

**БУЛЕТИНУЛ**  
**АКАДЕМИЕЙ ДЕ ШТИИНЦЕ**  
**А РСС МОЛДОВЕНЕШТЬ**

**ИЗВЕСТИЯ**  
**АКАДЕМИИ НАУК МОЛДАВСКОЙ ССР**



11-75 ВВ  
АКАДЕМИЯ НАУК МОЛДАВСКОЙ ССР

**БУЛЕТИНУЛ**  
**АКАДЕМИЕЙ ДЕ ШТИИНЦЕ**  
**А РСС МОЛДОВЕНЕШТЬ**

**ИЗВЕСТИЯ**  
**АКАДЕМИИ НАУК МОЛДАВСКОЙ ССР**

№ 5

ИЗДАТЕЛЬСТВО «ШТИИНЦА»  
АКАДЕМИИ НАУК МОЛДАВСКОЙ ССР  
КИШИНЕВ \* 1962

В. А. АНДРУНАКИЕВИЧ

## РАДИКАЛЫ СЛАБО АССОЦИАТИВНЫХ КОЛЕЦ. II

## ПРИМЕРЫ СПЕЦИАЛЬНЫХ РАДИКАЛОВ

## Введение

В работе [1] было введено понятие слабо ассоциативного кольца, обобщающее понятие ассоциативного кольца. Напомним, как вводилось это понятие.

Пусть  $K$  — произвольное кольцо (не обязательно ассоциативное),  $K_1$  — подкольцо в  $K$ ,  $B$  — идеал в  $K_1$  и  $A$  — подмножество в  $B$ . Обозначим соответственно через  $A_B$  и  $A_{K_1}$  идеалы, порожденные множеством  $A$  в кольце  $B$  и  $K_1$ . Кольцо  $K$  называется *слабо ассоциативным*, или, кратко, *с. а. кольцом*, если для всяких  $A$ ,  $B$  и  $K_1$  найдется такое натуральное число  $n$  (вообще говоря, зависящее от  $A$ ,  $B$  и  $K_1$ ), что  $A_{K_1}^n \subseteq A_B$ .

Для слабо ассоциативных колец в упомянутой выше работе развивалась общая теория радикалов. Настоящая работа является ее продолжением. Мы показываем, что в классе слабо ассоциативных колец радикал Бэра—Маккоя (см. [2, 3, 4]), а также антипростой радикал (см. [5]) являются специальными радикалами\*).

## § 1. Первичные с. а. кольца и радикал Бэра — Маккоя

Из определения специального класса колец (см. [1], § 4) и леммы 13 [1] вытекает следующее утверждение:

*Класс всех первичных с. а. колец является специальным классом колец.*

Первичные с. а. кольца образуют, очевидно, самый широкий специальный класс с. а. колец. Специальные идеалы в данном случае — это простые идеалы. Из результатов § 4 работы [1] следует, что простые идеалы в классе с. а. колец обладают свойствами VII.1 — VII.3 (см. [1]). Специальный радикал, определяемый классом всех первичных с. а. колец, ввиду замечания 4 [1] есть пересечение всех простых идеалов кольца, т. е. это радикал Маккоя  $R_m$  (см. [3]). Так как

\*) Определение специальных радикалов см. [1].

## РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ

Академики АН МССР Я. С. Гросул (главный редактор),  
А. В. Аблов (зам. главного редактора), В. А. Андрунакиевич,  
кандидаты физико-математических наук И. Ц. Гохберг,  
Т. И. Малиновский, В. А. Москаленко, С. И. Радауцан

1739669  
Центральная научная  
БИБЛИОТЕКА  
Академии наук Киргизской ССР

первичные с. а. кольца образуют самый широкий специальный класс с. а. колец, то радикал Маккоя будет наименьшим среди всех специальных радикалов. С. а. кольцо  $K$  является  $R_m$ -полупростым тогда и только тогда, когда оно изоморфно подпрямой сумме первичных с. а. колец.

Рассмотрим теперь класс  $M$  всех с. а. колец без нильпотентных идеалов. Легко проверить, что класс  $M$  удовлетворяет условиям III.1 и III.2 работы [6].

В самом деле, условие III.2 очевидно, а условие III.1 вытекает из следующей леммы.

**Лемма 1.** *В с. а. кольце  $K$  без нильпотентных идеалов всякий ненулевой идеал  $A$  есть также кольцо без нильпотентных идеалов.*

Действительно, пусть ненулевой идеал  $B$  кольца  $A$  нильпотентен, т. е.  $B^n = 0$ . Рассмотрим идеал  $B_K$  в кольце  $K$ , порожденный множеством  $B$ . В силу слабой ассоциативности кольца  $K$  найдется такое натуральное  $m$ , что  $B_K^m \subseteq B$ . Если  $B_K^m = 0$ , то получаем противоречие с условием леммы. Следовательно,  $B_K^m = C \neq 0$ . Но  $C^n \subseteq B^n = 0$ . Полученное противоречие и доказывает лемму.

Таким образом, класс  $M$  всех с. а. колец без нильпотентных идеалов определяет верхний радикал  $S_M$ , относительно которого класс  $M$  есть класс всех  $S_M$ -полупростых колец.  $S_M$ -радикальные кольца — это кольца, не отображающиеся гомоморфно на кольца без нильпотентных идеалов. В силу сказанного в § 1 работы [7] в произвольном кольце  $K$  радикал  $S_M$  есть пересечение всех таких идеалов  $T_\alpha$  из  $K$ , что фактор-кольца  $K/T_\alpha$  являются кольцами без нильпотентных идеалов. Следовательно, радикал  $S_M$  в классе с. а. колец есть в точности радикал (нижний) Бэра (см. [2]).

Левцкий [4] показал, что в ассоциативных кольцах радикал Маккоя  $R_m$  совпадает с радикалом Бэра, а потому  $R_m$ -полупростые кольца, т. е. подпрямые суммы первичных колец — это в точности кольца без нильпотентных идеалов.

Это утверждение остается справедливым и для слабо ассоциативных колец.

**Лемма 2.** *В любом кольце без нильпотентных идеалов существуют простые идеалы, или, что тоже самое, всякое кольцо без нильпотентных идеалов отображается гомоморфно на первичные кольца.*

**Доказательство.** Пусть  $a_0$  — ненулевой элемент в кольце без нильпотентных идеалов  $K$ . Тогда  $(a_0)^2 \neq 0$ , где  $(a_0)$  — идеал, порожденный элементом  $a_0$ . Выберем теперь ненулевой элемент  $a_1$  в  $(a_0)^2$ .

Продолжая таким образом, мы получим бесконечную последовательность ненулевых элементов  $\{a_i\}$ , обладающую свойством:  $a_i \in (a_{i-1})^2$ , где  $i = 1, 2, \dots$ . Рассмотрим множество всех идеалов кольца  $K$ , не пересекающих  $\{a_i\}$ . Такое множество не пусто, так как нулевой идеал не пересекает последовательность  $\{a_i\}$ . По лемме Цорна в этом множестве существует максимальный идеал  $P$ . Покажем, что  $P$  будет простым. Для этой цели, очевидно, достаточно показать, что если  $A$  и  $B$  такие идеалы, что  $A \supset P$  и  $B \supset P$ , то  $AB$  не содержится в  $P$ . Идеалы  $A$  и  $B$  пересекают последовательность  $\{a_i\}$ . Пусть  $a_j \in A$ ,  $a_k \in B$  и, для определенности, положим  $j < k$ . Тогда  $(a_k) \subseteq (a_j)$  и  $(a_k)^2 \subseteq (a_k)(a_j) \subseteq AB$ . Следовательно,  $a_{k+1} \in (a_k)^2 \subseteq AB$ , но  $a_{k+1} \notin P$ . Поэтому  $AB$  не содержится в  $P$ , что и требовалось доказать.

Из предыдущей леммы следует, что кольцо  $K$  не отображается гомоморфно на ненулевые кольца без нильпотентных идеалов, т. е. в классе с. а. колец радикалы Маккоя и Бэра совпадают.

Теорема 14 из работы [1] для  $R_m$ -полупростых колец принимает следующий вид:

*С. а. кольцо без нильпотентных идеалов и с условием максимальной для идеалов есть конечная подпрямая сумма первичных с. а. колец.*

Первая часть теоремы 15 из работы [1] в случае  $R_m$ -полупростых колец формулируется следующим образом:

*Если в с. а. кольце без нильпотентных идеалов  $K$  аннулятор  $Q^*$  всякого подпрямо неразложимого идеала  $Q \neq K$  отличен от нуля, то  $K$  есть дискретная прямая сумма идемпотентных простых колец.*

Наследственно идемпотентное кольцо, очевидно, является сильно  $R_m$ -полупростым. Из следствия 3 работы [1] вытекает справедливость и обратного утверждения. Поэтому для сильно  $R_m$ -полупростых колец следствие 19 из работы [1] формулируется следующим образом:

*Если в наследственно идемпотентном кольце  $K$  аннуляторы всех простых идеалов отличны от нуля, то  $K$  есть дискретная прямая сумма идемпотентных простых колец.*

В дальнейшем последнее утверждение будет уточнено.

## § 2. Подпрямо неразложимые с. а. кольца с идемпотентной сердцевиной и антипростой радикал

Из теоремы 9 работы [1] следует, что самый широкий специальный класс колец, составленный из подпрямо неразложимых колец, есть класс  $M$  всех подпрямо неразложимых колец с идемпотентной сердцевиной. Специальные идеалы в данном случае — это простые полумаксимальные идеалы, т. е. идеалы, фактор-кольца по которым суть подпрямо неразложимые кольца с идемпотентной сердцевиной.  $S_M$ -радикальные кольца — это кольца, не отображающиеся гомоморфно на подпрямо неразложимые кольца с идемпотентной сердцевиной, т. е. кольца без простых полумаксимальных идеалов. В дальнейшем  $S_M$ -радикальные кольца будут называться *антипростыми кольцами*. В силу теоремы 12, антипростой радикал есть двойственный себе специальный радикал. Антипростой радикал кольца  $K$  будет обозначаться через  $R_1(K)$ , или просто  $R_1$ . В силу замечания 4 из работы [1], антипростой радикал есть пересечение всех простых полумаксимальных идеалов, т. е.  $R_1$ -полупростые кольца — это подпрямые суммы подпрямо неразложимых колец с идемпотентной сердцевиной.

Согласно теореме 12 [1] подпрямо неразложимые кольца с идемпотентной сердцевиной — это в точности подпрямо неразложимые кольца с  $R_1$ -радикальной сердцевиной, где  $R_1$  — подидемпотентный радикал, определяемый классом всех подпрямо неразложимых колец с нильпотентной сердцевиной (подробно о нем будет сказано в § 3). В силу теоремы 2 из работы [1], следующие условия эквивалентны:

1.1. Слабо ассоциативное кольцо  $K$  — антипростое.

1.2. Всякий гомоморфный образ кольца  $K$  представим в виде подпрямой суммы подпрямо неразложимых колец с нильпотентной сердцевиной.

1.3.  $K$  есть сильно  $R_1$ -полупростое кольцо.

1.4. В кольце  $K$  всякий идеал есть пересечение таких идеалов, фактор-кольца по которым будут подпрямо неразложимы с нильпотентной сердцевиной.

Легко показать, что условия 1.1—1.4 равносильны следующему требованию:

1.5. Никакой идеал кольца  $K$  не отображается гомоморфно на идемпотентные простые кольца.

Выведем условие 1.5 из условия 1.1. По условию 1.1, кольцо  $K$  не отображается гомоморфно на подпрямо неразложимые кольца с идемпотентной сердцевиной, в частности на идемпотентные простые кольца. Так как кольцо  $K$  является, согласно теореме 9 из работы [1], специально радикальным, то и всякий его идеал есть специально радикальное кольцо. Поэтому никакой идеал кольца  $K$  не отображается гомоморфно на идемпотентные простые кольца.

Выведем теперь условие 1.1 из условия 1.5. Пусть  $K$  отображается гомоморфно на ненулевое подпрямо неразложимое кольцо  $\bar{K}$  с идемпотентной сердцевиной  $\bar{C}$ . В силу следствия 1 из работы [1],  $\bar{C}$  будет простым кольцом. Следовательно, прообраз  $C$  является идеалом в  $K$ , отображающимся гомоморфно на идемпотентное простое кольцо  $\bar{C}$ , что противоречит требованию 1.5.

Из условия 1.5 следует, что в классе с. а. колец антипростой радикал является наибольшим среди всех наследственных радикалов, относительно которых все идемпотентные простые кольца полупросты.

**Лемма 3.** Если ненулевой идемпотентный идеал  $V$  с. а. кольца  $K$  порождается конечным числом элементов, то кольцо  $V$  имеет простые максимальные идеалы, т. е.  $V$  отображается гомоморфно на идемпотентные простые кольца.

Предположим сначала, что идеал  $V$  порождается одним элементом, т. е.  $V = (a)$ . Так как  $V^2 = V$ , то в силу слабой ассоциативности кольца  $K$   $(a) = (a)_V$ , т. е.  $V = (a)_V$ . По принципу максимального элемента, среди идеалов кольца  $V$ , не содержащих элемента  $a$ , существует максимальный  $M$ . Ясно, что  $M$  является максимальным идеалом в  $V$ , причем, ввиду идемпотентности  $V$ , фактор-кольцо  $V/M$  также идемпотентно, т. е.  $M$  — простой идеал. Пусть теперь

$$V^2 = V = (a_1, a_2, \dots, a_n) = (a_1, a_2, \dots, a_n)_V,$$

где  $n > 1$ . Без ограничения общности можно предположить, что  $a_i \in (a_1, a_2, \dots, a_{i-1})$  для  $i = 2, 3, \dots, n$ . Рассмотрим идеал  $V_1 = (a_1, a_2, \dots, a_{n-1}) \neq V$ . Ясно, что максимальный среди идеалов кольца  $V$ , охватывающих идеал  $V_1$  и не содержащих элемент  $a_n$ , является простым максимальным идеалом в  $V$ .

Из свойства 1.5 и леммы 3 вытекает

**Следствие 1.** Если в с. а. кольце  $K$  ненулевой идеал  $V$ , порожденный конечным числом элементов, содержится в антипростом радикале  $R_1(K)$ , то  $V^2 \neq V$ .

**Теорема 1.** Слабо ассоциативное кольцо  $K$  является антипростым тогда и только тогда, когда в любом его гомоморфном образе  $\bar{K}$  для всякого ненулевого главного идеала  $(\bar{a})$  справедливо неравенство  $(\bar{a})^2 \neq (\bar{a})$ .

Действительно, если  $(\bar{a})^2 \neq (\bar{a})$  имеет место в любом гомоморфном образе  $\bar{K}$ , то, очевидно,  $K$  не отображается гомоморфно на подпрямо неразложимые кольца с идемпотентной сердцевиной, т. е.  $K$  будет антипростым кольцом. Обратно, если  $K$  — антипростое кольцо, то, ввиду следствия 1, для любого  $a \neq 0$  из  $K$   $(a)^2 \neq (a)$ . Так как любой гомоморфный образ  $\bar{K}$  антипростого кольца есть антипростое кольцо, то аналогичные неравенства имеют место и в  $\bar{K}$ .

Заметим, что в формулировке предыдущей теоремы главные идеалы можно заменить идеалами, порожденными конечным числом элементов.

### § 3. Подпрямо неразложимые с. а. кольца с нильпотентной сердцевиной и наследственно идемпотентный радикал Блэра $H = R_1$

Рассмотрим подробнее дополнительный к  $R_1$  подидемпотентный радикал  $R_1$ , определяемый классом всех подпрямо неразложимых с. а. колец с нильпотентной сердцевиной, т. е. классом всех подпрямо неразложимых колец с  $R_1$ -радикальной сердцевиной. В силу теоремы 2 из работы [1] следующие утверждения эквивалентны.

II.1. Слабо ассоциативное кольцо  $K$  не отображается гомоморфно на подпрямо неразложимые кольца с нильпотентной сердцевиной.

II.2. Всякий гомоморфный образ кольца  $K$  представим в виде подпрямой суммы подпрямо неразложимых колец с идемпотентной сердцевиной.

II.3.  $K$  есть сильно  $R_1$ -полупростое кольцо.

II.4. В кольце  $K$  любой идеал есть пересечение всех простых полумаксимальных идеалов его содержащих.

Легко показать, что условия II.1—II.4 равносильны следующему требованию:

II.5. Никакой идеал кольца  $K$  не отображается гомоморфно на ненулевые нильпотентные кольца.

Выведем условие II.5 из условия II.3. Пусть  $K$  — сильно  $R_1$ -полупростое кольцо. Тогда  $K$  не отображается гомоморфно на ненулевые  $R_1$ -радикальные кольца, в частности на ненулевые нильпотентные кольца. В силу леммы 7 работы [1], всякий идеал кольца  $K$  обладает этим же свойством.

Выведем теперь условие II.1 из II.5. Пусть  $K$  отображается гомоморфно на ненулевое подпрямо неразложимое кольцо  $\bar{K}$  с нильпотентной сердцевиной  $\bar{C}$ . Тогда прообраз  $C$  является идеалом в  $K$ , отображающимся гомоморфно на ненулевое нильпотентное кольцо, что противоречит требованию II.5.

Без труда доказывается следующее:

**Предложение 1.** Слабо ассоциативное кольцо  $K$  удовлетворяет одному из условий II.1—II.5 тогда и только тогда, когда  $K$  есть наследственно идемпотентное кольцо.

Действительно, из условия II.1 и леммы 2 [1] вытекает наследственная идемпотентность кольца  $K$ . Обратно, если  $K$  — наследственно идемпотентное кольцо, то оно удовлетворяет условию II.1, так как всякий гомоморфный образ наследственно идемпотентного кольца есть кольцо такого же рода.

Из сказанного выше следует, что в классе с. а. колец определен наследственно идемпотентный радикал  $R_1$ . Мы будем иногда обозначать его через  $H$ .

Наследственно идемпотентный радикал ( $f$ -регулярный радикал) был введен в классе ассоциативных колец в работах Блэра [8, 9]. Из определения подыдемпотентных радикалов следует, что  $H$  есть наибольший подыдемпотентный радикал. Отсюда вытекает утверждение:

Антипростой радикал  $R_1$  есть наименьший двойственный наднильпотентный радикал.

Действительно, пусть  $R$  — двойственный наднильпотентный радикал. В силу теоремы 5 из работы [1],  $R'$  есть подыдемпотентный радикал, а потому  $R' \subseteq R_1$ . Отсюда получим:

$$(R')' \supseteq (R_1)'$$

т. е.  $R \supseteq R_1$ .

Как было отмечено в § 1, наследственно идемпотентные с. а. кольца могут быть еще определены как сильно  $R_m$ -полупростые кольца, т. е.  $R'_m = R_1$ . Поэтому последнее утверждение из § 1 можно уточнить следующим образом:

*Если в наследственно идемпотентном с. а. кольце  $K$  аннуляторы всех простых полумаксимальных идеалов отличны от нуля, то  $K$  есть дискретная прямая сумма идемпотентных простых колец.*

Из сказанного в настоящем параграфе следует, что связь между радикалами  $R_m$  и  $H$  дается следующим равенством:

$$H = R'_m; R_1 = H' = R_m.$$

Так как наследственно идемпотентные кольца — это в точности кольца, любой гомоморфный образ которых не содержит нильпотентных идеалов, то радикал  $H$  есть наибольший радикал, который можно построить из колец без нильпотентных идеалов.

Поступило  
20.XI 1961 г.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. В. А. Андрунакиевич, Изв. Молд. фил. АН СССР, № 10 (76), 3 (1960).
2. R. Baer, Amer. Journ. Math., 65, 537 (1943).
3. N. H. McCoy, Amer. Journ. Math., 71, 823 (1949).
4. J. Levitzki, Amer. Journ. Math., 73, 25 (1951).
5. В. А. Андрунакиевич, Изв. АН СССР, серия матем., 21, 125 (1957).
6. А. Г. Курош, Матем. сб., 33 (75), 13 (1953).
7. В. А. Андрунакиевич, Матем. сб., 44 (86), 179 (1958).
8. R. L. Blair, Trans. Amer. Math. Soc., 50, 136 (1953).
9. R. L. Blair, Proc. Amer. Math. Soc., 6, 511 (1955).

В. А. АНДРУНАКИЕВИЧ

## РАДИКАЛЕЛЕ ИНЕЛЕЛОР СЛАБ АСОЧИАТИВЕ. II

ЕКЗЕМПЛЕ ДЕ РАДИКАЛЕ СПЕЧИАЛЕ

### Резумат

Ын прима парте а артикулулуй де фацэ [1] а фост ынтродусэ ноциуна де инеле слаб асочиативе, ши а фост дезволтатэ теория жене-ралэ а радикалелор пентру инелеле слаб асочиативе.

Ын лукраря де фацэ се аратэ, кэ ын класа инелелор слаб асочиа-тиве радикалул луй Бэр—Маккой [2, 3, 4], ла фел ши радикалул антисимплу [5] сынт радикале спечиале [1].

М. М. БУШКО-ЖУК

## ОБ ОПРЕДЕЛЕНИИ АДРЕСНОЙ ФУНКЦИИ И ПРИНЦИПАХ ПОСТРОЕНИЯ ПРОГРАММИРУЮЩИХ ПРОГРАММ

1.

Программирующей программой мы называем программу перевода записи алгоритма с некоторого абстрактного алгоритмического языка на язык конкретной машины. В этой связи подчеркиваем, что задачу формального преобразования алгоритма, с целью его улучшения в том или ином смысле, мы не относим к задачам программирующей программы. В самом деле, ведь запись алгоритма может быть и записью тестового характера, т. е. предусматривать именно те действия, которые записаны, и любое изменение записи с целью ее улучшения может лишить ее всякого смысла.

Поскольку принципы построения программирующих программ в наибольшей степени проявляют свое отличие друг от друга при обработке арифметических формул, то именно этим вопросом мы и займемся.

За исходный абстрактный алгоритмический язык нами принят адресный язык (см. [1, 2]). Прежде всего дадим строгое определение адресной функции (см. [1, 2, 3]).

Определение 1. При образовании адресной функции допустимы только следующие пять символов: „а“, „‘“, „(“, „+“, „)“.

Примечание 1. Под этими символами подразумеваем любой адрес, знак штриха, открывающую скобку, любой знак бинарной операции, закрывающую скобку.

Определение 2. Записью адресной функции называется строка из следующих друг за другом символов, перечисленных выше, удовлетворяющая одной из приведенных ниже систем аксиом.

Система аксиом 1.

1.  $a$  — функция и величина.
2. Если  $A$  — величина, то  $'A$  — функция и величина.
3. Если  $A$  и  $B$  — функции, то  $A + B$  — функция, но не величина.
4. Если  $A$  — функция, то  $(A)$  — функция и величина.

Система аксиом 1 определяет не строго скобочную запись. Допускаются лишние скобки; с другой стороны, скобки могут не полностью определять порядок действий.

Система аксиом 2.

Аксиомы 1—3 — те же, что и в первой системе.

4. Если  $A$  — функция, но не величина, то  $(A)$  — величина, но не функция.

Система аксиом 2 определяет не строго скобочную запись. Лишних скобок не может быть, но порядок действий не полностью определяется скобками.

Система аксиом 3.

Аксиомы 1, 2, 4 — те же, что и во второй системе.

3. Если  $A$  и  $B$  — величины, то  $A + B$  — функция, но не величина.

Эта система определяет строго скобочную запись. Лишних скобок здесь не может быть, и порядок действий строго определен скобками. Мы будем в дальнейшем исходить из этой системы, поскольку порядок действий, важный при переводе на другой язык, при системах аксиом 1 или 2 определяется не только скобками и для полной определенности понадобилось бы вводить другие символы и условия.

Системы аксиом 1, 2, 3 определяют правильность функции по ее построению, т. е. носят генетический характер. Функция строится постепенно по аксиомам; для проверки правильности мы восстанавливаем процесс построения функции.

Определение 3. Запись адресной функции, удовлетворяющая системе аксиом 3, называется генетически правильной записью.

Принципиально интересен вопрос: нельзя ли определить правильность записи, не восстанавливая способ ее построения, т. е. в терминах последовательности элементов написанной функции. Это оказывается возможным и для системы аксиом 1 проделано в [4]. Нас интересует система аксиом 3.

Определение 4. Парой скобок называется пара символов „(“ и „)“ такая, что символ „(“ стоит левее символа „)“, число символов „(“ и число символов „)“ между символами, составляющими пару, равно и, наконец, нет ни одного символа „(“ между символами, составляющими пару, такого, чтобы между ним и символом „(“ из пары было бы равное число символов „(“ и „)“.

Система аксиом 4.

1. Первым символом записи не может быть „+“.
2. За „‘“ не может следовать „+“.
3. За „‘“ не может следовать „)“.
4. За „(“ не может следовать „+“.
5. За „(“ не может следовать „)“.
6. За „+“ не может следовать „+“.
7. За „+“ не может следовать „)“.
8. За „а“ не может следовать „а“.
9. За „а“ не может следовать „‘“.
10. За „а“ не может следовать „(“.
11. За „)“ не может следовать „а“.
12. За „)“ не может следовать „‘“.
13. За „)“ не может следовать „(“.
14. Последним символом записи не может быть „‘“.
15. Последним символом записи не может быть „+“.
16. На любом начальном отрезке записи число символов „(“ больше или равно числу символов „)“.
17. Для всей записи число символов „(“ равно числу символов „)“.
18. Между любыми соседними символами „+“ имеется по крайней мере один символ „(“ или „)“.

19. Для каждой пары скобок имеется только две взаимоисключающие возможности: либо символ „+“ стоит левее символа „(“ этой пары так, что между ними нет другого символа „(“; либо символ „+“ стоит непосредственно справа от символа „)“ этой пары. Внутри пары скобок имеется не менее одного символа „+“.

20. Если самым левым символом является „(“, то он не составляет пары скобок с самым правым символом.

Определение 5. Запись адресной функции, удовлетворяющая системе аксиом 4, называется линейно правильной записью.

Можно доказать следующие теоремы.

Теорема 1. Система аксиом 4 независима.

Теорема 2. Генетически правильная запись линейно правильна.

Теорема 3. Линейно правильная запись генетически правильна.

Способы доказательства: построение записей, удовлетворяющих всем аксиомам, кроме одной (по очереди); доказательство аксиом из системы 4 как следствий аксиом системы 3 и наоборот.

Примечание 2. Под символом „‘“ можно понимать не только символ извлечения содержимого из адреса, но и символ любой унарной операции.

Примечание 3. Поскольку в некоторых машинах операции по нулевому рангу отсутствуют или их применение ограничено, то приходится их избегать или ограничивать и в адресных функциях. Для полного исключения нулевого ранга достаточно заменить „a“ на „‘a“ во всех формулировках аксиом.

Примечание 4. Правильность записи не гарантирует еще ее фактическую осуществимость. Для этого еще требуется применимость операций к тем аргументам, с которыми они встречаются в записи.

## 2

Работу программирующей программы можно считать законченной, если она свела запись адресной функции к линейному алгоритму, состоящему только из строк вида:

$$a) \quad 'a = > a$$

или

$$b) \quad 'a + 'a = > a,$$

которые соответствуют обычным командам трехадресной машины или обращению к простейшим подпрограммам.

Прежде всего бросается в глаза возможность применить для построения программирующей программы принцип поиска выполнимой операции а) или б) с целью постепенного исчерпания функции. Этот принцип основывается на определении адресной функции системой аксиом 3. Он предусматривает постепенное преобразование функции.

Алгоритм такой программы может быть описан следующим образом.

Правило 1. Найди в записи выражение вида „a“, запиши в линейный алгоритм новую строчку вида „a = > a“, а выражение замени выражением „‘a“; перейди опять к первому правилу. Если выражение указанного вида не найдено, переходи ко второму правилу.

Правило 2. Найди в записи выражение вида („‘a + ‘a“), запиши в линейный алгоритм новую строчку вида „‘a + ‘a = > a“, а выражение замени выражением „‘a“; перейди к правилу 1. Если выражение указанного вида не найдено, переходи к третьему правилу.

Правило 3. Найди в записи выражение вида „‘a + ‘a“, запиши в линейный алгоритм строчку вида „‘a + ‘a = > a“. После этого, а также если выражение не найдено, остановись.

Само собой разумеется, что при фактическом переводе нужно учитывать индивидуальность адресов и знаков двуместных операций (см. примечание 1) и индивидуальность знака „‘“ (см. примечание 2).

Все известные автору программирующие программы построены на той или иной модификации указанного принципа (см., например, [5 — 8]).

Определение правильности адресной функции системой аксиом 4 позволяет надеяться на создание программирующих программ, основанных на другом принципе — принципе элементной расшифровки алгоритма.

Ниже приводится запись (на адресном языке) алгоритма перевода адресных функций в программу для машины „Киев“ (см. [3]).

Предполагается, что запись функции расположена поэлементно (элементом считается и выражение вида „‘a“) в адресах  $\alpha + 1, \alpha + 2, \dots, \alpha + i$ , причем  $'(\alpha + i) = \omega$  (признак конца);  $'\varphi = \alpha + 1$ . Заметим, что  $'\varphi$  принимает при работе алгоритма значение элементов записи, а выражение *пр.* $'\varphi$ , употребляемое в алгоритме, обеспечивает переход на ту или иную метку алгоритма. Ячейки  $r, r + 1, \dots$  — рабочие; выражение *пр.* $a = \text{раб.}$  означает проверку, является ли  $a$  рабочей ячейкой.

Алгоритм имеет вид:

$$\begin{aligned} B \dots & 0 = > \mu; 0 = > \lambda; r = > \gamma; \beta - 1 = > \phi; \gamma + 1 = > \Sigma \\ H \dots & \text{Ц} \{ ' \varphi_0, C \emptyset = > \varphi \} \\ & \text{пр. } ' \varphi \\ ( \dots & 0 = > \mu \\ P & \left\{ \begin{array}{l} ' \lambda = 0 \} ' \phi = > ' \Sigma \\ ' \lambda = > ' \Sigma, 0 = > \lambda \end{array} \right. \\ & ' \Sigma + 1 = > \Sigma \\ P & \{ '(\phi_1) \neq 0 \} ( \varphi \\ & ' \gamma = > ' \phi_1 \\ & ' \phi - 1 = > \phi \\ (a \dots & ' \gamma = ' \phi_{III} \\ & H \\ ( \varphi \dots & P \{ \text{пр. } '(\phi_1) = \text{раб.} \} ' \lambda + 1 = > \lambda \\ & ' \lambda = > ' \phi_{II} \\ & \text{Ц} \{ ' \phi(-1) P \{ ' \phi \neq 0 \} = > \phi \} \\ L \dots & \\ & (a \\ ) \dots & ' \Sigma - 1 = > \Sigma \end{aligned}$$



$0 \Rightarrow \lambda$   
 $"\Sigma \Rightarrow \psi$   
 Н  
 $O_2 \dots P \{ '\lambda \neq 0 \} '\lambda \Rightarrow \psi, 0 \Rightarrow \lambda$   
 ${}^2\varphi \Rightarrow '\psi_0$   
 $0 \Rightarrow \mu$   
 Н  
 Штрих а ... P  $\{ (''\psi_1) = 0 \} {}^2\varphi \Rightarrow '\psi_1 \downarrow {}^2\varphi \Rightarrow '\psi_{11}$   
 Н  
 Штрих ... P  $\{ (''\psi_1) \neq 0 \}$  Шб  
 P  $\{ '\mu = 0 \}$  Ша  
 $0 \Rightarrow \mu; \boxed{\Phi} \Rightarrow '\psi_0$   
 Н  
 Ша ...  $'\chi \Rightarrow '\psi_1$   
 P  $\{ '\lambda = 0 \} '\psi \Rightarrow \lambda$   
 $'\psi - 1 \Rightarrow \psi$   
 Шб  
 Шб ... P  $\{ \text{нр. } (''\psi_1) = \text{раб.} \} '\chi + 1 \Rightarrow \chi$   
 $'\chi \Rightarrow '\psi_{11}$   
 Ц  $\{ '\psi(-1) P \{ {}^2\psi \neq 0 \} \Rightarrow \psi \}$   
 L ...  
 Шв ...  $\boxed{\Phi} \dots \boxed{\chi} \Rightarrow '\psi$   
 Н  
 $O_1 \dots P \{ (''\psi_1) \neq 0 \} O_1 \vartheta$   
 $\boxed{0003} \Rightarrow '\psi_1$   
 P  $\{ '\lambda = 0 \} '\psi \Rightarrow \lambda$   
 $O_1 \text{ а } \dots '\psi - 1 \Rightarrow \psi$   
 $\boxed{\text{УПП}} \boxed{3026} \boxed{'\psi + 1} \boxed{{}^2\varphi} \Rightarrow '\psi$   
 $'\psi - 1 \Rightarrow \psi$   
 $\boxed{+} \dots \boxed{0002} \Rightarrow '\psi$   
 $1 \Rightarrow \mu$   
 Н  
 $O_1 \vartheta \dots P \{ (''\psi_1) = 0003 \} V \text{ нр. } (''\psi_1) = \text{раб.} \} '\chi + 1 \Rightarrow \chi$   
 $'\chi \Rightarrow '\psi_{11}$   
 Ц  $\{ '\psi(-1) P \{ {}^2\psi \neq 0 \} \Rightarrow \psi \}$   
 L ...

$\boxed{+} \boxed{0003} \dots \boxed{\chi} \Rightarrow '\psi$

$O_1 \text{ а}$

$\omega \dots \text{Я.}$

Запись  $( "a + \sin('b - 'c) ) \times 'd$  разместится в адресах так:

адрес	элемент	значение пр. ${}^2\varphi$	значение ${}^2\varphi$
$\alpha + 1$	(	(	—
$\alpha + 2$	'	штрих	—
$\alpha + 3$	'a	штрих a	a
$\alpha + 4$	+	$O_2$	"+" (код операции сложения)
$\alpha + 5$	sin	$O_1$	"sin" (номер ячейки начала подпрограммы)
$\alpha + 6$	'	штрих	—
$\alpha + 7$	(	(	—
$\alpha + 8$	'b	штрих a	b
$\alpha + 9$	—	$O_2$	"—" (код операции вычитания)
$\alpha + 10$	'c	штрих a	c
$\alpha + 11$	)	)	—
$\alpha + 12$	)	)	—
$\alpha + 13$	$\times$	$O_2$	" $\times$ " (код операции умножения)
$\alpha + 14$	'd	штрих a	d

Запрограммируется она таким образом:

	—	b	c	r+1
$\beta - 6$	$\Phi$	r+1		0002
$\beta - 5$	УПП	3026	$\beta - 4$	"sin"
$\beta - 4$	+	0003		r+1
$\beta - 3$	$\Phi$	a		r
$\beta - 2$	+	r	r+1	r
$\beta - 1$	$\times$	r	d	

Основанная на указанном принципе программирующая программа ПП-Урал-ЭРА (для машины "Урал-1") работает в ВЦ АН УССР. Программы для ряда других машин находятся в процессе доработки.

Поступило  
15.I 1962 г.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Е. Л. Ющенко, Адресное программирование и особенности решения задач на машине «Урал», изд. КВИРТУ, 1960.
2. В. С. Королюк, К. Л. Ющенко, Питання теорії і практики програмування, Збірник праць ОЦ АН УРСР, 1961, т. I.
3. Б. В. Гнеденко, В. С. Королюк, Е. Л. Ющенко, Элементы программирования, Физматгиз, 1961.
4. К. Л. Ющенко, О. І. Михайлова, Алгоритми формальної перевірки правильності дужкового та бездужкового запису формул з одно- і двумісцевими операціями, Зб. праць ОЦ АН УРСР, 1961, т. I.
5. С. С. Камынин, Э. З. Любимский, М. Р. Шура-Бура, Об автоматизации программирования при помощи программирующей программы, Проблемы кибернетики, вып. 1, 1958, 135—171.
6. А. П. Ершов, Программирующая программа для БЭСМ, изд. АН СССР, 1958.
7. К. Л. Ющенко, Л. П. Бистрова, Програмуюча програма, інформацією для якої служить адресний алгоритм, Зб. праць ОЦ АН УРСР, 1961 т. III.
8. К. Л. Ющенко, Л. М. Іваненко, Основні питання побудови програмуючої програми для машини «Київ», Зб. праць ОЦ АН УРСР, 1961, т. II.

М. М. БУШКО-ЖУК

ДЕСПРЕ ДЕФИНИЦИЯ ФУНКЦИЕЙ КУ АДРЕСЕ  
ШИ ПРИНЧИПИЛЕ КОНСТРУКЦИЕЙ ПРОГРАМЕЛОР  
ПРОГРАМАНТЕ

Резумат

Ын артикол, реешинд дин конструкция функцией ку адресе, се дэ дефиниция ынскриерий ей перфекте.

Ачесте дефиниций депинд де ачея, акционязэ ла ординя операциилор нумай парантезеле, сау се я ын консидерадие ши тряпта операциилор. Пентру ынскриеря стриктэ ку парантезе а функцией се дэ дефиниция ынскриерий перфекте, каре оперязэ нумай ку ординя линиарэ а паркуржерий семнелор (симболилор) ынскриерий. Пе ачестэ базэ се репрезинтэ алгоритмул традучерий ынскриерий а функцией ку адресе ын програмул машиной „Київ“, базат пе „визионаря“ ачестей ынскриерь дупэ елементе нумай о сингурэ датэ.

И. Ц. ГОХБЕРГ и А. С. МАРКУС

ОБ УСТОЙЧИВОСТИ БАЗИСОВ БАНАХОВЫХ И ГИЛЬБЕРТОВЫХ  
ПРОСТРАНСТВ

1. В статье М. Г. Крейна, Д. П. Мильмана и М. А. Рутмана [1] впервые было указано свойство устойчивости базиса банахова пространства, заключающееся в том, что всякая последовательность  $\{\chi_j\}_1^\infty$ , достаточно близкая к базису  $\{\psi_j\}_1^\infty$  банахова пространства  $E$ , также есть базис  $E$ . Если базис  $\{\psi_j\}_1^\infty$  нормирован, то под достаточной близостью можно понимать условие

$$\sum_{j=1}^{\infty} |\chi_j - \psi_j| < \gamma^{-1}, \quad (1)$$

где

$$\gamma = \sup |f_j|,$$

а  $\{f_j\}_1^\infty$  — система функционалов, биортогональная к базису  $\{\psi_j\}_1^\infty$ .\*)

Идея получения таких признаков близости состоит в том, чтобы такой признак обеспечивал существование линейного непрерывного обратного оператора  $A$ , отображающего  $E$  на себя и переводящего базис  $\{\psi_j\}_1^\infty$  в систему  $\{\chi_j\}_1^\infty$  ( $A\psi_j = \chi_j$ ;  $j = 1, 2, \dots$ ), откуда и следует, что  $\{\chi_j\}_1^\infty$  есть базис.

Н. К. Барн [2] показала, что в случае, когда  $\{\psi_j\}_1^\infty$  является ортонормированным базисом гильбертова пространства  $H$ , условие (1) может быть ослаблено. А именно, оно может быть заменено условием

$$\sum_{j=1}^{\infty} |\chi_j - \psi_j|^2 < \infty$$

и дополнительным условием  $\omega$ -линейной независимости последовательности  $\{\chi_j\}_1^\infty$  (определение см. в § 1).

В [3] (стр. 628—629) было указано, что в приведенной теореме

\*) В статье [1] как следствие из приведенной теоремы получено следующее уточнение классической теоремы Вейерштрасса: в пространстве непрерывных функций  $C(0,1)$  существует полиномиальный базис.

М. Г. Крейна, Д. П. Мильмана и М. А. Рутмана условие (1) можно, по аналогии с теоремой Н. К. Бари, заменить условием

$$\sum_{j=1}^{\infty} |\chi_j - \psi_j| < \infty$$

и дополнительным требованием  $\omega$ -линейной независимости последовательности  $\{\chi_j\}$ .

Если в последних двух предложениях отбросить условие  $\omega$ -линейной независимости последовательности  $\{\chi_j\}$ , то эта последовательность, вообще говоря, уже не будет базисом пространства.

Однако в этом случае, как заметил М. Г. Крейн ([4], стр. 333—334), последовательность  $\{\chi_j\}$  можно превратить в базис заменой некоторого конечного числа векторов этой системы таким же числом надлежаще выбранных векторов.

2. Существенную роль во всей статье играет понятие дефектного базиса (так мы называем систему векторов банахова пространства, которую можно превратить в базис своей замкнутой линейной оболочки удалением из нее некоторого конечного числа векторов). По аналогии с теорией  $\Phi$ -операторов [5] вводятся понятия дефектных чисел и индекса дефектного базиса.

Понятия дефектного базиса и его числовых характеристик возникли под влиянием приведенного выше предложения М. Г. Крейна [4]. В этом предложении последовательность  $\{\chi_j\}$  является дефектным базисом с индексом, равным нулю.

В настоящей статье содержатся некоторые обобщения результатов, приведенных в п. 1. Эти обобщения заключаются, во-первых, в замене базисов дефектными базисами и, во-вторых, в установлении некоторых новых условий близости двух последовательностей векторов, обеспечивающих устойчивость дефектных базисов. Некоторые из полученных при этом результатов являются новыми уже для обычных базисов.

В § 1 приводятся основные общие предложения о дефектных базисах. Выясняется связь между понятиями  $\Phi$ -,  $\Phi_+$ -операторов и дефектного базиса (лемма 3). Доказываются предложения о дефектных базисах (лемма 2 и теорема 1), являющиеся аналогами леммы о расширении  $\Phi$ -оператора на конечное число измерений ([5], лемма 2.2) и теоремы об индексе произведения двух  $\Phi$ -операторов ([5], теорема 2.1).

Во втором параграфе (теоремы 2, 3) устанавливается устойчивость дефектных базисов и их индексов, а также полуустойчивость их дефектных чисел. Используемое при этом понятие близости двух последовательностей существенно опирается на принадлежащее Дж. Нейману понятие симметрической нормирующей функции.

Результаты § 2 применяются к безусловным дефектным базисам в § 3. В частности, здесь обобщается на пространства  $L_p$  и  $l_p$  ( $p \geq 1$ ) теорема Н. К. Бари—И. М. Гельфанда об устойчивости безусловных базисов гильбертова пространства.

В § 4 и 5 рассматриваются вопросы устойчивости базисов гильбертова пространства. Указываются характеристические свойства квадратично устойчивых базисов (определение см. в § 4). Оказывается, что этот класс базисов совпадает с классом базисов Бесселя, введенным Н. К. Бари [6] (теорема 6).

В последнем параграфе приводится одно новое условие близости двух последовательностей, обеспечивающее устойчивость некоторых классов дефектных базисов, и доказывается, что это условие нельзя ослабить (теоремы 7 и 8).

## § 1. Дефектные базисы в банаховых пространствах

1. Последовательность  $\Psi = \{\psi_j\}_1^\infty$  векторов банахова пространства  $E$  будем называть дефектным базисом, если из нее можно исключить конечное число векторов так, что оставшаяся последовательность будет базисом своей линейной замкнутой оболочки.\*) Минимальное число векторов, при исключении которых  $\Psi$  обращается в базис\*\*), обозначим  $\alpha(\Psi)$ .

Через  $\beta(\Psi)$  обозначим размерность [5] факторпространства  $E/R(\Psi)$ , где  $R(\Psi)$ —линейная замкнутая оболочка последовательности  $\Psi$ . Разность  $\kappa(\Psi) = \beta(\Psi) - \alpha(\Psi)$  назовем индексом дефектного базиса  $\Psi$ . Заметим, что индекс  $\kappa(\Psi)$  конечен тогда и только тогда, когда конечно число  $\beta(\Psi)$ .

Очевидно, что дефектный базис  $\Psi$  является базисом пространства  $E$  в том и только в том случае, когда  $\alpha(\Psi) = \beta(\Psi) = 0$ .

Отметим еще, что если у дефектного базиса  $\Psi$  число  $\beta(\Psi)$  конечно, то, заменяя в  $\Psi$  соответствующие  $\alpha(\Psi)$  векторов на  $\beta(\Psi)$  линейно независимых векторов, линейная оболочка которых пересекается с  $R(\Psi)$  только в нуле, получим базис пространства  $E$ .

Существенную роль в дальнейшем играют следующие две леммы.

*Лемма 1. Пусть  $\Psi$ —произвольный дефектный базис и  $\tilde{\Psi}$ —какой-либо базис, полученный из  $\Psi$  исключением  $n$  векторов. Для того чтобы имело место равенство  $R(\tilde{\Psi}) = R(\Psi)$ , необходимо и достаточно, чтобы  $n = \alpha(\Psi)$ .*

*Доказательство.* Если  $R(\tilde{\Psi})$  является правильной частью  $R(\Psi)$ , то среди исключенных векторов найдется хотя бы один вектор  $\psi_k$ , не принадлежащий  $R(\tilde{\Psi})$ . Очевидно, последовательность  $\tilde{\Psi}$ , пополненная вектором  $\psi_k$ , также является базисом. Стало быть,  $\alpha(\Psi) < n - 1$ .

Обратно, пусть  $R(\tilde{\Psi}) = R(\Psi)$ . Обозначим через  $\Psi'$  некоторый базис, полученный из  $\Psi$  исключением  $\alpha = \alpha(\Psi)$  векторов, и через  $k$ —число векторов последовательности  $\Psi$ , отсутствующих как в  $\tilde{\Psi}$ , так и в  $\Psi'$ . Пусть  $\hat{\Psi}$ —общая часть базисов  $\tilde{\Psi}$  и  $\Psi'$ . Тогда  $\tilde{\Psi}$  получается из  $\hat{\Psi}$  исключением  $\alpha - k$  векторов, т. е.

$$\dim R(\tilde{\Psi})/R(\hat{\Psi}) = \alpha - k. \quad (2)$$

\*) Так как в каждом банаховом пространстве найдется бесконечномерное подпространство, обладающее базисом ([13], стр. 206), то, очевидно, дефектные базисы существуют в произвольном банаховом пространстве.

\*\*) Если не указывается, в каком пространстве данная последовательность образует базис, то подразумевается, что она является базисом своей линейной замкнутой оболочки.

Аналогично выводим, что

$$\dim R(\Psi')/R(\tilde{\Psi}) = n - k. \quad (3)$$

Так как согласно уже доказанному

$$R(\Psi') = R(\Psi) = R(\tilde{\Psi}),$$

то из (2) и (3) следует равенство  $\alpha(\Psi) = n$ .

Лемма доказана.

Лемма 2. Пусть  $\Psi = \{\psi_j\}_1^\infty$  — произвольный дефектный базис в пространстве  $E$  и  $\{\chi_j\}_1^n$  — любая система векторов из  $E$ . Тогда объединение  $\tilde{\Psi}$  систем  $\{\psi_j\}_1^\infty, \{\chi_j\}_1^n$  является дефектным базисом в  $E$ , причем

$$\alpha(\tilde{\Psi}) \leq \alpha(\Psi) + n; \quad \beta(\tilde{\Psi}) \geq \beta(\Psi) - n \quad \text{и} \quad \kappa(\tilde{\Psi}) = \kappa(\Psi) - n. \quad (4)$$

Доказательство. Система  $\tilde{\Psi}$ , очевидно, является дефектным базисом в  $E$ . Таким образом, лемма будет доказана, если будут доказаны соотношения (4).

Обозначим через  $m$  ( $< n$ ) размерность факторпространства  $R(\tilde{\Psi})/R(\Psi)$ . Тогда, очевидно,

$$\beta(\tilde{\Psi}) = \beta(\Psi) - m. \quad (5)$$

Легко видеть, что в системе  $\{\chi_j\}_1^n$  найдется  $m$  линейно независимых векторов таких, что их линейная оболочка пересекается с подпространством  $R(\Psi)$  только в нуле. Без ограничения общности можно считать, что этими векторами являются векторы  $\chi_j$  ( $j = 1, 2, \dots, m$ ).

Систему  $\Psi$  можно превратить в базис подпространства  $R(\Psi)$ , исключив из нее  $\alpha(\Psi)$  векторов. Следовательно, систему  $\tilde{\Psi}$  можно превратить в базис подпространства  $R(\tilde{\Psi})$ , исключив из нее дополнительно к указанным  $\alpha(\Psi)$  векторам еще  $n - m$  векторов  $\chi_j$  ( $j = m + 1, \dots, n$ ). Отсюда следует в силу леммы 1, что

$$\alpha(\tilde{\Psi}) = \alpha(\Psi) + n - m. \quad (6)$$

Из равенств (5) и (6) выводим, что

$$\kappa(\tilde{\Psi}) = \beta(\tilde{\Psi}) - \alpha(\tilde{\Psi}) = \beta(\Psi) - \alpha(\Psi) - n = \kappa(\Psi) - n.$$

Лемма доказана.

2. Последовательность  $\Psi = \{\psi_j\}_1^\infty$  называется  $\omega$ -линейно независимой [4], если равенство  $\sum_{j=1}^{\infty} \alpha_j \psi_j = 0$  возможно лишь при  $\alpha_j = 0$  ( $j = 1, 2, \dots$ ).

1°. Дефектный базис  $\Psi$  является  $\omega$ -линейно независимым в том и только в том случае, когда  $\alpha(\Psi) = 0$ .

Очевидно, что всякий дефектный базис  $\Psi$ , для которого  $\alpha(\Psi) = 0$ , является  $\omega$ -линейно независимым.

Обратно, допустим, что для некоторого  $\omega$ -линейно независимого дефектного базиса  $\Psi$  число  $\alpha(\Psi) > 0$ . Тогда согласно лемме 1 без ограничения общности можно считать, что система  $\{\psi_j\}_{\alpha+1}^\infty$  является базисом  $R(\Psi)$ . Следовательно, в частности,

$$\psi_1 = \sum_{j=\alpha+1}^{\infty} c_j \psi_j.$$

Последнее противоречит  $\omega$ -линейной независимости системы  $\Psi$ .

3. Приведем несколько определений из теории нормально разрешимых операторов [5], которые понадобятся в дальнейшем.

Линейный ограниченный оператор  $A$ , действующий из одного банахова пространства  $E_1$  в другое  $E_2$ , называется  $\Phi_+$ -оператором\*, если оператор  $A$  нормально разрешим и размерность  $\alpha(A)$  подпространства  $L(A)$  всех решений уравнения  $A\varphi = 0$  ( $\varphi \in E_1$ ) конечна.

Множество всех значений оператора  $A$  обозначается через  $R(A)$ , а через  $\beta(A)$  обозначается размерность факторпространства  $E_2/R(A)$ . Если  $A$  является  $\Phi_+$ -оператором, то через  $\kappa(A)$  обозначается разность  $\beta(A) - \alpha(A)$ , называемая индексом оператора  $A$ .

Отметим, что данные выше определения числовых характеристик дефектного базиса введены по аналогии с соответствующими понятиями из теории  $\Phi_+$ -операторов [5]. В этом пункте устанавливаются связи, существующие между дефектными базисами и  $\Phi_+$ -операторами.

Лемма 3. Пусть  $\Psi = \{\psi_j\}_1^\infty$  — произвольный базис пространства  $E_1$  и  $A$  — любой  $\Phi_+$ -оператор, действующий из  $E_1$  в  $E_2$ . Тогда система  $A\Psi = \{A\psi_j\}_1^\infty$  является дефектным базисом в пространстве  $E_2$ , причем

$$\alpha(A\Psi) = \alpha(A) \quad \text{и} \quad \beta(A\Psi) = \beta(A).$$

Доказательство. Пусть  $\varphi_k$  ( $k = 1, 2, \dots, \alpha$ ;  $\alpha = \alpha(A)$ ) — некоторый базис подпространства  $L(A)$  и

$$\varphi_k = \sum_{j=1}^{\infty} c_{kj} \psi_j \quad (k = 1, 2, \dots, \alpha). \quad (7)$$

Так как векторы  $\varphi_k$  ( $k = 1, 2, \dots, \alpha$ ) линейно независимы, то у матрицы

$$\|c_{kj}\|_{\substack{k=1, 2, \dots, \alpha \\ j=1, 2, \dots}}$$

существует хотя бы один отличный от нуля минор порядка  $\alpha$ . Этот факт доказывается так же, как в случае конечных матриц (см. [7], стр. 114—116). Без ограничения общности можно считать, что

$$\det \|c_{kj}\|_{k,j=1, 2, \dots, \alpha} \neq 0. \quad (8)$$

\* ) Приведенное здесь определение  $\Phi_+$ -оператора незначительно отличается от определения, принятого в [5].

Покажем теперь, что подпространство  $L(A)$  и линейная замкнутая оболочка  $M$  последовательности  $\{\psi_j\}_{j=1}^{\infty}$  пересекаются только в нуле. В самом деле, если

$$\sum_{k=1}^{\alpha} \beta_k \varphi_k = \sum_{j=\alpha+1}^{\infty} \gamma_j \psi_j,$$

то, подставляя в левую часть этого равенства выражения для  $\varphi_k$  из (7) и приравнявая коэффициенты при  $\psi_j$  ( $j=1, 2, \dots, \alpha$ ), получим

$$\sum_{k=1}^{\alpha} c_{kj} \beta_k = 0 \quad (j=1, 2, \dots, \alpha).$$

Следовательно, в силу (8)  $\beta_k=0$  ( $k=1, 2, \dots, \alpha$ ). Так как, кроме того,  $\dim L(A)=\alpha=\dim E_1/M$ , то  $E_1=L(A) \dot{+} M$ . Оператор  $A$  изоморфно отображает подпространство  $M$  на  $R(A)$ , и, стало быть, последовательность  $\{A\psi_j\}_{j=\alpha+1}^{\infty}$  является базисом подпространства  $R(A)$ . Таким образом,  $A\psi_j$  является дефектным базисом. Кроме того, из доказанного выше вытекает, что  $R(A\psi_j)=R(A)$ , а следовательно,  $\beta(A\psi_j)=\beta(A)$ . Наконец, так как система  $\{A\psi_j\}_{j=\alpha+1}^{\infty}$  является базисом в  $R(A\psi_j)$ , то согласно лемме 1  $\alpha(A\psi_j)=\alpha=\alpha(A)$ .

Лемма доказана.

Отметим, что если  $E_1=E_2=N$  является гильбертовым пространством, то имеет место утверждение, обратное к лемме 1.

2°. Если  $\Psi=\{\psi_j\}$  — дефектный базис в гильбертовом пространстве  $N$ , то существуют базис  $X=\{\chi_j\}$  пространства  $N$  и  $\Phi_+$ -оператор  $A$  такие, что  $A\chi_j=\psi_j$ .

Приводимая ниже теорема является аналогом теоремы об индексе произведения  $\Phi_+$ -операторов ([5], теорема 2.1). Идея доказательства этой теоремы заимствована из [8].

Теорема 1. Пусть  $\Psi=\{\psi_j\}_1^{\infty}$  — произвольный дефектный базис в  $E_1$  и  $A$  — любой  $\Phi_+$ -оператор, действующий из  $E_1$  в  $E_2$ . Тогда последовательность  $A\psi_j=\{\psi_j\}_1^{\infty}$  является дефектным базисом в пространстве  $E_2$ , причем

$$\alpha(A\Psi)=\alpha(A)+\alpha(\Psi). \quad (9)$$

Доказательство. Пусть  $M_1=R(\Psi) \cap L(A)$ ,  $n_1=\dim M_1$  и  $\tilde{\Psi}$  — базис подпространства  $R(\Psi)$ , полученный исключением  $\alpha(\Psi)$  векторов из дефектного базиса  $\Psi$ .

Применяя лемму 3 к сужению  $\tilde{A}$  оператора  $A$  на подпространство  $R(\Psi)$ , получим, что  $A\tilde{\Psi}$ , а следовательно, и  $A\Psi$  является дефектным базисом, и что из  $A\tilde{\Psi}$  можно исключить  $\alpha(\tilde{A})=n_1$  векторов так, чтобы оставшаяся при этом система образовала базис подпространства  $R(A\tilde{\Psi})$ . Таким образом, из последовательности  $A\Psi$  можно исключить  $\alpha(\Psi)+n_1$  векторов так, чтобы оставшиеся векторы образовали базис в  $R(A\Psi)$ . Согласно лемме 1 это означает, что

$$\alpha(A\Psi)=\alpha(\Psi)+n_1. \quad (10)$$

Обозначим через  $M_2$  какое-нибудь прямое дополнение к  $M_1$  в  $L(A)$ .

Отметим, что если хотя бы одно из чисел  $\beta(A)$ ,  $\beta(\Psi)$  бесконечно, то соотношение (9) очевидно. Поэтому в дальнейшем будем считать, что числа  $\beta(A)$  и  $\beta(\Psi)$  конечны.

Пусть  $M_3$  — некоторое прямое дополнение в  $E_1$  к  $R(\Psi) \dot{+} M_2$  и  $n_3=\dim M_3$ . Очевидно,  $\dim(M_2 \dot{+} M_3)=\beta(\Psi)$ , а так как  $\dim M_2=\alpha(A)-n_1$ , то

$$n_1-n_3=\alpha(A)-\beta(\Psi). \quad (11)$$

Принимая во внимание, что  $M_3 \cap L(A)=0$ , получим

$$R(A)=R(A\Psi) \dot{+} AM_3 \quad (12)$$

и  $\dim AM_3=n_3$ .

Из (12) следует, что

$$\beta(A\Psi)=\beta(A)+n_3. \quad (13)$$

Вычитая (10) из (13), получим в силу (11)

$$\alpha(A\Psi)=\beta(A)-\alpha(\Psi)+n_3-n_1=\beta(A)-\alpha(\Psi)+\beta(\Psi)-\alpha(A)=\alpha(A)+\alpha(\Psi).$$

Теорема доказана.

Следствие. Пусть  $\Psi=\{\psi_j\}$  — произвольный дефектный базис в банаховом пространстве  $E$  и  $T$  — любой линейный вполне непрерывный оператор, действующий в  $E$ . Тогда последовательность  $(I-T)\Psi$  является дефектным базисом в  $E$  и  $\alpha((I-T)\Psi)=\alpha(\Psi)$ .

В частности, если  $\Psi=\{\psi_j\}$  образует базис пространства  $E$ , а система  $(I-T)\Psi$  является  $\omega$ -линейно независимой, то она также является базисом пространства  $E$ .

## § 2. Теоремы об устойчивости дефектных базисов

1. Для формулировки теорем об устойчивости дефектных базисов понадобятся некоторые сведения о симметрических нормирующих функциях (symmetric gauge functions), впервые для конечномерного случая рассмотренных Дж. Нейманом [9]. Теория симметрических нормирующих функций развита в совместных исследованиях Дж. Неймана и Р. Шаттена [10, 11].

Обозначим через  $K$  векторное пространство всех последовательностей  $\xi=(\xi_j)_1^{\infty}$  комплексных чисел, в каждой из которых имеется лишь конечное число ненулевых координат.

Функцию  $\Phi(\xi)$ , определенную на  $K$ , назовем симметрической нормирующей функцией, если она обладает следующими свойствами:

$$a) \Phi(\xi) > 0 \quad (\xi \in K, \xi \neq 0);$$

$$b) \text{ для любого комплексного } \lambda$$

$$\Phi(\lambda\xi) = |\lambda| \Phi(\xi) \quad (\xi \in K);$$

$$в) \Phi(\xi_1 + \xi_2) \leq \Phi(\xi_1) + \Phi(\xi_2) \quad (\xi_1, \xi_2 \in K);$$

г) если  $\xi=(\xi_j)_1^{\infty} \in K$  и  $\xi'=(\xi'_j)_1^{\infty}$ , где  $n_j(j=1, 2, \dots)$  — произвольная перестановка чисел  $1, 2, \dots, n$  и  $|\xi_j|=|\xi'_j|=1$ , то

$$\Phi(\xi) = \Phi(\xi');$$

д)  $\Phi(1, 0, 0, \dots) = 1$ .

Легко видеть, что для любой симметрической нормирующей функции  $\Phi(\xi)$

$$\max_j |\xi_j| < \Phi(\xi) < \sum_j |\xi_j| \quad (\xi = \{\xi_j\} \in K).$$

Каждой симметрической нормирующей функции  $\Phi(\xi)$  сопоставляется [10] два, вообще говоря, различных банаховых пространства  $l_\Phi$  и  $l_\Phi^{(0)}$ .

Первое из них состоит из всех последовательностей комплексных чисел  $\xi = \{\xi_j\}_1^\infty$ , для которых

$$\sup_n \Phi(\xi^{(n)}) < \infty,$$

где  $\xi^{(n)} = \{\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n, 0, 0, \dots\}$  ( $n=1, 2, \dots$ ); норма в  $l_\Phi$  определяется равенством

$$\|\xi\|_\Phi = \lim_{n \rightarrow \infty} \Phi(\xi^{(n)}) (= \Phi(\xi)) \quad (\xi \in l_\Phi).$$

Второе же —  $l_\Phi^{(0)}$  является подпространством  $l_\Phi$ , совпадающим с замыканием  $K$  в пространстве  $l_\Phi$ . Векторы  $\xi = \{\xi_j\}_1^\infty$  из  $l_\Phi^{(0)}$  характеризуются тем, что для них

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|\xi - \xi^{(n)}\|_\Phi = \lim_{n \rightarrow \infty} \Phi(\xi - \xi^{(n)}) = 0. \quad (14)$$

В [10] показано, что всякой симметрической нормирующей функции  $\Phi(\xi)$  отвечает сопряженная симметрическая нормирующая функция  $\Phi^*(\xi)$ , определяемая равенством

$$\Phi^*(\xi) = \max_{\eta \neq 0, \eta \in K} \frac{|\sum_j \xi_j \eta_j|}{\Phi(\eta)} \quad (\xi \in K).$$

Сопряженная функция  $\Phi^*(\xi)$  обладает следующими двумя свойствами:

$$\Phi^{**}(\xi) = \Phi(\xi)$$

$$\sum_j |\xi_j| |\eta_j| \leq \Phi(\xi) \Phi^*(\eta) \quad (\xi \in l_\Phi, \eta \in l_{\Phi^*}).$$

Простейшим примером симметрической нормирующей функции является функция  $\Phi_p(\xi)$ , где

$$\Phi_p(\xi) = (\sum_j |\xi_j|^p)^{1/p} \quad (1 < p < \infty), \quad \Phi_\infty(\xi) = \max_j |\xi_j| \quad (\xi \in K).$$

Как известно,  $\Phi_p^*(\xi) = \Phi_q(\xi)$  ( $p^{-1} + q^{-1} = 1$ ).

Если  $p < \infty$ , то пространства  $l_{\Phi_p}$  и  $l_{\Phi_p}^{(0)}$  совпадают и представляют собой пространство, обозначаемое обычно через  $l_p$ . При  $p = \infty$  пространство  $l_{\Phi_\infty} = m$ , а  $l_{\Phi_\infty}^{(0)} = c_0$ .

Каждой невозрастающей последовательности положительных чисел  $\pi_1 = 1, \pi_2, \pi_3, \dots$ , обладающей свойствами

$$\sum_j \pi_j = \infty, \quad \lim_{j \rightarrow \infty} \pi_j = 0,$$

сопоставляются [12] две симметрические нормирующие функции по правилу

$$\Phi_\Pi(\xi) = \sup_n \left( \sum_{j=1}^n \xi_j^* / \sum_{j=1}^n \pi_j \right) \quad \text{и} \quad \Phi_\pi(\xi) = \sum_{j=1}^\infty \pi_j \xi_j^*,$$

где через  $\xi^* = \{\xi_j^*\}$  обозначается последовательность  $|\xi_1|, |\xi_2|, \dots$ , расположенная в невозрастающем порядке.

В [12] показано, что  $\Phi_\pi^*(\xi) = \Phi_\Pi(\xi)$ .

Эти функции порождают [12] тройку пространств  $l_{\Phi_\Pi}^{(0)}, l_{\Phi_\pi} = l_{\Phi_\pi}^{(0)}, l_{\Phi_\Pi}$ , обладающих тем свойством, что каждое последующее является сопряженным к предыдущему.

2. Напомним, что два базиса  $\{\psi_j\}$  и  $\{\chi_j\}$  банахова пространства  $E$  называются эквивалентными, если существует линейный ограниченный обратимый оператор  $A$  такой, что  $A\psi_j = \chi_j$  ( $j=1, 2, \dots$ ).

**Теорема 2.** Пусть  $\Phi(\xi)$  — произвольная симметрическая нормирующая функция и  $\Psi = \{\psi_j\}_1^\infty$  — дефектный базис в банаховом пространстве  $E$ , обладающий тем свойством, что всегда из сходимости ряда  $\sum_j c_j \psi_j$  по норме вытекает принадлежность вектора  $c = \{c_j\}_1^\infty$  пространству  $l_\Phi$ . Тогда всякая последовательность  $X = \{\chi_j\}_1^\infty$  из  $E$ , для которой вектор  $\|\chi_j - \psi_j\|_1 \in l_\Phi^{(0)}$ , является дефектным базисом\*) в  $E$  и

$$x(X) = x(\Psi). \quad (15)$$

Если  $\Psi$  является базисом пространства  $E$ , а последовательность  $X$   $\omega$ -линейно независима, то  $X$  также является базисом пространства  $E$ , эквивалентным базису  $\Psi$ \*\*).

**Доказательство.** Без ограничения общности можно считать, что последовательность  $\tilde{\Psi} = \{\psi_j\}_{\alpha+1}^\infty$  ( $\alpha = \alpha(\Psi)$ ) является базисом  $R(\Psi)$ .

Обозначим через  $B_k$  ( $k=1, 2, \dots$ ) линейный ограниченный оператор, отображающий всякий вектор  $x = \sum_j c_j \psi_{\alpha+j} \in R(\Psi)$  в последовательность  $\{c_1, c_2, \dots, c_k, 0, 0, \dots\} \in l_\Phi$ . Согласно условию теоремы для каждого вектора  $x \in R(\Psi)$

$$\sup_k \|B_k x\|_\Phi < \infty,$$

а следовательно, в силу теоремы Банаха—Штейнгауза ([13], стр. 68)

$$\sup_k \|B_k\| < \infty.$$

Таким образом, существует число  $\gamma$ , не зависящее от  $x$  и такое, что

$$\|\{c_j\}\|_\Phi \leq \gamma \|\sum_j c_j \psi_{\alpha+j}\| = \gamma \|x\| \quad (x \in R(\Psi)). \quad (16)$$

\*) Отметим, что дефектный базис  $X$  также обладает свойством, что из сходимости ряда  $\sum_j c_j \chi_j$  по норме вытекает принадлежность вектора  $c = \{c_j\}$  пространству  $l_\Phi$ .

\*\*) Доказываемая в §4 теорема 6 показывает, что условия теоремы 2 в определенном смысле являются точными.

На линейной оболочке базиса  $\tilde{\Psi}$  определим линейный оператор  $T$ , полагая

$$T\psi_{\alpha+j} = \chi_{\alpha+j} - \psi_{\alpha+j} \quad (j=1, 2, \dots).$$

Так как

$$\begin{aligned} |T \sum_j c_j \psi_{\alpha+j}| &< \sum_j |c_j| \|T\psi_{\alpha+j}\| < \sum_j |c_j| \|\psi_{\alpha+j} - \chi_{\alpha+j}\| < \\ &< \gamma \|\sum_j c_j \psi_{\alpha+j}\| + \sum_j |c_j| \|\psi_{\alpha+j} - \chi_{\alpha+j}\| < \gamma \|\sum_j c_j \psi_{\alpha+j}\| + \epsilon, \end{aligned} \quad (17)$$

то оператор  $T$  ограничен и, стало быть, допускает расширение на все  $R(\Psi)$  по непрерывности.

Обозначим через  $T_n$  конечномерный оператор, определенный равенством

$$T_n(\sum_{j=1}^n c_j \psi_{\alpha+j}) = \sum_{j=1}^n c_j T\psi_{\alpha+j} \quad (n=1, 2, \dots).$$

Легко проверить, что

$$\|T - T_n\| < \gamma \|\sum_{j=n+1}^{\infty} \|\psi_{\alpha+j} - \chi_{\alpha+j}\|\|_{\Phi^*}.$$

В силу (14)

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|\sum_{j=n+1}^{\infty} \|\psi_{\alpha+j} - \chi_{\alpha+j}\|\|_{\Phi^*} = 0,$$

и, стало быть, оператор  $T$ , действующий из  $R(\Psi)$  в  $E$ , вполне непрерывен.

Очевидно, оператор  $I$ , рассматриваемый как оператор, действующий из  $R(\Psi)$  в  $E$ , является  $\Phi_+$ -оператором, причем

$$\alpha(I) = 0 \text{ и } \beta(I) = \beta(\Psi).$$

Согласно теоремам 2.3 и 7.3 [5] оператор  $I+T$ , отображающий  $R(\Psi)$  в  $E$ , также является  $\Phi_+$ -оператором и

$$\kappa(I+T) = \kappa(I) = \beta(\Psi).$$

Так как последовательность  $\tilde{\Psi}$  является базисом в  $R(\Psi)$  и

$$(I+T)\psi_{\alpha+j} = \chi_{\alpha+j} \quad (j=1, 2, \dots), \quad (18)$$

то согласно лемме 3 последовательность  $\tilde{X} = \{\chi_{\alpha+j}\}_1^{\infty}$  является дефектным базисом в  $E$ , причем

$$\kappa(\tilde{X}) = \kappa(I+T) = \beta(\Psi).$$

Применяя лемму 2 к расширению  $X$  последовательности  $\tilde{X}$ , получим

$$\kappa(X) = \kappa(\tilde{X}) - \alpha(\Psi) = \beta(\Psi) - \alpha(\Psi) = \kappa(\Psi).$$

Если  $\Psi$  — базис  $E$ , то оператор  $I+T$  определен на всем пространстве  $E$  и в равенствах (18)  $\alpha = 0$ . В силу полной непрерывности оператора  $T$  и леммы 3 из равенств (18) следует, что

$$\alpha(X) = \alpha(I+T) = \beta(I+T) = \beta(X).$$

Если, кроме того, последовательность  $X$   $\omega$ -линейно независима, то в силу  $1^\circ \alpha(X) = 0$ , и, стало быть,

$$\alpha(I+T) = \beta(I+T) = \beta(X) = 0.$$

Следовательно, оператор  $I+T$  непрерывно обратим и  $X$  является базисом  $E$ , эквивалентным базису  $\Psi$ .

Теорема доказана.

**Замечание.** В последнем утверждении теоремы условие  $\omega$ -линейной независимости последовательности  $X$  можно заменить следующим более слабым условием: если ряд  $\sum c_j \chi_j$  сходится по норме и вектор  $c = \{c_j\} \in l_\Phi$ , то равенство

$$\sum c_j \chi_j = 0$$

влечет за собой равенство нулю всех чисел  $c_j$ :  $c_1 = c_2 = \dots = 0$ .

В самом деле, условие  $\omega$ -линейной независимости последовательности  $X$  было использовано в доказательстве теоремы 1 лишь для того, чтобы установить справедливость равенства

$$\alpha(I+T) = \beta(I+T) = 0. \quad (19)$$

Покажем, что последнее равенство можно вывести и из указанного выше более слабого условия. Пусть  $(I+T)\varphi = 0$ . Так как это доказательство ведется в предположении, что  $\Psi$  — базис пространства  $E$ , то  $\varphi$  можно представить в виде  $\varphi = \sum c_j \psi_j$ . Согласно условию теоремы вектор  $c = \{c_j\} \in l_\Phi$ . Кроме того,

$$\sum c_j \chi_j = (I+T)\sum c_j \psi_j = 0.$$

Отсюда вытекает, что  $c = 0$  и, стало быть,  $\varphi = 0$ . Таким образом,  $\alpha(I+T) = 0$ , откуда следует (19).

3. В теореме 2 не указаны никакие связи между числами  $\alpha(\Psi)$ ,  $\beta(\Psi)$  и числами  $\alpha(X)$ ,  $\beta(X)$ . Приводимая ниже теорема дополняет теорему 2 в этом направлении.

**Теорема 3.** Пусть  $\Psi = \{\psi_j\}_1^{\infty}$  — дефектный базис, удовлетворяющий условиям теоремы 2. Тогда существует число  $\delta (> 0)$  такое, что всякая последовательность  $X = \{\chi_j\}_1^{\infty}$  из  $E$ , удовлетворяющая условиям:

$$\|\chi_j - \psi_j\|_1 \in l_{\Phi^*} \text{ и } \|\|\chi_j - \psi_j\|\|_1^{\infty} |_{\Phi^*} < \delta,$$

является дефектным базисом, причем

$$\alpha(X) < \alpha(\Psi), \beta(X) < \beta(\Psi) \text{ и } \kappa(X) = \kappa(\Psi).$$

Если  $\Psi$  — базис пространства  $E$ , то  $X$  также является базисом  $E$ , эквивалентным  $\Psi$ .

**Доказательство.** Будем здесь пользоваться обозначениями из доказательства теоремы 2. Положим  $\delta$  равным  $(3\gamma)^{-1}$ , где  $\gamma$  — константа из равенства (16)\*. Тогда из соотношений (17) следует, что для

\* Если  $\beta(\Psi) < \infty$ , то можно положить  $\delta = \gamma^{-1}$ .

оператора  $T$ , действующего из  $R(\Psi)$  в  $E$ , выполнено условие  $|T| < 1/3$ . Поэтому в силу теорем 2.4 и 7.1 [5] оператор  $I+T$ , действующий из  $R(\Psi)$  в  $E$ , является  $\Phi_+$ -оператором,  $\kappa(I+T) = \kappa(I) = \beta(\Psi)$  и  $\alpha(I+T) = 0$ . Так как  $(I+T)\tilde{\Psi} = \tilde{X}$ , то согласно лемме 3  $\tilde{X}$  является дефектным базисом в  $E$  и

$$\alpha(\tilde{X}) = \alpha(I+T) = 0, \quad \kappa(\tilde{X}) = \kappa(I+T) = \beta(\Psi).$$

В силу леммы 2 отсюда следует, что  $X$  также есть дефектный базис в  $E$ , причем

$$\alpha(X) < \alpha(\tilde{X}) + \alpha = \alpha(\Psi) \quad (20)$$

и

$$\kappa(X) = \kappa(\tilde{X}) - \alpha = \beta(\Psi) - \alpha(\Psi) = \kappa(\Psi). \quad (21)$$

Из соотношений (20) и (21) следует, что  $\beta(X) < \beta(\Psi)$ . Теорема доказана.

### § 3. Теоремы об устойчивости безусловных дефектных базисов

1. Напомним, что базис  $\Psi = \{\psi_j\}_1^\infty$  пространства  $E$  называется безусловным, если он остается базисом  $E$  при любых перестановках его векторов.

Аналогично этому определению дефектный базис  $\Psi = \{\psi_j\}$  в пространстве  $E$  будем называть безусловным, если он остается дефектным базисом при любых перестановках его векторов.

Имеет место следующее предложение, дополняющее теоремы 2 и 3.

3°. Если выполняются условия теоремы 2 или теоремы 3 и, кроме того, дефектный базис (базис)  $\Psi$  является безусловным, то безусловным является также дефектный базис (базис)  $X$ .

Это предложение вытекает из теорем 2 и 3. В самом деле, для этого достаточно принять во внимание, что если условия теоремы 2 или 3 выполняются для безусловного дефектного базиса  $\Psi$  и последовательности  $X$ , то они будут также выполняться, если произвести в последовательностях  $\Psi$  и  $X$  одну и ту же произвольную перестановку.

В применении к симметрической нормирующей функции

$$\Phi(\xi) = \Phi_p(\xi) = (\sum_j |\xi_j|^p)^{1/p} \quad (1 < p < \infty)$$

теорема 2, замечание к ней и предложение 3° дают следующую теорему.

Теорема 4. Если дефектный базис  $\Psi = \{\psi_j\}$  в  $E$  обладает тем свойством, что из сходимости ряда  $\sum c_j \psi_j$  по норме вытекает\*)

$$\sum_j |c_j|^p < \infty \quad (1 < p < \infty), \quad (22)$$

\*) При  $p = \infty$  условие (22) понимается в следующем смысле:

$$\sup_j |c_j| < \infty.$$

Очевидно, это условие выполняется для любого нормированного дефектного базиса.

то всякая последовательность  $X = \{\chi_j\}_1^\infty$  из  $E$ , удовлетворяющая условию\*)

$$\sum_{j=1}^{\infty} |\psi_j - \chi_j|^q < \infty \quad (p^{-1} + q^{-1} = 1), \quad (23)$$

является дефектным базисом в  $E$  и

$$\kappa(X) = \kappa(\Psi).$$

Если дефектный базис  $\Psi$  безусловен, то безусловным является также дефектный базис  $X$ .

Если  $\Psi$  — базис (безусловный базис) пространства  $E$ , а последовательность  $X$  обладает тем свойством, что равенство

$$\sum_j c_j \chi_j = 0$$

невозможно при

$$0 < \sum_j |c_j|^p < \infty,$$

то  $X$  является базисом (безусловным базисом) пространства  $E$ , эквивалентным  $\Psi$ .

Эта теорема является обобщением приведенных во введении результатов М. Г. Крейна, Д. П. Мильмана и М. А. Рутмана [1] (см. также [3], стр. 628—629), Н. К. Бари [6] и М. Г. Крейна [4].

2. И. М. Гельфанд [14] показал, что в случае гильбертова пространства базис является безусловным в том и только в том случае, когда он эквивалентен ортогональному. Теорема И. М. Гельфанда [14] вместе с теоремой Н. К. Бари [6] приводят к следующему предложению:

Пусть  $\Psi = \{\psi_j\}$  — нормированный безусловный базис гильбертова пространства  $H$  и  $X = \{\chi_j\}$  — произвольная  $\omega$ -линейно независимая последовательность из  $H$ , для которой

$$\sum_j |\chi_j - \psi_j|^2 < \infty.$$

Тогда  $X$  также является безусловным базисом пространства  $H$ . Ниже приводится обобщение этого предложения для случая, когда  $E$  принимает одно из значений  $L_p, l_p$  ( $1 < p < \infty$ ).

Теорема 5. Пусть  $E_p$  ( $1 < p < \infty$ ) — одно из пространств  $L_p, l_p$  и  $\Psi = \{\psi_j\}_1^\infty$  — нормированный дефектный безусловный базис в пространстве  $E_p$ . Тогда всякая система  $X = \{\chi_j\}_1^\infty$  ( $\chi_j \in E_p$ ), удовлетворяющая условию

$$\sum_j |\psi_j - \chi_j|^s < \infty,$$

где

$$s = \begin{cases} p/(p-1) & \text{при } p > 2 \\ 2 & \text{при } p < 2, \end{cases}$$

\*) При  $q = \infty$  условие (23) понимается в следующем смысле:

$$\lim_{j \rightarrow \infty} |\psi_j - \chi_j| = 0.$$



является дефектным безусловным базисом в пространстве  $E_p$  и  $\chi(Y) = \chi(X)$ .

Если, кроме того,  $Y$  — базис пространства  $E_p$ , а последовательность  $X = \{\gamma_j\}_1^\infty$  обладает тем свойством, что равенство

$$\sum_j c_j \gamma_j = 0$$

невозможно при

$$0 < \sum_j |c_j|^r < \infty \quad (r^{-1} + s^{-1} = 1),$$

то  $X$  является безусловным базисом пространства  $E_p$ , эквивалентным базису  $Y$ .

Доказательство. Согласно условию теоремы из сходимости ряда  $\sum c_j \psi_j$  по норме вытекает его сходимость при всевозможных перестановках его членов. В силу теоремы Орлича [15] отсюда следует, что если сходится по норме ряд  $\sum c_j \psi_j$ , то

$$\sum_j |c_j|^r < \infty,$$

где  $r$  — показатель, сопряженный с  $s$ , т. е.

$$r = \begin{cases} p & \text{при } p > 2 \\ 2 & \text{при } p < 2. \end{cases}$$

Таким образом, для окончания доказательства этой теоремы достаточно применить к рассматриваемому случаю теорему 4.

Из-за недостатка места здесь не формулируются аналоги теоремы 3 при условиях теорем 4 и 5.

#### § 4. Характеристические свойства квадратично устойчивых базисов

Две последовательности  $\{\psi_j\}$  и  $\{\varphi_j\}$  векторов гильбертова пространства  $H$  называются квадратично близкими, если

$$\sum_j |\psi_j - \varphi_j|^2 < \infty.$$

Последовательность  $\{\psi_j\}$  ( $\in H$ ) будем называть  $\omega^{(2)}$ -линейно независимой, если равенство  $\sum c_j \psi_j = 0$  невозможно при

$$0 < \sum |c_j|^2 < \infty.$$

Базис  $\{\psi_j\}$  пространства  $H$  назовем квадратично устойчивым, если всякая квадратично близкая к нему  $\omega^{(2)}$ -линейно независимая последовательность является базисом  $H$ .

В этом параграфе решается задача, близкая к одному вопросу, поставленному Н. К. Бари [6]. А именно, будет установлено, что класс квадратично устойчивых базисов совпадает с классом базисов Бесселя, введенным Н. К. Бари [6].

Базис  $\{\psi_j\}$  пространства  $H$  называется базисом Бесселя, если последовательность коэффициентов в разложении любого вектора  $f = \sum c_j \psi_j$  по базису  $\{\psi_j\}$  удовлетворяет условию  $\sum |c_j|^2 < \infty$ .

Базис  $\{\psi_j\}$  пространства  $H$  тогда и только тогда является базисом

Бесселя, когда линейный оператор  $A$ , определенный на его линейной оболочке равенствами  $A\psi_j = \varphi_j$  ( $j = 1, 2, \dots$ ), где  $\{\varphi_j\}$  — какой-нибудь ортонормированный базис  $H$ , является ограниченным [6].

Теорема 6. Последовательность векторов пространства  $H$  является квадратично устойчивым базисом  $H$  в том и только в том случае, когда она является базисом Бесселя пространства  $H$ .

Доказательство. Достаточность условия теоремы следует из теоремы 4.

Перейдем к доказательству необходимости условия теоремы. Пусть  $\{\psi_j\}$  — квадратично устойчивый базис  $H$ ,  $\{\varphi_j\}$  — некоторый ортонормированный базис  $H$  и  $A$  — линейный оператор, определенный на линейной оболочке базиса  $\{\psi_j\}$  равенствами  $A\psi_j = \varphi_j$  ( $j = 1, 2, \dots$ ).

Покажем, что оператор  $A$  допускает замыкание.

Если

$$f_n = \sum_{k=1}^{r_n} c_{nk} \varphi_k \quad (n = 1, 2, \dots), \quad \lim_{n \rightarrow \infty} f_n = 0 \quad \text{и} \quad \lim_{n \rightarrow \infty} A f_n = g,$$

то

$$\lim_{n \rightarrow \infty} c_{nk} = 0 \quad (k = 1, 2, \dots) \quad \text{и} \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^{r_n} c_{nk} \psi_k = g. \quad (24)$$

Рассмотрим разложение вектора  $g$  по базису  $\{\psi_j\}$ :

$$g = \sum \beta_j \psi_j.$$

В силу соотношений (24)

$$\beta_j = \lim_{n \rightarrow \infty} c_{nj} = 0 \quad (j = 1, 2, \dots).$$

Стало быть,  $g = 0$ . Таким образом, оператор  $A$  допускает замыкание; замкнем его, не меняя обозначения.

Покажем, далее, что уравнение  $A\varphi = 0$  имеет только тривиальное решение  $\varphi = 0$ . В самом деле, пусть  $A\varphi = 0$ ; так как оператор  $A$  получен замыканием оператора, определенного на конечных линейных комбинациях векторов  $\varphi_j$  ( $j = 1, 2, \dots$ ), то существует последовательность

векторов  $\chi_n = \sum_{j=1}^{k_n} a_{nj} \varphi_j$  ( $n = 1, 2, \dots$ ) такая, что  $\lim_{n \rightarrow \infty} \chi_n = \varphi$  и  $\lim_{n \rightarrow \infty} A \chi_n = 0$ .

Следовательно,  $\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{j=1}^{k_n} a_{nj} \psi_j = 0$ , и поэтому

$$\lim_{n \rightarrow \infty} a_{nj} = 0 \quad (j = 1, 2, \dots). \quad (25)$$

Разлагая вектор  $\varphi$  по базису  $\{\varphi_j\}$

$$\varphi = \sum \gamma_j \varphi_j,$$

получим из (25)  $\gamma_j = 0$  ( $j = 1, 2, \dots$ ), т. е.  $\varphi = 0$ .

Заметим теперь, что для доказательства теоремы достаточно установить, что множество значений  $R(A)$  оператора  $A$  есть все пространство  $H$ . В самом деле, тогда в силу замкнутости оператора  $A$  обратный оператор  $A^{-1}$ , переводящий базис  $\{\psi_j\}$  в ортонормированный базис  $\{\varphi_j\}$ , ограничен, и, следовательно,  $\{\psi_j\}$  — базис Бесселя.

Допустим, что существует вектор  $\psi$ , не принадлежащий  $R(A)$ . Так как область определения оператора  $A$  плотна в  $H$ , то существует сопряженный оператор  $A^*$ , область определения которого  $D$  также плотна в  $H$ . Следовательно, существует такой вектор  $\chi \in D$ , что  $(\chi, \psi) \neq 0$ . Положим  $f = (\chi, \psi)^{-1} A^* \chi$  и рассмотрим оператор

$$B = A - (\cdot, f)\psi.$$

Оператор  $B$  является линейным замкнутым и имеет ту же область определения, что и  $A$ . Так как  $A\varphi \neq 0$  при  $\varphi \neq 0$  и  $\psi \in R(A)$ , то уравнение  $B\varphi = 0$  также имеет лишь тривиальное решение  $\varphi = 0$ .

Положим, далее,  $g_j = B\varphi_j$  ( $j = 1, 2, \dots$ ). Последовательность  $\{g_j\}$  является  $\omega^{(2)}$ -линейно независимой, так как если  $\sum c_j g_j = 0$  и  $\sum |c_j|^2 < \infty$ , то, в силу замкнутости оператора  $B$ ,

$$B(\sum c_j \varphi_j) = 0,$$

и поэтому  $c_j = 0$  ( $j = 1, 2, \dots$ ).

Из равенства

$$\psi_j - g_j = (A - B)\varphi_j = (\varphi_j, f)\psi$$

следует, что

$$\sum |\psi_j - g_j|^2 = \sum |(\varphi_j, f)|^2 |\psi|^2 = |f|^2 \sum |\varphi_j|^2.$$

Таким образом, последовательности  $\{\psi_j\}$  и  $\{g_j\}$  являются квадратично близкими.

Покажем, наконец, что в противоречие с квадратичной устойчивостью базиса  $\{\psi_j\}$  последовательность  $\{g_j\}$  не является базисом  $H$ .

В самом деле, для любого  $j$

$$\begin{aligned} (g_j, \chi) &= (A\varphi_j - (\varphi_j, f)\psi, \chi) = (\varphi_j, A^*\chi) - (\varphi_j, f)(\psi, \chi) = \\ &= (\psi, \chi)(\varphi_j, f) - (\varphi_j, f)(\psi, \chi) = 0, \end{aligned}$$

и так как  $\chi \neq 0$ , то последовательность  $\{g_j\}$  не является полной в  $H$ .

Теорема доказана.

### § 5. Характеристика допустимых возмущений для ортогональных базисов

1. Далее нам понадобится еще один класс базисов, введенный Н. К. Бари [6], — класс базисов Рисса. Базисом Рисса называется базис пространства  $H$ , эквивалентный ортонормированному базису.

В силу приведенной в § 3 теоремы И. М. Гельфанда [14] базис Рисса — это безусловный базис  $H$ , нормы элементов которого ограничены снизу и сверху положительными числами.

Дефектный базис  $\Psi = \{\psi_j\}$  пространства  $H$  будем называть дефектным базисом Рисса (Бесселя), если базис, получающийся из  $\Psi$  исключением конечного числа векторов, является базисом Рисса (Бесселя) своей линейной замкнутой оболочкой.

В этом пункте доказываем (теорема 7), что в теоремах об устойчивости дефектных базисов Рисса и Бесселя при возмущении их системами  $\{g_j\}$ , удовлетворяющими условию  $\sum |g_j|^2 < \infty$ , это условие может быть заменено следующим более слабым условием: матрица Грама  $\|(g_j, g_k)\|$  системы  $\{g_j\}$  вполне непрерывна (т. е. порождает

вполне непрерывный оператор в пространстве  $l_2$ ). В то же время доказываемая далее теорема 8 показывает, что это последнее условие уже неослабляемо (даже при значительном сужении класса возмущаемых базисов).

**Теорема 7.** Пусть  $\{g_j\}$  — последовательность векторов, матрица Грама  $\|(g_j, g_k)\|$  которой вполне непрерывна. Если  $\Psi = \{\psi_j\}$  — дефектный базис Рисса (Бесселя) в  $H$ , то система  $X = \{\chi_j\}$ , где  $\chi_j = \psi_j + g_j$  ( $j = 1, 2, \dots$ ), также является дефектным базисом Рисса (Бесселя) в  $H$ , причем

$$\kappa(X) = \kappa(\Psi). \quad (26)$$

Если же, кроме того,  $\Psi$  — базис  $H$  и система  $X$   $\omega^{(2)}$ -линейно независима, то она является базисом Рисса (Бесселя) пространства  $H$ , эквивалентным базису  $\Psi$ .

**Доказательство.** Без ограничения общности можно считать, что система  $\tilde{\Psi} = \{\psi_j\}_{\alpha+1}^{\infty}$  ( $\alpha = \alpha(\Psi)$ ) является базисом Рисса (Бесселя)  $R(\Psi)$ . Поэтому линейный оператор  $A$ , определенный на линейной оболочке системы  $\tilde{\Psi}$  равенствами  $A\psi_j = \varphi_j$  ( $j = \alpha + 1, \dots$ ), где  $\{\varphi_j\}_{\alpha+1}^{\infty}$  — какой-либо ортонормированный базис  $H$ , является ограниченным. Доопределим оператор  $A$  на всё пространство  $H$ , полагая его равным нулю на ортогональном дополнении к  $R(\Psi)$ . Введем линейный оператор  $T$ , определенный на линейной оболочке базиса  $\{\varphi_j\}$  равенствами  $T\varphi_j = g_j$  ( $j = 1, 2, \dots$ ).

Так как  $(g_j, g_k) = (T\varphi_j, T\varphi_k) = (T^*T\varphi_j, \varphi_k)$  ( $j, k = 1, 2, \dots$ ), то  $T^*T = G$ , где  $G$  — оператор, определяемый в базисе  $\{\varphi_j\}$  матрицей  $\|(g_j, g_k)\|$ . Из полной непрерывности оператора  $G$  следует, что оператор  $T$  также вполне непрерывен. Следовательно,  $I + TA$  есть  $\Phi_+$ -оператор и  $\kappa(I + TA) = 0$ . Так как при  $j \geq \alpha + 1$

$$\chi_j = \psi_j + g_j = \psi_j + T\varphi_j = \psi_j + TA\psi_j = (I + TA)\psi_j,$$

то из теоремы 1 следует, что система  $\tilde{X} = \{\chi_j\}_{\alpha+1}^{\infty}$  является дефектным базисом в  $H$  и

$$\kappa(\tilde{X}) = \kappa(\tilde{\Psi}). \quad (27)$$

В силу леммы 2

$$\kappa(\Psi) = \kappa(\tilde{\Psi}) - \alpha. \quad (28)$$

Согласно той же лемме  $X$  является дефектным базисом в  $H$  и

$$\kappa(X) = \kappa(\tilde{X}) - \alpha. \quad (29)$$

Из равенств (27), (28) и (29) следует (26).

Обозначим сужение оператора  $I + TA$  на подпространство  $R(\Psi)$  через  $B$ . Если  $\alpha_0 = \alpha(B)$ , то без ограничения общности можно считать, что подпространство  $R'$ , натянутое на систему  $\Psi' = \{\psi_j\}_{\alpha_0+1}^{\infty}$ , пересекается с  $L(B)$  только в нуле (см. доказательство леммы 3). Следовательно, оператор  $B$  изоморфно отображает  $R'$  на линейную замкнутую оболочку системы  $X' = \{\chi_j\}_{\alpha_0+1}^{\infty}$ . Так как  $B\psi_j = \chi_j$  ( $j = \alpha_0 + 1, \dots$ ), то система  $X'$  вместе с  $\Psi'$  является базисом

Рисса (Бесселя) своей линейной замкнутой оболочкой. Следовательно,  $X$  есть дефектный базис Рисса (Бесселя).

Первая часть теоремы доказана. Перейдем к доказательству ее второй части.

Если  $\Psi$  — базис  $H$ , то  $\alpha(\Psi) = 0$  и  $R(\Psi) = H$ . Если, кроме того, система  $X$   $\omega^{(2)}$ -линейно независима, то  $\alpha(I + TA) = 0$ . В самом деле, пусть  $(I + TA)f = 0$  и  $f = \sum c_j \phi_j$  — разложение вектора  $f$  по базису  $\{\phi_j\}$ ; тогда  $\sum c_j \phi_j = 0$ , а так как  $\sum |c_j|^2 < \infty$ , то  $c_j = 0$  ( $j = 1, 2, \dots$ ). Таким образом,  $\alpha(I + TA) = \alpha_0 = 0$ .

Из полной непрерывности оператора  $TA$  и из равенства  $\alpha(I + TA) = 0$  следует, что оператор  $I + TA$  изоморфно отображает  $H$  на  $H$ . Так как  $(I + TA)\phi_j = \chi_j$  ( $j = 1, 2, \dots$ ), то в рассматриваемом случае  $X$  есть базис  $H$ , эквивалентный базису  $\Psi$ .

Теорема доказана.

Последняя теорема допускает обращение. Более того, имеет место следующая

**Теорема 8.** Пусть последовательность векторов  $\{g_j\}$  обладает следующим свойством: для любого ортонормированного базиса  $\{\varphi_j\}$  пространства  $H$  и произвольного положительного числа  $a$  система  $\{a\varphi_j + g_j\}$  является дефектным базисом Рисса в  $H$ . Тогда матрица Грама  $\Gamma = \|\langle g_j, g_k \rangle\|$  последовательности  $\{g_j\}$  вполне непрерывна.

**Доказательство.** Пусть  $\{\phi_j\}$  — некоторый ортонормированный базис  $H$  и  $T$  — линейный оператор, определенный на линейной оболочке этого базиса равенствами  $T\phi_j = g_j$  ( $j = 1, 2, \dots$ ). Если  $U$  — произвольный унитарный оператор и  $a$  — любое положительное число, то согласно условию теоремы последовательность  $X = \{\chi_j\}_1^\infty$ , где  $\chi_j = (aU + T)\phi_j$ , является дефектным базисом Рисса в  $H$ . Без ограничения общности можно считать, что система  $\{\chi_j\}_1^\infty$  ( $\alpha = \alpha(X)$ ) является базисом Рисса в  $R(X)$ . Следовательно, оператор  $aU + T$  изоморфно отображает линейную замкнутую оболочку системы  $\{\phi_j\}_1^\infty$  на  $R(X)$ . Отсюда, в частности, вытекает ограниченность оператора  $T$ . Кроме того, отсюда следует, что оператор  $aU + T$  является  $\Phi_+$ -оператором.

Покажем теперь, что оператор  $T$  вполне непрерывен. Допустим обратное. Тогда не является вполне непрерывным и положительный оператор  $A = (T^*T)^{1/2}$ . Пусть  $E_\lambda$  — спектральная функция оператора  $A$ . Так как оператор  $A$  не является вполне непрерывным, то существует такое число  $b > 0$ , что для любого интервала  $(\gamma, \beta)$ , содержащего  $b$ , проектор  $E_\beta - E_\gamma$  бесконечномерен.

Следовательно, можно выбрать такую ортонормированную систему  $\{f_j\}$ , что

$$|Af_j - bf_j| < j^{-1} \quad (j = 1, 2, \dots); \quad (30)$$

при этом без ограничения общности можно считать, что линейные замкнутые оболочки систем  $\{Af_j\}$  и  $\{Tf_j\}$  имеют бесконечные дефекты в  $H$ . Так как  $|Af_j| = |Tf_j|$  для любого  $f \in H$ , то существует унитарный оператор  $U_0$  такой, что  $U_0 Af_j = Tf_j$  ( $j = 1, 2, \dots$ ). Из (30) следует

$$|Tf_j - bU_0 f_j| < j^{-1} \quad (j = 1, 2, \dots). \quad (31)$$

Обозначим через  $L$  линейную замкнутую оболочку системы  $\{f_j\}$ . В силу (31)

$$\sum_j |Tf_j - bU_0 f_j|^2 < \infty,$$

и поэтому сужение оператора  $T - bU_0$  на подпространство  $L$  является вполне непрерывным. Последнее невозможно, так как  $T - bU_0 = b(-U_0) + T$  есть  $\Phi_+$ -оператор и подпространство  $L$  бесконечномерно (см., например, [16], теорема 4.1).

Таким образом, оператор  $T$  вполне непрерывен. Если  $G$  — оператор, определяемый матрицей  $\Gamma$  в базисе  $\{\phi_j\}$ , то  $G = T^*T$ . Стало быть, оператор  $G$ , а значит, и матрица  $\Gamma$  вполне непрерывны.

Теорема доказана.

Поступило  
16.I 1962 г.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. М. Г. Крейн, Д. П. Мильман и М. А. Рутман, Зап. Харьк. матем. об-ва, сер. 4, 16, 106 (1940).
2. Н. К. Барн, Матем. сб., 14 (56), 1-2, 51 (1944).
3. М. Г. Крейн и Л. А. Люстерник, Математика в СССР за 30 лет, 608 (1948).
4. М. Г. Крейн, Усп. матем. наук, 12, вып. 3, 333 (1957).
5. И. Ц. Гохберг и М. Г. Крейн, Усп. матем. наук, 12, вып. 2, 43 (1957).
6. Н. К. Барн, Уч. зап. МГУ, сер. матем., 4, вып. 148, 69 (1951).
7. А. Г. Курош, Курс высшей алгебры, М., Гостехиздат, 1955.
8. И. Ц. Гохберг, Матем. сб., 33(75), 1, 193 (1953).
9. J. von Neumann, Изв. ин-та матем. и мех. при Томском ун-те, 1, 286 (1937).
10. R. Schatten, A theory of cross-spaces, Princeton, 1950.
11. R. Schatten, Norm ideals of completely continuous operators, Berlin — Göttingen — Heidelberg, 1960.
12. И. Ц. Гохберг и М. Г. Крейн, ДАН, 137, № 5, 1034 (1961).
13. С. Банах, Курс функционального анализа. Київ, 1948.
14. И. М. Гельфанд, Уч. зап. МГУ, сер. матем., 4, вып. 148, 224 (1951).
15. W. Orlicz, Studia Math., 4, 41 (1933).
16. И. Ц. Гохберг, А. С. Маркус, И. А. Фельдман, Изв. Молд. фил. АН СССР, № 10 (76), 51 (1960).

И. Ц. ГОХБЕРГ шн А. С. МАРКУС

#### ДЕСПРЕ СТАБИЛИТАТЯ БАЗЕЛОР ЫН СПАЦИИЛЕ БАНАХ ШИ ХИЛБЕРТ

#### Резумат

Ын артикол се женерализизэ унеле резултате але луй М. Г. Крейн, Д. П. Милман шн М. А. Рутман [1] шн Н. К. Барн [2] деспре стабилитатя базелор. Ачесте женерализэрь концин ын сине ын примул рынд ынлокуиря базелор прин базе ку дефект (дефиницие в. § 1) шн апой студия унор ной кондиций де вечинэте пентру доуэ консекутивитэць де векторь, каре гарантыээ стабилитатя базелор ку дефект. Унеле дин резултате примите сынт ной кяр шн пентру базеле симпле.

А. И. КАСИЯН

## К ТЕОРИИ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ ИОННЫХ КРИСТАЛЛОВ

Традиционные методы вычисления электропроводности металлов и полупроводников, использующие кинетические уравнения типа уравнения Больцмана, существенно опираются на представление о длине свободного пробега носителей тока и функции распределения скоростей [1, 2]. Однако этими понятиями можно воспользоваться лишь в том случае, если выполняется условие

$$(\hbar/\tau) \ll kT, \quad (1)$$

где  $\tau$  — время свободного пробега носителя тока.

Часто это неравенство не выполняется, и тогда необходимо с самого начала исходить из выражений, не связанных с ограничением (1). В случае слабой связи такой расчет электропроводности в модели Фрелиха был выполнен в работах [3, 4] с помощью метода матрицы плотности. В случае же адиабатической связи аналогичная задача, насколько нам известно, не рассматривалась. Недавно С. В. Тябликовым [5] был развит метод квантовых функций Грина для исследования взаимодействия электронов и фононов в адиабатическом приближении. Представляется интересным в этом же приближении исследовать вопрос о вычислении электропроводности.

## 1. Постановка задачи

Будем исходить из выражения, связывающего тензор электропроводности  $\sigma_{\alpha\beta}(\Omega)$  с корреляционной функцией токов [6, 7]:

$$\text{Re} \sigma_{\alpha\beta}(\Omega) = \frac{1}{2\Omega} \left( e^{\frac{\Omega}{\theta}} - 1 \right) \int_{-\infty}^{\infty} \langle j_{\alpha}(0) j_{\beta}(t) \rangle e^{i\Omega t} dt, \quad (1.1)$$

где  $\theta \equiv kT$  ( $T$  — температура);  $\Omega$  — частота внешнего электрического поля;  $j_{\alpha}(t)$  — компонента оператора плотности тока в гайзенберговском представлении ( $\hbar = 1$ ):

$$j_{\alpha}(t) \equiv e^{iHt} j_{\alpha}(0) e^{-iHt}. \quad (1.2)$$

Здесь и в дальнейшем символ  $\langle \dots \rangle$  означает усреднение по каноническому ансамблю Гиббса с полным гамильтонианом системы  $H$ .

Формула (1.1) справедлива в линейном по внешнему полю приближении для тока и имеет место при любых значениях константы связи электронно-фононного взаимодействия.

Для дальнейшего представляется удобным придать формуле (1.1) несколько иной вид. С этой целью воспользуемся спектральными представлениями для двухвременных функций Грина [7, 8] и запишем токовую корреляционную функцию в виде:

$$\langle j_{\alpha}(t') j_{\beta}(t) \rangle = i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{G(\omega + i\delta) - G(\omega - i\delta)}{e^{\omega/\theta} - \eta} e^{-i\omega(t-t')} d\omega, \quad (1.3)$$

$$G(E) \equiv \langle\langle j_{\beta} | j_{\alpha} \rangle\rangle, \quad (1.4)$$

где  $\langle\langle j_{\beta} | j_{\alpha} \rangle\rangle$  — фурье-образ запаздывающей (при  $\text{Im} E > 0$ ) или опережающей (при  $\text{Im} E < 0$ ) токовой функции Грина в комплексной плоскости  $E$ , т. е.

$$\langle\langle j_{\beta} | j_{\alpha} \rangle\rangle = \frac{1}{2\pi} \int \langle\langle j_{\beta}(t); j_{\alpha}(0) \rangle\rangle e^{iEt} dt, \quad (1.5)$$

где по определению

$$\langle\langle j_{\beta}(t); j_{\alpha}(t') \rangle\rangle^r = \frac{1}{i} \theta(t-t') \langle [j_{\beta}(t), j_{\alpha}(t')]_{\eta} \rangle, \quad (1.6)$$

$$\langle\langle j_{\beta}(t); j_{\alpha}(t') \rangle\rangle^a = -\frac{1}{i} \theta(t'-t) \langle [j_{\beta}(t), j_{\alpha}(t')]_{\eta} \rangle, \quad (1.7)$$

$$[A, B]_{\eta} \equiv AB - \eta BA; \quad \eta = \pm 1; \quad \theta(\tau) = \begin{cases} 1, & \tau > 0 \\ 0, & \tau < 0. \end{cases}$$

Как известно, функция  $G(E)$  образует единую аналитическую функцию, ввиду чего в (1.5) индексы  $r$  и  $a$  не указаны.

Подстановка (1.3) в (1.1) приводит после интегрирования по  $t$  и  $\omega$  к следующему выражению для вещественной части тензора электропроводности  $\sigma_{\alpha\beta}(\Omega)$  (для сокращения записи символ  $\text{Re}$  в дальнейшем опускается):

$$\sigma_{\alpha\beta}(\Omega) = i\pi \frac{\Omega}{e^{\frac{\Omega}{\theta}} - 1} \frac{G(\Omega + i\delta) - G(\Omega - i\delta)}{e^{\Omega/\theta} - \eta}. \quad (1.8)$$

Знак  $\eta$  выбирается из соображений удобства. Так как наша цель состоит главным образом в вычислении статической проводимости, удобно положить  $\eta = -1$ . Такой выбор знака позволяет непосредственно перейти в формуле (1.8) к пределу  $\Omega = 0$ . В противном случае  $\sigma_{\alpha\beta}(0)$  выразилось бы через разность производных от функций Грина (или массового оператора) по  $\Omega$  в точке  $\Omega = 0$  [9]. Тогда (1.8) переписывается в виде:

$$\sigma_{\alpha\beta}(\Omega) = \frac{i\pi}{\Omega} \frac{th \frac{\Omega}{2\theta}}{2\theta} \{ G(\Omega + i\delta) - G(\Omega - i\delta) \}. \quad (1.9)$$

Используя эрмитовость оператора плотности тока, нетрудно показать:

$$\langle\langle j_\beta | j_\alpha \rangle\rangle = \langle\langle j_\alpha | j_\beta \rangle\rangle, \quad (1.10)$$

свойство, которое сразу доказывает принцип симметрии кинетических коэффициентов Онзагера:

$$\sigma_{\alpha\beta}(\Omega) = \sigma_{\beta\alpha}(\Omega). \quad (1.11)$$

По определению правая часть в (1.9) должна быть вещественной величиной. Это означает, что фигурная скобка в этом выражении должна быть чисто мнимой, т. е.

$$\operatorname{Re} \langle\langle j_\beta | j_\alpha \rangle\rangle_{\Omega + i\delta} = \operatorname{Re} \langle\langle j_\beta | j_\alpha \rangle\rangle_{\Omega - i\delta}. \quad (1.12)$$

Кроме того, имеем соотношение

$$\langle\langle A | B \rangle\rangle_E = \eta \langle\langle B | A \rangle\rangle_{-E}, \quad (1.13)$$

справедливое для любых двух операторов  $A$  и  $B$  (где  $E$  — комплексная величина).

Из (1.10), (1.12) и (1.13) следует, что при  $\Omega = 0$ .

$$\operatorname{Re} \langle\langle j_\alpha | j_\beta \rangle\rangle_{i\delta} = \operatorname{Re} \langle\langle j_\alpha | j_\beta \rangle\rangle_{-i\delta} = 0. \quad (1.14)$$

Напишем уравнение движения для функции Грина (1.5)

$$E \langle\langle j_\alpha | j_\beta \rangle\rangle = \frac{1}{2\pi} \langle [j_\alpha, j_\beta]_+ \rangle + \langle\langle i \frac{dj_\alpha}{dt} | j_\beta \rangle\rangle \quad (1.15)$$

и определим массовый оператор формально соотношением [9, 10]:

$$\langle\langle i \frac{dj_\alpha}{dt} | j_\beta \rangle\rangle = M_{\alpha\beta}(E) \langle\langle j_\alpha | j_\beta \rangle\rangle, \quad (1.16)$$

т. е. так, чтобы функция Грина имела вид:

$$\langle\langle j_\alpha | j_\beta \rangle\rangle = \frac{1}{2\pi} \frac{\langle [j_\alpha, j_\beta]_+ \rangle}{E - M_{\alpha\beta}(E)} \quad (1.17)$$

В дальнейшем  $M_{\alpha\beta}(E)$  вычислим по теории возмущений.

Отметим следующие свойства симметрии массового оператора  $M_{\alpha\beta}(E)$ :

$$M_{\alpha\beta}(E) = M_{\beta\alpha}(E), \quad (1.18)$$

$$\operatorname{Re} M_{\alpha\beta}(\Omega + i\delta) = \operatorname{Re} M_{\alpha\beta}(\Omega - i\delta), \quad (1.19)$$

$$M_{\alpha\beta}(E) = -M_{\beta\alpha}(-E), \quad (1.20)$$

вытекающие непосредственно из соотношений (1.10), (1.13) и определения (1.16).

Подстановка (1.17) в (1.9) дает:

$$\sigma_{\alpha\beta}(\Omega) = \frac{1}{\Omega} \operatorname{th} \frac{\Omega}{20} \frac{\gamma_{\alpha\beta}(\Omega)}{[\Omega - M_{\alpha\beta}(\Omega)]^2 + [\gamma_{\alpha\beta}(\Omega)]^2} \langle [j_\alpha, j_\beta]_+ \rangle, \quad (1.21)$$

где  $M_{\alpha\beta}(\Omega)$  и  $\gamma_{\alpha\beta}(\Omega)$  — вещественные функции [9]:

$$\lim_{\delta \rightarrow 0^+} M_{\alpha\beta}(\Omega \pm i\delta) = M_{\alpha\beta}(\Omega) \mp i\gamma_{\alpha\beta}(\Omega). \quad (1.22)$$

При  $\Omega = 0$  в силу свойств (1.18) — (1.20)  $M_{\alpha\beta}(0) = 0$ , в результате чего будем иметь

$$\sigma_{\alpha\beta}(0) = \frac{1}{20} \frac{\langle [j_\alpha, j_\beta]_+ \rangle}{\gamma_{\alpha\beta}(0)}; \quad \gamma_{\alpha\beta}(0) = i M_{\alpha\beta}(i\delta). \quad (1.23)$$

Задача сводится, таким образом, к нахождению массового оператора  $M_{\alpha\beta}(E)$ .

## 2. Гамильтониан системы

Рассмотрим систему, состоящую из  $N$  электронов, взаимодействующих с оптическими фононами в ионных кристаллах, пренебрегая при этом прямым взаимодействием между электронами.

Следуя работе [5], представим гамильтониан системы в виде:

$$H = \sum_{k\sigma} T_k a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} + \varepsilon \sum_q A_q (\rho_q b_q + b_{-q}^+ \rho_{-q}^+) + \varepsilon^2 \sum_q \omega_q b_q^+ b_q, \quad (2.1)$$

где

$$\rho_q = \sum_{k\sigma} a_{k\sigma}^+ a_{k-q,\sigma}; \quad A_q = \frac{1}{q} \sqrt{4\pi\gamma e^2 \omega_q / V}; \quad \gamma = \frac{1}{n^2} - \frac{1}{\varepsilon_1}. \quad (2.2)$$

Здесь  $a_{k\sigma}$  и  $b_q$  — операторы Ферми и Бозе соответственно:  $k, q$  — волновые векторы;  $\sigma$  — спиновая переменная;  $T_k$  и  $\omega_q$  — собственные энергии свободных электронов и фононов;  $\varepsilon_1$  — диэлектрическая постоянная;  $n$  — показатель преломления;  $\varepsilon$  — формальный малый параметр ( $\varepsilon \ll 1$ ).

Произведем теперь в (2.1) канонические преобразования операторов  $a_{k\sigma}$  и  $b_q$

$$a_{k\sigma} = \sum_\nu u_{\nu k} \alpha_{\nu\sigma}, \quad (2.3)$$

$$b_q = \frac{1}{\varepsilon} c_q + \beta_q; \quad \langle \beta_q \rangle = 0, \quad (2.4)$$

где  $\alpha_{\nu\sigma}$  и  $\beta_q$  — новые ферми- и бозе-операторы;  $c_q$  —  $c$ -числа, определяемые из уравнения

$$\langle i \frac{db_q}{dt} \rangle = \varepsilon A_q \langle \rho_{-q} \rangle + \varepsilon^2 \omega_q \langle b_q \rangle = 0, \quad (2.5)$$

на основании которого имеем:

$$c_q = - \frac{A_q \langle \rho_{-q} \rangle}{\omega_q}; \quad c_q = c_{-q}^*. \quad (2.6)$$

Величины  $u_{\nu k}$  образуют полную систему функций волнового уравнения:

$$T_k u_{\nu k} + 2 \sum_q A_q c_q u_{\nu, k-q} = E_\nu u_{\nu k}. \quad (2.7)$$

Они удовлетворяют соотношениям ортонормировки:

$$\sum_k u_{\nu k}^* u_{\mu k} = \delta_{\nu\mu}; \quad \sum_{\nu} u_{\nu k}^* u_{\nu k'} = \delta_{kk'}. \quad (2.8)$$

Гамильтониан  $H$  приобретает тогда вид:

$$H = E_0 + H_0 + \varepsilon H_1 + \varepsilon^2 H_2, \quad (2.9)$$

где

$$E_0 = \sum_q \omega_q |c_q|^2, \quad (2.10)$$

$$H_0 = \sum_{\nu\sigma} E_{\nu} \alpha_{\nu\sigma}^+ \alpha_{\nu\sigma}, \quad (2.11)$$

$$H_1 = \sum_{\nu\mu\sigma q} V_{q\nu\mu} \alpha_{\nu\sigma}^+ \alpha_{\mu\sigma} (\beta_q + \beta_{-q}^+) + \sum_q \omega_q c_q^* (\beta_q + \beta_{-q}^+), \quad (2.12)$$

$$H_2 = \sum_q \omega_q \beta_q^+ \beta_q, \quad (2.13)$$

$$V_{q\nu\mu} = A_q \sum_k u_{\nu k}^* u_{\mu, k-q}. \quad (2.14)$$

Величины  $E_{\nu}$ , являющиеся собственными значениями волнового уравнения (2.7), очевидно, играют роль собственных энергий новых фермиевских возбуждений в системе.

В новых амплитудах  $\alpha_{\nu\sigma}$  оператор плотности тока имеет вид:

$$j_{\alpha} = \sum_{\nu\mu\sigma} f_{\nu\mu}^{\alpha} \alpha_{\nu\sigma}^+ \alpha_{\mu\sigma}, \quad (2.15)$$

$$f_{\nu\mu}^{\alpha} = -e \sum_k \frac{\partial T_k}{\partial k_{\alpha}} u_{\nu k}^* u_{\mu k}. \quad (2.16)$$

### 3. Вычисление массового оператора

Вернемся теперь к рассмотрению функций Грина, входящих в определение массового оператора (1.16). Выпишем с этой целью уравнение движения:

$$E \ll i \frac{dj_{\alpha}}{dt} | j_{\beta} \gg = \frac{1}{2\pi} \langle [i \frac{dj_{\alpha}}{dt}, j_{\beta}]_+ \rangle - \ll i \frac{dj_{\alpha}}{dt} | i \frac{dj_{\beta}}{dt} \gg. \quad (3.1)$$

Нетрудно показать, что первый член в правой части (3.1) тождественно равен нулю. Действительно, из (1.10), (1.13) и (1.15) вытекают следующие свойства функции  $\ll i \frac{dj_{\alpha}}{dt} | j_{\beta} \gg$ :

$$\ll i \frac{dj_{\alpha}}{dt} | j_{\beta} \gg = \ll i \frac{dj_{\beta}}{dt} | j_{\alpha} \gg, \quad (3.2)$$

$$\ll i \frac{dj_{\alpha}}{dt} | j_{\beta} \gg_E = \ll i \frac{dj_{\beta}}{dt} | j_{\alpha} \gg_{-E}. \quad (3.3)$$

С другой стороны, аналогично (1.10) можно доказать, что

$$\ll i \frac{dj_{\alpha}}{dt} | i \frac{dj_{\beta}}{dt} \gg = \ll i \frac{dj_{\beta}}{dt} | i \frac{dj_{\alpha}}{dt} \gg. \quad (3.4)$$

Из (3.1), (3.2) и (3.4) следует, что

$$\langle [i \frac{dj_{\alpha}}{dt}, j_{\beta}]_+ \rangle = - \langle [i \frac{dj_{\beta}}{dt}, j_{\alpha}]_+ \rangle \equiv 0. \quad (3.5)$$

Подставляя (1.15) и (3.1) в (1.16), мы получаем для массового оператора выражение:

$$M_{\alpha\beta}(E) = - \frac{\ll i \frac{dj_{\alpha}}{dt} | i \frac{dj_{\beta}}{dt} \gg}{\frac{1}{2\pi} \langle [j_{\alpha}, j_{\beta}]_+ \rangle + \ll i \frac{dj_{\alpha}}{dt} | j_{\beta} \gg}. \quad (3.6)$$

В случае изотропной среды, который мы и рассматриваем, можем сразу положить

$$\sigma_{\alpha\beta}(0) = \sigma \delta_{\alpha\beta}, \quad (3.7)$$

так что вычислению подлежит  $M_{\alpha\alpha}(E)$ .

Имея в виду написать цепочку уравнений для функций Грина, входящих в (3.6), приведем уравнения движения для операторов  $\alpha_{\nu\sigma}$ ,  $\beta_q$  и  $j_{\alpha}$ :

$$i \frac{d\alpha_{\nu\sigma}}{dt} = E_{\nu} \alpha_{\nu\sigma} + \varepsilon \sum_{\mu q} V_{q\nu\mu} \alpha_{\mu\sigma} (\beta_q + \beta_{-q}^+), \quad (3.8)$$

$$i \frac{d\beta_q}{dt} = \varepsilon^2 \omega_q \beta_q + \varepsilon \sum_{\nu\mu\sigma} V_{-q,\nu\mu} \alpha_{\nu\sigma}^+ \alpha_{\mu\sigma} + \varepsilon \omega_q c_q. \quad (3.9)$$

Уравнения движения для  $\alpha_{\nu\sigma}^+$  и  $\beta_q^+$  получатся соответственно из (3.8) и (3.9) операцией эрмитового сопряжения; при этом можно учесть, что  $V_{q\nu\mu}^* = V_{-q,\mu\nu}$ . Для оператора плотности тока  $j_{\alpha}$  имеем:

$$\frac{dj_{\alpha}}{dt} = \sum_{\nu\mu\sigma} T_{\nu\mu}^{\alpha} \alpha_{\nu\sigma}^+ \alpha_{\mu\sigma} + \varepsilon \sum_{\nu\mu\sigma q} U_{q\nu\mu}^{\alpha} \alpha_{\nu\sigma}^+ \alpha_{\mu\sigma} (\beta_q + \beta_{-q}^+), \quad (3.10)$$

где введены обозначения:

$$T_{\nu\mu}^{\alpha} = -e \sum_k \frac{\partial T_k}{\partial k_{\alpha}} u_{\nu k}^* u_{\mu k} (E_{\mu} - E_{\nu}), \quad (3.11)$$

$$U_{q\nu\mu}^{\alpha} = -e A_q \sum_k \frac{\partial}{\partial k_{\alpha}} (T_k - T_{k-q}) u_{\nu k}^* u_{\mu, k-q}. \quad (3.12)$$

Уравнение (3.10) позволяет представить числитель массового оператора (3.6) в виде:

$$\begin{aligned} \ll i \frac{dj_{\alpha}}{dt} | i \frac{dj_{\alpha}}{dt} \gg &= \sum_{\nu\mu\sigma} \sum_{\nu'\mu'\sigma'} T_{\nu\mu}^{\alpha} T_{\nu'\mu'}^{\alpha} \ll \alpha_{\nu\sigma}^+ \alpha_{\mu\sigma} | \alpha_{\nu'\sigma'}^+ \alpha_{\mu'\sigma'} \gg + \\ &+ \varepsilon \sum_{\nu\mu\sigma q} \sum_{\nu'\mu'\sigma'} U_{q\nu\mu}^{\alpha} T_{\nu'\mu'}^{\alpha} \ll (\beta_q + \beta_{-q}^+) \alpha_{\nu\sigma}^+ \alpha_{\mu\sigma} | \alpha_{\nu'\sigma'}^+ \alpha_{\mu'\sigma'} \gg + \\ &+ \varepsilon \sum_{\nu\mu\sigma q'} \sum_{\nu'\mu'\sigma'} T_{\nu\mu}^{\alpha} U_{q'\nu'\mu'}^{\alpha} \ll \alpha_{\nu\sigma}^+ \alpha_{\mu\sigma} | \alpha_{\nu'\sigma'}^+ \alpha_{\mu'\sigma'} (\beta_{q'} + \beta_{-q'}^+) \gg + \\ &+ \varepsilon^2 \sum_{\nu\mu\sigma q} \sum_{\nu'\mu'\sigma'q'} U_{q\nu\mu}^{\alpha} U_{q'\nu'\mu'}^{\alpha} \ll (\beta_q + \beta_{-q}^+) \alpha_{\nu\sigma}^+ \alpha_{\mu\sigma} | \alpha_{\nu'\sigma'}^+ \alpha_{\mu'\sigma'} (\beta_{q'} + \beta_{-q'}^+) \gg. \end{aligned} \quad (3.13)$$

С помощью соотношений (3.8) и (3.9) можно установить уравнения движения для интересующих нас функций Грина, входящих в правую часть равенства (3.13). Уравнения для этих функций имеют вид:

$$(E + E_\nu - E_\mu) \ll \alpha_{\nu\sigma}^+ \alpha_{\mu\sigma} | \alpha_{\nu'\sigma'}^+ \alpha_{\mu'\sigma'} \gg = \frac{1}{2\pi} \langle [\alpha_{\nu\sigma}^+ \alpha_{\mu\sigma}, \alpha_{\nu'\sigma'}^+ \alpha_{\mu'\sigma'}]_+ \rangle - \varepsilon \sum_{\mu''q} V_{q\mu''\nu} \ll (\beta_q + \beta_{-q}^+) \alpha_{\mu''\sigma}^+ \alpha_{\mu\sigma} | \alpha_{\nu'\sigma'}^+ \alpha_{\mu'\sigma'} \gg + \varepsilon \sum_{\mu''q} V_{q\mu\mu''} \ll (\beta_q + \beta_{-q}^+) \alpha_{\nu\sigma}^+ \alpha_{\mu''\sigma} | \alpha_{\nu'\sigma'}^+ \alpha_{\mu'\sigma'} \gg, \quad (3.14)$$

$$(E - E_{\nu'} + E_{\mu'}) \ll (\beta_q + \beta_{-q}^+) \alpha_{\nu\sigma}^+ \alpha_{\eta\sigma} | \alpha_{\nu'\sigma'}^+ \alpha_{\mu'\sigma'} \gg = \frac{1}{2\pi} \langle [(\beta_q + \beta_{-q}^+) \alpha_{\nu\sigma}^+ \alpha_{\eta\sigma}, \alpha_{\nu'\sigma'}^+ \alpha_{\mu'\sigma'}]_+ \rangle + \varepsilon \sum_{\nu''q'} V_{q'\nu''\nu} \ll (\beta_q + \beta_{-q}^+) \alpha_{\nu\sigma}^+ \alpha_{\eta\sigma} | (\beta_{q'} + \beta_{-q'}^+) \alpha_{\nu''\sigma'}^+ \alpha_{\mu'\sigma'} \gg - \varepsilon \sum_{\nu''q'} V_{q'\mu'\nu''} \ll (\beta_q + \beta_{-q}^+) \alpha_{\nu\sigma}^+ \alpha_{\mu\sigma} | (\beta_{q'} + \beta_{-q'}^+) \alpha_{\nu''\sigma'}^+ \alpha_{\nu'\sigma'} \gg. \quad (3.15)$$

При получении уравнения (3.15) использовалось тождество:

$$i \frac{d}{dt} \ll A(t); B(t') \gg = -i \frac{d}{dt'} \ll A(t); B(t') \gg.$$

Равенство

$$\ll \alpha_{\nu}^+ \alpha_{\mu} | \alpha_{\nu'}^+ \alpha_{\mu'} (\beta_{q'} + \beta_{-q'}^+) \gg_E = - \ll (\beta_{q'} + \beta_{-q'}^+) \alpha_{\nu'}^+ \alpha_{\mu'} | \alpha_{\nu}^+ \alpha_{\mu} \gg_{-E},$$

вытекающее из свойства симметрии (1.13), снимает необходимость написания уравнения движения для функции

$$\ll \alpha_{\nu\sigma}^+ \alpha_{\mu\sigma} | \alpha_{\nu'\sigma'}^+ \alpha_{\mu'\sigma'} (\beta_{q'} + \beta_{-q'}^+) \gg.$$

Соотношения (3.14) и (3.15) позволяют представить правую часть в (3.13) через одну лишь функцию

$$\ll (\beta_q + \beta_{-q}^+) \alpha_{\nu\sigma}^+ \alpha_{\mu\sigma} | (\beta_{q'} + \beta_{-q'}^+) \alpha_{\nu'\sigma'}^+ \alpha_{\mu'\sigma'} \gg.$$

После несложных преобразований получаем:

$$\ll i \frac{dJ_\alpha}{dt} | i \frac{dJ_\beta}{dt'} \gg = \frac{1}{2\pi} \sum_{\nu\mu\sigma} \sum_{\nu'\mu'\sigma'} T_{\nu\mu}^\alpha T_{\nu'\mu'}^\alpha \frac{\langle [\alpha_{\nu\sigma}^+ \alpha_{\mu\sigma}, \alpha_{\nu'\sigma'}^+ \alpha_{\mu'\sigma'}]_+ \rangle}{E + E_\nu - E_\mu} + \frac{\varepsilon}{2\pi} \sum_{\nu\mu\sigma q} \sum_{\nu'\mu'\sigma'} \left\{ \sum_x \left( \frac{T_{\nu x}^\alpha V_{q x \mu}}{E + E_\nu - E_x} - \frac{V_{q \nu x} T_{x \mu}^\alpha}{E + E_x - E_\mu} \right) \frac{T_{\nu'\mu'}^\alpha}{E - E_{\nu'} + E_{\mu'}} + \frac{U_{q\nu\mu}^\alpha T_{\nu'\mu'}^\alpha}{E - E_{\nu'} + E_{\mu'}} + \frac{T_{\nu\mu}^\alpha U_{q'\nu'\mu'}^\alpha}{E + E_{\nu'} - E_{\mu'}} \right\} \ll (\beta_q + \beta_{-q}^+) [\alpha_{\nu\sigma}^+ \alpha_{\mu\sigma}, \alpha_{\nu'\sigma'}^+ \alpha_{\mu'\sigma'}]_+ \gg +$$

$$+ \varepsilon^2 \sum_{\nu\mu\sigma q} \sum_{\nu'\mu'\sigma' q'} \left\{ \sum_x \left( \frac{T_{\nu x}^\alpha V_{q x \mu}}{E + E_\nu - E_x} - \frac{V_{q \nu x} T_{x \mu}^\alpha}{E + E_x - E_\mu} \right) \left( \frac{V_{q'\nu'\eta} T_{\eta\mu'}^\alpha}{E - E_{\eta'} + E_{\mu'}} - \frac{T_{\nu'\eta}^\alpha V_{q'\eta\mu'}}{E - E_{\nu'} + E_{\eta'}} \right) + U_{q'\mu}^\alpha \sum_x \left( \frac{V_{q'\nu'x} T_{x\mu'}^\alpha}{E - E_x + E_{\mu'}} - \frac{T_{\nu'x}^\alpha V_{q'x\mu'}}{E - E_{\nu'} + E_x} \right) + \sum_x \left( \frac{T_{\nu x}^\alpha V_{q x \mu}}{E + E_\nu - E_x} - \frac{V_{q \nu x} T_{x \mu}^\alpha}{E + E_x - E_\mu} \right) U_{q'\nu'\mu'}^\alpha + U_{q'\mu}^\alpha U_{q'\nu'\mu'}^\alpha \right\} \ll (\beta_q + \beta_{-q}^+) \alpha_{\nu\sigma}^+ \alpha_{\mu\sigma} | \alpha_{\nu'\sigma'}^+ \alpha_{\mu'\sigma'} (\beta_{q'} + \beta_{-q'}^+) \gg. \quad (3.16)$$

Свойство (3.3) для функции Грина (3.16) можно непосредственно проверить, если заметить, что имеет место тождество

$$\sum_{\nu\mu\sigma} \sum_{\nu'\mu'\sigma'} A_{\nu\mu} B_{\nu'\mu'} (E_\mu - E_{\nu'} + E_{\mu'} - E_{\nu'}) \langle [\alpha_{\nu\sigma}^+ \alpha_{\mu\sigma}, \alpha_{\nu'\sigma'}^+ \alpha_{\mu'\sigma'}]_+ \rangle \equiv \equiv -\varepsilon \sum_{\nu\mu\sigma q} \sum_{\nu'\mu'\sigma' x'} \left\{ (A_{\nu x} V_{q x \mu} - V_{q \nu x} A_{x \mu}) B_{\nu'\mu'} + A_{\nu\mu} (B_{\nu'x} V_{q x \mu'} - V_{q \nu'x} B_{x \mu'}) \right\} \langle (\beta_q + \beta_{-q}^+) [\alpha_{\nu\sigma}^+ \alpha_{\mu\sigma}, \alpha_{\nu'\sigma'}^+ \alpha_{\mu'\sigma'}]_+ \rangle, \quad (3.17)$$

которое легко доказывается, если учесть, что

$$\frac{d}{dt} \langle [\alpha_{\nu\sigma}^+(t) \alpha_{\mu\sigma}(t), \alpha_{\nu'\sigma'}^+(t) \alpha_{\mu'\sigma'}(t)]_+ \rangle = 0,$$

и раскрыть это соотношение с помощью уравнений движения (3.8) и (3.9). В (3.17)  $A_{\nu\mu}$  и  $B_{\nu'\mu'}$  означают произвольные функции; в частности, для проверки свойства (3.3) мы должны положить

$$A_{\nu\mu} = \frac{T_{\nu\mu}^\alpha}{E + E_\nu - E_\mu}; \quad B_{\nu'\mu'} = \frac{T_{\nu'\mu'}^\alpha}{E - E_{\nu'} + E_{\mu'}}.$$

Рассмотрим знаменатель в формуле (3.6). На основании уравнения движения (3.1), равенства (3.5) и формулы (3.16) его можно представить также через одну лишь функцию Грина  $\ll (\beta_q + \beta_{-q}^+) \alpha_{\nu\sigma}^+ \alpha_{\mu\sigma} | (\beta_{q'} + \beta_{-q'}^+) \alpha_{\nu'\sigma'}^+ \alpha_{\mu'\sigma'} \gg$ . Получающееся таким образом точное выражение для  $M_{\alpha\alpha}(E)$  удобно преобразовать, подставляя в нем

$$\frac{T_{\nu\mu}^\alpha}{E + E_\nu - E_\mu} = f_{\nu\mu}^\alpha \left( \frac{E}{E + E_\nu - E_\mu} - 1 \right) \quad (3.18)$$

и выполняя некоторые упрощения на основе тождества (3.17). Переходя затем к пределу  $E \rightarrow i\delta$  ( $\delta = 0^+$ ) и замечая, что для того, чтобы вычислить  $M_{\alpha\alpha}(i\delta)$  с точностью до членов порядка  $\varepsilon^2$  включительно, достаточно знать функцию Грина  $\ll (\beta_q + \beta_{-q}^+) \alpha_{\nu\sigma}^+ \alpha_{\mu\sigma} | (\beta_{q'} + \beta_{-q'}^+) \alpha_{\nu'\sigma'}^+ \alpha_{\mu'\sigma'} \gg$  в нулевом приближении, после некоторых преобразований получаем:

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} M_{aa}(i\delta) = -i \frac{\langle [J_a, J_a]_+ \rangle}{4\theta^2 \sigma_0^2} \left\{ 2\theta \sigma_0 - \pi \varepsilon^2 \sum_{\nu\mu\sigma} \sum_{\nu'\mu'\sigma'} f_{\nu\mu} f_{\nu'\mu'} \cdot \right. \\ \left. \langle [\alpha_{\nu\sigma}^+ \alpha_{\mu\sigma}, \alpha_{\nu'\sigma'}^+ \alpha_{\mu'\sigma'}]_+ \rangle_{(2)} \delta(E_\nu - E_\mu) - \pi \varepsilon^2 \sum_{\nu\mu\sigma q} \sum_{\nu'\mu'\sigma'} \left[ F'_{\nu\mu q} \delta(E_{\nu'} - E_{\mu'}) - \right. \right. \\ \left. \left. - F_{\nu\mu q} P \frac{1}{E_{\nu'} - E_{\mu'}} \right] f_{\nu'\mu'} \cdot \langle (\beta_q + \beta_{-q}^+) [\alpha_{\nu\sigma}^+ \alpha_{\mu\sigma}, \alpha_{\nu'\sigma'}^+ \alpha_{\mu'\sigma'}]_+ \rangle_{(1)} - \right. \\ \left. - 4\pi \varepsilon^2 \sum_{\nu\mu q} D_{\nu\mu q} [(F_{\nu\mu q} F'_{\mu\nu, -q} - F'_{\nu\mu q} F_{\mu\nu, -q}) P \frac{1}{E_\nu - E_\mu - \omega_q \varepsilon^2} + \right. \\ \left. + (F'_{\nu\mu q} F'_{\mu\nu, -q} + \pi^2 F_{\nu\mu q} F_{\mu\nu, -q}) \delta(E_\nu - E_\mu - \varepsilon^2 \omega_q) \right\}, \quad (3.19)$$

где мы использовали равенство

$$\langle\langle (\beta_q + \beta_{-q}^+) \alpha_{\nu\sigma}^+ \alpha_{\mu\sigma} | (\beta_{q'} + \beta_{-q'}^+) \alpha_{\nu'\sigma'}^+ \alpha_{\mu'\sigma'} \rangle\rangle_{i\delta} = \\ = \frac{1}{2\pi} \left( \frac{D_{\nu\mu q}}{E_\nu - E_\mu - \varepsilon^2 \omega_q + i\delta} + \frac{D_{\mu\nu q}}{E_\nu - E_\mu + \varepsilon^2 \omega_q + i\delta} \right) \delta_{q, -q'} \delta_{\nu\mu} \delta_{\mu\nu} \delta_{\sigma\sigma'}, \quad (3.20)$$

и обозначения:

$$\sigma_0 = \frac{\pi}{0} \sum_{\nu\mu\sigma} f_{\nu\mu} f_{\mu\nu} (n_\nu - n_\nu^2) \delta(E_\nu - E_\mu), \quad (3.21)$$

$$F'_{\nu\mu q} = \sum_x (f_{\nu x}^a V_{q x \mu} P \frac{1}{E_\nu - E_x} - V_{q \nu x} f_{x \mu}^a P \frac{1}{E_x - E_\mu}), \quad (3.22)$$

$$F_{\nu\mu q} = \sum_x (f_{\nu x} V_{q x \mu} \delta(E_\nu - E_x) - V_{q \nu x} f_{x \mu} \delta(E_\mu - E_x)), \quad (3.23)$$

$$D_{\nu\mu q} = N_q n_\mu (1 - n_\nu) + (1 + N_q) n_\nu (1 - n_\mu), \quad (3.24)$$

$$N_{q \pm} = (e^{\varepsilon^2 \omega_q / \theta} - 1)^{-1}; \quad n_\nu = (e^{(E_\nu - \zeta) / \theta} + 1)^{-1}, \quad (3.25)$$

$\zeta$  — химический потенциал.

Полученное выражение (3.19) следует теперь подставить в формулу (1.23) для электропроводности. При  $\varepsilon = 0$  получаем  $\sigma = \sigma_0$ . Последняя величина имеет смысл проводимости, вызванной рассеянием электронов на поляризационном поле, обязанном изменению положений равновесия и частот фононов. Этот эффект аналогичен примесной электропроводности, рассмотренной в работе [11].

Дальнейшее вычисление на основе (3.19) требует знания спектра  $E_\nu$  и совокупности функций  $n_{\nu k}$ , что само по себе является очень трудной задачей.

Отметим, что из (3.19) можно получить известные результаты теории слабой связи. В самом деле, полагая в этом случае в уравнении (2.8)  $c_q = 0$ , для  $n_{\nu k}$  и  $E_\nu$  получаем выражения:

$$n_{\nu k} = \delta_{\nu k}, \quad E_\nu = T_\nu, \quad (3.26)$$

подстановка которых в (3.19) дает:

$$\sigma = \frac{\left[ e^2 \sum_k \left( \frac{\partial T_k}{\partial k_a} \right)^2 (n_k - n_k^2) \right]^2}{\pi e^2 \sum_{kq} A_q^2 \left[ \frac{\partial}{\partial k_a} (T_{k+q} - T_k) \right]^2 (n_k - n_{k+q}) N_q (1 + N_q) \delta(T_{k+q} - T_k - \omega_q)}. \quad (3.27)$$

Чтобы сравнить эту формулу с результатами работы [4], введем время релаксации  $\tau_0$  и перепишем (3.27) в виде:

$$\sigma = \frac{p \tau_0}{0}, \quad (3.28)$$

где

$$p = \langle j_a^2 \rangle_0 = 2e^2 \sum_k v_{ka} (n_k - n_k^2), \quad \bar{v}_k = \frac{\partial T_k}{\partial k},$$

$$\tau_0^{-1} = \frac{4\pi e^2}{3\rho} \sum_{kq} A_q^2 (\bar{v}_{k+q} - \bar{v}_k)^2 (n_k - n_{k+q}) N_q (1 + N_q) \delta(T_{k+q} - T_k - \omega_q).$$

Выражение (3.28) в точности совпадает с соответствующей формулой Клингера [4], полученной им для случая слабого электронно-фононного рассеяния методом матрицы плотности. Этим же методом формула (3.27) была получена также Накано [3] с той лишь разницей, что он рассматривал слабое взаимодействие электронов с акустическими фононами в металлах.

Автор глубоко благодарен В. А. Москаленко за большую помощь при выполнении данной работы, а также Д. Н. Зубареву и С. В. Тябликову за обсуждение работы и ценные замечания.

Поступило  
12.I 1962 г.



## ЛИТЕРАТУРА

1. Р. Пайерлс, Квантовая теория твердых тел, ИЛ, 1956.
2. С. И. Пекар, УФН, 60, 191 (1956).
3. Н. Накао, Progr. theor. Phys., 17, 145 (1957).
4. М. И. Клиnger, ФТТ, 1, 861 (1959).
5. С. В. Тябликов, ФТТ, 3, 3445 (1961).
6. Р. Кубо, J. Phys. Soc. Jap., 12, 570 (1957).
7. Д. Н. Зубарев, УФН, 71, 71 (1960).
8. В. Л. Бонч-Бруевич, С. В. Тябликов, Метод функций Грина в статистической физике, Физматгиз, 1961.
9. Д. Н. Зубарев, Докторская диссертация, М., 1962.
10. С. В. Тябликов, В. Л. Бонч-Бруевич, Теория возмущений для двухвременных температурных функций Грина, М., 1962 (ротопринт).
11. Т. Matsubara, Y. Toyozawa, Progr. Theor. Phys., 26, 739 (1961).

А. И. КАСИЯН

АСУПРА ТЕОРИЕЙ КОНДУКТИБИЛИТАЦИЙ ЭЛЕКТРИЧЕ  
А КРИСТАЛЛОР ИОНИЧЕ

## Резумат

Се студиязе кондуктибилитатя електрикэ а унуй систем де електронь ын интеракциуне путерникэ ку осцилацииле оптиче але рецелей кристаличе. Се фолосеште метода функциилор авантате ши ретардате але луй Грин. Кондуктибилитатя електрикэ (ын апроксимация унуй кымп слаб) се експримэ ку ажуторул операторулуй де масэ а функцией Грин де курут; каре се калкулязе ын а доуа апроксимацие а теорией адиабатиче а пертурбаццилор.

Пентру коефициентул де кондуктибилитате електрикэ се обцине о формулэ жeneralэ, експриматэ прин системул де функций а поларонулуй, адеватэ пентру тоатэ скара температурий. Ла ануите пресупунерь, че кореспунд казулуй лимитэ а дифузией слабе динтре електронь ши фононь, експресия обцинутэ трече ын формула куноскутэ а казулуй интеракциуний слабе.

В. А. КОВАРСКИЙ и В. А. МОСКАЛЕНКО

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ  
ДЛЯ ЛОКАЛЬНОГО ЦЕНТРА

## § 1. Постановка задачи

Одноэлектронный локальный центр типа  $F$ -центра в приближении метода эффективной массы описывается гамильтонианом вида:

$$H = H_0(r) + V(r, q) + H_q, \quad (1)$$

где  $H_0(r) = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + Q(r)$  — гамильтониан, характеризующий движение электрона в поле заряженного центра  $Q(r)$ ;  $V(r, q)$  — потенциальная энергия взаимодействия электрона с „активной“ ветвью колебаний кристаллической решетки (продольные акустические колебания в случае гомеополярных кристаллов; продольные оптические — в случае ионных);  $H_q$  — гамильтониан свободных колебаний рассматриваемой ветви.

Волновые функции и энергетический спектр системы, описываемые гамильтонианом (1), исследовались в [1]. При этом не учитывалась статистическая возможность возбуждений в электронной и колебательной подсистемах. Другими словами, теории локального центра строились по существу для температуры абсолютного нуля.

Успешное развитие термодинамической теории возмущений, основанной на применении диаграммной техники Фейнмана при конечных температурах и методе температурных функций Грина, позволило развить последовательную температурную теорию для исследования однородных электронно-фононных систем [2—4]. Целью настоящей заметки является обобщение этих результатов на случай неоднородных электронно-фононных систем, в частности определение термодинамического потенциала кристалла, содержащего локальный центр.

В дальнейшем удобно перейти к представлению вторичного квантования. В качестве базисных функций для квантования электронной подсистемы можно выбрать полную систему функций уравнения:

$$H_0(r)\psi_{s\sigma}^0(r) = E_{s\sigma}^0\psi_{s\sigma}^0(r), \quad (2)$$

где  $s$  и  $\sigma$  — квантовые числа, характеризующие состояние электрона и его спин.

Гамильтониан системы принимает вид: ( $\hbar = 1$ )

$$H = H_0 + H_b, \quad (3)$$

$$H_0 = \sum_{i,\sigma} \varepsilon_i a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma} + \sum_q \omega_q b_q^+ b_q \quad (4)$$

$$H_1 = g \sum_{i,j,\sigma,q} \{ \langle i | V_q^-(r) | j \rangle a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} b_q + \text{к. с.} \} \quad (5)$$

Здесь  $a_{i,\sigma}^+$  и  $a_{i,\sigma}$  — операторы порождения и уничтожения электронов в  $i$ -состоянии и спином  $\sigma$ ;  $b_q^+$  и  $b_q$  — операторы порождения и уничтожения фононов;  $V_q^-(r)$  — коэффициент разложения энергии  $V(r, q)$  в ряд по малым смещениям ядер из положения равновесия  $V_q(r) \sim V_q$  (в случае акустических колебаний) и  $V_q(r) \sim \frac{1}{q}$  (в случае оптических колебаний);  $g$  — безразмерная константа связи. Для удобства в  $\varepsilon_i$  включен химический потенциал  $\mu$ :

$$\varepsilon_i = E_i - \mu. \quad (8)$$

Основная задача исследования термодинамических свойств системы сводится к вычислению большой статистической суммы:

$$Z = \langle U(\beta, 0) \rangle Z_0; \quad \beta = \frac{1}{k_0 T}, \quad (9)$$

$$Z_0 = \text{Sp} e^{-\beta H_0}, \quad (10)$$

$$\langle \dots \rangle = \frac{\text{Sp} \{ \dots e^{-\beta H_0} \}}{\text{Sp} \{ e^{-\beta H_0} \}}, \quad (11)$$

$$U(\beta, 0) = e^{\beta H_0} e^{-\beta H}, \quad (12)$$

$U(\beta, 0)$  — оператор эволюции системы.

Введем в рассмотрение квантованные волновые функции электронов и фононов:

$$\Psi(\vec{x}, \sigma) = \sum_{i,\sigma_0} a_{i\sigma_0} \psi_i(\vec{x}, \sigma_0) \delta_{\sigma\sigma_0}, \quad (13)$$

$$\Psi^+(\vec{x}, \sigma) = \sum_{i,\sigma_0} a_{i\sigma_0}^+ \psi_i^*(\vec{x}, \sigma_0) \delta_{\sigma\sigma_0}, \quad (14)$$

$$\varphi(\vec{x}) = \sum_q f(q) [b_q e^{-i\vec{q}\vec{x}} + b_q^+ e^{i\vec{q}\vec{x}}], \quad (15)$$

с помощью которых член взаимодействия  $H_1$  представим в виде:

$$H_1 = g \sum_{\sigma} \int \Psi^+(\vec{x}, \sigma) \Psi(\vec{x}, \sigma) \varphi(\vec{x}) d\vec{x}. \quad (16)$$

Выражение для оператора эволюции можно представить  $T$ -упорядоченной экспонентой ( $\tau$  — индекс упорядочивания):

$$U(\beta, 0) = T \exp \left\{ - \int_0^{\beta} d'x W(x, \sigma) \right\}, \quad (17)$$

здесь обозначено:

$$\int_0^{\beta} d'x \equiv \sum_{\sigma} \int_0^{\beta} d\tau \int d\vec{x}; \quad x \equiv (\vec{x}, \tau), \quad (18)$$

$$W(x, \sigma) = g \bar{\Psi}(x, \sigma) \Psi(x, \sigma) \varphi(x), \quad (19)$$

$$\bar{\Psi}(x, \sigma) = e^{-\tau H_0} \Psi^+(\vec{x}, \sigma) e^{-\tau H_0} = \sum_{i,s} a_{is}^+ \psi_i^*(\vec{x}, s) e^{-\tau \varepsilon_i} \delta_{\sigma s}, \quad (20)$$

$$\Psi(x, \sigma) = e^{-\tau H_0} \Psi(\vec{x}, \sigma) e^{-\tau H_0} = \sum_{is} a_{is} \psi_i(\vec{x}, s) e^{-\tau \varepsilon_i} \delta_{\sigma s}, \quad (21)$$

$$\varphi(x) = e^{-\tau H_0} \varphi(\vec{x}) e^{-\tau H_0} = \sum_q f(q) (b_q e^{-i\vec{q}\vec{x} - \tau \omega_q} + b_q^+ e^{i\vec{q}\vec{x} + \tau \omega_q}). \quad (22)$$

Штрих в формуле (22) означает отсутствие слагаемого  $q=0$ . Такое ограничение для гомеоплярных кристаллов очевидно, поскольку  $V_0(r) = 0$ . В случае ионных кристаллов при  $q=0$   $\langle i | V_0 | j \rangle = \langle i | V_0 | j \rangle \delta_{ij}$ . Соответствующее слагаемое из  $H_1$  может быть объединено с аналогичным фононным членом из  $H_0$  и выделено в независимую подсистему.

Таким образом, нахождение большой статистической суммы  $Z$  в (9) сводится к нахождению среднего статистического от  $T$ -произведения, входящего в оператор эволюции (12). Для раскрытия последнего может быть использована хронологическая теорема Вика.

В дальнейшем понадобятся хронологические спаривания свободных операторов электронных и фононных полей:

$$\begin{aligned} S^c(x, x') \delta_{\sigma\sigma'} &= \overline{\psi(x, \sigma) \bar{\psi}(x', \sigma')} = \\ &= \theta(\tau - \tau') \delta_{\sigma\sigma'} \sum_i \psi_i(\vec{x}, \sigma) \psi_i^*(\vec{x}', \sigma') e^{(\tau' - \tau) \varepsilon_i} [1 - \langle a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma'} \rangle] - \\ &- \theta(\tau' - \tau) \delta_{\sigma\sigma'} \sum_i \psi_i(\vec{x}, \sigma) \psi_i^*(\vec{x}', \sigma') e^{(\tau' - \tau) \varepsilon_i} \langle a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma'} \rangle, \end{aligned} \quad (23)$$

$$\text{где} \quad \langle a_i^+ a_i \rangle = [e^{\beta \varepsilon_i} + 1]^{-1}. \quad (24)$$

Выражение для  $D_0^c(x - x') = \langle T(\varphi(x), \varphi(x')) \rangle$  то же самое, что и в случае однородной электронно-фононной системы.

Для совпадающих аргументов функция  $S^c(x, x')$  должна быть доопределена. Ниже предполагается, что

$$S^c(x, x^+) = \lim_{\tau' \rightarrow \tau+0} S^c(x, x') = - \sum_i |\psi_i|^2(x, \sigma) \langle a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma} \rangle. \quad (25)$$

§. 2 Вакуумные диаграммы задачи локального центра

Представим  $T$ -упорядоченную экспоненту в виде обычного степенного разложения.

Большая статистическая сумма примет вид:

$$Z = Z_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^{\beta} \dots \int_0^{\beta} d'x_1 \dots d'x_n \langle T \{ W(x_1 \sigma_1) \dots W(x_n \sigma_n) \} \rangle. \quad (26)$$

Члены этого ряда удобно анализировать с помощью графического изображения спаривания операторов в виде диаграмм Фейнмана.

Во втором порядке по константе взаимодействия имеются следующие диаграммы:

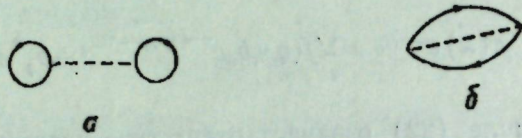


рис. 1

Пунктирные линии относятся к спариванию фононных операторов, сплошные — электронных. В отличие от однородных электронно-фононных систем в исследуемом случае возможны самозамыкающиеся петли типа рис. 1, а.

На основании этих диаграмм по правилам Фейнмана можно записать их вклад в  $Z^{(2)}$ :

$$Z^{(2)} = \frac{g^2}{2!} \left\{ (-2)^2 \int_0^{\beta} \int_0^{\beta} dx_1 dx_2 S_c(x_1, x_1^+) S_c(x_2, x_2^+) D_c^0(x_1 - x_2) + (-2) \int_0^{\beta} \int_0^{\beta} S_c(x_1, x_2) S_c(x_2, x_1) D_c^0(x_1 - x_2) dx_1 dx_2 \right\}. \quad (27)$$

При написании (27) учтено, что суммирование по спиновым переменным для каждой замкнутой электронной петли вносит вклад  $(-2)$ .

Согласно известной теореме, доказанной Блохом и Доминисисом [3], вклад в большую статистическую сумму вносят лишь связанные диаграммы, так что имеет место экспоненциальная формула:

$$Z = Z_0 \exp \langle U(\beta, 0) \rangle_c \quad (28)$$

(с здесь и в дальнейшем — значок связности диаграмм).

Для исследования диаграмм высших порядков по константе взаимодействия  $g$  удобно воспользоваться классификацией диаграмм (включая несвязанные) по электронным петлям, предложенной одним из авторов [4]. Например, в четвертом порядке имеется следующее распределение по электронным петлям:

$$Ne(4) = 1 \begin{matrix} | & | & | & | \\ | & | & | & | \\ | & | & | & | \end{matrix} + 6 \begin{matrix} | & | & | \\ | & | & | \\ | & | & | \end{matrix} + 8 \begin{matrix} | & | \\ | & | \\ | & | \end{matrix} + 6 \begin{matrix} | & | \\ | & | \end{matrix} + 3 \begin{matrix} | & | \\ | & | \end{matrix}. \quad (30)$$

Установим возможные связанные структуры в 4-м порядке и соответствующее каждой из этих структур число эквивалентных диаграмм.

Рассмотрим слагаемое  $8 \begin{matrix} | & | \\ | & | \end{matrix}$ . Возможные связанные структуры имеют вид:

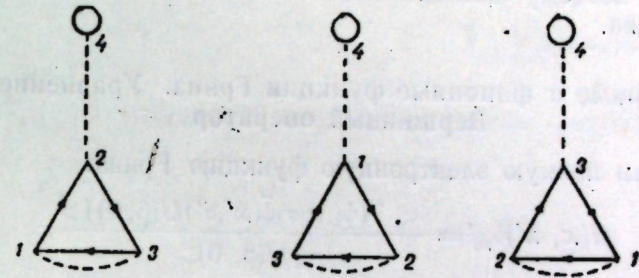


рис. 2

Таким образом, число эквивалентных диаграмм с учетом весового множителя 8 равно 24. Символически запишем этот результат в виде:

$$\Gamma_{31} = 24 \begin{matrix} \circ \\ | \\ \triangle \end{matrix}$$

Аналогично были исследованы и другие структуры формулы (30).

Полное число эквивалентных диаграмм всех возможных связанных структур в четвертом порядке дается ниже:

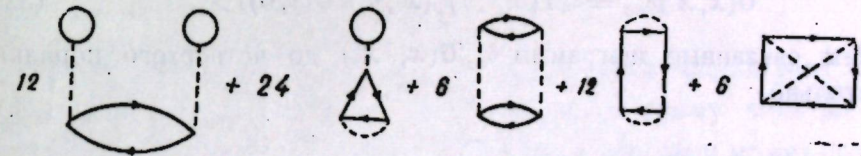


рис. 3

Приведем несколько связанных структур с указанием числа эквивалентных диаграмм для шестого и восьмого порядков:

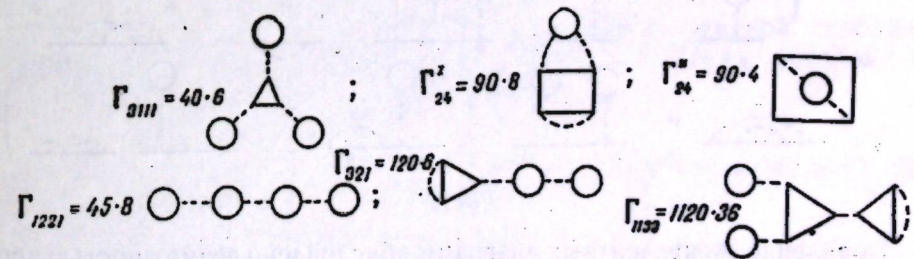


рис. 4

где первое число означает „вес“, с которым данная структура входит в разложение по электронным петлям, второе — количество возможных спариваний фононных операторов.

Разложение  $\langle U(\beta, 0) \rangle_c$  по связанным диаграммам может быть существенно упрощено, если выполнить частичное суммирование диаграмм. Необходимо поэтому исследовать полные электронные и фоновые функции Грина.

### §3. Электронные и фоновые функции Грина. Уравнение Дайсона. Вершинный оператор

Рассмотрим полную электронную функцию Грина:

$$G(x, x')\delta_{\sigma\sigma'} = \frac{\langle T(\psi(x, \sigma)\bar{\psi}(x', \sigma')U(\beta, 0)) \rangle}{\langle U(\beta, 0) \rangle} \quad (31)$$

В числитель формулы (31) входят диаграммы вида:

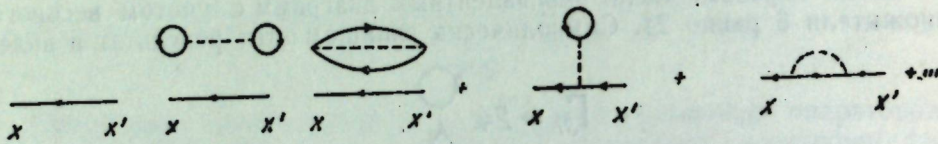


Рис. 5

Нетрудно убедиться, что делением на  $\langle U(\beta, 0) \rangle$  из числителя (31) исключаются все несвязанные диаграммы вакуумного типа. В итоге полная функция Грина  $G(x, x')\delta_{\sigma\sigma'}$  принимает вид:

$$G(x, x')\delta_{\sigma\sigma'} = \langle T(\psi(x, \sigma)\bar{\psi}(x', \sigma')U(\beta, 0)) \rangle_c \quad (32)$$

Приведем связанные диаграммы  $\delta_{\sigma\sigma'}G(x, x')$  до четвертого порядка включительно:

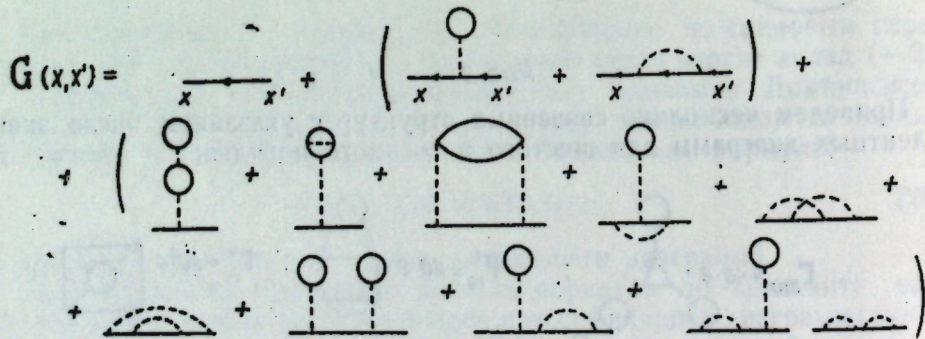


Рис. 6

Появление эквивалентных диаграмм обусловлено возможностью представлять  $n$  внутренних вершин. Последние четыре диаграммы относятся к так называемым слабосвязанным диаграммам. Такие и подобно повторяющиеся структуры могут быть учтены простым приемом при записи уравнения Дайсона. Сумма остальных "сильно связанных" диаграмм выражается через собственно энергетическую часть.

Простейшая собственно энергетическая часть может быть получена, если рассмотреть второй порядок по константе взаимодействия. Найдем:

$$G_2(x, x') = \int_0^\beta \int_0^\beta d'x_1 d'x_2 S(x, x_1) (\Sigma'_2(x_1, x_2) + \Sigma''_2(x_1, x_2)) S(x_2, x'). \quad (33)$$

Через  $\Sigma'_2$  и  $\Sigma''_2$  обозначены структуры собственно энергетической части во втором порядке:

$$\Sigma'_2(x_1, x_2) = g^2 S^c(x_1, x_2) D^0_c(x_1, x_2), \quad (34)$$

$$\Sigma''_2(x_1, x_2) = g^2 \delta(x_1 - x_2) \int_0^\beta S^c(x_3, x_3^+) D(x_1, x_3) d'x_3, \quad (35)$$

Соответствующие диаграммы имеют вид:

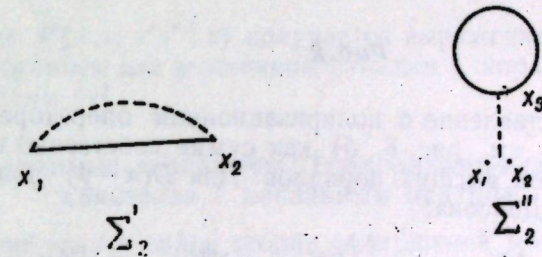


Рис. 7

Обозначим сумму собственно энергетических частей типа  $\Sigma'_2$  высших порядков через  $\Sigma'$ , а соответствующую сумму типа  $\Sigma''_2$  — через  $\Sigma''$ . В итоге сумма всех сильно связанных диаграмм может быть представлена выражением:

$$\int_0^\beta \int_0^\beta d'x_1 d'x_2 S(x, x_1) (\Sigma'(x_1, x_2) + \Sigma''(x_1, x_2)) S(x_2, x'), \quad (36)$$

где слабо связанные диаграммы можно учесть заменой свободной функции Грина  $S(x_2, x')$  на полную  $G(x_2, x')$ . Таким образом, мы приходим к одному из уравнений Дайсона:

$$G(x, x') = S(x, x') + \int_0^\beta \int_0^\beta d'x_1 d'x_2 S(x, x_1) (\Sigma'(x_1, x_2) + \Sigma''(x_1, x_2)) G(x_2, x'). \quad (37)$$

Исследуем фоновые функции Грина:

$$D(x-y) = \frac{\langle T(\varphi(x), \varphi(y))U(\beta, 0) \rangle}{\langle U(\beta, 0) \rangle} \quad (38)$$

Функция  $D$  может быть представлена в виде:

$$D(x-y) = D(x-y) + \Phi(x)\Phi(y), \quad (39)$$

$$D(x-y) = \langle T(\varphi(x), \varphi(y)U(\beta, 0)) \rangle_c, \quad (40)$$

$$\Phi(x)\Phi(y) = \langle \varphi(x)U(\beta, 0) \rangle_c \cdot \langle \varphi(y)U(\beta, 0) \rangle_c. \quad (41)$$

Вывод этих формул во многом аналогичен выводу формулы (32) и здесь приводиться не будет.

Для дальнейшего представляет интерес исследование функции  $D(x-y)$ . Во втором порядке по константе взаимодействия имеются диаграммы (рис. 8, а):

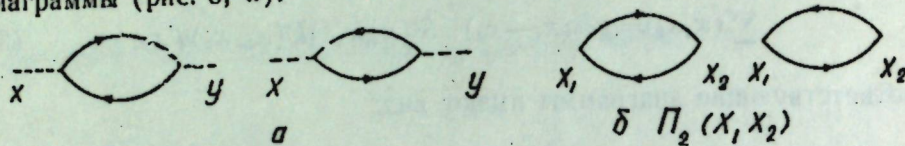


Рис. 8

Введем представление о поляризационном операторе  $\Pi(x_1, x_2)$  (для второго порядка см. рис. 8, б) как сумме собственно энергетических диаграмм фононов высших порядков. Для  $D(x-y)$  получим следующее уравнение Дайсона:

$$D(x-y) = D^0(x-y) + \int_0^\beta \int_0^\beta D^0(x-x_1)\Pi(x_1-x_2)D(x_2-y)dx_1dx_2. \quad (42)$$

В заключение исследуем вопрос о вершинных диаграммах, т. е. диаграммах, имеющих две внешние электронные и одну фононную линию. Подобные диаграммы появляются при анализе функции:

$$W(x\sigma, x'\sigma' | z) = \frac{\langle T[\psi(x, \sigma)\bar{\psi}(x', \sigma')\varphi(z)U(\beta, 0)] \rangle}{\langle U(\beta, 0) \rangle}. \quad (43)$$

Рассмотрим структуру некоторых диаграмм числителя формулы (43):

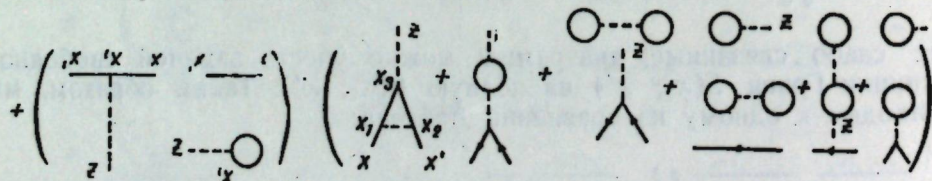


Рис. 9

Как видно из рисунка, функция  $W(x\sigma, x'\sigma' | z)$  может быть представлена в виде:

$$W(x\sigma, x'\sigma' | z) = \tilde{W}(x\sigma, x'\sigma' | z) + V(x\sigma, x'\sigma' | z), \quad (44)$$

где обозначено:

$$\tilde{W}(x\sigma, x'\sigma' | z) = \langle T[\psi(x, \sigma)\bar{\psi}(x', \sigma')\varphi(z)U(\beta, 0)] \rangle_c, \quad (45)$$

$$V(x\sigma, x'\sigma' | z) = G(x\sigma, x'\sigma')\Phi(z). \quad (46)$$

Выражение для  $\tilde{W}(x\sigma, x'\sigma' | z)$  упрощается, если ввести в рассмотрение вершинный оператор  $\Gamma(x_1, x_2 | x_3)$ :

$$\Gamma(x_1, x_2 | x_3) = \Gamma_1(x_1, x_2 | x_3) + \Gamma_3(x_1, x_2 | x_3) + \dots \quad (47)$$

Простейшие вершинные операторы имеют вид:

$$\Gamma_1(x_1, x_2 | x_3) = \delta(x_2 - x_1)\delta(x_3 - x_1); \quad \Gamma_3(x_1, x_2 | x_3) = g^2 \text{ (triangle diagram)} \quad (48)$$

В итоге для  $\tilde{W}(x, \sigma; x', \sigma' | z)$  получается выражение, внешне совпадающее с выражением для вершинной функции однородной электронно-фононной системы [4].

#### § 4. Неприводимые диаграммы. Термодинамический потенциал кристалла с локальным центром

Диаграммный анализ рядов теории возмущений может быть существенно упрощен приведением связанных диаграмм к простейшим неприводимым диаграммам, т. е. диаграммам, в которых исключены собственно энергетические и вершинные части.

Простейшие неприводимые диаграммы собственной энергии электрона изображены на рис. 7. Неприводимые поляризационные диаграммы фононов даются на рис. 8, б. Две вакуумные неприводимые диаграммы приведены на рис. 1. Вершинных неприводимых диаграмм имеется, как обычно, бесконечное число.

Построение связанных собственно энергетических электронных и фононных диаграмм из неприводимых структур однозначно и символически может быть изображено следующим образом:

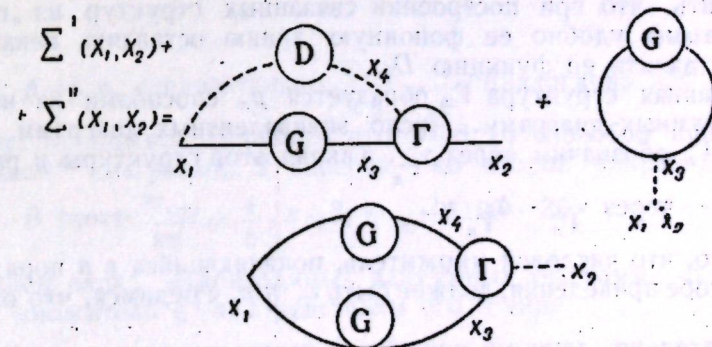


Рис. 10

Соответствующие вклады имеют вид:

$$\Sigma' + \Sigma''(x_1, x_2) = g^2 \int_0^{\beta} \int_0^{\beta} G(x_1 x_3) \Gamma(x_3 x_2 | x_4) D(x_1 x_4) dx_3 dx_4 + (-2)g^2 \delta(x_1 - x_2) \int D_0(x_1 - x_3) G(x_3 x_3^+) dx_3, \quad (49)$$

$$\Pi(x_1, x_2) = -2g^2 \int G(x_1 x_4) \Gamma(x_4 x_3 | x_2) G(x_3 x_1) dx_3 dx_4. \quad (50)$$

Полученные условия (49) и (50) являются второй парой уравнений Дайсона (наряду с уравнениями (37) и (42)).

Рассмотрим вопрос о приведении вакуумных диаграмм. В качестве примера разберем приведение структуры  $\Gamma_{31}$  (рис. 3). Имеется два способа построения этой структуры из „гантельной“ неприводимой диаграммы (рис. 1, а)

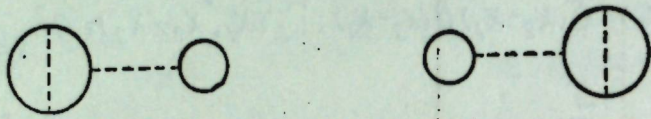


Рис. 11

Кроме того, существует два способа вставки собственно энергетической электронной части во вторую неприводимую диаграмму рис. (1, б):

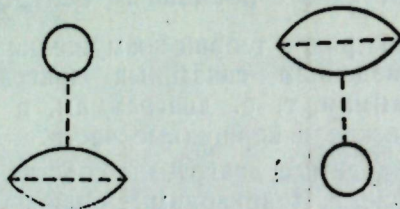


Рис. 12

Таким образом, имеется четыре способа построения или, соответственно, приведения структуры  $\Gamma_{31}$  к неприводимым диаграммам. Следует заметить, что при построении связанных структур из „гантельной“ диаграммы удобно ее фоновую линию оставлять неизменной, т. е. сопоставлять ей функцию  $D_0$ .

Пусть данная структура  $\Gamma_n$  образуется  $p_n$  способами из неприводимых вакуумных диаграмм. Число эквивалентных диаграмм данной структуры  $\Gamma_n$  обозначим через  $\nu_{\Gamma_n}$ , а вклад этой структуры в разложение  $U(\beta, 0)$  — через  $\nu_{\Gamma_n} \cdot \Delta_{\Gamma_n} / n!$ .

Очевидно, что числовой множитель, появляющийся в  $n$  порядке при данном способе приведения, должен быть  $\nu_{\Gamma_n} / n! p$ . Убедимся, что он равен

$\frac{1}{n}$ . Действительно, данному способу образования структуры  $\Gamma_n$  (фиксирована одна из вершин неприводимой диаграммы) соответствует

$(n-1)!$  эквивалентных диаграмм, так что при  $p$  способах построения  $\Gamma_n$  число эквивалентных диаграмм  $\nu_{\Gamma_n} = p(n-1)!$ . Приведем примеры, подтверждающие правило  $\frac{1}{n}$ . Для исследованной выше структуры  $\Gamma_{31}$ :  $p=4$ ;  $\nu_{\Gamma_{31}}=24$ ;  $n=4$  имеем:

$$\frac{\nu_{\Gamma_n}}{n! p} = \frac{24}{4! 4} = \frac{1}{4}.$$

Рассмотрим приведение структуры  $\Gamma_{321}$  (рис. 4):  $\nu_{\Gamma_{321}}=720$ ;  $n=6$ . Установим число способов  $p$  приведения к неприводимым диаграммам. Имеется четыре способа приведения к „гантельной“ диаграмме:

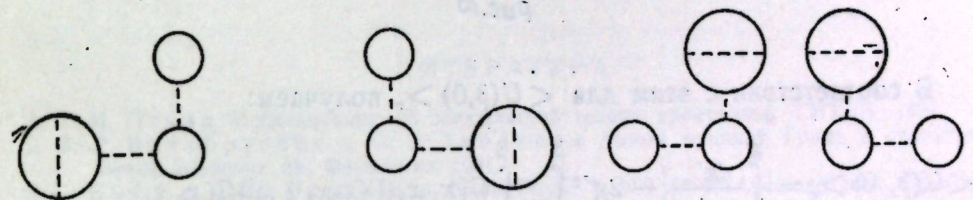


Рис. 13

и два способа приведения ко второй неприводимой диаграмме:

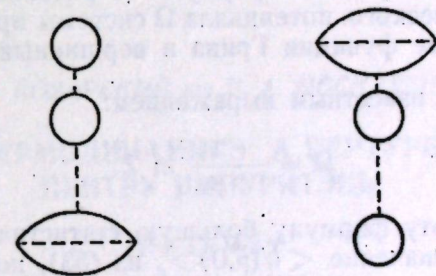


Рис. 14

Итак:  $p=6$  и, следовательно,  $\frac{\nu_{\Gamma_{321}}}{6! 6} = \frac{1}{6}$ . Аналогично для структуры  $\Gamma_{1133}$  (рис. 5) можно установить, что  $p=8$  (6 способов приведения к „гантельной“ диаграмме, 2 способа — ко второй неприводимой диаграмме). В итоге  $\frac{\nu_{\Gamma_{1133}}}{8! 8} = \frac{1}{8}$ ,  $n=8$ ;  $\nu_{\Gamma_{1133}}=1120 \cdot 36$ .

Запишем вклад неприводимых вакуумных диаграмм. В  $n$  порядке имеется множитель  $g^n / n$ . Представим его в виде:

$$\frac{g^n}{n} = \int_0^g \frac{dg'}{g'} g'^n. \quad (52)$$

Такая запись, как и в случае однородных электронно-фононных систем, позволяет получить компактное выражение для  $\langle U(\beta, 0) \rangle_c$ . При этом каждой вершине ставится в соответствие константа связи  $g'_i$ . Графическое изображение правила образования связанных вакуумных диаграмм из неприводимых дается ниже:

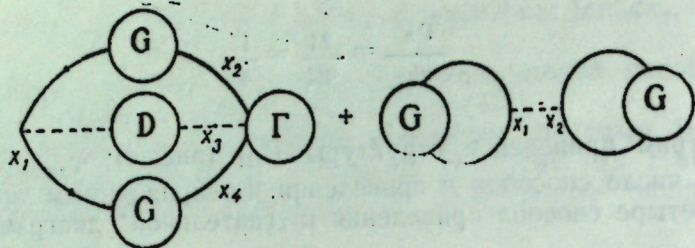


Рис. 15

В соответствии с этим для  $\langle U(\beta, 0) \rangle_c$  получаем:

$$\langle U(\beta, 0) \rangle_c = \int_0^g \frac{dg'}{g'} \left\{ -2g'^2 \int_0^\beta \int_0^\beta G(x_1, x_2) \Gamma(x_2, x_4 | x_3) G(x_4, x_1) \cdot D(x_1, x_3) dx_1 \dots dx_4 + 4g'^2 \int_0^\beta \int_0^\beta dx_1 dx_2 G(x_1, x_1^+) D^0(x_1, x_2) G(x_2, x_2^+) dx_1 dx_2 \right\}. \quad (53)$$

На основании полученной формулы (53) можно найти выражение для термодинамического потенциала  $\Omega$  системы примесной центр-кристалл через полные функции Грина и вершинный оператор.

Вспользуемся известным выражением:

$$\Omega = -\frac{1}{\beta} \ln Z. \quad (54)$$

Подставляя в эту формулу большую статистическую сумму  $Z$  из (98) и найденное значение  $\langle U(\beta, 0) \rangle_c$  из (53), получим:

$$\Omega = -\frac{1}{\beta} \ln Z_0 + \frac{2}{\beta} \int_0^g g' dg' \left\{ \int_0^\beta \int_0^\beta dx_1 \dots dx_4 G(x_1, x_2) \Gamma(x_2, x_4 | x_3) \cdot G(x_4, x_1) D(x_1, x_3) + 2 \int_0^\beta \int_0^\beta G(x_1, x_1^+) D^0(x_1, x_2) G(x_2, x_2^+) dx_1 dx_2 \right\}. \quad (55)$$

С помощью уравнений Дайсона (37, 42) можно преобразовать  $\Omega$  также к виду:

$$\Omega = -\frac{1}{\beta} \ln Z_0 + \frac{2}{\beta} \int_0^g \frac{dg'}{g'} \int_0^\beta \int_0^\beta dx_1 dx_2 [\Sigma'(x_1, x_2) + \Sigma''(x_1, x_2)] G(x_2, x_1), \quad (56)$$

$$\Omega = -\frac{1}{\beta} \ln Z_0 - \frac{1}{\beta} \int_0^g \frac{dg'}{g'} \int \int \Pi(x_1, x_2) D(x_1, x_2) dx_1 dx_2 - \frac{4}{\beta} \int_0^g g' dg' \int_0^\beta \int_0^\beta G(x_1, x_1^+) D^0(x_1, x_2) G(x_2, x_2^+) dx_1 dx_2. \quad (57)$$

Непосредственный расчет термодинамического потенциала по этим формулам будет выполнен отдельно.

Поступило  
2.II 1962 г.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. С. И. Пекар, Исследования по электронной теории кристаллов, ГИТТЛ, 1951.
2. В. Л. Бонч-Бруевич и С. В. Тябликов, Метод функций Грина в статистической механике, М., Физматгиз, 1961.
3. С. Bloch et C. de Dominicis, Nucl. Phys., 7, 459 (1958) (см. перевод: Проблемы современной физики, 1958, № 6).
4. В. А. Москаленко, Вычисление термодинамического потенциала квантовых систем, Матем. ин-т им. В. А. Стеклова, М., 1961 (ротопринт).
5. В. А. Москаленко, Известия АН МССР, № 10 (88), 41 (1961).

В. А. КОВАРСКИЙ и В. А. МОСКАЛЕНКО

#### ТЕОРИЯ ТЕРМОДИНАМИКЭ А ПЕРТУРБАЦИИЛОР ПЕНТРУ ИМПУРИТЭЦЬ

#### Резюме

Се дезволтэ теория термодинамикэ а пертурбациилор пентру ун кристал ку ун сингур  $F$ -центру. Луындын консидерацье проприетэциле неоможене але системулуй, се обцин екуаций пентру функцииле Грин монопартикуларе ши експресия екзактэ пентру потенциалул термодинамик ал системулуй.

С. А. МОСКАЛЕНКО, А. И. БОБРЫШЕВА

ПРАВИЛА ОТБОРА И ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР  
ЭКСИТОНОВ. IIДЕЙСТВИЕ ВНЕШНИХ ПОЛЕЙ И НАПРАВЛЕННЫХ ДЕФОРМАЦИЙ  
НА КУБИЧЕСКИЕ КРИСТАЛЛЫ\*)

## Введение

В предыдущей работе [1] мы вывели правила отбора при экситонном поглощении света в кристалле, исходя из

- 1) общего многоэлектронного рассмотрения задачи без конкретизации модели экситона;
- 2) того, что экстремумы зон расположены в точке  $\vec{k} = 0$ ;
- 3) предположения, что переход чисто электронный, без участия фононов;
- 4) того, что кулоновское дальнедействие и запаздывание не учитываются.

Несмотря на явный учет конечности квазимпульса  $\vec{k}$  экситона, правила отбора последнего при указанных условиях совпадают с правилами отбора для локального центра. В [1] это было показано на примере дипольных переходов.

В § 1 мы кратко рассмотрим переходы в следующем приближении по  $\vec{k}$ , после чего приведем таблицы, отражающие поведение экситонного уровня каждого из десяти типов симметрии в точке  $\vec{k} = 0$  кубического кристалла при различных условиях опыта. Эти результаты будут использованы в § 2 при обсуждении экситонного спектра в кристалле  $\text{Cu}_2\text{O}$ .

## § 1. Правила отбора при квадрупольном и магнитно-дипольном переходах

Многоэлектронная волновая функция (3) работы [1] произвольного экситонного состояния

$$\Psi(\vec{k}, \Gamma_{kex}, j(i)) = \sum_{p,q,r} A(\vec{k}, p, q, r) \frac{1}{n_k} \sum_{g \in Q_k} g \overline{\Gamma_{kex}} g \Psi(\vec{k}, p, q, r) \quad (1)$$

\*) Доложено на II Всесоюзном совещании по фотоэлектрическим и оптическим свойствам полупроводников, ноябрь, 1961, Львов.

с квазимпульсом  $\vec{k}$ , принадлежащего  $j$ -ой строке неприводимого представления  $\Gamma_{kex}$  группы волнового вектора  $Q_k$ , выражается через

сумму детерминантов  $\Psi(\vec{k}, p, q, r)$ , зависящих от пространственных и спиновых координат всех электронов кристалла. Амплитуды квадрупольного  $q_{(+)}$  и магнитно-дипольного  $q_{(-)}$  переходов согласно (16) [1] имеют вид:

$$q_{(\pm)} = \sum_{p,q,s} A(\vec{k}, p, q, s) \left\{ \frac{ika}{2} \sum_{\zeta, \eta} (\vec{f}) \sum_{\sigma} \Theta_{\zeta}^* (\vec{r}, \vec{\sigma}) (f_{\zeta} \nabla_{\eta} \pm f_{\eta} \nabla_{\zeta}) \cdot \right.$$

$$\left. \Theta_p(\vec{r} - \vec{f}, \vec{\sigma}) d\tau - \frac{ik}{2} \sum_{\zeta, \eta} (\vec{f}) \sum_{\sigma} \Theta_{\zeta}^* (\vec{r}, \vec{\sigma}) (r_{\zeta} \nabla_{\eta} \pm r_{\eta} \nabla_{\zeta}) \Theta_p(\vec{r} - \vec{f}, \vec{\sigma}) d\tau \right\}. \quad (2)$$

В (1) и (2) индексы  $p, q, s$  указывают неприводимые представления и номера строк этих представлений, по которым преобразуются одноэлектронные функции  $\Theta$  и функции относительного движения в экситоне  $\varphi$ . Индексы  $\zeta$  и  $\eta$  указывают направление падения света и ориентацию электрического вектора. Суммы по узлам решетки  $\vec{f}$ , входящие в (2), могут быть преобразованы всеми операциями точечно-пространственной группы, совпадающей с группой волнового вектора  $\vec{k} = 0$ . Тогда

$$q_{\pm} = \sum_{\Gamma_e, \Gamma_x, D, \lambda, \delta, \nu} A(\vec{k}, \Gamma_e, \lambda; \Gamma_x, \delta; D, \nu) \frac{1}{n} \sum_{G \in Q_0} g_{\lambda', \delta', \nu'; \lambda, \delta, \nu}^{\Pi} g_{\zeta', \eta'; \zeta, \eta}^{\Gamma_0(\pm)} \cdot \left\{ \frac{ika}{2} \sum_{\zeta, \eta} (\vec{f}) \sum_{\sigma} \Theta_{\zeta}^* (\vec{r}, \vec{\sigma}) (f_{\zeta} \nabla_{\eta} \pm f_{\eta} \nabla_{\zeta}) \Theta_{\Gamma_e \lambda'}(\vec{r} - \vec{f}, \vec{\sigma}) d\tau - \right.$$

$$\left. - \frac{ik}{2} \sum_{\zeta, \eta} (\vec{f}) \sum_{\sigma} \Theta_{\zeta}^* (\vec{r}, \vec{\sigma}) (r_{\zeta} \nabla_{\eta} \pm r_{\eta} \nabla_{\zeta}) \Theta_{\Gamma_e \lambda'}(\vec{r} - \vec{f}, \vec{\sigma}) d\tau \right\}. \quad (3)$$

$\Gamma_0(\pm)$  являются вещественными представлениями группы симметрии кристалла  $G$ , соответствующими точке  $\vec{k} = 0$  и образованными на базисах

$$\left\{ (r_{\zeta} \nabla_{\eta} \pm r_{\eta} \nabla_{\zeta}); G(r_{\zeta} \nabla_{\eta} \pm r_{\eta} \nabla_{\zeta}) \right\},$$

где  $G \in G$ .

Выражение (3) отлично от нуля, если

$$\frac{1}{n} \sum_{G \in G} G_{m', m}^{\Pi} G_{n', n}^{\Gamma_0(\pm)} \neq 0, \quad (4)$$

что может быть интерпретировано как требование того, чтобы экситонная функция (1), у которой  $\vec{k} = 0$ , преобразовывалась по одному из неприводимых представлений, входящих в представление  $\Gamma_0(\pm)$ . Действительно, функция

$$\sum_{p,q,r} A(\vec{k}, p, q, r) \frac{1}{n} \sum_{G \in G} G_{n', n}^{\Gamma_0(\pm)} G \Psi(0/p, q, r) \quad (5)$$

обладает этими свойствами, и матричный элемент между функциями основного состояния и функцией (5) от оператора возмущения квадрупольного или магнитно-дипольного типа отличен от нуля. От-



метим, что функции (1) и (5) принадлежат одной и той же экситонной зоне, но к различным точкам бриллюэновской зоны:  $\vec{k} \neq 0$  и  $\vec{k} = 0$ . Последнее следует из того, что в (5) и (1) суммирование ведется по тем же индексам  $p, q, r$  и что все неприводимые представления, на которые разлагаются представления  $\Gamma_0(\pm)$  в точке  $\vec{k} = 0$  при ограничении группы  $Q_0$  до  $Q_{\vec{k}}$ , содержат в себе представление  $\Gamma_{\vec{k}\epsilon\kappa}$  [1]. Таким образом, экситонный уровень, переход на который мы изучаем в точке  $\vec{k} = 0$ , переходит в экситонный уровень с представлением  $\Gamma_{\vec{k}\epsilon\kappa}$  в точке  $\vec{k} \neq 0$ .

Правила отбора в точке  $\vec{k} = 0$  указывают не только на поляризацию поглощения, но и на зависимость интенсивности перехода от волнового вектора  $\vec{k}$ . Они оказались такими же, как и для локальных центров в кристаллах [1], и согласуются с правилами отбора по группе волнового вектора. С их помощью мы определили поведение экситонных уровней десяти типов симметрии точки  $\vec{k} = 0$  в кубических кристаллах при различных условиях опыта. В табл. 1—10 указаны направления внешних постоянных полей  $\vec{E}$  и  $\vec{H}$ , направленной деформации  $\vec{P}$  и распространения света  $\vec{k}$ .

Под действием внешних полей и деформаций уровни могут расщепиться. В таблицах указаны представления всех расщепившихся подуровней в обозначениях работы [1], причем дипольно активная компонента отмечена прямой линией, квадрупольно активная  $\longleftrightarrow$ , магнитно-дипольно активная значком  $\text{---}$ , активная в двух последних приближениях  $\text{---}$ . Там, где нет разрешенных переходов во всех трех приближениях, — пустое поле, а прочерк означает, что соответствующие случаи не рассматривались. Под каждой активной линией указана ее поляризация. Линия, активная в одной поляризации в нулевом и первом приближении по  $\vec{k}$ , отмечена как дипольная. Приведенные таблицы являются своего рода эталонами симметрии и дают возможность легко определить представление обнаруженной на опыте спектральной линии.

Применим полученные результаты к анализу экситонных линий поглощения в кристалле закиси меди.

## § 2. Экситонный спектр в кристалле $\text{Cu}_2\text{O}$

В кристалле  $\text{Cu}_2\text{O}$  Гросс, Каплянский и Чжан Гуан-Инь [2] обнаружили две новые серии экситонных полос поглощения в голубой и синей областях спектра, а Носков, Зверев и Шур [3], исследуя фотомагнитоэлектрический эффект, обнаружили две новые зоны проводимости. Оба эксперимента подтверждают полученные ранее сведения [4, 5] о большом числе экситонных серий и сложной структуре зон в кристалле  $\text{Cu}_2\text{O}$ . Так как серии начинаются с  $n = 2$ , соответствующие электронные и дырочные зоны имеют одинаковую четность

Эллиот [6] объяснил происхождение ступенек поглощения в окрестности линии  $\lambda_0 = 6125 \text{ \AA}$  типа симметрии  $\Gamma_5^+$  комбинационным переходом на этот экситонный уровень с излучением или поглощением фонона решетки с импульсом  $\vec{k} = 0$  типа симметрии  $\Gamma_3^-$ . Мысль о комбинационном поглощении в ступеньках высказывалась также Горбанем.

Данные табл. 10 для  $\Gamma_5^+$  в большинстве случаев согласуются с экспериментом [7]. Из-за недостатка опытных данных ряд выводов теории еще не подтвержден. Из таблиц для уровней типа  $\Gamma_3^+$ ,  $\Gamma_5^+$  следует их возгорание в электрическом поле, что было предсказано в [4, 5].

Крайне интересными являются данные о поведении основных полос желтой серии в сильных магнитных полях и ориентированных деформациях [2]. В связи с этим в [1] были предложены и обсуждены две гипотезы. По-видимому, свет поглощают ионы меди, расположение и смещение которых при деформациях приводят к наблюдаемым явлениям.

Гросс, Захарченя и Канская [8] изучили поведение „побочных“ линий поглощения желтой серии в присутствии электрического поля. Однако сопоставление полученных ими результатов с данными табл. 1—10 (не прибегая к дополнительным гипотезам работы [1]), не позволило определить тип симметрии соответствующих энергетических уровней. Необходимо дальнейшее теоретическое и экспериментальное изучение этого вопроса.

В заключение выражаем благодарность К. Б. Толпыго за обсуждение и интерес к работе.

Поступило  
29.XII 1961 г

## ЛИТЕРАТУРА

1. С. А. Москаленко и А. И. Бобрышева, ФТТ, IV, вып. 7 (1962).
2. Е. Ф. Гросс, А. А. Каплянский, Б. П. Захарченя, В. Г. Агекян и Чжан Гуан-Инь. Доклады на II Всесоюзном совещании по фотоэлектрическим и оптическим явлениям в полупроводниках, ноябрь, 1961, Львов.
3. Л. П. Зверев, Н. М. Носков, М. Я. Шур, ФТТ, 3, вып. 11, 3556 (1961).
4. С. А. Москаленко, ФТТ, 2, вып. 8, 1755 (1960).
5. С. А. Москаленко, Журн. опт. и спектр., 9, вып. 3, 369 (1961).
6. R. J. Elliot, Phys. Rev., 124, № 2, 340 (1961).
7. Е. Ф. Гросс и А. А. Каплянский, ФТТ, 2, вып. 11, 2968 (1960).
8. Е. Ф. Гросс, Б. П. Захарченя, Л. М. Канская, ФТТ, 3, вып. 3, 972 (1961).

С. А. МОСКАЛЕНКО, А. И. БОБРЫШЕВА

## РЕГУЛИЛЕ ДЕ СЕЛЕКЦИЕ ШИ СПЕКТРУЛ ЕНЕРЖЕТИК АЛ ЕКСИТОНИЛОР. II

### Резумат

Се студиязэ нивелуриле енержетиче але екситонулуй ынтр'ун кристал кубик, супуа акциуней кымпурилоу ши деформацилоу ориентате. Нивелуриле пот авя орьшиче репрезентаре а группей де симетрие. Се дискуте пе скурт спектрул де абсорбцие ын кристалул  $\text{Cu}_2\text{O}$ .



Таблица 3

$\Gamma_4^-$	$P=0, E=0, H=0$	$\bar{P}_{II} \langle 1-10 \rangle$	$\bar{E}_{II} \langle 1-10 \rangle$	$\bar{H}_{II} \langle 1-10 \rangle$	$\bar{P}_{II} \langle 100 \rangle$	$\bar{E}_{II} \langle 100 \rangle$	$\bar{H}_{II} \langle 100 \rangle$	$\bar{P}_{II} \langle 111 \rangle$	$\bar{E}_{II} \langle 111 \rangle$	$\bar{H}_{II} \langle 111 \rangle$
$\bar{K}$	$\Gamma_4^-$	$\bar{E}_1 \bar{E}_2 \bar{E}_3 \bar{E}_4$	$\bar{E}_1 \bar{E}_2 \bar{E}_3 \bar{E}_4$	$\bar{E}_1 \bar{E}_2 \bar{E}_3 \bar{E}_4$	$\bar{\Delta}_1^- \bar{\Delta}_2^-$	$\bar{\Delta}_1^- \bar{\Delta}_2^-$	$\bar{\Delta}_1^- \bar{\Delta}_2^-$	$\bar{\Delta}_1^- \bar{\Delta}_2^-$	$\bar{\Delta}_1^- \bar{\Delta}_2^-$	$\bar{\Delta}_1^- \bar{\Delta}_2^-$
$\langle 100 \rangle$	$\langle 010 \rangle$ $\langle 001 \rangle$	—	—	—	$\langle 010 \rangle$ $\langle 001 \rangle$	$\langle 010 \rangle$ $\langle 001 \rangle$	$\langle 010 \rangle$ $\langle 001 \rangle$	—	—	—
$\langle 110 \rangle$	—	—	—	—	$\langle 01-1 \rangle$ $\langle 100 \rangle$	$\langle 01-1 \rangle$ $\langle 100 \rangle$	—	—	—	—
$\langle 1-10 \rangle$	—	$\langle 110 \rangle$ $\langle 001 \rangle$	$\langle 110 \rangle$ $\langle 001 \rangle$	$\langle 110 \rangle$ $\langle 001 \rangle$	—	—	—	$\langle 111 \rangle$ $\langle 11-2 \rangle$	$\langle 111 \rangle$ $\langle 11-2 \rangle$	$\langle 111 \rangle$ $\langle 11-2 \rangle$
$\langle 100 \rangle$	—	$\langle 1-10 \rangle$ $\langle 001 \rangle$	$\langle 1-10 \rangle$ $\langle 001 \rangle$	$\langle 1-10 \rangle$ $\langle 001 \rangle$	$\langle 100 \rangle$ $\langle 010 \rangle$	$\langle 100 \rangle$ $\langle 010 \rangle$	$\langle 100 \rangle$ $\langle 010 \rangle$	—	—	—
$\langle 111 \rangle$	$\langle 11-2 \rangle$ $\langle 1-10 \rangle$	$\langle 1-10 \rangle$ $\langle 11-2 \rangle$ $\langle 1-10 \rangle$	$\langle 1-10 \rangle$ $\langle 11-2 \rangle$ $\langle 1-10 \rangle$	$\langle 1-10 \rangle$ $\langle 11-2 \rangle$ $\langle 1-10 \rangle$	—	—	—	$\langle 11-2 \rangle$ $\langle 1-10 \rangle$	$\langle 11-2 \rangle$ $\langle 1-10 \rangle$	$\langle 11-2 \rangle$ $\langle 1-10 \rangle$
$\langle 11\bar{2} \rangle$	—	$\langle 1-10 \rangle$ $\langle 11-\sqrt{2} \rangle$	$\langle 1-10 \rangle$ $\langle 11-\sqrt{2} \rangle$	$\langle 1-10 \rangle$ $\langle 11-\sqrt{2} \rangle$	—	—	—	—	—	—

Таблица 4

$\Gamma_5^-$	$\bar{P}_{II} \langle 1-10 \rangle$	$\bar{E}_{II} \langle 1-10 \rangle$	$\bar{H}_{II} \langle 1-10 \rangle$	$\bar{P}_{II} \langle 100 \rangle$	$\bar{E}_{II} \langle 100 \rangle$	$\bar{H}_{II} \langle 100 \rangle$	$\bar{P}_{II} \langle 111 \rangle$	$\bar{E}_{II} \langle 111 \rangle$	$\bar{H}_{II} \langle 111 \rangle$
$\bar{K}$	$\Gamma_5^-$	$\bar{E}_1 \bar{E}_2 \bar{E}_3 \bar{E}_4$	$\bar{E}_1 \bar{E}_2 \bar{E}_3 \bar{E}_4$	$\bar{\Delta}_1^- \bar{\Delta}_2^-$	$\bar{\Delta}_1^- \bar{\Delta}_2^-$	$\bar{\Delta}_1^- \bar{\Delta}_2^-$	$\bar{\Delta}_1^- \bar{\Delta}_2^-$	$\bar{\Delta}_1^- \bar{\Delta}_2^-$	$\bar{\Delta}_1^- \bar{\Delta}_2^-$
$\langle 100 \rangle$	—	—	—	$\langle 001 \rangle$ $\langle 010 \rangle$	$\langle 001 \rangle$ $\langle 010 \rangle$	$\langle 010 \rangle$ $\langle 001 \rangle$	—	—	—
$\langle 110 \rangle$	—	—	—	$\langle 01-1 \rangle$ $\langle 100 \rangle$	$\langle 01-1 \rangle$ $\langle 100 \rangle$	—	—	—	—
$\langle 1-10 \rangle$	$\langle 110 \rangle$	$\langle 110 \rangle$	$\langle 110 \rangle$ $\langle 001 \rangle$	—	—	—	$\langle 11-2 \rangle$	$\langle 11-2 \rangle$ $\langle 111 \rangle$	$\langle 11-2 \rangle$ $\langle 111 \rangle$
$\langle 001 \rangle$	$\langle 1-10 \rangle$ $\langle 110 \rangle$	$\langle 1-10 \rangle$ $\langle 001 \rangle$	$\langle 1-10 \rangle$ $\langle 001 \rangle$	$\langle 100 \rangle$ $\langle 010 \rangle$	$\langle 100 \rangle$ $\langle 010 \rangle$	$\langle 010 \rangle$	—	—	—
$\langle 111 \rangle$	$\langle 1-10 \rangle$ $\langle 11-2 \rangle$ $\langle 1-10 \rangle$	$\langle 1-10 \rangle$ $\langle 11-2 \rangle$ $\langle 1-10 \rangle$	$\langle 1-10 \rangle$ $\langle 11-2 \rangle$ $\langle 1-10 \rangle$	—	—	—	$\langle 11-2 \rangle$ $\langle 1-10 \rangle$	$\langle 11-2 \rangle$ $\langle 1-10 \rangle$	$\langle 11-2 \rangle$ $\langle 1-10 \rangle$
$\langle 11\bar{2} \rangle$	$\langle 1-10 \rangle$ $\langle 11-\sqrt{2} \rangle$	$\langle 1-10 \rangle$ $\langle 11-\sqrt{2} \rangle$	$\langle 1-10 \rangle$ $\langle 11-\sqrt{2} \rangle$	—	—	—	—	—	—

Таблица 5

$\Gamma_3^+$	$P=0, E=0, H=0$	$\bar{P}  \langle 1-10 \rangle$	$\bar{E}  \langle 1-10 \rangle$	$\bar{H}  \langle 1-10 \rangle$	$\bar{E}  \langle 100 \rangle$	$\bar{H}  \langle 100 \rangle$	$\bar{P}  \langle 111 \rangle$	$\bar{E}  \langle 111 \rangle$	$\bar{H}  \langle 111 \rangle$						
$\bar{K}$	$\Gamma_3^+$	$E_1^+$	$E_4^+$	$E_1$	$E_4$	$B_1^+$	$B_2^+$	$\Delta_1$	$\Delta_2$	$\alpha_1^+$	$\alpha_2^+$	$\Lambda_3^+$	$\Lambda_3$	$\zeta_2^+$	$\zeta_3^+$
$\langle 111 \rangle$	-	-	-	-	$\langle 01-1 \rangle$ $\langle 100 \rangle$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
$\langle 1-10 \rangle$	-	$\langle 110 \rangle$	$\langle 110 \rangle$	$\langle 110 \rangle$	$\langle 110 \rangle$	$\langle 001 \rangle$	-	-	$\langle 111 \rangle$ $\langle 11-2 \rangle$	$\langle 111 \rangle$ $\langle 11-2 \rangle$	$\langle 111 \rangle$ $\langle 11-2 \rangle$	$\langle 111 \rangle$ $\langle 11-2 \rangle$	$\langle 111 \rangle$ $\langle 11-2 \rangle$	$\langle 111 \rangle$ $\langle 11-2 \rangle$	$\langle 111 \rangle$ $\langle 11-2 \rangle$
$\langle 110 \rangle$	$\downarrow$ $\langle 1-10 \rangle$	$\langle 1-10 \rangle$	$\langle 1-10 \rangle$	$\langle 1-10 \rangle$	$\langle 1-10 \rangle$	$\langle 001 \rangle$	-	-	-	-	-	-	-	-	-
$\langle 100 \rangle$	-	-	$\langle 110 \rangle$ $\langle 1-10 \rangle$	-	$\langle 100 \rangle$	$\langle 010 \rangle$	-	-	-	-	-	-	-	-	-
$\langle 111 \rangle$	$\downarrow$ $\langle 11-2 \rangle$ $\langle 1-10 \rangle$	$\langle 1-10 \rangle$ $\langle 11-2 \rangle$	$\langle 11-2 \rangle$ $\langle 1-10 \rangle$	-	-	-	$\langle 11-2 \rangle$ $\langle 1-10 \rangle$	$\langle 11-2 \rangle$ $\langle 1-10 \rangle$	$\langle 11-2 \rangle$ $\langle 1-10 \rangle$	$\langle 11-2 \rangle$ $\langle 1-10 \rangle$	$\langle 11-2 \rangle$ $\langle 1-10 \rangle$	$\langle 11-2 \rangle$ $\langle 1-10 \rangle$	$\langle 11-2 \rangle$ $\langle 1-10 \rangle$	$\langle 11-2 \rangle$ $\langle 1-10 \rangle$	$\langle 11-2 \rangle$ $\langle 1-10 \rangle$
$\langle 11\bar{2} \rangle$	$\downarrow$ $\langle 11-2 \rangle$ $\langle 1-10 \rangle$	$\langle 1-10 \rangle$ $\langle 11-2 \rangle$	$\langle 11-2 \rangle$ $\langle 1-10 \rangle$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

Таблица 6

$\Gamma_1^-$	$\bar{P}  \langle 1-10 \rangle$	$\bar{H}  \langle 1-10 \rangle$	$\bar{E}  \langle 100 \rangle$	$\bar{H}  \langle 100 \rangle$	$\bar{E}  \langle 111 \rangle$	$\bar{H}  \langle 111 \rangle$
$\bar{K}$	$E_2$	$B_1^-$	$\Delta_1$	$\alpha_1^-$	$\Lambda_2$	$\zeta_1^-$
$\langle 1-10 \rangle$	-	-	-	-	$\langle 11-2 \rangle$	$\langle 111 \rangle$
$\langle 110 \rangle$	$\langle 001 \rangle$	$\langle 1-10 \rangle$	-	-	-	-
$\langle 001 \rangle$	$\langle 110 \rangle$	-	$\langle 100 \rangle$	$\langle 100 \rangle$	-	-
$\langle 111 \rangle$	$\langle 11-2 \rangle$	-	-	-	-	-
$\langle 1\bar{1}\bar{2} \rangle$	$\downarrow$	-	-	-	-	-

Таблица 7

$\Gamma_2^+$	$\bar{P}  \langle 1-10 \rangle$	$\bar{E}  \langle 1-10 \rangle$	$\bar{H}  \langle 1-10 \rangle$	$\bar{E}  \langle 100 \rangle$	$\bar{H}  \langle 100 \rangle$	$\bar{E}  \langle 111 \rangle$	$\bar{H}  \langle 111 \rangle$
$\bar{K}$	$E_1^+$	$E_1$	$B_1^+$	$\Delta_1$	$\alpha_1^+$	$\Lambda_1$	$\zeta_1^+$
$\langle 1-10 \rangle$	-	-	-	-	-	$\langle 111 \rangle$	$\langle 11-2 \rangle$
$\langle 110 \rangle$	-	$\langle 1-10 \rangle$	$\langle 001 \rangle$	-	-	-	-
$\langle 001 \rangle$	-	$\langle 1-10 \rangle$	-	$\langle 100 \rangle$	$\langle 010 \rangle$	-	-
$\langle 111 \rangle$	$\langle 11-2 \rangle$	$\langle 11-2 \rangle$ $\langle 1-10 \rangle$	-	-	-	-	-
$\langle 11\bar{2} \rangle$	$\downarrow$ $\langle 11-2 \rangle$ $\langle 1-10 \rangle$	$\langle 11-2 \rangle$ $\langle 1-10 \rangle$	-	-	-	-	-

Таблица 8

$\Gamma_2^+$	$\bar{P}  \langle 1-10 \rangle$	$\bar{E}  \langle 1-10 \rangle$	$\bar{H}  \langle 1-10 \rangle$	$\bar{E}  \langle 100 \rangle$	$\bar{P}  \langle 111 \rangle$	$\bar{E}  \langle 111 \rangle$	$\bar{H}  \langle 111 \rangle$
$\bar{K}$	$E_4^+$	$E_4$	$B_2^+$	$\alpha_2^+$	$\Lambda_2^+$	$\Lambda_2$	$\zeta_1^+$
$\langle 1-10 \rangle$	$\langle 110 \rangle$	$\langle 110 \rangle$	$\langle 110 \rangle$ $\langle 001 \rangle$	-	$\langle 11-2 \rangle$	$\langle 11-2 \rangle$	$\langle 11-2 \rangle$
$\langle 110 \rangle$	$\langle 1-10 \rangle$	$\langle 1-10 \rangle$	$\langle 1-10 \rangle$	-	-	-	-
$\langle 001 \rangle$	-	$\langle 110 \rangle$	-	$\langle 010 \rangle$	-	-	-
$\langle 111 \rangle$	$\langle 1-10 \rangle$	$\langle 11-2 \rangle$ $\langle 1-10 \rangle$	-	-	-	-	-
$\langle 11\bar{2} \rangle$	$\downarrow$ $\langle 1-10 \rangle$	$\langle 11-2 \rangle$ $\langle 1-10 \rangle$	-	-	-	-	-

Таблица 9

$\Gamma_3^-$	$\bar{P}  \langle 1-10 \rangle$	$\bar{E}  \langle 1-10 \rangle$	$\bar{H}  \langle 1-10 \rangle$	$\bar{E}  \langle 100 \rangle$	$\bar{H}  \langle 100 \rangle$	$\bar{P}  \langle 111 \rangle$	$\bar{E}  \langle 111 \rangle$	$\bar{H}  \langle 111 \rangle$	
$\bar{K}$	$\varepsilon_2^- \varepsilon_3^-$	$\varepsilon_3^-$	$\varepsilon_2^-$	$\nu_2^- \nu_1^-$	$\Delta_1^- \Delta_2^-$	$\alpha_1^- \alpha_2^-$	$\lambda_3^-$	$\lambda_3^-$	$\nu_2^- \nu_3^-$
$\langle 1-10 \rangle$	 $\langle 001 \rangle$	 $\langle 001 \rangle$	 $\langle 110 \rangle$   $\langle 001 \rangle$	-	-	 $\langle 11-2 \rangle$	 $\langle 111 \rangle$   $\langle 11-2 \rangle$	 $\langle 11-2 \rangle$	
$\langle 110 \rangle$	 $\langle 001 \rangle$	 $\langle 001 \rangle$	 $\langle 001 \rangle$   $\langle 1-10 \rangle$	-	-	-	-	-	
$\langle 001 \rangle$	-	 $\langle 1-10 \rangle$   $\langle 110 \rangle$	-	 $\langle 0-10 \rangle$	 $\langle 100 \rangle$	-	-	-	
$\langle 111 \rangle$	 $\langle 11-2 \rangle$	 $\langle 11-2 \rangle$   $\langle 1-10 \rangle$	-	-	-	 $\langle 11-2 \rangle$   $\langle 1-10 \rangle$	 $\langle 11-2 \rangle$   $\langle 1-10 \rangle$	 $\langle 11-2 \rangle$   $\langle 1-10 \rangle$	
$\langle 11\bar{2} \rangle$	 $\langle 11-1\bar{2} \rangle$	 $\langle 11-1\bar{2} \rangle$   $\langle 1-10 \rangle$	-	-	-	-	-	-	

Таблица 10

$\Gamma_2^-$	$\bar{P}  \langle 1-10 \rangle$	$\bar{E}  \langle 1-10 \rangle$	$\bar{H}  \langle 1-10 \rangle$	$\bar{P}  \langle 111 \rangle$	$\bar{E}  \langle 111 \rangle$	$\bar{H}  \langle 111 \rangle$
$\bar{K}$	$\varepsilon_3^-$	$\varepsilon_3^-$	$\nu_2^-$	$\lambda_1^-$	$\lambda_1^-$	$\nu_1^-$
$\langle 01-1 \rangle$	 $\langle 001 \rangle$	 $\langle 001 \rangle$	 $\langle 110 \rangle$   $\langle 001 \rangle$	 $\langle 111 \rangle$	 $\langle 111 \rangle$	 $\langle 111 \rangle$
$\langle 011 \rangle$	 $\langle 001 \rangle$	 $\langle 001 \rangle$	 $\langle 001 \rangle$	-	-	-
$\langle 010 \rangle$	-	 $\langle 1-10 \rangle$	-	-	-	-
$\langle 111 \rangle$	 $\langle 11-2 \rangle$	 $\langle 11-2 \rangle$   $\langle 1-10 \rangle$	-	-	-	-
$\langle 211 \rangle$	 $\langle 11-1\bar{2} \rangle$	 $\langle 11-1\bar{2} \rangle$   $\langle 1-10 \rangle$	-	-	-	-

М. Е. ПАЛИСТРАНТ

## К ТЕОРИИ БЕЗЫЗЛУЧАТЕЛЬНЫХ ПЕРЕХОДОВ В F-ЦЕНТРЕ

Известно, что в локальных центрах могут происходить квантовые переходы без внешнего возмущения вследствие нестационарности состояний. Расчет вероятности такого процесса, называемого безызлучательным переходом, связан с вычислением двойной суммы матричных элементов "оператора неадиабатичности". Существуют различные методы вычисления этих сумм. Одним из них является метод фейнмановского операторного исчисления Лэкса [1], основанный на введении характеристической функции  $I(t)$ :

$$I(t) = \int_{-\infty}^{\infty} I(\nu) e^{-2\pi i \nu t} d\nu,$$

$$I(\nu) = \int_{-\infty}^{\infty} I(t) e^{2\pi i \nu t} dt, \quad (1)$$

где  $I(0)$  — величина, пропорциональная вероятности безызлучательного перехода.

Согласно [1],

$$I(t) = \langle M_{ba}^+(q) e^{-iH_b t/\hbar} M_{ba}(q) e^{iH_a t/\hbar} \rangle, \quad (2)$$

где  $H_a$  и  $H_b$  — фоновые гамильтонианы, соответствующие начальному и конечному состояниям электрона;

$M_{ba}(q)$  — матричный элемент электронного перехода из состояния  $a$  в  $b$ .

Символ  $\langle \dots \rangle$  означает статистическое усреднение по начальным состояниям гамильтониана  $H_a$ .

Главная задача состоит в вычислении характеристической функции  $I(t)$ .

С. В. Тябликов и В. А. Москаленко [2] развили метод вычисления (1), основанный на использовании квантовых функций Грина. При помощи этого метода в нашей работе [3] получены точные значения первых четырех моментов спектральной кривой  $F$ -полосы. Расчет в [3] оказался упрощенным благодаря введению функций Грина, являющихся линейной комбинацией функций, введенных в [2].

В настоящей статье, являющейся развитием нашей работы [3], методом квантовых функций Грина проводится оценка вероятности безызлучательного перехода с учетом изменения положений равновесия и частот фононов при электронном переходе. Воспользуемся всеми обозначениями [3].

Для рассматриваемой нами задачи хорошим приближением является линейная форма матричного элемента  $M_{ba}(q)$  по бозе-амплитудам:

$$M_{ba} = \sum_{\omega} (M_{\omega} X_{\omega} + N_{\omega} \Pi_{\omega}), \quad (3)$$

где

$$X_{\omega} = \frac{1}{\sqrt{2}} (b_{\omega} + b_{-\omega}^+), \quad (4)$$

$$\Pi_{\omega} = \frac{i}{\sqrt{2}} (b_{\omega}^+ - b_{-\omega}).$$

В [3] было получено

$$H_a - H_b = \Delta + V, \quad (5)$$

где  $\Delta$  — некоторая постоянная,

$$V = \sum_{\omega} V_{\omega} X_{\omega} + \sum_{\omega\omega'} A_{\omega\omega'} X_{\omega} X_{\omega'}. \quad (6)$$

Разность  $H_a - H_b$  обусловлена изменением положений равновесия и частот фононов при электронном переходе.

Подставляя в (2) формулу (3), получим

$$I(t) = \sum_{\omega\omega'} \left\{ M_{-\omega}^* M_{\omega'} F_1(\omega\omega't) + N_{-\omega}^* N_{\omega'} F_2(\omega\omega't) + M_{-\omega}^* N_{\omega'} G_1(\omega\omega't) + N_{-\omega}^* M_{\omega'} G_2(\omega\omega't) \right\}. \quad (7)$$

В (7) введены обозначения:

$$\begin{aligned} F_1(\omega\omega't) &= \langle X_{\omega}(t) U(t) X_{\omega'}(0) \rangle, \\ F_2(\omega\omega't) &= \langle \Pi_{\omega}(t) U(t) \Pi_{\omega'}(0) \rangle, \\ G_1(\omega\omega't) &= \langle X_{\omega}(t) U(t) \Pi_{\omega'}(0) \rangle, \\ G_2(\omega\omega't) &= \langle \Pi_{\omega}(t) U(t) X_{\omega'}(0) \rangle, \end{aligned} \quad (8)$$

где

$$U(t) = e^{-i\Delta t/\hbar} e^{iH_a t/\hbar} e^{-iH_b t/\hbar} = e^{-i\Delta t/\hbar} U'(t), \quad (9)$$

$$\left. \begin{aligned} X_{\omega}(t) &= e^{iH_a t/\hbar} X_{\omega} e^{-iH_a t/\hbar} \\ \Pi_{\omega}(t) &= e^{iH_a t/\hbar} \Pi_{\omega} e^{-iH_a t/\hbar} \end{aligned} \right\} \quad (10)$$

Таким образом, дальнейший расчет сводится к вычислениям величин (8).

Введем следующие функции Грина:

$$\varphi(\omega\tau) = \frac{\langle P\{X_{\omega}(\tau)U'_a(t)\} \rangle}{\langle U'_a(t) \rangle},$$

$$\psi(\omega\tau) = \frac{\langle P\{\Pi_{\omega}(\tau)U'_a(t)\} \rangle}{\langle U'_a(t) \rangle},$$

$$D(\omega\tau \omega'\tau') = \frac{\langle P\{X_{\omega}(\tau)X_{\omega'}(\tau')U'_a(t)\} \rangle}{\langle U'_a(t) \rangle},$$

$$D_1(\omega\tau \omega'\tau') = \frac{\langle P\{\Pi_{\omega}(\tau)\Pi_{\omega'}(\tau')U'_a(t)\} \rangle}{\langle U'_a(t) \rangle}, \quad (11)$$

$$D_2(\omega\tau \omega'\tau') = \frac{\langle P\{X_{\omega}(\tau)\Pi_{\omega'}(\tau')U'_a(t)\} \rangle}{\langle U'_a(t) \rangle},$$

где

$$U'_a(t) = P \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t \alpha v(\tau) d\tau\right). \quad (12)$$

Легко видеть, что между (8) и (11) можно установить соотношения

$$\begin{aligned} F_1(\omega\omega't) &= D(\omega t \omega' 0) S(t), \\ F_2(\omega\omega't) &= D_1(\omega t \omega' 0) S(t), \\ G_1(\omega\omega't) &= D_2(\omega t \omega' 0) S(t), \\ G_2(\omega\omega't) &= D_2(\omega 0 \omega' t) S(t), \end{aligned} \quad (13)$$

где

$$S(t) = \langle U(t) \rangle. \quad (14)$$

Воспользовавшись хронологической теоремой Вика, а также формулами (12) и (6), получим уравнения для функций Грина:

$$\begin{aligned} \psi(\omega\tau) &= -\frac{i\alpha}{\hbar} \int_0^t d\tau_1 [V_{\omega} d_1(\omega\tau_1 \omega\tau) + \sum_{\omega_1} \bar{A}_{\omega\omega_1} d_1(\omega\tau_1 \omega\tau) \varphi(\omega_1\tau_1)], \\ D_1(\omega\tau \omega'\tau') &= d_0(\omega\tau \omega'\tau') - \frac{i\alpha}{\hbar} \int_0^t d\tau_1 [V_{\omega} d_1(\omega\tau_1 \omega\tau) \psi(\omega'\tau') + \\ &\quad + \sum_{\omega_1} \bar{A}_{\omega\omega_1} d_1(\omega\tau_1 \omega\tau) D_2(\omega_1\tau_1 \omega'\tau'), \\ D_2(\omega\tau \omega'\tau') &= d_1(\omega\tau \omega'\tau') - \frac{i\alpha}{\hbar} \int_0^t d\tau_1 [V_{-\omega} d_0(\omega\tau - \omega\tau_1) \cdot \\ &\quad \cdot \psi(\omega'\tau') + \sum_{\omega_1} \bar{A}_{-\omega\omega_1} d_0(\omega\tau - \omega\tau_1) D_2(\omega_1\tau_1 \omega'\tau')]. \end{aligned} \quad (15)$$

Уравнения для  $\varphi(\omega\tau)$  и  $D(\omega\tau\omega'\tau')$  приведены в [3].

В (15)  $d_0(\omega\tau\omega_1\tau_1)$  и  $d_1(\omega\tau\omega_1\tau_1)$  определяются по формулам

$$d_0(\omega\tau\omega_1\tau_1) = D(\omega\tau\omega_1\tau_1) \Big|_{-0} = D_1(\omega\tau\omega_1\tau_1) \Big|_{-0}, \quad (\text{см. [3]})$$

$$d_1(\omega\tau\omega_1\tau_1) = D_2(\omega\tau\omega_1\tau_1) \Big|_{-0} =$$

$$= \frac{i}{2} \delta_{\omega\omega_1} \{ [(1 + \bar{n}_\omega) e^{i\Omega_\omega(\tau_1 - \tau)} - \bar{n}_\omega e^{-i\Omega_\omega(\tau_1 - \tau)}] \Theta(\tau - \tau_1) + \\ + [\bar{n}_\omega e^{i\Omega_\omega(\tau_1 - \tau)} - (\bar{n}_\omega + 1) e^{-i\Omega_\omega(\tau_1 - \tau)}] \Theta(\tau_1 - \tau) \}. \quad (16)$$

Уравнения (15) можно свести к более простым, если искать решение в виде:

$$D_1(\omega\tau\omega'\tau') = \psi(\omega\tau)\psi(\omega'\tau') + \Delta_1(\omega\tau\omega'\tau'), \quad (17)$$

$$D_2(\omega\tau\omega'\tau') = \varphi(\omega\tau)\psi(\omega'\tau') + \Delta_2(\omega\tau\omega'\tau').$$

Подстановка (17) в (15) дает

$$\Delta_1(\omega\tau\omega'\tau') = d_0(\omega\tau\omega'\tau') - \frac{i\alpha}{\hbar} \int_0^t \sum_{\omega_1} \bar{A}_{\omega\omega_1} d_1(\omega\tau_1\omega\tau) \Delta_2(\omega_1\tau_1\omega'\tau') d\tau_1,$$

$$\Delta_2(\omega\tau\omega'\tau') = d_1(\omega\tau\omega'\tau') - \frac{i\alpha}{\hbar} \int_0^t d\tau_1 \sum_{\omega_1} \bar{A}_{-\omega\omega_1} d_0(\omega\tau - \omega\tau_1) \cdot \\ \cdot \Delta_2(\omega_1\tau_1\omega'\tau'). \quad (18)$$

В предположении малого  $t$  приближенное решение интегральных уравнений для  $\psi$ ,  $\Delta_1$ ,  $\Delta_2$  можно найти методом итераций. С точностью до двойного интегрирования включительно имеем:

$$\psi^{(2)}(\omega\tau) = -\frac{i\alpha}{\hbar} \int_0^t d\tau_1 V_\omega d_1(\omega\tau_1\omega\tau) + \left(-\frac{i\alpha}{\hbar}\right)^2 \int_0^t d\tau_1 \int_0^t d\tau_2 \sum_{\omega_1} \bar{A}_{\omega\omega_1} \cdot \\ \cdot V_{-\omega_1} d_1(\omega\tau_1\omega\tau) d_0(\omega_1\tau_1 - \omega_1\tau_2),$$

$$\Delta_1^{(2)}(\omega\tau\omega'\tau') = d_0(\omega\tau\omega'\tau') - \frac{i\alpha}{\hbar} \int_0^t d\tau_1 \bar{A}_{\omega\omega'} d_1(\omega\tau_1\omega\tau) d_1(\omega'\tau_1\omega'\tau') +$$

$$+ \left(-\frac{i\alpha}{\hbar}\right)^2 \int_0^t d\tau_1 \int_0^t d\tau_2 \sum_{\omega_1} \bar{A}_{\omega\omega_1} \bar{A}_{-\omega_1\omega'} d_1(\omega\tau_1\omega\tau) d_0(\omega_1\tau_1 - \omega_1\tau_2) d_1(\omega'\tau_2\omega'\tau'),$$

$$\Delta_2^{(2)}(\omega\tau\omega'\tau') = d_1(\omega\tau\omega'\tau') - \frac{i\alpha}{\hbar} \int_0^t d\tau_1 \bar{A}_{-\omega\omega'} d_0(\omega\tau - \omega\tau_1) \cdot$$

$$\cdot d_1(\omega'\tau_1\omega'\tau') + \left(-\frac{i\alpha}{\hbar}\right)^2 \int_0^t d\tau_1 \int_0^t d\tau_2 \sum_{\omega_1} \bar{A}_{-\omega\omega_1} \bar{A}_{-\omega_1\omega'} \cdot \\ \cdot d_0(\omega\tau - \omega\tau_1) d_0(\omega_1\tau_1 - \omega_1\tau_2) d_1(\omega'\tau_2\omega'\tau'). \quad (19)$$

На основании (7), (13), (17) и (19), а также выражения для  $D(\omega\tau\omega'0)$  (см. [3]) имеем:

$$I(t) = K(t) S(t) = [K_1(t) + K_2(t)] S(t), \quad (20)$$

где

$$K_1(t) = -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^t d\tau_1 \int_0^t d\tau_2 \sum_{\omega\omega'} \{ M_{-\omega}^* M_{\omega'} d_0(\omega\tau - \omega\tau_1) d_0(\omega'0 - \omega'\tau_2) + \\ + N_{-\omega}^* N_{\omega'} V_\omega V_{\omega'} d_1(\omega\tau_1\omega\tau) d_1(\omega'\tau_2\omega'0) + M_{-\omega}^* N_{\omega'} V_\omega^* V_{\omega'} \cdot \\ \cdot d_0(\omega\tau - \omega\tau_1) d_1(\omega'\tau_2\omega'0) + M_{\omega'} N_{-\omega}^* V_{\omega'}^* V_\omega d_0(\omega'0 - \omega'\tau_1) d_1(\omega\tau_2\omega\tau) \}, \\ K_2(t) = \sum_{\omega} [ (|M_\omega|^2 + |N_\omega|^2) d_0(\omega t, -\omega 0) + (M_{-\omega}^* N_\omega - M_\omega N_{-\omega}^*) \cdot$$

$$\cdot d_1(\omega t\omega 0) ] - \frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau_1 \sum_{\omega\omega'} \{ M_{-\omega}^* M_{\omega'} \bar{A}_{\omega\omega'} d_0(\omega t, -\omega\tau_1) \cdot \\ \cdot d_0(\omega'0, -\omega'\tau_1) + N_{-\omega}^* N_{\omega'} \bar{A}_{\omega\omega'} d_1(\omega\tau_1\omega\tau) d_1(\omega'\tau_1\omega'0) + \\ + M_{-\omega}^* N_{\omega'} \bar{A}_{-\omega\omega'} d_0(\omega t, -\omega\tau_1) d_1(\omega'\tau_1\omega'0) + M_{\omega'} N_{-\omega}^* \bar{A}_{-\omega'\omega} \cdot \\ \cdot d_0(\omega'0 - \omega'\tau_1) d_1(\omega\tau_1\omega\tau) \} - \\ - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t d\tau_1 \int_0^t d\tau_2 \sum_{\omega\omega'\omega_1} d_0(\omega_1\tau_1 - \omega_1\tau_2) \{ M_{-\omega}^* M_{\omega'} \bar{A}_{\omega'\omega_1} \bar{A}_{-\omega\omega_1} \cdot \\ \cdot d_0(\omega'0, -\omega'\tau_2) d_0(\omega t, -\omega\tau_1) + N_{-\omega}^* N_{\omega'} \bar{A}_{\omega\omega_1} \bar{A}_{-\omega_1\omega'} d_1(\omega\tau_1\omega\tau) \cdot \\ \cdot d_1(\omega'\tau_2\omega'0) + M_{-\omega}^* N_{\omega'} \bar{A}_{-\omega\omega_1} \bar{A}_{-\omega_1\omega'} d_0(\omega t, -\omega\tau_1) d_1(\omega'\tau_2\omega'0) + \\ + M_{\omega'} N_{-\omega}^* \bar{A}_{-\omega'\omega_1} \bar{A}_{-\omega_1\omega} d_0(\omega'0 - \omega'\tau_1) d_1(\omega\tau_2\omega\tau) \}, \quad (21)$$

$$S(t) = e^{f(t) - i\Delta t/\hbar}. \quad (22)$$

Вычисление функции  $f(t)$ , фигурирующей в (22), проведено в [3]. Ввиду его громоздкости, результат здесь не приводится. Формулы (1), (20) и (22) дают

$$I(0) = \int_{-\infty}^{\infty} K(t) e^{f(t) - i\Delta t/\hbar} dt. \quad (23)$$

Следуя работе [2], разложим  $K(t)$  и  $f(t)$  в ряд по степеням  $t$  с точностью до членов второго порядка, затем выполним интегрирование в (23). В результате получим:

$$I(0) = \frac{2\pi}{|f''(0)|} \left\{ K(0) - \frac{K'(0)}{f''(0)} \left( f'(0) - \frac{i\Delta}{\hbar} \right) + \frac{1}{2} K''(0) \cdot \left[ \left( \frac{f'(0) - i\Delta/\hbar}{f''(0)} \right)^2 - \frac{1}{f''(0)} \right] \right\} \exp \left\{ -\frac{(f'(0) - i\Delta/\hbar)^2}{2f''(0)} \right\}, \quad (24)$$

где

$$f'(0) = -\frac{i}{2\hbar} \sum_{\omega} A_{\omega, -\omega} (2\bar{n}_{\omega} + 1),$$

$$f''(0) = -\frac{1}{2\hbar^2} \left\{ \sum_{\omega} |V_{\omega}|^2 (2\bar{n}_{\omega} + 1) + \sum_{\omega\omega'} |A_{\omega\omega'}|^2 (2\bar{n}_{\omega} + 1)(2\bar{n}_{\omega'} + 1), \right.$$

$$K(0) = \frac{1}{2} \sum_{\omega} \left\{ (|M_{\omega}|^2 + |N_{\omega}|^2) (2\bar{n}_{\omega} + 1) + i (M_{-\omega}^* N_{\omega} - M_{\omega} N_{-\omega}^*) \right\};$$

$$K'(0) = -\frac{i}{2} \sum_{\omega} \left\{ (|M_{\omega}|^2 + |N_{\omega}|^2) \Omega_{\omega} + i (M_{-\omega}^* N_{\omega} - M_{\omega} N_{-\omega}^*) \cdot \right.$$

$$\left. (2\bar{n}_{\omega} + 1) \Omega_{\omega} \right\} - \frac{i}{2\hbar} \sum_{\omega\omega'} \left\{ M_{-\omega}^* M_{\omega'} A_{\omega\omega'}^* (2\bar{n}_{\omega} + 1) (2\bar{n}_{\omega'} + 1) + \right.$$

$$\left. + N_{-\omega}^* N_{\omega'} A_{\omega\omega'} + i (M_{-\omega}^* N_{\omega'} - M_{\omega} N_{-\omega'}^*) A_{-\omega\omega'} (2\bar{n}_{\omega} + 1) \right\},$$

$$K''(0) = -\frac{1}{2} \sum_{\omega} \left\{ (|M_{\omega}|^2 + |N_{\omega}|^2) (2\bar{n}_{\omega} + 1) \Omega_{\omega}^2 + i (M_{-\omega}^* N_{\omega'} - M_{\omega} N_{-\omega}^*) \Omega_{\omega}^2 \right\} -$$

$$-\frac{1}{2\hbar} \sum_{\omega\omega'} \left\{ M_{-\omega}^* M_{\omega'} A_{\omega\omega'}^* [(2\bar{n}_{\omega} + 1) \Omega_{\omega'} + (2\bar{n}_{\omega'} + 1) \Omega_{\omega}] + \right.$$

$$\left. + N_{-\omega}^* N_{\omega'} A_{\omega\omega'} [(2\bar{n}_{\omega'} + 1) \Omega_{\omega'} + (2\bar{n}_{\omega} + 1) \Omega_{\omega}] + i (M_{-\omega}^* N_{\omega'} - \right.$$

$$\left. - M_{\omega} N_{-\omega'}^*) A_{-\omega\omega'} [(2\bar{n}_{\omega} + 1) (2\bar{n}_{\omega'} + 1) \Omega_{\omega'} + \Omega_{\omega}] \right\} -$$

$$-\frac{1}{2\hbar^2} \sum_{\omega\omega'} \left\{ M_{-\omega}^* M_{\omega'} V_{\omega}^* V_{\omega'}^* (2\bar{n}_{\omega} + 1) (2\bar{n}_{\omega'} + 1) + N_{-\omega}^* N_{\omega'} V_{\omega} V_{\omega'} + \right.$$

$$\left. + i (M_{-\omega}^* N_{\omega'} - M_{\omega} N_{-\omega'}^*) V_{\omega}^* V_{\omega'} (2\bar{n}_{\omega} + 1) \right\} -$$

$$-\frac{1}{\hbar^2} \sum_{\omega\omega_1\omega_2} \left\{ M_{-\omega}^* M_{\omega_1} A_{\omega_1\omega_2}^* A_{-\omega\omega_2} (2\bar{n}_{\omega} + 1) (2\bar{n}_{\omega_1} + 1) (2n_{\omega_2} + 1) + \right.$$

$$\left. + N_{-\omega}^* N_{\omega_1} A_{\omega_1\omega_2} A_{-\omega_1\omega_2} (2\bar{n}_{\omega_1} + 1) + \right.$$

$$\left. + i (M_{-\omega}^* N_{\omega_1} - M_{\omega} N_{-\omega_1}^*) A_{-\omega_1\omega_2} A_{-\omega_1\omega_2} (2\bar{n}_{\omega} + 1) (2n_{\omega_1} + 1) \right\}. \quad (25)$$

Приведенная приближенная оценка величины  $I(0)$ , определяющей вероятность безызлучательного перехода, возможна благодаря сильному влиянию электронно-фононного взаимодействия на  $F$ -центры.

В самом деле, полуширина оптических полос  $F$ -центров в ионных кристаллах при не очень низких температурах велика и, как известно, определяется величиной  $[-\hbar^2 f''(0)]^{1/2}$ . Ввиду больших значений  $|f''(0)|$  можно считать, что основной вклад в (23) дает область малых  $t$ .

Величины  $K(0)$ ,  $K'(0)$ ,  $K''(0)$ , а также  $f'(0)$  и  $f''(0)$  значительно упрощаются, если исключить из рассмотрения эффект изменения частот фононов при электронном переходе ( $A_{\omega\omega'} = 0$ ).

В заключение выражаю благодарность В. А. Москаленко за руководство темой.

Поступило  
10.1.1962 г.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. M. Lax, Journ. chem. phys., 20, 1752 (1952). Перевод ПФП, стр. 407.
2. С. В. Тябликов и В. А. Москаленко. Труды Матем. ин-та им. В. А. Стеклова, LXIV, 267 (1961).
3. М. Е. Палистрант, Известия АН МССР, № 10(88), 48 (1961).

ПАЛИСТРАНТ М. Е.

#### АСУПРА ТЕОРИЕЙ ТРАНЗИЦИЛОР ТЕРМИЧЕ ЫН ЦЕНТРУЛ $F$

#### Резумат

Апликынд метода функцилор квантиче але луй Грин се студиязэ транзициле термиче Ын Центрул  $F$ , луынд Ын консидерацье скимбаря позицилор де екилибру, прекум ши а фреквенцей фононилор Ын тимпул транзицией електрониче. Ау фост обцинуте екуациле пентру функциле квантиче але луй Грин ши с'а гэсит солуция лор апроксимативэ, чея че а дат посибилитате де а детермина валора апроксимативэ а пробабилитэций транзицилор термиче.



Ю. С. БОЯРСКАЯ, М. И. ВАЛЬКОВСКАЯ

О СВЯЗИ УПРУГОГО ВОССТАНОВЛЕНИЯ ОТПЕЧАТКОВ  
С МИКРОТВЕРДОСТЬЮ ВЕЩЕСТВА

## 1. Введение

Изучение упругого восстановления отпечатков, получаемых при измерении микротвердости, показало, что для некоторых веществ оно практически отсутствует (NaCl), для других же достигает одного (LiF) или нескольких микрон (стекло, кварц) [1]. На основании этого было высказано мнение, что упругое восстановление зависит от микротвердости вещества, возрастая с ростом последней. Эту закономерность, грубо говоря, можно объяснить следующим образом.

Вдавливание наконечника в вещество под действием нагрузки прекращается тогда, когда напряжения, возникающие в веществе при его деформировании, уравновесят приложенную силу. Чем больше эти напряжения, тем меньший отпечаток получается при данной нагрузке, т. е. тем больше микротвердость вещества. С другой стороны, естественно считать, что упругое восстановление отпечатков тем больше, чем больше напряжения имеются в веществе при вдавлении наконечника. Однако можно предположить, что из общего правила (упругое восстановление больше для веществ с большей твердостью) могут быть исключения. В самом деле, микротвердость зависит как от упругих, так и от пластичных свойств вещества, а упругое восстановление определяется лишь упругой деформацией, имеющейся в веществе при вдавленном наконечнике. Поэтому у одного вещества с большей микротвердостью, но иными упругими свойствами, чем у другого вещества с меньшей микротвердостью, упругое восстановление может оказаться меньшим, чем у второго.

В связи со сказанным представлялось целесообразным изучить упругое восстановление на ряде веществ с различной микротвердостью и разными упругими свойствами. Это и является содержанием настоящей работы.

## 2. Экспериментальное определение упругого восстановления отпечатков

Измерение упругого восстановления отпечатков на ряде прозрачных кристаллов производилось прямым методом, описанным ранее [1]. Результаты измерений содержатся в табл. 1, где для сравнения приведены данные по упругому восстановлению в щелочно-галонидных

кристаллах [1, 2, 3, 4], стекле и кварце [1]. В таблице приняты следующие обозначения:  $H$  — микротвердость,  $b_0$  — размер стороны невосстановленного отпечатка,  $\Delta b_0$  — упругое восстановление стороны отпечатка в ее центре. Так как упругое восстановление стороны зависит от ее величины [1], то измерение  $\Delta b_0$  для разных веществ производилось на отпечатках примерно одинаковых размеров. Только для самых твердых веществ — топаза и рубина измерение оказалось возможным провести лишь для небольших отпечатков (9, 2 и 10  $\mu$  соответственно). Однако на основании этих данных и предположения, что для рубина и топаза  $\Delta b_0$  возрастает пропорционально  $b_0$  так же, как это было установлено для стекла и кварца [1], оказалось возможным определить  $\Delta b_0$  для топаза и рубина при  $b_0=18,8 \mu$ . Данные этого подсчета отмечены в таблице звездочками в отличие от результатов, полученных непосредственным измерением.

Таблица 1

	Вещество	Исследуемая грань	$H$ , кг/мм <sup>2</sup>	$b_0$ , $\mu$	$\Delta b_0$ , $\mu$
I	Сильвин	(100)	11	18,8	Отсутствует
	Бромистый калий	(100)	13	18,8	.
	Каменная соль	(100)	20	18,8	.
II	Сегнетова соль	(001)	74	18,8	0,6
	Фтористый литий	(100)	115	20,0	0,9
	Барит	(010)	127	12,3 17,8	0,3 0,4
	Кальцит	(11 $\bar{2}$ 0)	189	14,3 18,5	0,5 0,1
	Флюорит	(111)	225	17,4 21,6 28,1	0,5 0,4 0,3
III	Стекло	—	500	19,2	5,1
	Кварц	Ориентация неизвестна	1200	18,3	5,5
	Топаз	(001)	1400	9,2 18,8	0,98 $\approx$ 1,0 2,9*
	Рубин	Ориентация неизвестна	2900	10,0 18,8	0,95 $\approx$ 1,0 2,8*

Микротвердость исследуемых веществ измерялась на приборе ПМТ-3. Значения  $\Delta b_0$ , приведенные в таблице, являются средними арифметическими из результатов измерений нескольких десятков отпечатков. Для рубина же и топаза измерялось до 100 отпечатков, так как при небольших отпечатках получается больший разброс значений  $\Delta b_0$ . Ошибка измерения  $\Delta b_0$  примерно 0,5  $\mu$ .

Как видно из таблицы, все исследованные вещества можно разделить на три группы: I — мягкие ( $H = 11 \div 20 \text{ кг/мм}^2$ ); II — вещества со средней твердостью ( $H = 74 \div 225 \text{ кг/мм}^2$ ) и III — твердые ( $H = 500 \div 2900 \text{ кг/мм}^2$ ). У веществ первой группы упругое восстановление отсутствует; у веществ второй группы оно есть, но мало и лежит, за исключением фтористого лития, в пределах ошибок опыта. Вещества третьей группы обладают упругим восстановлением, лежащим за пределами ошибок измерений и достигающим нескольких микрон. Таким образом, для веществ разных групп, различие между твердостями которых значительно, выполняется замеченная ранее закономерность: упругое восстановление возрастает с ростом микротвердости. Для веществ же одной группы наблюдаются отклонения от этого правила. Так, упругое восстановление топаза и рубина оказывается меньшим, чем у стекла и кварца, хотя они тверже последних. Этот пример свидетельствует о правильности высказанного во введении предположения.

### 3. Теоретический расчет упругого восстановления отпечатков

Упругое восстановление отпечатков для щелочно-галлоидных кристаллов, стекла и кварца вычислялось ранее теоретически [1—4]. При этом оказалось, что вычисленные значения  $\Delta b_0$  возрастали, в соответствии с экспериментом, при росте микротвердости вещества. Представлялось интересным вычислить  $\Delta b_0$  для всех исследованных в настоящей работе веществ и проверить, будут ли теоретические значения меньше для топаза и рубина, чем для стекла и кварца, как это показывает эксперимент. Упругое восстановление стороны отпечатка в ее центре подсчитывалось для всех веществ по формуле, выведенной для изотропного тела [1]:

$$\Delta b_0 = \frac{2P}{\pi E} \left[ (1 - \sigma) l \operatorname{arctg} \frac{lb_0}{l^2 - \left(\frac{b_0}{2}\right)^2} + b_0 \ln \frac{l^2 + \left(\frac{b_0}{2}\right)^2}{\left(\frac{b_0}{2}\right)^2} \right], \quad (1)$$

где  $E$  — модуль Юнга,  $\sigma$  — коэффициент Пуассона вещества,  $l$  — параметр, характеризующий размеры области, за пределами которой напряжения и деформации столь малы, что ими можно пренебречь [2, 3]. Подставляя в (1) вместо  $P$  поочередно предел упругости вещества и микротвердость, получим нижнюю и верхнюю границы интервала, в котором лежит значение  $\Delta b_0$  [1].

Так как при вычислении  $\Delta b_0$  кристаллы рассматриваются нами как изотропные тела, то для определения  $E$  и  $\sigma$  находилось их изменение на той грани кристалла, где происходило измерение  $\Delta b_0$ , и из полученных значений вычислялись средние. Упругие константы кристаллов были взяты из работы Г. Хантингтона [5], а их изменение в зависимости от направления находилось по формулам, приведенным У. Кэди [6]. Значения пределов упругости для тех веществ, которые не были нами найдены в литературе, определялись приближенно из графиков, характеризующих зависимость предела упругости от микротвердости. Необходимо отметить, что предел упругости вообще является довольно неопределенной величиной, так как его значение зависит от выбран-

ного метода измерений, от его точности. Поэтому нижние пределы, приводимые в табл. 2, ориентировочны, они позволяют судить только о порядке величины.

Таблица 2

	Вещество	Предел упругости, кг/мм <sup>2</sup>	$E$ , кг/мм <sup>2</sup>	$\sigma$	$b_0$ , $\mu$	$l$ , $\mu$	Интервал, в котором должно находиться $\Delta b_0$ , $\mu$
I	Сильвин	0,1 [7]	3 730	0,05	18,8	2 000	$0,003 < \Delta b_0 < 0,4$
	Бромистый калий	0,1 [7]	3 200	0,15	18,8	2 000	$0,004 < \Delta b_0 < 0,5$
	Каменная соль	0,2 [7, 8]	4 200	0,21	18,8	2 000	$0,006 < \Delta b_0 < 0,64$
II	Сегнетова соль	1,3 [6]	2 400	0,33	18,8	2 000	$0,07 < \Delta b_0 < 4$
	Фтористый литий	0,57 [9]	9 000	0,28	18,8	2 000	$0,008 < \Delta b_0 < 1,6$
	Барит	0,6	6 500	0,15	18,8	2 000	$0,01 < \Delta b_0 < 2,6$
	Кальцит	0,5 [10]	7 600	0,32	18,8	2 000	$0,009 < \Delta b_0 < 3,4$
	Флюорит	1,0	10 300	0,21	18,8	2 000	$0,01 < \Delta b_0 < 3$
III	Стекло	17,5 [11]	6 900	0,24	18,8	2 000	$0,34 < \Delta b_0 < 10$
	Кварц	240,0 [6]	9 465	0,24	18,8	2 000	$3,4 < \Delta b_0 < 17,2$
	Топаз	269,0	27 500	0,28	9,2	1 250	$0,69 < \Delta b_0 < 3,6$
	Рубин				18,8	2 000	$1,22 < \Delta b_0 < 6,8$
			552	41 200	0,22	10,0	1 250
				18,8	2 000	$1,8 < \Delta b_0 < 9,2$	

Результаты вычислений  $\Delta b_0$  приведены в табл. 2. Как следует из таблицы, и нижняя, и верхняя границы интервалов для  $\Delta b_0$  возрастают, в согласии с экспериментом, по мере перехода от первой группы веществ ко второй и далее к третьей. Экспериментальные значения  $\Delta b_0$  (см. табл. 1) для всех веществ лежат в интервалах, предсказанных теорией. Интересно также отметить следующее. Из результатов теоретического расчета можно ожидать, что упругое восстановление кварца будет большим, чем у топаза и рубина, как это наблюдается на опыте. Насчет сравнения  $\Delta b_0$  для стекла с  $\Delta b_0$  для рубина и топаза трудно что-либо сказать, так как нижняя граница интервала  $\Delta b_0$  у стекла меньше, чем у топаза и рубина, а верхняя — больше.

Из всего сказанного следует, что теория находится в неплохом согласии с экспериментом.

### 4. Об измерении микротвердости по невосстановленным отпечаткам

При измерении упругого восстановления и микротвердости было замечено, что у ряда веществ вокруг отпечатков наблюдается рас- трескивание и разрушение материала. Это затрудняет, а иногда и де-

лает невозможным измерение размеров отпечатков. При этом невозстановленные отпечатки (отпечатки под пирамидой) в большинстве случаев или совсем не разрушались, или разрушались гораздо меньше, чем восстановленные, т. е. сильное растрескивание и разрушение материала вблизи отпечатков происходило при поднятии пирамиды из образца (см. рис. 1 и 2). Поэтому для кристаллов, у которых измерение микротвердости обычным способом (по восстановленным отпечаткам) затруднительно вследствие сильного разрушения отпечатков, можно рекомендовать проводить измерения по невозстановленным отпечаткам.

Поступило  
15.XII 1961 г.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Ю. С. Боярская, М. И. Вальковская, Упругое восстановление отпечатков, получаемых при измерении микротвердости (в печати).
2. Ю. С. Боярская, Ю. П. Келоглу, Ю. О. Лапскер, Заводская лаборатория, № 4; 477 (1960).
3. Ю. С. Боярская, Ю. П. Келоглу, М. К. Болога, В. В. Меденец, Кристаллография, 4, вып. 4, 597 (1959).
4. Ю. С. Боярская, Тезисы докладов II Всесоюзного совещания по физике щелочно-галонидных кристаллов, Рига, 1961, стр. 15.
5. Г. Хантингтон, УФН, 74, вып. 3, 462 (1961).
6. У. Кэди, Пьезоэлектричество и его практические применения, М., 1949, стр. 78, 127, 382.
7. В. П. Лужковский, Уч. зап. Ленингр. гос. пед. ин-та, 17, 75—84 (1957).
8. В. Д. Кузнецов, Физика твердого тела, 1, Томск, 1937.
9. J. J. Gilman, Acta met., 7, 9 (1959).
10. И. М. Лифшиц, И. В. Обренимов, Изв. АН СССР, серия физ., 12, вып. 2, 65 (1948).
11. А. П. Александров, С. Н. Журков, Явление хрупкого разрыва, 1933.

Ю. С. БОЯРСКАЯ, М. И. ВАЛЬКОВСКАЯ

#### ДЕСПРЕ АТЫРНАРЯ РЕСТАБИЛИРИЙ ЕЛАСТИЧЕ А ЫНТИПЭРИЛОР ДЕ МИКРОТЭРИЯ СУБСТАНЦЕЙ

#### Резумат

А фост мэсуратэ рестабилирия еластикэ а ынтипэририлор ын корпусь ку диферитэ тэрне. Тотодатэ, пентру ачеляшь корпусь а фост ындеплинит ун калкул теоретик ал рестабилирий еластиче а латурей ынтипэририй. Мэримя калкулатэ се акордэ калитатив ку чя мэсуратэ. Се пропуне о методэ де мэсураре а микротэрией корпусилор сфэрымчоасе, студинид ынтипэририле че н'ау фост рестабилите.

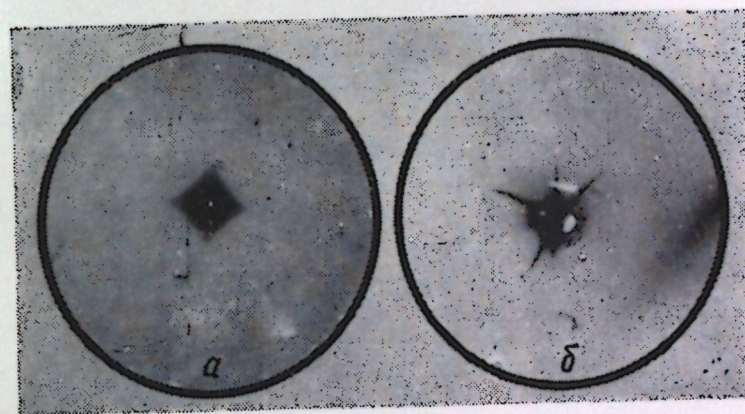


Рис. 1. Невосстановленный (а) и восстановленный (б) отпечатки на кварце. Восстановленный отпечаток растрескался

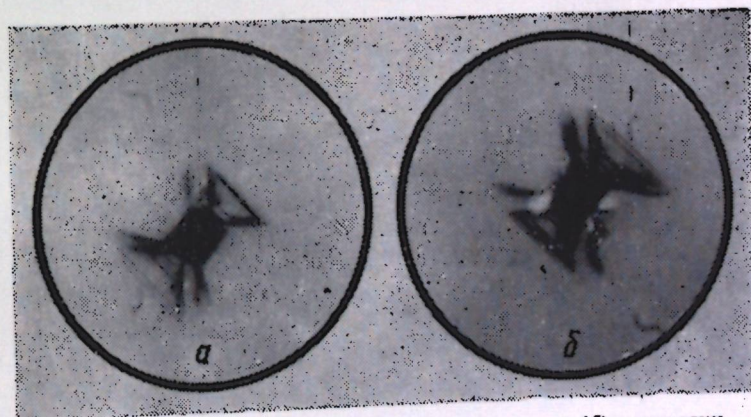


Рис. 2. Невосстановленный (а) и восстановленный (б) отпечатки на барите. Невосстановленный отпечаток с трещинами, но его можно измерить

Д. В. ГИЦУ, Г. А. ИВАНОВ

## К РАСЧЕТУ АНИЗОТРОПИИ ГАЛЬВАНОМАГНИТНЫХ СВОЙСТВ МОНОКРИСТАЛЛОВ ВИСМУТА

### Введение

Анализ экспериментальных результатов исследования анизотропии гальваномагнитных свойств монокристаллов висмута и его сплавов [1, 2] показал, что даже качественная их интерпретация дает весьма полезные сведения о зонной структуре энергетического спектра электронов. В этом легко убедиться, если, исходя из той или иной модели энергетического спектра электронов, выразить экспериментальные диаграммы вращения магнетосопротивления  $\Delta\rho/\rho(\theta)$  и коэффициента Холла  $R(\theta)$  через обычно принятые параметры электронной теории твердого тела.

Такие расчеты были выполнены для модели Эйблса—Мейбума [3], но они показали существенное расхождение с экспериментальными данными. Неудовлетворительной оказалась и модель Окады [4].

Стало очевидным, что предположение квадратичности изоэнергетических поверхностей электронов в кристаллах висмута может дать удовлетворительное описание анизотропии гальваномагнитных свойств при условии, что эти поверхности образуют в зоне проводимости семейства эллипсоидальных поверхностей, главные оси которых несколько наклонены к тригональной оси.

Такая модель была выдвинута впервые Шенбергом [5] для объяснения экспериментальных результатов исследования эффекта де Гааза—ван Альфена.

Примененный в нашей работе метод расчета существенно не отличается от метода, использованного в [6] и [7]. Поэтому все промежуточные операции сокращены до минимума и приводятся только конечные результаты.

### § 1. Электронная теория гальваномагнитных эффектов в кристаллах висмута

На основании вышесказанного, энергетический спектр электронов в кристаллах висмута аппроксимируется следующей многоэллипсоидальной моделью.

1. Изоэнергетические поверхности зоны проводимости образуют шесть одинаковых семейств эллипсоидов типа:

$$E_s = \frac{\hbar^2}{2m_0} (\alpha_{11}k_x^2 + \alpha_{22}k_y^2 + \alpha_{33}k_z^2 + 2\alpha_{23}k_yk_z), \quad (1)$$

где ось  $k_z$  направлена вдоль тригональной оси, а  $k_x$  — вдоль одной из бинарных осей. Каждое семейство получается из другого вращением вокруг тригональной оси на угол, кратный  $\pm 120^\circ$ , и отражением через центр. Одна из главных осей эллипсоидов ( $k_x$ ) параллельна какой-либо бинарной оси; вторая и третья образуют соответственно с тригональной осью и тригональной плоскостью угол  $\varphi$ .

2. Изоэнергетические поверхности валентной зоны образуют два одинаковых семейства эллипсоидов вращения типа

$$E_d = \frac{\hbar^2}{2m_0} [\beta_{11}(k_x^2 + k_y^2) + \beta_{33}k_z^2], \quad (2)$$

т. е. ось вращения эллипсоидов параллельна тригональной оси.

Эта модель отличается от модели Шенберга [5] лишь удвоенным числом эллипсоидов электронов и дырок (удвоенное число эллипсоидов обусловлено наличием центра инверсии). Если положить  $\varphi = 0$  и уменьшить число семейств эллипсоидов в два раза, то получается модель Эйблса—Мейбума [3].

Чтобы упростить решаемую задачу, предположим, что время релаксации изотропно и что в процессе ее имеют место только переходы между состояниями данного семейства эллипсоидов. В этом случае каждое семейство эллипсоидов рассматривается отдельно, независимо от других, а полная плотность тока в кристалле определяется суммированием по всем семействам.

В приближении слабых магнитных полей плотность тока, обусловленная одним семейством, выражается следующим образом:

$$I_l = \sigma_{ij} E_j + \sigma_{ij,k} E_j H_k + \sigma_{ij,kl} E_j H_k H_l + \dots \quad (3)$$

Нетрудно проверить, что тензоры  $\sigma_{ij}$ ,  $\sigma_{ij,k}$  и  $\sigma_{ij,kl}$  в координатной системе, связанной с главными осями эллипсоидов, в общем случае имеют следующий вид:

$$\sigma_{ij} = - \frac{2e^2 \sqrt{2m_1 m_2 m_3}}{2\pi^2 \hbar^3 m_l} \int_0^\infty \tau E^{3/2} \frac{\partial f}{\partial E} dE \cdot \delta_{ij}, \quad (4)$$

$$\sigma_{ij,k} = \frac{2e^2 \sqrt{2m_1 m_2 m_3}}{3\pi^2 \hbar^3 c m_l m_j} \int_0^\infty \tau^2 E^{3/2} \frac{\partial f}{\partial E} dE \cdot \varepsilon_{ijk}, \quad (5)$$

$$\sigma_{ij,kl} = - \frac{2e^4 \sqrt{2m_1 m_2 m_3}}{3\pi^2 \hbar^3 c^2 m_l m_j m_r} \cdot \frac{1}{2!} \int_0^\infty \tau^3 E^{3/2} \frac{\partial f}{\partial E} dE \cdot (\varepsilon_{lrl} \cdot \varepsilon_{rjk} + \varepsilon_{irk} \cdot \varepsilon_{rjl}), \quad (6)$$

где  $\tau$  — время релаксации,  $m$  — эффективная масса носителей тока,  $f$  — невозмущенная функция распределения,  $\delta_{ij}$  — символ Кронекера,  $\varepsilon_{ijk}$  при  $ijk = 123, 231, 312$  равен 1, при  $ijk = 213, 132, 321$  равен  $-1$  и при  $i=j$  или  $k$ , или при  $j=k$  равен 0.

В принятом приближении вычисление полной плотности тока в кристалле сводится к определению полных тензоров  $\Sigma_{ij}$ ,  $\Sigma_{ij,k}$  и  $\Sigma_{ij,kl}$ , представляющих собой сумму вкладов тензоров  $\sigma_{ij}$ ,  $\sigma_{ij,k}$  и  $\sigma_{ij,kl}$  всех семейств эллипсоидов, преобразованных к единой системе координат. Если в качестве такой системы взять систему, связанную с кристаллографическими осями, то для выбранной модели энергетического спектра электронов необходимы следующие преобразования:

1) поворот вокруг бинарных осей на угол  $\varphi$ :

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\varphi & \sin\varphi \\ 0 & -\sin\varphi & \cos\varphi \end{pmatrix};$$

2) поворот вокруг тригональной оси на угол  $\pm 120^\circ$ :

$$\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \pm \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \mp \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

После суммирования для неравных нулю составляющих получаем:

а) составляющие тензора  $\Sigma_{ij}$ :

$$\Sigma_{11} = \Sigma_{22} = \frac{2A^+}{m_1^+} + 3A^- \left( \frac{1}{m_1^-} + \frac{1}{m_2^-} \cos^2\varphi + \frac{1}{m_3^-} \sin^2\varphi \right), \quad (7)$$

$$\Sigma_{33} = 2 \left[ \frac{A^+}{m_3^+} + 3A^- \left( \frac{1}{m_2^-} \sin^2\varphi + \frac{1}{m_3^-} \cos^2\varphi \right) \right]; \quad (8)$$

б) составляющие тензора  $\Sigma_{ij,k}$ :

$$\Sigma_{123} = 2 \left[ \frac{B^+}{m_1^{+2}} + \frac{3B^-}{m_1^-} \left( \frac{1}{m_2^-} \cos^2\varphi + \frac{1}{m_3^-} \sin^2\varphi \right) \right], \quad (9)$$

$$\Sigma_{231} = \Sigma_{312} = \frac{2B^+}{m_1^+ m_3^+} + 3B^- \left( \frac{1}{m_2^- m_3^-} + \frac{1}{m_1^- m_2^-} \sin^2\varphi + \frac{1}{m_1^- m_3^-} \cos^2\varphi \right); \quad (10)$$

в) составляющие тензора  $\Sigma_{ij,kl}$ :

$$\Sigma_{11,11} = \Sigma_{22,22} = - \frac{3C^-}{2} \left[ \frac{3}{4} \cdot \frac{1}{m_1^-} \left( \frac{1}{m_2^-} - \frac{1}{m_3^-} \right)^2 \sin^2 2\varphi + \frac{1}{m_2^-} \left( \frac{1}{m_1^-} - \frac{1}{m_3^-} \right)^2 \sin^2\varphi + \frac{1}{m_3^-} \left( \frac{1}{m_1^-} - \frac{1}{m_2^-} \right)^2 \cos^2\varphi \right], \quad (11)$$

$$\Sigma_{11,22} = \Sigma_{22,11} = -\frac{4C^+}{m_1^+ m_3^+} - \frac{3C^-}{2} \left[ \frac{1}{m_3^-} \left( \frac{1}{m_1^-} + \frac{1}{m_2^-} \right) \cos^2 \varphi + \frac{3}{m_2^-} \left( \frac{1}{m_1^-} + \frac{1}{m_3^-} \right) \sin^2 \varphi + \frac{1}{4m_1^-} \left( \frac{1}{m_2^-} - \frac{1}{m_3^-} \right)^2 \sin^2 2\varphi + \frac{2}{m_1^- m_2^- m_3^-} \right], \quad (12)$$

$$\Sigma_{11,23} = \Sigma_{22,23} = \frac{3C^-}{2m_1^-} \left( \frac{1}{m_3^-} - \frac{1}{m_2^-} \right) \left( \frac{1}{m_1^-} - \frac{1}{m_2^-} \cos^2 \varphi - \frac{1}{m_3^-} \sin^2 \varphi \right) \sin 2\varphi, \quad (13)$$

$$\Sigma_{11,33} = \Sigma_{22,33} = -2 \left[ \frac{2C^+}{m_1^+} + \frac{3C^-}{m_1^-} \left( \frac{1}{m_2^-} \cos^2 \varphi + \frac{1}{m_3^-} \sin^2 \varphi \right) \cdot \left( \frac{1}{m_1^-} + \frac{1}{m_2^-} \cos^2 \varphi + \frac{1}{m_3^-} \sin^2 \varphi \right) \right], \quad (14)$$

$$\Sigma_{23,11} = -\Sigma_{23,22} = \Sigma_{13,12} = \frac{3}{2} C^- \left( \frac{1}{m_2^-} - \frac{1}{m_3^-} \right) \left[ \frac{1}{m_2^- m_3^-} - \frac{1}{m_1^-} \left( \frac{1}{m_2^-} \sin^2 \varphi + \frac{1}{m_3^-} \cos^2 \varphi \right) \right] \sin 2\varphi, \quad (15)$$

$$\Sigma_{23,23} = \Sigma_{13,13} = \frac{2C^+}{m_1^+ m_3^+} + \frac{3C^-}{m_1^-} \left[ \frac{1}{m_2^- m_3^-} (1 + \cos^2 2\varphi) + \frac{1}{2} \left( \frac{1}{m_2^-} + \frac{1}{m_3^-} \right) \sin^2 2\varphi \right], \quad (16)$$

$$\Sigma_{33,11} = \Sigma_{33,22} = -2 \left[ \frac{2C^+}{m_1^+ m_3^+} + 3C^- \left( \frac{1}{m_2^-} \sin^2 \varphi + \frac{1}{m_3^-} \cos^2 \varphi \right) \cdot \left[ \frac{1}{m_2^- m_3^-} + \frac{1}{m_1^-} \left( \frac{1}{m_2^-} \sin^2 \varphi + \frac{1}{m_3^-} \cos^2 \varphi \right) \right] \right], \quad (17)$$

$$\Sigma_{33,33} = -\frac{3C^-}{m_1^-} \left( \frac{1}{m_2^-} - \frac{1}{m_3^-} \right)^2 \sin^2 \varphi. \quad (18)$$

Здесь

$$A = e^2 n K_1(\mu^*), \quad B = -\frac{e^3}{c} n K_2(\mu^*), \quad C = \frac{e^4}{2c^2} n K_3(\mu^*),$$

где  $n = \frac{(kT)^{3/2} \sqrt{2m_1 m_2 m_3}}{\pi^2 \hbar^3} F_{1/2}(\mu^*)$  — концентрация носителей тока, соот-

ветствующая одному семейству,  $F_{1/2}(\mu^*) = \int_0^{\infty} \frac{E}{kT} \frac{1}{e^{E/kT} - \mu^* + 1} \cdot d\left(\frac{E}{kT}\right)$  —

— интеграл Ферми,  $\mu^*$  — приведенный химический потенциал, а

$$K_p(\mu^*) = \frac{\int_0^{\infty} \tau^p E^{3/2} \frac{\partial f}{\partial E} dE}{\int_0^{\infty} E^{3/2} \frac{\partial f}{\partial E} dE}. \quad (19)$$

Как видно из (19), параметр  $K_p$  зависит от характера рассеяния носителей тока и от положения уровня химического потенциала. Для измеренных нами образцов характер рассеяния и положение уровня от сплава к сплаву изменяются. В чистом висмуте преобладающим является тепловое рассеяние, тогда как в сплавах по мере роста концентрации примесных атомов все более существенным становится рассеяние на примесных центрах.

При добавлении теллура химический потенциал электронов, согласно [10], изменяется от  $\mu \sim kT$  в чистом висмуте до  $\mu \sim 15kT$  в сплаве Bi—0,4% Te. Следовательно, эти параметры, строго говоря, необходимо вычислить отдельно для каждого сплава.

В настоящей работе мы ограничимся только качественным рассмотрением картины анизотропии, так как использованные в [1] и [2] поля не являются слабыми. Поэтому, следуя [3], предположим, что время релаксации не зависит от энергии, т. е.  $\tau(E) = \tau_0$ . В этом случае:

$$K_p = \tau_0^p, \quad (20)$$

$$\Sigma_{11} = \frac{1}{\rho_{11}} = eN_+ u_1^+ + \frac{1}{2} eN_- (u_1^- + u_2^- \cos^2 \varphi + u_3^- \sin^2 \varphi), \quad (21)$$

$$\Sigma_{33} = \frac{1}{\rho_{33}} = eN_+ u_3^+ + eN_- (u_2^- \sin^2 \varphi + u_3^- \cos^2 \varphi), \quad (22)$$

$$R_{1,1} = -\frac{\Sigma_{231}}{\Sigma_{11} \cdot \Sigma_{33}} =$$

$$= \frac{e}{c} \left[ N_+ u_1^+ u_3^+ - \frac{1}{2} N_- (u_2^- u_3^- + u_1^- u_2^- \sin^2 \varphi + u_1^- u_3^- \cos^2 \varphi) \right] \frac{1}{\Sigma_{11} \cdot \Sigma_{33}}, \quad (23)$$

$$R_{3,3} = -\frac{\Sigma_{123}}{\Sigma_{11}^2} = \frac{e}{c} \left[ N_+ u_1^{+2} - N_- u_1^- (u_2^- \cos^2 \varphi + u_3^- \sin^2 \varphi) \right] \frac{1}{\Sigma_{11}^2}, \quad (24)$$

$$\rho_{11,11} = -\frac{\Sigma_{11,11}}{\Sigma_{11}^2} = \frac{N-e}{8c^2} \cdot$$

$$\left[ \frac{3}{4} u_1^- (u_2^- - u_3^-)^2 \sin^2 2\varphi + u_2^- (u_1^- - u_3^-)^2 \sin^2 \varphi + u_3^- (u_1^- - u_2^-)^2 \cos^2 \varphi \right] \frac{1}{\Sigma_{11}^2}, \quad (25)$$

$$\rho_{11,22} = -\frac{\Sigma_{11,22}}{\Sigma_{11}^2} = \frac{\Sigma_{231}}{\Sigma_{11}^2 \Sigma_{33}} =$$

$$= \frac{e}{c^2} \left[ N_+ u_1^{+2} u_3^+ + \frac{1}{8} N_- \left[ 3u_3^- (u_1^{+2} + u_2^{-2}) \cos^2 \varphi + 3u_2^- (u_1^{-2} + u_3^{-2}) \sin^2 \varphi \right] \right] \frac{1}{\Sigma_{11}^2} +$$

$$+ \frac{1}{4} u_1^- (u_2^- - u_3^-)^2 \sin^2 2\varphi + u_1^- u_2^- u_3^- \Big] - \Sigma_{33} R_{1,1}^2, \quad (26)$$

$$\rho_{11,23} = - \frac{\Sigma_{11,23}}{\Sigma_{11}^2} = \frac{eN_-}{8c^2} \cdot \frac{[u_1^- (u_2^- - u_3^-) (u_1^- - u_2^- \cos^2 \varphi - u_3^- \sin^2 \varphi) \sin 2\varphi]}{\Sigma_{11}^2}, \quad (27)$$

$$\rho_{11,33} = - \frac{\Sigma_{11,33}}{\Sigma_{11}^2} - \frac{\Sigma_{123}^2}{\Sigma_{11}^3} =$$

$$= \frac{e}{c^2} \left[ \frac{N_+ u_1^{+3} + \frac{1}{2} N_- u_1^- (u_2^- \cos^2 \varphi + u_3^- \sin^2 \varphi) (u_1^- + u_2^- \cos^2 \varphi + u_3^- \sin^2 \varphi)}{\Sigma_{11}^2} \right] - \Sigma_{11} R_{3,3}^2, \quad (28)$$

$$\rho_{23,11} = - \frac{\Sigma_{23,11}}{\Sigma_{11} \Sigma_{33}} =$$

$$= \frac{eN_-}{8c^2} \frac{\left\{ (u_3^- - u_2^-) [u_2^- u_3^- - u_1^- (u_3^- \sin^2 \varphi + u_3^- \cos^2 \varphi)] \sin 2\varphi \right\}}{\Sigma_{11} \Sigma_{33}}, \quad (29)$$

$$\rho_{23,23} = - \frac{\Sigma_{23,23}}{\Sigma_{11} \cdot \Sigma_{33}} + \frac{1}{2} \frac{\Sigma_{123} \cdot \Sigma_{231}}{\Sigma_{11}^2 \cdot \Sigma_{33}} =$$

$$= \frac{e}{2c^2} \frac{\left\{ N_+ u_1^{+2} u_3^{+2} + \frac{1}{2} N_- \left[ u_2^- u_3^- (1 + \cos^2 2\varphi) + \frac{1}{2} (u_2^{-2} + u_3^{-2}) \sin^2 2\varphi \right] \right\}}{\Sigma_{11} \cdot \Sigma_{33}} +$$

$$+ \frac{1}{2} \Sigma_{11} R_{1,1} \cdot R_{3,3}, \quad (30)$$

$$\rho_{33,11} = - \frac{\Sigma_{33,11}}{\Sigma_{33}^2} - \frac{\Sigma_{231}^2}{\Sigma_{11} \cdot \Sigma_{33}^2} =$$

$$= \frac{e}{c^2} \frac{\left\{ N_+ u_1^{+2} u_3^{+2} + \frac{1}{2} N_- (u_2^- \sin^2 \varphi + u_3^- \cos^2 \varphi) [u_2^- u_3^- + u_1^- (u_2^- \sin^2 \varphi + u_3^- \cos^2 \varphi)] \right\}}{\Sigma_{33}^2} - \Sigma_{11} \cdot R_{1,1}^2, \quad (31)$$

$$\rho_{33,33} = - \frac{\Sigma_{33,33}}{\Sigma_{33}^2} = \frac{1}{4} \frac{e}{c^2} \frac{N_- u_1^- (u_2^- - u_3^-)^2 \sin^2 2\varphi}{\Sigma_{33}^2}, \quad (32)$$

где  $N_+ = 2n_+$ ,  $N_- = 6n_-$  — общее число дырок и электронов, а  $u_i = \frac{e\tau_0}{m_i}$  — подвижности носителей в  $i$ -ом направлении главных осей эллипсоидов.

Приведенные уравнения (21—32) для изотропной среды дают обычные выражения, вытекающие из предположения о сферичности изоэнергетических поверхностей в  $k$ -пространстве.

## § 2. Сравнение с экспериментальными данными

Соотношения (21—32) довольно громоздки и трудно поддаются непосредственному анализу. Тем не менее даже качественное их рассмотрение дает возможность лучше понять своеобразие гальваномагнитных эффектов в висмуте, изменение анизотропии под действием примесных атомов и, следовательно, позволяет судить о правильности принятой модели энергетического спектра электронов.

Сравнивая теоретические результаты, вытекающие из моделей Шенберга и Эйблса — Мейбума, с полученными нами экспериментальными данными, нетрудно убедиться, что первая модель описывает анизотропию гальваномагнитных свойств кристаллов висмута значительно лучше, чем вторая.

Чтобы облегчить это сравнение, приведем выражения для напряженности электрического поля вдоль тока  $E_1'$  и в направлении, перпендикулярном току и магнитному полю,  $E_2'$  в измеренных нами образцах.

В поперечном магнитном поле эти выражения имеют вид:

1) образцы типа А (тригональная ось параллельна оси образца):

$$E_1' = \rho_{33} I + \rho_{33,11} I H^2, \quad (33)$$

$$E_2' = \rho_{23,11} I H^2 \sin 3\theta - R_{1,1} I H - R_{1,111} I H^3; \quad (34)$$

2) образцы типа Б (одна из бинарных осей параллельна оси образца):

$$E_1' = \rho_{11} I + (\rho_{11,22} \sin^2 \theta - \rho_{11,23} \sin 2\theta + \rho_{11,33} \cos^2 \theta) I H^2, \quad (35)$$

$$E_2' = - (R_{1,1} \sin^2 \theta + R_{3,3} \cos^2 \theta) I H - [R_{1,111} \sin^4 \theta +$$

$$+ \frac{3}{4} (R_{3,113} + R_{1,133}) \sin^2 2\theta + \frac{1}{2} (R_{3,112} + 3R_{1,123}) \sin^2 \theta \cdot \sin 2\theta +$$

$$+ R_{3,333} \cos^4 \theta] I H^3; \quad (36)$$

3) образцы типа В (тригональная ось и одна из бинарных осей перпендикулярны оси образца):

$$E_1' = \rho_{11} I + (\rho_{11,22} \sin^2 \theta + \rho_{11,33} \cos^2 \theta) I H^2, \quad (37)$$

$$E_2' = (\rho_{23,11} \sin^2 \theta - 2\rho_{11,23} \cos^2 \theta) \sin \theta \cdot I H^2 - (R_{1,1} \sin^2 \theta + R_{3,3} \cos^2 \theta) I H -$$

$$- [R_{1,111} \sin^4 \theta + \frac{3}{4} (R_{1,133} + R_{3,113}) \sin^2 2\theta + R_{3,333} \cos^4 \theta] I H^3. \quad (38)$$

В продольном магнитном поле имеем:

1) для образцов типа А

$$E'_1 = \rho_{33}I + \rho_{33,33}IH^2; \quad (39)$$

2) для образцов типа Б и В

$$E'_1 = \rho_{11}I + \rho_{11,11}IH^2. \quad (40)$$

Если положить  $\varphi = 0$  (модель Эйблса—Мейбума), то, как видно из (27, 29 и 32), составляющие  $\rho_{11,23}$ ,  $\rho_{23,11}$  и  $\rho_{33,33}$  равны 0.

Это означает, что, во-первых, диаграммы вращения образцов типа Б и В должны совпадать и, во-вторых, магнетосопротивление образцов типа А в продольном магнитном поле должно быть равным 0.

Для всех измеренных нами сплавов, даже в самых слабых магнитных полях, экспериментальные значения диаграмм  $\Delta\rho/\rho(\theta)$  образцов типа Б всегда смещены на  $10-30^\circ$  по отношению к тем же значениям диаграмм образцов типа В. Особенно сильное отличие между этими диаграммами имеет место в сплавах с малым содержанием примесей теллура.

В слабых магнитных полях, как видно из (35), смещение экстремальных значений диаграмм  $\Delta\rho/\rho(\theta)$  образцов типа Б вызвано членом  $\rho_{11,23} \sin 2\theta$ . Как показывает расчет, для чистого висмута составляющая  $\rho_{11,23}$  имеет такой же порядок, как и составляющие  $\rho_{11,11}$  и  $\rho_{11,23}$ .

Результаты измерений изменения сопротивления в продольном магнитном поле образцов типа А приведены в [1] и [2]. Такое изменение наблюдается во всех изученных сплавах, хотя в сплавах висмут—теллур с большим содержанием второй компоненты при комнатной температуре оно очень мало.

Составляющая  $\rho_{23,11}$  нами не вычислялась. Но выполненные измерения показывают, что и она не равна 0. В самом деле, как видно из (34),  $\rho_{23,11}$  входит в выражении для поперечного электрического поля  $E'_2$  в член, содержащий  $H^2$ . Поэтому при коммутации направления магнитного поля измеренное поперечное электрическое поле  $E'_2$  имеет неодинаковые значения. Наблюдаемая экспериментально разность между  $E'_2(+\vec{H})$  и  $E'_2(-\vec{H})$  в кристаллах типа А превышает возможные ошибки, возникающие, в частности, от смещения холловских зондов относительно друг друга. Более того, наблюдается периодическое изменение этой разности в зависимости от ориентации образца относительно магнитного поля, как и следует из (34). Это наглядно видно из таблицы, где приведены значения поперечной разности потенциалов  $V'_2(+\vec{H})$  и  $V'_2(-\vec{H})$  для одного из измеренных образцов типа А (чистый висмут) при разных углах вращения  $\theta$ .

Все эти факты, существование которых не вызывает сомнения, нельзя объяснить, исходя из модели Эйблса—Мейбума, но они вытекают естественным образом из модели Шенберга.

$\theta^\circ$	$V'_2(+\vec{H})$ , мкв	$V'_2(-\vec{H})$ , мкв	$\theta^\circ$	$V'_2(+\vec{H})$ , мкв	$V'_2(-\vec{H})$ , мкв
0	257	257	70	224	228
10	241	230	80	182	198
20	209	199	90	176	194
30	233	174	100	211	229
40	247	200	110	244	252
50	267	226	120	250	260
60	250	245	130	237	229

### ВЫВОДЫ

1. Для удовлетворительного воспроизведения картины анизотропии гальваномагнитных свойств монокристаллов висмута и его сплавов с теллуrom при комнатной температуре необходимо учитывать наклон главных осей эллипсоидальных поверхностей зоны проводимости к осям симметрии кристалла.

2. Метод диаграмм вращения гальваномагнитных эффектов можно использовать как простой и удобный способ для выбора подходящих моделей зонной структуры кристаллов.

### ЛИТЕРАТУРА

1. Д. В. Гицу, Г. А. Иванов, ФТТ, 2, 1457 (1960).
2. Д. В. Гицу, Г. А. Иванов, ФТТ, 2, 1464 (1960).
3. B. Abeles, S. Meiboom, Phys. Rev., 101, 544 (1956).
4. T. Okada, J. Phys. Soc. Japan, 12, 12 (1957).
5. D. Shoenberg, Phil. Trans. Roy. Soc., A245, 1 (1952).
6. B. Abeles, S. Meiboom, Phys. Rev., 95, 31 (1954).
7. F. R. Drabble and R. Wolfe, Proc. Phys. Soc., 69, 1101 (1956).
8. S. Mase, J. Phys. Soc. Japan, 13, 434 (1958).
9. G. E. Smith, Phys. Rev., 115, 1561 (1959).
10. Г. А. Иванов, ФТТ, 1, 1600 (1959).

Д. В. ГИЦУ, Г. А. ИВАНОВ

КУ ПРИВИРЕ ЛА КАЛКУЛУЛ АНИЗОТРОПИЕЙ ПРОПРИЕТЭЦИЛОР  
ГАЛВАНОМАГНЕТИЧЕ А МОНОКРИСТАЛЕЛОР БИСМУТУЛУЙ

### Резумат

Не лукраре сынт презентате резултателе калкулулуй ефектелор галваномагнетиче ын кристалеле бисмутулуй ын апроксимацие де кымпурь магнетиче слабе. Ка модел примар ал структурий спектрулуй енержетик ал електронилор се фолосеште моделул Шенберг ку ун нумэр дублу де елипсонде пентру банда де кондукцие ши чя валентэ. Екуацииле примите дау посибилитате де а калкула ефектеле галваномагнетиче ын орьче дирекцие кристалографикэ.



С. И. РАДАУЦАН, И. А. МАДАН

## ТВЕРДЫЕ РАСТВОРЫ ФОСФИДО-СЕЛЕНИДОВ ИНДИЯ

## Введение

Новые полупроводниковые материалы все шире применяются в полупроводниковом приборостроении [1—3 и др.]. Этим объясняется увеличивающееся число работ, посвященных всестороннему исследованию сложных полупроводниковых соединений и твердых растворов на их основе [4—6]. Среди последних можно назвать гетеровалентные твердые растворы между бинарными соединениями типа  $A^{III}B^V$  и  $A_2^{III}B_3^{VI}$  [7—13]. Обнаружено, что широкие области растворимости образуются как между изоструктурными соединениями, так и между соединениями, обладающими различными кристаллическими структурами, но близкими по типу химической связи и энергетическим характеристикам. Так, например, соединение  $In_2Se_3$ , имеющее гексагональную решетку [14, 15], образует твердые растворы со структурой типа цинковой обманки с арсенидом индия [9, 13], селенидом кадмия [16], теллуридом индия [17] и др.

Предварительные исследования [18, 19] показали, что наблюдается растворимость в широком интервале концентраций в разрезе  $InP-In_2Se_3$  тройной системы индий—фосфор—селен.

Учитывая хорошие полупроводниковые свойства фосфида индия [20] и перспективность практического использования фосфидов [2, 4], мы провели комплексное изучение сплавов разреза  $(InP)_{3x}-(In_2Se_3)_{1-x}$  с целью уточнения области существования твердых растворов и определения их некоторых структурных, термических и электрических свойств.

## Методика приготовления и исследования образцов

Для синтеза сплавов были использованы исходные элементы высокой степени чистоты (не менее 99,99% основного вещества). Сплавление проводилось в вакуированных и затем заполненных аргоном кварцевых ампулах при максимальной температуре 800—1150°C в течение 30—50 часов с применением вибрационного перемешивания [21].

В работе [19] было указано, что в сплавах  $(InP)_{3x}-(In_2Se_3)_{1-x}$  получают однофазные твердые растворы в интервале концентраций  $x=1 \div 0,75$ . Дальнейшая разработка оптимального режима синтеза с длительной выдержкой при максимальной температуре и последую-

щим медленным охлаждением со скоростью 10—15° в час позволила расширить область растворимости и на интервал  $x=0,75 \div 0,25$ . Максимальная температура нагрева сплава каждого состава была на 20—50°C выше его температуры ликвидуса (см. таблицу).

Некоторые свойства сплавов разреза  $(InP)_{3x}-(In_2Se_3)_{1-x}$ 

№ пп.	Состав сплава (значения $x$ )	Количество фаз	Содержание фаз	Структура	Постоянная решетки, Å	Микротвердость, кг/мм <sup>2</sup>	Интервал температур затвердевания, °C	Удельная электропроводность, Ом <sup>-1</sup> ·см <sup>-1</sup>
1	1	1	100	ZnS	5,87	410—435	1070*	40*)
2	0,750	1	100	ZnS	5,86	490	1030—975	880
3	0,571	1	100	ZnS	5,82	400	975—880	175
4	0,600	1	100	ZnS	5,79	325	900—835	145
5	0,333	1	100	ZnS	6,77	300	776—720	35
6	0,250	1	100	ZnS	5,76	275	750—710	1,8
7	0,214	3	25	ZnS	5,85	525	770—700	8·10 <sup>-2</sup>
			25	низкосим.	—	210	675—650	
			50	низкосим.	—	—	580—575	
8	0,100	2	50	низкосим.	—	235	815—805	2,3·10 <sup>-1</sup>
			50	низкосим.	—	30	645—630	
9	0,036	2	20	низкосим.	—	170	865—818	2,5·10 <sup>-1</sup>
			80	низкосим.	—	37	652	
10	0	1	100	(гексагональная*) (α-модификация)	$a=16,00^*$ $c=19,24$	30—40*)	890*)	1·10 <sup>-3</sup> *)

\*) Данные литературных источников [15, 20, 22].

Область существования твердых растворов определялась методами рентгеноструктурного, термического и микроструктурного анализов. У некоторых сплавов были изучены температурные зависимости электропроводности. Рентгенографические измерения проводились при помощи камеры РКУ-114 на медном излучении с никелевым фильтром.

Термический анализ был проведен на пирометре Курнакова ФПК-55 по ранее разработанной методике для изучения диаграмм состояния легколетучих и окисляющихся сложных полупроводниковых сплавов [4, 13]. Микрошлифы образцов исследовались при помощи металлмикроскопа МИМ-7, микротвердость измерялась микротвердометром ПМТ-3. Изучение удельной электропроводности сплавов проводилось в приборе О. В. Емельяненко с применением компенсационной схемы [23, 24].

## Экспериментальные результаты

Было изучено 10 сплавов разреза  $(\text{InP})_{3x} - (\text{In}_2\text{Se}_3)_{1-x}$ , составы которых приведены в таблице.

Рентгеноструктурные исследования показали, что сплавы составов от фосфида индия  $x=1$  до  $x=0,25$  обладают структурой типа цинковой обманки с параметром решетки, постепенно изменяющимся от 5,87 до 5,76 Å. На рис. 1 дано схематическое изображение дифракционных картин сплавов фосфида-селенидов индия.

В интервале концентрации 75 эквимол. % в сторону фосфида индия все штрихдебаграммы имеют одну систему линий, отвечающих решетке цинковой обманки. При этом наблюдается постепенное погасание

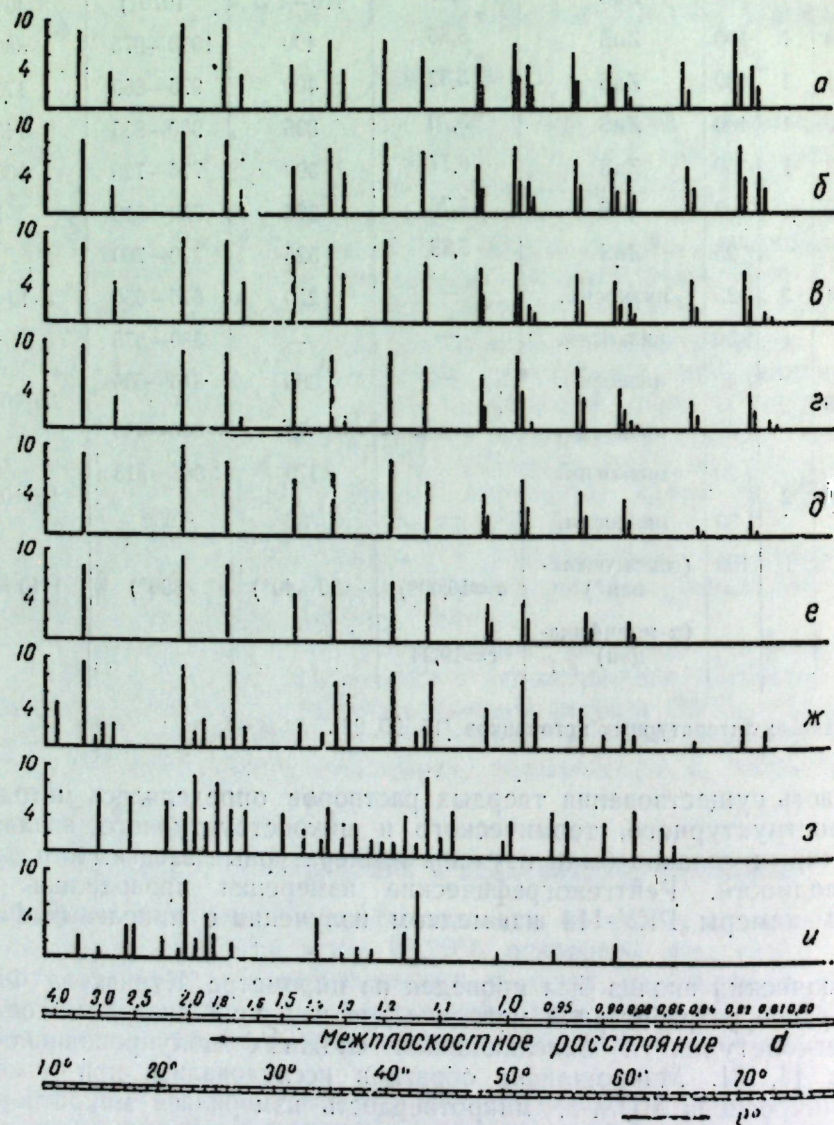


Рис. 1. Схематическое изображение дифракционных картин сплавов системы  $(\text{InP})_{3x} - (\text{In}_2\text{Se}_3)_{1-x}$  при  $x$ , равном: 1 (а); 0,750 (б); 0,571 (в); 0,500 (г); 0,333 (д); 0,250 (е); 0,214 (ж); 0,100 (з); 0 (и)

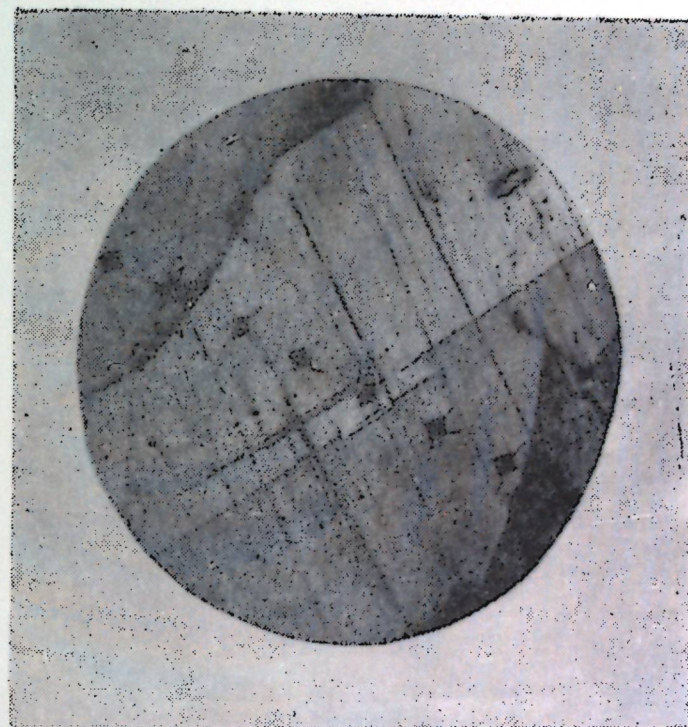


Рис. 2. Микроструктура сплава состава  $x=0,750$  после травления  $\text{HNO}_3 + 3\text{HCl}$  ( $\times 160$ )



Рис. 3. Микроструктура сплава состава  $x=0,214$  до травления ( $\times 160$ )

четких сверхструктурных линий, что, по-видимому, можно объяснить статистическим распределением атомов разного сорта в решетке [25].

У сплавов состава  $x < 0,5$  вблизи границ существования твердых растворов линии, соответствующие большим брэгговским углам, постепенно уширяются и размываются, а для состава  $x = 0,25$ , начиная с  $hkl$  (622), они практически не различаются. Это, по-видимому, вызвано наличием частичной микроликвации в сплавах [26]. Для сплавов состава  $x = 0,214$  и др. с большей концентрацией селенида индия наблюдаются дополнительные линии, не характерные для структуры цинковой обманки.

Проведенное с целью уточнения границ области твердых растворов дополнительное исследование сплава состава  $x = 0,232$  показало, что и у этого состава наблюдаются две системы линий, соответствующие двум различным фазам: со структурой  $ZnS$  и низкосимметричной.

Результаты термического анализа хорошо согласуются с рентгенофазовыми исследованиями. Так, в интервале концентраций  $x = 1 - 0,25$  (составы 1—6, см. таблицу) наблюдаются на термограммах четкие критические точки, соответствующие точкам ликвидуса и солидуса сплавов. При этом температура плавления уменьшается от 1070 до 750—710°C. Последнее обстоятельство имеет большое технологическое значение для синтеза и обработки фосфидных сплавов, ибо при более низких температурах плавления меньше давление паров этих веществ над расплавом, что резко сокращает количество неудачных синтезов из-за растрескивания кварцевых ампул. У сплавов составов 2—4 ( $x = 0,75; 0,5; 0,25$ ) наблюдались слабые дополнительные эффекты при температурах 585—630°C. Это, по-видимому, объясняется недостаточной гомогенизацией этих сплавов либо полиморфными превращениями в них.

Термограммы сплавов состава  $x = 0,25$  обладают несколькими близкими по величине эффектами, соответствующими наличию разных фаз.

Микроструктурный анализ подтверждает данные рентгенофазовых и термических исследований. На рис. 2 и 3 показаны микрошлифы сплавов составов  $x = 0,75$  (после травления) и  $x = 0,214$  (без травления). Для первого сплава наблюдается однородная поверхность с одинаковыми величинами микротвердости вдоль шлифа. Травление  $HNO_3 + 3HCl$  позволяет выявить границы зерен (рис. 2). Для второго сплава, относящегося к области отсутствия растворимости, наблюдаются различные фазы с резко отличающимися значениями микротвердости (рис. 3).

Микротвердость в зависимости от состава изменяется по кривой с максимумом, что ранее наблюдалось и в других разрезах аналогичных систем [8, 9]. Максимальное значение микротвердости ( $490 \text{ кг/мм}^2$ ) получено для состава  $x = 0,75$  (см. таблицу).

Электропроводность сплавов в зависимости от концентрации вначале возрастала более чем на один порядок при добавлении  $In_2Se_3$  в фосфид индия, затем постепенно убывала до состава  $x = 0,25$ . В области, где твердые растворы не были обнаружены, она не изменялась закономерно, а принимала различные значения в зависимости от состава участка измеряемого образца.

Аналогичные зависимости электропроводности от состава наблюдались ранее также в арсеноселенидах галлия и индия [10, 22] и в арселлуридах индия [22, 27].

Такой характер изменения электрических свойств, по-видимому, вызван тем, что при добавлении в фосфид индия малых концентраций селенида индия образуется большое количество донорных примесных центров за счет атомов селена, замещающих атомы фосфора. Этим можно объяснить увеличение значения электропроводности для состава  $x=0,75$ . Дальнейшее постепенное увеличение количества нейтральных вакантных узлов в решетке полупроводникового материала (при росте концентрации дефектного соединения  $A_2^{III}V_3^{VI}$ ) приводит к нарушению периодичности в расположении атомов вещества и созданию дополнительного электрического поля, препятствующего образованию примесных уровней [28, 29].

Измерение температурной зависимости электропроводности для некоторых составов (рис. 4) показало, что фосфидо-селениды индия обладают полупроводниковыми свойствами, изменяющимися в зависимости от концентраций исходных соединений.

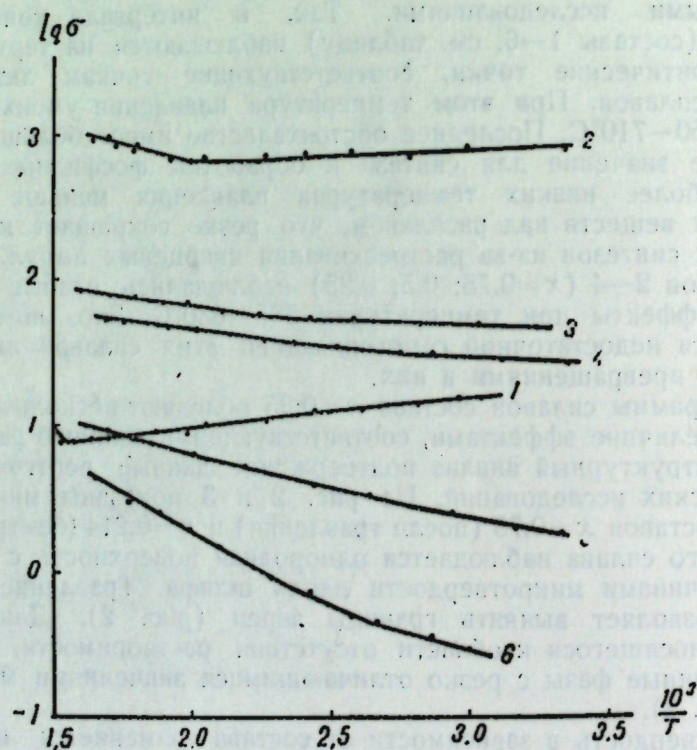


Рис. 4. Температурная зависимость электропроводности сплавов системы  $(InP)_{3x}-(In_2Se_3)_{1-x}$  при  $x$ , равном: 1 (1); 0,750 (2); 0,571 (3); 0,500 (4); 0,250 (5); 0,100 (6).

Дальнейшее подробное изучение электрических, гальваномагнитных и оптических свойств позволит определить основные характеристики твердых растворов фосфидо-селенидов индия. Однако, исходя из аналогии с уже изученными растворами типа  $A_2^{III}V_3^{VI} - A_2^{III}V_3^{VI}$  [30, 27], можно предположить, что ширина запрещенной зоны изучаемых твердых растворов будет плавно изменяться от 1,4 эВ (для  $InP$ ) до 1,2 эВ (для  $In_2Se_3$ ).

## ВЫВОДЫ

1. Изучение разреза  $(InP)_{3x}-(In_2Se_3)_{1-x}$  тройной системы индий—фосфор—селен показало, что в интервале концентраций 75 эквивал. % ( $x=1 \div 0,25$ ) образуются твердые растворы со структурой типа цинковой обманки с параметром решетки, изменяющимся от 5,87 до 5,76 Å.

Термические и микроструктурные исследования подтвердили наличие растворимости в указанном интервале концентраций.

2. Измерения температурной зависимости электропроводности выявили аналогию свойств изучаемых материалов с другими твердыми растворами на основе дефектных соединений  $In_2Se_3$  и  $In_2Te_3$ . Все сплавы обладают полупроводниковыми свойствами.

В заключение авторы приносят глубокую благодарность доктору химических наук Н. А. Горюновой за большой интерес к данному исследованию и ценные советы при его выполнении, а также Р. А. Маслянку за участие в экспериментальной работе.

Поступило  
6.XII 1961 г.

## ЛИТЕРАТУРА

1. А. Ф. Иоффе, Физика полупроводников, изд. АН СССР, 1957.
2. В. П. Жузе, А. Р. Регель, Технические применения эффекта Холла, Л., 1957.
3. D. A. Jenpy, J. J. Loferski, P. Rappaport, Phys. Rev., 101, 1208 (1956).
4. Н. А. Горюнова, Исследование в области химии полупроводников, Докт. дисс., Л., 1958.
5. H. Welker, Physica, 20, 893 (1954).
6. Н. А. Горюнова, Известия Молд. фил. АН СССР № 3(69), 21 (1960).
7. Н. А. Горюнова, В. С. Григорьева, ЖТФ, 26, 2157 (1956).
8. Н. А. Горюнова, С. И. Радауцан, ДАН, 121, 848 (1958).
9. Н. А. Горюнова, С. И. Радауцан, ЖТФ, 28, 1917 (1958).
10. Д. Н. Наследов, И. А. Фелтиньш, ФТТ, 1, 565 (1959); 2, 823 (1960).
11. J. C. Woolley, V. A. Smith, Proc. Phys. Soc., 72, 864 (1958).
12. М. С. Миргаловская, Е. В. Скуднова, ЖНХ, 4, 1113 (1959).
13. С. И. Радауцан, ЖНХ, 4, 1121 (1959).
14. H. Hahn, Angew. chem., 65, 538 (1953).
15. С. А. Семилетов, ФТТ, 3, 746 (1961).
16. Б. Т. Коломиец, А. А. Малькова, ФТТ, сб. II, 32 (1959).
17. С. И. Радауцан, О. П. Дерид, Известия Молд. фил. АН СССР, № 3 (69), 105 (1960).
18. Н. А. Горюнова, В. И. Соколова, Известия Молд. фил. АН СССР, № 3 (69), 31 (1960).
19. С. И. Радауцан, И. А. Мадан, И. П. Молодяи, Р. А. Иванова, Известия Молд. фил. АН СССР № 3(69), 107 (1960).
20. O. G. Folberth, H. Weiss, Zs. Naturforsch., 10a, 615 (1955).
21. А. С. Борщевский, Д. Н. Третьяков, ФТТ, 1, 1483 (1959).
22. С. И. Радауцан, Исследование некоторых твердых растворов полупроводников на основе арсенида индия, Канд. дисс., Л., 1958.
23. О. В. Емельяненко, Н. В. Тришин, ПТЭ, 1, 98 (1960).
24. О. В. Емельяненко, Д. Н. Наследов, Уч. записки Кишиневского гос. ун-та, 55, 3 (1960).
25. Б. Ф. Ормонт, Структуры неорганических веществ, М.—Л., ГИТТЛ, 1950.
26. О. В. Богородский, А. Я. Нашельский, В. З. Островская, Кристаллография, 6, вып. 1, 119 (1961).
27. J. C. Woolley, V. R. Ramplin, J. A. Evans, J. Phys. Chem. Solids, 19, 147 (1961).
28. В. П. Жузе, В. М. Сергеева, А. И. Шелых, ФТТ, 2, 2858 (1960).
29. С. И. Радауцан, Б. Е. Ш. Малкович, ФТТ, 3, 3324 (1961).
30. Д. Н. Наследов, М. П. Проинина, С. И. Радауцан, ФТТ, 2, 50 (1960).

С. И. РАДАУЦАН, И. А. МАДАН

СОЛУЦИИЛЕ СОЛИДЕ АЛЕ ФОСФУРИЛОР ШИ СЕЛЕНИУРИЛОР  
ДЕ ИНДИУ

## Резумат

С'ау студият алиажеле секциуней  $(\text{InP})_{3x} - (\text{In}_2\text{Se}_3)_{1-x}$  дин систе-  
мул триплу индиу—фосфор—селену. Прии методеле анализей рент-  
геноструктурале, термиче ши микроструктурале, с'а доведит, кэ ши  
секциуня студиятэ се формязэ солуций солиде ку структура де типул  
блендей де зинк ши интервалул дела фосфура де индиу пынэ. ла  
алиажул компус  $x=0,25$ .

Скимбаря термикэ а кондуктибилитэций електриче доведеште, кэ  
тоате алиажеле студияте ау проприетэць де семикондуктор.

## КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

И. У. БРОНШТЕЙН, Б. А. ЩЕРБАКОВ

НЕКОТОРЫЕ СВОЙСТВА УСТОЙЧИВЫХ ПО ЛАГРАНЖУ  
ВОРОНОК ОБОБЩЕННЫХ ДИНАМИЧЕСКИХ СИСТЕМ

В этой заметке изучаются некоторые свойства устойчивых по Ла-  
гранжу воронок обобщенных динамических систем [1], заданных в  
произвольном метрическом пространстве  $R$ .

Определение 1. Точка  $q \in R$  называется  $\omega(\alpha)$ -предельной точкой  
воронки  $f(p, I)$  ( $p \in R$ ), если для любых  $\varepsilon > 0$  и  $T > 0$  существует  
 $t > T$  ( $t < -T$ ) такое, что  $\rho[q, f(p, t)] < \varepsilon$ .

Множество всех  $\omega(\alpha)$ -предельных точек воронки  $f(p, I)$  обозна-  
чается  $f(p; +)$  ( $f(p; -)$ ). Это определение равносильно соответствую-  
щему определению, приведенному в работе [1]. Там же доказана  
замкнутость множеств  $f(p; +)$  и  $f(p; -)$ .

Определение 2. Воронка  $f(p, I)$  называется устойчивой по Ла-  
гранжу в положительном (отрицательном) направлении, если  $\overline{f(p, I^+)}$   
( $\overline{f(p, I^-)}$ ) компактно (что равносильно компактности в  $R$  множества  
 $f(p, I^+)$ ), соответственно  $f(p, I^-)$ .

Примечание. Очевидно, что если воронка  $f(p, I)$  устойчива в  
положительном (отрицательном) направлении, то и воронка  $f(q, I)$   
точки  $q \in f(p, I^+)$  ( $q \in f(p, I^-)$ ) также устойчива по Лагранжу в положи-  
тельном (отрицательном) направлении.

Теорема 1. Для того, чтобы воронка  $f(p, I)$  была устойчивой  
по Лагранжу в положительном направлении, необходимо и доста-  
точно выполнения следующих условий:

- 1)  $f(p; +)$  не пусто;
- 2)  $f(p; +)$  компактно;
- 3)  $\lim_{t \rightarrow +\infty} \beta[f(p, t), f(p; +)] = 0$ ,

где  $\beta$  означает полуотклонение одного множества от другого.

Необходимость. Рассмотрим произвольную числовую после-  
довательность  $\{t_n\}$ ,  $t_n > 0$ , сходящуюся к  $+\infty$ . Так как  $\{q_n\} \subset \overline{f(p, I^+)}$ ,  
где  $q_n \in f(p, t_n)$ , то последовательность  $\{q_n\}$  можно считать сходящейся.  
Пусть  $\{q_n\} \rightarrow q$ . Точка  $q$  является  $\omega$ -предельной точкой воронки  $f(p; +)$ .  
Значит,  $f(p; +)$  не пусто. Компактность  $f(p; +)$  вытекает из вклю-  
чения  $f(p; +) \subset \overline{f(p, I)}$ . Выполнение условия 3 доказывается так же,  
как и в [1] (стр. 193).

Достаточность. Докажем компактность  $f(p, I^+)$  в  $R$ . Рассмо-  
трим бесконечную последовательность  $\{q_n\} \subset f(p, I^+)$ . Пусть  $q_n \in f(p, t_n)$ .  
Если последовательность  $\{t_n\}$  ограничена, то  $\{q_n\}$  принадлежит конеч-

ному отрезку воронки  $f(p, I)$ , который является компактным в себе множеством ([1] стр. 178). В этом случае из  $\{q_n\}$  можно выделить сходящуюся подпоследовательность.

Пусть  $\{t_n\} \rightarrow +\infty$ . Ввиду выполнения условия 3, для каждого натурального  $k$  можно подобрать номер  $n_k$  так, чтобы выполнялось неравенство:  $\beta[f(p, t_{n_k}), f(p; +)] < \frac{1}{k}$ . Из этого неравенства следует

существование точки  $r_k \in f(p; +)$  такой, что  $\rho(q_{n_k}, r_k) < \frac{1}{k}$ . В силу

условия 2, последовательность  $\{r_k\}$  можно считать сходящейся, так как  $\{r_k\} \subset f(p; +)$ . Переходя к пределу при  $k \rightarrow \infty$  в неравенстве  $\rho(q_{n_k}, r) \leq \rho(q_{n_k}, r_k) + \rho(r_k, r)$ , где  $r = \lim_{k \rightarrow \infty} r_k$ , убеждаемся, что последовательность  $\{q_{n_k}\}$  сходится.

**Следствие.** Для того, чтобы движение  $f(p, t)$  [2] динамической системы с единственностью  $(f(p, t) - \text{точка при любом } p \in R)$  было устойчивым по Лагранжу в положительном направлении, необходимо и достаточно выполнения следующих условий:

- 1')  $\Omega_p$  не пусто;
- 2')  $\Omega_p$  компактно;
- 3')  $\lim_{t \rightarrow +\infty} \rho[f(p, t), \Omega_p] = 0$ .

Можно указать случаи, когда условия 1' и 3' выполнены, но движение не устойчиво по Лагранжу в положительном направлении\*).

**Пример 1.** В системе дифференциальных уравнений ([2], стр. 362)

$$\frac{dx}{dt} = \frac{x(1-x^2) - y(1-x^2)^2}{(1+x^2)(1+p)}, \quad \frac{dy}{dt} = \frac{y}{1+p} + \frac{x}{1-x^2} \cdot \frac{1}{1+p},$$

где  $\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$ , произведем замену переменных  $u = xe^{-y^2}$ ,  $v = y$ . Геометрическая картина расположения траекторий полученной системы схематически изображена на рис. 1.

Точка  $O(0,0)$  является точкой покоя, а  $\Omega_p = L_1UL_2$ . Движение  $f(p, t)$  не устойчиво по Лагранжу в положительном направлении, хотя условия 1' и 3' выполнены.

Можно также показать, что из условий 1' и 2' не следует, вообще говоря, условие 3'.

**Пример 2.** Если в качестве пространства  $R$  взять открытый круг  $x^2 + y^2 < 1$  с присоединенной к нему точкой  $x=1, y=0$  и определить динамическую систему уравнениями ([2] стр. 375):

$$\frac{dx}{dt} = [-y + x(1-x^2-y^2)] \cdot [(x-1)^2 + y^2],$$

$$\frac{dy}{dt} = [x + y(1-x^2-y^2)] \cdot [(x-1)^2 + y^2],$$

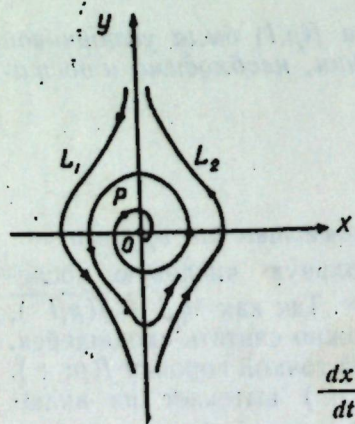


Рис. 1

\*) Идея построения такого рода примеров принадлежит Ю. М. Рябухиной.

то для любой точки  $p$ , отличной от начала координат и лежащей внутри круга, множество  $\Omega_p$  состоит из точки покоя  $x=1, y=0$  и, следовательно, является непустым и компактным. В то же время очевидно, что  $\lim_{t \rightarrow +\infty} \rho[\Omega_p, f(p, t)]$  не существует и движение  $f(p, t)$  не устойчиво по Лагранжу.

Заметим, что в этом примере пространство  $R$  не является ни полным, ни локально компактным.

Аналогичный пример можно, однако, построить и в полном пространстве.

**Пример 3.** Построим бесконечную в обе стороны последовательность  $\{a_k\}$  ( $k = \dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots$ ) по следующему правилу:

$$a_k = \begin{cases} \sqrt{|k|}, & \text{если число } \sqrt{|k|} \text{ — натуральное,} \\ 0 & \text{в противном случае.} \end{cases}$$

Включив эту последовательность путем линейной интерполяции в пространство Бebutова [3], получим функцию  $\varphi(x)$  ( $-\infty < x < +\infty$ ) такую, что  $\varphi(k) = a_k$ .

Замыкание  $f(p, I)$  траектории  $f(p, I)$  точки  $p = \varphi(x)$  в системе Бebutова состоит из точек самой траектории и точки покоя  $p_0 = \varphi_0(x) \equiv 0$  ( $-\infty < x < +\infty$ ), причем  $\Omega_p = p_0$ .

Так как  $f(p, I)$  — замкнутое подмножество полного пространства Бebutова, то  $f(p, I)$  — полное пространство. Движение  $f(p, t)$  имеет непустое компактное  $\omega$ -предельное множество, но не устойчиво по Лагранжу в положительном направлении, так как функция  $\varphi(x)$  неограничена.

**Теорема 2.** Для того, чтобы воронка  $f(p, I)$  была устойчивой по Лагранжу в положительном направлении, необходимо и достаточно выполнения следующих условий:

- A. Если  $q \in f(p, I^+)$ , то  $f(q; +)$  не пусто;
- B.  $f(p; +)$  компактно;
- C.  $f(p, I^+)$  локально компактно.

**Необходимость.** Пусть  $f(p, I^+)$  компактно. Тогда условие A имеет место ввиду примечания и условия 1. Выполнимость остальных условий очевидна.

**Достаточность.** В силу теоремы 1 достаточно показать, что  $\lim_{t \rightarrow +\infty} \beta[f(p, t), f(p; +)] = 0$ . Допустим противное. Тогда для некоторого  $\varepsilon_0 > 0$  можно найти последовательность точек  $\{p_n\}$  ( $p_n \in f(p, t_n)$ ,  $t_n > 0$ ,  $\{t_n\} \rightarrow +\infty$ ), для которых  $\rho[p_n, f(p; +)] \geq \varepsilon_0 > 0$ . В силу условий, наложенных на  $f(p, I^+)$ , можно считать, что  $S[f(p; +), 2\varepsilon_0] \cap f(p, I^+)$  компактно. Так как  $f(p_n; +)$  не пусто и, как легко видеть,  $f(p_n; +) \subset f(p; +)$ , то найдутся точки  $r_n \in f(p_n, \tau_n)$ , для которых  $\rho[r_n, f(p; +)] < \varepsilon_0$ . Соединим точки  $p_n$  и  $r_n$  дугой траектории  $\varphi_{p_n}[0, \tau_n]$  ([1] стр. 180). В силу непрерывности функции  $\varphi_{p_n}(t)$  найдется число  $\tau'_n$ ,  $0 \leq \tau'_n < \tau_n$ , для которого

$$\rho[\varphi_{p_n}(\tau'_n), f(p; +)] = \varepsilon_0. \quad (1)$$

Тогда  $\varphi_{p_n}(\tau'_n) \in S[f(p; +), 2\varepsilon_0] \cap f(p, I^+)$ . Поэтому существует точка  $q$ , являющаяся предельной для некоторой подпоследовательности последовательности  $\{\varphi_{p_n}(\tau'_n)\}$ . Так как  $\varphi_{p_n}(\tau'_n) \in f(p_n, \tau'_n)$  и  $p_n \in f(p, t_n)$ , а  $t_n > 0$  и  $\tau'_n \geq 0$ , то  $\varphi_{p_n}(\tau'_n) \in f(p, t_n + \tau'_n)$ , и поскольку  $(t_n) \rightarrow +\infty$ , то  $q \in f(p; +)$ . С другой стороны, из (1) следует, что  $\rho[q, f(p; +)] = \varepsilon_0 > 0$ . Теорема доказана.

Как следует из работы [1], в случае непрерывных динамических систем в теореме 2 условие А можно заменить следующим:

А\*.  $f(p; +)$  не пусто.

Следствие 1. Для того чтобы движение  $f(p, t)$  динамической системы с единственностью было устойчивым по Лагранжу в положительном направлении, необходимо и достаточно выполнения следующих условий:

А'.  $\Omega_p$  не пусто;

В'.  $\Omega_p$  компактно;

С'.  $\bar{f}(p, I^+)$  локально компактно.

В случае неконинуальных динамических систем условие А не может быть заменено условием А\*, что показывает.

Пример 4. Пространство  $R$  состоит из прямой  $MN$  и дуги  $AB$  (рис. 2). Зададим обобщенную динамическую систему так, чтобы движение по прямой  $MN$  было равномерным, а по дуге  $AB$  асимптотически стремящимся к точке  $B$  при  $t \rightarrow +\infty$  и к  $A$  при  $t \rightarrow -\infty$ .

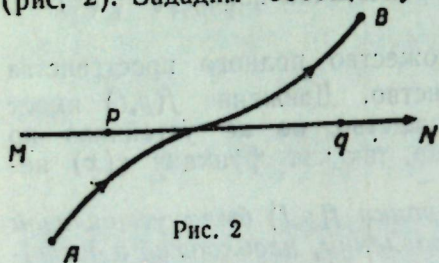


Рис. 2

Легко видеть, что условия А\*, В и С выполнены для точки  $p$ , а условие А не выполнено и воронка  $f(p, I)$  не устойчива по Лагранжу в положительном направлении.

Следствие 2. Пусть пространство  $R$  локально компактно (каким является, например,  $n$ -мерное евклидово пространство). Для того, чтобы воронка  $f(p, I)$  обобщенной динамической системы была устойчивой по Лагранжу в положительном направлении, необходимо и достаточно выполнения условий А и В, а в случае непрерывной динамической системы — чтобы множество  $f(p; +)$  было непустым и компактным.

Предложения, аналогичные доказанным выше, имеют место для воронок, устойчивых по Лагранжу в отрицательном направлении.

Поступило  
20.1 1962 г.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Б. М. Будак, Уч. зап. МГУ, вып. 155, Математика, V, 174 (1952).
2. В. В. Немыцкий и В. В. Степанов, М.—Л., ГИТТЛ, 1949.
3. В. В. Немыцкий, УМН, IV, вып. 6 (34), 91 (1949).

И. Ц. ГОХБЕРГ и А. С. МАРКУС

### О НЕКОТОРЫХ НЕРАВЕНСТВАХ МЕЖДУ СОБСТВЕННЫМИ ЧИСЛАМИ И МАТРИЧНЫМИ ЭЛЕМЕНТАМИ ЛИНЕЙНЫХ ОПЕРАТОРОВ

В настоящем сообщении приводятся некоторые новые неравенства между собственными и сингулярными числами и матричными элементами линейных операторов, а также некоторые теоремы о существовании линейных операторов с заданным спектром и заданными матричными элементами. Эти результаты основываются на одной теореме о вогнутых функциях.

Доказательства приводимых здесь предложений будут опубликованы позднее.

1. Пусть  $\{a_k\}_1^\omega$  и  $\{b_k\}_1^\omega$  ( $\omega < \infty$ ) — две системы вещественных чисел. Будем говорить, что первая из них мажорируется второй и писать  $\{a_k\}_1 \prec \{b_k\}_1$ , если выполнены следующие условия:

$$1) \sup_{j=1}^n a_{k_j} < \sup_{j=1}^n b_{k_j}, \quad \inf_{j=1}^n a_{k_j} > \inf_{j=1}^n b_{k_j} \quad (n = 1, 2, \dots, \omega),$$

где верхняя и нижняя грани распространяются на все системы из  $n$  различных натуральных чисел  $k_1, k_2, \dots, k_n$ ;

$$2) \sum_{j=1}^{\omega} a_j = \sum_{j=1}^{\omega} b_j, \quad \text{причем оба ряда сходятся абсолютно.}$$

Очевидно, для невозрастающих систем  $\{a_k\}$  и  $\{b_k\}$  неотрицательных чисел условие 1) в этом определении можно заменить любым из двух следующих условий:

$$1') \sum_{j=1}^n a_j < \sum_{j=1}^n b_j \quad (n = 1, 2, \dots, \omega); \quad 1'') \sum_{j=n}^{\omega} a_j > \sum_{j=n}^{\omega} b_j \quad (n = 1, 2, \dots, \omega).$$

Лемма. Пусть  $\{a_k\}_1^\omega$  и  $\{b_k\}_1^\omega$  — невозрастающие последовательности неотрицательных чисел, вторая из которых мажорирует первую. Тогда существуют такие неотрицательные числа  $p_{ki}$  ( $i, k = 1, 2, \dots$ ), что

$$a_k = \sum_{j=1}^{\omega} p_{kj} b_j \quad (k = 1, 2, \dots)$$

$$\sum_{i=1}^{\infty} p_{ki} = 1 (k=1, 2, \dots), \quad \sum_{k=1}^{\infty} p_{ki} = 1 (i=1, 2, \dots).$$

С помощью этой леммы доказывается следующая

**Теорема 1.** Пусть  $\{a_k\}_1^{\infty}$  и  $\{b_k\}_1^{\infty}$  — невозрастающие последовательности неотрицательных чисел, причем вторая из них мажорирует первую. Тогда для любой вогнутой функции  $f(x)$  ( $0 < x < \infty$ )

$$\sum_{k=1}^{\infty} f(a_k) \geq \sum_{k=1}^{\infty} f(b_k),$$

причем для строго вогнутой функции  $f(x)$  знак равенства в этом соотношении (при условии, что обе его части конечны) достигается лишь при  $a_k = b_k$  ( $k=1, 2, \dots$ ). Если же  $f(x)$  ( $0 < x < \infty$ ) — произвольная вогнутая неубывающая функция, то

$$\sum_{k=n}^{\infty} f(a_k) \geq \sum_{k=n}^{\infty} f(b_k) \quad (n=1, 2, \dots).$$

Имеет место предложение, обратное к первому утверждению теоремы 1.

**Теорема 2.** Пусть  $\{a_k\}_1^{\infty}$  и  $\{b_k\}_1^{\infty}$  — невозрастающие последовательности неотрицательных чисел. Если

$$\sum_{k=1}^{\infty} f(a_k) \geq \sum_{k=1}^{\infty} f(b_k)$$

для любой вогнутой функции  $f(x)$  ( $0 < x < \infty$ ), то выполняются условие 1') и равенства

$$\lim a_k = \lim b_k, \quad \sum_{k=1}^{\infty} a_k = \sum_{k=1}^{\infty} b_k.$$

Отметим, что для конечных систем  $\{a_k\}_1^m$  и  $\{b_k\}_1^m$  лемма, первое утверждение теоремы 1 и теорема 2 были доказаны Харди, Литтлвудом и Поля ([1], стр. 62—66 и 111—113), а второе утверждение теоремы 1 — Островским ([2], стр. 265—266).

2. Пусть  $H$  — сепарабельное гильбертово пространство,  $\omega = \dim H (< \infty)$ ,  $R$  — нормированное кольцо всех линейных ограниченных операторов, действующих в  $H$ , и  $S_{\infty}$  — банахово пространство всех линейных вполне непрерывных операторов, действующих в  $H$ , с обычной нормой  $|A|_{\infty} = \sup_{f \in H} (|Af| / |f|)$  ( $A \in S_{\infty}$ ).

Если  $G$  — самосопряженный оператор из  $S_{\infty}$ , то через  $\{\lambda_j(G)\}_1^{\omega}$  будем обозначать полную систему собственных чисел оператора  $G$ , занумерованных как-либо в порядке убывания абсолютных величин,

причем при этой нумерации каждое ненулевое собственное число считается столько раз, какова его кратность\*).

Для произвольного оператора  $A \in S_{\infty}$  положим  $s_j(A) = \lambda_j((A^*A)^{1/2})$  ( $j=1, 2, \dots, \omega$ ). Следуя [3] и [4], через  $S_p$  ( $0 < p < \infty$ ) обозначим совокупность всех операторов  $A \in S_{\infty}$ , для которых

$$|A|_p = \left( \sum_{j=1}^{\omega} s_j^p(A) \right)^{1/p} < \infty.$$

Приводимые в этом пункте предложения доказываются с помощью теоремы 1 и некоторых результатов Фань Цюя [5] и Г. Вейля [6].

1°. Если  $A \in S_{\infty}$  и  $n (< \omega)$  — произвольное натуральное число, то при  $p \geq 2$

$$\max \left( \sum_{j=1}^n |A\varphi_j|^p \right)^{1/p} = \left( \sum_{j=1}^n s_j^p(A) \right)^{1/p},$$

а при  $p < 2$

$$\max \left( \sum_{j=1}^n |A\varphi_j|^p \right)^{1/p} = n^{1/p-1/2} \left( \sum_{j=1}^n s_j^2(A) \right)^{1/2},$$

где максимум распространяется на всевозможные ортонормированные системы  $\{\varphi_j\}_1^n$ .

2°. Если  $A \in S_{\infty}$  и  $p \geq 2$ , то

$$\max \left( \sum_{j=1}^{\omega} |A\varphi_j|^p \right)^{1/p} = |A|_p,$$

где максимум распространяется на все ортонормированные базисы  $\{\varphi_j\}_1^{\omega}$  пространства  $H$ . Если  $\omega = \infty$ ,  $A \in R$ ,  $A \neq 0$  и  $p < 2$ , то всегда существует такой ортонормированный базис  $\{\varphi_j\}_1^{\omega}$  пространства  $H$ , что  $\sum |A\varphi_j|^p = \infty$ .

3°. Если  $A \in S_{\infty}$ , то при  $0 < p < 2$

$$\min \left( \sum_{j=k}^{\omega} |A\varphi_j|^p \right)^{1/p} = \left( \sum_{j=k}^{\omega} s_j^p(A) \right)^{1/p} \quad (k=1, 2, \dots, \omega),$$

при  $p \geq 2$  и  $\omega < \infty$

$$\min \left( \sum_{j=k}^{\omega} |A\varphi_j|^p \right)^{1/p} = (\omega - k + 1)^{1/p-1/2} \left( \sum_{j=k}^{\omega} s_j^2(A) \right)^{1/2} \quad (k=1, 2, \dots, \omega),$$

\* Термин «полная» имеет в случае  $\omega = \infty$  не совсем обычный смысл, так как если у оператора  $G$  имеется бесконечное число ненулевых собственных чисел, то последовательность  $\{\lambda_j(G)\}_1^{\infty}$  будет состоять только из таких и, стало быть, в нее не войдут собственные числа оператора  $G$ , равные нулю, даже если такие имеются; если же оператор  $G$  имеет конечное число  $n$  ненулевых собственных чисел, то полагаем  $\lambda_{n+j}(G) = 0$  ( $j=1, 2, \dots$ ).



а при  $p > 2$  и  $\omega = \infty$

$$\inf \sum_{j=1}^{\omega} |A\varphi_j|^p = 0.$$

Здесь минимум и нижняя грань берутся по всем ортонормированным базисам  $\{\varphi_j\}_1^{\omega}$  пространства  $H$ .

4°. Если  $A \in S_{\infty}$  и  $p \geq 2$ , то

$$\max \left( \sum_{k=1}^n |(A\varphi_j, \psi_k)|^p \right)^{1/p} = \left( \sum_{j=1}^n s_j^p(A) \right)^{1/p} \quad (n = 1, 2, \dots, \omega),$$

где максимум распространяется на все ортонормированные базисы  $\{\varphi_j\}_1^{\omega}$  и  $\{\psi_j\}_1^{\omega}$  пространства  $H$ . Если  $\omega = \infty$ ,  $A \in R$ ,  $A \neq 0$  и  $p < 2$ , то всегда найдется такой ортонормированный базис  $\{\varphi_j\}_1^{\omega}$ , что  $\sum |(A\varphi_j, \varphi_k)|^p = \infty$ .

5°. Если  $A \in S_{\infty}$  и  $0 < p < 2$ , то

$$\min \left( \sum_{j,k=1}^{\omega} |(A\varphi_j, \psi_k)|^p \right)^{1/p} = |A|_p,$$

где минимум распространяется на все ортонормированные базисы  $\{\varphi_j\}_1^{\omega}$  и  $\{\psi_j\}_1^{\omega}$  пространства  $H$ . Если же  $A \in S_{\infty}$ ,  $p > 2$  и  $\omega = \infty$ , то

$$\inf \sum_{j,k=1}^{\omega} |(A\varphi_j, \varphi_k)|^p = 0,$$

где нижняя грань берется по всем ортонормированным базисам  $\{\varphi_j\}_1^{\omega}$  пространства  $H$ .

Приведем два следствия из предложений этого пункта.

6°. Если линейный оператор  $A$  определен на некотором ортонормированном базисе  $\{\varphi_j\}_1^{\omega}$  пространства  $H$ ,  $0 < p < 2$  и выполнено хотя бы одно из двух следующих неравенств:

$$\sum_{j,k=1}^{\omega} |(A\varphi_j, \varphi_k)|^p < \infty \quad \text{или} \quad \sum_{j=1}^{\omega} |A\varphi_j|^p < \infty,$$

то  $A \in S_p$  и

$$|A|_p^p < \sum_{j=1}^{\omega} |A\varphi_j|^p = \sum_{j=1}^{\omega} \left( \sum_{k=1}^{\omega} |(A\varphi_j, \varphi_k)|^2 \right)^{p/2} < \sum_{j,k=1}^{\omega} |(A\varphi_j, \varphi_k)|^p.$$

Отметим, что для случая  $p = 1$  это предложение содержится в [7] и [8] (стр. 65—66).

7°. Если  $A \in S_p$ ,  $p \geq 2$  и  $\{\varphi_j\}_1^{\omega}$  — произвольный ортонормированный базис пространства  $H$ , то

$$\sum_{j,k=1}^{\omega} |(A\varphi_j, \varphi_k)|^p < \sum_{j=1}^{\omega} \left( \sum_{k=1}^{\omega} |(A\varphi_j, \varphi_k)|^2 \right)^{p/2} = \sum_{j=1}^{\omega} |A\varphi_j|^p < |A|_p^p.$$

3. Здесь указываются некоторые обобщения результатов предыдущего пункта, основанные на одном неопубликованном результате И.Ц. Гохберга и М. Г. Крейна и на теореме 1. Через  $\{P_j\}_1^{\nu}$  ( $\nu < \infty$ ) далее обозначается система ортогональных друг к другу ортогональных проекторов.

8°. Пусть  $A \in S_{\infty}$ . Если  $p \geq 2$ , то при  $\sum_{j=1}^{\nu} P_j = I$

$$\max \sum_{j=1}^{\nu} |AUP_j|_p^p = |A|_p^p,$$

а при  $\dim \sum_{j=1}^{\nu} P_j = n < \infty$

$$\max \sum_{j=1}^{\nu} |AUP_j|_p^p = \sum_{j=1}^n s_j^p(A).$$

Если же  $0 < p < 2$ , то при  $\dim (I - \sum_{j=1}^{\nu} P_j) = n < \infty$

$$\min \sum_{j=1}^{\nu} |AUP_j|_p^p = \sum_{j=n+1}^{\omega} s_j^p(A).$$

Здесь максимум и минимум распространяются на все унитарные операторы  $U$ , действующие в  $H$ .

9°. Если  $A \in S_{\infty}$  и  $\sum_{j=1}^{\nu} P_j = I$ , то при  $p \geq 2$

$$\max \sum_{j,k=1}^{\nu} |P_j U A V P_k|_p^p = |A|_p^p,$$

а при  $0 < p < 2$

$$\min \sum_{j,k=1}^{\nu} |P_j U A V P_k|_p^p = |A|_p^p,$$

где максимум и минимум распространяются на всевозможные унитарные операторы  $U$  и  $V$ , действующие в  $H$ .

4. Пусть  $G$  — некоторый самосопряженный оператор из  $S_{\infty}$  и  $\{\varphi_j\}_1^{\omega}$  — произвольный ортонормированный базис пространства  $H$ . Как установил Фань Цюй [9], для последовательностей  $\{(G\varphi_j, \varphi_j)\}$  и  $\{\lambda_j(G)\}$  выполняется условие 1). Если, кроме того,  $G \in S_1$ , то, очевидно, для этих последовательностей выполняется и условие 2), и, стало быть,  $\{(G\varphi_j, \varphi_j)\} \rightarrow \{\lambda_j(G)\}$ .

Имеет место утверждение, в некотором смысле обратное к сформулированному.

**Теорема 3.** Пусть  $G$  — самосопряженный оператор из  $S_1$ . Какова бы ни была последовательность расположенных по убыванию модуля вещественных чисел  $\{a_j\}_1^\omega$ , мажорируемая последовательностью  $\{\lambda_j(G)\}_1^\omega$ , существует ортонормированный базис пространства  $H$ , являющийся объединением ортонормированных систем  $\{\varphi_j\}_1^\omega$  и  $\{\psi_j\}_1^m$  ( $0 \leq m \leq \infty$ ) таких, что  $(G\varphi_j, \varphi_j) = a_j$  ( $j = 1, 2, \dots, \omega$ ) и  $(G\psi_j, \psi_j) = 0$  ( $j = 1, 2, \dots, m$ ).

Для случая  $\omega < \infty$  теорема 3 была доказана Хорном [10], а затем Мирским [11].

5. Если  $A$  — линейный ограниченный оператор, мнимая компонента которого  $A_j = (A - A^*) / 2i$  вполне непрерывна, то через  $\{\mu_k(A)\}_1^\omega$  обозначим полную систему его не вещественных собственных значений, занумерованных как-либо в порядке убывания величин  $|\operatorname{Im} \mu_k(A)|$  с учетом их кратностей\*). Как показал Фань Цюй [12], для последовательностей  $\{\operatorname{Im} \mu_k(A)\}$  и  $\{\lambda_k(A_j)\}$  выполняется условие 1). Если, кроме того,  $A_j \in S_1$  и система корневых векторов оператора  $A$  полна в  $H$ , то легко убедиться, что для этих последовательностей выполняется также условие 2), и, следовательно,  $\{\operatorname{Im} \mu_k(A)\} \rightarrow \{\lambda_k(A_j)\}$ .

С помощью теоремы 3 можно получить следующее обращение приведенного утверждения.

**Теорема 4.** Пусть  $\{z_k\}_1^\omega$  — ограниченная последовательность комплексных чисел, занумерованных в порядке убывания величин  $|\operatorname{Im} z_k|$ , и  $\{b_k\}_1^\omega$  — занумерованная в порядке убывания абсолютных величин последовательность вещественных чисел. Если  $\{\operatorname{Im} z_k\} \rightarrow \{b_k\}$ , то существует оператор  $A \in R$ , обладающий полной системой корневых векторов и такой, что  $A_j \in S_1$ ,  $\mu_k(A) = z_k$ ,  $\lambda_k(A_j) = b_k$  ( $k = 1, 2, \dots, \omega$ ). Если  $\operatorname{Im} z_k = 0$ , то  $A \in S_\infty$ .

Для случая  $\omega < \infty$  теорема 4 была доказана Мирским [11] и Амир-Моэзом и Хорном [13].

Поступило  
16.1 1962 г.

\*) Если число не вещественных собственных значений оператора  $A$  меньше  $\omega$ , то мы дополняем систему  $\{\mu_k(A)\}$  нулями.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Г. Г. Харди, Дж. Е. Литтлвуд и Д. Поля, Неравенства, М., ИЛ, 1948.
2. A. Ostrowski, J. math. pures et appl., 31, № 3, 253 (1952).
3. И. Ц. Гохберг и М. Г. Крейн, ДАН, 128, № 2, 227 (1959).
4. И. Ц. Гохберг и М. Г. Крейн, ДАН, 137, № 5, 1034 (1961).
5. Ku Fan, Proc. Nat. Acad. Sci. USA, 37, 760 (1951).
6. H. Weyl, Proc. Nat. Acad. Sci. USA, 35, 408 (1949).
7. W. F. Stinespring, J. reine und angew. Math., 200, № 3—4, 200 (1958).
8. И. М. Гельфанд и Н. Я. Виленкин, Некоторые применения гармонического анализа. Оснащенные гильбертовы пространства, М., Физматгиз, 1961.
9. Ku Fan, Proc. Nat. Acad. Sci. USA, 35, 652 (1949).
10. A. Horn, Amer. J. Math., 76, № 3, 620 (1954).
11. L. Mirsky, J. London Math. Soc., 33, № 1, 14 (1958).
12. Ku Fan, Proc. Nat. Acad. Sci. USA, 36, 31 (1950).
13. A. R. Amir-Moéz, A. Horn, Amer. Math. Monthly, 65, № 10, 742 (1958).

Э. П. СИНЯВСКИЙ, В. А. КОВАРСКИЙ

#### К ТЕОРИИ РЕКОМБИНАЦИИ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ ПРИ НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ В «НЕКОНДОНОВСКОМ ПРИБЛИЖЕНИИ»\*)

В последнее время всесторонне обсуждается вопрос о механизме рекомбинации носителей тока в полупроводниках. Теоретические оценки поперечников захвата, выполненные в рамках так называемого «кондоновского приближения», приводят к значениям, отличающимся на несколько порядков от соответствующих экспериментальных оценок [1, 2]. Предложенный Лэксом [3] механизм «каскадного» захвата дает правильный порядок для величины эффективного поперечника, но при этом его температурная зависимость в некоторых случаях не согласуется с наблюдаемой на опыте [4]. Кроме того [5], в ряде случаев нет необходимых условий, чтобы реализовался «каскад». С другой стороны, развитая одним из авторов [6] теория безызлучательных переходов в «некондоновском приближении» при низких температурах приводит к резкому возрастанию вероятностей безызлучательного перехода. Таким образом, представляет интерес оценить в рамках предложенной теории соответствующие эффективные поперечники захвата.

В качестве примера исследуем рекомбинацию электрона на заряженном кулоновском центре. Простоты ради учтем взаимодействие электрона с продольными оптическими фононами. Соответствующий потенциал взаимодействия в ионных полупроводниках имеет вид [7]:

$$v = \sum_x V_x(\vec{r}) q_x; V_x(\vec{r}) = -eV \sqrt{4\pi\hbar\omega_c} \frac{1}{x} \chi_{-x}(\vec{r});$$

$$\chi_{-x}(\vec{r}) = \sqrt{\frac{2}{L^3}} \begin{cases} \cos \vec{xr} & x_x < 0 \\ \sin \vec{xr} & x_x > 0. \end{cases} \quad (1)$$

\*) Результаты работы частично доложены В. А. Коварским на II Всесоюзном совещании по фотоэлектрическим и оптическим явлениям в полупроводниках, Львов, 1961 г.

Здесь  $L^3$  — размер основной области,  $c = \frac{1}{n^2} - \frac{1}{s}$  ( $n$  — показатель преломления,  $\epsilon$  — диэлектрическая постоянная),  $\omega$  — предельная частота оптических колебаний.

Потенциал взаимодействия электрона с оптической ветвью гомеоплярного кристалла, следуя Зейцу [8] (см. также [1]), в грубом приближении можно оценить, заменив волновой вектор  $\vec{x}$  на  $\vec{x}_d$  (Дебая) в выражении для взаимодействия электрона с акустической ветвью [9], т. е.:

$$V(\vec{r}) = \sum_{\vec{x}} V_{\vec{x}}(\vec{r}) q_{\vec{x}}; V_{\vec{x}}(\vec{r}) = G \sqrt{\frac{\hbar^2 \vec{x}_d}{\rho W}} \chi_{-\vec{x}}(r), \quad (2)$$

где  $G$  — константа связи с оптическими колебаниями, имеющая размерность энергии;  $\rho$  — плотность кристалла;  $W$  — скорость звука.

С помощью метода [6] (см. также [10]) было получено общее выражение для среднего „теплового“ эффективного поперечника захвата носителя тока локальным центром „эйнштейновского кристалла“ при низких температурах:

$$\sigma_{\text{рекомб}} = \frac{1}{2V_T} \left( \frac{\hbar^2}{\mu k_0 T} \right)^{3/2} \frac{\pi}{\hbar^2 \omega} e^{-\frac{a}{2}} \sum_k \sum_{\nu=0}^4 \left( \frac{a}{2} \right)^{l_k - \nu} \frac{e^{-\frac{\hbar^2 k^2}{2\mu k_0 T}}}{(l_k - \nu)!} \cdot \sum_{n,m=0}^4 \left\{ \sum_{\vec{x}} | \langle s | v_{\vec{x}} | k \rangle |^2 \cdot K_{nm\nu} + \left[ \sum_{\vec{x}} \frac{\langle s | v_{\vec{x}} | s \rangle \langle s | v_{\vec{x}} | k \rangle}{\hbar \omega} \right]^2 R_{nm\nu} \right\} \cdot \theta_{n,l_k-\nu}^{\pm} \theta_{m,l_k-\nu}^{\pm} \quad (3)$$

$$K_{101} = K_{102} = a; -\frac{1}{2} K_{213} = 2K_{212} = -K_{111} = -K_{113} = -K_{223} = \frac{1}{4} a^2, \\ K_{001} = -1; K_{112} = \frac{1}{2} a^2 - \frac{5}{4} a.$$

Остальные  $K_{nm\nu}$  тождественно равны нулю. Приведем отличные от

нуля  $R_{nm\nu}$ :  $R_{200} = \frac{4}{3} R_{111} = R_{301} = R_{202} = -R_{032} = -R_{101} = R_{023} = R_{103} =$

$= \frac{4}{13} R_{113} = R_{100} = \frac{1}{2} a$ ;  $R_{110} = -2 + \frac{1}{2} a - \frac{1}{8} a^2$ ;  $-R_{321} = -2R_{222} = R_{322} =$

$= -2R_{332} = R_{313} = \frac{1}{2} R_{323} = R_{413} = R_{423} = 2R_{114} = -\frac{1}{2} R_{214} = -\frac{1}{2} R_{224} =$

$= R_{314} = \frac{1}{2} R_{324} = -2R_{334} = -R_{412} = +\frac{1}{4} a^2$ ;  $R_{001} = -2R_{002} = 1$ ;

$R_{102} = \frac{4-a}{2}$ ;  $R_{220} = -\frac{1}{8} a(4a+1)$ ;  $R_{221} = \frac{1}{2} a^2 - \frac{1}{8} a$ ;  $R_{211} = \frac{1}{4} a^2 +$

$+\frac{5}{4} a$ ;  $R_{112} = -2 - \frac{1}{4} a^2 - \frac{1}{4} a$ ;  $R_{312} = \frac{1}{4} a(3-a)$ ;  $R_{210} = -\frac{a}{4} (a+2)$ ;

$R_{212} = \frac{3}{4} a^2 - \frac{a}{2}$ ;  $R_{223} = -\frac{a}{4} (5+a)$ ;  $R_{000} = \frac{1}{2}$ ;  $R_{213} = -\frac{1}{4} a(11+a)$ ;

$R_{201} = -\frac{3}{2} a + 2$ ;

$$\theta_{n-2p+1, l_k-\nu}^+ = \int_0^{\infty} e^{-\frac{a}{4} \tau^2} \tau^n (1 + \tau^2)^{\frac{l_k-\nu}{2}} \cos(\tau l_k - (l_k - \nu) \arctg \tau) d\tau, \quad (5)$$

$$\theta_{n-2p, l_k-\nu}^- = \int_0^{\infty} e^{-\frac{a}{4} \tau^2} \tau^n (1 + \tau^2)^{\frac{l_k-\nu}{2}} \sin(\tau l_k - (l_k - \nu) \arctg \tau) d\tau, \quad (6)$$

$$l_k = l_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}, \quad l_0 \approx \frac{l_{1s}}{\hbar \omega_d} \quad [9], \quad (7)$$

где  $\mu$  — эффективная масса электрона в зоне проводимости;  $v_T$  — средняя тепловая скорость электрона:

$$(\hbar \omega_d)^2 a = \sum_{\vec{x}} v_{\vec{x}s}^2 = \sum_{\vec{x}} | \langle s | v_{\vec{x}} | s \rangle |^2. \quad (8)$$

Для вычисления матричного элемента  $\langle s | v_{\vec{x}} | k \rangle$  воспользуемся точной кулоновской функцией  $\phi_{\vec{k}}^{(-)}$  [11]:

$$\phi_{\vec{k}}^{(-)*} = \frac{1}{L^{3/2}} e^{\frac{\pi n_0}{2}} \Gamma(1 - in) e^{-i\vec{k}r} F(in; 1; i(kr + \vec{k}r)); \quad n = \frac{n_0}{k}; \quad (9)$$

$$n_0 = \frac{\mu e^2}{\epsilon \hbar^2}.$$

Здесь  $F(\gamma, \alpha, z)$  — вырожденная гипергеометрическая функция (предполагается, что эффект экранировки невелик, что согласно В. Л. Бонч-Бруевичу [12] соответствует „нормальному“ случаю для электронного газа в полупроводнике).

Для расчета необходимо знать выражение вида:

$$\left| \int \phi_{\vec{k}}^{(-)*}(r) e^{i\vec{q}r} \phi_s(r) d\tau \right|^2 = |I|^2, \quad (10)$$

$$\phi_s(r) = \left( \frac{\alpha^3}{\pi} \right)^{1/2} e^{-\alpha r}, \quad (11)$$

где  $\phi_s(r)$  — волновая функция основного состояния электрона в локальном центре. Матричный элемент типа (10) для случая  $\alpha = n_0$  вычислен в [2, 11]. В исследуемом случае  $\alpha \neq n_0$  матричный элемент вычислялся одним из авторов в [13].

Приведем значение  $\sum_{\vec{x}} | \langle s | v_{\vec{x}} | k \rangle |^2$  для исследуемого случая низких температур ( $k/\alpha \ll 1$ );  $v_{\vec{x}}(\vec{r})$  взято согласно (2):

$$\sum_{\vec{x}} | \langle s | v_{\vec{x}} | k \rangle |^2 = \frac{2\pi \hbar^2 \alpha^2}{\rho W L^3} \frac{n_0}{k} \exp \left\{ -\frac{4\gamma_0}{1 + x_0^2} \right\} (\gamma_0^2 - \gamma_0 + 2) \cdot \left\{ 1 + O \left( \frac{k^2}{\alpha^2} \right) \right\}; \quad \gamma_0 = \frac{n_0}{\alpha}; \quad x_0 = \frac{2}{3} \gamma_0 \left( 1 + \sqrt{1 + \frac{9}{\gamma_0^2}} \right). \quad (12)$$

Матричный элемент  $[(\hbar\omega_x)^{-1} \sum_x \langle s | v_x | s \rangle \langle s | v_x | k \rangle]^2$ , входящий в общую формулу (3), для несильной электронно-фононной связи меньше либо порядка матричного элемента  $\sum_x |\langle s | v_x | k \rangle|^2$ , и для оценки порядка  $\sigma_{рекомб}$  можно ограничиться в (3) первым слагаемым в фигурной скобке, т. е. учитывая лишь члены с  $K_{nmv}$ .

Заметим также, что для перехода в непрерывный спектр с волновой функцией (9) учет колебаний по Кубо—Тоезава [14] либо по Пекару—Кривоглазу не изменяет общего выражения для эффективного поперечника (3). Кроме того, можно использовать приближение статьи [6] и не учитывать „эффектов второго порядка“.

Функцию  $\Theta_{n,l-\nu}^{\pm}$  удобно определить с помощью рекуррентных соотношений вида:

$$l\Theta_{0,l-\nu}^- = 1 - \frac{a}{2} \Theta_{1,l-\nu}^+ + (l-\nu)\Theta_{0,l-\nu-1}^-, \quad (13)$$

$$l\Theta_{1,l-\nu}^- = -\Theta_{0,l-\nu}^- + \frac{a}{2} \Theta_{2,l-\nu}^- + (l-\nu)\Theta_{1,l-\nu-1}^+, \quad (14)$$

$$\Theta_{0,l-\nu}^- = \Theta_{0,l-\nu-1}^+ - \Theta_{1,l-\nu-1}^+, \quad (15)$$

$$\Theta_{1,l-\nu}^+ = \Theta_{1,l-\nu-1}^+ + \Theta_{2,l-\nu-1}^-, \quad (16)$$

$$(l-1)\Theta_{0,l-2}^- - \left(\frac{a}{2} + l\right)\Theta_{0,l-1}^- + \frac{a}{2}\Theta_{0,l}^- + 1 = 0. \quad (17)$$

На основании (13—17) по известным выражениям

$$2i\Theta_{00}^- = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{-l^2/a} \Phi\left[\left(\frac{il}{\sqrt{a}}\right) - \text{к.с.}\right]; \Theta_{0,1}^- = \Theta_{00}^- \left(1 + \frac{2l}{a}\right) - \frac{2}{a}, \quad (18)$$

где  $\Phi(z)$  — интеграл вероятности, можно вычислять любую  $\Theta_{n,l-\nu}^{\pm}$  при произвольном значении параметров  $l$  и  $a$ .

Поступило  
17.1 1962 г.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. G. Rickayzen, Proc. Roy. Soc., A241, № 1227, 480 (1957) (перевод: Рекомб. носит. тока в полупроводниках, ИЛ, 1959).
2. Gummel, M. Lax, Annals of Phys., 2, 28 (1957).
3. H. Lax, Phys. Rev., 1961 (в печати).
4. С. Г. Калашников, Доклад на II Всесоюз. совещ. по фотоэлектр. и опт. явлениям в полупроводниках, Львов, 1961.
5. В. Л. Бонч-Бруевич, В. Б. Гласко, Доклад на II Всесоюз. совещ. по фотоэлектр. и опт. явлениям в полупроводниках, Львов, 1961.
6. В. А. Коварский, ФТТ, вып. 6, 1962.
7. С. И. Пекар, Исследования по электронной теории кристаллов, ГИТТЛ, 1951.
8. F. Seitz, Phys. Rev., 73, 549 (1948).
9. М. Ф. Дейген, ЖЭТФ, 31, 504 (1956).
10. Э. П. Сияевский, Дипломная работа, Кишиневский ун-т, 1961.
11. Л. Д. Ландау, И. М. Лифшиц, Квантовая механика, М., 1948.
12. В. Л. Бонч-Бруевич, Сб. ФТТ, 2, 182 (1959).
13. В. А. Коварский, Канд. дисс., Киев, 1958.
14. R. Kubo, J. Toyozawa, Progr. Theor. Phys., 13, 160 (1955).

В. Н. ЛАНГЕ и Т. И. ЛАНГЕ

#### ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ПОДВИЖНОСТИ НОСИТЕЛЕЙ ТОКА В СИСТЕМАХ ТЕЛЛУР—СЕЛЕН И ТЕЛЛУР—СЕРА

При изучении твердых растворов в системах теллур—селен и теллур—сера [1—4] было обнаружено, что зависимость некоторых физических характеристик от состава имеет в них аномальный характер: при определенном содержании меньшей компоненты на диаграммах: „состав — свойство“ обнаруживаются резкие отклонения от монотонного изменения. Так, например, в системе теллур—селен при содержании селена порядка 0,10 ат. % более чем вдвое увеличивается подвижность дырок, примерно на два порядка возрастает их концентрация и электропроводность, заметно уменьшаются ширина запретной зоны, твердость и плотность. При увеличении содержания примеси физические характеристики приближаются к свойствам исходного теллура, а в отдельных случаях превосходят их. Аналогичные явления наблюдаются также в системе теллур—сера при содержании серы около 0,05 ат. %.

Для интерпретации полученных экспериментальных результатов было предположено, что при малом содержании примесные атомы селена или серы входят в цепочки, из которых построена решетка теллура [5], по одному, тогда как при большей концентрации становится возможным образование внутри цепочек комплексов примесных атомов. В работе [4] показано, что если одиночные примесные атомы селена или серы сильно деформируют цепочку, увеличивая количество дефектов, то комплекс из трех подряд стоящих примесных атомов практически не искажает решетку. В соответствии с этим можно говорить об изменении степени дефектности структуры теллура при вариации содержания в нем примеси.

Дополнительные подтверждения справедливости рассмотренного выше механизма распределения примесных атомов в решетке теллура можно, по-видимому, получить, анализируя температурную зависимость подвижности носителей тока в образцах с различным содержанием примеси. Действительно, есть все основания предполагать, что переход от одиночного распределения примесных атомов к образованию группировок должен отразиться на характере температурной зависимости подвижности носителей тока таким образом, что в тех образ-

цах, где концентрация дефектов выше, рассеяние на фонах начнет сказываться при более высоких температурах. В самом деле, в работе В. П. Жузе, В. М. Сергеевой и А. И. Шелых [6] показано, что в полупроводниках с большой концентрацией нейтральных центров рассеяния, например в соединении  $\text{In}_3\text{Te}_2$ , где таковыми являются вакансии в катионной подрешетке, подвижность остается практически постоянной в широком интервале температур.

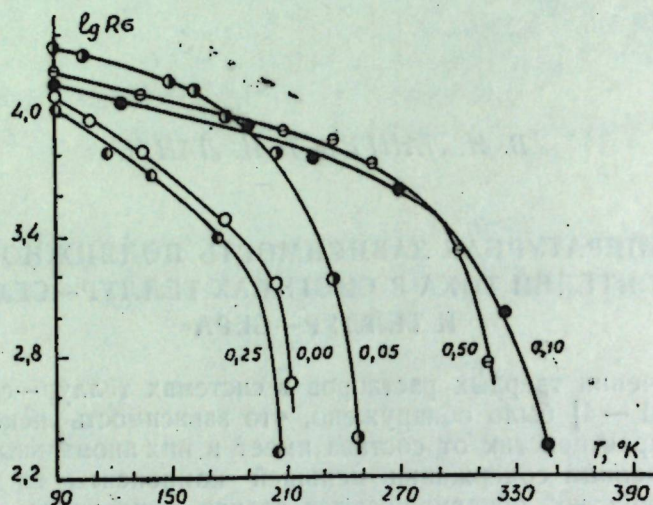


Рис. 1. Зависимость эффективной подвижности от температуры для различных образцов системы теллур—селен. Цифры у кривых означают содержание селена в ат. %

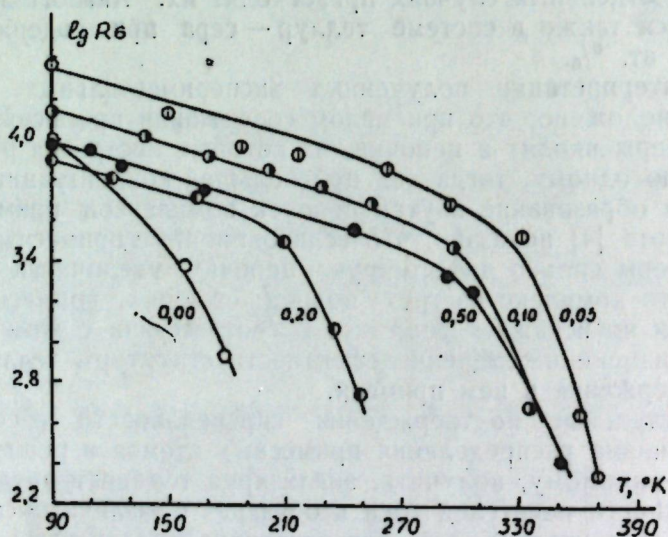


Рис. 2. Температурная зависимость эффективной подвижности для различных образцов системы теллур—серы. Содержание серы в образцах обозначено цифрами у кривых

Для проверки этого предположения были построены кривые зависимости  $\lg R\sigma$  от температуры для образцов систем теллур—селен и теллур—серы с различным содержанием примесей. Согласно обычной теории произведение  $R\sigma$  дает непосредственно подвижность носителей тока при проводимости какого-либо одного знака. Однако если пренебречь поправками, необходимыми для учета носителей двух знаков, оно является полезной характеристикой, и им в настоящее время часто пользуются для анализа экспериментальных результатов [6, 7]. На рис. 1 и 2 представлены результаты расчета. На рис. 1 приведены данные для образцов системы теллур—селен, приготовленных на основе теллура с концентрацией активных некомпенсированных примесей порядка  $10^{15}\text{см}^{-3}$ . На рис. 2 приводятся результаты для образцов системы теллур—серы, приготовленных на основе теллура примерно той же степени чистоты.

Из рис. 1 видно, что добавка селена в количестве 0,05 ат. % приводит к увеличению интервала, в котором подвижность слабо зависит от температуры. Еще более существенно он увеличивается при повышении содержания селена до 0,10 ат. %. Этот факт связывается нами с увеличением числа дефектов в решетке и хорошо коррелирует с данными, полученными ранее [1—4]. При дальнейшем повышении содержания селена начинается образование комплексов примесных атомов, в результате чего концентрация дефектов уменьшается. При этом сокращается также интервал слабой зависимости подвижности от температуры. Однако при увеличении содержания селена до 0,50 ат. %, видимо, существенную роль начинает играть рассеяние на комплексах примесных атомов, и быстрый спад произведения  $R\sigma$  становится заметным при еще более высокой температуре. Как следует из рис. 2, в системе теллура—серы наблюдаются такие же эффекты.

Быстрое уменьшение произведения  $R\sigma$ , наблюдаемое во всех сплавах при переходе к достаточно большим температурам, обусловлено, разумеется, не только повышением роли рассеяния на фонах, но и переходом к собственной проводимости. Поэтому необходимо рассмотреть, как меняется ширина запрещенной зоны теллура при введении селена или серы.

Действительно, с уменьшением  $\Delta E$  собственная проводимость, а с ней и спад  $R\sigma$  должны наблюдаться при более низкой температуре. Однако в системах теллур—селен и теллур—серы дело обстоит иначе. При введении в теллур, например, селена в количестве 0,05 ат. % ширина запрещенной зоны уменьшается, по нашим измерениям [4], от 0,32 до 0,31 эв. Увеличение концентрации селена до 0,10 ат. % уменьшает  $\Delta E$  до 0,27 эв. В то же время, как об этом говорилось выше, быстрое уменьшение  $R\sigma$  происходит при более высокой температуре. Поэтому особенности температурной зависимости подвижности носителей тока в системах теллур—селен и теллур—серы объяснить изменением ширины запрещенной зоны нельзя.

Таким образом, из анализа характера температурной зависимости  $\lg R\sigma$  можно, по-видимому, сделать выводы о степени дефектности бинарных твердых растворов при малом содержании одной из исходных компонент.

Авторы выражают благодарность за ценные советы и обсуждение работы в целом профессору А. Р. Регелю и кандидатам физико-математических наук Д. В. Гицу и С. И. Радауцану.

## ЛИТЕРАТУРА

1. В. Н. Ланге, Сб. науч. статей Барнаульского пед. ин-та, вып. 3, 351 (1958).
2. В. Н. Ланге и А. Р. Регель, ФТТ, 1, 559 (1959).
3. В. Н. Ланге и А. Р. Регель, ФТТ, 1, 562 (1959).
4. В. Н. Ланге и А. Р. Регель, ФТТ, 2, 2439 (1960).
5. Б. Ф. Ормонт, Структуры неорганических веществ, ГИТТЛ, 1950.
6. В. П. Жузе, В. М. Сергеева и А. И. Шельх, ФТТ, 2, 2859 (1960).
7. V. P. Žuže, A. R. Regel, Proc. Inter. Conf. of Semicond. Phys. Prague 1960, R 19, Prague, 1961, p. 929.

## СОДЕРЖАНИЕ

В. А. Андрунакиевич. Радикалы слабо ассоциативных колец. II	3
М. М. Бушко-Жук. Об определении адресной функции и принципах построения программирующих программ	10
И. Ц. Гохберг и А. С. Маркус. Об устойчивости базисов банаховых и гильбертовых пространств	17
А. И. Касьян. К теории электропроводности ионных кристаллов	36
В. А. Коварский и В. А. Москаленко. Термодинамическая теория возмущений для локального центра	47
С. А. Москаленко, А. И. Бобрывшева. Правила отбора и энергетический спектр экситонов. II. Действие внешних полей направленных деформаций на кубические кристаллы	60
М. Е. Палистрант. К теории безызлучательных переходов в F-центре	71
Ю. С. Боярская, М. И. Вальковская. О связи упругого восстановления отпечатков с микротвердостью вещества	78
Д. В. Гицу, Г. А. Иванов. К расчету анизотропии гальваномагнитных свойств монокристаллов висмута	83
С. И. Радауцаи, П. А. Мадан. Твердые растворы фосфида-селенидов индия	92

## КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

И. У. Бронштейн, Б. А. Щербаков. Некоторые свойства устойчивых по Лагранжу воронок обобщенных динамических систем	99
И. Ц. Гохберг и А. С. Маркус. О некоторых неравенствах между собственными числами и матричными элементами линейных операторов	103
Э. П. Синявский, В. А. Коварский. К теории рекомбинации в полупроводниках при низких температурах в «некондоновском приближении»	109
В. Н. Ланге и Т. И. Ланге. Температурная зависимость подвижности носителей тока в системах теллур — селен и теллур — сера	113

## ИЗВЕСТИЯ

АКАДЕМИИ НАУК МОЛДАВСКОЙ ССР

№ 5

Редактор Л. К. Мальцева  
 Художественный редактор В. Л. Пленковский  
 Технический редактор С. А. Полонский  
 Корректор П. Б. Цам

Сдано в набор 27/IV 1962 г.	Подписано к печати 20/VII 1962 г.
Формат бумаги 70×108 <sup>1/16</sup> .	Печ. л. 9,93+2 вкл. Уч.-изд. л. 5,96
Тираж 500 экз.	АБ01721. Заказ № 356. Цена 45 коп.

Издательство «Штиница» Академии наук Молдавской ССР  
 Кишинев, проспект Ленина, 1

Типография издательства «Штиница». Кишинев, Куйбышевский пер., 17