DOI: https://doi.org/10.15688/mpcm.jvolsu.2023.4.5

УДК 538.915
ББК 22.317.23+22.314.7

Дата поступления статьи: 24.10.2023
Дата принятия статьи: 26.11.2023

УПРАВЛЕНИЕ ДИНАМИКОЙ СПИНОВОГО ТОКА В ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКОМ ПРОВОДНИКЕ С ХИРАЛЬНОЙ СТРУКТУРОЙ [1]

Вячеслав Константинович Игнатьев
Доктор физико-математических наук, профессор кафедры радиофизики,
Волгоградский государственный университет
vkignatjev@yandex.ru
просп. Университетский, 100, 400062 г. Волгоград, Российская Федерация

Сергей Владимирович Перченко
Кандидат физико-математических наук, доцент кафедры радиофизики,
Волгоградский государственный университет
perchenko@volsu.ru
https://orcid.org/0000-0003-4643-3015
просп. Университетский, 100, 400062 г. Волгоград, Российская Федерация

Дмитрий Александрович Станкевич
Кандидат физико-математических наук, доцент кафедры радиофизики,
Волгоградский государственный университет
stankevich@volsu.ru
https://orcid.org/0000-0003-0208-903X
просп. Университетский, 100, 400062 г. Волгоград, Российская Федерация

Аннотация. Получено уравнение для динамики среднего по кристаллиту спина электрона проводимости в поликристаллическом парамагнетике при наличии деформации и тока проводимости. Среднее значение вычисляется в смешанном состоянии с использованием волновой функции коллективизированного электрона проводимости. В результате аналитического усреднения спинового момента по случайно ориентированным кристаллитам при наличии дисторсии кручения получены уравнения для динамики спиновой поляризации и тензора плотности спинового тока. Из уравнений следует, что в стационарном случае спиновая поляризация будет ориентирована преимущественно вдоль вектора плотности тока проводимости. Проанализирована динамика спиновой поляризации в хиральных парамагнетиках, кристаллическая решетка которых может рассматриваться как элементарная решетка, искаженная дисторсией кручения. Показано, что несмотря на случайную ориентацию отдельных кристаллитов макроскопического образца, проекция спина вдоль направления зарядового тока остается отличной от нуля. Этот вывод согласуется с недавними экспериментальными результатами, полученными на макроскопических образцах дисилицида ниобия.

Ключевые слова: спиновый ток, спиновая поляризация, спиновый транспорт, стрейнтроника, спинтроника, хиральность.

Введение

Спиновая стрейнтроника, формирующаяся в настоящее время, возможно, создаст предпосылки для объединения активно развивающихся спинтроники, которая изучает использование спиновых потоков в микроэлектронике [10], и стрейнтроники, использующей физические эффекты в веществе, обусловленные деформациями [9], в новое направление технической электродинамики. Одна из ветвей стрейнтроники направлена на изучение влияния механических напряжений на электронные свойства вещества. 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 [12]. Оценки показывают, что это взаимодействие, как и обменное взаимодействие в рамках модели РККИ [13], может обеспечить когерентность спиновой поляризации на микроскопических расстояниях (порядка 0,1 мкм), но его не достаточно для эффективной макроскопической (порядка 1 мм) поляризации спиновых токов в поликристаллических образцах. В работе [4] показана возможность эффективной генерации спиновой поляризации в поликристаллических ферромагнитных образцах с помощью дисторсии кручения, ось которой перпендикулярна вектору плотности зарядового тока. Дисторсия кручения нарушает симметрию материала. Такое нарушение симметрии существует без внешних воздействий в энантиочистых хиральных кристаллах, например, в $\mathrm{MnO_2}$. В настоящее время применение хиральных сред рассматривается как основное направление развития спинтроники [15]. Такой подход создает предпосылки для управления значительными потоками спиновой поляризации в массивных образцах, а не только пленках.

1. Оператор плотности спинового тока

Будем рассматривать ансамбль электронов проводимости в некотором объеме V как открытую систему. Система обменивается энергией и веществом с термостатами и резервуарами частиц через контакты, то есть участки S_k ограничивающей систему поверхности S, в которых она контактирует с внешней средой. Гамильтониан и оператор спина электронов проводимости, не зависящие в представлении Шредингера явно от времени, в представлении взаимодействия можно описать квазилокальными операторами плотности

$$\hat{H}\left(t\right)=\int\limits_V \hat{h}\left(t,\mathbf{r}\right)d^3r+\hat{H}_r\left(t\right),\mathbf{S}\hat{\left(t\right)}=\int\limits_V \hat{\mathbf{s}}\left(t,\mathbf{r}\right)d^3r, \tag{1}$$

где $\hat{H}_r$ — релаксационный гамильтониан взаимодействия системы с внешней средой; V — объем системы. Квазилокальным является оператор $\hat{d}\,(t,\mathbf{r})$, матричный элемент которого в координатном представлении $d\left(t,\mathbf{r},\mathbf{r}^{'},\mathbf{r}^{''}\right)$ быстро убывает при удалении хотя бы одной из точек $\mathbf{r}'$ и $\mathbf{r}^{''}$ от точки $\mathbf{r}$ [1].

Для квазилокального оператора плотности спина можно ввести операторы спинового тока i-й компоненты, удовлетворяющие уравнению [1]:

$$i\hbar\frac{\partial\hat{s}_{\alpha}\,(t,\mathbf{r})}{\partial t}=\left[\hat{S}_{\alpha}\,(t)\,,\hat{h}_0\,(t,\mathbf{r})\right]-i\hbar\frac{\partial\hat{\upsilon}_{\alpha\beta}\,(t,\mathbf{r})}{\partial r_{\alpha}},\alpha,\beta=1,2,3, \tag{2}$$

здесь $\hat{h}_0\,(t,\mathbf{r})$ — плотность невозмущенного гамильтониана системы,

$$\hat{\upsilon}_{\alpha\beta}\,(t,\mathbf{r})=\frac{i}{\hbar}\int\limits_V r_{\beta}^{'}\int\limits_0^1\left[\hat{h}_0\left(t,\mathbf{r}-(1-\xi)\,\mathbf{r}^{'}\right),\hat{s}_{\alpha}\left(t,\mathbf{r}+\xi\mathbf{r}^{'}\right)\right]d\xi d^3r^{'}\ - \tag{3}$$

оператор тензора плотности спинового тока.

В представлении вторичного квантования плотность невозмущенного гамильтониана можно представить в виде

$$\hat{h}_0\,(t,\mathbf{r})=-\frac{\hbar^2}{2m}\hat{\psi}_{\sigma}^{+}\,(t,\mathbf{r})\,\Delta\hat{\psi}_{\sigma}\,(t,\mathbf{r})\,,\hat{\mathbf{s}}\,(t,\mathbf{r})=\hat{\psi}_{\sigma}^{+}\,(t,\mathbf{r})\,\mathbf{s}_{\sigma\sigma'}\hat{\psi}_{\sigma'}\,(t,\mathbf{r})\,. \tag{4}$$

Здесь $\hat{\psi}_{\sigma}\,(t,\mathbf{r})$ — полевой оператор электрона; m — его масса; σ — спиновая переменная; $\mathbf{s}_{\sigma\sigma'}$ — спиновая матрица. Соответственно, с учетом (4), коммутатор из уравнения (2) принимает вид

$$\begin{aligned}\left[\hat{\mathbf{s}}\left(t,\mathbf{r}^{'}\right),\hat{h}_0\,(t,\mathbf{r})\right]=\frac{\mathbf{s}_{\sigma\sigma'}\hbar^2}{2m}\Big(\hat{\psi}_{\sigma''}^{+}\,(t,\mathbf{r})\,\Delta\hat{\psi}_{\sigma''}\,(t,\mathbf{r})\,\hat{\psi}_{\sigma}^{+}\left(t,\mathbf{r}^{'}\right)\hat{\psi}_{\sigma'}\left(t,\mathbf{r}^{'}\right)-\\-\hat{\psi}_{\sigma}^{+}\left(t,\mathbf{r}^{'}\right)\hat{\psi}_{\sigma'}\left(t,\mathbf{r}^{'}\right)\hat{\psi}_{\sigma''}^{+}\,(t,\mathbf{r})\,\Delta\hat{\psi}_{\sigma''}\,(t,\mathbf{r})\Big).\end{aligned} \tag{5}$$

Перестановочные соотношения для полевых операторов электронов можно записать в виде $\hat{\psi}_{\sigma'}\left(t,\mathbf{r}^{'}\right)\hat{\psi}_{\sigma}^{+}\,(t,\mathbf{r})+\hat{\psi}_{\sigma}^{+}\,(t,\mathbf{r})\,\hat{\psi}_{\sigma'}\left(t,\mathbf{r}^{'}\right)=\delta\left(\mathbf{r}-\mathbf{r}^{'}\right)\delta_{\sigma\sigma'}$. Остальные антикоммутаторы равны нулю. Кроме того, $\hat{\psi}_{\sigma'}^{+}\left(t,\mathbf{r}^{'}\right)\Delta_{\mathbf{r}}\hat{\psi}_{\sigma}\,(t,\mathbf{r})\ =\ \Delta_{\mathbf{r}}\left(\hat{\psi}_{\sigma'}^{+}\left(t,\mathbf{r}^{'}\right)\hat{\psi}_{\sigma}\,(t,\mathbf{r})\right)$. Тогда уравнение (5) принимает вид

$$\begin{aligned}\left[\hat{\mathbf{s}}\left(t,\mathbf{r}^{'}\right),\hat{h}_0\,(t,\mathbf{r})\right]=-\frac{\hbar^2}{2m}\Big(\delta\left(\mathbf{r}-\mathbf{r}^{'}\right)\mathbf{s}_{\sigma\sigma''}\hat{\psi}_{\sigma}^{+}\left(t,\mathbf{r}^{'}\right)\Delta\hat{\psi}_{\sigma''}\,(t,\mathbf{r})-\\-\Delta_{\mathbf{r}}\delta\left(\mathbf{r}-\mathbf{r}^{'}\right)\mathbf{s}_{\sigma''\sigma'}\hat{\psi}_{\sigma''}^{+}\,(t,\mathbf{r})\,\hat{\psi}_{\sigma'}\left(t,\mathbf{r}^{'}\right)\Big).\end{aligned}$$

Соответственно,

$$\left[\hat{\mathbf{S}}\,(t)\,,\hat{h}_0\,(t,\mathbf{r})\right]=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\hat{\psi}_{\sigma}^{+}\,(t,\mathbf{r})\,\mathbf{s}_{\sigma\sigma'}\Delta\hat{\psi}_{\sigma'}\,(t,\mathbf{r})-\hat{\psi}_{\sigma}^{+}\,(t,\mathbf{r})\,\mathbf{s}_{\sigma\sigma'}\Delta\hat{\psi}_{\sigma'}\,(t,\mathbf{r})\right)=0,$$

и уравнение (1) принимает вид уравнения непрерывности

$$\frac{\partial\hat{s_{\alpha}}\,(t,\mathbf{r})}{\partial t}=-\frac{\partial\upsilon_{\alpha\beta}\,(t,\mathbf{r})}{\partial r_{\alpha}},\alpha,\beta=1,2,3. \tag{6}$$

При вычислении коммутатора в уравнении (3) произведем замену в уравнении (5) $\mathbf{r}$ на $\mathbf{r}-(1-\xi)\mathbf{r}'$, а $\mathbf{r}'$ на $\mathbf{r}+\xi\mathbf{r}'$. Тогда

$$\left[\hat{h}_0\left(\mathbf{r}-(1-\xi)\mathbf{r}'\right), \hat{\mathbf{s}}\left(\mathbf{r}+\xi\mathbf{r}'\right)\right] = \frac{\hbar^2}{2m}\Bigg(\delta\left(\mathbf{r}'\right)\hat{\psi}_\sigma^+\left(\mathbf{r}'\right)s_{\alpha\sigma\sigma'}\Delta\hat{\psi}_{\sigma''}\left(\mathbf{r}-(1-\xi)\mathbf{r}'\right) -$$

$$-\Delta_{\mathbf{a}}\delta\left(\mathbf{r}'-\mathbf{a}\right)\Big|_{\mathbf{a}=0}\hat{\psi}_\sigma^+\left(\mathbf{r}-(1-\xi)\mathbf{r}'\right)s_{\alpha\sigma\sigma'}\hat{\psi}_{\sigma'}\left(\mathbf{r}+\xi\mathbf{r}'\right)\Bigg),$$

и уравнение (3) принимает вид

$$\hat{\upsilon}_{\alpha\beta}(t,\mathbf{r}) = \frac{i\hbar}{2m}\left(\hat{\psi}_\sigma^+(t,\mathbf{r})s_{\alpha\sigma\sigma'}\frac{\partial}{\partial r_\beta}\hat{\psi}_{\sigma'}(t,\mathbf{r}) - \frac{\partial}{\partial r_\beta}\hat{\psi}_\sigma^+(t,\mathbf{r})s_{\alpha\sigma\sigma'}\hat{\psi}_{\sigma'}(t,\mathbf{r})\right). \tag{7}$$

Уравнение динамики оператора тензора плотности спинового тока в представлении взаимодействия имеет вид

$$i\hbar\frac{\partial\hat{\upsilon}_{\alpha\beta}(t,\mathbf{r})}{\partial t} = \left[\hat{\upsilon}_{\alpha\beta}(t,\mathbf{r}), \hat{H}_0\right] = \int\limits_V\left[\hat{\upsilon}_{\alpha\beta}(t,\mathbf{r}), \hat{h}_0\left(t,\mathbf{r}'\right)\right]d^3r'. \tag{8}$$

Вычисление коммутатора в правой части уравнения (8) с учетом соотношений (4) и (7) и перестановочных соотношений дает

$$\left[\hat{\upsilon}_{\alpha\beta}(t,\mathbf{r}), \hat{h}_0\left(t,\mathbf{r}'\right)\right] =$$

$$= \frac{i\hbar^3}{4m^2}\left(\frac{\partial\delta\left(\mathbf{r}-\mathbf{r}'\right)}{\partial r_\beta}\Delta_{\mathbf{r}'}\left(\hat{\psi}_\sigma^+(t,\mathbf{r})\hat{\psi}_{\sigma'}\left(t,\mathbf{r}'\right)\right) - \Delta_{\mathbf{r}'}\delta\left(\mathbf{r}-\mathbf{r}'\right)\frac{\partial\left(\hat{\psi}_\sigma^+\left(t,\mathbf{r}'\right)\hat{\psi}_{\sigma'}(t,\mathbf{r})\right)}{\partial r_\beta}\right) +$$

$$+ \frac{i\hbar^3}{4m^2}\left(\hat{\psi}_\sigma^+\left(t,\mathbf{r}'\right)\hat{\psi}_{\sigma'}(t,\mathbf{r})\Delta_{\mathbf{r}'}\frac{\partial\delta\left(\mathbf{r}-\mathbf{r}'\right)}{\partial r_\beta} - \delta\left(\mathbf{r}-\mathbf{r}'\right)\Delta_{\mathbf{r}'}\frac{\partial\left(\hat{\psi}_\sigma^+(t,\mathbf{r})\hat{\psi}_{\sigma'}\left(t,\mathbf{r}'\right)\right)}{\partial r_\beta}\right).$$

Соответственно,

$$\left[\hat{\upsilon}_{\alpha\beta}(t,\mathbf{r}), \hat{H}_0\right] = \frac{i\hbar^3 s_{\alpha\sigma\sigma'}}{4m^2}\left(\frac{\partial}{\partial r_\beta}\Delta_{\mathbf{r}}\left(\hat{\psi}_\sigma^+(t,\mathbf{r})\hat{\psi}_{\sigma'}(t,\mathbf{r})\right) - \Delta_{\mathbf{r}}\frac{\partial}{\partial r_\beta}\left(\hat{\psi}_\sigma^+(t,\mathbf{r})\hat{\psi}_{\sigma'}(t,\mathbf{r})\right)\right) +$$

$$+ \frac{i\hbar^3 s_{\alpha\sigma\sigma'}}{4m^2}\left(\Delta_{\mathbf{r}}\frac{\partial}{\partial r_\beta}\left(\hat{\psi}_\sigma^+(t,\mathbf{r})\hat{\psi}_{\sigma'}(t,\mathbf{r})\right) - \Delta_{\mathbf{r}}\frac{\partial}{\partial r_\beta}\left(\hat{\psi}_\sigma^+(t,\mathbf{r})\hat{\psi}_{\sigma'}(t,\mathbf{r})\right)\right) = 0.$$

Уравнение (8) при этом принимает вид

$$\frac{\partial\hat{\upsilon}_{\alpha\beta}(t,\mathbf{r})}{\partial t} = 0, \tag{9}$$

то есть в представлении взаимодействия оператор плотности спинового тока явно от времени не зависит.

Уравнения динамики средних компонент плотности спинового момента $s_\alpha(t,\mathbf{r}) = \langle\hat{s}_\alpha(t,\mathbf{r})\rangle = \mathrm{Sp}\left(\hat{s}_\alpha(t,\mathbf{r})\hat{\rho}\right)$ и тензора плотности спинового тока $\upsilon_{\alpha\beta}(t,\mathbf{r}) = \langle\hat{\upsilon}_{\alpha\beta}(t,\mathbf{r})\rangle = \mathrm{Sp}\left(\hat{\upsilon}_{\alpha\beta}(t,\mathbf{r})\hat{\rho}\right)$ с учетом уравнений (4) и (9) имеют вид

$$\frac{\partial s_\alpha(t,\mathbf{r})}{\partial t} = \mathrm{Sp}\left(\hat{s}_\alpha(t,\mathbf{r})\frac{d\hat{\rho}}{dt}\right) - \frac{\partial\upsilon_{\alpha\beta}(t,\mathbf{r})}{\partial r_\beta}, \tag{10}$$

$$\frac{\partial \upsilon_{\alpha\beta}(t,\mathbf{r})}{\partial t} = \mathrm{Sp}\left(\hat{\upsilon}_{\alpha\beta}(\mathbf{r})\frac{d\hat{\rho}}{dt}\right), \tag{11}$$

где $\hat{\rho}$ — оператор плотности ансамбля электронов проводимости.

В представлении взаимодействия уравнение Неймана для оператора плотности имеет вид

$$i\hbar\frac{d\hat{\rho}}{dt} = \left[\hat{H}' + \hat{H}_r, \hat{\rho}\right], \hat{H}' = \int\limits_V \hat{h}'(t,\mathbf{r})\, d^3r. \tag{12}$$

Здесь $\hat{h}'(t,\mathbf{r})$ — оператор плотности гамильтониана регулярного (полевого) возмущения. В приближении марковской релаксации уравнение Неймана (12) для матрицы плотности имеет вид

$$\frac{d\rho_{mn}}{dt} = -\frac{\rho_{mn} - \rho_{mn}^e}{\tau_{mn}} - \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}', \hat{\rho}\right]_{mn}, \tag{13}$$

где ρ_{mn}^e — матричные элементы равновесного оператора плотности; τ_{mn} — времена релаксации.

Примем, что при вычислении первого слагаемого в правой части уравнения (13) можно заменить времена релаксации усредненным значением τ_α. Тогда уравнения спиновой динамики (10) и (11) с учетом перестановки операторов под шпуром принимают вид

$$\frac{\partial s_\alpha(t,\mathbf{r})}{\partial t} = -\frac{s_\alpha(t,\mathbf{r}) - s_\alpha^e(\mathbf{r})}{\tau_\alpha} - \frac{i}{\hbar}\int\limits_V \mathrm{Sp}\left(\hat{\rho}\left[\hat{s}_\alpha(t,\mathbf{r}), \hat{h}'(t,\mathbf{r})\right]\right) d^3r' - \frac{\partial \upsilon_{\alpha\beta}(t,\mathbf{r})}{\partial r_\beta}, \tag{14}$$

$$\frac{\partial \upsilon_{\alpha\beta}(t,\mathbf{r})}{\partial t} = -\frac{\upsilon_{\alpha\beta}(t,\mathbf{r}) - \upsilon_{\alpha\beta}^e(\mathbf{r})}{\tau_\alpha} - \frac{i}{\hbar}\int\limits_V \mathrm{Sp}\left(\hat{\rho}\left[\hat{\upsilon}_{\alpha\beta}(t,\mathbf{r}), \hat{h}'(t,\mathbf{r})\right]\right) d^3r'. \tag{15}$$

Здесь $s_\alpha^e = \mathrm{Sp}\left(\hat{s}_\alpha(\mathbf{r})\,\hat{\rho}^e\right)$ и $\upsilon_{\alpha\beta}^e(\mathbf{r}) = \mathrm{Sp}\left(\hat{\upsilon}_{\alpha\beta}(\mathbf{r})\,\hat{\rho}^e\right)$ — равновесные компоненты плотности спинового момента и тензора плотности спинового тока соответственно.

2. Эффективный гамильтониан спин-орбитального взаимодействия электрона проводимости

Гамильтониан электрона с зарядом $-e$, находящегося в заданных электрическом $\mathbf{E}$ и магнитном $\mathbf{B}$ полях во втором порядке малости по $1/c$, имеет вид [2]:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \mu_B\hat{\mathbf{s}}\mathbf{B} + U(\mathbf{r}) + \frac{e\hbar}{2m^2c^2}\left[\mathbf{E}\times\hat{\mathbf{p}}\right]\hat{\mathbf{s}} - \frac{\hat{\mathbf{p}}^4}{8m^3c^2} + \frac{e\hbar^2}{8m^2c^2}\mathrm{div}\mathbf{E}. \tag{16}$$

Здесь $\mu_B = \dfrac{e\hbar}{mc}$ — магнетон Бора; $U(\mathbf{r}) = -e\varphi(\mathbf{r})$, $\varphi(\mathbf{r})$ — потенциал заданного электрического поля $\mathbf{E}(\mathbf{r})$. Последнее слагаемое в правой части (16) — это поправка Дарвина, отличная от нуля только там, где находятся заряды, создающие заданное электрическое поле. Считая эти заряды внешними для системы, внутри системы этим слагаемым можно пренебречь. Пятое слагаемое — следствие релятивистской зависимости кинетической энергии от импульса. При нерелятивистских скоростях электрона им можно пренебречь. Четвертое слагаемое в правой части (16) — оператор спин-орбитального взаимодействия.

Для системы электронов, связанных кулоновским взаимодействием, первый и второй операторы в правой части (16) являются одночастичными. Их вклад в плотность гамильтониана находится стандартным образом [1]. С учетом соотношения (4) получаем $\hat{h}_0(t,\mathbf{r})+\mu_B\hat{\mathbf{s}}(t,\mathbf{r})\,\mathbf{B}(t,\mathbf{r})$. В потенциальную энергию $U(\mathbf{r})$ в (16) помимо слагаемого $-e\varphi(\mathbf{r})$ нужно добавить сумму энергий попарных кулоновских взаимодействий электронов. Такой оператор уже не будет одночастичным. Электрическое поле $\mathbf{E}$ в четвертом слагаемом (16) также нельзя считать заданным. Это поле создано всеми электронами, кроме рассматриваемого, и всеми ядрами, то есть всем кристаллитом. Кристаллит чистого металла можно рассматривать как гомоядерную макромолекулу с металлической связью. В рамках одноэлектронного приближения Хартри — Фока каждый электрон находится в самосогласованном поле, созданном ионными остатками и другими электронами [7].

Самосогласованное поле можно искать методом последовательных приближений. В начальном приближении волновая функция коллективизированного электрона рассматривается как молекулярная спин-орбиталь и представляется в виде линейной комбинации атомных спин-орбиталей (приближение ЛКАО). В приближении сильной связи такой комбинацией может быть функция Ванье [8]:

$$\psi(\mathbf{r})=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{n=1}^{N}\Psi(\mathbf{r}-\mathbf{R}_n)\exp(i\mathbf{k}\mathbf{R}_n)\,. \tag{17}$$

Здесь $\Psi(\mathbf{r})$ — водородоподобная функция коллективизированного электрона; $\mathbf{R}_n$ — вектор трансляции; N — количество узлов в кристаллите.

В качестве модельного самосогласованного поля начального приближения возьмем кристаллическое поле ионных остатков с эффективным зарядом Ze и координатами $\mathbf{r}_k$

$$\mathbf{E}(\mathbf{r})=-\frac{eZ}{4\pi\varepsilon_0}\sum_{k=1}^{N}\frac{\mathbf{r}-\mathbf{r}_k}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_k|^3}. \tag{18}$$

Здесь ε_0 — электрическая постоянная. Величину Z можно оценить, приравняв координату максимума радиальной компоненты водородоподобной волновой функции к радиусу атома.

Построим эффективный спиновый гамильтониан спин-орбитального взаимодействия, усреднив по координатам четвертое слагаемое в (16). Подставляя в него формулы (17) и (18) и выполнив замену переменных $\mathbf{r}-\mathbf{r}_k\to\mathbf{r}$, получим

$$\begin{gathered}\hat{H}_{SO}=-\frac{\hbar^2e^2Z}{8\pi\varepsilon_0m^2c^2N}\times\\ \times\sum_{n,m,k=1}^{N}\left\{\exp\left(i\mathbf{k}\left(\mathbf{R}_n-\mathbf{R}_m\right)\right)\left\langle\Psi\left(\mathbf{r}+\mathbf{r}_k-\mathbf{R}_m\right)\left|\frac{\hat{\mathbf{l}}}{r^3}\right|\Psi\left(\mathbf{r}+\mathbf{r}_k-\mathbf{R}_n\right)\right\rangle\right\}\hat{\mathbf{s}},\end{gathered} \tag{19}$$

где $\hat{\mathbf{l}}$ — оператор орбитального момента.

Рассматривая спиновый ток только в металлах, воспользуемся для электронов проводимости 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_BT, где

k_B — постоянная Больцмана, T — температура. В результате, чем плотнее ферми-газ в металле, тем он идеальнее [5]. 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 $m^* \approx m$. Положим в рамках метода эффективной массы в (19) $\mathbf{k} = -\mathbf{j}m^*/(\hbar e n_e)$, где $\mathbf{j}$ — плотность зарядового тока, n_e — концентрация электронов проводимости.

Водородоподобные функции малы при $r \geq n a_B/Z$, где $a_B = 5{,}29 \cdot 10^{-11}$ м — боровский радиус, n — главное квантовое число. Поэтому среднее в правой части (2) отлично от нуля только при $\mathbf{R}_n - \mathbf{r}_k = \pm\mathbf{a}_\nu$ и $\mathbf{R}_m - \mathbf{r}_k = 0$ или $\mathbf{R}_m - \mathbf{r}_k = \pm\mathbf{a}_\nu$ и $\mathbf{R}_n - \mathbf{r}_k = 0$, где $\mathbf{a}_\nu$ — вектор, проведенный от рассматриваемого атома с центром в точке $\mathbf{r} = 0$ к ближайшему соседу. Тогда с учетом эрмитовости оператора орбитального момента в первом порядке малости по $\mathbf{k}\mathbf{a}_\nu$ получаем

$$\begin{gathered}
\hat{H}_{SO} = -\left(\mathbf{I} + \mathbf{J}\right)\hat{\mathbf{s}}, \\
\hat{\mathbf{I}} = \frac{\hbar^2 e^2 Z}{4\pi\varepsilon_0 m^2 c^2}\sum_\nu \Re\left\langle \Psi_\nu^+ \middle| \frac{\hat{\mathbf{l}}}{r^3} \middle| \Psi \right\rangle, \\
\mathbf{J} = \frac{e^2\hbar Z R_H}{4\pi\varepsilon_0 m c^2}\sum_\nu \left(\mathbf{j}\mathbf{a}_\nu\right)\Im\left\langle \Psi_\nu^- \middle| \frac{\hat{\mathbf{l}}}{r^3} \middle| \Psi \right\rangle.
\end{gathered} \tag{20}$$

Здесь $R_H = (m^*/m)/(e n_e)$ — коэффициент Холла; $\Psi_\nu^+(\mathbf{r}) = \Psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}_\nu) + \Psi(\mathbf{r} - \mathbf{a}_\nu)$ — функция с четностью, совпадающей с четностью функции $\Psi(\mathbf{r})$; $\Psi_\nu^-(\mathbf{r}) = \Psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}_\nu) - \Psi(\mathbf{r} - \mathbf{a}_\nu)$ — функция с четностью, противоположной четности функции $\Psi(\mathbf{r})$, и подразумевается суммирование по ν по парам симметрично расположенных ближайших соседей.

В недеформированном кристаллите $\mathbf{J} = 0$. При неоднородной дисторсии узел кристалла с координатой $\mathbf{r}$ смещается в новое положение с координатой $\mathbf{r}'$: $r'_\alpha = r_\alpha + u_\alpha(\mathbf{r})$, а операторы и волновые функции преобразуются по правилу

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

Здесь α, β, $\gamma = x$, y, z. Соответственно меняются ориентация кристаллических осей и орбиталей валентных электронов. При дисторсии кручения образца вдоль оси $\mathbf{n}$ вида $\mathbf{\Omega}(\mathbf{r}) = \mathbf{n}(\mathbf{r}\mathbf{n})\,\omega$, где ω — погонное кручение, ограничиваясь первой степенью дисторсии, получаем

$$\begin{gathered}
u_\beta = \omega\varepsilon_{\beta\sigma\nu} n_\sigma n_\mu r_\nu r_\mu, \\
\tfrac{\partial u_\delta}{\partial r_\gamma} = \omega\varepsilon_{\delta\sigma\nu} n_\sigma n_\mu \left(r_\nu \delta_{\mu\gamma} + r_\mu \delta_{\nu\gamma}\right) = \omega\varepsilon_{\delta\sigma\nu} n_\sigma n_\gamma r_\nu + \omega\varepsilon_{\delta\sigma\nu} n_\sigma n_\mu r_\mu, \\
\hat{\mathbf{l}}' = \hat{\mathbf{l}} + \omega(\mathbf{n}\mathbf{r})\left[\mathbf{n} \times \hat{\mathbf{l}}\right] + \omega\left(\mathbf{n}\hat{\mathbf{l}}\right)\left[\mathbf{n} \times \mathbf{r}\right], \\
\hat{l}'_\alpha = \hat{l}_\alpha + \omega\varepsilon_{\alpha\beta\gamma} n_\beta n_\delta\left(r_\delta \hat{l}_\gamma + r_\gamma \hat{l}_\delta\right), \\
\Psi\left(\mathbf{r}'\right) = \Psi(\mathbf{r}) + i\mathbf{\Omega}(\mathbf{r})\,\hat{\mathbf{l}}\Psi(\mathbf{r}) = \Psi(\mathbf{r}) + i\omega n_\beta n_\delta r_\delta \hat{l}_\beta \Psi(\mathbf{r}).
\end{gathered} \tag{21}$$

Из соотношений (21) в линейном по ω приближении с учетом эрмитовости оператора момента и коммутационных соотношений $\left[\hat{l}_\alpha, \hat{l}_\beta\right] = i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{l}_\gamma$, $\left[\hat{l}_\alpha, r_\beta\right] = i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma} r_\gamma$

получаем:

$$\left\langle \Psi'_\nu \middle| \Psi' \right\rangle - \left\langle \Psi_\nu \middle| \Psi \right\rangle = \omega n_\beta n_\delta \left\{ i \left\langle \Psi_\nu \middle| r_\delta \hat{l}_\beta \Psi \right\rangle - i \left\langle r_\delta \hat{l}_\beta \Psi_\nu \middle| \Psi \right\rangle \right\} =$$
$$= i\omega n_\beta n_\delta \left\langle \Psi_\nu \middle| r_\delta \hat{l}_\beta - \hat{l}_\beta r_\delta \middle| \Psi \right\rangle = \omega \varepsilon_{\beta\delta\gamma} n_\beta n_\delta \left\langle \Psi_\nu \middle| r_\gamma \middle| \Psi \right\rangle = 0,$$
$$\left\langle \Psi'_\nu \middle| \hat{l}'_\alpha \middle| \Psi' \right\rangle - \left\langle \Psi_\nu \middle| \hat{l}_\alpha \middle| \Psi \right\rangle =$$
$$= \omega n_\beta n_\delta \left\{ i \left\langle \Psi_\nu \middle| \hat{l}_\alpha \middle| r_\delta \hat{l}_\beta \Psi \right\rangle - i \left\langle r_\delta \hat{l}_\beta \Psi_\nu \middle| \hat{l}_\alpha \middle| \Psi \right\rangle + \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \left\langle \Psi_\nu \middle| r_\delta \hat{l}_\gamma - \hat{l}_\gamma r_\delta \middle| \Psi \right\rangle \right\} =$$
$$= \omega n_\beta n_\delta \left\langle \Psi_\nu \middle| \hat{l}_\alpha r_\delta \hat{l}_\beta - \hat{l}_\beta r_\delta \hat{l}_\alpha + \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} r_\delta \hat{l}_\gamma + \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} r_\gamma \hat{l}_\delta \middle| \Psi \right\rangle = 2\omega \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} n_\beta n_\delta \left\langle \Psi_\nu \middle| r_\gamma \hat{l}_\delta \middle| \Psi \right\rangle.$$

Подставим эти соотношения в третье уравнение (20):

$$J_{\alpha'} = \frac{e^2 \hbar Z R_H \omega}{2\pi\varepsilon_0 m c^2} \varepsilon_{\alpha'\beta'\gamma'} n_{\beta'} n_{\delta'} j_{\sigma'} \sum_\nu a_{\nu\sigma'} \Im \left\langle \Psi_\nu^- \middle| \frac{r_{\gamma'} \hat{l}_{\delta'}}{r^3} \middle| \Psi \right\rangle. \tag{22}$$

Величина $a_\nu \omega$ в формуле (22) является кручением элементарной ячейки, то есть углом поворота ее кристаллографической плоскости относительно соседних. Дисторсия кручения нарушает симметрию материала. Такое нарушение симметрии существует без внешних воздействий в энантиочистых хиральных кристаллах, например, в $NbSi_2$.

Для s-электрона с $l = 0$ в соотношениях (20) и (22) все интегралы равны нулю. Потенциал кристаллического поля вида (18) не является центрально-симметричным, и орбитальный момент электрона не является для него «хорошим» квантовым числом. Поэтому волновая функция электрона в атоме отличается от волновой функции электрона в изолированном атоме. Соответственно волновая функция $\Psi(\mathbf{r})$ в соотношениях (20) и (22) не является волновой функцией внешнего электрона, например, s-электрона, изолированного атома. Но ее всегда можно представить в виде линейной комбинации волновых функций изолированного атома. В результате в металлах зоны проводимости перекрываются, и часть электронов проводимости может быть образована коллективизацией p-электронов [6], а в переходных металлах также и d-электронов [3].

3. Плотность спин-орбитального гамильтониана в хиральном поликристалле

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 определенное значение $l_z = l$. Энергия электрона в атоме, находящемся в электрическом поле, зависит от проекции его орбитального момента на направление поля [7]. Поэтому ориентация атомных орбиталей определяется положением осей кристаллита, и можно считать, что соотношения (20) и (22) записаны в кристаллофизической системе координат, связанной с осями симметрии кристаллита.

Введем лабораторную систему координат, связанную с приборами, которые задают ток проводимости и измеряют компоненты спина. Поэтому вектор плотности тока и вектор спина электронов проводимости следует считать заданными в лабораторной системе координат. В хиральном кристалле ось кручения также определяется положением осей кристаллита, поэтому компоненты вектора $\mathbf{n}$ в соотношении (20) заданы в кристаллофизической системе координат. Компоненты векторов и тензоров в лабораторной системе будем обозначать не штрихованными индексами, а в кристаллофизической системе координат — штрихованными.

Преобразуем вектор плотности тока из лабораторной системы в кристаллофизическую $j_{\sigma'} = p_{\sigma'\sigma} j_\sigma$, а векторы $\mathbf{I}$ и $\mathbf{J}$ из кристаллофизической системы в лабораторную $J_\alpha = p^{-1}_{\alpha\alpha'} J_{\alpha'}$, где $p_{\alpha'\alpha}$ — унитарная матрица поворота, которую удобно выражать через углы Эйлера. Тогда формула (22) принимает вид:

$$\overline{J_\alpha} = \frac{e^2 \hbar Z R_H}{2\pi\varepsilon_0 mc^2} \varepsilon_{\alpha'\beta'\gamma'} \overline{p^{-1}_{\alpha\alpha'} p_{\sigma'\sigma}} n_{\beta'} n_{\delta'} j_\sigma \sum_\nu a_{\nu\sigma'} \Im \left\langle \Psi^-_\nu \middle| \frac{r_{\gamma'} \hat{l}_{\delta'}}{r^3} \middle| \Psi \right\rangle . \tag{23}$$

Здесь черта сверху обозначает усреднение по случайным углам Эйлера, которые для изотропного поликристалла имеют равномерное распределение. Аналитическое усреднение уравнения (23) и второго уравнения (20) дает

$$\overline{\mathbf{I}} = 0,\ \overline{\mathbf{J}} = K\mathbf{j}. \tag{24}$$

Скаляр в формуле (24) имеет вид:

$$K = \frac{e^2 \hbar Z R_H}{12\pi\varepsilon_0 mc^2} \sum_\nu \Im \left\langle \Psi^-_\nu \middle| \frac{\left(\mathbf{r}\hat{\mathbf{l}}\right) \left[\mathbf{a}_\nu \times \mathbf{n}\right] \mathbf{r}}{r^3} \middle| \Psi \right\rangle . \tag{25}$$

Он зависит только от свойств кристалла, и его можно вычислить в кристаллофизической системе координат. Тогда первое уравнение (20) для поликристаллической хиральной среды принимает вид:

$$\hat{H}_{SO} = -K\mathbf{j}\hat{\mathbf{s}}. \tag{26}$$

Эффективный спин-орбитальный гамильтониан электрона проводимости (26) является одночастичным оператором. Его плотность находится стандартным образом [1]. С учетом соотношения (4) получаем $\hat{h}_{SO}(t,\mathbf{r}) = -K\mathbf{j}(t,\mathbf{r})\,\hat{\mathbf{s}}(t,\mathbf{r})$. Тогда плотность гамильтониана возмущения в соотношениях (14) и (15) принимает вид:

$$\hat{h}'(t,\mathbf{r}) = \left(\mu_B \mathbf{B}(t,\mathbf{r}) - K\mathbf{j}(t,\mathbf{r})\right) \hat{\mathbf{s}}(t,\mathbf{r}). \tag{27}$$

4. Динамика спиновой поляризации и спинового тока

С учетом уравнения (27) второе слагаемое в правой части уравнения (14) принимает вид:

$$-\frac{i}{\hbar} \int\limits_V \left(\mu_B B_\beta\left(t,\mathbf{r}'\right) - K j_\beta\left(t,\mathbf{r}'\right)\right) \mathrm{Sp}\left(\hat{\rho}\left[\hat{s}_\alpha(t,\mathbf{r}), \hat{s}_\beta\left(t,\mathbf{r}'\right)\right]\right) d^3 r'. \tag{28}$$

Коммутатор в подынтегральном выражении (28) вычисляется с учетом уравнения (4) и перестановочных соотношений для полевых операторов и спиновых матриц электронов

$$\left[\hat{s}_\alpha(t,\mathbf{r}), \hat{s}_\beta\left(t,\mathbf{r}'\right)\right] = i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \delta\left(\mathbf{r} - \mathbf{r}'\right) \hat{s}_\gamma\left(t,\mathbf{r}'\right).$$

Тогда второе слагаемое в правой части уравнения (14) с учетом (27) принимает вид:

$$\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\left(\mu_B B_\beta\left(t,\mathbf{r}\right)-Kj_\beta\left(t,\mathbf{r}\right)\right)\hat{s}_\gamma\left(t,\mathbf{r}\right)/\hbar.$$

Будем считать индукцию магнитного поля $\mathbf{B}\left(t,\mathbf{r}\right)$ и плотность зарядового тока $\mathbf{j}\left(t,\mathbf{r}\right)$ медленно (в сравнении с временем продольной релаксации τ_α) меняющимися управляющими параметрами. Тогда спиновая система будет релаксировать к локально-квазиравновесной медленно меняющейся спиновой плотности $\mathbf{s}^e\left(t,\mathbf{r}\right)$. Из уравнения (27) следует, что разница энергий состояний, когда средний спин в момент времени t в окрестности точки $\mathbf{r}$ ориентирован параллельно или антипараллельно вектору $\mu_B\mathbf{B}\left(t,\mathbf{r}\right)-K\mathbf{j}\left(t,\mathbf{r}\right)$, равна $\left|\mu_B\mathbf{B}\left(t,\mathbf{r}\right)-K\mathbf{j}\left(t,\mathbf{r}\right)\right|$. Тогда при температуре T

$$\mathbf{s}^e\left(t,\mathbf{r}\right)=\frac{\mu_B\mathbf{B}\left(t,\mathbf{r}\right)-K\mathbf{j}\left(t,\mathbf{r}\right)}{2\left|\mu_B\mathbf{B}\left(t,\mathbf{r}\right)-K\mathbf{j}\left(t,\mathbf{r}\right)\right|}\operatorname{th}\left(\frac{\left|\mu_B\mathbf{B}\left(t,\mathbf{r}\right)-K\mathbf{j}\left(t,\mathbf{r}\right)\right|}{2k_\beta T}\right),\tag{29}$$

и уравнение динамики плотности спина (14) принимает вид:

$$\frac{\partial s_\alpha\left(t,\mathbf{r}\right)}{\partial t}=\frac{\left[\left(\mu_B\mathbf{B}\left(t,\mathbf{r}\right)-K\mathbf{j}\left(t,\mathbf{r}\right)\right)\times\mathbf{s}\left(t,\mathbf{r}\right)\right]_\alpha}{\hbar}-\frac{\partial \upsilon_{\alpha\beta}\left(t,\mathbf{r}\right)}{\partial r_\beta}-\frac{s_\alpha\left(t,\mathbf{r}\right)-s_\alpha^e\left(t,\mathbf{r}\right)}{\tau_\alpha}.\tag{30}$$

Коммутатор в правой части уравнения (15) вычисляется аналогично

$$\left[\hat{\upsilon}_{\alpha\beta}\left(\mathbf{r}\right),\hat{s}_\gamma\left(\mathbf{r}'\right)\right]=$$

$$=-\frac{i\hbar}{2m}\left(\frac{\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\sigma\sigma''}}{4}+\frac{i\varepsilon_{\alpha\gamma\delta}s_{\delta\sigma\sigma''}}{2}\right)\left(\hat{\psi}_\sigma^+\left(\mathbf{r}\right)\hat{\psi}_{\sigma''}\left(\mathbf{r}'\right)\frac{\partial\delta\left(\mathbf{r}-\mathbf{r}'\right)}{\partial r_\beta}-\frac{\partial\hat{\psi}_\sigma^+}{\partial r_\beta}\hat{\psi}_{\sigma''}\left(\mathbf{r}'\right)\delta\left(\mathbf{r}-\mathbf{r}'\right)\right)+$$

$$+\frac{i\hbar}{2m}\left(\frac{\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\sigma''\sigma'}}{4}-\frac{i\varepsilon_{\alpha\gamma\delta}s_{\delta\sigma''\sigma'}}{2}\right)\left(\delta\left(\mathbf{r}-\mathbf{r}'\right)\hat{\psi}_{\sigma''}^+\left(\mathbf{r}'\right)\frac{\partial\hat{\Psi}_{\sigma'}}{\partial r_\beta}-\hat{\psi}_{\sigma''}^+\left(\mathbf{r}'\right)\hat{\psi}_{\sigma'}\left(\mathbf{r}\right)\frac{\partial\delta\left(\mathbf{r}-\mathbf{r}'\right)}{\partial r_\beta}\right).$$

Тогда второе слагаемое в правой части уравнения (15) с учетом (27) принимает вид:

$$-\frac{n_e\left(t,\mathbf{r}\right)}{4m}\frac{\partial}{\partial r_\beta}\left(\mu_B B_\alpha\left(t,\mathbf{r}\right)-Kj_\alpha\left(t,\mathbf{r}\right)\right).\tag{31}$$

Здесь $n_e\left(t,\mathbf{r}\right)=\left\langle\hat{\psi}_\sigma^+\left(t,\mathbf{r}\right)\hat{\psi}_\sigma\left(t,\mathbf{r}\right)\right\rangle$ — концентрация электронов проводимости, энергия которых находится в интервале порядка k_BT около уровня Ферми.

Для квазиравновесного значения плотности спинового тока в (15) можно принять $\upsilon_{\alpha\beta}^e\left(t,\mathbf{r}\right)=-R_H s_\alpha^e\left(t,\mathbf{r}\right)j_\beta\left(t,\mathbf{r}\right)m/m^*$. Тогда с учетом уравнений (29) и (31) уравнение (15) принимает вид:

$$\frac{\partial\upsilon_{\alpha\beta}\left(t,\mathbf{r}\right)}{\partial t}=-\frac{\upsilon_{\alpha\beta}\left(t,\mathbf{r}\right)}{\tau_\alpha}-\frac{R_H s_\alpha^e\left(t,\mathbf{r}\right)j_\beta\left(t,\mathbf{r}\right)m}{m^*\tau_\alpha}-$$
$$-\frac{n_e\left(t,\mathbf{r}\right)}{4m}\frac{\partial}{\partial r_\beta}\left(\mu_B B_\alpha\left(t,\mathbf{r}\right)-Kj_\alpha\left(t,\mathbf{r}\right)\right).\tag{32}$$

Динамика управляемого спинового тока и спиновой поляризации в поликристаллическом хиральном проводнике описывается системой уравнений (29), (30) и (32). В однородном проводнике положение уровня Ферми и концентрация электронов проводимости постоянны по объему. Однако при наличии потоков тепла и зарядов, а также в неоднородном проводнике концентрация электронов проводимости может стать дополнительным управляющим параметром, наряду с плотностью зарядового тока и магнитной индукцией.

Заключение

Не так давно в хиральных молекулах был обнаружен [14] новый класс явлений, называемых индуцированной хиральностью спиновой селективностью (CISS). В CISS спиновая поляризация генерируется в электронах, проходящих через хиральную молекулу. Направление спиновой поляризации зависит от направленности хиральных молекул. На основе экспериментальных результатов [11] авторы предполагают, что хиральные поликристаллы могут работать как хороший проводник спинов с очень малой потерей спиновой поляризации. Материалы, рассмотренные в этом исследовании, содержат $4d$- или $5d$-переходные металлы, которые обладают сильной спин-орбитальной связью. Оказалось, что такие материалы демонстрируют перенос спиновых поляризаций на большие расстояния, несмотря на малую длину спиновой диффузии в чистых металлах.

ПРИМЕЧАНИЕ

[1] 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.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ахиезер, А. И. Методы статистической физики / А. И. Ахиезер, С. В. Пелетминский. — М. : Наука, 1977. — 367 с.

2. Берестецкий, В. Б. Квантовая электродинамика / В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский. — М. : Физматлит, 1989. — 388 с.

3. Вонсовский, С. В. Электронная теория переходных металлов. I / С. В. Вонсовский, Ю. А. Изюмов // УФН. — 1962. — № 77. — С. 377–448. — DOI: https://doi.org/10.3367/UFNr.0077.196207a.0377

4. Игнатьев, В. К. Эффект управления спиновой поляризацией электронов проводимости через деформацию ферромагнетика / В. К. Игнатьев, Н. Г. Лебедев, Д. А. Станкевич // Письма в журнал технической физики. — 2022. — № 48 (23). — С. 30–33. — DOI: http://dx.doi.org/10.21883/PJTF.2022.23.53949.19363

5. Квасников, И. А. Термодинамика и статистическая физика. В 3 т. Т. 2: Теория равновесных систем: Статистическая физика / И. А. Квасников. — М. : Едиториал УРСС, 2002. — 240 с.

6. Кринчик, Г. С. Физика магнитных явлений / Г. С. Кринчик. — М. : Изд-во МГУ, 1976. — 149 с.

7. Ландау, Л. Д. Квантовая механика. Нерелятивистская теория / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. — М. : Физматлит, 1974. — 752 с.

8. Маделунг, О. Теория твердого тела / О. Маделунг. — М. : Наука, 1980. — 416 с.

9. Стрейнтроника — новое направление микро- и наноэлектроники и науки о материалах / А. А. Бухараев, А. К. Звездин, А. П. Пятаков, Ю. К. Фетисов // УФН. — 2018. — № 188. — С. 1288–1330. — DOI: http://dx.doi.org/10.3367/UFNr.2018.01.038279

10. Фетисов, Ю. К. Спинтроника: физические основы и устройства / Ю. К. Фетисов, А. С. Сигов // РЕНСИТ. — 2018. — № 10 (3). — С. 343–356. — DOI: http://dx.doi.org/10.17725/rensit.2018.10.343

11. Detection of Chirality-Induced Spin Polarization over Millimeters in Polycrystalline Bulk Samples of Chiral Disilicides $NbSi_2$ and $TaSi_2$ / H. Shishido, R. Sakai, Y. Hosaka, Y. Togawa // Appl. Phys. Lett. — 2021. — № 119. — Article ID: 182403. — DOI: https://doi.org/10.1063/5.0074293

12. Manchon, A. Theory of Nonequilibrium Intrinsic Spin Torque in a Single Nanomagnet / A. Manchon, S. Zhang // Phys. Rev. B. — 2008. — № 78. — Article ID: 212405. — DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevB.78.212405

13. Ruderman, M. A. Indirect Exchange Coupling of Nuclear Magnetic Moments by Conduction Electrons / M. A. Ruderman, C. Kittel // Phys. Rev. — 1954. — № 96 (1). — P. 99–102. — DOI: https://doi.org/10.1103/PHYSREV.96.99

14. Spin Specific Electron Conduction through DNA Oligomers / Z. Xie, T. Z. Markus, S. R. Cohen, Z. Vager, R. Gutierrez, R. Naaman // Nano Lett. — 2011. — № 11. — P. 4652–4655. — DOI: https://doi.org/10.1021/nl2021637

15. Yu, T. Chirality as Generalized Spin–Orbit Interaction in Spintronics / T. Yu, Z. Luo, G. E. W. Bauer // Physics Reports. — 2023. — № 1009. — P. 1–115. — DOI: https://doi.org/10.1016/j.physrep.2023.01.002

REFERENCES

1. Akhiezer A.I., Peletminskiy S.V. *Metody statisticheskoy fiziki* [Methods of Statistical Physics]. Moscow, Nauka Publ., 1977. 367 p.

2. Berestetskiy V.B., Lifshits E.M., Pitaevskiy L.P. *Kvantovaya elektrodinamika* [Quantum Electrodynamics]. Moscow, Fizmatlit Publ., 1989. 388 p.

3. Vonsovskii S.V., Izyumov Yu.A. Elektronnaya teoriya perekhodnykh metallov. I [Electron Theory of Transition Metals. I]. *UFN* [Sov. Phys. Usp.], 1963, no. 5, pp. 547-593. DOI: https://doi.org/10.3367/UFNr.0077.196207a.0377

4. Ignatjev V.K., Lebedev N.G., Stankevich D.A. Effekt upravleniya spinovoy polyarizatsiey elektronov provodimosti cherez deformatsiyu ferromagnetika [The Effect of the Spin Polarization Control of Conduction Electrons Through the Deformation of a Ferromagnet]. *Pisma v zhurnal tekhnicheskoy fiziki* [Technical Physics Letters], 2022, no. 48 (23), pp. 30-33. DOI: http://dx.doi.org/10.21883/PJTF.2022.23.53949.19363

5. Kvasnikov I.A. *Termodinamika i statisticheskaya fizika. V 3 t. T. 2: Teoriya ravnovesnykh sistem: Statisticheskaya fizika* [Thermodynamics and Statistical Physics. In 3 Vol. Vol. 2: Theory of Equilibrium Systems: Statistical Physics]. Moscow, Editorial URSS Publ., 2002. 240 p.

6. Krinchik G.S. *Fizika magnitnykh yavleniy* [Physics of Magnetic Phenomena]. Moscow, Izd-vo MGU, 1976. 149 p.

7. Landau L.D., Lifshits E.M. *Kvantovaya mekhanika. Nerelyativistskaya teoriya* [Quantum Mechanics. Nonrelativistic Theory]. Moscow, Fizmatlit Publ., 1974. 752 p.

8. Madelung O. *Teoriya tverdogo tela* [Solid State Theory]. Moscow, Nauka Publ., 1980. 416 p.

9. Bukharaev A.A., Zvezdin A.K., Pyatakov A.P., Fetisov Yu.K. Streyntronika — novoe napravlenie mikro- i nanoelektroniki i nauki o materialakh [Straintronics: A New Trend in Micro- and Nanoelectronics and Materials Science]. *UFN* [Phys. Usp.], 2018, no. 188, pp. 1288-1330. DOI: http://dx.doi.org/10.3367/UFNr.2018.01.038279

10. Fetisov Yu.K., Sigov A.S. Spintronika: fizicheskie osnovy i ustroystva [Spintronics: Physical Foundations and Devices]. *RENSIT*, 2018, no. 10 (3), pp. 343-356. DOI: http://dx.doi.org/10.17725/rensit.2018.10.343

11. Shishido H., Sakai R., Hosaka Y., Togawa 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, no. 119, article ID: 182403. DOI: https://doi.org/10.1063/5.0074293

12. Manchon A., Zhang S. Theory of Nonequilibrium Intrinsic Spin Torque in a Single Nanomagnet. *Phys. Rev. B*, 2008, no. 78, article ID: 212405. DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevB.78.212405

13. Ruderman M.A., Kittel C. Indirect Exchange Coupling of Nuclear Magnetic Moments by Conduction Electrons. *Phys. Rev.*, 1954, no. 96 (1), pp. 99-102. DOI: https://doi.org/10.1103/PHYSREV.96.99

14. Xie Z., Markus T.Z., Cohen S.R., Vager Z., Gutierrez R., Naaman R. Spin Specific Electron Conduction Through DNA Oligomers. *Nano Lett.*, 2011, no. 11, pp. 4652-4655. DOI: https://doi.org/10.1021/nl2021637

15. Yu T., Luo Z., Bauer G.E.W. Chirality as Generalized Spin–Orbit Interaction in Spintronics. *Physics Reports*, 2023, no. 1009, pp. 1-115. DOI: https://doi.org/10.1016/j.physrep.2023.01.002

CONTROL OF SPIN CURRENT DYNAMICS IN A POLYCRYSTALLINE CONDUCTOR WITH CHIRAL STRUCTURE

Vyacheslav K. Ignatjev

Doctor of Sciences (Physics and Mathematics), Professor,
Department of Radiophysics,
Volgograd State University
vkignatjev@yandex.ru
Prosp. Universitetsky, 100, 400062 Volgograd, Russian Federation

Sergey V. Perchenko

Candidate of Sciences (Physics and Mathematics), Associate Professor,
Department of Radiophysics,
Volgograd State University
perchenko@volsu.ru
https://orcid.org/0000-0003-4643-3015
Prosp. Universitetsky, 100, 400062 Volgograd, Russian Federation

Dmitry A. Stankevich

Candidate of Sciences (Physics and Mathematics), Associate Professor,
Department of Radiophysics,
Volgograd State University
stankevich@volsu.ru
https://orcid.org/0000-0003-0208-903X
Prosp. Universitetsky, 100, 400062 Volgograd, Russian Federation

Abstract. In this paper the operator of the spin current density tensor is obtained taking into account the commutation relations for the field operators of fermions and their spin matrices. It is shown that the spin operators and the spin current density tensor commute with the density of the unperturbed Hamiltonian. The equations of dynamics of mean values of spin density and spin current density tensor are obtained by the Kubo method in the approximation of Markov relaxation. The effective one-particle Hamiltonian of the spin-orbit interaction of the collective conduction electron in a deformed metal is constructed by the Hartree-Fock one-electron approximation, considering a pure metal crystallite as a homonuclear macromolecule with metallic bonding. For a chiral polycrystal a relation is obtained from which the perturbation density operator is constructed in the second quantization representation. Tensor material equations for externally induced spin currents are constructed. The controlling influences are magnetic field induction, charge current density and temperature. The concentration of conduction electrons enters the equations as a parameter. In a homogeneous conductor without external influences it is constant in volume. However, in a stress-strained state, in the presence of temperature gradients and heat fluxes, this concentration can become an additional control parameter describing the influence of mechanical and other external influences on the polarization and depolarization of the spin current.

Key words: spin current, spin polarization, spin transport, straintronics, spintronics, chirality.