Національна академія наук України

ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP–20–10U

П. П. Костробій*, Ф. О. Іващишин*
Б. М. Маркович*, М. В. Токарчук

МІКРОСКОПІЧНА ТЕОРІЯ ВПЛИВУ ДИПОЛЬНИХ СУПЕРПАРАМАГНЕТИКІВ (ТИПУ $\langle\beta-\mathrm{CD}\langle\mathrm{FeSO_4}\rangle\rangle$) НА СТРУМОПРОХОДЖЕННЯ У НАПІВПРОВІДНИКОВИХ ШАРУВАТИХ СТРУКТУРАХ (ТИПУ GaSe, InSe)

*Національний університет «Львівська політехніка», вул. С. Бандери, 12, Львів

ЛЬВІВ

УДК: 538.93
PACS: 05.20.-y; 05.60.Cd

Мікроскопічна теорія впливу дипольних суперпарамагнетиків (типу $\langle\beta-\mathrm{CD}\langle\mathrm{FeSO_4}\rangle\rangle$) на струмопроходження у напівпровідникових шаруватих структурах (типу GaSe, InSe)

П.П. Костробій, Ф.О. Іващишин, Б.М. Маркович, М.В. Токарчук

Анотація. Запропоновано статистичний підхід опису процесів переносу носіїв заряду у гібридних наноструктурах з врахуванням електромагнітних полів. Отримано узагальнені рівняння переносу, які описують немарковські процеси переносу заряду у системі з врахуванням магнітних та поляризаційних процесів під впливом зовнішніх та індукованих внутрішніх електромагнітних полів. Отримано узагальнене рівняння дифузії типу Каттано у часових дробових похідних для електронів з характерним часом релаксації та запропоновано узагальнену модель, що враховує складність релаксаційних електро-магніто-дифузійних процесів для електронів у шаруватих наноструктурах.

Microscopic theory of the influence of dipole superparamagnetics (type $\langle\beta-\mathrm{CD}\langle\mathrm{FeSO_4}\rangle\rangle$) on current flow in semiconductor layered structures (type GaSe, InSe)

P.P. Kostrobij, F.O. Ivashchyshyn, B.M. Markovych, M.V. Tokarchuk

Abstract. A statistical approach to the description of charge carrier transfer processes in hybrid nanostructures taking into account electromagnetic fields is proposed. Generalized transfer equations are obtained, which describe non-Markov processes of charge transfer in the system taking into account magnetic and polarization processes under the influence of external and induced internal electromagnetic fields. A generalized Cattaneo-type diffusion equation in time fractional derivatives for electrons with a characteristic relaxation time is obtained and a generalized model is proposed that takes into account the complexity of relaxation electro-magnetic diffusion processes for electrons in layered nanostructures.

Подається в Mathematical Modeling and Computing
Submitted to Mathematical Modeling and Computing

Препринти Інституту фізики конденсованих систем НАН України розповсюджуються серед наукових та інформаційних установ. Вони також доступні по електронній комп'ютерній мережі на WWW-сервері інституту за адресою http://www.icmp.lviv.ua/

The preprints of the Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine are distributed to scientific and informational institutions. They also are available by computer network from Institute's WWW server (http://www.icmp.lviv.ua/)

Петро Петрович Костробій
Федір Олегович Іващишин
Богдан Михайлович Маркович
Михайло Васильович Токарчук

Мікроскопічна теорія впливу дипольних суперпарамагнетиків (типу $\langle\beta - \mathrm{CD}\langle \mathrm{FeSO_4}\rangle\rangle$) на струмопроходження у напівпровідникових шаруватих структурах (типу GaSe, InSe)

Роботу отримано 21 грудня 2020 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку відділом теорії м'якої речовини

Виготовлено при ІФКС НАН України

1. Вступ

Дослідження впливу процесів намагнічення та поляризації в електронній підсистемі та інтеркальованих шарах комплексів на струмопроходження в системі залишаються актуальними [1–3]. У недавній роботі [2] для системи $\mathrm{SiO_2}\langle\mathrm{SmCl_3}\rangle$ були побудовані діаграми Найквіста — відображення повного імпедансу у комплексній площині з координатними осями його дійсної і уявної частин — $\mathrm{Re}\,Z - \mathrm{Im}\,Z$. Із діаграми видно, що після інкапсуляції $\mathrm{SmCl_3}$ дійсна складова питомого комплексного імпедансу ($\mathrm{Re}\,Z$) в найнизькочастотній області (що відповідає струмопроходженню переважно делокалізованими носіями) зменшується більш як в чотири рази. Водночас, міняється і вид годографу імпедансу в темряві - появляється горизонтальний низькочастотний "хвіст". Він, найімовірніше, пов'язаний з розподіленістю активного опору (зумовленого дискретизацією енергетичного спектру). Цікаво, що він зберігається і в постійному магнітному полі напруженістю 2,75 кОе, яке викликає від'ємний магніторезистивний ефект, зумовлений зееманівською делокалізацією носіїв з пасткових центрів, локалізованих поблизу рівня Фермі. Крім того, цікавим виявився ефект переходу низькочастотної ділянки годографу імпедансу у IV-індуктивний квадрант площини комплексного імпедансу при освітленні. Подібна поведінка спостерігалася і в діаграмах Найквіста для GaSe [3–5] і з точки зору теоретичних досліджень були трактована як субдифузійний імпеданс на основі рівнянь субдифузії типу Кеттано у часових дробових похідних. Виявлене явище фотоіндукованої "від'ємної" ємності може знайти своє застосування для вирішення проблеми формування безгіраторних нановимірних ліній затримки з оптичним керуванням. Поява гігантської від'ємної фотоємності найімовірніше пов'язаний з фотозбудженням електронів із зайнятих станів нижче рівня Фермі і формуванням таким чином пасткових центрів для інжектованих електронів з часом релаксації більшим від півперіоду синусоїдального сигналу. Для вияснення механізмів таких процесів необхідні мікроскопічні підходи опису струмопроходження у таких системах з врахуванням їх електромагнітної природи.

Дія зовнішнього магнітного поля на молекулярну структуру нанопрошарків $\langle\beta - \mathrm{CD}\langle \mathrm{FeSO_4}\rangle\rangle$ з вмістом сульфату заліза, катіонна структура якого має великий магнітний момент у шаруватій структурі GaSe може приводити до намагнічування даних шарів, що впливає на зміну опору. Якщо намагніченості шарів паралельні, то електричний струм пов'язаний з електронами тунелювання між цими шарами через напівпровідниковий шар буде зростати, а отже опір буде зменшуватися. І навпаки, якщо намагніченості шарів антипаралельні, то ймовірність тунелювання електронів різко зменшується, а отже опір зростає. Ефект гігантського магнітоопору виникає через залежність розсіювання електронів від напрямку їх спіну відносно вектора намагніченості. Електрони, спін яких напрямлений протилежно напрямку намагніченості, розсіюється інтенсивніше, ніж ті електрони, спін яких напрямлений однаково з намагніченістю. Тому, коли намагніченості у шарах будуть антипаралельні то опір буде зростати, і навпаки коли намагніченості - паралельні, опір буде падати. Очевидно, що процеси намагнічення у шарах впливають на спінову динаміку електронної підсистеми. Це може приводити до суттєвих кореляцій між потоками заряду електронів (дирок) з відповідно направленими спінами і градієнтами густини заряду електронів. Суттєва зміна потоку заряду може відбуватися за рахунок індукованих магнітоелектричних взаємодій. Дані процеси є суттєво неліній ні із складною поведінкою релаксаційних процесів, пов'язаних із магнітоелектричними взаємодіями (включаючи внутрішні електричні та магнітні поля), що ведуть до процесів намагнічення та поляризації про що свідчить поведінка діелектричної функції від частоти та імпедансні залежності. Внутрішні електричні та магнітні поля вносять суттєвий вплив на асиметризацію густини станів над і під рівнем Фермі, що і забезпечує характер струмопроходження. Такі процеси можуть також стимулювати виникнення пасток для носіїв заряду, що впливатиме на струмопроходження, про що свідчить поведінка імпедансних залежностей. Відповідь на ці питання необхідно шукати у дослідженнях процесів намагнічення та поляризації в електронній підсистемі та інтеркальованих шарів комплексів $\langle\beta-\mathrm{CD}\langle\mathrm{FeSO_4}\rangle\rangle$. При цьому важливо враховувати фрактальність системи на рівні побудови рівнянь переносу електронів та рівнянь Максвелла для електромагнітних полів. Окремого дослідження вимагають можливі процеси тунелювання електронів між модифікованими комплексами через шар напівпровідникової матриці. Подібні фізичні процеси струмопроходження будуть відбуватися і в клатратах $\mathrm{GaSe}\langle\mathrm{SmCl_3}\rangle$ з можливо більшим проявом магнітних процесів.

З точки зору моделей, які б могли бути застосовані для опису кореляцій між потоками частинок і градієнтами їх густин, насамперед, це модель субдифузії на основі рівнянь Кеттано [3–6], яке було використано для моделювання подібної системи з модифікуванням β-циклодекстрину без $\mathrm{FeSO_4}$. Однак, модифікація рівняння Кеттано повинна враховувати вплив $\mathrm{FeSO_4}$, а також вплив зовнішнього магнітного поля. Важливо зазначити, що розвитку кінетичної теорії на основі дробово-диференціальних рівнянь переносу для опису процесів переносу носіїв заряду у напівпровідникових структурах присвячена ціла низка робіт [7–10] феноменологічного та напівфеноменологічного характеру [11, 12].

У другому розділі подано гамільтоніан моделі гібридних мультишарових наноструктур в електромагнітному полі. У третьому розділі запропоновано статистичний підхід опису процесів переносу у даних системах із застосуванням методу нерівноважного статистичного оператора (НСО) Зубарєва [13, 14]. Для опису нерівноважних процесів переносу носіїв заряду у гібридних наноструктурах з врахуванням магнетизму за параметри скороченого опису вибрано нерівноважні середні значення операторів густин електронів $\langle n_\sigma(\mathbf{r})\rangle^t$, комплексів $\langle n^c_\sigma(\mathbf{r})\rangle^t$ та їх відповідних густин магнітних моментів $\langle\mathbf{m}(\mathbf{r})\rangle^t$, $\langle\mathbf{M}_{ef}(\mathbf{r})\rangle^t$, де усереднення виконується за допомогою нерівноважного статистичного оператора $\varrho(t)$, який знаходиться методом НСО як запізнюючий розв'язок квантового рівняння Ліувілля. У четвертому розділі за допомогою нерівноважного статистичного оператора для параметрів скороченого опису отримано узагальнені рівняння переносу, які описують немарковські процеси струмопроходження у системі з врахуванням магнітних та поляризаційних процесів під впливом зовнішніх та індукованих внутрішніх електромагнітних полів. У п'ятому розділі розглянуто слабо нерівноважні процеси струмопроходження у наноструктурах та отримано нерівноважний статистичний оператор, за допомогою якого у шостому розділі записано магніто-дифузійні рівняння переносу для електронів у шаруватих наноструктурах. У сьомому розділі отримано узагальнене рівняння дифузії типу Кеттано у часових дробових похідних для електронів з характерним часом релаксації, а у восьмому - запропоновано узагальнену модель, що враховує складність релаксаційних електромагніто дифузійних процесів для електронів у шаруватих наноструктурах.

2. Гамільтоніан системи

З точки зору теоретичних досліджень важливо розглядати модель гібридної мультишарової наноструктури $\mathrm{GaSe}\langle\beta-\mathrm{CD}\langle\mathrm{FeSO_4}\rangle\rangle$ у полях світла, електричного та магнітного полів. Гамільтоніан такої моделі можна подати у вигляді:

$$H(t) = H_e + H_{e-ph} + H_{e-m} + H_{m-ph} + H_{m-m} + H_{ph}, \tag{2.1}$$

$$H_e(t) = \frac{\hbar^2}{2m_2}\sum_{j=1}^{N_e}\left(\nabla_j - \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}_j;t)\right)^2 + H_{ee} + H_s + H_{ef}(t) + \sum_{j=1}^{N_e} e\Phi(\mathbf{r}_j;t), \tag{2.2}$$

— гамільтоніан електронної підсистеми, H_{ee} — гамільтоніан ефективної електрон-електронної взаємодії та H_{e-ph} — гамільтоніан електрон-фононної взаємодії у наноструктурі. $\mathbf{A}(\mathbf{r}_j;t)$, $\Phi(\mathbf{r}_j;t)$ — векторний і скалярний потенціали електромагнітного поля, що діє на електрони та макромолекули у наноструктурі, включаючи внутрішні та зовнішні поля. H_{e-m} — гамільтоніан взаємодії електронів та поляризованих макромолекул, зокрема β-циклодекстрину модифікованого $FeSO_4$. Комплекси $\langle\beta - \mathrm{CD}\langle \mathrm{FeSO}_4\rangle\rangle$ є дипольними суперпарамагнетиками у шаруватій структурі GaSe. Тому в електричних та магнітних полях вони будуть поляризуватися та намагнічуватися відповідно і через магнітоелектричну взаємодію з електронною підсистемою можуть впливати на струмопроходження в системі. Струмопроходження через молекулярну структуру нанопрошарків з вмістом сульфату заліза може бути обумовлене, насамперед взаємодією носіїв заряду матриці із d-електронами заліза. H_{m-ph} — гамільтоніан взаємодії комплексів $\langle\beta - \mathrm{CD}\langle \mathrm{FeSO}_4\rangle\rangle$ у шарах із структурою матриці, а H_{m-m} — гамільтоніан взаємодії між комплексами у шарах і між шарами.

$$H_s = -\hbar\omega_s \sum_j s_j^z \tag{2.3}$$

— зеєманівська енергія електронів, s_j^z — компонента вектора спіну електрона,

$$H_{ef}(t) = -g_s\mu_0\Big(\sum_j \mathbf{s}_j\mathbf{B}(\mathbf{r}_j;t) + \sum_j \mathbf{S}_j\mathbf{B}(\mathbf{r}_j;t)\Big) \tag{2.4}$$

$$= \int d\mathbf{r}\mathbf{m}(\mathbf{r})\mathbf{B}(\mathbf{r};t) + \int d\mathbf{r}\mathbf{M}_{ef}(\mathbf{r})\mathbf{B}(\mathbf{r};t)$$

— взаємодія спінів електронів та комплексів із змінним магнітним полем $\mathbf{B}(\mathbf{r}_j;t)$, $\mathbf{m}(\mathbf{r}) = \sum_j \mathbf{s}_j\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_j)$ — густина магнітного моменту електронів, $\mathbf{M}_{ef}(\mathbf{r}) = \sum_j \mathbf{S}_j\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_j)$ — оператор густини магнітного моменту комплексів, інтеркальованих у наноструктуру.

$$H_{ee} = V_{ee} + H_d + H_{ds}, \tag{2.5}$$

V_{ee} — потенціал ефективної електростатичної взаємодії електронів,

$$H_d = -\frac{1}{2}\sum_{l\neq j} J(\mathbf{r}_{lj})\mathbf{s}_l\mathbf{s}_j, \tag{2.6}$$

— обмінна магнітна взаємодії електронів провідності з обмінним інтегралом $J(\mathbf{r}_{lj})$,

$$H_{ds} = -U\sum_{\mathbf{q}} \mathbf{s}_{\mathbf{q}}\bar{\mathbf{s}}_{-\mathbf{q}}, \tag{2.7}$$

— обмінна магнітна взаємодії електронів провідності і локалізованих електронів з обмінним інтегралом U, $\mathbf{s}_{\mathbf{q}}$ і $\bar{\mathbf{s}}_{\mathbf{q}}$ — фур'є-компоненти густин спінів електронів провідності і локалізованих електронів, $\bar{\mathbf{s}}_{\mathbf{q}} = \sum_f e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_f}\bar{\mathbf{s}}_f$, $\bar{\mathbf{s}}_f$ — спін електрона, локалізованого на f -вузлі. Очевидно, що це не повний гамільтоніан такої складної системи, однак магнітна складова нами найбільш врахована. Крім цього, важливо врахувати в H_{m-m} диполь-дипольну взаємодію комплексів $\langle\beta - \mathrm{CD}\langle \mathrm{FeSO}_4\rangle\rangle$ у шаруватій структурі GaSe, а також у H_{m-e} — взаємодію електронів із цими дипольними суперпарамагнетиками.

У наступному розділі ми запропонуємо статистичний підхід опису цих процесів методом нерівноважного статистичного оператора та отримаємо узагальнені рівняння переносу для носіїв заряду із гамільтоніаном (2.1) для опису процесів струмопроходження у таких гібридних наноструктурах.

3. Нерівноважний статистичний оператор системи

Для опису нерівноважних процесів переносу носіїв заряду у гібридних наноструктурах з врахуванням магнетизму за параметри скороченого опису виберемо нерівноважні середні значення операторів густин електронів $\langle n_\sigma(\mathbf{r})\rangle^t$, комплексів $\langle n^c_{\bar\sigma}(\mathbf{r})\rangle^t$ та їх відповідних густин магнітних моментів $\langle \mathbf{m}(\mathbf{r})\rangle^t$, $\langle \mathbf{M}_{ef}(\mathbf{r})\rangle^t$, де $\langle(\ldots)\rangle^t = \mathrm{Sp}\,(\ldots\varrho(t))$ усереднення виконується за допомогою нерівноважного статистичного оператора $\varrho(t)$, який знаходиться методом НСО [13, 14], як запізнюючі розв'язки квантового рівняння Ліувілля:

$$\varrho(t) = \varrho_{rel}(t) - \int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}T(t,t')(1-P_{rel}(t'))iL(t')\varrho_{rel}(t')dt', \tag{3.1}$$

де $iL(t')$ — оператор Ліувілля, що відповідає гамільтоніану задачі (2.1), $T(t,t') = \exp(-\int_{t'}^{t}(1-P_{rel}(t''))iL(t'')dt'')$ — узагальнений оператор еволюції з проектуванням Кавасакі-Гантона $P_{rel}(t'')$, структура якого залежить від параметрів скороченого опису та релевантного (квазірівноважного) статистичного оператора $\varrho_{rel}(t)$. В методі Зубарєва $\varrho_{rel}(t)$ знаходиться із екстремуму інформаційної ентропії (ентропії Гіббса) при фіксованих значеннях спостережуваних змінних (у нашому випадку фіксовані) та збережені умови нормування

$\int d\Gamma \varrho_{rel}(t) = 1$ [13, 14]:

$$\varrho_{rel}(t) = \exp\Bigg(- \Phi(t) - \beta(t)\Big(H(t) - \sum_{\sigma}\int d\mathbf{r} n_{\sigma}(\mathbf{r})\nu_{\sigma}(\mathbf{r};t) \tag{3.2}$$

$$-\sum_{\bar{\sigma}}\int d\mathbf{r} n^{c}_{\bar{\sigma}}(\mathbf{r})\nu^{c}_{\bar{\sigma}}(\mathbf{r};t) - \int d\mathbf{r}\mathbf{m}(\mathbf{r})\mathbf{b}(\mathbf{r};t) - \int d\mathbf{r}\mathbf{M}_{ef}(\mathbf{r})\mathbf{b}'(\mathbf{r};t)\Big)\Bigg),$$

де $n_{\sigma}(\mathbf{r})$ — оператор густини електронів з відповідним напрямком спінів $\sigma =\uparrow,\downarrow$, $n^{c}_{\bar{\sigma}}(\mathbf{r})$ — оператор густини комплексів напрямком спінів $\bar{\sigma} =\uparrow,\downarrow$, інтеркальованих у наноструктуру, $\beta(t)$ — обернене значення нерівноважної температури системи, $\nu_{\sigma}(\mathbf{r};t) = \mu_{\sigma}(\mathbf{r};t) - e\varphi(\mathbf{r};t)$, $\mu_{\sigma}(\mathbf{r};t)$ — електрохімічний та хімічний потенціал електронів з відповідним напрямком спінів, відповідно, $\nu^{c}_{\bar{\sigma}}(\mathbf{r};t) = \mu^{c}_{\bar{\sigma}}(\mathbf{r};t) + \mathbf{d}_{ef}\cdot\mathbf{e}(\mathbf{r};t)$ — дипольно-хімічний потенціал комплексів з відповідним напрямком спінів, $\mathbf{d}_{ef}$ — їх ефективний дипольний момент, відповідно, $\varphi(\mathbf{r};t)$ — скалярний потенціал внутрішнього електромагнітного поля з напруженостями $\mathbf{e}(\mathbf{r};t)$ та $\mathbf{b}(\mathbf{r};t)$. $\Phi(t)$ — функціонал Мас'є-Планка:

$$\Phi(t) = \ln Sp\exp(-\beta(t)(H(t) - \sum_{\sigma}\int d\mathbf{r} n_{\sigma}(\mathbf{r})\nu_{\sigma}(\mathbf{r};t) \tag{3.3}$$

$$-\sum_{\bar{\sigma}}\int d\mathbf{r} n^{c}_{\bar{\sigma}}(\mathbf{r})\nu^{c}_{\bar{\sigma}}(\mathbf{r};t) - \int d\mathbf{r}\mathbf{m}(\mathbf{r})\mathbf{b}(\mathbf{r};t) - \int d\mathbf{r}\mathbf{M}_{ef}(\mathbf{r})\mathbf{b}'(\mathbf{r};t))),$$

у якому нерівноважні параметри Лагранжа $\beta(t)$, $\nu_{\sigma}(\mathbf{r};t)$, $\nu^{c}_{\bar{\sigma}}(\mathbf{r};t)$, $\mathbf{b}(\mathbf{r};t)$, $\mathbf{b}'(\mathbf{r};t)$ визначаються із умов самоузгоджень:

$$\langle H(t)\rangle^{t} = \langle H(t)\rangle^{t}_{rel}, \langle n_{\sigma}(\mathbf{r})\rangle^{t} = \langle n_{\sigma}(\mathbf{r})\rangle^{t}_{rel}, \langle n^{c}_{\bar{\sigma}}(\mathbf{r})\rangle^{t} = \langle n^{c}_{\bar{\sigma}}(\mathbf{r})\rangle^{t}_{rel}, \tag{3.4}$$

$$\langle \mathbf{m}(\mathbf{r})\rangle^{t} = \langle \mathbf{m}(\mathbf{r})\rangle^{t}_{rel}, \langle \mathbf{M}_{ef}(\mathbf{r})\rangle^{t} = \langle \mathbf{M}_{ef}(\mathbf{r})\rangle^{t}_{rel}.$$

Виходячи із означення ентропії Гіббса та умов самоузгоджень (3.4), отримаємо ентропію Гіббса нерівноважних процесів у розглядуваній системі:

$$S(t) = -\langle \ln\varrho_{rel}(t)\rangle^{t}_{rel} = \Phi(t) + \beta(t)(H(t) - \sum_{\sigma}\int d\mathbf{r}\langle n_{\sigma}(\mathbf{r})\rangle^{t}\nu_{\sigma}(\mathbf{r};t) \tag{3.5}$$

$$-\sum_{\bar{\sigma}}\int d\mathbf{r}\langle n^{c}_{\bar{\sigma}}(\mathbf{r})\rangle^{t}\nu^{c}_{\bar{\sigma}}(\mathbf{r};t) - \int d\mathbf{r}\langle \mathbf{m}(\mathbf{r})\rangle^{t}\mathbf{b}(\mathbf{r};t) - \int d\mathbf{r}\langle \mathbf{M}_{ef}(\mathbf{r})\rangle^{t}\mathbf{b}'(\mathbf{r};t)),$$

де

$$S(t) = -\langle \ln\varrho_{rel}(t)\rangle^{t}_{rel} = \Phi(t) + \beta(t)(H(t) \tag{3.6}$$

$$-\sum_{\sigma}\int d\mathbf{r}\langle n_{\sigma}(\mathbf{r})\rangle^{t}(\mu_{\sigma}(\mathbf{r};t) - e\varphi(\mathbf{r};t))$$

$$-\sum_{\bar{\sigma}}\int d\mathbf{r}\langle n^{c}_{\bar{\sigma}}(\mathbf{r})\rangle^{t}(\mu^{c}_{\bar{\sigma}}(\mathbf{r};t) + \mathbf{d}_{ef}\cdot\mathbf{e}(\mathbf{r};t))$$

$$-\int d\mathbf{r}\langle \mathbf{m}(\mathbf{r})\rangle^{t}\mathbf{b}(\mathbf{r};t) - \int d\mathbf{r}\langle \mathbf{M}_{ef}(\mathbf{r})\rangle^{t}\mathbf{b}'(\mathbf{r};t)),$$

де, зокрема, $\langle n_{\sigma}(\mathbf{r})\rangle^{t}e = \rho_{e\sigma}(\mathbf{r};t)$ — нерівноважне значення густини заряду електронів з відповідним напрямком спінів, $\langle n^{c}_{\bar{\sigma}}(\mathbf{r})\rangle^{t}\mathbf{d}_{ef} = \mathbf{d}_{c}(\mathbf{r};t)$ — нерівноважне значення густини дипольного заряду магнітних комплексів $\langle\beta - \mathrm{CD}\langle \mathrm{FeSO_4}\rangle\rangle$. Розкривши дію операторів $iL(t)$, $(1-P_{rel}(t'))$ на $\varrho_{rel}(t)$, для нерівноважного статистичного оператора отримаємо:

$$\varrho(t) = \varrho_{rel}(t) - \int d\mathbf{r}'\int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}T(t,t') \tag{3.7}$$

$$(\sum_{\sigma} I^{e}_{n\sigma}(\mathbf{r}';t',\tau)\beta(t')\nu_{\sigma}(\mathbf{r}';t') + \sum_{\bar{\sigma}} I^{c}_{n\bar{\sigma}}(\mathbf{r}';t',\tau)\beta(t')\nu^{c}_{\bar{\sigma}}(\mathbf{r}';t')$$

$$+I_{m}(\mathbf{r}';t',\tau)\beta(t')\mathbf{b}(\mathbf{r}';t') + I_{M}(\mathbf{r}';t',\tau)\beta(t')\mathbf{b}'(\mathbf{r}';t'))dt',$$

де $I_{l}(\mathbf{r}';t',\tau) = \int_{0}^{1}\varrho^{\tau}_{rel}(t')I_{l}(\mathbf{r}';t')\varrho^{-\tau}_{rel}(t')d\tau$

$$I^{e}_{n\sigma}(\mathbf{r}';t') = (1-P(t'))iL(t')n_{\sigma}(\mathbf{r}'), I^{c}_{n\bar{\sigma}}(\mathbf{r}';t') = (1-P(t'))iL(t')n^{c}_{\bar{\sigma}}(\mathbf{r}'), \tag{3.8}$$

$$I_{m}(\mathbf{r}';t') = (1-P(t'))iL(t')\mathbf{m}(\mathbf{r}'), I_{M}(\mathbf{r}';t') = (1-P(t'))iL(t')\mathbf{M}_{ef}(\mathbf{r}')$$

- узагальнені потоки з проекційним оператором Морі $P(t')$, що побудований на операторах $A_{l}(\mathbf{r})$: $A_{1}(\mathbf{r}) = n_{\sigma}(\mathbf{r})$, $A_{2}(\mathbf{r}) = n^{c}_{\bar{\sigma}}(\mathbf{r})$, $A_{3}(\mathbf{r}) = \mathbf{m}(\mathbf{r})$, $A_{4}(\mathbf{r}) = \mathbf{M}_{ef}(\mathbf{r})$:

$$P(t)A(\mathbf{r}) = \langle A(\mathbf{r})\rangle^{t}_{rel} + \sum_{l}\int d\mathbf{r}\frac{\delta\langle A(\mathbf{r})\rangle^{t}_{rel}}{\delta\langle A_{l}(\mathbf{r})\rangle^{t}}(\langle A_{l}(\mathbf{r}) - \langle A_{l}(\mathbf{r})\rangle^{t}) \tag{3.9}$$

з властивостями $P(t)P(t') = P(t)$, $P(t)(1-P(t')) = 0$, $P(t)A_{l}(\mathbf{r}) = A_{l}(\mathbf{r})$. Узагальнені потоки описують процеси переносу електронів з врахуванням магнітно-поляризаційних процесів у системі із магнітними комплексами впроваджених у структуру під впливом світла, магнітного поля. Нерівноважний статистичний оператор (3.7) за структурою є функціоналом параметрів скороченого опису середніх значень операторів густин електронів $\langle n_{\sigma}(\mathbf{r})\rangle^{t}$, комплексів $\langle n^{c}_{\bar{\sigma}}(\mathbf{r})\rangle^{t}$ та їх відповідних густин магнітних моментів $\langle \mathbf{m}(\mathbf{r})\rangle^{t}$,$\langle \mathbf{M}_{ef}(\mathbf{r})\rangle^{t}$ та узагальнених потоків $I_{l}(\mathbf{r}';t')$ є основою побудови узагальнених рівнянь переносу для параметрів скороченого опису.

4. Узагальнені рівняння переносу

За допомогою нерівноважного статистичного оператора (3.7) для параметрів скороченого опису можуть бути отримані узагальнені рівняння переносу, які подамо у матричному вигляді:

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle\tilde{A}(\mathbf{r})\rangle^t = \langle\dot{\tilde{A}}(\mathbf{r})\rangle^t_{rel} - \int d\mathbf{r}' \int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}\tilde{W}_{II}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t')\tilde{F}(\mathbf{r}';t')dt', \tag{4.1}$$

де $\tilde{A}(\mathbf{r}) = col(n_\sigma(\mathbf{r}), n^c_{\bar{\sigma}}(\mathbf{r}), \mathbf{m}(\mathbf{r}), \mathbf{M}_{ef}(\mathbf{r}))$ — вектор-стовпець, $\tilde{A}^{(+)}(\mathbf{r}) = n_\sigma(\mathbf{r}), n^c_{\bar{\sigma}}(\mathbf{r}), \mathbf{m}(\mathbf{r}), \mathbf{M}_{ef}(\mathbf{r})$ — вектор-стрічка, $\tilde{F}^{(+)}(\mathbf{r};t) = \beta(t)\nu_\sigma(\mathbf{r};t), \beta(t)\nu^c_{\bar{\sigma}}(\mathbf{r};t), \beta(t)\mathbf{b}(\mathbf{r};t), \beta(t)\mathbf{b}'(\mathbf{r};t)$ - вектор-стрічка, $\dot{\tilde{A}}(\mathbf{r}) = iL\tilde{A}(\mathbf{r})$.

$$\tilde{W}_{II}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t') = Sp\tilde{I}(\mathbf{r};t)T(t,t')\int_0^1 \varrho^{\tau}_{rel}(t')\tilde{I}^{(+)}(\mathbf{r}';t')\varrho^{1-\tau}_{rel}(t')d\tau = \tag{4.2}$$

$$\begin{vmatrix} \tilde{W}_{I_nI_n} & \tilde{W}_{I_nI_m} \\ \tilde{W}_{I_mI_n} & \tilde{W}_{I_mI_m} \end{vmatrix}_{(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t')}$$

— блочна матриця ядер переносу, де $\tilde{I}(\mathbf{r};t) = col(I^e_{n\sigma}(\mathbf{r};t), I^c_{n\bar{\sigma}}(\mathbf{r};t), I_m(\mathbf{r}';t'), I_M(\mathbf{r}';t'))$ — вектор-стовчик і $\tilde{I}^{(+)}(\mathbf{r};t) = I^e_{n\sigma}(\mathbf{r};t), I^c_{n\bar{\sigma}}(\mathbf{r};t), I_m(\mathbf{r}';t'), I_M(\mathbf{r}';t')$ — вектор-стрічка узагальнених потоків. Матриця $\tilde{W}_{I_nI_n}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t')$ є блочною з наступною структурою:

$$\tilde{W}_{I_nI_n}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t') = \begin{vmatrix} \tilde{W}^{ee}_{I_nI_n} & \tilde{W}^{ec}_{I_nI_m} \\ \tilde{W}^{ce}_{I_mI_n} & \tilde{W}^{cc}_{I_mI_m} \end{vmatrix}_{(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t')}, \tag{4.3}$$

де

$$\tilde{W}^{ee}_{I_nI_n}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t') = \begin{vmatrix} W^{ee}_{I_{n\uparrow}I_{n\uparrow}} & W^{ee}_{I_{n\uparrow}I_{n\downarrow}} \\ W^{ee}_{I_{n\downarrow}I_{n\uparrow}} & W^{ee}_{I_{n\downarrow}I_{n\downarrow}} \end{vmatrix}_{(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t')} \tag{4.4}$$

матриця, елементи якої описують часово - просторові кореляції електронних потоків з відповідними напрямками спінів,

$$\tilde{W}^{ec}_{I_nI_n}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t') = \begin{vmatrix} W^{ec}_{I_{n\uparrow}I_{n\uparrow}} & W^{ec}_{I_{n\uparrow}I_{n\downarrow}} \\ W^{ec}_{I_{n\downarrow}I_{n\uparrow}} & W^{ec}_{I_{n\downarrow}I_{n\downarrow}} \end{vmatrix}_{(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t')} \tag{4.5}$$

$$\tilde{W}^{ce}_{I_nI_n}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t') = \begin{vmatrix} W^{ce}_{I_{n\uparrow}I_{n\uparrow}} & W^{ce}_{I_{n\uparrow}I_{n\downarrow}} \\ W^{ce}_{I_{n\downarrow}I_{n\uparrow}} & W^{ce}_{I_{n\downarrow}I_{n\downarrow}} \end{vmatrix}_{(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t')} \tag{4.6}$$

матриці, елементи яких описують часово - просторові кореляції електронних потоків із потоками (дипольними орієнтаціями) комплексів з відповідними напрямками спінів,

$$\tilde{W}^{cc}_{I_nI_n}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t') = \begin{vmatrix} W^{cc}_{I_{n\uparrow}I_{n\uparrow}} & W^{cc}_{I_{n\uparrow}I_{n\downarrow}} \\ W^{cc}_{I_{n\downarrow}I_{n\uparrow}} & W^{cc}_{I_{n\downarrow}I_{n\downarrow}} \end{vmatrix}_{(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t')} \tag{4.7}$$

матриця, елементи якої описують часово - просторові кореляції між потоками (дипольними орієнтаціями) комплексів з відповідними напрямками спінів.

$$\tilde{W}_{I_nI_M}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t') = \begin{vmatrix} W^{e}_{I_{n\uparrow}I_m} & W^{e}_{I_{n\uparrow}I_M} \\ W^{e}_{I_{n\downarrow}I_m} & W^{e}_{I_{n\downarrow}I_M} \\ W^{c}_{I_{n\uparrow}I_m} & W^{c}_{I_{n\uparrow}I_M} \\ W^{c}_{I_{n\downarrow}I_m} & W^{c}_{I_{n\downarrow}I_M} \end{vmatrix}_{(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t')}, \tag{4.8}$$

$$\tilde{W}_{I_MI_n}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t') = \begin{vmatrix} W^{e}_{I_mI_{n\uparrow}} & W^{e}_{I_MI_{n\uparrow}} & W^{c}_{I_mI_{n\uparrow}} & W^{c}_{I_MI_{n\uparrow}} \\ W^{e}_{I_mI_{n\downarrow}} & W^{e}_{I_MI_{n\downarrow}} & W^{c}_{I_mI_{n\downarrow}} & W^{c}_{I_MI_{n\downarrow}} \end{vmatrix}_{(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t')}, \tag{4.9}$$

матриці, елементи (ядра переносу) яких описують часово - просторові кореляції електронних потоків потоків (дипольними орієнтаціями) комплексів з відповідними напрямками спінів із узагальненими магнітними потоками електронів $I_m(\mathbf{r};t)$ та магнітних комплексів $I_m(\mathbf{r};t)$,

$$\tilde{W}_{I_MI_M}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t') = \begin{vmatrix} W_{I_mI_m} & W_{I_mI_M} \\ W_{I_MI_m} & W_{I_MI_M} \end{vmatrix}_{(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t')}, \tag{4.10}$$

матриця, елементи (ядра переносу) якої описують часово-просторові кореляції між узагальненими магнітними потоками електронів $I_m(\mathbf{r};t)$ та узагальненими потоками магнітних комплексів $I_m(\mathbf{r};t)$. У розгорнутому вигляді рівняння переносу мають наступну структуру:

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle n_\sigma(\mathbf{r})\rangle^t = \tag{4.11}$$

$$-\int d\mathbf{r}' \sum_{\sigma'} \int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)} W^{ee}_{I_{n\sigma}I_{n\sigma'}}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t')\beta(t')(\mu_{\sigma'}(\mathbf{r}';t') - e\varphi(\mathbf{r}';t'))dt'$$

$$-\int d\mathbf{r}' \sum_{\bar{\sigma}'} \int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)} W^{ee}_{I_{n\sigma}I_{n\bar{\sigma}'}}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t')\beta(t')(\mu_{\bar{\sigma}'}(\mathbf{r}';t') + \mathbf{d}_{ef}\cdot\mathbf{e}(\mathbf{r}';t'))dt'$$

$$-\int d\mathbf{r}' \sum_{\sigma'} \int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)} W^{ee}_{I_{n\sigma}I_m}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t')\beta(t')\mathbf{b}(\mathbf{r}';t')dt'$$

$$-\int d\mathbf{r}'\sum_{\sigma'}\int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}W^{ee}_{I_{n\sigma}I_M}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t')\beta(t')\mathbf{b}'(\mathbf{r}';t')dt',$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle\mathbf{m}(\mathbf{r})\rangle^t=\langle\dot{\mathbf{m}}(\mathbf{r})\rangle^t \tag{4.12}$$

$$-\int d\mathbf{r}'\sum_{\sigma'}\int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}W^{ee}_{I_mI_{n\sigma'}}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t')\beta(t')(\mu_{\sigma'}(\mathbf{r}';t')-e\varphi(\mathbf{r}';t'))dt'$$

$$-\int d\mathbf{r}'\sum_{\bar\sigma'}\int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}W^{ee}_{I_mI_{n\bar\sigma'}}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t')\beta(t')(\mu_{\bar\sigma'}(\mathbf{r}';t')+\mathbf{d}_{ef}\cdot\mathbf{e}(\mathbf{r}';t'))dt'$$

$$-\int d\mathbf{r}'\sum_{\sigma'}\int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}W^{ee}_{I_mI_m}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t')\beta(t')\mathbf{b}(\mathbf{r}';t')dt'$$

$$-\int d\mathbf{r}'\sum_{\sigma'}\int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}W^{ee}_{I_mI_M}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t')\beta(t')\mathbf{b}'(\mathbf{r}';t')dt',$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle n_{\bar\sigma}(\mathbf{r})\rangle^t= \tag{4.13}$$

$$-\int d\mathbf{r}'\sum_{\sigma'}\int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}W^{ee}_{I_{n\bar\sigma}I_{n\sigma'}}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t')\beta(t')(\mu_{\sigma'}(\mathbf{r}';t')-e\varphi(\mathbf{r}';t'))dt'$$

$$-\int d\mathbf{r}'\sum_{\bar\sigma'}\int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}W^{ee}_{I_{\bar\sigma}I_{n\bar\sigma'}}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t')\beta(t')(\mu_{\bar\sigma'}(\mathbf{r}';t')+\mathbf{d}_{ef}\cdot\mathbf{e}(\mathbf{r}';t'))dt'$$

$$-\int d\mathbf{r}'\sum_{\sigma'}\int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}W^{ee}_{I_{n\bar\sigma}I_m}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t')\beta(t')\mathbf{b}(\mathbf{r}';t')dt'$$

$$-\int d\mathbf{r}'\sum_{\sigma'}\int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}W^{ee}_{I_{n\bar\sigma}I_M}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t')\beta(t')\mathbf{b}'(\mathbf{r}';t')dt',$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle\mathbf{M}_{ef}(\mathbf{r})\rangle^t=\langle\dot{\mathbf{M}}_{ef}(\mathbf{r})\rangle^t \tag{4.14}$$

$$-\int d\mathbf{r}'\sum_{\sigma'}\int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}W^{ee}_{I_MI_{n\sigma'}}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t')\beta(t')(\mu_{\sigma'}(\mathbf{r}';t')-e\varphi(\mathbf{r}';t'))dt'$$

$$-\int d\mathbf{r}'\sum_{\bar\sigma'}\int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}W^{ee}_{I_MI_{n\bar\sigma'}}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t')\beta(t')(\mu_{\bar\sigma'}(\mathbf{r}';t')+\mathbf{d}_{ef}\cdot\mathbf{e}(\mathbf{r}';t'))dt'$$

$$-\int d\mathbf{r}'\sum_{\sigma'}\int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}W^{ee}_{I_MI_m}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t')\beta(t')\mathbf{b}(\mathbf{r}';t')dt'$$

$$-\int d\mathbf{r}'\sum_{\sigma'}\int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}W^{ee}_{I_MI_M}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t')\beta(t')\mathbf{b}'(\mathbf{r}';t')dt',$$

де

$$\dot{\mathbf{m}}(\mathbf{r})=-\frac{\partial}{\partial\mathbf{r}}\mathbf{J}^{(1)}_m(\mathbf{r})--\frac{\partial}{\partial\mathbf{r}}\mathbf{J}^{(2)}_m(\mathbf{r})-R_m(\mathbf{r};t),$$

$$\mathbf{J}^{(1)\alpha}_m(\mathbf{r})=\sum_j\frac{p^\alpha}{m_e}\mathbf{s}_j\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_j),$$

$$\mathbf{J}^{(2)\alpha}_m(\mathbf{r})=\frac{1}{2}\sum_{l\neq j}r^\alpha_{lj}[\mathbf{s}_l\times\mathbf{s}_j]\int_0^1 d\xi\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_j+\xi\mathbf{r}_l),$$

$$R_m(\mathbf{r};t)=-\int d\mathbf{r}[\mathbf{B}(\mathbf{r};t)\times\mathbf{m}(\mathbf{r}')]\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$$

із характерним вкладом спінової компоненти у магнітний потік. Узагальнені рівняння переносу (4.11)–(4.14) описують немарковські процеси струмопроходження у системі з врахуванням магнітних та поляризаційних процесів під впливом зовнішніх та індукованих внутрішніх електромагнітних полів, які відображені у правих частинах даних рівнянь. І очевидно, дані рівняння необхідно доповнити відповідною системою рівнянь Максвелла для електромагнітних полів. Отримані рівняння переносу можуть описувати як сильно, так і слабо нерівноважні процеси відповідно у сильних та слабких (або сталих) електромагнітних полях. У випадку сильно нерівноважних процесах рівняння переносу є незамкнуті і потребують наближених (числових) методів розрахунку. У зв'язку з тим, що у експериментальних дослідженнях використовуються слабкі, або постійні електричні та магнітні поля у наступному розділі розглянемо випадок слабо нерівноважних процесів з врахуванням того, що парамагнітні комплекси у шарах певним чином орієнтуються під дією постійного зовнішнього магнітного поля, створюючи ефективне постійне магнітне поле, що діє на електронну підсистему, впливаючи на процеси струмопроходження. Тобто при такому розгляді впроваджені комплекси знаходяться у рівноважному стані.

5. Слабо нерівноважні процеси струмопроходження

Будемо розглядати слабо нерівноважні процеси в системі, коли значення термодинамічних параметрів та магнітного поля мало відрізняються від їх локально рівноважних значень, тобто флуктуації параметрів $\delta\beta(t) = \beta(t) - \beta$, $\delta\nu_\uparrow(\mathbf{r};t) = \nu_\uparrow(\mathbf{r};t) - \nu_\uparrow(\mathbf{r})$, $\delta\nu_\downarrow(\mathbf{r};t) = \nu_\downarrow(\mathbf{r};t) - \nu_\downarrow(\mathbf{r})$, $\delta\mathbf{b}(\mathbf{r};t) = \mathbf{b}(\mathbf{r};t) - \mathbf{b}(\mathbf{r})$ є малі, де $\nu_\sigma(\mathbf{r}) = \mu_\sigma(\mathbf{r}) - e\varphi(\mathbf{r})$, $\mu_\sigma(\mathbf{r})$, $\varphi(\mathbf{r})$, $\mathbf{b}(\mathbf{r})$ — локально рівноважні значення хімічного потенціалу електронів, електричного потенціалу та внутрішнього магнітного поля. Крім цього, будемо вважати, що температура стала: $\beta(t) = \beta$, тобто $\delta\beta(t) = 0$. У цьому випадку релевантний статистичний оператор у лінійному наближені за даними флуктуаціями буде мати вигляд:

$$\varrho^0_{rel}(t) = (1 - \int d\mathbf{r}\beta\delta\nu_\uparrow(\mathbf{r};t)n_\uparrow(\mathbf{r};\tau) \tag{5.1}$$

$$- \int d\mathbf{r}\beta\delta\nu_\downarrow(\mathbf{r};t)n_\downarrow(\mathbf{r};\tau) - \int d\mathbf{r}\beta\delta\mathbf{b}(\mathbf{r};t)\mathbf{m}(\mathbf{r};\tau))\varrho_0,$$

де $n_\sigma(\mathbf{r};\tau) = \int_0^1 d\tau\varrho_0^\tau n_\sigma(\mathbf{r})\varrho_0^{-\tau}$, $\mathbf{m}(\mathbf{r};\tau) = \int_0^1 d\tau\varrho_0^\tau\mathbf{m}(\mathbf{r})\varrho_0^{-\tau}$,

$$\varrho_0 = e^{-\Phi-\beta(H-\sum_\sigma\int d\mathbf{r}\nu_\sigma(\mathbf{r}))n_\sigma(\mathbf{r})-\int d\mathbf{r}\mathbf{b}(\mathbf{r})\mathbf{m}(\mathbf{r})} \tag{5.2}$$

— великий канонічний розподіл Гіббса, який повністю описує рівноважні термодинамічні та структурні властивості системи. Для подальшого використання $\varrho^0_{rel}(t)$ необхідно визначити флуктуації відповідних термодинамічних параметрів та магнітного поля. Параметр $\delta\nu_\uparrow(\mathbf{r};t)$ будемо визначати із умови самоузгодження:

$$\langle n_\uparrow(\mathbf{r})\rangle^t = \langle n_\uparrow(\mathbf{r})\rangle^t_{rel}, \tag{5.3}$$

тоді із врахуванням (5.1), отримаємо:

$$\langle n_\uparrow(\mathbf{r})\rangle^t = \langle n_\uparrow(\mathbf{r})\rangle_0 \tag{5.4}$$

$$- \int d\mathbf{r}'\Phi_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r},\mathbf{r}')\beta\delta\nu_\uparrow(\mathbf{r}';t) - \int d\mathbf{r}'\Phi_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r},\mathbf{r}')\beta\delta\nu_\downarrow(\mathbf{r}';t)$$

$$- \int d\mathbf{r}'\Phi_{\uparrow m}(\mathbf{r},\mathbf{r}')\beta\delta\mathbf{b}(\mathbf{r}';t),$$

де $\langle(\ldots)\rangle_0 = \mathrm{Sp}\,(\ldots)\varrho_0$ усереднення виконується із рівноважним розподілом ϱ_0,

$$\Phi_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \langle n_\uparrow(\mathbf{r})n_\uparrow(\mathbf{r}';\tau)\rangle_0, \Phi_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \langle n_\uparrow(\mathbf{r})n_\downarrow(\mathbf{r}';\tau)\rangle_0 \tag{5.5}$$

- рівноважні кореляційні функції “густина–густина” типу Гріна-Кубо для електронів із відповідними напрямками спінів,

$$\Phi_{\uparrow m}(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \langle n_\uparrow(\mathbf{r})\mathbf{m}(\mathbf{r}';\tau)\rangle_0 \tag{5.6}$$

— рівноважна кореляційна функція типу Гріна–Кубо, що описує магнітострикційні властивості. Фур’є-образи кореляційних функцій (5.5) у просторі хвильових векторів є рівноважними структурними факторами електронів, які можуть бути виміряні в експериментах із розсіювання нейтронів. Із (5.4) знайдемо параметр $\delta\nu_\uparrow(\mathbf{r};t)$. Для цього означимо функцію $\Phi^{-1}_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r},\mathbf{r}')$, обернену до $\Phi_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r},\mathbf{r}')$ за інтегральним співвідношенням:

$$\int d\mathbf{r}\Phi^{-1}_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r}'',\mathbf{r})\Phi_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r}''-\mathbf{r}'). \tag{5.7}$$

Далі домножимо рівняння (5.4) на $\Phi^{-1}_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r},\mathbf{r}')$ та проінтегруємо за $\int d\mathbf{r}$, після нескладних перетворень для параметра $\delta\nu_\uparrow(\mathbf{r};t)$ отримаємо наступний вираз:

$$\beta\delta\nu_\uparrow(\mathbf{r};t) = -\int d\mathbf{r}'\Phi^{-1}_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r},\mathbf{r}')\langle\delta n_\uparrow(\mathbf{r}')\rangle^t \tag{5.8}$$

$$- \int d\mathbf{r}'\int d\mathbf{r}''\Phi^{-1}_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r},\mathbf{r}'')\Phi_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r}'',\mathbf{r}')\beta\delta\nu_\downarrow(\mathbf{r}';t)$$

$$- \int d\mathbf{r}'\int d\mathbf{r}''\Phi^{-1}_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r},\mathbf{r}'')\Phi_{\uparrow m}(\mathbf{r}'',\mathbf{r}')\beta\delta\mathbf{b}(\mathbf{r}';t),$$

де $\delta n_\uparrow(\mathbf{r}') = n_\uparrow(\mathbf{r}') - \langle n_\uparrow(\mathbf{r}')\rangle_0$ — флуктуації оператора мікроскопічної густини електронів із напрямком спінів $\uparrow$ відносно рівноважного значення розподілу густини. Тепер, підставивши (5.8) у (5.1) для $\varrho^0_{rel}(t)$ отримаємо:

$$\varrho^0_{rel}(t) = (1 + \int d\mathbf{r}\int d\mathbf{r}'\langle\delta n_\uparrow(\mathbf{r}')\rangle^t\Phi^{-1}_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r}',\mathbf{r})n_\uparrow(\mathbf{r};\tau) \tag{5.9}$$

$$- \int d\mathbf{r}\beta\delta\nu_\downarrow(\mathbf{r};t)\bar{n}_\downarrow(\mathbf{r};\tau) - \int d\mathbf{r}\beta\delta\mathbf{b}(\mathbf{r};t)\mathbf{m}'(\mathbf{r};\tau))\varrho_0,$$

де

$$\bar{n}_\downarrow(\mathbf{r}) = n_\downarrow(\mathbf{r}) - \int d\mathbf{r}'\int d\mathbf{r}''\Phi_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{r},\mathbf{r}'')\Phi^{-1}_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r}'',\mathbf{r}')n_\uparrow(\mathbf{r}') = (1-P_{n\uparrow})n_\downarrow(\mathbf{r}), \tag{5.10}$$

$$\mathbf{m}'(\mathbf{r}) = \mathbf{m}(\mathbf{r}) - \int d\mathbf{r}'\int d\mathbf{r}''\Phi_{m\uparrow}(\mathbf{r},\mathbf{r}'')\Phi^{-1}_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r}'',\mathbf{r}')n_\uparrow(\mathbf{r}') = (1-P_{n\uparrow})\mathbf{m}(\mathbf{r}) \tag{5.11}$$

— нові оператори густини електронів із напрямком спінів $\downarrow$ та магнітного моменту, відпроектованих на простір операторів густини електронів із напрямком спінів $\uparrow$. $P_{n\uparrow}$ — проекційний оператор типу Морі, який має наступну структуру:

$$P_{n\uparrow}A = \int d\mathbf{r}' \int d\mathbf{r}'' \langle A n_\uparrow(\mathbf{r}'')\rangle_0 \Phi^{-1}_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r}'',\mathbf{r}') n_\uparrow(\mathbf{r}'). \tag{5.12}$$

Важливо зазначити, що оператори $\bar{n}_\downarrow(\mathbf{r})$, $\mathbf{m}'(\mathbf{r})$ є ортогональні до $n_\uparrow(\mathbf{r}')$ у розумінні середніх значень:

$$\langle \bar{n}_\downarrow(\mathbf{r}) n_\uparrow(\mathbf{r}'')\rangle_0 = \langle \mathbf{m}'(\mathbf{r}) n_\uparrow(\mathbf{r}'')\rangle_0 = 0. \tag{5.13}$$

Тепер, визначивши подібним способом параметри $\delta\nu_\downarrow(\mathbf{r};t)$, $\delta\mathbf{b}(\mathbf{r};t)$ із відповідних умов самоузгоджень:

$$\langle \bar{n}_\downarrow(\mathbf{r})\rangle^t = \langle \bar{n}_\downarrow(\mathbf{r})\rangle^t_{rel}, \langle \mathbf{m}'(\mathbf{r})\rangle^t = \langle \mathbf{m}'(\mathbf{r})\rangle^t_{rel}, \tag{5.14}$$

для $\varrho^0_{rel}(t)$ отримаємо наступний вираз:

$$\varrho^0_{rel}(t) = \Bigg(1 + \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \langle \delta n_\uparrow(\mathbf{r}')\rangle^t \Phi^{-1}_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r}',\mathbf{r}) n_\uparrow(\mathbf{r};\tau) \tag{5.15}$$
$$+ \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \langle \delta \bar{n}_\uparrow(\mathbf{r}')\rangle^t \bar{\Phi}^{-1}_{\downarrow\downarrow}(\mathbf{r}',\mathbf{r}) \bar{n}_\downarrow(\mathbf{r};\tau)$$
$$+ \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \langle \delta \bar{\mathbf{m}}(\mathbf{r}')\rangle^t \Phi^{-1}_{\bar{m}\bar{m}}(\mathbf{r}',\mathbf{r}) \bar{\mathbf{m}}(\mathbf{r};\tau)\Bigg)\varrho_0,$$

де $\delta\bar{n}_\uparrow(\mathbf{r}') = \bar{n}_\uparrow(\mathbf{r}') - \langle \bar{n}_\uparrow(\mathbf{r}')\rangle_0$, $\bar{\Phi}^{-1}_{\downarrow\downarrow}(\mathbf{r}',\mathbf{r})$, $\Phi^{-1}_{\bar{m}\bar{m}}(\mathbf{r}',\mathbf{r})$ — функції обернені до рівноважних кореляційних функцій, відповідно

$$\bar{\Phi}_{\downarrow\downarrow}(\mathbf{r}',\mathbf{r}) = \langle \bar{n}_\downarrow(\mathbf{r}') \bar{n}_\downarrow(\mathbf{r};\tau)\rangle_0, \Phi^{-1}_{\bar{m}\bar{m}}(\mathbf{r}',\mathbf{r}) = \langle \bar{\mathbf{m}}(\mathbf{r}') \bar{\mathbf{m}}(\mathbf{r};\tau)\rangle_0 \tag{5.16}$$

за інтегральними співвідношеннями:

$$\int d\mathbf{r} \bar{\Phi}^{-1}_{\downarrow\downarrow}(\mathbf{r}'',\mathbf{r}) \bar{\Phi}_{\downarrow\downarrow}(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r}''-\mathbf{r}'), \tag{5.17}$$

$$\int d\mathbf{r} \Phi^{-1}_{\bar{m}\bar{m}}(\mathbf{r}'',\mathbf{r}) \Phi_{\bar{m}\bar{m}}(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r}''-\mathbf{r}'), \tag{5.18}$$

у яких $\bar{\mathbf{m}}(\mathbf{r})$ — новий оператор наступної структури:

$$\bar{\mathbf{m}}(\mathbf{r}) = \mathbf{m}'(\mathbf{r}) - \int d\mathbf{r}' \int d\mathbf{r}'' \Phi_{m'\downarrow}(\mathbf{r},\mathbf{r}'') \bar{\Phi}^{-1}_{\downarrow\downarrow}(\mathbf{r}'',\mathbf{r}') \bar{n}_\downarrow(\mathbf{r}') \tag{5.19}$$
$$= (1-P_{\bar{n}\downarrow})(1-P_{n\uparrow})\mathbf{m}(\mathbf{r}),$$

де $P_{\bar{n}\downarrow}$ — проекційний оператор побудований на операторах $\bar{n}_\downarrow(\mathbf{r})$

$$P_{\bar{n}\downarrow}A = \int d\mathbf{r}' \int d\mathbf{r}'' \langle A \bar{n}_\downarrow(\mathbf{r}'';\tau)\rangle_0 \bar{\Phi}^{-1}_{\downarrow\downarrow}(\mathbf{r}'',\mathbf{r}') \bar{n}_\downarrow(\mathbf{r}'), \tag{5.20}$$

при цьому $\bar{\mathbf{m}}(\mathbf{r})$ та $\bar{n}_\downarrow(\mathbf{r}')$ є ортогональні у розумінні середніх значень:

$$\langle \bar{\mathbf{m}}(\mathbf{r}) \bar{n}_\downarrow(\mathbf{r}';\tau)\rangle_0 = 0. \tag{5.21}$$

Кореляційна функція $\bar{\Phi}_{\downarrow\downarrow}(\mathbf{r}',\mathbf{r})$ має наступний вигляд:

$$\bar{\Phi}_{\downarrow\downarrow}(\mathbf{r}',\mathbf{r}) = \Phi_{\downarrow\downarrow}(\mathbf{r}',\mathbf{r}) - \langle P_{n\uparrow} n_\downarrow(\mathbf{r}')\rangle_0 - \langle P_{n\uparrow} n_\downarrow(\mathbf{r})\rangle_0 \tag{5.22}$$
$$+\langle P_{n\uparrow} n_\downarrow(\mathbf{r}') P_{n\uparrow} n_\downarrow(\mathbf{r})\rangle_0 =$$
$$\Phi_{\downarrow\downarrow}(\mathbf{r}',\mathbf{r}) - \int d\mathbf{r}'' \int d\mathbf{r}''' \Phi_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{r},\mathbf{r}'') \Phi^{-1}_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r}'',\mathbf{r}''') \Phi_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r}''',\mathbf{r}').$$

Інша кореляційна функція $\Phi_{\bar{m}\bar{m}}(\mathbf{r},\mathbf{r}')$, що описує магнітні властивості має наступну структуру:

$$\Phi_{\bar{m}\bar{m}}(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \Phi_{mm}(\mathbf{r},\mathbf{r}') - \langle \mathbf{m}(\mathbf{r})(P_{\bar{n}\downarrow} + P_{n\uparrow} - P_{\bar{n}\downarrow}P_{n\uparrow})\mathbf{m}(\mathbf{r}')\rangle_0 \tag{5.23}$$
$$-\langle \mathbf{m}(\mathbf{r}')(P_{\bar{n}\downarrow} + P_{n\uparrow} - P_{\bar{n}\downarrow}P_{n\uparrow})\mathbf{m}(\mathbf{r})\rangle_0$$
$$+\langle (P_{\bar{n}\downarrow} + P_{n\uparrow} - P_{\bar{n}\downarrow}P_{n\uparrow})\mathbf{m}(\mathbf{r})(P_{\bar{n}\downarrow} + P_{n\uparrow} - P_{\bar{n}\downarrow}P_{n\uparrow})\mathbf{m}(\mathbf{r}')\rangle_0,$$

де $\Phi_{mm}(\mathbf{r},\mathbf{r}')$ — просторово неоднорідна магнітна сприйнятливість системи, наступні доданки у (5.23) описують складні магнітострикційні кореляції.

У знайденому лінійному наближенні за флуктуаціями нерівноважних термодинамічних параметрів та магнітного поля для $\varrho^0_{rel}(t)$ (5.15) нерівноважний статистичний оператор системи буде мати вигляд:

$$\varrho(t) = \varrho^0_{rel}(t) - \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)} T_0(t,t') \times \tag{5.24}$$
$$(I_{n\uparrow}(\mathbf{r}';\tau)\Phi^{-1}_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r}',\mathbf{r})\langle \delta n_\uparrow(\mathbf{r})\rangle^{t'} + I_{\bar{n}\downarrow}(\mathbf{r}';\tau)\bar{\Phi}^{-1}_{\downarrow\downarrow}(\mathbf{r}',\mathbf{r})\langle \delta\bar{n}_\downarrow(\mathbf{r})\rangle^{t'}$$
$$+I_{\bar{m}}(\mathbf{r}';\tau)\Phi^{-1}_{\bar{m}\bar{m}}(\mathbf{r}',\mathbf{r})\langle \delta\bar{\mathbf{m}}(\mathbf{r})\rangle^{t'})\varrho_0 dt',$$

де

$$I_{n\uparrow}(\mathbf{r}) = (1-P)iLn_\uparrow(\mathbf{r}), I_{\bar{n}\downarrow}(\mathbf{r}) = (1-P)iL\bar{n}_\downarrow(\mathbf{r}), \tag{5.25}$$
$$I_{\bar{m}}(\mathbf{r}) = (1-P)iL\bar{\mathbf{m}}(\mathbf{r})$$

— узагальнені потоки електронів із відповідними напрямками спінів та магнітного потоку спінів у лінійному наближенні, у яких P — проекційний оператор Морі, що має таку структуру:

$$P = P_{n\uparrow} + P_{\bar{n}\downarrow} + P_{\bar{m}}, \tag{5.26}$$

де

$$P_{\bar{m}}(\ldots) = \int d\mathbf{r}' \int d\mathbf{r}'' \langle(\ldots)\bar{\mathbf{m}}(\mathbf{r}'')\rangle_0 \Phi^{-1}_{\bar{m}\bar{m}}(\mathbf{r}'',\mathbf{r}')\bar{\mathbf{m}}(\mathbf{r}') \tag{5.27}$$

і має наступні властивості $P^2 = P$, $(1-P)P = 0$. $T_0(t,t') = e^{-(1-P)iL(t'-t)}$ — оператор еволюції (лінійне наближення) у часі для системи, що відповідає відомій теорії Морі.

6. Магніто-дифузійні рівняння переносу для електронів у шаруватих наноструктурах

За допомогою нерівноважного статистичного оператора (5.24) можна побудувати систему рівнянь переносу для опису процесів електронного переносу в системі з врахуванням магнітних процесів. Дана система має вигляд:

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle\delta n_\uparrow(\mathbf{r})\rangle^t = \tag{6.1}$$

$$-\int d\mathbf{r}' \int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)} W_{I\uparrow I\uparrow}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t')\langle\delta n_\uparrow(\mathbf{r}')\rangle^{t'} dt'$$

$$-\int d\mathbf{r}' \int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)} W_{I\uparrow I\downarrow}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t')\langle\delta \bar{n}_\downarrow(\mathbf{r}')\rangle^{t'} dt'$$

$$-\int d\mathbf{r}' \int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)} W_{I\uparrow I_{\bar{m}}}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t')\langle\delta \bar{\mathbf{m}}(\mathbf{r}')\rangle^{t'} dt',$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle\bar{n}_\downarrow(\mathbf{r})\rangle^t = \tag{6.2}$$

$$-\int d\mathbf{r}' \int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)} W_{I\downarrow I\uparrow}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t')\langle\delta n_\uparrow(\mathbf{r}')\rangle^{t'} dt'$$

$$-\int d\mathbf{r}' \int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)} W_{I\downarrow I\downarrow}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t')\langle\delta \bar{n}_\downarrow(\mathbf{r}')\rangle^{t'} dt'$$

$$-\int d\mathbf{r}' \int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)} W_{I\downarrow I_{\bar{m}}}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t')\langle\delta \bar{\mathbf{m}}(\mathbf{r}')\rangle^{t'} dt',$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle\bar{\mathbf{m}}(\mathbf{r})\rangle^t = -\int d\mathbf{r}' i\Omega_{\bar{m}\bar{m}}(\mathbf{r},\mathbf{r}')\langle\bar{\mathbf{m}}(\mathbf{r}')\rangle^t \tag{6.3}$$

$$-\int d\mathbf{r}' \int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)} W_{I_{\bar{m}} I\uparrow}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t')\langle\delta n_\uparrow(\mathbf{r}')\rangle^{t'} dt'$$

$$-\int d\mathbf{r}' \int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)} W_{I_{\bar{m}} I\downarrow}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t')\langle\delta \bar{n}_\downarrow(\mathbf{r}')\rangle^{t'} dt'$$

$$-\int d\mathbf{r}' \int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)} W_{I_{\bar{m}} I_{\bar{m}}}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t')\langle\delta \bar{\mathbf{m}}(\mathbf{r}')\rangle^{t'} dt',$$

де

$$i\Omega_{\bar{m}\bar{m}}(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \int d\mathbf{r}'' \langle iL\bar{\mathbf{m}}(\mathbf{r})\cdot\bar{\mathbf{m}}(\mathbf{r}'')\rangle_0 \Phi^{-1}_{\bar{m}\bar{m}}(\mathbf{r}'',\mathbf{r}') \tag{6.4}$$

— нормована кореляційна функція, що описує недисипативні магнітні властивості,

$$W_{I\uparrow I\uparrow}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t') = \int d\mathbf{r}'' \langle I_{n\uparrow}(\mathbf{r}) T_0(t,t') I_{n\uparrow}(\mathbf{r}'')\rangle_0 \Phi^{-1}_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r}'',\mathbf{r}') \tag{6.5}$$

$$W_{I\uparrow I\downarrow}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t') = \int d\mathbf{r}'' \langle I_{n\uparrow}(\mathbf{r}) T_0(t,t') I_{\bar{n}\downarrow}(\mathbf{r}'')\rangle_0 \bar{\Phi}^{-1}_{\downarrow\downarrow}(\mathbf{r}'',\mathbf{r}'), \tag{6.6}$$

$$W_{I\downarrow I\downarrow}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t') = \int d\mathbf{r}'' \langle I_{\bar{n}\downarrow}(\mathbf{r}) T_0(t,t') I_{\bar{n}\downarrow}(\mathbf{r}'')\rangle_0 \bar{\Phi}^{-1}_{\downarrow\downarrow}(\mathbf{r}'',\mathbf{r}'), \tag{6.7}$$

$$W_{I\uparrow I_{\bar{m}}}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t') = \int d\mathbf{r}'' \langle I_{n\uparrow}(\mathbf{r}) T_0(t,t') I_{\bar{m}}(\mathbf{r}'')\rangle_0 \Phi^{-1}_{\bar{m}\bar{m}}(\mathbf{r}'',\mathbf{r}'), \tag{6.8}$$

$$W_{I\downarrow I_{\bar{m}}}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t') = \int d\mathbf{r}'' \langle I_{\bar{n}\downarrow}(\mathbf{r}) T_0(t,t') I_{\bar{m}}(\mathbf{r}'')\rangle_0 \Phi^{-1}_{\bar{m}\bar{m}}(\mathbf{r}'',\mathbf{r}') \tag{6.9}$$

$$W_{I_{\bar{m}} I_{\bar{m}}}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t') = \int d\mathbf{r}'' \langle I_{\bar{m}}(\mathbf{r}) T_0(t,t') I_{\bar{m}}(\mathbf{r}'')\rangle_0 \Phi^{-1}_{\bar{m}\bar{m}}(\mathbf{r}'',\mathbf{r}') \tag{6.10}$$

— узагальнені ядра переносу (функції пам'яті), що описують електронні дифузійні процеси з врахуванням напрямків спінів за і проти напрямку ефективного магнітного поля, та магніто дифузійні процеси в системі. Зокрема, ядро $W_{I\uparrow I\uparrow}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t')$ описує дисипативні часові та просторові кореляції між потоками електронів із напрямком спінів за полем, $W_{I\downarrow I\downarrow}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t')$ описує дисипативні часові та просторові кореляції між потоками електронів із напрямком спінів проти поля, а $W_{I\uparrow I\downarrow}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t')$ описує дисипативні часові та просторові кореляції між потоками електронів із напрямками спінів за і проти напрямку магнітного поля. Ядро переносу $W_{I_{\bar m}I_{\bar m}}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t')$ описує магнітну дифузію в системі, а $W_{I\downarrow I_\sigma}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t')$ — взаємні просторово-часові кореляції потоків електронів із відповідним напрямком спінів і магнітним потоком. Як бачимо, за структурою система рівнянь (6.1)–(6.3) є замкнута. Використавши фур'є-перетворення за часом до даних рівнянь, можемо шляхом розв'язків відповідних інтегральних рівнянь знайти точні рівняння для відповідних фур'є-образів відповідних нерівноважних значень операторів густин електронів з виділеним напрямком спінів та оператора магнітного моменту. Зокрема, для флуктуацій нерівноважного середнього значення оператора густини електронів із напрямком спінів за магнітним полем $\langle\delta n_\uparrow(\mathbf{r})\rangle^\omega$, отримуємо відповідне інтегральне рівняння:

$$i\omega\langle\delta n_\uparrow(\mathbf{r})\rangle^\omega=-\int d\mathbf{r}'D_{I\uparrow I\uparrow}(\mathbf{r},\mathbf{r}';\omega+i\varepsilon)\langle\delta n_\uparrow(\mathbf{r}')\rangle^\omega, \tag{6.11}$$

де ω — частота,

$$D_{I\uparrow I\uparrow}(\mathbf{r},\mathbf{r}';\omega)=\bar W_{I\uparrow I\uparrow}(\mathbf{r},\mathbf{r}';\omega) \tag{6.12}$$
$$-\int d\mathbf{r}''\int d\mathbf{r}'''\bar W_{I\uparrow I\downarrow}(\mathbf{r},\mathbf{r}'';\omega)\Sigma^{-1}_{I\downarrow I\downarrow}(\mathbf{r}'',\mathbf{r}''';\omega)\bar W_{I\downarrow I\uparrow}(\mathbf{r}''',\mathbf{r}';\omega)$$

— узагальнене ядро переносу, що враховує складні дисипативні кореляції через ядра переносу (6.5)–(6.10) та складні перенормовки через магнітні дисипативні процеси, що виражаються через відповідні ядра переносу:

$$\bar W_{I\uparrow I\uparrow}(\mathbf{r},\mathbf{r}';\omega)=W_{I\uparrow I\uparrow}(\mathbf{r},\mathbf{r}';\omega) \tag{6.13}$$
$$-\int d\mathbf{r}''\int d\mathbf{r}'''W_{I\uparrow I_{\bar m}}(\mathbf{r},\mathbf{r}'';\omega)\Sigma^{-1}_{I_{\bar m}I_{\bar m}}(\mathbf{r}'',\mathbf{r}''';\omega)W_{I_{\bar m}I\uparrow}(\mathbf{r}''',\mathbf{r}';\omega),$$

$$\bar W_{I\uparrow I\downarrow}(\mathbf{r},\mathbf{r}';\omega)=W_{I\uparrow I\downarrow}(\mathbf{r},\mathbf{r}';\omega) \tag{6.14}$$
$$-\int d\mathbf{r}''\int d\mathbf{r}'''W_{I\uparrow I_{\bar m}}(\mathbf{r},\mathbf{r}'';\omega)\Sigma^{-1}_{I_{\bar m}I_{\bar m}}(\mathbf{r}'',\mathbf{r}''';\omega)W_{I_{\bar m}I\downarrow}(\mathbf{r}''',\mathbf{r}';\omega),$$

$$\bar W_{I\downarrow I\uparrow}(\mathbf{r},\mathbf{r}';\omega)=W_{I\downarrow I\uparrow}(\mathbf{r},\mathbf{r}';\omega) \tag{6.15}$$
$$-\int d\mathbf{r}''\int d\mathbf{r}'''W_{I\downarrow I_{\bar m}}(\mathbf{r},\mathbf{r}'';\omega)\Sigma^{-1}_{I_{\bar m}I_{\bar m}}(\mathbf{r}'',\mathbf{r}''';\omega)W_{I_{\bar m}I\uparrow}(\mathbf{r}''',\mathbf{r}';\omega),$$

$$\bar W_{I\downarrow I\downarrow}(\mathbf{r},\mathbf{r}';\omega)=W_{I\downarrow I\downarrow}(\mathbf{r},\mathbf{r}';\omega) \tag{6.16}$$

$$-\int d\mathbf{r}''\int d\mathbf{r}'''W_{I\downarrow I_{\bar m}}(\mathbf{r},\mathbf{r}'';\omega)\Sigma^{-1}_{I_{\bar m}I_{\bar m}}(\mathbf{r}'',\mathbf{r}''';\omega)W_{I_{\bar m}I\downarrow}(\mathbf{r}''',\mathbf{r}';\omega),$$

у яких функція $\Sigma^{-1}_{I_{\bar m}I_{\bar m}}(\mathbf{r}'',\mathbf{r}''';\omega)$ знаходиться із інтегрального рівняння

$$\int d\mathbf{r}''\Sigma^{-1}_{I_{\bar m}I_{\bar m}}(\mathbf{r},\mathbf{r}'';\omega)\Sigma_{I_{\bar m}I_{\bar m}}(\mathbf{r}'',\mathbf{r}';\omega)=\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \tag{6.17}$$

і обернена до функції, яка вже враховує перенормовку через магнітну підсистему

$$\Sigma_{I_{\bar m}I_{\bar m}}(\mathbf{r},\mathbf{r}';\omega)=i\omega\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')-\Omega_{\bar m\bar m}(\mathbf{r},\mathbf{r}')+W_{I_{\bar m}I_{\bar m}}(\mathbf{r},\mathbf{r}';\omega). \tag{6.18}$$

Відповідно функція $\Sigma^{-1}_{I\downarrow I\downarrow}(\mathbf{r}'',\mathbf{r}''';\omega)$ визначається із інтегрального співвідношення

$$\int d\mathbf{r}''\Sigma^{-1}_{I\downarrow I\downarrow}(\mathbf{r},\mathbf{r}'';\omega)\Sigma_{I\downarrow I\downarrow}(\mathbf{r}'',\mathbf{r}';\omega)=\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \tag{6.19}$$

і обернена до функції, яка вже враховує перенормовку через магнітну підсистему

$$\Sigma_{I\downarrow I\downarrow}(\mathbf{r},\mathbf{r}';\omega)=i\omega\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')+\bar W_{I\downarrow I\downarrow}(\mathbf{r},\mathbf{r}';\omega)= \tag{6.20}$$
$$i\omega\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')+W_{I\downarrow I\downarrow}(\mathbf{r},\mathbf{r}';\omega)$$
$$-\int d\mathbf{r}''\int d\mathbf{r}'''W_{I\downarrow I_{\bar m}}(\mathbf{r},\mathbf{r}'';\omega)\Sigma^{-1}_{I_{\bar m}I_{\bar m}}(\mathbf{r}'',\mathbf{r}''';\omega)W_{I_{\bar m}I\downarrow}(\mathbf{r}''',\mathbf{r}';\omega).$$

Виконавши у (6.11) зворотне фур'є-перетворення, отримаємо узагальнене рівняння дифузії для флуктуацій середніх нерівноважних значень:

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle\delta n_\uparrow(\mathbf{r})\rangle^t=\int d\mathbf{r}'\int_{-\infty}^t e^{\varepsilon(t'-t)}D_{I\uparrow I\uparrow}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t')\langle\delta n_\uparrow(\mathbf{r}')\rangle^{t'}dt'= \tag{6.21}$$
$$\int d\mathbf{r}'\int_{-\infty}^t e^{\varepsilon(t'-t)}\frac{\partial}{\partial\mathbf{r}}\cdot\bar D_{I\uparrow I\uparrow}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t')\cdot\frac{\partial}{\partial\mathbf{r}'}\langle\delta n_\uparrow(\mathbf{r}')\rangle^{t'}dt',$$

де $\bar D_{I\uparrow I\uparrow}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t')$ — узагальнений коефіцієнт дифузії для електронів із напрямком спінів за напрямком магнітного поля і, який визначається через ядро (6.12), відповідно. Треба зазначити, що структура функцій (6.12)–(6.20) важлива з точки зору розуміння, а також моделювання механізмів відповідних процесів струмопроходження у системах.

7. Рівняння дифузії типу Каттано у часових дробових похідних для електронів

Узагальнене рівняння дифузії (6.21) для електронів описує немарковські просторово неоднорідні процеси, тобто ефекти пам'яті, які пов'язані із характерними часами релаксації електронних (включаючи тунелювання), магнітних процесів відповідно до поведінки ядер переносу (6.12)–(6.20). На даний час точний розрахунок ядер переносу неможливо провести. Тому проводять наближений розрахунок, виходячи із певних припущень про основні можливі механізми струмопроходження в системі. Для подальшого дослідження особливостей імпедансної поведінки, пов'язаної із ефектами затримки, індуктивності, ефекти пам'яті будемо описувати на основі припущень, які приводять до дробової динаміки [6, 15]. Для $\bar{D}_{I\uparrow I\uparrow}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t')$ застосуємо наступне наближення:

$$\bar{D}_{I\uparrow I\uparrow}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t') \approx R_{I\uparrow I\uparrow}(t,t')\bar{D}_{I\uparrow I\uparrow}(\mathbf{r},\mathbf{r}'), \tag{7.1}$$

де $R_{I\uparrow I\uparrow}(t,t')$ можна означити як функцію пам'яті у часі. З врахуванням цього наближення рівняння (6.21), можна подати у вигляді:

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle\delta n_\uparrow(\mathbf{r})\rangle^t = \int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)} R_{I\uparrow I\uparrow}(t,t')\Psi_{I\uparrow I\uparrow}(\mathbf{r};t')dt', \tag{7.2}$$

де

$$\Psi_{I\uparrow I\uparrow}(\mathbf{r};t') = \int d\mathbf{r}'\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}\cdot\bar{D}_{I\uparrow I\uparrow}(\mathbf{r},\mathbf{r}')\cdot\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}'}\langle\delta n_\uparrow(\mathbf{r}')\rangle^{t'}. \tag{7.3}$$

Застосувавши перетворення Фур'є до рівняння (7.2), отримаємо:

$$i\omega\langle\delta n_\uparrow(\mathbf{r})\rangle^\omega = R_{I\uparrow I\uparrow}(\omega)\Psi_{I\uparrow I\uparrow}(\mathbf{r};\omega). \tag{7.4}$$

Увівши час релаксації $\tau_\uparrow$ (який характеризує процеси переносу електронів із напрямком спінів $\uparrow$ у системі), частотну залежність функції пам'яті подамо у вигляді:

$$R_{I\uparrow I\uparrow}(\omega) = \frac{(i\omega)^{1-\xi}}{1+i\omega\tau_\uparrow}, 0<\xi\leq 1. \tag{7.5}$$

Тоді рівняння (7.4) можна записати так:

$$(1+i\omega\tau_\uparrow)i\omega\langle\delta n_\uparrow(\mathbf{r})\rangle^\omega = (i\omega)^{1-\xi}\Psi_{I\uparrow I\uparrow}(\mathbf{r};\omega). \tag{7.6}$$

Далі використаємо перетворення Фур'є до дробових похідних від функцій: $L({}_0D_t^{1-\xi}f(t):i\omega) = (i\omega)^{1-\xi}L(f(t):i\omega)$,

$${}_0D_t^{1-\xi}f(t) = \frac{1}{\Gamma(\xi)}\frac{d}{dt}\int_0^t\frac{f(\tau)}{(t-\tau)^{1-\xi}}d\tau \tag{7.7}$$

— дробова похідна Рімана–Ліувілля. З його використанням, зворотній перехід у рівнянні (7.6) до часової залежності дає узагальнене рівняння дифузії типу Каттано з врахуванням часової фрактальності:

$$\tau_\uparrow\frac{\partial^2}{\partial t^2}\langle\delta n_\uparrow(\mathbf{r})\rangle^t + \frac{\partial}{\partial t}\langle\delta n_\uparrow(\mathbf{r})\rangle^t = \tag{7.8}$$

$${}_0D_t^{1-\xi}\int d\mathbf{r}'\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}\cdot\bar{D}_{I\uparrow I\uparrow}(\mathbf{r},\mathbf{r}')\cdot\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}'}\langle\delta n_\uparrow(\mathbf{r}')\rangle^t.$$

Рівняння (7.9) містять суттєву просторову неоднорідність у $\bar{D}_{I\uparrow I\uparrow}(\mathbf{r},\mathbf{r}')$. Якщо знехтувати просторовою неоднорідністю: $\bar{D}_{I\uparrow I\uparrow}(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \bar{D}_{I\uparrow I\uparrow}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$, то отримаємо:

$$\tau_\uparrow\frac{\partial^2}{\partial t^2}\langle\delta n_\uparrow(\mathbf{r})\rangle^t + \frac{\partial}{\partial t}\langle\delta n_\uparrow(\mathbf{r})\rangle^t = {}_0D_t^{1-\xi}\bar{D}_{I\uparrow I\uparrow}\frac{\partial^2}{\partial r^2}\langle\delta n_\uparrow(\mathbf{r})\rangle^t \tag{7.9}$$

— рівняння дифузії типу Каттано із часовою фрактальністю із сталим коефіцієнтом дифузії електронів із напрямком спінів за магнітним полем.

8. Електро-магніто дифузійні релаксаційні процеси

Моделювання субдифузійних процесів на основі рівнянь дифузії типу Каттано у дробових похідних для носіїв заряду характеризувалось відповідним часом релаксації та коефіцієнтом дифузії. Однак, така модель очевидно не враховує складність релаксаційних електромагніто дифузійних процесів, які в цілому описуються системою рівнянь (6.1)–(6.3). Ми розглянемо модель з врахуванням ряду релаксаційних процесів шляхом моделювання функцій пам'яті (6.5)–(6.10), для яких маємо зв'язок з узагальненими коефіцієнтами:

$$W_{I_jI_l}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t') = \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}\cdot D_{I_jI_l}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t')\cdot\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}'} \tag{8.1}$$

для електронів з відповідним напрямком спінів, магнітної дифузії та коефіцієнтів дифузії, що описують перехресні процеси. Далі приймемо для узагальнених коефіцієнтів переносу наступні наближення:

$$D_{I_jI_l}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t') \approx W_{I_jI_l}(t,t')\bar{D}_{I_jI_l}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}), \tag{8.2}$$

де $W_{I_jI_l}(t,t')$ — функції пам'яті у часі, $\bar{D}_{I_jI_l}$ — відповідні сталі коефіцієнти дифузії відповідно для електронів, магнітної дифузії, які в принципі можуть бути оцінені із експериментальних досліджень. Використавши наближення (8.2), систему рівнянь (6.1)–(6.3) у частотно-хвильовому зображені Фур'є подамо у вигляді:

$$i\omega\langle\delta n_\uparrow(\mathbf{k})\rangle_\omega = -k^2 W_{I_\uparrow I_\uparrow}(\omega)\bar{D}_{I_\uparrow I_\uparrow}\langle\delta n_\uparrow(\mathbf{k})\rangle_\omega \tag{8.3}$$
$$-k^2 W_{I_\uparrow I_\downarrow}(\omega)\bar{D}_{I_\uparrow I_\downarrow}\langle\delta n_\downarrow(\mathbf{k})\rangle_\omega - k^2 W_{I_\uparrow I_{\bar{m}}}(\omega)\bar{D}_{I_\uparrow I_{\bar{m}}}\langle\delta\bar{\mathbf{m}}(\mathbf{k})\rangle_\omega,$$

$$i\omega\langle\delta n_\downarrow(\mathbf{k})\rangle_\omega = -k^2 W_{I_\downarrow I_\uparrow}(\omega)\bar{D}_{I_\downarrow I_\uparrow}\langle\delta n_\uparrow(\mathbf{k})\rangle_\omega \tag{8.4}$$
$$-k^2 W_{I_\downarrow I_\downarrow}(\omega)\bar{D}_{I_\downarrow I_\downarrow}\langle\delta n_\downarrow(\mathbf{k})\rangle_\omega - k^2 W_{I_\downarrow I_{\bar{m}}}(\omega)\bar{D}_{I_\downarrow I_{\bar{m}}}\langle\delta\bar{\mathbf{m}}(\mathbf{k})\rangle_\omega,$$

$$i\omega\langle\delta\bar{\mathbf{m}}(\mathbf{k})\rangle_\omega = i\Omega_{\bar{m}\bar{m}}(\mathbf{k})\langle\delta\bar{\mathbf{m}}(\mathbf{k})\rangle_\omega - k^2 W_{I_{\bar{m}} I_\uparrow}(\omega)\bar{D}_{I_{\bar{m}} I_\uparrow}\langle\delta n_\uparrow(\mathbf{k})\rangle_\omega \tag{8.5}$$
$$-k^2 W_{I_{\bar{m}} I_\downarrow}(\omega)\bar{D}_{I_{\bar{m}} I_\downarrow}\langle\delta n_\downarrow(\mathbf{k})\rangle_\omega - k^2 W_{I_{\bar{m}} I_{\bar{m}}}(\omega)\bar{D}_{I_{\bar{m}} I_{\bar{m}}}\langle\delta\bar{\mathbf{m}}(\mathbf{k})\rangle_\omega.$$

Знайдемо розв'язки даної системи рівнянь. Із (8.5) знайдемо $\langle\delta\bar{\mathbf{m}}(\mathbf{k})\rangle_\omega$

$$\langle\delta\bar{\mathbf{m}}(\mathbf{k})\rangle_\omega = -k^2\Sigma^{-1}_{I_{\bar{m}} I_{\bar{m}}}(\mathbf{k};\omega) W_{I_{\bar{m}} I_\uparrow}(\omega)\bar{D}_{I_{\bar{m}} I_\uparrow}\langle\delta n_\uparrow(\mathbf{k})\rangle_\omega \tag{8.6}$$
$$-k^2\Sigma^{-1}_{I_{\bar{m}} I_{\bar{m}}}(\mathbf{k};\omega) W_{I_{\bar{m}} I_\downarrow}(\omega)\bar{D}_{I_{\bar{m}} I_\downarrow}\langle\delta n_\downarrow(\mathbf{k})\rangle_\omega,$$

де функція $\Sigma^{-1}_{I_{\bar{m}} I_{\bar{m}}}(\mathbf{k};\omega)$ обернена до $\Sigma_{I_{\bar{m}} I_{\bar{m}}}(\mathbf{k};\omega)$

$$\Sigma_{I_{\bar{m}} I_{\bar{m}}}(\mathbf{k};\omega) = i\omega - i\Omega_{\bar{m}\bar{m}}(\mathbf{k}) + W_{I_{\bar{m}} I_{\bar{m}}}(\omega)\bar{D}_{I_{\bar{m}} I_{\bar{m}}}. \tag{8.7}$$

Далі (8.6) підставимо у Із (8.3) і Із (8.4) відповідно, в результаті отримаємо:

$$i\omega\langle\delta n_\uparrow(\mathbf{k})\rangle_\omega = -k^2\Sigma_{I_\uparrow I_\uparrow}(\mathbf{k};\omega)\langle\delta n_\uparrow(\mathbf{k})\rangle_\omega - k^2\Sigma_{I_\uparrow I_\downarrow}(\mathbf{k};\omega)\langle\delta n_\downarrow(\mathbf{k})\rangle_\omega, \tag{8.8}$$

$$i\omega\langle\delta n_\downarrow(\mathbf{k})\rangle_\omega = -k^2\Sigma_{I_\downarrow I_\uparrow}(\mathbf{k};\omega)\langle\delta n_\uparrow(\mathbf{k})\rangle_\omega - k^2\Sigma_{I_\downarrow I_\downarrow}(\mathbf{k};\omega)\langle\delta n_\downarrow(\mathbf{k})\rangle_\omega, \tag{8.9}$$

де

$$\Sigma_{I_\uparrow I_\uparrow}(\mathbf{k};\omega) = W_{I_\uparrow I_\uparrow}(\omega)\bar{D}_{I_\uparrow I_\uparrow} \tag{8.10}$$
$$-k^2 W_{I_\uparrow I_{\bar{m}}}(\omega)\bar{D}_{I_\uparrow I_{\bar{m}}}\Sigma^{-1}_{I_{\bar{m}} I_{\bar{m}}}(\mathbf{k};\omega) W_{I_{\bar{m}} I_\uparrow}(\omega)\bar{D}_{I_{\bar{m}} I_\uparrow},$$

$$\Sigma_{I_\uparrow I_\downarrow}(\mathbf{k};\omega) = W_{I_\uparrow I_\downarrow}(\omega)\bar{D}_{I_\uparrow I_\downarrow} \tag{8.11}$$
$$-k^2 W_{I_\uparrow I_{\bar{m}}}(\omega)\bar{D}_{I_\uparrow I_{\bar{m}}}\Sigma^{-1}_{I_{\bar{m}} I_{\bar{m}}}(\mathbf{k};\omega) W_{I_{\bar{m}} I_\downarrow}(\omega)\bar{D}_{I_{\bar{m}} I_\downarrow},$$

$$\Sigma_{I_\downarrow I_\uparrow}(\mathbf{k};\omega) = W_{I_\downarrow I_\uparrow}(\omega)\bar{D}_{I_\downarrow I_\uparrow} \tag{8.12}$$
$$-k^2 W_{I_\downarrow I_{\bar{m}}}(\omega)\bar{D}_{I_\downarrow I_{\bar{m}}}\Sigma^{-1}_{I_{\bar{m}} I_{\bar{m}}}(\mathbf{k};\omega) W_{I_{\bar{m}} I_\uparrow}(\omega)\bar{D}_{I_{\bar{m}} I_\uparrow},$$

$$\Sigma_{I_\downarrow I_\downarrow}(\mathbf{k};\omega) = W_{I_\downarrow I_\downarrow}(\omega)\bar{D}_{I_\downarrow I_\downarrow} \tag{8.13}$$
$$-k^2 W_{I_\downarrow I_{\bar{m}}}(\omega)\bar{D}_{I_\downarrow I_{\bar{m}}}\Sigma^{-1}_{I_{\bar{m}} I_{\bar{m}}}(\mathbf{k};\omega) W_{I_{\bar{m}} I_\downarrow}(\omega)\bar{D}_{I_{\bar{m}} I_\downarrow}$$

Із системи рівнянь (8.8), (8.9) для $\langle\delta n_\uparrow(\mathbf{k})\rangle_\omega$ отримуємо наступне рівняння:

$$i\omega\langle\delta n_\uparrow(\mathbf{k})\rangle_\omega + k^2(\Sigma_{I_\uparrow I_\uparrow}(\mathbf{k};\omega) \tag{8.14}$$
$$-k^2\Sigma_{I_\uparrow I_\downarrow}(\mathbf{k};\omega)\frac{1}{i\omega + k^2\Sigma_{I_\downarrow I_\downarrow}(\mathbf{k};\omega)}\Sigma_{I_\downarrow I_\uparrow}(\mathbf{k};\omega))\langle\delta n_\uparrow(\mathbf{k})\rangle_\omega = 0.$$

і в результаті приходимо до особливостей частотно-хвильового спектру:

$$i\omega + k^2(\Sigma_{I_\uparrow I_\uparrow}(\mathbf{k};\omega) - k^2\Sigma_{I_\uparrow I_\downarrow}(\mathbf{k};\omega)\frac{1}{i\omega + k^2\Sigma_{I_\downarrow I_\downarrow}(\mathbf{k};\omega)}\Sigma_{I_\downarrow I_\uparrow}(\mathbf{k};\omega)) = 0. \tag{8.15}$$

розрахунок, якого потребує задання частотної залежності часових функцій пам'яті $W_{I_j I_l}(\omega)$, введенням відповідних часів релаксації, що характеризують електро-магніто дифузійні процеси.

9. Висновки

1. Побудована модель опису дипольно-магнітних властивостей суперпарамагнетиків $\langle\beta - \mathrm{CD}\langle\mathrm{FeSO_4}\rangle\rangle$ інкапсульованих у напівпровідникові шаруваті структури GaSe. Модель враховує взаємодію носіїв заряду матриці із d-електронами заліза, обмінну магнітну взаємодію електронів провідності та локалізованих електронів, а також диполь-дипольну взаємодію комплексів у шаруватій структурі GaSe. Визначено основні параметри скороченого опису процесів струмопроходження з врахуванням магнетизму у гібридних наноструктурах $\langle\beta - \mathrm{CD}\langle\mathrm{FeSO_4}\rangle\rangle$ GaSe. Отримано нерівноважний статистичний оператор системи як функціонал параметрів скороченого опису.

2. Отримано узагальнені рівняння переносу (4.11)–(4.14), які описують немарковські процеси струмопроходження у шаруватих наноструктурах з врахуванням магнітних та поляризаційних процесів під впливом зовнішніх та індукованих внутрішніх електромагнітних

полів, які відображені у правих частинах даних рівнянь. Отримані рівняння переносу можуть описувати як сильно, так і слабо нерівноважні процеси відповідно у сильних та слабких (або сталих) електромагнітних полях.

3. У випадку слабо нерівноважних процесів отримано магнітодифузійні рівняння переносу (6.1)–(6.3) для електронів у шаруватих наноструктурах. Шляхом розв'язків через інтегральні рівняння, отримано узагальнене рівняння дифузії електронів із напрямком спінів за магнітним полем. Узагальнене рівняння дифузії (6.21) для електронів описує немарковські просторово неоднорідні процеси, тобто ефекти пам'яті, які пов'язані із характерними часами релаксації електронних (включаючи тунелювання), магнітних процесів відповідно до поведінки ядер переносу (6.13)–(6.20).

4. Шляхом моделювання функції пам'яті з введенням характерного часу релаксації, отримано узагальнене рівняння дифузії типу Каттано з врахуванням часової фрактальності для електронів із напрямком спінів за магнітним полем.

5. Запропоновано узагальнену модель, що враховує складність релаксаційних електро-магніто дифузійних процесів для електронів у шаруватих наноструктурах. У наближенні (8.2), розв'язано систему рівнянь (6.1)–(6.3), що привело до розрахунку відповідного частотно-хвильового спектру електро-магніто дифузійних процесів у шаруватих наноструктурах.

Література

1. Chabecki P., Calus D., Ivashchyshyn F., Pidluzhna A., Hryhorchak O., Bordun I., Makarchuk O., and Kityk A.V. Function Energy Accumulation Photo- and Magnetosensitive Hybridity in the GaSe-Based Hierarchical Structures // *Energies.* — 2020. — Vol. 13, — p. 4321:1–16. doi: 10.3390/en13174321
2. Grygorchak I., Calus D., Pidluzhna A., Ivashchyshyn F., Hryhorchak O., Chabecki P., Shvets R. Thermogalvanic and local field effects in $SiO_2 < SmCl_3 >$ structure. // *Applied Nanoscience.* — 2020. — doi: 10.1007/s13204-020-01477-2
3. Grygorchak I. I., Kostrobiy P. P., Stasyuk I. V., et al. Fizychni protsesy ta yikh mikroskopichni modeli v periodychnykh neorhanichno/ orhanichnykh klatratakh. L'viv: Rastr-7, 2015. — 285p.
4. Kostrobiy P. P., Grygorchak I. I., Ivaschyshyn F. O., et al. Mathematical modeling of subdiffusion impedance in multi-layer nanostructures. // *Mathematical Modeling and Computing.* — 2015. — Vol. 2, no. 2. — p. 154–159.
5. Kostrobij P., Grygorchak I., Ivashchyshyn F., Markovych B., Viznovych O., Tokarchuk M. Generalized Electrodiffusion Equation with Fractality of Space—Time: Experiment and Theory.// *Journal of Physical Chemistry A..* — 2018. — Vol. 122, No. 16. — p. 4099–4110.
6. Kostrobij P., Markovych B., Viznovych O., Tokarchuk M. Generalized transport equation with nonlocality of space–time. Zubarev's NSO method.// *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications..* — 2019. — Vol. 514,— p. 63–70.
514, 63–70 (2019).
7. *Сибатов Р. Т., Учайкин В. В.* Дробно-дифференциальный подход к описанию дисперсионного переноса в полупроводниках.// *Усп.физ. наук.* — 2009. — том. 179, no. 10. — с. 1079–1104.
8. *Сибатов Р. Т.* Дробно-дифференциальная теория аномальной кинетики носителей заряда в неупорядоченных полупроводниковых системах. Автореф. дис. д.ф.-м.н., Ульяновск, 2012. 44с.
9. *Рехвиашвили С. Ш., Мамчуев М. О., Мамчуев М. О.* Модель диффузионно-дрейфового транспорта носителей заряда в слоях с фрактальной структурой.// *ФТТ.* — 2016. — том. 58, вып.. 4. — с. 763–766.
10. *Рехвиашвили С. Ш., Алиханов А. А.* Моделирование диффузионно-дрейфового транспорта носителей заряда в полупроводниковых слоях с фрактальной структурой в переменном электрическом поле. // *Физ. и тех. полупров..* — 2017. — том. 51, вып.. 6. — с. 787–791.
11. *Uchaikin V. V.* Fractional Derivatives Method. Uljanovsk : Artishock-Press, 2008. 500p.
12. Fractional Dynamics. Recent Advances. (Edit. Klafter J., Lim S.C., Metzler R.). World Scientific, 2012, 530p.
13. *Zubarev D. N.* Modern methods of the statistical theory of nonequilibrium processes / D. N. Zubarev // *Journal of Soviet Mathematics.* — 1981. — Vol. 16, no. 6. — Pp. 1509–1571.
14. *Костробій П. П., Токарчук М. В., Маркович Б. М. та ін.* Реакційно-дифузійні процеси в системах «метал–газ», монографія. Львів : Видавництво Національного університету «Львівська політехніка», 2009. 208 с.
15. Kostrobij P. P., Markovych B. M., Tokarchuk M. V. Generalized diffusion equation with nonlocality of space-time. Memory function modelling.// *Condens. Matter Phys*, 2020 , vol. 23, No. 2, p. 23003:1-8.