И. М. Кричевер, Алгебро-геометрическая спектральная теория разностного оператора Шредингера и модель Пайерлса, *Докл. АН СССР*, 1982, том 265, номер 5, 1054–1058

УДК 513.835 МАТЕМАТИКА

И.М. КРИЧЕВЕР

АЛГЕБРО-ГЕОМЕТРИЧЕСКАЯ СПЕКТРАЛЬНАЯ ТЕОРИЯ РАЗНОСТНОГО ОПЕРАТОРА ШРЕДИНГЕРА И МОДЕЛЬ ПАЙЕРЛСА

(Представлено академиком С.П. Новиковым 9 II 1982)

В последние годы в многочисленных исследованиях континуальных приближений модели Пайерлса широко использовались результаты так называемой "конечнозонной", или алгебро-геометрической теории интегрирования нелинейных уравнений [1–4]. Любопытно отметить, что особенно широко применялись вариационные принципы для функционалов Крускала, которые послужили основой первоначального подхода к теории конечнозонных решений уравнения Кортевега–де Фриза [5]. (Обзоры различных этапов развития теории конечнозонного интегрирования содержатся в [6–9].) Модель Пайерлса [10] описывает самосогласованное поведение системы электронов и решетки ионного остова. На ее основе обычно строится теория, описывающая характерные особенности квазиодномерных проводников.

Пусть x_n – координата n-го узла остова, $x_n < x_{n+1}$, а v_n – внутренняя координата. Предполагается, что система удовлетворяет периодическим условиям

$$v_n = v_{n+N}, \qquad c_n = c_{n+N} = e^{x_n - x_{n+1}}.$$

Уровни энергии электронов определяются спектром периодической задачи для разностного оператора Шредингера

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

Имеется N вещественных собственных значений $E_1 \leqslant E_2 \leqslant \ldots \leqslant E_N$ (в общем случае точки E_i могут сливаться, но не более чем две соседние).

Если в системе имеется m электронов, то при нулевой температуре они займут m нижних уровней энергии (без учета спинового вырождения). Общая энергия состоит из энергии элекронов и энергии деформации решетки. Ее величина, приходящаяся на один узел,

$$W\{c_n, v_n\} = \frac{1}{N}\left(\sum_{i=1}^{m} E_i + \sum_{n=0}^{N-1} (\Phi_1(v_n) + \Phi_2(c_n^2))\right), \tag{2}$$

где Φ_1 и Φ_2 – потенциал деформации.

С математической точки зрения задача состоит в минимизации функционала W по переменным c_n и v_n. Основной интерес задача представляет в термодинамическом пределе $N\to\infty$, $m\to\infty$, $m/N\to\rho$ – плотность электронов.

В работе [11] дискретная модель Пайерлса была исследована при специальном выборе потенциалов деформации

$$\Phi_1^0(v_n) + \Phi_2^0(c_n^2) = \kappa(v_n^2 + 2c_n^2) - P\ln c_n. \tag{3}$$

Было доказано, что минимуму W отвечает оператор L, имеющий две разрешенные зоны спектра на всей прямой; были найдены и исследованы уравнения, определяющие концы зон.

Настоящая работа стимулирована следующими двумя вопросами. Во-первых, возможны ли однозонные экстремали (оператор L называется q-зонным, если спектр задачи (1) на всей прямой состоит из $q+1$ разрешенной зоны) для потенциалов Φ_1, Φ_2 общего вида?

Для потенциалов (3) функционал W инвариантен относительно уравнений цепочки Тода (см., например, в книге [12]). Значит, все уровни W, в том числе и основное состояние, вырождены. Подобное вырождение отвечает за так называемую фрелиховскую проводимость. Второй вопрос, рассматриваемый ниже, о наличии вырождения основного состояния для произвольных Φ_1 и Φ_2, как будет видно в дальнейшем, тесно связан с первым.

I. Конечнозонные операторы Шредингера. Разностный оператор (1) исследовался многими авторами в связи с задачей интегрирования уравнений цепочки Тода. Было доказано, что спектр этого оператора дает интегралы системы в инволюции. Следовательно, динамика по t линеаризуется в переменных действие–угол (см. в [12]). Нам потребуется иной аспект этой теории. Оказывается, переход к этим же переменным "линеаризует" зависимость v_n и c_n от дискретной переменной n. Это следует из явных формул для v_n и c_n через тэта-функции Римана, которые были получены в [13]. Последняя работа завершила исследования, начатые в [6], гл. III, § 1.

Следуя [13] (см. также приложение автора к [9]), сформулируем вкратце необходимые результаты о конечнозонных операторах Шредингера. Для всех (кроме конечного числа) значений E уравнение (1) имеет два решения $\psi_n^{\pm}(E)$, собственных для оператора сдвига T: $\psi_n \to \psi_{n+N}$ и нормированных условием $\psi_0^{\pm}(E) \equiv 1$. Эта двузначная функция становится однозначной мероморфной функцией $\psi_n(P)$, $P \in \Gamma$, на римановой поверхности Γ функции $\sqrt{R(E)} = \left(\sum_{i=1}^{2q+2} (E - e_i) \right)^{1/2}$. Точки e_i являются простыми точками спектра периодической и антипериодической задач для L. В окрестности бесконечности $\psi_n^{\pm}(E)$ имеет вид

$$(4) \qquad \psi_n^{\pm}(E) = e^{\pm x n} E^{\pm n} \left(1 + \sum_{s=1}^{\infty} \xi_s^{\pm}(n) E^{-s} \right).$$

Вне бесконечности $\psi_n(P)$ имеет q полюсов $\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_q$, расположенных по одному над каждой из конечных запрещенных зон $[e_{2k}, e_{2k+1}]$.

Замечание. Проекции γ_i на E-плоскость, которые будут обозначать так же, являются точками спектра задачи для L с нулевыми граничными условиями, $\widetilde{\psi}_0(\gamma_i) = \widetilde{\psi}_N(\gamma_i) = 0$. Остальные $N - q$ точек спектра этой задачи совпадают с двукратно вырожденными точками спектра периодической и антипериодической задач для L.

Если задать произвольный набор $\{e_i\}$ и точки $\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_q$ на Γ, то существует единственная функция $\psi_n(P)$ с полюсами в γ_i, имеющая вид (4) в окрестности $E = \infty$. В [13] было доказано, что такой функции соответствует единственный оператор L такой, что выполнено (1); его коэффициенты даются формулами

$$(5а) \qquad c_n^2 = \frac{\theta(z^0 + nU + Z)\,\theta(-z^0 + (n+1)U + Z)}{\theta(-z^0 + nU + Z)\,\theta(z^0 + (n+1)U + Z)},$$

$$(5б) \qquad v_n = \frac{d}{dt} \ln \frac{\theta(z^0 + nU + Z + Vt)}{\theta(z^0 + (n+1)U + Z + Vt)} \bigg|_{t=0} + \text{const}.$$

Здесь $\theta(u_1, u_2, \dots, u_q)$ – тэта-функция Римана, которая, как и q-мерные векторы z^0, U, V, однозначно определяется римановой поверхностью Γ (точками e_i). Вектор Z отвечает выбору точек γ_i.

Если e_i вещественны, а γ_i расположены так, как было указано выше, то v_n и c_n вещественны и $c_n > 0$.

Из (5) следует, что v_n, c_n являются в общем случае квазипериодическими функциями n. Для того чтобы L имел период N, необходимо и достаточно, чтобы координаты вектора U имели вид m_k/N, где m_k целые. Эти координаты определяются равенством

$$(6) \qquad U_k = \frac{1}{\pi} \int_{e_1}^{e_{2k}} dp,$$

где дифференциал dp, называемый дифференциалом квазиимпульса, имеет вид

$$(7) \qquad dp = \frac{E^q + \sum_{k=0}^{q-1} a_k E^{q-k}}{i\sqrt{R(E)}} \, dE$$

и однозначно определен условиями нормировки

$$(8) \qquad \int_{e_{2k}}^{e_{2k+1}} dp = 0.$$

II. Функционал Пайерлса. Функционал W определен первоначально для периодических операторов. В пределе $N \to \infty$ он легко может быть доопределен на всех (в том числе и квазипериодических) q-зонных операторах формулой

$$(9) \qquad W = \frac{1}{\pi} \int_{e_1}^{\mu} E\,dp + \lim_{N \to \infty} \frac{1}{N} \left(\sum_{n=0}^{N-1} \Phi_1(v_n) + \Phi_2(c_n^2) \right)$$

(интегрирование со спектральной плотностью dp, которое ведется вдоль разрешенных зон, расположенных левее μ, при $N \to \infty$ заменяет суммирование по уровням энергии в (2)). Химический потенциал μ определяется из условия на плотность электронов

$$(10) \qquad \frac{1}{\pi} \int_{e_1}^{\mu} dp = \rho.$$

Набор $\{e_i\}$ называется нерезонансным, если частоты U_k, определенные (6) линейно-независимы над полем рациональных чисел с 1.

Теорема 1. *Для нерезонансного набора $\{e_i\}$ функционал W не зависит от переменных γ_i и равен*

$$(11) \qquad W = \frac{1}{\pi} \int_{e_1}^{\mu} E\,dp + \int_0^1 \int_0^1 \ldots \int_0^1 F(z)\,dz_1\,dz_2 \ldots dz_q.$$

Здесь $F(z)$ определена формулами $(z = (z_1, z_2, \ldots, z_q))$

$$F(z) = \Phi_1(v(z)) + \Phi_2(c^2(z)), \qquad c^2(z) = \frac{\theta^2(z)}{\theta(z - 2z^0)\theta(z + 2z^0)},$$

$$v(z) = \frac{d}{dt} \ln \frac{\theta(z + Vt)}{\theta(z + 2z^0 + Vt)} \bigg|_{t=0} + \text{const}.$$

Из формул (5) следует, что $\Phi_1(v_n) + \Phi_2(c_n^2) = F(nU + Z)$. Утверждение теоремы легко вытекает из того, что точки с координатами $nU_k + Z_k (\mathrm{mod}\, 1)$ для нерезонансных наборов плотно и равномерно заполняют единичный тор.

С л е д с т в и е. *Для нерезонансного набора* $\{e_i\}$ *имеет место*

$$(12а)\quad W = \frac{1}{\pi}\int_{e_1}^{\mu} E\,dp + \frac{1}{Q}\oint_{e_2}^{e_3}\ldots\oint_{e_{2q}}^{e_{2q+1}} \widetilde{F}(\gamma_1,\gamma_2,\ldots,\gamma_q)\,\frac{\prod\limits_{i<k}(\gamma_i-\gamma_k)\,d\gamma_1 d\gamma_2\ldots d\gamma_q}{\prod\limits_i\sqrt{R(\gamma_i)}},$$

$$(12б)\quad Q = \oint_{e_2}^{e_3}\ldots\oint_{e_{2q}}^{e_{2q+1}} \frac{\prod\limits_{i<k}(\gamma_i-\gamma_k)}{\prod\limits_i\sqrt{R(\gamma_i)}}\,d\gamma_1 d\gamma_2\ldots d\gamma_q,$$

где $\widetilde{F}(\gamma_1,\gamma_2,\ldots,\gamma_q) = \Phi_1(\widetilde{v}) + \Phi_2(\widetilde{c}^2)$, *а* $\widetilde{v}$ *и* $\widetilde{c}^2$, *как следует из формул следов для* v_n *и* c_n^2, $(s_1 = \Sigma e_i,\ 2s_2 = \Sigma e_i e_j)$

$$(13)\quad \widetilde{v} = \left(\sum_{i=1}^{q}\gamma_i\right) - \frac{s_1}{2},\quad \widetilde{c}^2 = \frac{s_1^2}{16} - \frac{s_2}{4} + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{q}\frac{\sqrt{R(\gamma_i)} - \gamma_i^{q+1} + \tfrac{1}{2}s\gamma_i^q}{\prod\limits_{k\neq i}(\gamma_i-\gamma_k)}.$$

В дальнейшем будем предполагать, что μ совпадает с концом одной из разрешенных зон, $\mu = e_{2k}$. При этом $U_k = \rho$.

С л е д с т в и е. *Если* ρ *иррационально, то значения* W *вырождены.*

В однозонном случае W, рассматриваемая как функция ρ, является разрывной в рациональных точках и непрерывной и иррациональных. Если $\rho = r_1/r_2$, то скачок W имеет порядок Δ^{r_2}, где $\Delta = e_3 - e_2$ — ширина запрещенной зоны.

III. Э к с т р е м а л и ф у н к ц и о н а л а П а й е р л с а. Замыкание $\hat{M}_N$ множества M_N N-зонных операторов является стратифицированным многообразием, содержащим M_q, $q \leqslant N$.

Пусть $e_1^0, e_2^0, \ldots, e_4^0$ — основное состояние системы для функционала W при $\Phi_1 = \Phi_1^0$ и $\Phi_2 = \Phi_2^0$, который мы обозначим W_0.

Вариациям $e_1^0, e_2^0, \ldots, e_4^0$ в $\hat{M}_N$ соответствуют наборы $(e_1', e_2', \ldots, e_4')$ $(e_-^j < e_+^j)$, где $\delta e_i = e_i' - e_i^0$ и $\delta e^j = e_+^j - e_-^j$ малы, e^j расположены в старых разрешенных зонах, $e_1^0 < e^j < e_2^0$ или $e_3^0 < e^j < e_2^0$.

Т е о р е м а 2. *Вторая вариация* W_0 *строго положительна,*

$$\delta^2 W_0 = \sum_{i=1}^{4}\lambda_i(\delta e_i)^2 + \sum_{j=1}^{N-1}\lambda(e^j)(\delta e^j)^2,$$

где

$$\lambda(e) = \frac{1}{4\pi i}\int_{e_1}^{e_2}\frac{e+a}{\sqrt{R}(E-e)}\,dE \geqslant \Lambda > 0,\qquad \lambda_i = \frac{2}{3}\lambda(e_i^0),$$

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

Пусть $\Phi_1 = \Phi_1^0 + g\widetilde{\Phi}_1$, $\Phi_2 = \Phi_2^0 + g\widetilde{\Phi}_2$, где $\widetilde{\Phi}_1$, $\widetilde{\Phi}_2$ — аналитические функции, положительные на вещественной оси.

Т е о р е м а 3. *Если* ρ *удовлетворяет условию*

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

для $n > n_0$, α — *константа, то существует* $g_\rho > 0$, *непрерывно зависящая от* ρ, *что для* $g < g_\rho$ *энергия основного состояния*

$$W^*(\rho) = \min W$$

удовлетворяет неравенству

$$|W^*(\rho) - W(e_1^0, e_2^0, \ldots, e_4^0)| < Ag^2 .$$

Основное состояние системы дается формулами (5), где координаты соответствующего вектора U имеют вид

$$U_k = r_k \rho + r_k^0,$$

r_k, r_k^0 целые. Если ρ иррационально, то оно вырождено. Функция $W^*(\rho)$ разрывна во всех рациональных точках $\rho = P/q$, величина разрыва в которых имеет порядок $\sim e^{-q}$.

В заключение приведем явный вид $W(e_1^0, e_2^0, \ldots, e_4^0)$. Используя эллиптические функции Вейерштрасса, можно от переменных $e_1, e_2, \ldots, e_4$ перейти к переменным ω, ω', z_0, h, где

$$e_1 = E(0), \quad e_2 = E(\omega), \quad e_3 = E(\omega + \omega'), \quad e_4 = E(\omega'),$$

$$E(z) = \zeta(z + z_0) - \zeta(z - z_0) + h.$$

Здесь $\zeta(z \mid \omega, \omega')$ – ζ-функция Вейерштрасса.

В работе [11] были найдены следующие уравнения для определения основного состояния для функционала W_0:

$$z_0 = (\rho - 1)\omega', \qquad \kappa = \frac{i}{\pi}\,\omega,$$

$$\pi i + 2\eta z_0 = \omega(2\zeta + h), \qquad \zeta_0 = \zeta(2z_0),$$

$$P = \frac{2}{\pi i}(\eta + \wp_0 \omega), \qquad \wp_0 = \wp(2z_0).$$

Если ω, ω', z_0, h – решения этих уравнений, то для иррациональных ρ энергия основного состояния с точностью до $O(g^2)$ равна

$$-P(2\eta_1\rho^2\omega' - \ln\sigma(2\rho\omega_1) - 1) + \frac{\kappa}{2}((\xi_0 + h)^2 - 3\wp_0) + \rho(\zeta_0 + h) +$$

$$+ \frac{g}{\omega'} \int\limits_{\omega}^{\omega+\omega'} (\tilde{\Phi}_1((2\zeta_0 + h) + \zeta(z + z_0) - \zeta(z - z_0)) + \tilde{\Phi}_2(\wp_0 - \wp(z)))\,dz.$$

В заключение автор пользуется возможностью выразить благодарность И.Е. Дзялошинскому, С.А. Бразовскому, С.А. Гордюнину за плодотворные обсуждения и помощь при постановке задачи.

Государственный научно-исследовательский энергетический институт им. Г.М. Кржижановского, Москва

Поступило 9 II 1982

ЛИТЕРАТУРА

1. *Бразовский С.А., Гордюнин С.А., Кирова Н.Н.* – Письма ЖЭТФ, 1980, т. 31, № 8, с. 486. 2. *Бразовский С.А., Дзялошинский И.Е., Кирова Н.Н.* – ЖЭТФ, 1981, т. 81, № 6, с. 2279. 3. *Белоколос Е.Д.* – Теорет. и матем. физика, 1980, т. 45, № 2, с. 268. 4. *Белоколос Е.Д.* – Там же, 1981, т. 48, № 1, с. 60. 5. *Новиков С.П.* – Функц. анализ и его прилож., 1974, т. 8, № 3, с. 54. 6. *Дубровин Б.А., Матвеев В.Б., Новиков С.П.* – УМН, 1976, т. 31, № 1, с. 55. 7. *Кричевер И.М.* – УМН, 1977, т. 32, № 6, с. 183. 8. *Кричевер И.М., Новиков С.П.* – УМН, 1980, т. 35, № 6, с. 47. 9. *Дубровин Б.А.* – УМН, 1981, т. 36, № 2, с. 11. 10. *Пайерлс Р.* – Квантовая теория твердых тел. М.: ИЛ, 1956. 11. *Бразовский С.А., Дзялошинский И.Е., Кричевер И.М.* – ЖЭТФ, 1982, т. 82, № 6. 12. *Захаров В.Е., Манаков С.В., Новиков С.П., Питаевский Л.П.* Теория солитонов. Метод обратной задачи. М.: Наука, 1980. 13. *Кричевер И.М.* – УМН, 1978, т. 33, № 4, с. 215.