01.4;07.4

Соотношения взаимности для нелинейных систем

© В.К. Игнатьев

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

Поступило в Редакцию 22 февраля 2019 г.
В окончательной редакции 15 марта 2019 г.
Принято к публикации 15 марта 2019 г.

В приближении марковской релаксации получено квантовое доказательство соотношений взаимности для нелинейных нестационарных систем в магнитном поле.

Ключевые слова: соотношение взаимности, нелинейные системы, марковская релаксация, нестационарный отклик, магнитное поле.

DOI: 10.21883/PJTF.2019.11.47822.17748

Интерес к обобщению соотношений взаимности Онзагера [1], полученных в линейном приближении, на нелинейные системы, возникший в последние десятилетия [2], во многом стимулирован перспективами спинтроники. Большое внимание уделяется исследованию соотношений симметрии кинетических коэффициентов при взаимодействии спиновых токов с зарядовыми и потоками тепла [3]. Детально изучено влияние граничных условий [4] и симметрии [5] сложных неоднородных и анизотропных систем на выполнение соотношений взаимности. Обнаружены существенные нарушения соотношений взаимности между спин-зависимыми эффектами Пельтье и Зеебека, обусловленные нелинейностью вольт-амперной характеристики и нарушением локального равновесия при больших транспортных токах [3].

Для нелинейных систем соотношения взаимности удается получить только для некоторых частных случаев [6]. Для нелинейной проводящей среды, находящейся в однородном магнитном поле, в релаксационном приближении получены соотношения взаимности для тензора нелинейной проводимости [7]. На их основе получены соотношения взаимности для матрицы нелинейных сопротивлений гальваномагнитного многополюсника в магнитном поле [8]. Экспериментально показано, что эти соотношения выполняются в пределах погрешности измерений [8,9]. Поскольку элементы функциональной электроники являются нелинейными и нестационарными, представляют интерес общие соотношения взаимности для нелинейной нестационарной системы.

Пусть величины x_i, например координаты, остаются неизменными при инверсии времени, а их операторы (наблюдаемые) не зависят явно от времени и в координатном представлении Шредингера являются действительными [10]. Введем обобщенные силы f_i

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{H}_r - \mathbf{F}(t)\hat{\mathbf{X}}, \tag{1}$$

где $\hat{\mathbf{X}}$ — вектор наблюдаемых, $\mathbf{F}(t)$ — вектор обобщенных сил, $\hat{H}_0$ — стационарный невозмущенный гамильтониан, $\hat{H}_r$ — релаксационный гамильтониан, описывающий взаимодействие системы с окружающей средой (термостатом), которое обеспечивает релаксацию системы к равновесному состоянию после прекращения внешних воздействий. При этом [10]

$$\hat{H}_0^*(-\mathbf{B}) = \hat{H}_0(\mathbf{B}), \quad \hat{H}_r^*(-\mathbf{B}) = \hat{H}_r(\mathbf{B}). \tag{2}$$

Выберем в качестве базиса собственные функции невозмущенного гамильтониана $\hat{H}_0$. Пусть до начала внешнего воздействия система находилась в равновесном состоянии с диагональным стационарным оператором плотности $\hat{\rho}|_{-\infty} = \hat{\rho}^e$, причем

$$\langle \hat{x}_i \rangle^e = \mathrm{Sp}\left(\hat{\rho}^e \hat{x}_i\right) = \rho_{nm}^e x_{inn} = 0. \tag{3}$$

Решение уравнения Неймана для не зависящего явно от времени оператора в представлении взаимодействия $i\hbar d\hat{x}/dt = \left[\hat{x}, \hat{H}_0\right]$ имеет вид [10]:

$$\hat{x}(t) = \exp\left(i\hat{H}_0 t/\hbar\right)\hat{x}(0)\exp\left(-i\hat{H}_0 t/\hbar\right),$$
$$x_{nm}(t-\theta) = \exp\left(-i\omega_{nm}\theta\right)x_{nm}(t), \tag{4}$$

где $\omega_{nm} = (E_n - E_m)/\hbar$. Выполним в уравнении (4) инверсию времени, изменив знак магнитного поля [10]. Тогда с учетом условия (2) стационарный гамильтониан $\hat{H}_0(\mathbf{B})$ переходит в $\hat{H}_0(-\mathbf{B}) = \hat{H}_0^*(\mathbf{B})$. В момент времени $t = 0$ оператор в представлении взаимодействия совпадает с действительным оператором в представлении Шредингера. Тогда

$$\hat{x}(-t, -\mathbf{B}) = \exp\left(-i\hat{H}_0^* t/\hbar\right)\hat{x}(0)\exp\left(i\hat{H}_0^* t/\hbar\right) = \hat{x}^*(t, \mathbf{B}),$$
$$x_{nm}(-t, -\mathbf{B}) = x_{nm}^*(t, \mathbf{B}) = x_{mn}(t, \mathbf{B}). \tag{5}$$

Уравнение Неймана для матрицы плотности в представлении взаимодействия с учетом условий (1) и (4) имеет вид [10]:

$$i\hbar\partial\rho_{nm}(\mathbf{F}, \mathbf{B})/\partial t = f_j\left(\rho_{nk}(\mathbf{F}, \mathbf{B})x_{jkm}(0, \mathbf{B})\exp(i\omega_{km}t)\right.$$
$$\left. - x_{jnk}(0, \mathbf{B})\rho_{km}(\mathbf{F}, \mathbf{B})\exp(i\omega_{nk}t)\right)$$
$$-\left(\rho_{nk}(\mathbf{F}, \mathbf{B})H_{rkm} - H_{rnk}\rho_{nkm}(\mathbf{F}, \mathbf{B})\right), \ \rho_{nm}(\mathbf{F}, \mathbf{B})|_{-\infty} = \rho_{nm}^e, \tag{6}$$

В приближении марковской релаксации, которое отвечает предположению Онзагера [1] о том, что средняя релаксация флуктуаций в системе происходит в соответствии с макроскопическими законами, последнее слагаемое в правой части уравнения (6) имеет вид [10]:

$$i\hbar\big(\rho_{nm}(\mathbf{F},\mathbf{B})-\rho^{e}_{nm}\big)/\tau_{nm}(\mathbf{B}),$$

где $\tau_{nm}=\tau_{mn}$ — вещественные положительные времена релаксации. С учетом условия (2)

$$\tau_{nm}(-\mathbf{B})=\tau_{nm}(\mathbf{B}). \quad (7)$$

Возьмем от уравнения (6) комплексное сопряжение, одновременно инвертировав обобщенные силы $\mathbf{F}$ и магнитное поле $\mathbf{B}$. С учетом соотношений (5) получим

$$i\hbar\partial\rho^{*}_{nm}(-\mathbf{F},-\mathbf{B})/\partial t=f_j\big(\rho^{*}_{nk}(-\mathbf{F},-\mathbf{B})x_{jkm}(0,\mathbf{B})$$
$$\times\exp(i\omega_{mk}t)-x_{jnk}(0,\mathbf{B})\rho^{*}_{km}(-\mathbf{F},-\mathbf{B})\exp(i\omega_{kn}t)\big)$$
$$-\,i\hbar\big(\rho^{*}_{nm}(-\mathbf{F},-\mathbf{B})-\rho^{e}_{nm}\big)/\tau_{nm}(\mathbf{B}),$$
$$\rho^{*}_{nm}(-\mathbf{F},-\mathbf{B})|_{-\infty}=\rho^{e}_{nm}. \quad (8)$$

Из единственности решения задач Коши (6) и (8) следует, что

$$\rho_{nm}\big(\mathbf{F}(t),\mathbf{B}\big)=\rho_{mn}(-\mathbf{F}(t),-\mathbf{B}) \quad (9)$$

при одновременной замене всех частот ω_{nm} на ω_{mn}. В соотношении (9) и далее аргумент функций вида $\mathbf{F}(t)$ подразумевает, что функции зависят от значений сил во все моменты, предшествующие t.

Уравнения (6) и (8) эквивалентны интегральным уравнениям

$$\rho_{nm}(t)=\rho^{e}_{nm}-\frac{i}{\hbar}\int\limits_{-\infty}^{t}\exp\Big(\frac{t'-t}{\tau_{nm}}\Big)f_i(t')$$
$$\times\big\{\rho_{nk}(t')x_{jkm}(t')-x_{jnk}(t')\rho_{km}(t')\big\}dt'. \quad (10)$$

С учетом формул (3) и (10) после перестановки операторов под знаком шпура для реакции системы на силы $\mathbf{F}(t)$ в магнитном поле $\mathbf{B}$ получаем

$$x_i\big(\mathbf{F}(t),\mathbf{B}\big)=\mathrm{Sp}(\hat\rho\hat x_i)=\int\limits_0^{\infty}\alpha_{ij}\big(\tau,\mathbf{F}(t-\tau),\mathbf{B}\big)f_j(t-\tau)d\tau, \quad (11)$$

где функция отклика нелинейной системы имеет вид формулы Кубо [10]:

$$\alpha_{ij}\big(\tau,\mathbf{F}(t),\mathbf{B}\big)=\frac{i}{\hbar}\rho_{nm}\big(\mathbf{F}(t-\tau),\mathbf{B}\big)\exp\Big(\frac{-\tau}{\tau_{nm}}\Big)$$
$$\times\big\{x_{imk}(t,\mathbf{B})x_{jkn}(t-\tau,\mathbf{B})-x_{jmk}(t-\tau,\mathbf{B})x_{ikn}(t,\mathbf{B})\big\}. \quad (12)$$

Положим в формуле (1) $\mathbf{F}(t)=a\mathbf{F}'(t)$ и будем решать уравнение (10) методом последовательных приближений

$$\rho_{nm}(t)=\rho^{e}_{nm}+a\rho^{(1)}_{nm}(t)+a^2\rho^{(2)}_{nm}(t)+\ldots.$$

По стандартной процедуре [10] получаем

$$\rho_{nm}(t)=\rho^{e}_{nm}-\frac{i}{\hbar}\int\limits_0^{\infty}\exp\Big(-\frac{\tau'}{\tau_{nm}}\Big)$$
$$\times f_j(t-\tau')(\rho^{e}_{nn}-\rho^{e}_{mm})x_{jnm}(t-\tau')d\tau'$$
$$+\Big(\frac{i}{\hbar}\Big)^2\int\limits_0^{\infty}\int\limits_0^{\infty}\exp\Big(\frac{\tau'-\tau''}{\tau_{nl}}-\frac{\tau'}{\tau_{nm}}\Big)$$
$$\times f_j(t-\tau')f_k(t-\tau'')(\rho^{e}_{mm}-\rho^{e}_{ll})$$
$$\times x_{jnl}(t-\tau')x_{klm}(t-\tau'')d\tau'd\tau''$$
$$-\Big(\frac{i}{\hbar}\Big)^2\int\limits_0^{\infty}\int\limits_0^{\infty}\exp\Big(\frac{\tau'-\tau''}{\tau_{lm}}-\frac{\tau'}{\tau_{nm}}\Big)$$
$$\times f_j(t-\tau')f_k(t-\tau'')(\rho^{e}_{ll}-\rho^{e}_{nn})x_{jlm}(t-\tau')$$
$$\times x_{knl}(t-\tau'')d\tau'd\tau''+\ldots, \quad (13)$$

$$x_i(t)=-\frac{i}{\hbar}\int\limits_0^{\infty}\exp\Big(-\frac{\tau'}{\tau_{nm}}\Big)f_j(t-\tau')(\rho^{e}_{nn}-\rho^{e}_{mm})x_{imn}(t)$$
$$\times x_{jnm}(t-\tau')d\tau'+\Big(\frac{i}{\hbar}\Big)^2\int\limits_0^{\infty}\int\limits_0^{\infty}\exp\Big(\frac{\tau'-\tau''}{\tau_{nl}}-\frac{\tau'}{\tau_{nm}}\Big)$$
$$\times f_j(t-\tau')f_k(t-\tau'')(\rho^{e}_{mm}-\rho^{e}_{ll})x_{imn}(t)x_{jlm}(t-\tau')$$
$$\times x_{klm}(t-\tau'')d\tau'd\tau''-\Big(\frac{i}{\hbar}\Big)^2\int\limits_0^{\infty}\int\limits_0^{\infty}\exp\Big(\frac{\tau'-\tau''}{\tau_{lm}}-\frac{\tau'}{\tau_{nm}}\Big)$$
$$\times f_j(t-\tau')f_k(t-\tau'')(\rho^{e}_{ll}-\rho^{e}_{nn})x_{imn}(t)x_{jnl}(t-\tau')$$
$$\times x_{klm}(t-\tau'')d\tau'd\tau''+\ldots. \quad (14)$$

Из формулы (4) следует, что если в матричных элементах всех координат изменить аргумент t на $t-\theta$, то реакция $x_i(t)$ в формуле (14) не изменится. Из формулы (13) следует, что при этом все матричные элементы $\rho_{nm}(t)$ перейдут в $\rho_{nm}(t)\exp(-i\omega_{nm}\theta)$. Тогда, взяв в формуле (12) $\theta=t-\tau/2$, получим

$$\alpha_{ij}\big(\tau,\mathbf{F}(t),\mathbf{B}\big)=\frac{i\rho_{nm}(\mathbf{F}(t-\tau),\mathbf{B})}{\hbar\exp(\tau/\tau_{nm})}\exp\Big(i\omega_{nm}\big(\frac{\tau}{2}-t\big)\Big)$$
$$\times\Big\{x_{imk}\Big(\frac{\tau}{2},\mathbf{B}\Big)x_{jkn}\Big(-\frac{\tau}{2},\mathbf{B}\Big)-x_{jmk}\Big(-\frac{\tau}{2},\mathbf{B}\Big)x_{ikn}\Big(\frac{\tau}{2},\mathbf{B}\Big)\Big\}. \quad (15)$$

Соответственно с учетом соотношений (7) и (9)

$$\alpha_{ji}\big(\tau, -\mathbf{F}(t), -\mathbf{B}\big) = \frac{i\rho_{mn}(\mathbf{F}(t-\tau), \mathbf{B})}{\hbar \exp(\tau/\tau_{nm})}$$
$$\times \exp\left(i\omega_{mn}\left(\frac{\tau}{2} - t\right)\right)$$
$$\times \left\{x_{jmk}\left(\frac{\tau}{2}, -\mathbf{B}\right)x_{ikn}\left(-\frac{\tau}{2}, -\mathbf{B}\right)\right.$$
$$\left. - x_{imk}\left(-\frac{\tau}{2}, -\mathbf{B}\right)x_{jkn}\left(-\frac{\tau}{2}, -\mathbf{B}\right)\right\}.$$

Преобразуем эту формулу с учетом соотношений (5)

$$\alpha_{ji}\big(\tau, -\mathbf{F}(t), -\mathbf{B}\big) = \frac{i\rho_{mn}(\mathbf{F}(t-\tau), \mathbf{B})}{\hbar \exp(\tau/\tau_{nm})} \exp\left(i\omega_{mn}\left(\frac{\tau}{2} - t\right)\right)$$
$$\times \left\{x_{jkm}\left(-\frac{\tau}{2}, \mathbf{B}\right)x_{ink}\left(\frac{\tau}{2}, \mathbf{B}\right) - x_{ikm}\left(\frac{\tau}{2}, \mathbf{B}\right)x_{jnk}\left(-\frac{\tau}{2}, \mathbf{B}\right)\right\}$$

и выполним замену индексов $n \leftrightarrow m$

$$\alpha_{ji}\big(\tau, -\mathbf{F}(t), -\mathbf{B}\big) = \frac{i\rho_{nm}(\mathbf{F}(t-\tau), \mathbf{B})}{\hbar \exp(\tau/\tau_{nm})} \exp\left(i\omega_{nm}\left(\frac{\tau}{2} - t\right)\right)$$
$$\times \left\{x_{jkn}\left(-\frac{\tau}{2}, \mathbf{B}\right)x_{imk}\left(\frac{\tau}{2}, \mathbf{B}\right) - x_{ikn}\left(\frac{\tau}{2}, \mathbf{B}\right)x_{jmk}\left(-\frac{\tau}{2}, \mathbf{B}\right)\right\}. \tag{16}$$

Из сравнения формул (15) и (16) получаем соотношения взаимности для функции отклика нелинейной системы

$$\alpha_{ij}\big(\tau, \mathbf{F}(t), \mathbf{B}\big) = \alpha_{ji}\big(\tau, -\mathbf{F}(t), -\mathbf{B}\big). \tag{17}$$

Для многополюсника обобщенными силами по отношению к потенциалам зажимов φ_i в смысле формулы (1) являются заряды q_i, проходящие через эти зажимы [10]. Введем время установления многополюсника τ_r, такое, что все $\alpha_{ij}(\tau > \tau_r) \equiv 0$. С учетом экспоненциального множителя в формуле (12) можно принять, что $\tau_r > \max(\tau_{nm})$. Разложим в подынтегральном выражении формулы (11) силу в ряд Тейлора в окрестности точки t. В квазистационарном режиме при $\tau_r|d^2i_j/dt^2| \ll |di_j/dt|$, где $i_j = dq_j/dt$ — ток, втекающий в j-й зажим, при $\tau \leqslant \tau_r$ можно ограничиться третьим слагаемым ряда

$$\varphi_i(t) = \int_0^{\tau_r} \alpha_{ij}\big(\tau, \mathbf{Q}(t-\tau)\big)$$
$$\times \left(q_j(t) - \tau\frac{dq_j(t)}{dt} + \frac{\tau^2}{2}\frac{d^2q_j(t)}{dt^2} + \ldots\right)d\tau$$
$$= C_{ij}\big(\mathbf{Q}(t)\big)q_j(t) + L_{ij}\big(\mathbf{I}(t)\big)di_j/dt + R_{ij}\big(\mathbf{I}(t)\big)i_j(t), \tag{18}$$

где

$$C_{ij}\big(\mathbf{Q}(t)\big) = \int_0^{\infty} \alpha_{ij}\big(\tau, \mathbf{Q}(t-\tau)\big)d\tau,$$
$$L_{ij}\big(\mathbf{I}(t)\big) = \int_0^{\infty} \frac{\tau^2}{2}\alpha_{ij}\big(\tau, \mathbf{Q}(t-\tau)\big)d\tau,$$
$$R_{ij}\big(\mathbf{I}(t)\big) = -\int_0^{\infty} \tau\alpha_{ij}\big(\tau, \mathbf{Q}(t-\tau)\big)d\tau \tag{19}$$

— матрицы в общем случае нелинейных емкостей, индуктивностей и сопротивлений многополюсника соответственно. В формулах (18) и (19) учтено, что предыстория токов $\mathbf{I}(t)$ взаимно однозначно связана с предысторией зарядов $\mathbf{Q}(t)$. Тогда соотношения взаимности (17) с учетом формул (19) принимают вид

$$C_{ji}\big(\mathbf{Q}(t), \mathbf{B}\big) = C_{ij}\big(-\mathbf{Q}(t), -\mathbf{B}\big),$$
$$L_{ji}\big(\mathbf{I}(t), \mathbf{B}\big) = L_{ij}\big(-\mathbf{I}(t), -\mathbf{B}\big),$$
$$R_{ji}\big(\mathbf{I}(t), \mathbf{B}\big) = R_{ij}\big(-\mathbf{I}(t), -\mathbf{B}\big). \tag{20}$$

Последнее из соотношений (20) было проверено экспериментально [8,9] для нелинейного гальваномагнитного четырехполюсника в квазистационарном установившемся режиме, когда первыми двумя слагаемыми в правой части формулы (18) можно пренебречь и записать ее в виде

$$\varphi_i\big(\mathbf{I}(t), \mathbf{B}\big) = R_{ij}\big(\mathbf{I}(t), \mathbf{B}\big)i_j(t).$$

Свойства симметрии операторов, содержащих спиновые переменные, при инверсии времени более сложные, чем следует из формулы (14) [11]. Поэтому соотношения взаимности для нелинейных спиново-упорядоченных систем, в частности при наличии спиновых токов [3], требуют специального анализа.

Список литературы

[1] *Onsager L.* // Phys. Rev. 1931. V. 37. P. 405–426.
[2] *Снарский А.А., Буда С.И.* // ЖТФ. 1998. Т. 68. В. 11. С. 121–124.
[3] *Dejene F.K., Flipse J., van Wees B.J.* // Phys. Rev. B. 2014. V. 90. P. 180402(R).
[4] *Doi M., Makino M.* // J. Chem. Phys. 2008. V. 128. P. 044715.
[5] *Jacquod P., Whitney R.S., Meair J., Büttiker M.* // Phys. Rev. B. 2012. V. 86. P. 155118.
[6] *Балагуров Б.Я.* // ЖЭТФ. 2014. Т. 145. В. 6. С. 1101–1105.
[7] *Игнатьев В.К., Орлов А.А., Перченко С.В.* // Письма в ЖТФ. 2016. Т. 42. В. 4. С. 74–81.
[8] *Игнатьев В.К., Перченко С.В.* // ЖТФ. 2017. Т. 87. В. 6. С. 837–846.
[9] *Ignatjev V., Orlov A., Perchenko S.* // PIER Lett. 2016. V. 59. P. 71–75.
[10] *Файн В.М., Ханин Я.И.* Квантовая радиофизика. М.: Сов. радио, 1965. 606 с.
[11] *Ахиезер А.И., Пелетминский С.В.* Методы статистической физики. М.: Наука, 1977. 368 с.