Low Temperature Physics/Физика низких температур, 2014, т. 40, № 4, с. 468–471

# Намагниченность и поляризация электронного газа в мультиферроиках

В.А. Маргулис

*Мордовский государственный университет им. Н.П. Огарева*
*ул. Большевистская, 68, г. Саранск, 430005, Россия*
E-mail: theorphysics@mrsu.ru

Статья поступила в редакцию 16 октября 2013 г.

Рассмотрен микроскопический механизм намагниченности и поляризации, обусловленный сильной спин-орбитальной связью электронного газа в мультиферроиках. Получены явные аналитические выражения для намагниченности и поляризации электронного газа в мультиферроиках.

Розглянуто мікроскопічний механізм намагніченості та поляризації через сильний спін-орбітальний зв’язок електронного газу у мультифероіках. Отримано явні аналітичні вирази для намагніченості та поляризації електронного газу у мультифероіках.

PACS: **75.30.–m** Собственные свойства магнитоупорядоченных материалов;
**75.80.+q** Магнитомеханические эффекты, магнитострикция;
**75.85.+t** Магнитоэлектрические эффекты, мультиферроики.

Ключевые слова: мультиферроики, намагниченность, поляризация, электронный газ.

## 1. Введение

Недавно в [1] был предложен простой микроскопический механизм, позволяющий понять магнитоэлектрическую связь в неколлинеарных мультиферроиках. Этот механизм основан на идее, что ферроэлектричество имеет место только в частично заполненной электронной зоне. Это отличает такие неколлинеарные мультиферроики как $DyMnO_3$, $TbMnO_3$, $GdMnO_3$ от общеизвестных ферроэлектрических материалов, в которых электронные зоны или полностью заполнены, или пусты. Предложенный в [1] механизм обеспечивает некоторые качественные предсказания. В частности, объяснение причин малых, на два–три порядка меньше, по сравнению с обычными ферроэлектрическими материалами значениями ферроэлектричества. Заметим, что магнитные осцилляции де Гааза–ван Альфена в мультиферроиках экспериментально исследованы в [2].

Ясно, что в частично заполненной электронной зоне электроны образуют электронный газ с сильным спин-орбитальным взаимодействием. Гамильтониан одного электрона в такой зоне рассмотрен в [1] и имеет вид

$$H_e = \frac{1}{2m^*}(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A})^2 - \mu_B \mathrm{rot}\mathbf{A}\boldsymbol{\sigma} - e\alpha(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A})[\boldsymbol{\sigma}\times\mathbf{E}], \quad (1)$$

где $m^*$ — эффективная масса электрона, $\alpha$ — параметр эффективной спин-орбитальной связи, $\mu_B$ — магнетон Бора, $\mathbf{A}$ — векторный потенциал электромагнитного поля, $\sigma_i$ — матрица Паули, $\mathbf{E} = -\nabla U/e$ — напряженность внутреннего электрического поля, $U$ — потенциал решетки. Гамильтониан (1) описывает электрон в частично заполненной зоне, помещенный во внутреннее электрическое и внешнее магнитное поля.

Ясно, что спектр одноэлектронных состояний гамильтониана (1) зависит от напряженностей полей $\mathbf{B}$ и $\mathbf{E}$. Последнее слагаемое в (1) обусловлено только спин-орбитальным взаимодействием. В силу этого обстоятельства электроны в незаполненной зоне будут обладать как магнитным моментом $\mathbf{M}$, так и поляризационным моментом $\mathbf{P}$. Очевидно, что поляризация при этом будет зависеть от величины напряженности как электрического, так и магнитного поля. Целью настоящей работы является исследование намагниченности и поляризации электронов в незаполненной электронной зоне.

## 2. Электронный энергетический спектр

Рассмотрим случай, когда электрическое и магнитное поля однородные и постоянные. Тогда (1) можно представить в виде $H_e = H_0 + H_{so}$, где

$$H_0 = \frac{1}{2m^*}(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A})^2 - \mu_B \mathrm{rot}\mathbf{A}\boldsymbol{\sigma}, \quad (2)$$

а $H_{so}$ имеет вид

$$H_{so} = -e\alpha(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A})[\boldsymbol{\sigma}\times\mathbf{E}]. \qquad (3)$$

Пусть $\mathbf{B}\parallel oz$. Тогда

$$H_0 = \frac{1}{2m^*}(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A})^2 - \mu_B\sigma_z B, \qquad (4)$$

где, в калибровке Ландау, $\mathbf{A} = (-By, 0, 0)$.

Рассмотрим два случая: $\mathbf{E}\perp\mathbf{B}$ и $\mathbf{E}\parallel\mathbf{B}$. В первом случае выберем $\mathbf{E}\parallel Ox$. Тогда из (3) следует

$$H_{so}^{\perp} = e\alpha E(\sigma_y p_z - \sigma_z p_y). \qquad (5)$$

Если $\mathbf{E}\parallel z$, из (3) получаем

$$H_{so}^{\parallel} = e\alpha E(\sigma_x p_y - \sigma_y p_x) - \frac{e^2\alpha E}{c}By\sigma_y. \qquad (6)$$

Удобно ввести операторы вторичного квантования

$$a = \frac{[p_y + i(p_x - eA_x/c)]}{\sqrt{2m^*\hbar\omega_c}} \quad \text{и} \quad a^+ = \frac{[p_y - i(p_x - eA_x/c)]}{\sqrt{2m^*\hbar\omega_c}},$$

такие, что $\{a, a^+\} = 1$, где $\omega_c = |e|B/m^*c$, $A_x = -By$. В этом представлении гамильтониан $H_0$ имеет вид

$$H_0 = \hbar\omega_c\left(a^+a + \frac{1}{2}\right) - \hbar\omega_c\frac{m^*}{2m_0}\sigma_z + \frac{{p_z}^2}{2m^*}. \qquad (7)$$

В случае $\mathbf{E}\parallel\mathbf{B}$ имеем

$$H_{so} = eE\alpha\sqrt{\frac{m^*\hbar\omega_c}{2}}[(a + a^+)\sigma_x + i\sigma_y(a - a^+)]. \qquad (8)$$

Из (8) получим

$$H_{so} = \sqrt{2m^*\hbar\omega_c}\,e\alpha E\begin{pmatrix} 0 & a \\ a^+ & 0 \end{pmatrix}. \qquad (9)$$

Введем обозначения для спектра $H_0$ без спинового члена.

$$E_{np_z} = \hbar\omega_c\left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{p_z^2}{2m^*}. \qquad (10)$$

Обозначим $\beta = m^*/2m_0$ и $\gamma = eE\alpha\sqrt{2m^*/\hbar\omega_c}$. Тогда уравнение Шредингера примет вид

$$\left[\left(a^+a + \frac{1}{2}\right) + \beta\sigma_z + \gamma\begin{pmatrix} 0 & a \\ a^+ & 0 \end{pmatrix}\right]\Psi = \varepsilon\Psi, \qquad (11)$$

где $\varepsilon = (E - p_z^2/2m^*)/\hbar\omega_c$, а $E$ — спектр $H_0 + H_{so}$. Вводя двухкомпонентную функцию $\Psi = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix}$, получим систему двух уравнений:

$$\begin{cases} (a^+a + 1/2)f_1 + \beta f_1 + \gamma a f_2 = \varepsilon f_1, \\ (a^+a + 1/2)f_2 - \beta f_1 + \gamma a^+ f_1 = \varepsilon f_2. \end{cases} \qquad (12)$$

Для решения системы (12) разложим $f_1$ и $f_2$ по осцилляторным функциям $\Psi_s$ таким, что

$$a_s\Psi_s = \sqrt{s}\Psi_{s-1}; \quad a_s^+ = \sqrt{s+1}\Psi_{s+1}. \qquad (13)$$

Тогда

$$f_1 = \sum_{s=0}^{\infty}c_s\Psi_s, \quad f_2 = \sum_{s=0}^{\infty}d_s\Psi_s.$$

Используя (13), из (12) получим

$$\sum_{s=0}^{\infty}\{[(s+1/2)c_s + \beta c_s]\Psi_s + \gamma\sqrt{s}d_s\Psi_{s-1}\} = \varepsilon\sum_{s=0}^{\infty}c_s\Psi_s,$$

$$\sum_{s=0}^{\infty}\{[(s+1/2)d_s - \beta d_s]\Psi_s + \gamma\sqrt{s+1}c_s\Psi_{s+1}\} = \varepsilon\sum_{s=0}^{\infty}d_s\Psi_s. \qquad (14)$$

После простых преобразований из (14) получим уравнения

$$(s+1/2)c_s + \beta c_s + \gamma\sqrt{s+1}d_{s+1} = \varepsilon c_s,$$

$$(s+1/2)d_s - \beta d_s + \gamma\sqrt{s}c_{s-1} = \varepsilon d_s. \qquad (15)$$

Из первого уравнения (15) имеем

$$\frac{c_{s-1}}{d_s} = -\frac{\gamma\sqrt{s}}{s - 1/2 + \beta - \varepsilon}. \qquad (16)$$

Из второго получим

$$\frac{c_{s-1}}{d_s} = \frac{\varepsilon - (s+1/2) + \beta}{\gamma\sqrt{s}}. \qquad (17)$$

Из (16) и (17) получим уравнение для $\varepsilon$

$$(\varepsilon - s - 1/2 + \beta)(\varepsilon - s + 1/2 + \beta) = \gamma^2 s. \qquad (18)$$

Решая (18), получим два решения $\varepsilon^+$ и $\varepsilon^-$

$$\varepsilon^{\pm} = s \pm \sqrt{(\beta - 1/2)^2 + \gamma^2 s}. \qquad (19)$$

Здесь квантовое число $s$ пробегает значения $s = 0, 1, 2, \ldots$ Спектр гамильтониана $H_e$ состоит из двух систем уровней

$$E_{sp_z}^{\pm} = \frac{p_z^2}{2m^*} + \hbar\omega_c\left[s \pm \sqrt{(\beta - 1/2)^2 + \gamma^2 s}\right]. \qquad (20)$$

Гамильтониан при $\mathbf{E}\perp\mathbf{B}$, $\mathbf{E}\parallel ox$, $\mathbf{B}\parallel oz$ имеет вид

$$H_e^{\perp} = \frac{1}{2m^*}\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 - \mu_B\sigma_z B + e\alpha E(\sigma_y p_z - \sigma_z p_y). \qquad (21)$$

Вновь вводя операторы $a$ и $a^+$, получим

$$H_e^\perp = \hbar\omega_c(a^+a+1/2)-\hbar\omega_c\frac{m^*}{2m}\sigma_z -$$

$$-e\alpha E\sigma_z\sqrt{\frac{m^*\hbar\omega_c}{2}}(a^++a)+e\alpha Ep_z\sigma_y. \qquad (22)$$

Введем $\delta_0 = e\alpha Ep_z/\hbar\omega_c$, тогда

$$H^\perp = \hbar\omega_c[a^+a+1/2-\beta\sigma_z+\delta_0\sigma_y-\gamma\sigma_z(a+a^+)]. \qquad (23)$$

Вводя двухкомпонентную волновую функцию, получим, аналогично предыдущему случаю, систему

$$(s+1/2+\beta-\varepsilon)c_s - i\delta_0 d_s-\gamma(\sqrt{s+1}c_{s+1}+\sqrt{s}c_{s-1})=0,$$

$$(s+1/2-\beta-\varepsilon)d_s + i\delta_0 c_s+\gamma(\sqrt{s+1}d_{s+1}+\sqrt{s}d_{s-1})=0. \qquad (24)$$

Система (24) состоит из двух трехчленных рекурентных соотношений и не решается аналитически. Поэтому далее рассматривается только случай $\mathbf{E}\parallel\mathbf{H}$.

### 3. Магнитный и поляризационный момент

Для нахождения магнитного момента **M** и поляризационного момента **P** электронного газа необходимо найти его термодинамический потенциал $\Omega$. Через производные $\Omega$ по напряженности магнитного или электрического поля выражаются магнитный и электрический отклики соответственно.

Для нахождения $\Omega$ удобно использовать подход, основанный на вычислении классической статсуммы электронного газа $Z$ [3–5].

$$Z=\sum_{s,p_z}\mathrm{e}^{E^+_{sp_z}/T}+\sum_{s,p_z}\mathrm{e}^{E^-_{sp_z}/T}. \qquad (25)$$

Воспользовавшись (20), получим

$$Z=\frac{A}{\sqrt{\xi}}\left[\mathrm{e}^{-\delta\xi}+2\sum_{s=1}^{\infty}\mathrm{ch}(\xi\sqrt{\delta^2+\gamma^2 s})\mathrm{e}^{-\xi s}\right]. \qquad (26)$$

Здесь $\xi=\hbar\omega_c/T$, безразмерная величина $A$ определяется соотношением

$$A=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\frac{V}{l_c^3}, \qquad (27)$$

где $l_c=\sqrt{\hbar/m^*\omega_c}$ — магнитная длина, $V$ — объем газа.

Для нахождения $\Omega$ воспользуемся зависимостью термодинамического потенциала от $Z$ [4].

$$\Omega=\frac{1}{2\pi i}\int_{\alpha-i\infty}^{\alpha+i\infty}\frac{Z(\xi)d\xi}{\xi^2}\int_0^\infty \mathrm{e}^{E\xi}\frac{\partial f_0}{\partial E}dE, \qquad (28)$$

где $\alpha<1/T$, $f_0$ — функция Ферми, $\xi=\dfrac{1}{T}$.

Для дальнейшего удобно ввести величину

$$z(\varepsilon)=\frac{1}{2\pi i}\int_{\alpha-i\infty}^{\alpha+i\infty}\frac{\mathrm{e}^{\varepsilon\xi}Z(\xi)d\xi}{\xi^2}. \qquad (29)$$

Рассмотрим далее только случай сильно вырожденного электронного газа и введем $\eta=(\varepsilon-\mu)/T$. Тогда

$$\Omega=\int_{-\mu/T}^{\infty}z(\mu+T\eta)\frac{\partial f_0}{\partial\eta}d\eta, \qquad (30)$$

где в нашем случае $\mu/T>>1$. Из (30) вытекает оценка

$$\Omega=\int_{-\infty}^{\infty}z(\mu+T\eta)\frac{\partial f_0}{\partial\eta}d\eta. \qquad (31)$$

Поскольку $-(\partial f_0/\partial\varepsilon)$ — $\delta$-образный пик, основной вклад в (31) вносит область $\eta<<1$. Раскладывая $z$ в ряд Тейлора и отбрасывая члены $\sim\eta^3$, получим оценку

$$z(\mu+T\eta)\simeq z(\mu)+z'(\mu)\eta T+1/2z''(\mu)T^2\eta^2+O(\eta^3). \qquad (32)$$

Член с $z'(\mu)$ дает нулевой вклад в (31), поэтому получим

$$\Omega\simeq -z(\mu)-\frac{\pi^2T^2}{6}z''(\mu). \qquad (33)$$

Входящие в $z(\mu)$ и $z''(\mu)$ интегралы вычисляются с помощью формулы 2.3.3.4 из [6].

$$\frac{1}{2\pi i}\int_{\alpha-i\infty}^{\alpha+i\infty}z^{\gamma-1}\mathrm{e}^{-pz}dz=\begin{cases}0, & p>0\\ \dfrac{1}{(-p)^\gamma\Gamma(1-\gamma)}, & p<0\end{cases}, \qquad (34)$$

где $\alpha>0$, $\mathrm{Re}\gamma<1$. Используя (34), получим

$$\Omega=-\frac{A\hbar\omega_c}{\sqrt{\pi}}(\zeta-\delta)^{3/2}\left[\frac{4}{3}+\frac{1}{6}\left(\frac{\pi T}{\mu-\hbar\omega_c\delta}\right)^2\right]+\frac{A\hbar\omega_c}{\sqrt{\pi}}\left\{\sum_{s=1}^{n_1}\left[\frac{4}{3}(\zeta-s+\sqrt{\delta^2+\gamma^2 s})\right]^{3/2}+\right.$$

$$\left.+\frac{1}{6}\left(\frac{\pi T}{\hbar\omega_c}\right)^2\frac{1}{(\zeta-s+\sqrt{\delta^2+\gamma^2 s})^{1/2}}+\sum_{s=1}^{n_2}\left[\frac{4}{3}\left(\zeta-s-\sqrt{\delta^2+\gamma^2 s}\right)^{3/2}+\frac{1}{6}\left(\frac{\pi T}{\hbar\omega_c}\right)^2\frac{1}{(\zeta-s-\sqrt{\delta^2+\gamma^2 s})^{1/2}}\right]\right\}. \qquad (35)$$

где $\zeta=\mu/\hbar\omega_c$.

Здесь $n_1$ и $n_2$ соответствуют максимальному $s$, которое удовлетворяет условиям $s-\sqrt{\delta^2+\gamma^2 s}<\zeta$ и $s+\sqrt{\delta^2+\gamma^2 s}<\zeta$ соответственно.

Заметим, что из-за зависимости $n_{1,2}$ от величин напряженностей электрического и магнитного полей, находить электрический и магнитный отклики прямым дифференцированием (35) неудобно. Проще воспользоваться соотношением (33) и найти производные $z(\mu)$ и $z''(\mu)$ по напряженности полей, а затем вычислить производные $\mathbf{M}=-(\partial\Omega/\partial\mathbf{B})$ и $\mathbf{P}=-(\partial\Omega/\partial\mathbf{E})$. Используя (34), после громоздких, но простых преобразований, получим

$$\frac{M}{2\mu_{B^*}}=A\sum_{s=1}^{n_1}\left[\frac{10}{3\sqrt{\pi}}\kappa_1^{3/2}(s)-\frac{2}{\sqrt{\pi}}\frac{\mu}{\hbar\omega_c}\kappa_1^{1/2}(s)+\frac{\pi^2T^2}{6(\hbar\omega_c)^2}\frac{1}{2\sqrt{\pi}}\left(\kappa_1^{-1/2}(s)+\frac{\mu}{\hbar\omega_c}\kappa_1^{-3/2}(s)\right)\right]+$$

$$+A\sum_{s=1}^{n_2}\left[\frac{10}{3\sqrt{\pi}}\kappa_2^{3/2}(s)-\frac{\sqrt{\pi}}{2}\frac{\mu}{\hbar\omega_c}\kappa_2^{1/2}(s)++\frac{\pi^2T^2}{6(\hbar\omega_c)^2}\frac{1}{2\sqrt{\pi}}\left(\kappa_2^{-1/2}(s)+\frac{\mu}{\hbar\omega_c}\kappa_2^{-3/2}(s)\right)\right]+A\left\{\frac{10}{3\sqrt{\pi}}(\zeta-\delta)^{3/2}-\right.$$

$$\left.-\frac{2}{\sqrt{\pi}}\frac{\mu}{\hbar\omega_c}\sqrt{\zeta-\delta}+\frac{1}{2\sqrt{\pi}}\left[\frac{1}{\sqrt{\zeta-\delta}}+\frac{\mu}{\hbar\omega_c}\frac{1}{(\zeta-\delta)^{3/2}}\right]\frac{\pi^2T^2}{6(\hbar\omega_c)^2}\right\}, \tag{36}$$

где $\mu_{B^*}=\dfrac{e\hbar}{2m^*c}$, $\kappa_1(s)=\zeta-s+\sqrt{\delta^2+\gamma^2}s$, $\kappa_2(s)=\zeta-s-\sqrt{\delta^2+\gamma^2}s$.

В квазиклассическом приближении [7] из (36) получим при $T=0$ оценку

$$\frac{M_{\text{osc}}}{2\mu_{B^*}}=\frac{V}{\pi^4 l_c^3}\sum_{\nu=1}^{\infty}\frac{1}{\nu^{5/2}}\cos\left(\frac{\dfrac{2\pi\nu\xi}{\hbar\omega_c}-\pi}{4}\right). \tag{37}$$

Вычисляя производные от $\zeta(n)$ и $\zeta''(n)$ по электрическому и магнитному полям и используя (33), получим

$$P=\frac{A\gamma\gamma_0\sqrt{\pi}}{2}(\hbar\omega_c)\left[\sum_{s=1}^{n_1}\frac{s}{\sqrt{\delta^2+\gamma^2 s}}\kappa_1^{1/2}-\right.$$

$$\left.-\sum_{s=1}^{n_2}\frac{s}{\sqrt{\delta^2+\gamma^2 s}}\kappa_2^{1/2}\right]-\frac{\pi^2T^2}{6(\hbar\omega_c)^2}\frac{A\gamma\gamma_0}{2\sqrt{\pi}}(\hbar\omega_c)\times$$

$$\times\left[\sum_{s=1}^{n_1}\frac{s}{\sqrt{\delta^2+\gamma^2 s}}\kappa_1^{-3/2}-\sum_{s=1}^{n_2}\frac{s}{\sqrt{\delta^2+\gamma^2 s}}\kappa_2^{-3/2}\right], \tag{38}$$

где $\gamma_0=e\alpha\sqrt{2m^*/\hbar\omega_c}$. Входящие в (38) суммы легко оценить, заменяя их интегралами. После простых оценок находим

$$P\sim\frac{A\sqrt{\pi}\gamma\gamma_0}{2}\hbar\omega_c\zeta^{3/2}. \tag{39}$$

Подставляя в (39) $\omega_c\sim 10^{13}$ с$^{-1}$, $\gamma\sim 0{,}02$ и $E\sim 1$ В/м, получим для $\zeta\sim 10$ значение $P\sim 0{,}1$μКл/см$^2$. Таким образом, для электронов в зоне поляризация, обусловленная спиральным магнитным порядком [1] и спин-орбитальным взаимодействием (39), имеет один порядок величины (на два порядка меньше, чем в обычных ферроэлектриках [1]).

Как ясно из вышеизложенного, при исследовании мультиферроиков в модели, основанной на электронах в незаполненной зоне, поляризация, обусловленная спин-орбитальной связью дает значительный вклад в величину $P$.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации, ГК № 11.519.11.3023.

1. J. Hu, *Phys. Rev. Lett*. **100**, 077202 (2008).
2. V.A. Sanina, E.I. Golovenchits, V.G. Zalesskii, and M.P. Scheglov, *J. Phys.: Condens. Matter* **23**, 456003 (2011).
3. А.М. Переломов, *Обобщенные когерентные состояния и их применения*, Наука, Москва (1987).
4. Ю.Б. Румер, *ЖЭТФ* **18**, 1081 (1948).
5. И.И. Бойко, Э.И. Рашба, *ФТТ* **2**, 1874 (1960).
6. А.М. Прудников, Ю.А. Брычков, О.И. Маричев, *Интегралы и ряды. Элементарные функции*, Наука, Москва (1981).
7. И.М. Лифшиц, А.М. Косевич, *ЖЭТФ* **29**, 730 (1955).

## Magnetization and polarization of electron gas in multiferroics

V.A. Margulis

The microscopic mechanism of magnetization and polarization determined by the strong spin-orbital coupling of the electron gas in multiferroics is considered. Explicit analytic expressions for magnetization and polarization of electron gas in multiferroics are obtained.

PACS: **75.30.–m** Intrinsic properties of magnetically ordered materials;
**75.80.+q** Magnetomechanical effects, magnetostriction;
**75.85.+t** Magnetoelectric effects, multiferroics.

Keywords: multiferroics, magnetization, polarization, electron gas.