11

Соотношения взаимности для механически индуцированных спиновых токов в металлах в нелинейном режиме

 В.К. Игнатьев

Волгоградский государственный университет,
400062 Волгоград, Россия
e-mail: vkignatjev@yandex.ru

Поступило в Редакцию 29 ноября 2022 г.
В окончательной редакции 6 марта 2023 г.
Принято к публикации 17 марта 2023 г.

В приближении марковской релаксации и локально квазиравновесного распределения методом Кубо получены аналоги соотношений Онзагера для функций отклика спинового тока в нелинейном по интенсивным механическим и термодинамическим воздействия режиме.

Ключевые слова: локально квазиравновесное распределение, спиновый гамильтониан, спиновый ток, нелинейность, взаимность, стрейнтроника, спиновая калоритроника, спиновый эффект Пельтье, спиновый эффект Зеебека.

DOI: 10.21883/JTF.2023.05.55466.258-22

Введение

Спиновая стрейнкалоритроника, формирующаяся в настоящее время, возможно, создаст предпосылки для объединения активно развивающихся спиновой калоритроники и стрейнтроники в новый раздел термодинамики. Эксперименты [1,2] показали, что приложение деформации может изменить направление теплового потока, генерируемого магнитотермоэлектрическими эффектами. В настоящее время динамика спина коллективизированных электронов проводимости в системах спинтроники моделируется гамильтонианами Рашбы и Дрессельхауса, описывающими взаимодействие орбитального момента электрона проводимости с его спиновым моментом [3]. Оценки показывают, что это взаимодействие, как и обменное взаимодействие в рамках модели РККИ [4], может обеспечить когерентность спиновой поляризации на микроскопических расстояниях (порядка $0.1\,\mu$m), но его не достаточно для эффективной макроскопической (порядка 1 mm) поляризации спиновых токов в поликристаллических образцах.

В работе [5] показана возможность эффективной генерации спиновой поляризации в поликристаллических ферромагнитных образцах с помощью дисторсии кручения, ось которой перпендикулярна вектору плотности зарядового тока. Такой подход создает предпосылки для управления методами стрейнтроники значительными потоками тепла в массивных образцах, а не только пленках. Для оптимизации конструкции и режимов работы спиновых систем теплового транспорта нужно построить и верифицировать аналитические функции отклика спинового тока и теплового потока на электрические, механические и термодинамические воздействия и соотношения взаимности для них. При этом высокая эффективность теплового насоса достигается при больших плотностях тепловых потоков и высоких интенсивностях механических и электрических воздействий. Поэтому необходимо получить аналоги классических соотношений Онзагера в существенно нелинейном по воздействиям режиме.

В работе [6] методом Кубо построены функции отклика нелинейных систем на неоднородные переменные электрические и механические воздействия в присутствии нестационарных спиновых токов и термодинамических потоков и доказаны соотношения взаимности для них. Однако этот вывод получен в предположении аддитивности воздействий. Проведенный в работе [5] анализ показал, что при механическом управлении генерацией спиновых токов электрический ток и механическая дисторсия воздействуют на систему мультипликативно. Этот случай, как и механически индуцированная генерация спиновых токов в немагнитных материалах, и сопровождающие ее спинкалорические эффекты, требует отдельного рассмотрения.

1. Спиновый гамильтониан электрона проводимости в деформированном металле

Рассмотрим однородный и изотропный поликристаллический металл. Пусть в кристаллите N узлов, в каждом из которых находятся одинаковые ионы с эффективным зарядом $+Ze$. Такая решетка создает электрическое поле

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = -\frac{eZ}{4\pi\varepsilon_0}\sum_{k=1}^{N}\frac{\mathbf{r}-\mathbf{r}_k}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_k|^3}.$$

Спин-орбитальная добавка в энергию электрона имеет вид [7]:

$$\hat{V} = \frac{\hbar e}{2m^2c^2}\,[\mathbf{E}(\mathbf{r})\times\hat{\mathbf{p}}]\hat{\mathbf{s}}. \tag{1}$$

Здесь m — масса электрона с зарядом $-e$. Запишем волновую функцию коллективизированного электрона проводимости в виде функции Ванье [8]:

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{n=1}^{N}\Psi(\mathbf{r}-\mathbf{R}_n)\exp(i\mathbf{k}\mathbf{R}_n),$$

где $\mathbf{R}_n$ — вектор трансляции, и построим спиновый гамильтониан для возмущения (1)

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2e^2Z}{8\pi\varepsilon_0m^2c^2N}\,\hat{s}_\alpha\exp(i\mathbf{k}(\mathbf{R}_n-\mathbf{R}_m))$$
$$\times\left\langle\Psi(\mathbf{r}+\mathbf{r}_k-\mathbf{R}_m)\middle|\frac{\hat{l}_\alpha}{r^3}\middle|\Psi(\mathbf{r}+\mathbf{r}_k-\mathbf{R}_n)\right\rangle. \tag{2}$$

В приближении ближайших соседей среднее в правой части (2) отлично от нуля только при $\mathbf{R}_n-\mathbf{r}_k=0$ или $\mathbf{a}_\nu$ и $\mathbf{R}_m-\mathbf{r}_k=0$ или $\mathbf{a}_\nu$, где $\mathbf{a}_\nu$ — вектор, проведенный к ближайшему соседу

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2e^2Z}{4\pi\varepsilon_0m^2c^2}\,\hat{s}_\alpha\left\{\cos(\mathbf{k}\mathbf{a}_\nu)\mathrm{Re}\left\langle\Psi_\nu^+\middle|\frac{\hat{l}_\alpha}{r^3}\middle|\Psi\right\rangle\right.$$
$$\left.+\sin(\mathbf{k}\mathbf{a}_\nu)\mathrm{Im}\left\langle\Psi_\nu^-\middle|\frac{\hat{l}_\alpha}{r^3}\middle|\Psi\right\rangle\right\}.$$

Здесь $\Psi_\nu^\pm(\mathbf{r}) = \Psi(\mathbf{r}+\mathbf{a}_\nu)\pm\Psi(\mathbf{r}-\mathbf{a}_\nu)$, и подразумевается суммирование по v по парам симметрично расположенных ближайших соседей. Полагая $\mathbf{k}=\mathbf{p}/\hbar$, где $\mathbf{p}$ — квазиимпульс электронов проводимости, получим в первом порядке малости по $\mathbf{p}\,\mathbf{a}_\nu$:

$$\hat{H} = \mathbf{J}\hat{\mathbf{s}}, \tag{3}$$

$$\mathbf{J} = -\frac{\hbar e^2Z}{4\pi\varepsilon_0m^2c^2}\,(\mathbf{p}\mathbf{a}_\nu)\mathrm{Im}\left\langle\Psi_\nu^-\middle|\frac{\hat{\mathbf{l}}}{r^3}\middle|\Psi\right\rangle. \tag{4}$$

В недеформированном кристаллите $\mathbf{J}=0$. При неоднородной дисторсии $r'_\alpha = r_\alpha + u_\alpha(\mathbf{r})$ волновая функция и оператор момента в (4) преобразуются по закону

$$\hat{l}'_\alpha = -i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}r'_\beta\frac{\partial}{\partial r'_\gamma} = \hat{l}_\alpha - i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\left(u_\beta\frac{\partial}{\partial r_\gamma} - r_\beta\frac{\partial u_\delta}{\partial r_\gamma}\frac{\partial}{\partial r_\delta}\right),$$

$$\Psi(\mathbf{r}') = \Psi(\mathbf{r}) + \frac{\partial\Psi}{\partial r_\alpha}\frac{\partial u_\alpha}{\partial r_\beta}r_\beta.$$

При дисторсии кручения в образце вдоль оси $\mathbf{n}$ вида $\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{r}) = \mathbf{n}(\mathbf{r}\mathbf{n})\omega$, где ω — погонное кручение, ограничиваясь первыми степенями дисторсии, получаем

$$\hat{l}'_\alpha = \hat{l}_\alpha + \omega\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}n_\beta n_\delta(r_\delta\hat{l}_\gamma + r_\gamma\hat{l}_\delta),$$

$$\Psi(\mathbf{r}') = \Psi(\mathbf{r}) + i\omega n_\beta n_\delta r_\delta\hat{l}_\beta\Psi(\mathbf{r}).$$

$$J_{\alpha'} = -\frac{\hbar e^2Z\omega}{2\pi\varepsilon_0m^2c^2}\,\varepsilon_{\alpha'\beta'\gamma'}n_{\beta'}n_{\delta'}p_{\sigma'}a_{\nu\sigma'}\mathrm{Im}\left\langle\Psi_\nu^-\middle|\frac{r_{\gamma'}\hat{l}_{\delta'}}{r^3}\middle|\Psi\right\rangle. \tag{5}$$

Соотношение (5) записано в системе координат, связанной с осями кристаллита. Введем лабораторную систему координат, связанную с приборами, которые задают ток проводимости и дисторсию и измеряют компоненты спина. Компоненты векторов и тензоров в лабораторной системе будем обозначать нештрихованными индексами, а в системе координат, связанной с кристаллическими осями, — штрихованными.

Преобразуем векторы квазиимпульса и оси кручения из лабораторной системы в систему кристаллических осей $p_{\sigma'} = p_{\sigma'\sigma}p_\sigma$, а вектор $\mathbf{J}$ из системы кристаллических осей в лабораторную $J_\alpha = p^{-1}_{\alpha\alpha'}J_{\alpha'}$, где $p_{\alpha'\alpha}$ — унитарная матрица поворота. Подставим это преобразование в уравнение (5) и усредним вектор $\mathbf{J}$ в макроскопической области по случайным равномерно распределенным ориентациям кристаллитов

$$\bar{\mathbf{J}} = \omega K\big[\mathbf{n}\times[\mathbf{p}\times\mathbf{n}]\big]. \tag{6}$$

Соответственно усредненный спиновый гамильтониан (3) принимает вид

$$\hat{H} = \omega K(p_\alpha - n_\alpha n_\beta p_\beta)\hat{s}_\alpha, \tag{7}$$

$$K = \frac{\hbar e^2Z}{12\pi\varepsilon_0m^2c^2}\,\mathrm{Im}\left\langle\Psi_\nu^-\middle|\mathbf{a}_\nu\frac{\lfloor\mathbf{r}\times\hat{\mathbf{l}}\rfloor}{r^3}\middle|\right\rangle. \tag{8}$$

Величина K зависит только от свойств кристалла, ее можно вычислить в осях симметрии кристалла.

2. Соотношения взаимности для нелинейной среды

Введем операторы плотности спинового момента $\hat{\mathbf{s}}(\mathbf{r},t)$ и спинового гамильтониана $\hat{h}(\mathbf{r},t)$ так, что в представлении взаимодействия

$$\hat{\mathbf{s}}(t) = \int_V\hat{\mathbf{s}}(\mathbf{r},t)d^3r,\ \ \hat{H}(t) = \int_V\hat{h}(\mathbf{r},t)d^3r\ \ [9].$$

Следуя Кубо [10], запишем для средних компонент плотности спинового момента

$$s_\alpha(\mathbf{r},t) = \langle\hat{s}_\alpha(\mathbf{r},t)\rangle = \mathrm{Sp}(\hat{s}_\alpha(\mathbf{r},t)\hat{\rho}(t)). \tag{9}$$

Здесь $\hat{\rho}(t)$ — оператор плотности. Динамика оператора плотности и наблюдаемых в представлении взаимодействия с учетом соотношения (7) описывается уравнениями Неймана

$$i\hbar\frac{\partial\hat{\rho}}{\partial t} = \int_V K\omega(\mathbf{r}',t)\big(n_\alpha(\mathbf{r}',t)n_\beta(\mathbf{r}',t)p_\beta(\mathbf{r}',t)$$
$$-p_\alpha(\mathbf{r}',t)\big)[\hat{s}_\alpha(\mathbf{r}',t),\hat{\rho}(t)]d^3r + [\hat{H}_r,\hat{\rho}(t)],$$

$$i\hbar\frac{\partial\hat{s}_\alpha(\mathbf{r},t)}{\partial t}=[\hat{s}_\alpha(\mathbf{r},t),\hat{H}_0],\qquad(10)$$

Здесь $\hat{H}_r$ — релаксационный гамильтониан, $\hat{H}_0=\int\limits_V\hat{h}_0(\mathbf{r},t)d^3r$ — вещественный стационарный невозмущенный гамильтониан.

В отсутствие внешних механических воздействий в системе устанавливается локально квазиравновесное распределение с оператором плотности [11]:

$$\hat{\rho}^q(t)=\exp\Big\{-\Phi(t)-\int\limits_V\theta(\mathbf{r},t)\hat{h}_0(\mathbf{r},t)d^3r\Big\},$$

$$\Phi(t)=\ln\operatorname{Sp}\exp\Big\{-\int\limits_V\theta(\mathbf{r},t)\hat{h}_0(\mathbf{r},t)d^3r\Big\}.\qquad(11)$$

Здесь $\Phi(t)$ — функционал Масье–Планка, $\theta(\mathbf{r},t)=1/(kT(\mathbf{r},t))$, k — постоянная Больцмана, $T(\mathbf{r},t)$ — локальная температура.

Выберем в качестве базиса собственные функции гамильтониана $\hat{H}_0$, соответствующие энергетическим уровням E_n. Решение второго уравнения Неймана (10) имеет вид

$$\hat{s}_\alpha(\mathbf{r},t)=\exp(i\hat{H}_0t/\hbar)\hat{s}_\alpha(\mathbf{r},0)\exp(-i\hat{H}_0t/\hbar t),$$

$$s_{\alpha nm}(\mathbf{r},t-t')=\exp(-i\omega_{nm}t')s_{\alpha nm}(\mathbf{r},t).\qquad(12)$$

Здесь $\omega_{nm}=(E_n-E_m)/\hbar$. Соответственно с учетом эрмитовости наблюдаемых и смены знака всех компонент спина при инверсии времени

$$\hat{s}_\alpha(\mathbf{r},-t)=-\hat{s}^*_\alpha(\mathbf{r},t),$$

$$s_{\alpha km}(\mathbf{r},-t)=-s^*_{\alpha km}(t,\mathbf{r})=-s_{\alpha mk}(\mathbf{r},t).\qquad(13)$$

Обозначим $\mathbf{f}(\mathbf{r},t)=\omega(\mathbf{r},t)\big[\mathbf{n}(\mathbf{r},t)\times[\mathbf{p}(\mathbf{r},t)\times\mathbf{n}(\mathbf{r},t)]\big]$ — вектор воздействия на систему. Поскольку $\mathbf{p}(-t)=-\mathbf{p}(t)$, $\mathbf{n}(-t)=-\mathbf{n}(t)$, $\omega(-t)=\omega(t)$, то $\mathbf{f}(\mathbf{r},-t)=-\mathbf{f}(\mathbf{r},t)$. Из первых уравнений (10) и (13) получаем

$$\hat{\rho}(-t,\mathbf{f}(\mathbf{r},-t))=\hat{\rho}^*(t,-\mathbf{f}(\mathbf{r},t)),$$

$$\rho_{nm}(-t,\mathbf{f}(\mathbf{r},-t))=\hat{\rho}^*_{nm}(t,-\mathbf{f}(\mathbf{r},t))=\rho_{mn}(t,-\mathbf{f}(\mathbf{r},t)).\qquad(14)$$

Первое уравнение (10) в приближении марковской релаксации в матричной форме имеет вид

$$\frac{\partial\rho_{nm}(t,\mathbf{f},T)}{\partial t}=\frac{\rho^q_{nm}-\rho_{nm}(t,\mathbf{f},T)}{\tau_{nm}}-\frac{i}{\hbar}\int\limits_V f_\beta(\mathbf{r},t)$$

$$\times\big(\rho_{nk}(t,\mathbf{f},T)s_{\beta km}(\mathbf{r},t)-s_{\beta nk}(\mathbf{r},t)\rho_{km}(t,\mathbf{f},T)\big)d^3r.\qquad(15)$$

Здесь $\tau_{nm}=\tau_{mn}$ — вещественные положительные времена релаксации, и принято, что в момент времени t_0 система находилась в квазиравновесном состоянии с оператором плотности $\hat{\rho}^0$. Здесь и далее зависимость $\mathbf{f}$ и T от времени и координат подразумевается. Будем искать решение уравнения (15) в виде $\rho_{nm}(t,\mathbf{f},T)=\tilde{\rho}_{nm}(\mathbf{f},T)\exp(i\omega_{nm}t)$. С учетом второго уравнения (14) получаем

$$\tilde{\rho}_{nm}\big(\mathbf{f}(\mathbf{r},t),T(\mathbf{r},t)\big)=\tilde{\rho}_{mn}\big(-\mathbf{f}(\mathbf{r},t),T(\mathbf{r},t)\big)\qquad(16)$$

при одновременной замене всех частот ω_{nm} на ω_{mn}.

Уравнение (15) эквивалентно интегральному уравнению

$$\rho_{nm}(t)=(\rho^0_{nm}+\rho^q_{nm}(t))\exp\left(\frac{t_0-t}{\tau_{nm}}\right)-\rho^q_{nm}(t)$$

$$+\int\limits_{t_0}^{t}\exp\left(\frac{t'-t}{\tau_{nm}}\right)\frac{d\rho^q_{nm}(t')}{dt'}\,dt'+\frac{i}{\hbar}\int\limits_V\int\limits_{t_0}^{t}\exp\left(\frac{t'-t}{\tau_{nm}}\right)$$

$$\times f_\beta(\mathbf{r}',t')\Big(s_{\beta nl}(\mathbf{r}',t')\rho_{lm}(t')-\rho_{nl}(t')s_{\beta lm}(\mathbf{r}',t')\Big)dt'd^3r'.\qquad(17)$$

Здесь в интеграле, содержащем ρ^q_{nm}, выполнено интегрирование по частям. В соотношении (16) и далее аргумент функций вида $\mathbf{f}(\mathbf{r},t)$ подразумевает, что функции зависят от значений аргументов во все моменты, предшествующие t, и во всей области V.

Для квазилокального оператора плотности невозмущенного гамильтониана можно ввести оператор плотности потоков, удовлетворяющего уравнению непрерывности $\hat{h}_0(\mathbf{r},t)/\partial t=-\partial\hat{q}_{0\alpha}(\mathbf{r},t)/\partial r_\alpha$, $\alpha=1,2,3$ [9]. Тогда в соответствии с уравнением (11)

$$\frac{d\hat{\rho}^q(t)}{dt}=-\hat{\rho}^q\int\limits_V\Big\{\frac{\partial\theta(\mathbf{r},t)}{\partial t}\hat{h}_0(\mathbf{r},t)+\hat{q}_{0\alpha}(\mathbf{r},t)\frac{\partial\theta(\mathbf{r},t)}{\partial r_\alpha}\Big\}d^3r$$

$$+\hat{\rho}^q(t)\theta_k(t)Q_k(t)-\hat{\rho}^q(t)\,\frac{d\Phi}{dt}.\qquad(18)$$

Здесь $\hat{Q}_k(t)=\int\limits_{S_k}n_{k\alpha}(\mathbf{r})\hat{q}_{0\alpha}(\mathbf{r},t)d^2r$ — операторы потоков энергии через k-й контакт, $\theta_k(t)=\theta(t,\mathbf{r}_k)$, $\mathbf{r}_k$ — координата центра k-го контакта, $n_{k\alpha}$ — α-проекция внешней нормали к поверхности k-го контакта. Наряду со спиновыми наблюдаемыми $\hat{s}_\alpha(\mathbf{r})$ и соответствующими им механическими воздействиями $f_\alpha(\mathbf{r},t)$, можно ввести термодинамические наблюдаемые — плотность энергии $\hat{h}_0(\mathbf{r})$, проекции плотностей потока энергии $\hat{q}_{0\alpha}(\mathbf{r},t)$, потоки энергии через k-й контакт — $\hat{Q}_k(t)$ и соответствующие им термодинамические воздействия $\partial\theta/\partial t$, $\partial\theta/\partial r_\alpha$, $\theta_k(t)$. Будем обозначать термодинамические наблюдаемые как Θ_α, а соответствующие им термодинамические воздействия как T_α.

Устремим момент времени t_0 в формуле (17) к $-\infty$, тогда первое слагаемое в правой части равно нулю. Введем новую переменную $\tau=t-t'$. С учетом формулы (18) уравнение (17) принимает вид

$$\rho_{nm}(t) = -\rho_{nm}^{q}(t) - \int_{0}^{\infty} \exp\left(\frac{-\tau}{\tau_{nm}}\right)\rho_{nm}^{q}(t-\tau)\frac{d\Phi(t-\tau)}{dt}\,d\tau$$

$$-\frac{1}{2}\int_{V}\int_{0}^{\infty}\exp\left(\frac{-\tau}{\tau_{nm}}\right)\big(\Theta_{\beta nl}(t-\tau,\mathbf{r}')\rho_{lm}^{q}(t-\tau)$$

$$+\rho_{nl}^{q}(t-\tau)+\Theta_{\beta lm}(\mathbf{r}',t-\tau)\big)T_{\beta}(\mathbf{r}',t-\tau)d\tau d^{3}r'$$

$$+\frac{i}{\hbar}\int_{V}\int_{0}^{\infty}\exp\left(\frac{-\tau}{\tau_{nm}}\right)\big(s_{\beta nl}(\mathbf{r}',t-\tau)\rho_{lm}(t-\tau)$$

$$-\rho_{nl}(t-\tau)s_{\beta lm}(\mathbf{r}',t')\big)f_{\beta}(\mathbf{r}',t-\tau)d\tau d^{3}r'. \tag{19}$$

Для реакции среднего значения спиновых наблюдаемых на механическое воздействие из формулы (19) получаем

$$s_{\alpha}(\mathbf{r},t,\mathbf{f},\mathbf{T}) = \rho_{nm}(t,\mathbf{f},\mathbf{T})s_{\alpha mn}(\mathbf{r},t,\mathbf{f},\mathbf{T}) = s_{\alpha}^{q}(\mathbf{r},t)$$

$$+\int_{V}\int_{0}^{\infty}\chi_{\alpha\beta}\mathbf{r},\mathbf{r}',\tau,\mathbf{f},\mathbf{T})f_{\beta}(\mathbf{r}',t-\tau)d\tau d^{3}r'. \tag{20}$$

Здесь термодинамические воздействия объединены в вектор $\mathbf{T}(\mathbf{r},t)$, первое слагаемое в правой части (20) имеет вид

$$s_{\alpha}^{q}(\mathbf{r},t) = -\rho_{nm}^{q}(t)s_{imn}(\mathbf{r},t) - \int_{0}^{\infty}\exp\left(\frac{-\tau}{\tau_{nm}}\right)\rho_{nm}^{q}(t-\tau)$$

$$\times s_{imn}(\mathbf{r},t)\,\frac{d\Phi(t-\tau)}{dt}\,d\tau \tag{21}$$

и описывает квазиравновесное, т.е. в отсутствие механических и термодинамических воздействий, значение наблюдаемой. Второе слагаемое в (20) описывает отклик системы на механические воздействия. Функции отклика системы имеют вид формулы Кубо [10]

$$\chi_{\alpha\beta}(\mathbf{r},\mathbf{r}',\tau,\mathbf{f},\mathbf{T}) = \frac{iK\rho_{nm}(\mathbf{f},\mathbf{T})}{\hbar\exp(\tau/\tau_{nm})}$$

$$\times\left\{\hat{s}_{\alpha}(\mathbf{r},t)\hat{s}_{\beta}(\mathbf{r}',t-\tau)-\hat{s}_{\beta}(\mathbf{r}',t-\tau)\hat{s}_{\alpha}(\mathbf{r},t)\right\}_{mn}.$$

Преобразуем эту формулу с учетом второго уравнения (12) при $t' = t - \tau/2$

$$\chi_{\alpha\beta}(\mathbf{r},\mathbf{r}',\tau,\mathbf{f},\mathbf{T}) = \frac{iK\tilde{\rho}_{nm}(\mathbf{f},\mathbf{T})}{\hbar\exp(\tau/\tau_{nm})}\exp\left(i\omega_{nm}\frac{\tau}{2}\right)$$

$$\times\left\{s_{\alpha ml}\left(\mathbf{r},\frac{\tau}{2}\right)s_{\beta ln}\left(\mathbf{r}',-\frac{\tau}{2}\right)-s_{\beta ml}\left(\mathbf{r}',-\frac{\tau}{2}\right)s_{\alpha ln}\left(\mathbf{r},\frac{\tau}{2}\right)\right\}. \tag{22}$$

С учетом соотношений (19) и (22) из формулы (23) получаем

$$\chi_{\beta\alpha}(\mathbf{r},\mathbf{r}',\tau,-\mathbf{f},\mathbf{T}) = \frac{iK\tilde{\rho}_{mn}(\mathbf{f},\mathbf{T})}{\hbar\exp(\tau/\tau_{nm})}\exp\left(\frac{i\omega_{nm}\tau}{2}\right)$$

$$\times\left\{s_{\beta ml}\left(\mathbf{r},\frac{\tau}{2}\right)s_{\alpha ln}\left(\mathbf{r}',-\frac{\tau}{2}\right)-s_{\alpha ml}\left(\mathbf{r}',-\frac{\tau}{2}\right)s_{\beta ln}\left(\mathbf{r},\frac{\tau}{2}\right)\right\}.$$

Выполним замену индексов $n \leftrightarrow m$ с учетом соотношений (16) и симметрии матрицы τ_{nm}:

$$\chi_{\beta\alpha}(\mathbf{r},\mathbf{r}',\tau,-\mathbf{f},\mathbf{T}) = \frac{iK\tilde{\rho}_{nm}(\mathbf{f},\mathbf{T})}{\hbar\exp(\tau/\tau_{nm})}\exp\left(\frac{i\omega_{mn}\tau}{2}\right)$$

$$\times\left\{s_{\beta ln}\left(\mathbf{r},-\frac{\tau}{2}\right)s_{\alpha ml}\left(\mathbf{r}',\frac{\tau}{2}\right)-s_{\alpha ln}\left(\mathbf{r}',\frac{\tau}{2}\right)s_{\beta ml}\left(\mathbf{r},-\frac{\tau}{2}\right)\right\}. \tag{23}$$

Из сравнения формул (22) с (23) получаем соотношения взаимности для функций отклика спиновой поляризации на совместное воздействие дисторсии кручения и зарядового тока

$$\chi_{\alpha\beta}\big(\mathbf{r},\mathbf{r}',\tau,\mathbf{f}(\mathbf{r},t),\mathbf{T}(\mathbf{r},t)\big) = \chi_{\beta\alpha}\big(\mathbf{r}',\mathbf{r},\tau,-\mathbf{f}(\mathbf{r},t),\mathbf{T}(\mathbf{r},t)\big). \tag{24}$$

Нелинейность системы проявляется в зависимости функций отклика (22) и (23) от воздействия. Она обусловлена тем, что усреднение проводится не по квазиравновесному оператору плотности (11), а по текущему (19), которое отклоняется при интенсивных воздействиях от квазиравновесного. Для слабых воздействий таким отклонением можно пренебречь и провести усреднение по квазиравновесному оператору плотности. Тогда правые части формул (22) и (23) не зависят от воздействия $\mathbf{f}$, т.е. система будет линейной. Полагая в (24) $\mathbf{f} = -\mathbf{f} = 0$, получаем классическое соотношение симметрии Онзагера.

Рассматривая механически индуцированные спиновые токи только в металлах, воспользуемся для электронов проводимости приближением идеального ферми-газа. Применимость этой модели обоснована тем, что термодинамика ферми-системы определяется ее микроскопической структурой только вблизи поверхности Ферми [12]. Экспериментальные исследования температурной зависимости электронной теплоемкости в металлах показывают, что она хорошо соответствует модели идеального ферми-газа. При этом для большинства металлов эффективная масса электрона проводимости близка к массе свободного электрона. Поэтому в соотношениях (4)−(7) и в определении вектора механического воздействия $\mathbf{f}$ можно положить $\mathbf{p} = -m\mathbf{j}/(en_e)$, где $\mathbf{j}$ — плотность зарядового тока, n_e — концентрация электронов проводимости.

Со спиновой поляризацией связан тензор плотности спинового тока

$$S_{\alpha\beta}(\mathbf{r},t) = -s_{\alpha}(\mathbf{r},t)j_{\beta}(\mathbf{r},t)/(en_e). \tag{25}$$

Рассмотрим реакцию тензора плотности спинового тока только на совместное воздействие дисторсии кручения и зарядового тока и будем для простоты считать, что направление оси кручения постоянно во времени и пространстве. Тогда с учетом соотношения (20) формулу (25) можно записать в виде

$$S_{\alpha\beta}(\mathbf{r},t,\omega\mathbf{f},\mathbf{T}) = S^q_{\alpha\beta}(\mathbf{r},t) + \int\limits_V\int\limits_0^\infty \chi_{\alpha\beta\gamma}(\mathbf{r},\mathbf{r}',\tau,\omega\mathbf{j},\mathbf{T},t)$$
$$\times\,\omega(\mathbf{r}',t-\tau)\big(j_\gamma(\mathbf{r}',t-\tau) - n_\gamma n_\delta j_\delta(\mathbf{r}',t-\tau)\big)d\tau\,d^3r'. \quad (26)$$

Здесь $S^q_{\alpha\beta}(\mathbf{r},t)$ — тензор квазиравновесной плотности спинового тока, и в соответствии с формулами (22) и (25):

$$\chi_{\alpha\beta\gamma}(\mathbf{r},\mathbf{r}',\tau,\omega\mathbf{j},\mathbf{T},t) = \frac{iK_1\tilde\rho_{nm}(\omega\mathbf{j},\mathbf{T})}{\hbar\exp(\tau/\tau_{nm})en_e}$$
$$\times\exp\Big(i\omega_{mn}\frac{\tau}{2}\Big)j_\beta(\mathbf{r},t)\Big\{s_{\alpha ml}\Big(\mathbf{r},\frac{\tau}{2}\Big)s_{\gamma ln}\Big(\mathbf{r}',-\frac{\tau}{2}\Big)$$
$$-\,s_{\gamma ml}\Big(\mathbf{r}',-\frac{\tau}{2}\Big)s_{\alpha ln}\Big(\mathbf{r},\frac{\tau}{2}\Big)\Big\}$$

— функция отклика тензора плотности спинового тока на механические воздействия, $K_1 = -mK/(en_e)$. Если распределение зарядового тока однородное, то по аналогии с выводом формулы (24) получаем соотношение симметрии для функции отклика тензора плотности спинового тока на механические воздействия:

$$\chi_{\alpha\beta\gamma}(\mathbf{r},\mathbf{r}',\tau,\omega\mathbf{j},\mathbf{T},t) = -\chi_{\gamma\beta\alpha}(\mathbf{r}',\mathbf{r},\tau,-\omega\mathbf{j},\mathbf{T},t). \quad (27)$$

3. Взаимность спинстрейнкалорических эффектов

Уравнения непрерывности для операторов плотности спинового гамильтониана и компонент спина имеют вид

$$\hat h(\mathbf{r},t)/\partial t = -\partial\hat q_{s\beta}(\mathbf{r},t)/\partial r_\beta,$$
$$\hat s_\alpha(\mathbf{r},t)/\partial t = -\partial\hat S_{\alpha\beta}(\mathbf{r},t)/\partial r_\beta. \quad (28)$$

Здесь $\hat q_{s\beta}(\mathbf{r},t)$ — оператор плотности потока спиновой энергии, $\hat S_{\alpha\beta}(\mathbf{r},t)$ — оператор плотности тензора спинового тока. Полагая в (25) плотность зарядового тока заданной функцией времени и координат, а не динамической переменной, положим

$$\hat S_{\alpha\beta}(\mathbf{r},t) = \hat s_\alpha(\mathbf{r},t)j_\beta(\mathbf{r},t)/(en_e). \quad (29)$$

Полагая с учетом формулы (5), $\hat h(\mathbf{r},t) = \hat s_\alpha(\mathbf{r},t)f_\alpha(\mathbf{r},t)$ и считая механическое воздействие $\mathbf{f}(\mathbf{r},t)$ медленно меняющейся функцией времени и координат, получим из уравнений (28), (29) и (20):

$$\hat q_{s\gamma}(\mathbf{r},t) = K_1\hat S_{\alpha\gamma}(\mathbf{r},t)f_\alpha(\mathbf{r},t)$$
$$= K_1\hat s_\alpha(\mathbf{r},t)f_\alpha(\mathbf{r},t)j_\gamma(\mathbf{r},t)/(en_e). \quad (30)$$

Формула (30) описывает спиновый эффект Пельтье [13] — механически индуцированный спиновый ток создает поток тепла по аналогии с эффектом для зарядового тока. Соответственно

$$\hat q_{s\gamma}(\mathbf{r},t) = \frac{f_\alpha(\mathbf{r},t)j_\gamma(\mathbf{r},t)}{en_e}$$
$$\times\int\limits_V\int\limits_0^\infty \chi_{\alpha\beta}(\mathbf{r},\mathbf{r}',\tau,\mathbf{f},\mathbf{T})f_\beta(\mathbf{r}',t-\tau)d\tau\,d^3r'.$$

Функция отклика $\chi_{\alpha\beta}$ имеет вид (22) и удовлетворяет соотношениям взаимности (24). Введем время установления системы τ_r и расстояние релаксации r_r, такие, что все $\chi_{\alpha\beta}(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| > r_r, \tau > \tau_r) \equiv 0$ Тогда, если функция $\mathbf{f}(\mathbf{r},t)$ мало изменяется на расстоянии r_r и за время τ_r, можно ввести функцию отклика плотности теплового потока на механическое воздействие

$$\mathbf{q}_s(\mathbf{r},t) = \mathbf{j}(\mathbf{r},t)f_\alpha(\mathbf{r},t)f_\beta(\mathbf{r},t)\big(D_{\alpha\beta}(\mathbf{r},\mathbf{f},\mathbf{T})$$
$$+\,D_{\beta\alpha}(\mathbf{r},\mathbf{f},\mathbf{T})\big)/2, \quad (31)$$

и с учетом соотношения (24) получить для нее соотношения взаимности

$$D_{\alpha\beta}(\mathbf{r},\mathbf{f},\mathbf{T}) = \frac{K_1}{en_e}\int\limits_V\int\limits_0^\infty \chi_{\alpha\beta}(\mathbf{r},\mathbf{r}',\tau,\mathbf{F},\mathbf{T})d\tau\,d^3r'$$
$$= D_{\beta\alpha}(\mathbf{r},-\mathbf{f},\mathbf{T}). \quad (32)$$

Пусть в системе есть только одно термодинамическое воздействие — градиент температуры. Тогда для изотропной среды элементы матрицы (32) должны иметь вид

$$D_{\alpha\beta}(\mathbf{r},\mathbf{f},\partial T/\partial\mathbf{r}) = D_{\alpha\beta}(\mathbf{r},|\mathbf{f}|,|\partial T/\partial\mathbf{r}|,\mathbf{f},\partial T/\partial\mathbf{r}).$$

Из второго равенства (32) следует, что

$$D_{\alpha\beta}(\mathbf{r},\mathbf{f},-\partial T/\partial\mathbf{r}) = D_{\alpha\beta}(\mathbf{r},-\mathbf{f},\partial T/\partial\mathbf{r}) = D_{\beta\alpha}(\mathbf{r},\mathbf{f},\partial T/\partial\mathbf{r}).$$

В свою очередь, из соотношения (32) следует, что тепловой поток, создаваемый спиновым током против градиента температуры, равен потоку, создаваемому в направлении градиента температуры.

Заключение

Под воздействием, создающим в металле механически индуцированные спиновые токи, понимается коэффициент перед оператором спина в спиновом гамильтониане (7). Для деформированного металла это воздействие выражено через плотность зарядового тока и дисторсию кручения. Максимальная спиновая поляризация достигается, когда ось кручения перпендикулярна вектору плотности зарядового тока $\mathbf{j}$. В этом случае средний спин ориентирован параллельно или антипараллельно, в зависимости от знака K, вектору **j**. В воздействие векторы плотности зарядового тока и кручения входят мультипликативно. Это позволяет рассматривать механическое напряжение как параметрическое и моделировать экспериментально обнаруженное изменение направления теплового потока, генерируемого термоэлектрическими эффектами, под действием механических напряжений [1,2]. Возможность управления потоками тепла с помощью спинового тока, описываемая уравнением (31), экспериментально подтверждена в работе [14]. Предложенный метод анализа квантовых транспортных эффектов, обусловленных поляризацией механически индуцированного спинового тока, создает основу для проектирования и оптимизации характеристик эффективных систем теплового транспорта.

Кинетические коэффициенты (22) получены по схеме Кубо [10] формально, без детализации физического механизма этого отклика и конкретизации матричных элементов. Такое определение предназначено не для расчетов и оценок функций отклика, а для установления их общих свойств, таких, как соотношения симметрии. Кинетические коэффициенты рассчитываются и оцениваются из решения кинетических уравнений. При таком вычислении требования принципа симметрии кинетических коэффициентов удовлетворяются автоматически независимо от механизма релаксации, т. е. вида конкретного кинетического уравнения или матричных коэффициентов [15].

Классические соотношения Онзагера симметрии кинетических коэффициентов для линейных систем получены в предположении о том, что средняя релаксация спонтанных флуктуаций в системе происходит в соответствии с макроскопическими законами. В схеме Кубо [10] этому предположению соответствует приближение марковской релаксации, если невозмущенный гамильтониан является стационарным.

Получить соотношения взаимности для нелинейных систем в столь общих предположениях пока не удается. В рамках предложенной схемы их следует дополнить условием, что невозмущенная система находится в квазиравновесном состоянии (11), а система под действием возмущения, которое можно представить в виде суммы произведений классической заданной функции на оператор соответствующей внешней динамической переменной и оператора марковской релаксации к квазиравновесному состоянию, остается устойчивой. Применимость марковской релаксации и локально квазиравновесного оператора рассмотрена соответственно в [16,17].

Поскольку векторы плотности зарядового тока и кручения в спиновое возмущение (8) входят мультипликативно, построение по схеме Кубо функций отклика, описывающих спинстрейнкалорические эффекты в форме, допускающей получение соотношений симметрии для них, потребовало дополнительных предположений о системе. Такими предположениями являются представление волновой функции коллективизированного электрона проводимости в виде функции Ванье и приближение ближайших соседей в гамильтониане (2), а также модель идеального ферми-газа для электронов проводимости. Применимость этих моделей для конкретной задачи следует обосновывать экспериментально. В настоящее время доступны достоверные экспериментальные данные по спиновому эффекту Холла в металлах. Поэтому в рамках описанных приближений были рассчитаны коэффициенты спинового эффекта Холла немагнтных металлов 5-го и 6-го периодов [18]. Результаты расчетов согласуются с экспериментальными в пределах погрешности.

Предложенный подход к выводу соотношений взаимности в нелинейных системах позволяет обосновать достаточно общие выводы, например, о независимости теплового потока, генерируемого спиновым током, от направления градиента температуры. Этот вывод допускает экспериментальную проверку в широком диапазоне интенсивностей воздействий.

Финансирование работы

Исследование выполнено за счет средств гранта Российского научного фонда № 22-22-20035 (https://rscf.ru/project/22-22-20035/) и за счет средств бюджета Волгоградской области.

Конфликт интересов

Автор заявляет, что у него нет конфликта интересов.

Список литературы

[1] S. Ota, K. Uchida, R. Iguchi, P.V. Thach, H. Awano, D. Chiba. Scientific Reports, **9**, 13197 (2019). DOI: 10.1038/s41598-019-49567-2

[2] T. Hirai, H. Sepehri-Amin, K. Hasegawa, T. Koyama, R. Iguchi, T. Ohkubo, D. Chiba, K. Uchida. Appl. Phys. Lett., **118**, 022403 (2021). DOI: 10.1063/5.0034858

[3] A. Manchon, S. Zhang. Phys. Rev. B, **78**, 212405 (2008). DOI: 10.1103/PhysRevB.78.212405

[4] M.A. Ruderman, C. Kittel. Phys. Rev., **96**, 9 (1954). DOI: 10.1103/PHYSREV.96.99

[5] В.К. Игнатьев, Н.Г. Лебедев, Д.А. Станкевич. Письма в ЖТФ, **48** (23), 30 (2022). DOI: 10.21883/PJTF.2022.23.53949.19363

[6] В.К. Игнатьев. ЖТФ, **92** (1), 118 (2022). DOI: 10.21883/JTF.2022.01.51861.126-21

[7] В.Б. Берестецкий, Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский. *Квантовая электродинамика* (Физматлит, М., 1989) [V.B. Berestetskii, E.M. Lifshitz, L.P. Pitaevskii. *Quantum Electrodynamics* (*Course of Theoretical Physics Volume 4*), 2nd ed. (Butterworth-Heinemann, 1982)]

[8] О. Маделунг. *Теория твердого тела* (Наука, М., 1980) [пер. с нем. O. Madelung. *Festkorpertheorie I, II* (Springer-Verlag, Berlin, 1972)]

[9] А.И. Ахиезер, С.В. Пелетминский. *Методы статистической физики* (Наука, М., 1977). [A.I. Akhieser, S.V. Peletminsriy. *Methods of Statistical Physics* (Nauka, M., 1977)]

[10] R. Kubo. J. Phys. Soc. Jpn., **12** (6), 570 (1957). DOI: 10.1143/JPSJ.12.570.M.A.

[11] М.А. Леонтович. *Введение в термодинамику, статистическая физика* (Наука, М., 1983) [M.A. Leontovich. *An Introduction to Thermodynamics, Statistical Physics* (Nauka, M., 1983)]

[12] И.А. Квасников. *Теория равновесных систем: Статистическая физика* (Едиториал УРСС, М., 2002) [I.A. Kvasnikov. *A Theory of Equilibrium Systems: Statistical Physics* (Editorial, M., 2002)]

[13] S. Daimon, R. Iguchi, T. Hioki, E. Saitoh, K. Uchida. Nature Communications, **7**, 13754 (2016). DOI: 10.1038/ncomms13754

[14] M. Weiler, M. Althammer, M. Schreier, J. Lotze, M. Pernpeintner, S. Meyer, H. Huebl, R. Gross, A. Kamra, J. Xiao, Y.-T. Chen, H.J. Jiao, G.E.W. Bauer, S.T.B. Goennenwein. Phys. Rev. Lett., **111**, 176601 (2013). DOI: 10.1103/PhysRevLett.111.176601

[15] Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский. *Физическая кинетика* (Физматлит, М., 1979) [E.M. Lifshitz, L.P. Pitaevskii. *Physical Kinetics*, (*Course of Theoretical Physics Volume 10*) (Butterworth-Heinemann, 1981)]

[16] В.Ю. Шишков, Е.С. Андрианов, А.А. Пухов, А.П. Виноградов, А.А. Лисянский. УФН, **189** (5), 544 (2019). DOI: 10.3367/UFNr.2018.06.038359. [V.Yu. Shishkov, E.S. Andrianov, A.A. Pukhov, A.P. Vinogradov, A.A. Lisyansky. Physics-Uspekhi, **62** (5), 510 (2019). DOI: 10.3367/UFNe.2018.06.038359]

[17] Д.Н. Зубарев, В.Г. Морозов, Г. Репке. *Статистическая механика неравновесных процессов* (Физматлит, М., 2002), т. 1. [Пер. с англ. D. Zubarev, V. Morozov, G. Ropke. *Statistical Mechanics of Nonequilibrium Processes* (Akademie Verlag, 1997), v. 1.]

[18] В.К. Игнатьев, С.В. Перченко, Д.А. Станкевич. Письма в ЖТФ, **49** (6), 25 (2023). DOI: 10.21883/PJTF.2023.06.54812.19437