DOI: 10.17725/rensit.2023.15.385

Спинтроника немагнитных хиральных сред на примере эффекта Зеебека

Игнатьев В.К., Перченко С.В., Станкевич Д.А.
Волгоградский государственный университет, https://volsu.ru/
Волгоград 400062, Российская Федерация
E-mail: vkignatjev@yandex.ru, perchenko@volsu.ru, dimon50002004@yandex.ru

Поступила 12.07.2023, рецензирована 16.07.2023, принята 19.07.2023, опубликована 06.12.2023.
Представлена действительным членом РАЕН А.В. Андреевым

Аннотация: **Спиновый транспорт в хиральных материалах рассматривается как основное направление развития спинтроники. Экспериментальные работы по исследованию спинового эффекта Зеебека показывают, что в хиральных материалах удается добиться эффективной генерации спин-поляризованного тока на расстояниях до нескольких миллиметров. В представленной работе развит теоретический подход для описания спинового эффекта Зеебека, основанный на спиновом гамильтониане для электронов проводимости в хиральной среде. С учетом этого гамильтониана получено уравнение динамики среднего по поликристаллическому образцу спина электрона. В приближении идеального ферми-газа и локально-квазиравновесного распределения построен оператор плотности спина электронов проводимости. Показано, что усреднение по случайно ориентированным кристаллитам не разрушает спиновое упорядочивание при сильном спин-орбитальном взаимодействии, и градиент температуры генерирует спиновую поляризацию, направленную преимущественно вдоль градиента температуры. Спиновая поляризация по описанному в работе механизму не требует внешних магнитных полей и остаточной намагниченности и поэтому не создает помех при работе в микро- и нано-размерных структурах спинтроники. Поскольку спиновый эффект Зеебека является взаимным со спиновым эффектом Пельтье, представленный в работе теоретический подход может составить основу новых методов управления потоками тепла в системах спинтроники.**

Ключевые слова: **спинтроника, спиновый эффект Зеебека, спин-орбитальное взаимодействие, хиральный кристалл, поликристаллический проводник.**

PACS: 67.57.Lm, 72.25.Ba, 75.76.+j

Благодарности: 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.

Для цитирования: Игнатьев В.К., Перченко С.В., Станкевич Д.А. Спинтроника немагнитных хиральных сред на примере эффекта Зеебека. *РЭНСИТ: Радиоэлектроника. Наносистемы. Информационные технологии,* 2023, 15(4):385-392. DOI: 10.17725/rensit.2023.15.385.

Spintronics of non-magnetic chiral media on the example of the Seebeck effect

Vyacheslav K. Ignatjev, Sergey V. Perchenko, Dmitry A. Stankevich
Volgograd State University, https://volsu.ru/
Volgograd 400062, Russian Federation
E-mail: vkignatjev@yandex.ru, perchenko@volsu.ru, dimon50002004@yandex.ru

Received July 12, 2023, peer-reviewed July 16, 2023, accepted July 19, 2023, published December 06, 2023.

Abstract: **Spin transport in chiral materials is considered as the main direction for the spintronics development. Experimental work on the study of the spin Seebeck effect shows that in chiral materials it is possible to achieve effective generation of spin-polarized current at distances up**

to several millimeters. In the presented work, we develop a theoretical approach to describe the spin Seebeck effect based on the spin Hamiltonian for conduction electrons in a chiral medium. Taking into account this Hamiltonian, the equation of electron spin dynamics averaged over the polycrystalline sample is obtained. In the approximation of ideal Fermi-gas and local-quasi-equilibrium distribution, the spin density operator of conduction electrons is constructed. It is shown that averaging over randomly oriented crystallites does not destroy spin ordering at strong spin-orbit interaction, and the temperature gradient generates spin polarization directed predominantly along the temperature gradient. Spin polarization by the described in the paper mechanism does not require external magnetic fields and remanent magnetization and therefore does not interfere with the operation of micro- and nanosized structures of spintronics. Since the spin Seebeck effect is reciprocal with the spin Peltier effect, the theoretical approach presented in this work can form the basis of new methods for controlling heat flow in spintronics systems.

Keywords: **spintronics, spin Seebeck effect, spin-orbit interaction, chiral crystal, polycrystalline conductor**

PACS: 67.57.Lm, 72.25.Ba, 75.76.+j

Acknowledgments: The research was carried out of the funds of the Russian Science Foundation grant № 22-22-20035 (https://rscf.ru/en/project/22-22-20035/), as well as the funds of the Volgograd region budget resources.

For citation: Vyacheslav K. Ignatjev, Sergey V. Perchenko, Dmitry A. Stankevich. Spintronics of non-magnetic chiral media on the example of the Seebeck effect. *RENSIT: Radioelectronics. Nanosystems. Information Technologies,* 2023, 15(4):385-392e. DOI: 10.17725/rensit.2023.15.385.

Содержание

1. **Введение (386)**
2. **Построение модели (387)**
3. **Спинтроника хиральных сред (388)**
4. **Заключение (390)**

Литература (391)

1. ВВЕДЕНИЕ

Важнейшим направлением современной спинтроники является генерация спиновых потоков в проводниках и полупроводниках с целью их использования в различного рода устройствах микроэлектроники [1]. Традиционные методы, основанные на спин-зависимом рассеянии в материалах с сильным спин-орбитальным взаимодействием, например в платине, обеспечивают долю спин-поляризованного тока менее процента с длиной когерентности порядка десятков нанометров. Этого достаточно для исследований спиновых эффектов в наноструктурах, но не для информационных и биотехнологий. В работе [2] показано, что в условиях неоднородного кручения в стационарном случае средний спин электронов проводимости ориентирован преимущественно вдоль вектора плотности зарядового тока. Максимальное значение величины спин-орбитального взаимодействия наблюдается, когда ось кручения ортогональна вектору плотности тока, и может достигаться полная спиновая поляризация. Однако этот метод энергозатратный, эффективность спиновой поляризации быстро падает с увеличением частоты управляющих воздействий. Это обстоятельство также ограничивает применение управления динамикой спиновой поляризации электрическими и механическими воздействиями в современной наноэлектронике.

На начальном этапе спинтроники в качестве способа эффективной генерации спин-поляризованного тока на расстояниях до нескольких миллиметров рассматривался спиновый эффект Зеебека (СЭЗ) [3]. Этот эффект, заключающийся в вызванной градиентом температуры генерации спинового тока, был первоначально открыт в проводящих ферромагнитных металлах [4]. Авторы объяснили этот эффект магнонными и фононными степенями свободы [5]. В дальнейшем спиновый эффект Зеебека был обнаружен в немагнитных материалах [6-8]. Теоретическая модель СЭЗ в парамагнитном диэлектрике была экспериментально подтверждена [9]. Микроскопическая теория спинового транспорта, обусловленного градиентом температуры, в ферромагнетиках показала, что для генерации спинового тока градиент температуры эквивалентен электрическому полю [10]. Аналогичные выводы сделаны в работе [11].

Следует отметить, что экспериментально исследованный СЭЗ, по сути, является магнитотермогальваническим эффектом. Он проявляется в парамагнетиках во внешнем магнитном поле или в намагниченных ферромагнетиках. Вектор магнитной индукции или остаточной намагниченности задает выделенное направление в изотропном веществе. При этом управление спиновой поляризацией магнитным воздействием является еще более медленным и энергозатратным, чем электрическое и механическое управление, предложенное в работе [2], где выделенное направление задает вектор кручения. Общая модель спинового эффекта Зеебека в немагнитных материалах в настоящее время отсутствует.

Новые возможности для эффективной генерации спиновых токов в устройствах спинтроники открывает экспериментально обнаруженная активация СЭЗ в немагнитных материалах потоком хиральных фононов [8]. По мнению авторов обладающие угловым моментом хиральные фононы нарушают симметрию материала и создают возможность генерации спинового тока при наличии градиента температуры. Такое нарушение симметрии существует без внешних воздействий в энантиочистых хиральных кристаллах, например в WSe_2. В настоящее время применение хиральных сред рассматривается как основное направление развития спинтроники [12]. Для эффективного управления большими плотностями спинового тока управляющий элемент должен быть не тонкопленочным, а массивным. Поэтому представляет интерес модель СЭЗ в немагнитных поликристаллических структурах

2. ПОСТРОЕНИЕ МОДЕЛИ

Рассмотрим термически индуцированную поляризацию спина электрона проводимости в однородном и изотропном поликристалле. Взаимодействие коллективизированного электрона с кристаллическим полем выбирается в виде спин-орбитального взаимодействия с ионами решётки, то есть релятивистских поправок во втором порядке по величине $1/c$, где c – скорость света.

Спин-орбитальная добавка в энергию электрона в поле кристаллита, содержащего N одинаковых ионов с эффективным зарядом $+Ze$ и координатами r_l имеет вид [13]

$$\hat{V} = \frac{\hbar e}{2m^2c^2}\left[\mathbf{E}\times\hat{\mathbf{p}}\right]\hat{\mathbf{s}}, \quad \mathbf{E}(\mathbf{r}) = -\frac{eZ}{4\pi\varepsilon_0}\sum_{l=1}^{N}\frac{\mathbf{r}-\mathbf{r}_l}{\left|\mathbf{r}-\mathbf{r}_l\right|^3}. \qquad (1)$$

Здесь m – масса электрона с зарядом $-e$, ħ – постоянная Дирака (приведенная постоянная Планка), ε_0 – электрическая постоянная. Величину эффективного заряда Z можно оценить, приравняв координату максимума радиальной компоненты водородоподобной волновой функции к ковалентному радиусу атома. Например, для платины радиус атома равен $1.39\cdot10^{-10}$ м, что для $6s$ оболочки соответствует $Z \approx 22.45$.

Построим спиновый гамильтониан возмущения (1) для электрона проводимости, усреднив его по координатам [14]. Запишем волновую функцию электрона проводимости с волновым вектором $\mathbf{k}$ в виде функции Ванье [15]

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

где $\Psi(\mathbf{r})$ – атомарная функция электрона, $\mathbf{R}_n$ – вектор трансляции. Выполнив замену переменных $\mathbf{r} - \mathbf{r}_l \to \mathbf{r}$, получаем

$$\hat{V}_{\mathbf{k}} = -\frac{\hbar^2 e^2 Z\hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{k}}}{8\pi\varepsilon_0 m^2c^2N}\sum_{n,m,l=1}^{N}\exp\left(i\mathbf{k}\left(\mathbf{R}_n-\mathbf{R}_m\right)\right)\times$$
$$\times\left\langle\Psi\left(\mathbf{r}+\mathbf{r}_l-\mathbf{R}_m\right)\right|\frac{\hat{\mathbf{l}}}{r^3}\left|\Psi\left(\mathbf{r}+\mathbf{r}_l-\mathbf{R}_n\right)\right\rangle.$$

В приближении ближайших соседей оставим в правой части только слагаемые, для которых $\mathbf{R}_n - \mathbf{r}_l = \mathbf{R}_m - \mathbf{r}_l = 0$, или $\mathbf{R}_n - \mathbf{r}_l = \mathbf{a}_\nu$, а $\mathbf{R}_m - \mathbf{r}_l = 0$, или $\mathbf{R}_n - \mathbf{r}_l = 0$, а $\mathbf{R}_m - \mathbf{r}_l = \mathbf{a}_\nu$, где $\mathbf{a}_\nu$ – вектор, проведенный к ближайшему соседу. В первом порядке по $\mathbf{ka}_\nu$ получаем

$$\hat{V}_{\mathbf{k}} = \hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{k}}\left(\mathbf{I}_0 + \mathbf{I}_1 + \mathbf{I}_{\mathbf{k}}\right), \quad \mathbf{I}_0 = -\frac{\hbar^2 e^2 Z}{8\pi\varepsilon_0 m^2 c^2}\langle\Psi|\frac{\hat{\mathbf{l}}}{r^3}|\Psi\rangle,$$

$$\Psi_\nu(\mathbf{r}) = \Psi(\mathbf{r}+\mathbf{a}_\nu), \; \mathbf{I}_1 = -\frac{\hbar^2 e^2 Z}{4\pi\varepsilon_0 m^2 c^2}\mathrm{Re}\sum_\nu\langle\Psi_\nu|\frac{\hat{\mathbf{l}}}{r^3}|\Psi\rangle, \quad (2)$$

$$\mathbf{I}_{\mathbf{k}} = -\frac{\hbar^2 e^2 Z}{4\pi\varepsilon_0 m^2 c^2}\mathrm{Im}\sum_\nu(\mathbf{ka}_\nu)\langle\Psi_\nu|\frac{\hat{\mathbf{l}}}{r^3}|\Psi\rangle.$$

Для *s*-электронов векторы $\mathbf{I}_0$, $\mathbf{I}_1$, $\mathbf{I}_{\mathbf{k}}$ равны нулю. В металлах зоны проводимости перекрываются, и часть электронов проводимости может быть образована коллективизацией *p*-электронов.

Рассмотрим макроскопическую область поликристаллического металла. Для любого состояния электрона можно выбрать направление оси квантования (оси *z*) так, чтобы проекция его орбитального момента на эту ось имела определённое значение $l_z = l$. Энергия электрона в атоме, находящемся в электрическом поле зависит от проекции его орбитального момента на направление поля [14]. Поэтому ориентация атомных орбиталей определяется положением кристаллофизических осей кристаллита, и можно считать, что векторы $\mathbf{I}_0$ и $\mathbf{I}_1$ в соотношениях (2) записаны в системе координат, связанной с осями симметрии кристаллита.

Введем лабораторную систему координат, связанную с приборами, которые задают ток проводимости и измеряют компоненты спина. Поэтому волновой вектор и вектор спина электронов проводимости следует считать заданными в лабораторной системе координат. Компоненты векторов и тензоров в лабораторной системе будем обозначать не штрихованными индексами, а в системе координат, связанной с кристаллическими осями домена, штрихованными.

Преобразуем векторы $\mathbf{I}_0$ и $\mathbf{I}_1$ в лабораторную систему координат $I_\alpha = p_{\alpha\alpha'} \cdot I_{\alpha'}$, где $p_{\alpha\alpha'}$ – унитарная матрица поворота. Матрицу поворота удобно выразить через углы Эйлера:

где $0 \le \alpha \le 2\pi$ – угол прецессии, $0 \le \beta \le \pi$ – угол нутации, $0 \le \gamma \le 2\pi$ – угол собственного вращения. Тогда для макроскопически изотропного проводника усреднение по случайным ориентациям кристаллита сводится к усреднению по случайным равномерно распределенным углам Эйлера.

Усредним векторы $\mathbf{I}_0$ и $\mathbf{I}_1$ по случайным ориентациям кристаллитов. В изотропном поликристалле $\langle\mathbf{I}_0\rangle = \langle\mathbf{I}_1\rangle = 0$. Для симметричного кристалла, в котором каждому ближайшему соседу с вектором $\mathbf{a}_\nu$ соответствует сосед с вектором $\mathbf{a}_{-\nu} = -\mathbf{a}_\nu$, последнее соотношение формулы (2) принимает вид

$$\mathbf{I}_{\mathbf{k}} = -\frac{\hbar^2 e^2 Z}{4\pi\varepsilon_0 m^2 c^2}\mathrm{Im}\sum_{\nu>0}(\mathbf{ka}_\nu)\langle\Psi_\nu - \Psi_{-\nu}|\frac{\hat{\mathbf{l}}}{r^3}|\Psi\rangle. \quad (3)$$

В симметричном кристалле функция $\Psi_\nu - \Psi_{-\nu}$ имеет четность, противоположную четности функции Ψ. Поэтому все слагаемые в (6) для недеформированного кристалла равны нулю.

При дисторсии $r'_\alpha = r_\alpha + u_\alpha(\mathbf{r})$ получаем в (3)

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

Здесь $\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}$ – тензор Леви-Чивитты. При неоднородной дисторсии кручения вдоль оси $\mathbf{n}$ вида $\mathbf{\Omega}(\mathbf{r}) = \mathbf{n}(\mathbf{rn})\omega$, получаем

$$I_{\mathbf{k}\alpha} = -\frac{\hbar^2 e^2 Z\omega}{4\pi\varepsilon_0 m^2 c^2}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}n_\beta n_\delta k_\sigma a_{\nu\sigma}\times$$
$$\times\mathrm{Im}\langle\Psi_\nu - \Psi_{-\nu}|\frac{r_\gamma\hat{l}_\delta}{r^3}|\Psi\rangle, \quad (4)$$

где подразумевается суммирование по ν по парам ближайших соседей.

3. СПИНТРОНИКА ХИРАЛЬНЫХ СРЕД

Произведение величины ω на расстояние a_ν до ближайшего соседа в направлении оси кручения $\mathbf{n}$ характеризует кручение элементарной ячейки, то есть угол поворота ее кристаллографических плоскостей относительно соседних. Такое кручение

$$p_{ij} = \begin{bmatrix} \cos(\alpha)\cos(\gamma) - \sin(\alpha)\cos(\beta)\sin(\gamma) & -\cos(\alpha)\sin(\gamma) - \sin(\alpha)\cos(\beta)\cos(\gamma) & \sin(\alpha)\sin(\beta) \\ \sin(\alpha)\cos(\gamma) + \cos(\alpha)\cos(\beta)\sin(\gamma) & -\sin(\alpha)\sin(\gamma) + \cos(\alpha)\cos(\beta)\cos(\gamma) & -\cos(\alpha)\sin(\beta) \\ \sin(\beta)\sin(\gamma) & \sin(\beta)\cos(\gamma) & \cos(\beta) \end{bmatrix},$$

существует в хиральных кристаллах, таких как WSe_2 и слоистые гибридные перовскиты [10]. Поэтому можно считать, что вектор $\mathbf{n}$, как и векторы $\mathbf{a}_\nu$ заданы в системе кристаллофизических осей, а вектор $\mathbf{k}$ – в лабораторной системе. Тогда формулу (4) можно записать в виде

$$\langle I_{\mathbf{k}\alpha}\rangle = -\frac{\hbar^2 e^2 Z\omega}{4\pi\varepsilon_0 m^2 c^2}\langle p_{\alpha\alpha'} p^{-1}_{\sigma'\sigma}\rangle \varepsilon_{\alpha'\beta'\gamma'} n_{\beta'} n_{\delta'} k_\sigma a_{\nu\sigma'} \times \\ \times \mathrm{Im}\langle \Psi_\nu - \Psi_{-\nu} | \frac{r_{\gamma'}\hat{l}_{\delta'}}{r^3} | \Psi\rangle. \tag{5}$$

Обозначим $\mathbf{s}_\mathbf{k}(t) = \langle \hat{\mathbf{s}}_\mathbf{k}(t)\rangle = \mathrm{Sp}(\hat{\mathbf{s}}_\mathbf{k}(t)\hat{\rho}(t))$, где $\hat{\rho}(t)$ – оператор плотности. Тогда

$$\frac{d\mathbf{s}_\mathbf{k}}{dt} = \left\langle \frac{d\hat{\mathbf{s}}_\mathbf{k}}{dt}\right\rangle + \mathrm{Sp}\left(\hat{\mathbf{s}}_\mathbf{k}\frac{d\hat{\rho}}{dt}\right). \tag{6}$$

Динамика спина электрона проводимости, создаваемая возмущением (2), описывается уравнением [14]

$$\frac{d\hat{s}_{\mathbf{k}\alpha}}{dt} = \frac{i}{\hbar}\left[\hat{V}_\mathbf{k}, \hat{s}_\alpha\right] = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} I_{\mathbf{k}\beta}\hat{s}_{\mathbf{k}\gamma}, \\ \left\langle \frac{d\hat{\mathbf{s}}_\mathbf{k}}{dt}\right\rangle = \left[\langle \mathbf{I}_\mathbf{k}\rangle \times \mathbf{s}_\mathbf{k}\right] + \left\langle\left[\delta\mathbf{I}_\mathbf{k}\times\delta\hat{\mathbf{s}}_\mathbf{k}\right]\right\rangle, \tag{7} \\ \delta\mathbf{I}_\mathbf{k} = \mathbf{I}_\mathbf{k} - \langle \mathbf{I}_\mathbf{k}\rangle, \quad \delta\hat{\mathbf{s}}_\mathbf{k} = \hat{\mathbf{s}}_\mathbf{k} - \langle\hat{\mathbf{s}}_\mathbf{k}\rangle.$$

В стационарном состоянии, когда $d\hat{\rho}/dt = 0$, в правой части уравнения (6) остается только первое слагаемое, а уравнение (7) принимает вид

$$\frac{d\mathbf{s}_\mathbf{k}}{dt} = \left[\langle \mathbf{I}_\mathbf{k}\rangle \times \mathbf{s}_\mathbf{k}\right] + \left\langle\left[\delta\mathbf{I}_\mathbf{k}\times\delta\hat{\mathbf{s}}_\mathbf{k}\right]\right\rangle. \tag{8}$$

Модуль среднего спина не сохраняется из-за второго слагаемого в правой части (8). Поэтому его можно рассматривать как релаксационное и записать в виде $-(\mathbf{s}_\mathbf{k} - \mathbf{s}^e_\mathbf{k})/\tau$, где $\mathbf{s}^e_\mathbf{k}$ – равновесное значение среднего по образцу спина, τ – время продольной релаксации.

В отсутствии воздействий устанавливается квазиравновесное распределение с оператором плотности [16]

$$\hat{\rho}^q(t) = \exp\left\{-\Phi(t) - \int_V \theta(t,\mathbf{r})\hat{h}_\mathbf{k}(t,\mathbf{r})d^3r\right\}, \\ \Phi(t) = \ln\mathrm{Sp}\exp\left\{-\int_V \theta(t,\mathbf{r})\hat{h}_\mathbf{k}(t,\mathbf{r})d^3r\right\}. \tag{9}$$

Здесь $\theta(t,\mathbf{r}) = 1/(k_B T(t,\mathbf{r}))$, k_B – постоянная Больцмана, $T(t, \mathbf{r})$ – локальная температура, $\hat{h}_\mathbf{k}(t,\mathbf{r})$ – оператор плотности гамильтониана, удовлетворяющий соотношениям [17]

$$\hat{H}_\mathbf{k}(t) = \int_V \hat{h}_\mathbf{k}(t,\mathbf{r})d^3r, \quad \frac{\partial\hat{h}_\mathbf{k}(t,\mathbf{r})}{\partial t} = -\mathrm{div}\,\hat{\mathbf{q}}_\mathbf{k}(t,\mathbf{r}), \tag{10}$$

где $\hat{\mathbf{q}}_\mathbf{k}(t,\mathbf{r})$ – оператор плотности потока гамильтониана.

Воспользуемся для электронов проводимости в металлах приближением идеального ферми-газа. Применимость этой модели для электронов проводимости в металлах обоснована тем, что термодинамика ферми-системы определяется ее микроскопической структурой только вблизи поверхности Ферми и совершенно не зависит от того, что делается за пределами размытия порядка $k_B T$, где k_B – постоянная Больцмана, T – температура. В результате, чем плотнее ферми-газ в металле, тем он идеальнее [18]. Экспериментальные исследования температурной зависимости электронной теплоемкости в металлах показывают, что она хорошо соответствует модели идеального ферми-газа со скалярной эффективной массой m^*. Для многих металлов $m^* \approx m$. Такая модель позволяет описывать коллектив электронов с волновым вектором $\mathbf{k}$ своим оператором плотности и положить $\hat{\mathbf{q}}_\mathbf{k}(t,\mathbf{r}) = \hbar\mathbf{k}\,\hat{h}_\mathbf{k}(t,\mathbf{r})/m^*$. Тогда из (9) и (10) получаем

$$\frac{d\hat{\rho}^q}{dt} = -\hat{\rho}^q\left\{\frac{d\Phi}{dt} + \int_V \frac{\partial\theta}{\partial t}\hat{h}_\mathbf{k} d^3r - \right. \\ \left. - \int_V \mathrm{div}(\theta\hat{\mathbf{q}}_\mathbf{k})d^3r + \int_V \hat{\mathbf{q}}_\mathbf{k}\,\mathrm{grad}\,\theta d^3r\right\}. \tag{11}$$

Аналитическое усреднение уравнения (5) дает $\langle \mathbf{I}_\mathbf{k}\rangle = J\mathbf{k}$, где

$$J = \frac{\hbar^2 e^2 Z\omega}{24\pi\varepsilon_0 m^2 c^2}\mathrm{Im}\langle \Psi_\nu - \Psi_{-\nu} | \frac{(\mathbf{n}\hat{\mathbf{l}})[\mathbf{a}_\nu\times\mathbf{n}]\mathbf{r}}{r^3} | \Psi\rangle.$$

Подставим соотношение (11) во второе слагаемое в правой части уравнения (6), ограничиваясь слагаемыми, пропорциональными $\partial\theta/\partial\mathbf{r}$. С учетом (10) получим

$$\frac{d\mathbf{s}_\mathbf{k}}{dt} = J[\mathbf{k}\times\mathbf{s}_\mathbf{k}] - \frac{\mathbf{s}_\mathbf{k} - \mathbf{s}^e_\mathbf{k}}{\tau} - \frac{\hbar}{m^*}\left\langle \hat{\mathbf{s}}_\mathbf{k}\hat{H}_\mathbf{k}\right\rangle^e \mathbf{k}\frac{\partial\theta}{\partial\mathbf{r}}. \tag{12}$$

В отсутствии магнитного поля невозмущенный гамильтониан идеального ферми-газа не зависит от спиновых переменных, поэтому $\left\langle \hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{k}} \hat{H}_{\mathbf{k}} \right\rangle^e = \left\langle \hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{k}} \right\rangle^e \left\langle \hat{H}_{\mathbf{k}} \right\rangle^e = \mathbf{s}^e_{\mathbf{k}} H(\mathbf{k})$.

Введем оператор плотности спина электронов проводимости

$$\hat{\mathbf{s}}(t) = \int_V \hat{\mathbf{s}}(t,\mathbf{r}) d^3 r,$$

$$\hat{\mathbf{s}}(t,\mathbf{r}) = \frac{1}{8\pi^3} \int \hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{k}}(t) f(\mathbf{k},\mathbf{r}) d^3 k, \qquad (13)$$

$$f(\mathbf{k},\mathbf{r}) = \left[\exp\left(\left(H(\mathbf{k}) - F(\mathbf{r}) \right) \theta(\mathbf{r}) \right) + 1 \right]^{-1}.$$

Для изотропного ферми-газа $H(\mathbf{k}) = \hbar^2 k^2 / (2m^*)$. Энергия Ферми в (13) определяется как $F(\mathbf{r}) = \hbar^2 k_F^2(\mathbf{r}) / (2m^*)$, $k_F^3(\mathbf{r}) = 6\pi^2 n_e(\mathbf{r})$, где $n_e(\mathbf{r})$ – плотность электронов проводимости. При усреднении вида (13) первое слагаемое в правой части уравнения (12) равно нулю.

Стационарное состояние в (8) соответствует ориентации $\mathbf{s}_{\mathbf{k}}$ вдоль вектора $\mathbf{k}$. Усредняя возмущение (1) по квантовому состоянию и по случайным ориентациям, получим, что добавка к энергии состояний, когда спин ориентирован параллельно или антипараллельно вектору $\mathbf{k}$, составляет $\pm\hbar Jk/2$. Тогда

$$\mathbf{s}^e = \frac{1}{16\pi^3} \int \frac{\mathbf{k}}{k} \left\{ f\left(H(k^2) - \frac{\hbar J k}{2} \right) - \right.$$
$$\left. - f\left(H(k^2) + \frac{\hbar J k}{2} \right) \right\} d^3 k = 0.$$

Среднее по волновому вектору последнего слагаемого в правой части (12) при этом равно

$$\frac{\hbar^2 J}{16\pi^3 m^*} \int k \frac{df}{dH} \frac{\mathbf{k}}{k} H(k^2) \left(\mathbf{k} \frac{\partial \theta}{\partial \mathbf{r}} \right) d^3 k =$$
$$= \frac{3F(\mathbf{r}) J}{2\pi} n_e(\mathbf{r}) \frac{\partial \theta}{\partial \mathbf{r}},$$

и установившаяся спиновая поляризация параллельна градиенту температуры

$$\mathbf{s}(\mathbf{r}) = \frac{3F(\mathbf{r}) J \tau}{2\pi k_B} \frac{n_e(\mathbf{r})}{T^2(\mathbf{r})} \frac{\partial T}{\partial \mathbf{r}}. \qquad (14)$$

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Формула (14) описывает так называемый продольный спиновый эффект Зеебека, когда направление спиновой поляризации определяется градиентом температуры даже в отсутствии зарядового тока. Разумеется, градиент температуры создаст в проводнике и классический (зарядовый) эффект Зеебека. Поэтому, если проводник включен в замкнутую цепь, в нем возникнет зарядовый ток с продольной спиновой поляризацией. Зарядовый ток в проводнике может создаваться и внешним источником тока, что открывает возможность быстрого электрического управления спиновой поляризацией. Высокая эффективность такого управления обусловлена тем, что в хиральных средах кручение элементарной ячейки может достигать нескольких радиан – это на много порядков больше, чем можно получить механическими напряжениями [2] без необратимого разрушения. Возможность генерации спиновой поляризации на расстоянии нескольких миллиметров в поликристаллических хиральных средах показана в работе [19].

Спиновая поляризация по описанному в работе механизму не требует внешних магнитных полей и остаточной намагниченности и поэтому не создает помех при работе в микро- и нано-размерных структурах спинтроники. Источником работы, необходимой для спиновой поляризации по предложенному механизму являются тепловые потоки в среде, обусловленные градиентом температуры. Однако, функционирование устройств спинтроники, как и любых устройств микроэлектроники, всегда сопровождается генерацией тепловых потоков и градиентов температур. В этом смысле энергия, затрачиваемая на спиновую поляризацию по предложенному механизму в системах спинтроники, является «бесплатной».

Кроме того, спиновый эффект Зеебека является взаимным со спиновым эффектом Пельтье, соотношения взаимности для них, по крайней мере в магнитных диэлектриках, были экспериментально верифицированы

[20]. Общие соотношения взаимности между спиновыми эффектами Пельтье и Зеебека, в том числе для проводящих сред в присутствии механических деформаций, получены в работе [21]. Это позволяет предположить, что представленный в работе динамический эффект (12) может составить основу новых методов управления потоками тепла в системах спинтроники.

ЛИТЕРАТУРА

1. Atsufumi Hirohata, Keisuke Yamada, Yoshinobu Nakatani, Lucian Prejbeanu, Bernard Diény, Philipp Pirro, Burkard Hillebrands. Review on Spintronics: Principles and Device Applications. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials,* 2020, 509(12):166711, 1-28; https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2020.166711.
2. Игнатьев ВК, Лебедев НГ, Перченко СВ, Станкевич ДА. Управление динамикой спиновой поляризации электронов проводимости электрическим и механическим воздействием. *РЭНСИТ: Радиоэлектроника. Наносистемы. Информационные технологии*, 2023, 15(2):133-138; doi: 10.17725/rensit.2023.15.133.
3. Sadamichi Maekawa, Sergio O. Valenzuela, Eiji Saitoh, and Takashi Kimura (Eds.). *Spin Current.* Oxford, University Press, 2012, 461 p.
4. Uchida K, Takahashi S, Harii K, Ieda J, Koshibae W, Ando K, Maekawa S, Saitoh E. Observation of the spin Seebeck effect. *Nature*, 2008, 455, 778-781; doi: 10.1038/nature07321.
5. Adachi H, Uchida K, Saitoh E, Maekawa S. Theory of the spin Seebeck effect. *Reports on Progress in Physics,* 2013, 76(3):036501. doi: 10.1088/0034-4885/76/3/036501.
6. Capps J, Marinescu DC, Manolescu A. Spin Seebeck effect in an (In,Ga)As quantum well with equal Rashba and Dresselhaus spin-orbit couplings. *Phys. Rev. B.,* 2016, 93:085307; doi: 10.1103/PhysRevB.93.085307.
7. Yamada K, Kurokawa Y, Kogiso K, Yuasa H, Shima M. Observation of Longitudinal Spin Seebeck Voltage in YIG Films Chemically Prepared by Co-Precipitation and Spin Coating. *IEEE Trans. on Mag.*, 2019, 55(2):4500104; doi: 10.1109/TMAG.2018.2865199.
8. Kyunghoon Kim, Eric Vetter, Liang Yan, Cong Yang, Ziqi Wang, Rui Sun, Yu Yang, Andrew H. Comstock, Xiao Li, Jun Zhou, Lifa Zhang, Wei You, Dali Sun & Jun Liu. Chiral-phonon-activated spin Seebeck effect. *Nature Materials,* 2023, 22:322-328; https://doi.org/10.1038/s41563-023-01473-9.
9. Oyanagi K, Takahashi S, Kikkawa T, Saitoh E. Mechanism of paramagnetic spin Seebeck effect. *Phys. Rev. B,* 2023, 107:014423; doi: 10.1103/PhysRevB.107.014423.
10. Takezoe Y, Hosono K, Takeuchi A, Tatara G. Theory of spin transport induced by a temperature gradient. *Phys. Rev. B*, 2010, 82:094451; https://doi.org/10.1103/PhysRevB.82.094451.
11. Бебенин НГ. Влияние электрического тока на спиновую поляризацию электронов в материалах с неоднородной намагниченностью. ЖЭТФ, 2022, 161(5):737-745; doi: 10.31857/S004445102205011X.
12. Yu T, Luo Z, Bauer GEW. Chirality as generalized spin–orbit interaction in spintronics. *Physics Reports*, 2023, 1009:1-115; https://doi.org/10.1016/j.physrep.2023.01.002.
13. Берестецкий ВБ, Лифшиц ЕМ, Питаевский ЛП. Теоретическая физика. Т. IV. Квантовая электродинамика. М., Физматлит, 2002, 720 с..
14. Ландау ЛД, Лифшиц ЕМ. Теоретическая физика. Т. III. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М., Физматлит, 2004, 800 с.
15. Маделунг О. Теория твердого тела. М., Наука, 1980, 416 с.
16. Леонтович МА. Введение в термодинамику, статистическая физика. М., Наука, 1983, 416 с
17. Ахиезер АИ, Пелетминский СВ. Методы статистической физики. М., Наука, 1977, 368 с.
18. Квасников ИА. *Теория равновесных систем. Статистическая физика*. М., Едиториал УРСС. 2002, 240 с.
19. Shishidoa H, Sakai R, Hosaka Y, Togawaa Y. Detection of chirality-induced spin

polarization over millimeters in polycrystalline bulk samples of chiral disilicides $NbSi_2$ and $TaSi_2$. *Appl. Phys. Lett.*, 2021, 119(18):182403; doi: 10.1063/5.0074293.

20. Sola A, Basso V, Kuepferling M, Dubs C, Pasquale M. Experimental proof of the reciprocal relation between spin Peltier and spin Seebeck effects in a bulk YIG/Pt bilayer. *Scientific Reports,* 2019, 9(1):2047; https://doi.org/10.1038/s41598-019-38687-4.
21. Игнатьев ВК. Соотношения взаимности для открытых нелинейных систем в переменных полях. ЖТФ, 2022, 92(1):118-131; doi: 10.21883/JTF.2022.01.51861.126-21.

Игнатьев Вячеслав Константинович
д.ф.-м.н., профессор,
Волгоградский государственный университет
100, просп. Университетский, г. Волгоград, Россия
E-mail: vkignatjev@yandex.ru
Перченко Сергей Владимирович
к.ф.-м.н.
Волгоградский государственный университет
100, просп. Университетский, г. Волгоград, Россия
E-mail: perchenko@volsu.ru
Станкевич Дмитрий Александрович
к.ф.-м.н., доцент
Волгоградский государственный университет
100, просп. Университетский, г. Волгоград, Россия
E-mail: dimon50002004@yandex.ru.