

СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна



P4 - 4811

В.П. Калашников

ТЕОРИЯ ПОЛЯРИЗАЦИИ ЯДЕРНЫХ СПИНОВ
ПОСТОЯННЫМ ТОКОМ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ
(ЭФФЕКТ ФЕЕРА).

II. ПРИБЛИЖЕНИЕ ФОККЕРА-ПЛАНКА

ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

1969

Р4 - 4811

В.П. Калашников

**ТЕОРИЯ ПОЛЯРИЗАЦИИ ЯДЕРНЫХ СПИНОВ
ПОСТОЯННЫМ ТОКОМ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ
(ЭФФЕКТ ФЕЕРА).**

II. ПРИБЛИЖЕНИЕ ФОККЕРА-ПЛАНКА

**Научно-техническая
библиотека
ОИЯИ**

§1. Введение и постановка задачи

В первой части настоящей работы рассмотрен эффект Феера в случае, когда неравновесное состояние электронной подсистемы можно описать набором макропараметров - эффективных значений кинетической и спиновой температур, дрейфовой скорости и химического потенциала. Для нахождения этих параметров нужно решить систему алгебраических уравнений баланса.

Однако, как это хорошо известно из теории горячих электронов ^{/1/}, в ряде ситуаций приближение эффективных параметров непригодно для описания кинетики носителей тока полупроводников в сильных электрических полях. Это относится прежде всего к случаю низких концентраций электронов проводимости или высоких температур, когда частота межэлектронных столкновений ω_{ee} много меньше частоты столкновений электронов с решеткой ω_{el} . В этом случае в полном гамильтониане нашей системы энергию межэлектронного взаимодействия можно не учитывать. Теперь неравновесное состояние электронов проводимости определяется ускорением их во внешнем электрическом поле и столкновениями с решеткой. Очевидно, что в такой ситуации электронная подсистема как целое не может достичь внутреннего равновесия, которое можно было бы описывать с помощью эффективных параметров. Поэтому для статистического описания нашей системы необходимо ввести другие переменные, позволяющие учесть более тонкие детали ее эволюции. В настоящей работе мы будем рассматривать только слабонеупругие механизмы взаимодействия

электронов с решеткой, когда $\Delta\bar{\epsilon} < \bar{\epsilon}^x$. В теории горячих электронов, основанной на кинетическом уравнении, показывается /2,3/, что в такой ситуации любое неравновесное распределение горячих электронов релаксирует таким образом, что в процессе релаксации происходит постепенная симметризация функции распределения по электронному импульсу. Иначе говоря, если неравновесную функцию распределения горячих электронов разложить в ряд по сферическим функциям, то время релаксации членов этого разложения в процессе эволюции электронной подсистемы тем меньше, чем выше порядок соответствующей сферической гармоники. Поэтому для промежутков времени, больших, чем время затухания квадрупольной части функции распределения, электронную подсистему можно описывать при помощи сферически симметричной и антисимметричной по импульсу частей функции распределения /4/.

Указанная особенность поведения электронной подсистемы означает, по существу, что распределение электронов в энергетическом слое в окрестности заданного значения энергии ξ близко к состоянию статистического равновесия и может быть описано при помощи некоторых макропараметров, зависящих от этого значения энергии ξ . Эта идея в комбинации с методом Д.Н. Зубарева /5/ построения неравновесного статистического оператора дает возможность сформулировать теорию горячих электронов на многочастичной основе /6,7/ без использования кинетического уравнения. При этом во всех случаях, когда кинетическое уравнение справедливо, эта теория дает те же результаты. В настоящей работе мы применим основные идеи работ /5,6,7/ для теоретического описания эффекта Фейера в полупроводниках при $\omega_{ee} < \omega_{el}$. Будем рассматривать пространственно-однородный кристалл с малой концентрацией носителей тока, так что $\langle a_{\nu\sigma}^+ a_{\nu\sigma} \rangle \approx 1$. Примем для определенности, что электрическое и магнитное поля взаимно перпендикулярны: $\vec{E} = (0E0)$, $\vec{H} = (00H)$, и будем считать, что магнитное поле является сильным в смысле $\omega_0 > \omega_{el}$ (эта область включает также и квантующие магнитные поля). Полученные в работе общие формулы годятся как при $\hbar\omega_0 > \bar{\epsilon}_c \rho$, так и при $\hbar\omega_0 > \bar{\epsilon}$. Конкретные вычисления мы проведем для классической области изменения напряженности магнитного поля $\hbar\omega_0 < \bar{\epsilon}$.

^{x/} Мы придерживаемся тех же обозначений, что и в первой части статьи, если это не оговорено особо. Ссылки на формулы части I даются с указанием ее номера.

В рассматриваемом случае гамильтониан свободных электронов во внешних электрическом и магнитном полях можно представить в виде (суммирование производится по всем электронам):

$$\begin{aligned} H_e + H_{ef} &= H_k + H_s + eEy_0 = \sum_j H_j, \\ H_k &= \sum_j H_{kj}, H_s = \sum_j H_{sj}, y_0 = \sum_j y_{0j}, \end{aligned} \quad (1.1)$$

где H_{kj} - оператор кинетической энергии электрона в электрическом и магнитном полях $H_{kj} = \frac{(p_j^x)^2}{2m} + \frac{(p_j^y)^2}{2m} + \frac{m\omega_0^2}{2} (y_j + y_{0j})^2 + \frac{mV^2}{2}$, y_{0j} - оператор координаты центра циклотронной орбиты электрона, причем $y_{0j} = (m\omega_0)^{-1}(p_j^x - mV)$, $V = \frac{cE}{H}$ - скорость холловского дрейфа электронов, $H_{sj} = \hbar\Omega_s S_j^z$. В представлении, диагонализующем гамильтониан H_{kj} , оператор y_{0j} также диагонален. Пусть индексы $\nu\sigma$ соответствуют спектру и волновым функциям гамильтониана $H_{kj} + H_{sj}$. Тогда, переходя к представлению вторичного квантования, получаем

$$\begin{aligned} H_e + H_{ef} &= \sum_{\nu\sigma} \epsilon_{\nu\sigma} a_{\nu\sigma}^+ a_{\nu\sigma} + eE \sum_{\nu\sigma} y_{0\nu} a_{\nu\sigma}^+ a_{\nu\sigma}, \\ H_k &= H_k + H_s, H_k = \sum_{\nu\sigma} \epsilon_{\nu\sigma} a_{\nu\sigma}^+ a_{\nu\sigma}, H_s = \hbar\Omega_s \sum_{\nu\sigma} \sigma a_{\nu\sigma}^+ a_{\nu\sigma}. \end{aligned} \quad (1.2)$$

Удобство этого представления заключается в том, что оператор кинетической энергии электронов в скрещенных полях коммутирует с H_{ef} , благодаря чему уравнения движения сильно упрощаются. Полный гамильтониан системы принимает вид

$$H = H_e + H_{ef} + H_l + H_{el} + H_{nl} + H_n + H_{en}. \quad (1.3)$$

Явные выражения для составляющих этого гамильтониана, кроме H_e и H_{ef} , приведены в I, §2.

§2. Построение неравновесного статистического оператора

Мы будем строить неравновесную матрицу плотности системы, пользуясь методом Забарова /5/. Учитывая характер эволюции неравновесной электронной системы, удобно ввести плотности операторов динамических величин P_m в пространстве энергии $P_m(\xi)$; так что $P_m = \int d\xi P_m(\xi) \delta / \delta$.

Выбрав подходящий набор операторов $P_m(\xi)$, можно построить оператор энтропии системы

$$S(t, 0) = \Phi + \sum_m \int d\xi P_m(\xi) F_m(\xi t) \quad (2.1)$$

$$\Phi = \ln \text{Sp} \exp \left\{ - \sum_m \int d\xi P_m(\xi) F_m(\xi t) \right\}$$

и оператор производства энтропии

$$\dot{S}(t, 0) = \sum_m \int d\xi \left\{ \dot{P}_m(\xi) F_m(\xi t) + (P_m(\xi) - \langle P_m(\xi) \rangle_t) \dot{F}_m(\xi t) \right\}, \quad (2.2)$$

где $\langle \dots \rangle_t = \text{Sp}(\dots e^{-S(t,0)}) = \text{Sp}(\dots \rho_t)$. Неравновесный статистический оператор, построенный по методу Д.Н. Зубарева, записывается в виде

$$\rho = \exp \left\{ - \epsilon \int_{-\infty}^0 dt' e^{\epsilon t'} S(t+t', t') \right\} = \exp \left\{ -S(t,0) + \int_{-\infty}^0 dt' e^{\epsilon t'} S'(t+t', t') \right\}. \quad (2.3)$$

В этих формулах $F_m(\xi t)$ - функции, термодинамически сопряженные средним значениям операторов $P_m(\xi)$. Наложим на эти функции условия $\langle P_m(\xi) \rangle_t = \langle P_m(\xi) \rangle_t^t$, или

$$\text{Sp} \left(P_m(\xi) e^{-S(t,0)} \right) = \text{Sp} \left(P_m(\xi) e^{-S(t,0)} \right). \quad (2.4)$$

Теперь связь величин $\langle P_m(\xi) \rangle$ и $F_m(\xi t)$ имеет вид

$$\langle P_m(\xi) \rangle = - \frac{\delta \Phi}{\delta F_m(\xi t)}; \quad F_m(\xi t) = \frac{\delta S}{\delta \langle P_m(\xi) \rangle}. \quad (2.5)$$

где $S = \Phi + \sum_m \int d\xi \langle P_m(\xi) \rangle F_m(\xi t) = \langle S(t, 0) \rangle$ - энтропия квазиравновесного распределения, являющаяся функционалом от термодинами-

ческих координат $\langle P_m(\xi) \rangle^t$. В случае медленных необратимых процессов оператор $\dot{S}(t, 0)$ оказывается малым (в части I было показано, что он исчезает вместе с взаимодействием подсистем, если функции $F_m(\xi)$ не зависят от ξ). Это свойство оператора $\dot{S}(t, 0)$, как будто видно из дальнейшего, сохраняется и в нашем случае, и статистический оператор (2.3) можно разложить по его степеням

$$\rho = e^{-S(t,0)} + \int_0^1 dt' e^{\epsilon t'} \int_0^1 dr e^{-rS(t,0)} \dot{S}(t+t', t') e^{(r-1)S(t,0)} + \dots \quad (2.6)$$

Уравнения движения для переменных $F_m(\xi t)$ можно получить, дифференцируя по времени соотношение (2.4) с учетом термодинамических равенств (2.5):

$$- \sum_n \int d\xi' \frac{\delta \Phi}{\delta F_m(\xi t) \delta F_n(\xi' t)} \dot{F}_n(\xi' t) = - \sum_n \int d\xi' (P_m(\xi); P_n(\xi'))^t \dot{F}_n(\xi' t) = \langle \dot{P}_m(\xi) \rangle^t, \quad (2.7)$$

где скобки $(\dots; \dots)^t$ означают квантовые корреляционные функции (1.3.13). Правая часть уравнений (2.7) с учетом разложения (2.6) сводится к виду

$$\langle \dot{P}_m(\xi) \rangle^t = \langle \dot{P}_m(\xi) \rangle_t^t + \int_0^1 dt' e^{\epsilon t'} \left\{ \sum_n \int d\xi' (P_m(\xi); P_n(\xi' t'))^t F_n(\xi' t+t') + \right. \\ \left. + \sum_{n \neq l} \int d\xi' \int d\xi'' (P_m(\xi); P_n(\xi' t'))^t \frac{\delta^2 S(t+t')}{\delta \langle P_n(\xi') \rangle^{t+t'} \delta \langle P_l(\xi'') \rangle^{t+t'}} \langle P_l(\xi'') \rangle^{t+t'} \right\}. \quad (2.8)$$

Здесь мы провели процедуру исключения временных производных $\dot{F}_m(\xi t)$ из выражения для оператора $\dot{S}(t+t', t')$, используя соотношения

$$\dot{F}_m(\xi t) = \sum_n \int d\xi' \frac{\delta^2 S(t)}{\delta \langle P_m(\xi) \rangle^t \delta \langle P_n(\xi') \rangle^t} \langle \dot{P}_n(\xi') \rangle^t. \quad (2.9)$$

Уравнения (2.7) и термодинамические равенства (2.5) образуют замкнутую систему, позволяющую вычислить функции $F_m(\xi t)$ и $\langle P_m(\xi) \rangle^t$.

Удобный метод решения уравнений переноса (2.7) состоит в разложении интегральных операторов в формуле (2.8) и преобразовании нелинейных интегральных уравнений (2.7) в дифференциальные уравнения типа Фоккера-Планка в пространстве энергии. Применительно к кинетике горячих электронов такое разложение, как будет видно из дальнейшего, фактически ведется по параметру неупругости рассеяния $\Delta\bar{\epsilon}/\bar{\epsilon}^-$. В случае, если эта величина не мала, такое преобразование выполнить нельзя. Поэтому мы здесь будем рассматривать только слабонеупругие процессы рассеяния.

Введем в качестве операторов $P_m(\xi)$ плотность числа частиц $n(\xi)$, плотность кинетической энергии в скрещенных полях $H_k(\xi)$ и плотности зеемановской энергии $H_s(\xi)$, определенные на изоэнергетических поверхностях электронов:

$$n(\xi) = \sum_{\nu\sigma} \delta(\epsilon_{\nu\sigma} - \xi) a_{\nu\sigma}^+ a_{\nu\sigma}, \quad H_k(\xi) = \sum_{\nu\sigma} \epsilon_{\nu\sigma} \delta(\epsilon_{\nu\sigma} - \xi) a_{\nu\sigma}^+ a_{\nu\sigma},$$

$$H_s(\xi) = \sum_{\nu\sigma} \sigma h \Omega_s \delta(\epsilon_{\nu\sigma} - \xi) a_{\nu\sigma}^+ a_{\nu\sigma}, \quad H_e(\xi) = H_k(\xi) + H_s(\xi) = \xi n(\xi). \quad (2.10)$$

При этом

$$\int d\xi n(\xi) = N, \quad \int d\xi H_k(\xi) = H_k, \quad \int d\xi H_s(\xi) = H_s, \quad \int d\xi H_e(\xi) = H_e. \quad (2.11)$$

Ядерные спины и решетку будем описывать средними значениями гамильтонианов $H_n + H_{en}$ и $H_l + H_{el} + H_{nl}$, соответственно. Запишем оператор энтропии системы в форме

$$S(t, 0) = \Phi + \int d\xi \xi [\phi(\xi t) n(\xi) + \psi(\xi t) H_s(\xi)] + \beta_n^{(t)} (H_n + H_{en}) + \beta (H_l + H_{el} + H_{nl}),$$

$$\Phi = \ln \text{Sp} \exp \{ - \int d\xi [\phi(\xi t) n(\xi) + \psi(\xi t) H_s(\xi)] - \beta_n(t) (H_n + H_{en}) - \beta (H_l + H_{el} + H_{nl}) \}.$$

Здесь функции $\phi(\xi t)$ и $\psi(\xi t)$ есть термодинамические переменные, сопряженные средним значениям плотности числа частиц и зеемановской энергии электронов. Поскольку среди операторов (2.10) независимы только два, мы выбрали в качестве таковых $n(\xi)$ и $H_s(\xi)$.

Операторы, фигурирующие в формуле (2.12) и, следовательно, в выражении для квазиравновесного и неравновесного статистических операторов, подчиняются следующим уравнениям движения:

$$\dot{n}(\xi) = \dot{n}_{(l)}(\xi) + \dot{n}_{(n)}(\xi); \quad \dot{H}_s(\xi) = \dot{H}_{s(l)}(\xi) + \dot{H}_{s(n)}(\xi);$$

$$\dot{H}_l + \dot{H}_{el} + \dot{H}_{nl} = -\dot{H}'_{e(l)} - \dot{H}_{n(l)}; \quad \dot{H}_n + \dot{H}_{en} = -\dot{H}'_{e(n)} + \dot{H}_{n(l)};$$

$$H'_e = H_e + VP^x; \quad \dot{H}'_{e(l)} = \dot{H}_{e(l)} + V\dot{P}^x_{(l)} = \int d\xi \xi \dot{n}_{(l)}(\xi) + V\dot{P}^x_{(l)}; \quad (2.13)$$

$$\dot{H}'_{e(n)} = \dot{H}_{e(n)} + V\dot{P}^x_{(n)} = \int d\xi \xi \dot{n}_{(n)}(\xi) + V\dot{P}^x_{(n)},$$

где $\dot{H}_{s(l)}(\xi) = (i\hbar)^{-1} [H_s(\xi)H_{el} - H_{el}H_s(\xi)]$, $\dot{n}_{(n)}(\xi) = (i\hbar)^{-1} [n(\xi)H_{en} - H_{en}n(\xi)]$ и т.д. Используя эти уравнения, можно построить оператор производства энтропии $\dot{S}(t, 0)$

$$\dot{S}(t, 0) = \Delta \{ \int d\xi \xi [(\phi(\xi t) - \xi\beta) \dot{n}_{(l)}(\xi) + (\psi(\xi t) - \xi\beta_n) \dot{n}_{(n)}(\xi) +$$

$$+ \psi(\xi t) (\dot{H}_{s(l)}(\xi) + \dot{H}_{s(n)}(\xi)) + \dot{\phi}(\xi t) n(\xi) + \dot{\psi}(\xi t) H_s(\xi)] -$$

$$- V(\beta \dot{P}^x_{(l)} + \beta_n \dot{P}^x_{(n)}) + (\beta_n(t) - \beta) \dot{H}_{n(l)} + \dot{\beta}_n(t) (H_n + H_{en}) \}, \quad (2.14)$$

где $\Delta A = A - \langle A \rangle_t$. Далее, дифференцируя средние значения операторов $n(\xi)$, $H_s(\xi)$, $H_n + H_{en}$, получаем систему уравнений для $\phi(\xi t)$, $\psi(\xi t)$, $\beta_n(t)$:

$$- \int d\xi' (n(\xi); n(\xi'))^t \dot{\phi}(\xi' t) - \int d\xi' (n(\xi); H_s(\xi'))^t \dot{\psi}(\xi' t) = \langle \dot{n}(\xi) \rangle^t$$

$$- \int d\xi' (H_s(\xi); n(\xi'))^t \dot{\phi}(\xi' t) - \int d\xi' (H_s(\xi); H_s(\xi'))^t \dot{\psi}(\xi' t) = \langle \dot{H}_s(\xi) \rangle^t \quad (2.15)$$

$$- \dot{\beta}_n (H_n + H_{en}; H_n + H_{en})^t = \langle -\dot{H}'_{e(n)} + \dot{H}_{n(l)} \rangle^t.$$

В пренебрежении взаимодействиями подсистем корреляционные функции в (2.15) легко вычисляются (напомним, что в нашей теории $a_{\nu\sigma} a_{\nu\sigma}^+ \approx 1$):

$$\langle n(\xi); n(\xi') \rangle^t = \delta(\xi - \xi') \langle n(\xi) \rangle^t,$$

$$\langle H_s(\xi); n(\xi') \rangle^t = \langle n(\xi); H_s(\xi') \rangle^t = \delta(\xi - \xi') \langle H_s(\xi) \rangle^t, \quad (2.16)$$

$$\langle H_s(\xi); H_s(\xi') \rangle^t = \delta(\xi - \xi') \left(\frac{\hbar \Omega_s}{2} \right)^2 \langle n(\xi) \rangle^t,$$

$$\langle n(\xi) \rangle^t = \sum_{\nu\sigma} e^{-\phi(\xi t) - \sigma \hbar \Omega_s \psi(\xi t)} \delta(\epsilon_{\nu\sigma} - \xi),$$

$$\langle H_s(\xi) \rangle^t = \sum_{\nu\sigma} e^{-\phi(\xi t) - \sigma \hbar \Omega_s \psi(\xi t)} \sigma \hbar \Omega_s \delta(\epsilon_{\nu\sigma} - \xi). \quad (2.17)$$

Теперь мы легко можем вычислить временные производные $\dot{\phi}$, $\dot{\psi}$, $\dot{\beta}_n$:

$$\dot{\phi}(\xi t) = - \frac{\langle \dot{n}(\xi) \rangle^t \langle n(\xi) \rangle^t - \left(\frac{\hbar \Omega_s}{2} \right)^2}{\left(\frac{\hbar \Omega_s}{2} \langle n(\xi) \rangle^t \right)^2 - \left(\langle H_s(\xi) \rangle^t \right)^2} + \frac{\langle \dot{H}_s(\xi) \rangle^t \langle H_s(\xi) \rangle^t}{\left(\frac{\hbar \Omega_s}{2} \langle n(\xi) \rangle^t \right)^2 - \left(\langle H_s(\xi) \rangle^t \right)^2};$$

$$\dot{\psi}(\xi t) = - \frac{\langle \dot{H}_s(\xi) \rangle^t \langle n(\xi) \rangle^t}{\left(\frac{\hbar \Omega_s}{2} \langle n(\xi) \rangle^t \right)^2 - \left(\langle H_s(\xi) \rangle^t \right)^2} + \frac{\langle \dot{n}(\xi) \rangle^t \langle H_s(\xi) \rangle^t}{\left(\frac{\hbar \Omega_s}{2} \langle n(\xi) \rangle^t \right)^2 - \left(\langle H_s(\xi) \rangle^t \right)^2}; \quad (2.18)$$

$$\dot{\beta}_n(t) = - \frac{1}{\langle H_n; H_n \rangle} \langle -\dot{H}_{e(n)} + \dot{H}_{n(l)} \rangle^t.$$

Легко видеть, что оператор производства энтропии $\dot{S}(t, 0)$ по крайней мере первого порядка величины по взаимодействию подсистем и в этом смысле является малой величиной. Теперь мы можем записать общее выражение для неравновесного статистического оператора нашей системы в линейном по взаимодействию приближении. (Мы будем рассматривать стационарный режим и временные аргументы термодинамических переменных опустим):

$$\rho = \{ 1 + \int d\xi' \int_{-\infty}^t dt e^{\epsilon t} \int_0^1 d\tau \Delta [(\phi(\xi') - \xi \beta) \dot{n}_{(l)}(\xi' t i \tau) + (\phi(\xi') - \xi' \beta_n) \dot{n}_{(n)}(\xi' t i \tau) + \psi(\xi') (\dot{H}_{s(l)}(\xi' t i \tau) + \dot{H}_{s(n)}(\xi' t i \tau))] - \int_{-\infty}^0 dt e^{\epsilon t} \int_0^1 d\tau \Delta [\beta \dot{P}_{(l)}^x(t i \tau) + \beta_n \dot{P}_{(n)}^x(t i \tau)] + (\beta_n - \beta) \int_{-\infty}^0 dt e^{\epsilon t} \int_0^1 d\tau \Delta \dot{H}_n(t i \tau) - \int_0^1 d\tau \Delta [\beta_n H_{en}(i \tau) + \beta H_{el}(i \tau) + \beta H_{nl}(i \tau)] \} \times e^{S_0(0,0)}; \quad A(i \tau) = e^{-\tau S_0(0,0)} A e^{\tau S_0(0,0)} \quad (2.19)$$

$$S_0(0,0) = \Phi_0 + \int d\xi [\phi(\xi) n(\xi) + \psi(\xi) H_s(\xi)] + \beta H_l + \beta_n H_n$$

$$\Phi_0 = \ln \text{Sp} \exp \{ - \int d\xi [\phi(\xi) n(\xi) + \psi(\xi) H_s(\xi)] - \beta H_l - \beta_n H_n \}. \quad (2.20)$$

В дальнейшем все средние вычисляются с матрицей плотности $e^{-S_0(0,0)}$.

Рассмотрим средние (2.17). Функция распределения горячих электронов $e^{-\phi(\epsilon_{\nu\sigma})}$ описывает состояние электронной подсистемы, в котором спиновые степени свободы находятся в равновесии с орбитальным движением. На языке эффективных параметров этому распределению соответствует функция $e^{(\mu - \epsilon_{\nu\sigma}) \beta_k}$. Функция $\psi(\xi)$ описывает отклонение средней намагниченности электронов от значения, соответствующего этому "равновесному" состоянию. На языке эффективных параметров ей соответствует разность $\beta_s - \beta_k$ обратной спиновой и кинетической температур электронов. Таким образом, величина $\psi(\xi)$ определяется процессами спин-решеточной релаксации. Мы будем считать ее малой в смысле $\psi(\xi) \xi \ll \phi(\xi)$, что подтверждается последующими расчетами. В нулевом приближении по $\psi(\xi)$ $\langle n(\xi) \rangle_0 = e^{-\phi_0(\xi)} g(\xi)$, $\langle H_s(\xi) \rangle_0 = \frac{\hbar \Omega_s}{2} e^{-\phi_0(\xi)} g(\xi)$, где $g(\xi) = g_+(\xi)$, $\bar{g}(\xi) = g_+(\xi) - g_-(\xi)$, причем $g_{\pm}(\xi) = \sum_{\nu} \delta(\epsilon_{\nu \pm} - \xi)$ - плотность состояний электронов с различными ориентациями спина. Плотность нулевого приближения будем считать нормированной: $\int d\xi e^{-\phi_0(\xi)} g(\xi) = n$, где n - концентрация электронов. При $\psi(\xi) \neq 0$ $\phi_0(\xi) = \phi(\xi) + \delta\phi(\xi)$, где $\delta\phi(\xi) = \psi(\xi) \frac{\hbar \Omega_s}{2}$. Нормировка в линейном по $\psi(\xi)$ приближении

$$\int d\xi e^{-\phi_0(\xi)} (1 - \delta\phi(\xi) - \psi(\xi) \sigma_1 \Omega_s) = n_0 \quad (2.21)$$

автоматически сохраняется, если положить

$$\delta\phi(\xi) = -\psi(\xi) \frac{\hbar\Omega_s}{2} \frac{\bar{g}(\xi)}{g(\xi)} \quad (2.22)$$

Соотношение (2.22) аналогично связи между изменениями спиновой температуры и химического потенциала электронов в методе эффективных параметров, в чем легко убедиться, переписав его в виде:

$$\delta\phi(\xi) = -\psi(\xi) \frac{\langle H_s(\xi) \rangle_0}{\langle n(\xi) \rangle_0} = -\psi(\xi) \frac{\langle N; H_s(\xi) \rangle_0}{\langle N; n(\xi) \rangle_0}, \quad (2.23)$$

где средние вычисляются в нулевом приближении по $\psi(\xi)$. При этом в линейном по $\psi(\xi)$ приближении

$$\langle n(\xi) \rangle = e^{-\phi_0(\xi)} g(\xi) = \langle n(\xi) \rangle_0,$$

$$\langle H_s(\xi) \rangle = \langle H_s(\xi) \rangle_0 - \psi(\xi) \left(\frac{\hbar\Omega_s}{2} \right)^2 e^{-\phi_0(\xi)} g(\xi) \left[1 - \left(\frac{\bar{g}(\xi)}{g(\xi)} \right)^2 \right]. \quad (2.24)$$

Таким образом,

$$\delta\langle H_s(\xi) \rangle = \langle H_s(\xi) \rangle - \langle H_s(\xi) \rangle_0 = -\psi(\xi) \left(\frac{\hbar\Omega_s}{2} \right)^2 \langle n(\xi) \rangle \left[1 - \left(\frac{\bar{g}(\xi)}{g(\xi)} \right)^2 \right]. \quad (2.25)$$

Это соотношение аналогично связи между изменениями средней зеемановской энергии и спиновой температуры электронов в методе эффективных параметров. Мы ограничимся линейным приближением по функции $\psi(\xi)$.

В связи с этим удобно перестроить операторы $S_0(0,0)$ и $\dot{S}(0,0)$, заменив на $\phi(\xi)$ на $\phi_0(\xi) - \psi(\xi) \frac{\hbar\Omega_s}{2} \frac{\bar{g}(\xi)}{g(\xi)}$. (Индекс "0" у функции $\phi_0(\xi)$ в дальнейшем будем опускать):

$$S_0(0,0) = \Phi_0 + \int d\xi [\phi(\xi) n(\xi) + \psi(\xi) (H_s(\xi) - \frac{\hbar\Omega_s}{2} \frac{\bar{g}(\xi)}{g(\xi)} n(\xi))] + \beta H_\ell + \beta_n H_n \quad (2.26)$$

$$\begin{aligned} \dot{S}(0,0) = & \Delta \left\{ \int d\xi [(\phi(\xi) - \xi\beta) \dot{n}_{(\ell)}(\xi) + (\phi(\xi) - \xi\beta_n) \dot{n}_{(n)}(\xi) + \psi(\xi) (\dot{H}_{s(\ell)}(\xi) + \right. \\ & \left. + \dot{H}_{s(n)}(\xi) - \frac{\hbar\Omega_s}{2} \frac{\bar{g}(\xi)}{g(\xi)} (n_{(\ell)}(\xi) + n_{(n)}(\xi))] - V (\beta \dot{P}_{(\ell)}^x + \beta_n \dot{P}_{(n)}^x) + (\beta_n - \beta) \dot{H}_{n(\ell)} \right\}. \quad (2.27) \end{aligned}$$

§3. Макроскопические уравнения баланса

Запишем стационарные уравнения баланса, определяющие функции $\phi(\xi)$, $\psi(\xi)$ и β_n .

Уравнение баланса плотности электронов в пространстве энергии:

$$\begin{aligned} \int d\xi' \int_{-\infty}^0 dt e^{\xi t} \{ (\dot{n}_{(\ell)}(\xi'); (\phi(\xi') - \xi'\beta) \dot{n}_{(\ell)}(\xi' t) + \psi(\xi') (\dot{H}_{s(\ell)}(\xi' t) - \frac{\hbar\Omega_s}{2} \frac{\bar{g}(\xi')}{g(\xi')} \dot{n}_{(\ell)}(\xi' t))) + \\ + (\dot{n}_{(n)}(\xi'); (\phi(\xi') - \xi'\beta_n) \dot{n}_{(n)}(\xi' t) + \psi(\xi') (\dot{H}_{s(n)}(\xi' t) - \frac{\hbar\Omega_s}{2} \frac{\bar{g}(\xi')}{g(\xi')} \dot{n}_{(n)}(\xi' t))) \} - \\ - V \int_{-\infty}^0 dt e^{\xi t} (\dot{n}_{(\ell)}(\xi) + \dot{n}_{(n)}(\xi); \beta \dot{P}_{(\ell)}^x(t) + \beta_n \dot{P}_{(n)}^x(t)) = 0. \quad (3.1) \end{aligned}$$

Уравнение баланса плотности зеемановской энергии электронов в пространстве энергии:

$$\begin{aligned} \int d\xi' \int_{-\infty}^0 dt e^{\xi t} \{ (\dot{H}_{s(\ell)}(\xi'); (\phi(\xi') - \xi'\beta) \dot{n}_{(\ell)}(\xi' t) + \psi(\xi') (\dot{H}_{s(\ell)}(\xi' t) - \frac{\hbar\Omega_s}{2} \frac{\bar{g}(\xi')}{g(\xi')} \dot{n}_{(\ell)}(\xi' t))) + \\ + (\dot{H}_{s(n)}(\xi'); (\phi(\xi') - \xi'\beta_n) \dot{n}_{(n)}(\xi' t) + \psi(\xi') (\dot{H}_{s(n)}(\xi' t) - \frac{\hbar\Omega_s}{2} \frac{\bar{g}(\xi')}{g(\xi')} \dot{n}_{(n)}(\xi' t))) \} - \\ - V \int_{-\infty}^0 dt e^{\xi t} (\dot{H}_{s(\ell)}(\xi) + \dot{H}_{s(n)}(\xi); \beta \dot{P}_{(\ell)}^x(t) + \beta_n \dot{P}_{(n)}^x(t)) = 0. \quad (3.2) \end{aligned}$$

Уравнение баланса средней зеемановской энергии ядерных спинов

$$\begin{aligned} - \int d\xi' \int_{-\infty}^0 dt e^{\xi t} (\dot{H}'_{s(n)}(\xi'); (\phi(\xi') - \xi'\beta_n) \dot{n}_{(n)}(\xi' t) + \psi(\xi') (\dot{H}_{s(n)}(\xi' t) - \frac{\hbar\Omega_s}{2} \frac{\bar{g}(\xi')}{g(\xi')} \dot{n}_{(n)}(\xi' t))) + \\ + \int_{-\infty}^0 dt e^{\xi t} (\dot{H}'_{s(n)}(\xi); \dot{P}_{(n)}^x(t)) \beta_n V + \int_{-\infty}^0 dt e^{\xi t} (\dot{H}_{n(\ell)}(\xi); \dot{H}_{n(\ell)}(t)) (\beta_n - \beta) = 0. \end{aligned}$$

Мы получили систему нелинейных интегральных уравнений для набора искомых функций. Далее следует получить явные выражения для ядер интегральных операторов этой системы, т.е. корреляционных функций вида $L_{\ell}(\xi, \xi') = \int_{-\infty}^0 dt e^{\epsilon t} (\dot{A}_{\ell}(\xi), \dot{B}_{\ell}(\xi' t))$.

В борновском приближении по взаимодействию подсистем вычисление этих функций несложно. Ниже мы приведем результаты вычисления коррелятора $L_{\ell}(\xi, \xi')$ для рассматриваемых в нашей теории механизмов взаимодействия, считая одноэлектронные операторы A и B диагональными в Π_e -представлении. Только такие операторы фигурируют в системе (3.1)-(3.3).

А. Взаимодействия с фононами

$$L_{ph}(\xi, \xi') = \frac{2\pi}{h} \sum_{\nu\sigma, \nu\sigma'; q\lambda} (A_{\nu\sigma'} \delta(\xi_{\nu\sigma'} - \xi) - A_{\nu\sigma} \delta(\epsilon_{\nu\sigma} - \xi)) (B_{\nu\sigma'} \delta(\epsilon_{\nu\sigma'} - \xi') - B_{\nu\sigma} \delta(\epsilon_{\nu\sigma} - \xi')) \times |U_{\text{oph}}^{q\lambda}(\nu\sigma' | \nu\sigma)|^2 \Xi(\nu\sigma' | \nu\sigma) N_{q\lambda} \delta(\epsilon_{\nu\sigma'} - \epsilon_{\nu\sigma} - h\Omega_{q\lambda} + hq_x V)$$

$$f_{\nu\sigma} = \exp\left\{-\phi(\epsilon_{\nu\sigma}) - \psi(\epsilon_{\nu\sigma}) \frac{h\Omega_s}{2} \left(2\sigma - \frac{\bar{g}(\epsilon_{\nu\sigma})}{g(\epsilon_{\nu\sigma})}\right)\right\}; \Xi(\nu\sigma' | \nu\sigma) = \frac{e^y - 1}{y}$$

$$y = \phi(\epsilon_{\nu\sigma}) - \phi(\epsilon_{\nu\sigma'}) + \sigma h\Omega_s \psi(\epsilon_{\nu\sigma}) - \sigma' h\Omega_s \psi(\epsilon_{\nu\sigma'}) - \frac{h\Omega_s}{2} \left(\psi(\epsilon_{\nu\sigma}) \frac{g(\epsilon_{\nu\sigma}')}{g(\epsilon_{\nu\sigma})} - \psi(\epsilon_{\nu\sigma'}) \frac{\bar{g}(\epsilon_{\nu\sigma'})}{g(\epsilon_{\nu\sigma})}\right) - \beta(\epsilon_{\nu\sigma} - \epsilon_{\nu\sigma'})$$
(3.4)

Б. Взаимодействие с немагнитными примесями

$$L_1(\xi, \xi') = \frac{\pi}{h} \sum_{\nu\sigma, \nu\sigma'; q} (A_{\nu\sigma'} \delta(\epsilon_{\nu\sigma'} - \xi) - A_{\nu\sigma} \delta(\epsilon_{\nu\sigma} - \xi)) (B_{\nu\sigma'} \delta(\epsilon_{\nu\sigma'} - \xi') - B_{\nu\sigma} \delta(\epsilon_{\nu\sigma} - \xi')) \times |U_{e1}^q(\nu\sigma' | \nu\sigma)|^2 \Xi(\nu\sigma' | \nu\sigma) N_{1q} \delta(\epsilon_{\nu\sigma'} - \epsilon_{\nu\sigma} + hq_x V)$$
(3.5)

В. Взаимодействие с магнитными примесями

$$L_{m1} = \frac{\pi}{h} \sum_{\nu\sigma, \nu\sigma'; q1} (A_{\nu\sigma'} \delta(\epsilon_{\nu\sigma'} - \xi) - A_{\nu\sigma} \delta(\epsilon_{\nu\sigma} - \xi)) (B_{\nu\sigma'} \delta(\epsilon_{\nu\sigma'} - \xi') - B_{\nu\sigma} \delta(\epsilon_{\nu\sigma} - \xi')) \times |U_{em1}^{q1}(\nu\sigma' | \nu\sigma)|^2 \Xi(\nu\sigma' | \nu\sigma) N_{\ell} f_{\nu\sigma} \delta(\epsilon_{\nu\sigma'} - \epsilon_{\nu\sigma} - (\sigma' - \sigma)h\Omega_{m1} + hq_x V)$$

$$|U_{em1}^{q1}(\nu\sigma' | \nu\sigma)|^2 = \frac{1}{4} |U_{em1}^q(\nu' | \nu)|^2 \left\{ \ell^2 \delta_{\sigma\sigma'} + [I(I+1) - \ell^2 - \ell(\sigma - \sigma')] (\sigma - \sigma')^2 \right\}$$
(3.6)

Корреляционная функция $L_n(\xi, \xi')$ для случая взаимодействия электронов с ядерными спинами получается из выражения (3.6), если в последнем заменить матричные элементы взаимодействия с магнитными примесями на матричные элементы контактного взаимодействия электронов и ядер и Ω_{m1} заменить на Ω_n .

Для рассматриваемых слабонеупругих механизмов рассеяния выражение

$$(A_{\nu\sigma'} \delta(\epsilon_{\nu\sigma'} - \xi) - A_{\nu\sigma} \delta(\epsilon_{\nu\sigma} - \xi)) (B_{\nu\sigma'} \delta(\epsilon_{\nu\sigma'} - \xi') - B_{\nu\sigma} \delta(\epsilon_{\nu\sigma} - \xi')) = (A_{\nu\sigma'} e^{-\Delta\epsilon \frac{\partial}{\partial \xi}} - A_{\nu\sigma}) (B_{\nu\sigma'} e^{-\Delta\epsilon \frac{\partial}{\partial \xi'}} - B_{\nu\sigma}) \delta(\epsilon_{\nu\sigma} - \xi) \delta(\epsilon_{\nu\sigma} - \xi')$$

$$\Delta\epsilon = \epsilon_{\nu\sigma'} - \epsilon_{\nu\sigma}$$
(3.7)

можно разложить в ряд по степеням операции $\Delta\epsilon \frac{\partial}{\partial \xi}$ или $\Delta\epsilon \frac{\partial}{\partial \xi'}$; тогда (3.7) принимает вид:

$$\delta(\xi - \xi') (A_{\nu\sigma'} - A_{\nu\sigma}) (B_{\nu\sigma'} - B_{\nu\sigma}) \delta(\epsilon_{\nu\sigma} - \xi) + A_{\nu\sigma'} (B_{\nu\sigma'} - B_{\nu\sigma}) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-\Delta\epsilon)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial \xi^n} \delta(\epsilon_{\nu\sigma} - \xi) \delta(\epsilon_{\nu\sigma} - \xi') + B_{\nu\sigma'} (A_{\nu\sigma'} - A_{\nu\sigma}) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-\Delta\epsilon)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial \xi'^n} \delta(\epsilon_{\nu\sigma} - \xi) \delta(\epsilon_{\nu\sigma} - \xi') + A_{\nu\sigma'} B_{\nu\sigma'} \sum_{m,n=1}^{\infty} \frac{(-\Delta\epsilon)^{m+n}}{m!n!} \frac{\partial^m}{\partial \xi^m} \frac{\partial^n}{\partial \xi'^n} \delta(\epsilon_{\nu\sigma} - \xi) \delta(\epsilon_{\nu\sigma} - \xi')$$
(3.8)

Поскольку $\Delta\bar{\epsilon} < \bar{\epsilon}$, в разложениях такого типа мы будем удерживать только первые неисчезающие члены. Далее,

$$\begin{aligned} & \int d\xi' (A_{\nu'\sigma'} \delta(\epsilon_{\nu'\sigma'} - \xi) - A_{\nu\sigma} \delta(\epsilon_{\nu\sigma} - \xi)) (B_{\nu'\sigma'} \delta(\epsilon_{\nu'\sigma'} - \xi') - B_{\nu\sigma} \delta(\epsilon_{\nu\sigma} - \xi')) F(\xi') = \\ & = (A_{\nu'\sigma'} e^{-\Delta\epsilon \frac{\partial}{\partial \xi}} - A_{\nu\sigma}) \delta(\epsilon_{\nu\sigma} - \xi) (B_{\nu'\sigma'} e^{\Delta\epsilon \frac{\partial}{\partial \xi}} - B_{\nu\sigma}) F(\xi) = \\ & = (A_{\nu'\sigma'} e^{-\Delta\epsilon \frac{\partial}{\partial \xi}} - A_{\nu\sigma}) \delta(\epsilon_{\nu\sigma} - \xi) (B_{\nu'\sigma'} e^{(\epsilon_{\nu'\sigma'} - \xi) \frac{\partial}{\partial \xi}} - B_{\nu\sigma} e^{(\epsilon_{\nu\sigma} - \xi) \frac{\partial}{\partial \xi}}) F(\xi). \end{aligned} \quad (3.9)$$

Это соотношение позволяет перейти от системы нелинейных интегральных уравнений к дифференциальным уравнениям типа Фоккера-Планка в пространстве ξ , поскольку из (3.9) вытекает, что

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^0 d\xi' \int dt e^{\epsilon t} (\dot{A}_{(b)}(\xi); \dot{B}_{(b)}(\xi' t)) F(\xi') = \int_{-\infty}^0 dt e^{\epsilon t} (\dot{A}_{(b)}(\xi); \dot{B}_{(b)}(t)) F(\xi) + \\ & + \int_{-\infty}^0 dt e^{\epsilon t} (\dot{A}_{(b)}(\xi); \int d\xi' \dot{B}_{(b)}(\xi' t) (\xi' - \xi)) \frac{\partial F(\xi)}{\partial \xi} + \dots, \end{aligned} \quad (3.10)$$

причем, согласно (3.9), малым параметром, обеспечивающим сходимость разложения интегрального оператора (3.10), является отношение $\Delta\epsilon/\epsilon < 1$.

Отметим, далее, что при $\frac{\Delta\epsilon}{\epsilon} < 1$ величину $\Xi(\nu'\sigma'|\nu\sigma)$ в формулах (3.4)–(3.6) следует заменить единицей, поскольку мы сохраняем только первые неисчезающие члены разложения по этому параметру.

§4. Уравнение баланса ядерной намагниченности

Общее выражение для поляризации ядер в высокотемпературном приближении.

Как и в части I настоящей работы, мы рассматриваем область температур, где $\beta_n \hbar \Omega_n < 1$ и $\beta \hbar \Omega_n < 1$: Введем прежде всего времена релаксации ядерных спинов T_{ne} и T_{nl} на неравновесных электронах и решетке, соответственно:

$$T_{ne}^{-1} = \frac{1}{(H_n; H_n)_{-\infty}} \int dt e^{\epsilon t} (\dot{H}'_{e(n)}(\xi); \dot{H}'_{e(n)}(t)), \quad (4.1)$$

$$T_{nl}^{-1} = \frac{1}{(H_n; H_n)_{-\infty}} \int dt e^{\epsilon t} (\dot{H}'_{n(b)}(\xi); \dot{H}'_{n(b)}(t)). \quad (4.2)$$

Выражение для T_{nl} не зависит от способа описания электронной подсистемы и совпадает с формулой (1.5.2). Корреляционная функция $(H_n; H_n)$ дается выражением (1.5.3). Преобразуем теперь остальные корреляторы уравнения (3.3), пользуясь разложениями (3.10). В результате (3.3) запишется в виде:

$$\begin{aligned} & - \int d\xi' \left\{ \left(\frac{\partial \phi(\xi)}{\partial \xi} - \beta_n \right) \int dt e^{\epsilon t} (\dot{H}'_{e(n)}(\xi); \dot{H}'_{e(n)}(t)) - \frac{\partial \phi(\xi)}{\partial \xi} \int_{-\infty}^0 dt e^{\epsilon t} (\dot{H}'_{e(n)}(\xi); \dot{P}'_{(n)}(t)) V + \right. \\ & + \psi(\xi) \int_{-\infty}^0 dt e^{\epsilon t} (\dot{H}'_{e(n)}(\xi); \dot{H}'_{s(n)}(t)) - \int_{-\infty}^0 dt e^{\epsilon t} (\dot{H}'_{e(n)}(\xi); H'_{e(n)}(t)) \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\hbar \Omega_s}{2} \frac{\bar{g}(\xi)}{g(\xi)} \psi(\xi) \right) \left. + \right. \\ & + (\beta_n - \beta) \int_{-\infty}^0 dt e^{\epsilon t} (\dot{H}'_{n(b)}(\xi); \dot{H}'_{n(b)}(t)) = 0 \end{aligned} \quad (4.2)$$

$$H'_e(\xi) = \xi_n(\xi) + VP^x(\xi).$$

Далее, из структуры корреляционной функции (3.6) следует, что

$$\int_{-\infty}^0 dt e^{\epsilon t} (\dot{H}'_{e(n)}(\xi); \dot{H}'_{e(n)}(t)) = \frac{\Omega_n}{\Omega_n} \int_{-\infty}^0 dt e^{\epsilon t} (\dot{H}'_{e(n)}(\xi); \dot{H}'_{s(n)}(t)). \quad (4.3)$$

Согласно §3, все корреляционные функции в фигурной скобке уравнения (4.2) зависят от $\psi(\xi)$. Поскольку $\frac{\Omega_n}{\Omega_s} \ll 1$, то наибольшим из линейных по $\psi(\xi)$ членов является третий член этой скобки: при вычислении корреляторов, таким образом, можно положить $\psi(\xi) = 0$. Введем новую функцию $\eta(\xi)$, являющуюся аналогом параметра насыщения приближения эффективных параметров

$$\psi(\xi) = -\eta(\xi) \frac{\partial \phi(\xi)}{\partial \xi}.$$

Теперь, разрешив уравнение (4.2) относительно β_n , мы можем записать общее выражение для увеличения ядерной поляризации в стационарном режиме

$$I^* = \frac{\beta_n}{\beta} = \frac{\int d\xi \frac{\partial \phi(\xi)}{\partial \xi} \left\{ 1 - \eta(\xi) \frac{\Omega_s}{\Omega_n} - \Lambda(\xi) \right\} \int_{-\infty}^0 dt e^{\epsilon t} (\dot{H}'_{e(n)}(\xi); \dot{H}'_{e(n)}(t))}{\int d\xi \int_{-\infty}^0 dt e^{\epsilon t} (\dot{H}'_{e(n)}(\xi); \dot{H}'_{e(n)}(t))} \frac{T_{nl}}{T_{ne} + T_{nl}} + \quad (4.4)$$

$$+ \frac{T_{ne}}{T_{ne} + T_{nl}};$$

$$\Lambda(\xi) = \frac{\int_{-\infty}^0 dt e^{\epsilon t} (\dot{H}'_{e(n)}(\xi); \dot{P}'_{(n)}(t))}{\int_{-\infty}^0 dt e^{\epsilon t} (\dot{H}'_{e(n)}(\xi); \dot{H}'_{e(n)}(t))}. \quad (4.5)$$

Величина $\Lambda(\xi)$ определяет вклад электронного дрейфа в ядерную поляризацию; по порядку величины (4.5) равно $\Lambda(\xi) = -\frac{\Omega_s}{\Omega_n} \frac{mV^2}{\xi}$ (точное выражение, найденное в работе /8/, содержит численный множитель 1/3). Формула (4.4) для I^* переходит в выражение (1.5.5) метода эффективных параметров, если $\frac{\partial \phi(\xi)}{\partial \xi} = \beta_k = \text{Const}$, $\eta(\xi) = \eta = \text{Const}$. В силу этого все качественные соображения о величине и знаке эффекта Фейера, приведенные в I, остаются в силе и для нашего случая.

Раскрывая корреляционные функции в формуле (4.4), ограничимся нулевым приближением по $\psi(\xi)$, поскольку основной из линейных по ψ членов учтен в явном виде.

Мы не будем рассматривать здесь случай квантующих магнитных полей. В классическом интервале напряженности магнитного поля формула (4.4) принимает вид (взаимодействие электронов с ядрами считается контактным):

$$I^* = \frac{1}{\beta} \frac{\int d\xi \xi \frac{\partial \phi(\xi)}{\partial \xi} e^{-\phi(\xi)} \left\{ 1 - \frac{\Omega_s}{\Omega_n} (\eta(\xi) - \frac{1}{3} \frac{mV^2}{\xi}) \right\}}{\int d\xi \xi e^{-\phi(\xi)}} \cdot \frac{T_{nl}}{T_{ne} + T_{nl}} + \frac{T_{ne}}{T_{ne} + T_{nl}}, \quad (4.6)$$

а зависимость времени ядерно-электронной релаксации от внешних полей определяется формулой

$$T_{ne}^{-1} = T_{ne}^{-1}(0) \left(\frac{\pi\beta}{4} \right)^{1/2} \frac{\int_0^\infty d\xi \xi e^{-\phi(\xi)}}{\int_0^\infty d\xi \xi^{1/2} e^{-\phi(\xi)}}. \quad (4.7)$$

Теперь остается получить явные выражения для функций $\phi(\xi)$ и $\psi(\xi)$ из электронных уравнений (3.1) и (3.2).

§5. Уравнения баланса плотности энергии и плотности намагниченности горячих электронов

Уравнение (3.1) и (3.2) будем решать в тех же приближениях, что и соответствующую систему уравнений в части I.

В уравнении баланса плотности электронов пренебрегаем взаимодействием с ядерными спинами и отклонением электронной намагниченности от равновесия с орбитальным движением (т.е. функцией $\psi(\xi)$). Корреляционные функции в уравнении баланса плотности (3.1) можно преобразовать по способу, изложенному в §3. В результате уравнение (3.1) сводится к виду

$$\frac{\partial}{\partial \xi} (P(\xi) - j(\xi)E) = 0, \quad (5.1)$$

где $P(\xi)$ — мощность, теряемая горячими электронами с энергией ξ в столкновениях с решеткой (полная мощность потерь равна $\int d\xi P(\xi)$). При этом

$$P(\xi) = P_{ph}(\xi) + P_{mi}(\xi),$$

$$P_{ph}(\xi) = - \left(\frac{\partial \phi(\xi)}{\partial \xi} - \beta \right) e^{-\phi(\xi)} \frac{2\pi}{h} \sum_{\nu, \sigma', \nu\sigma; \vec{\lambda}} (h\Omega_{q\lambda}) |U_{eph}^{\vec{\lambda}}(\nu, \sigma' | \nu\sigma)|^2 N_{q\lambda} \delta(\epsilon_{\nu\sigma} - \xi) \times \quad (5.2)$$

$$\times \delta(\epsilon_{\nu\sigma'} - \xi),$$

$$P_{mi}(\xi) = - \left(\frac{\partial \phi(\xi)}{\partial \xi} - \beta \right) e^{-\phi(\xi)} \frac{\pi}{h} \sum_{\nu, \sigma', \nu\sigma; q\lambda} (\sigma - \sigma')^2 (h\Omega_{mi}) |U_{emi}^{\vec{\lambda}}(\nu, \sigma' | \nu\sigma)|^2 N_{q\lambda} \delta(\epsilon_{\nu\sigma} - \xi) \times \quad (5.3)$$

$$\times \delta(\epsilon_{\nu\sigma'} - \xi).$$

Далее $j(\xi)$ — есть плотность диссипативного тока горячих электронов с энергией ξ (полный ток в направлении электрического поля равен $\int d\xi j(\xi)$)

$$j(\xi) = j_{ph}(\xi) + j_i(\xi) + j_{mi}(\xi),$$

$$j_{ph}(\xi)E = \frac{\partial \phi(\xi)}{\partial \xi} e^{-\phi(\xi)} \frac{2\pi}{h} \sum_{\nu, \sigma, \nu\sigma; \vec{q}\lambda} (h q_x V)^2 |U_{eph}^{\vec{q}\lambda}(\nu\sigma|\nu\sigma)|^2 N_{q\lambda} \delta(\epsilon_{\nu\sigma} - \xi) \delta(\epsilon_{\nu\sigma} - \xi), \quad (5.4)$$

$$j_i(\xi)E = \frac{\partial \phi(\xi)}{\partial \xi} e^{-\phi(\xi)} \frac{\pi}{h} \sum_{\nu, \sigma, \nu\sigma; \vec{q}} (h q_x V)^2 |U_{ei}^{\vec{q}}(\nu\sigma|\nu\sigma)|^2 N_i \delta(\epsilon_{\nu\sigma} - \xi) \delta(\epsilon_{\nu\sigma} - \xi),$$

$$j_{mi}(\xi)E = \frac{\partial \phi(\xi)}{\partial \xi} e^{-\phi(\xi)} \frac{\pi}{h} \sum_{\nu, \sigma, \nu\sigma; \vec{q}\ell} (h q_x V)^2 |U_{emi}^{\vec{q}\ell}(\nu\sigma|\nu\sigma)|^2 N_\ell \delta(\epsilon_{\nu\sigma} - \xi) \delta(\epsilon_{\nu\sigma} - \xi). \quad (5.5)$$

Из уравнения (5.1) следует, что $P(\xi) - j(\xi)E = \text{Const}$, причем константа должна быть положена равной нулю, поскольку функция $e^{-\phi(\xi)}$ стремится к нулю на бесконечности. (Если эта функция не исчезает при $\xi \rightarrow \infty$, то константа может быть отлична от нуля. В этой ситуации, называемой обычно режимом "убегания" электронов, излагаемая теория неприменима). Таким образом, первый интеграл уравнения (5.1) представляет собой уравнение баланса энергии горячих электронов $P(\xi) - j(\xi)E = 0$, из которого сразу находится функция $\phi(\xi)$:

$$\phi(\xi) = \int d\xi' \frac{\partial \phi(\xi')}{\partial \xi'}, \quad \frac{\partial \phi(\xi)}{\partial \xi} = \beta \{1 + \kappa(\xi)\}^{-1}, \quad (5.6)$$

$$\kappa(\xi) = \frac{\sum (h q_x V)^2 \left\{ \frac{2\pi}{h} |U_{eph}^{\vec{q}\lambda}(\nu\sigma|\nu\sigma)|^2 N_{q\lambda} + \frac{\pi}{h} |U_{ei}^{\vec{q}}(\nu\sigma|\nu\sigma)|^2 N_i + \frac{\pi}{h} |U_{emi}^{\vec{q}\ell}(\nu\sigma|\nu\sigma)|^2 N_\ell \right\} \delta(\epsilon_{\nu\sigma} - \xi) \delta(\epsilon_{\nu\sigma} - \xi)}{\sum \left\{ \frac{2\pi}{h} (h \Omega_{q\lambda}) |U_{eph}^{\vec{q}\lambda}(\nu\sigma|\nu\sigma)|^2 N_{q\lambda} + \frac{\pi}{h} (\sigma - \sigma')^2 (h \Omega_{mi})^2 |U_{emi}^{\vec{q}\ell}(\nu\sigma|\nu\sigma)|^2 N_\ell \right\} \delta(\epsilon_{\nu\sigma} - \xi) \delta(\epsilon_{\nu\sigma} - \xi)}$$

Выражение, стоящее в числителе дроби в (5.6), пропорционально частоте релаксации импульса $\omega_{e\ell}(\xi)$ потока электронов с энергией ξ , причем $\omega_{e\ell}(\xi) = \omega_{eph}(\xi) + \omega_{ei}(\xi) + \omega_{emi}(\xi)$, а зависимость этих величин от ξ дается формулой $\omega_{e\ell}(\xi) \approx \xi^M$, где $M = 1/2$ для гомеополярных акустических фононов, магнитных примесей и точечных дефектов, $M = -1/2$ для пьезоакустических фононов и оптических фононов при $h\Omega_0 < \bar{\epsilon}$; $M = -3/2$ для ионизированных примесей, $M = 0$ для нейтральных примесей и оптических фононов при $h\Omega_0 > \bar{\epsilon}$. Выражение, стоящее в знаменателе,

можно связать с временем релаксации энергии электронов. Удобнее, однако, выразить его через частоты релаксации импульса на механизмах рассеяния, ответственных за релаксацию энергии. Опуская вычисления, приведем результаты для выражения в фигурной скобке формулы (5.6) для различных механизмов релаксации энергии горячих электронов.

1. Акустические фононы

$$1 + \kappa(\xi) = 1 + \frac{V^2}{3s^2} \frac{\omega_{e\ell}(\xi)}{\omega_{eph}(\xi)}. \quad (5.7)$$

2. Магнитные примеси

$$1 + \kappa(\xi) = 1 + \frac{2}{3} \frac{V^2 m \xi}{(h \Omega_{mi})^2} \frac{\omega_{e\ell}(\xi)}{\omega_{emi}(\xi)}. \quad (5.8)$$

3. Оптические фононы, $h\Omega_0 < \bar{\epsilon}$

$$1 + \kappa(\xi) = 1 + \frac{4V^2 m \xi}{3(h\Omega_0)^2 L} \frac{\omega_{e\ell}(\xi)}{\omega_{eph}(\xi)}, \quad L = \ln\left(\frac{4\xi}{h\Omega_0}\right). \quad (5.9)$$

4. Оптические фононы, $h\Omega_0 > \bar{\epsilon}$. Этот случай соответствует сильно неупругому рассеянию электронов. Однако, как показано Давыдовым и Шмушкевичем ^{/3/}, это рассеяние фактически является двухступенчатым, и состоит из поглощения оптического фонона с энергией $h\Omega_q$ и последующего излучения фонона с энергией $h\Omega_{q'}$, так что результирующее изменение энергии электрона равно $h\Omega_{q'} - h\Omega_q$, и определяется дисперсией энергии оптических фононов. В результате неупругость рассеяния оказывается очень малой, и этот процесс можно описать уравнениями диффузии в пространстве энергии. Мы не приводим подробных преобразований уравнений (3.1) и (3.2) для этого случая; они аналогичны преобразованиям, проделанным в работе ^{/3/}. Результат имеет вид:

$$1 + \kappa(\xi) = 1 + \frac{m V^2}{4\lambda^2 h \Omega_0} \frac{\omega_{e\ell}(\xi)}{\omega_{eph}(\xi)}; \quad \lambda = \frac{2ma^2 \Omega_0}{h}, \quad (5.10)$$

а - постоянная решетки.

Рассмотрим теперь уравнение (3.2) баланса плотности зеемановской энергии горячих электронов. Пренебрегая взаимодействием с ядерными спинами и преобразуя интегральные операторы по методу §3, запишем (3.2) в виде

$$\int_{-\infty}^0 dt e^{\epsilon t} (\dot{H}_{s(b)}(\xi); \dot{H}'_{e(b)}(t)) \left(\frac{\partial \phi(\xi)}{\partial \xi} - \beta \right) - \int_{-\infty}^0 dt e^{\epsilon t} (\dot{H}_{s(b)}(\xi); \dot{P}_{(b)}^x(t)) V \frac{\partial \phi(\xi)}{\partial \xi} + \int_{-\infty}^0 dt e^{\epsilon t} \{ (\dot{H}_{s(b)}(\xi); \dot{H}_{s(b)}(t)) \psi(\xi) - (\dot{H}_{s(b)}(\xi); \dot{H}_{e(b)}(t)) \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\hbar \Omega_s}{2} \frac{\bar{g}(\xi)}{g(\xi)} \right) \psi(\xi) \} = 0. \quad (5.11)$$

В этом уравнении третий член является наибольшим из линейных по $\psi(\xi)$ членов (остальные содержат малые отношения $\Delta \epsilon / \bar{\epsilon} < 1$ или $mV^2 / \bar{\epsilon} < 1$). Этот член пропорционален обратному времени релаксации продольной намагниченности электронов с энергией ξ :

$$T_{sl}^{-1}(\xi) = \frac{\int_{-\infty}^0 dt e^{\epsilon t} (\dot{H}_{s(b)}(\xi); \dot{H}_{s(b)}(t))}{\left(\frac{\hbar \Omega_s}{2} \right)^2 \langle n(\xi) \rangle \left[1 - \left(\frac{\bar{g}(\xi)}{g(\xi)} \right)^2 \right]}. \quad (5.12)$$

Выражение (5.12) является прямым аналогом формулы (1.6.13) для времени релаксации полной намагниченности. Вычисление этой величины несложно. Отметим, что в некваंटующих магнитных полях $\frac{\bar{g}(\xi)}{g(\xi)} \approx \frac{\hbar \Omega_s}{\xi} < 1$; раскрывая коррелятор (5.12), с помощью общих выражений §3 получаем

$$T_{sl}^{-1}(\xi) = T_{sph}^{-1}(\xi) + T_{si}^{-1}(\xi) + T_{smi}^{-1}(\xi), \quad (5.13)$$

$$T_{sph}^{-1}(\xi) = \frac{2\pi}{\hbar g(\xi)} \sum_{\nu \sigma', \nu \sigma; \vec{q} \lambda} (1 - \delta_{\sigma \sigma'}) |U_{eph}^{\vec{q} \lambda}(\nu \sigma' | \nu \sigma)|^2 N_{q\lambda} \delta(\epsilon_{\nu \sigma'} - \xi) \delta(\epsilon_{\nu \sigma} - \xi),$$

$$T_{si}^{-1}(\xi) = \frac{\pi}{\hbar g(\xi)} \sum_{\nu \sigma', \nu \sigma; \vec{q}} (1 - \delta_{\sigma \sigma'}) |U_{ei}^{\vec{q}}(\nu \sigma' | \nu \sigma)|^2 N_i \delta(\epsilon_{\nu \sigma'} - \xi) \delta(\epsilon_{\nu \sigma} - \xi), \quad (5.14)$$

$$T_{smi}^{-1}(\xi) = \frac{\pi}{\hbar g(\xi)} \sum_{\nu \sigma', \nu \sigma; \vec{q} \ell} (1 - \delta_{\sigma \sigma'}) |U_{emi}^{\vec{q} \ell}(\nu \sigma' | \nu \sigma)|^2 N_{\ell} \delta(\epsilon_{\nu \sigma'} - \xi) \delta(\epsilon_{\nu \sigma} - \xi).$$

Вычисление этих выражений с учетом явного вида матричных элементов спин-решеточного взаимодействия, приведенных в I, §2, дает

$$T_{sl}^{-1}(\xi) \approx \xi^{M'},$$

где $M' = \frac{t'+2}{2}$ для акустических фононов, $M' = \frac{t'+3}{2}$ для немагнитных примесей, $M' = 1/2$ - для магнитных примесей, $M' = 0$ для оптических фононов при $\hbar \Omega_0 > \bar{\epsilon}$ (двойное рассеяние), $M' = 0$ для оптических фононов при $\hbar \Omega_0 < \bar{\epsilon}$. Эти результаты относятся к случаю $r=2$ (т.е. к кристаллам с экстремумом энергии электронов в центре или на грани зоны Бриллюэна); значения показателя t' приведены в I, §2.

Раскрывая остальные корреляторы в уравнении (5.11) и вычисляя встречающиеся интегралы, получим функцию $\eta(\xi) = -\psi(\xi)/\phi'(\xi)$ в виде

$$\eta(\xi) = \sum_k \eta_k(\xi) T_{sk}^{-1}(\xi) / \sum_k T_{sk}^{-1}(\xi), \quad (5.15)$$

где индекс "k" нумерует механизмы рассеяния. Величина $\eta_k(\xi)$ для различных механизмов спин-решеточной релаксации равна:

1. Рассеяние на магнитных примесях

$$\eta_{mi}(\xi) = - \frac{\Omega_{mi}}{\Omega_s} \left(\frac{\beta}{\phi'(\xi)} - 1 \right). \quad (5.16)$$

2. Рассеяние на оптических фононах, $\hbar \Omega_0 < \bar{\epsilon}$

$$\eta_{ph}(\xi) = - \left(\frac{\hbar \Omega_0}{2\xi} \right)^3 \left(\frac{\beta}{\phi'(\xi)} - 1 \right). \quad (5.17)$$

3. Рассеяние на оптических фононах, $\hbar \Omega_0 > \bar{\epsilon}$

$$\eta_{ph}(\xi) = \frac{\xi \lambda}{\hbar \Omega_0} \left(\frac{\beta}{\phi'(\xi)} - 1 \right), \quad \lambda = \frac{2\pi a^2 \Omega_0}{h}. \quad (5.18)$$

4. Рассеяние на акустических фононах

$$\eta_{ph}(\xi) = \gamma^2 \left(\frac{V}{s} \right)^2 \frac{t'+3}{3} - \gamma^3 (t'+1)(t'+3) \left[\frac{\beta}{\phi'(\xi)} - 1 \right] \left(1 + \frac{2V^2}{3s^2} - \frac{4V^2 \xi \phi'(\xi)}{3s^2 (t'+2)} \right), \quad (5.19)$$

где $\gamma = \frac{ms^2}{2\xi}$ - параметр неупругости при акустическом рассеянии.

5. Рассеяние на немагнитных примесях

$$\eta_1(\xi) = \frac{mV^2}{\xi} \frac{t'+4}{6}. \quad (5.20)$$

§6. Ядерная поляризация

Сопоставление результатов (5.15)–(5.20) с соответствующими выражениями, полученными в рамках метода эффективных параметров, приводит к заключению, что во всех случаях, за исключением релаксации спина на оптических фононах при $\hbar\Omega_0 > \epsilon$, как знак, так и порядок величины эффекта Феера одинаковы при обеих схемах теоретического описания. Действительно, $\frac{\partial \phi(\xi)}{\partial \xi}$ соответствует обратной кинетической температуре горячих электронов; поэтому при $\xi = \bar{\epsilon}$ величины $\eta_k(\xi)$ переходят в выражения, полученные в первой части работы с точностью до численных множителей порядка единицы. Наибольшая поляризация ядер соответствует рассеянию электронного спина на магнитных примесях с малым временем спин-решеточной релаксации. Направление поляризации — противоположное эффекту Оверхаузера. Зависимость поляризации от напряженности электрического поля такая же, как и в методе эффективных параметров; максимальная поляризация $I'_{\max} \approx \frac{\Omega_{m1}}{\Omega_n}$. Следует отметить, что при больших временах релаксации спина примеси они отклоняются от равновесия с решеткой. При этом величина $\eta_{mi}(\xi)$ (или η) оказывается меньше выражения (5.16), а вместе с ней убывает и ядерная поляризация. Поэтому результат (5.16) фактически является завышенным.

В случае рассеяния на оптических фононах при $\hbar\Omega_0 > \bar{\epsilon}$ эффект Феера, рассчитанный в приближении Фоккера–Планка, гораздо меньше, чем в методе эффективных параметров, и имеет другой знак. Физическая причина этого заключается в следующем. Приближение эффективных параметров применимо к полупроводникам со сравнительно большими концентрациями электронов проводимости. В этих условиях межэлектронные соударения

термализуют электронную функцию распределения за время между двумя последовательными неупругими столкновениями электрона с решеткой. Даже при $\hbar\Omega_0 > \bar{\epsilon}$ существуют электроны, энергия которых больше, чем $\hbar\Omega_0$ ("хвост" функции распределения). Релаксация энергии, рассчитанная по методу эффективных параметров, фактически описывает эмиссию оптических фононов электронами с $\xi > \hbar\Omega_0$. Этот же механизм определяет и релаксацию спина. Поскольку этот механизм рассеяния является сильно неупругим, скорость отвода зеемановской энергии горячих электронов велика, что приводит к большому отклонению спинов от равновесия с орбитальным движением и большой поляризации ядер (см. 1). При низких же концентрациях электронов проводимости межэлектронные соударения не играют роли, и эмиссия оптических фононов невозможна, поскольку в этой ситуации электроны, попавшие из области энергий $\xi > \hbar\Omega_0$ в область $\xi < \hbar\Omega_0$, не перекачиваются обратно, как это происходит при большой частоте межэлектронных соударений. Фактически в этом случае электроны могут только поглощать оптические фононы с последующим излучением фононов несколько другой частоты. В результате рассеяние энергии и спина оказывается практически упругим (в теории горячих электронов хорошо известно, что этот механизм дает гораздо более медленную релаксацию энергии, чем в случае эмиссии оптических фононов термализованными электронами при $\xi > \hbar\Omega_0$ /3,9/); в соответствии с качественной трактовкой эффекта Феера (I, § I) упругое рассеяние спина может только незначительно повышать спиновую температуру электронов. Это означает, что $\eta > 0$ или $\eta(\xi) > 0$ и объясняет малую величину ядерной поляризации, соответствующую формуле (5.18).

Таким образом, для любой концентрации электронов проводимости можно получить большую поляризацию ядер $\approx \frac{\Omega_{m1}}{\Omega_n}$ при рассеянии спина на магнитных примесях. Рассеяние намагниченности электронов на оптических фононах дает большую ядерную поляризацию $\approx \frac{\Omega_s}{\Omega_n}$ в следующих условиях:

1. Концентрация электронов велика, так что $\omega_{el} < \omega_{ee}$.
2. Рассеяние энергии горячих электронов обусловлено слабонеупругим механизмом, например, акустическими фононами.

3. Рассеяние импульса потока горячих электронов обусловлено примесями (условия (3) и (4) дают быстрый рост средней кинетической энергии электронов).

4. Низкие температуры, $\bar{\epsilon} < h\Omega_0$.

Другие механизмы релаксации спина электронов, рассмотренные в нашей работе, дают поляризацию ядер $I^* \approx 10+10^2$ при дрейфовых скоростях электронного потока $V \approx (0,1+1) s$ (s - скорость звука).

В заключение пользуюсь случаем выразить глубокую признательность профессору Д.Н. Зубареву за обсуждение рассмотренных вопросов.

Л и т е р а т у р а

1. H. Frohlich, B.V. Paranjape. *Proc.Phys.Soc.*, B69, 21 (1956).
2. Б.Н. Давыдов. *ЖЭТФ* 7, 1069, 1937.
3. Б. Давыдов, И. Шмушкевич. *ЖЭТФ*, 10, 1043, 1940.
4. E. Korwell. *Sol. St.Phys.Suppl.* 8 N-Y-London, 1967.
5. Д.Н. Зубарев. *ДАН СССР* 140, 92, 1961; 162, 52, 1965; 164, 573, 1965.
6. В.П. Калашников. *ДАН СССР*, 186, 803, 1969.
7. В.П. Калашников. *Препринт ИТФ-68-79*, Киев, 1968.
8. В.П. Калашников. *ЖЭТФ*, 53, 1468, 1967.
9. K. Stratton . *Proc. Phys.Soc.*, A242, 355 (1957); A246, 406(1958).

Рукопись поступила в издательский отдел

18 ноября 1969 года.