р.* Квантовая теория твердых тел.— М.: ИЛ, 1956.
12. *Бразовский С. А., Дзялошинский И. Е., Кричевер И. М.* Точно решаемые дискретные модели Пайерлса.— ЖЭТФ, 1982, т. 82, вып. 8.
13. *Дзялошинский И. Е.* Теория геликоидальных структур.— ЖЭТФ, 1964, т. 47, вып. 5, с. 992—1008.
14. *Dzyloshinskii I.* On Frelix's model of one dimensional superconductivity.— Coll. prop. of Phys. system. B. Landkvist, New York—London: Acad. Press, 1973, p. 143—165.
15. *Aubry S.* Metal-insulator transition in one-dimensional deformable lattices.— Bifurcation Phenomena in Math. Phys. and Related Topics, ed. C. Bardos, D. Bessis, 1980, p. 163—184.
16. *Кричевер И. М.* Алгебраические кривые и нелинейные разностные уравнения.— УМН, 1978, т. 33, вып. 4, с. 215—216.
17. *Итс А. Р., Матвеев В. Б.* Об одном классе решений уравнения КдФ.— В сб.: Проблемы математической физики, № 8, ЛГУ, 1976.
18. *Кричевер И. М.* Интегрирование нелинейных уравнений методами алгебраической геометрии.— Функц. анализ, 1977, т. 11, вып. 1, с. 20—31.
19. *Бейтмен Г., Эрдейи А.* Высшие трансцендентные функции. Эллиптические и автоморфные функции. Функции Ламе и Матье.— М.: Наука, 1967.
20. *Dinaburg E. I., Sinai Y. C.* Schrodinger equation with quasi-periodic potentials. Fund. Anal., 1976, v. 9, p. 279—283.


Московский энергетический институт
им. Г. М. Кржижановского

Поступила в редакцию
28 января 1982 г.