

Мультиферроики: точки зрения и факты



В.П. Сахненко, Н.В. Тер-Оганесян

НИИ физики Южного федерального университета

?

$$\operatorname{div} \vec{E} = \rho$$

$$\operatorname{div} \vec{B} = 0$$

$$\operatorname{rot} \vec{H} = \cancel{j} + \cancel{\frac{\partial \vec{D}}{\partial t}}$$

$$\operatorname{rot} \vec{E} = -\cancel{\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}}$$



Кало Фрида, «Две Фирды». 1939 г.

Обменное взаимодействие

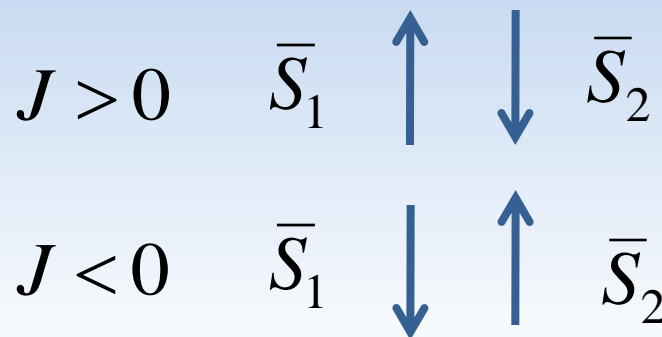
$$J(f_1, f_2, f_2, f_1) = \int \Psi_{f_1}^*(\bar{r}_1) \Psi_{f_2}^*(\bar{r}_2) \frac{e^2}{|\bar{r}_1 - \bar{r}_2|} \Psi_{f_2}(\bar{r}_1) \Psi_{f_1}(\bar{r}_2) d\bar{r}_1 d\bar{r}_2$$

По Дираку это взаимодействие может быть представлено в форме:

$$\hat{V}_{общ} = -\frac{1}{2} J (1 + 4\hat{S}_1 \hat{S}_2)$$

$$V = -J(\bar{S}_1 \cdot \bar{S}_2)$$

\bar{S} - классический аксиальный вектор



Гамильтониан по Боголюбову

$$\hat{H} = \sum_{f \dots} H_f \dots a_f^+ a_f + \dots +$$
$$+ \sum_{f \dots} J(f_1 \dots, f_2 \dots, f_2 \dots, f_1 \dots) a_{f_1}^+ \dots a_{f_2}^+ \dots a_{f_2} \dots a_{f_1}$$

$f \dots - \Psi_{nlm\sigma}$

Эквивалентный гамильтониан

$$\left\{ \begin{array}{l} S_f^x = \frac{1}{2} (a_{f_0}^+ a_{f_1} + a_{f_1}^+ a_{f_0}) \\ S_f^y = \frac{1}{2i} (a_{f_0}^+ a_{f_1} - a_{f_1} a_{f_0}) \quad (0, 1) \rightarrow (1/2, -1/2) \\ S_f^z = \frac{1}{2} (a_{f_0}^+ a_{f_0} - a_{f_1}^+ a_{f_1}) \\ a_{f_1}^+ a_{f_1} + a_{f_0}^+ a_{f_0} = 1 \quad (\text{условие квазигомеоплярности}) \end{array} \right.$$

$$a^+ a = f(S)$$

$$J(f_1, f_2) a_{f_1}^+ a_{f_2}^+ a_{f_2} a_{f_1}$$

$$V_{обм} = -\frac{1}{2} J \left(1 + 4 \hat{S}_1 \hat{S}_2 \right)$$

Если два атома с электронами не в s-состоянии, то аналогично вводим операторы орбитального момента.

В самом простом случае **p-электронов** ($l=1$) получим

$$\left\{ \begin{array}{l} l_f^x = i \sum_{\sigma} a_{f_{y\sigma}}^+ a_{f_{x\sigma}} - a_{f_{x\sigma}}^+ a_{f_{y\sigma}} \\ l_f^y = i \sum_{\sigma} a_{f_{z\sigma}}^+ a_{f_{y\sigma}} - a_{f_{y\sigma}}^+ a_{f_{z\sigma}} \\ l_f^z = i \sum_{\sigma} a_{f_{x\sigma}}^+ a_{f_{z\sigma}} - a_{f_{z\sigma}}^+ a_{f_{x\sigma}} \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{l}_{fx}^2 = a_{f_{y0}}^+ a_{f_{y0}} + a_{f_{y1}}^+ a_{f_{y1}} + a_{f_{z0}}^+ a_{f_{z0}} + a_{f_{z1}}^+ a_{f_{z1}} \\ \dots \\ l_f^x l_{fy}^y = -a_{f_{y0}}^+ a_{f_{x0}} - a_{f_{y1}}^+ a_{f_{x1}} \\ l^x l^y S^x = -\frac{1}{2} a_{f_{y0}}^+ a_{f_{x0}} - \frac{1}{2} a_{f_{y1}}^+ a_{f_{x0}} \\ \dots \end{array} \right.$$

$$J(1 + 4\bar{S}_1\bar{S}_2) \rightarrow R(f_1\lambda_1, f_2\lambda_2, f_2\lambda_2', f_1\lambda_1') l_{f_1}^{\lambda_1'} l_{f_1}^{\lambda_1} l_{f_2}^{\lambda_2'} l_{f_2}^{\lambda_2} (1 + 4\bar{S}_1\bar{S}_2)$$

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(\bar{r}_1 - \bar{r}_2) + A[\hat{L}\hat{S}] \quad H\Psi = E\Psi \quad \Psi = \Psi_0 + \Psi'$$

Строим эквивалентный гамильтониан в этом базисе



$$\bar{d}_{f_i f_k} [\bar{S}_{f_i} \times \bar{S}_{f_k}]$$

$$\begin{aligned} & (S_{f_1}^x S_{f_2}^y - S_{f_2}^x S_{f_1}^y) [(1 - l_{f_1}^{y^2})(l_{f_2}^y l_{f_2}^x + l_{f_2}^x l_{f_2}^y) - (1 - l_{f_2}^{y^2})(l_{f_1}^y l_{f_1}^x + l_{f_1}^x l_{f_1}^y) + \\ & + (1 - l_{f_1}^{x^2})(l_{f_2}^y l_{f_2}^x + l_{f_2}^x l_{f_2}^y) - (1 - l_{f_2}^{x^2})(l_{f_1}^y l_{f_1}^x + l_{f_1}^x l_{f_1}^y) + \dots] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & (S_{f_1}^x S_{f_2}^y - S_{f_2}^x S_{f_1}^y) [(2 - l_{f_1}^{x^2} - l_{f_1}^{y^2})(l_{f_2}^y l_{f_2}^x + l_{f_2}^x l_{f_2}^y) - \\ & - (2 - l_{f_2}^{x^2} - l_{f_2}^{y^2})(l_{f_1}^y l_{f_1}^x + l_{f_1}^x l_{f_1}^y)] \end{aligned}$$

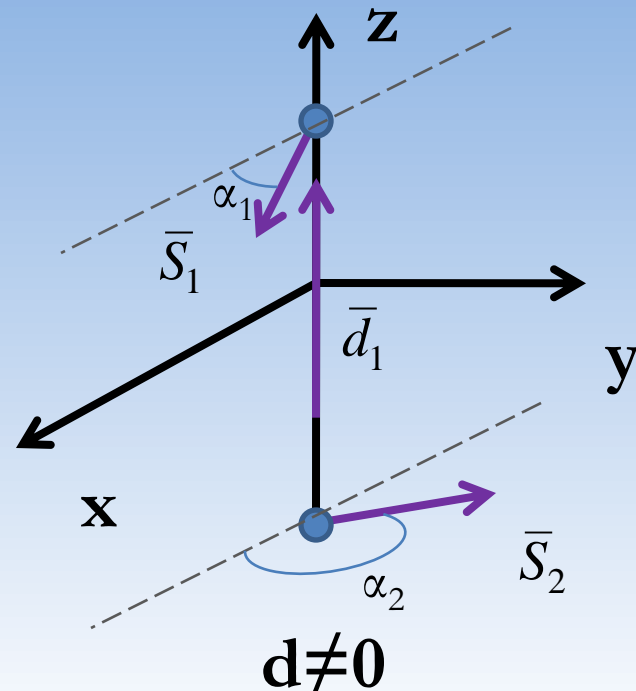
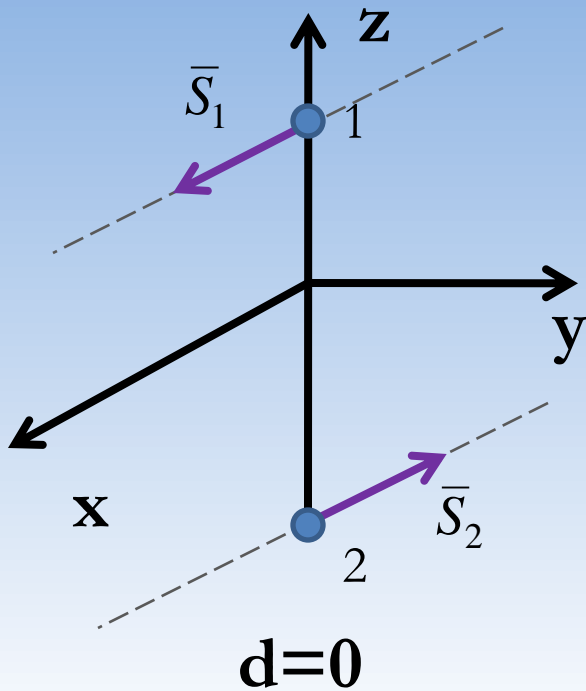
$$U = -J(\bar{S}_1 \cdot \bar{S}_2) + Ad\bar{d}[\bar{S}_1 \times \bar{S}_2] + \frac{1}{2\alpha}\bar{d}^2$$

Пусть $\bar{S} = \{S_x, S_y\} \rightarrow \bar{d} = \{0, 0, d_z\}$

$$U = -J(\bar{S}_{1x}S_{2x} + \bar{S}_{1y}S_{2y}) + d(S_{1x}S_{2y} + S_{1y}S_{2x}) + \frac{1}{2\alpha}d^2$$

$$S_x = S \cos(\alpha), S_y = S \sin(\alpha), S^2 = const$$

$$U = -JS^2 \cos(\varphi) + AdS^2 \sin(\varphi) + \frac{1}{2\alpha}d^2, \quad \varphi = \alpha_1 - \alpha_2$$



$$\frac{\partial U}{\partial \varphi} = J \sin(\varphi) - Ad \cos(\varphi) = 0 \quad \text{tg}(\varphi) = \frac{Ad}{J}$$

$$\frac{\partial U}{\partial d} = -Ad^2 \sin(\varphi) + \frac{1}{\alpha} d = 0$$

$$-AS^2 \frac{\text{tg}(\varphi)}{\sqrt{1+\text{tg}^2(\varphi)}} + \frac{1}{\alpha} d = 0$$

$$-AS^2 \frac{\text{tg}(\varphi)}{\sqrt{1+\frac{A^2 d^2}{J^2}}} + \frac{1}{\alpha} d = 0$$

1) $d=0$

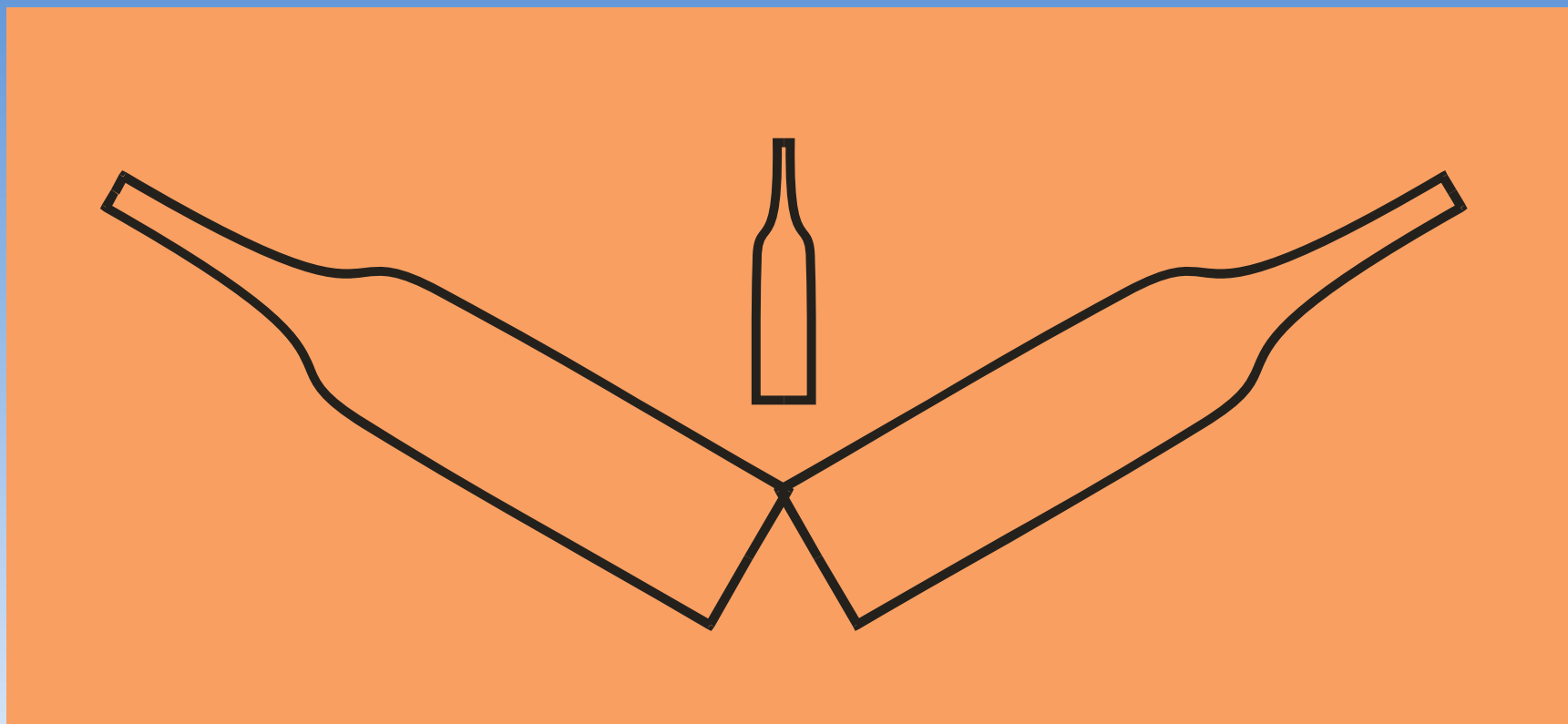
$$2) -\frac{A^2 S^2}{\sqrt{J^2 + A^2 d^2}} + \frac{1}{\alpha} = 0 \quad d = \sqrt{\alpha^2 A^2 S^4 - \frac{J^2}{A^2}}$$

$\text{tg}(\varphi) = 0, \pi$

$$\text{tg}(\varphi) = \frac{A}{J} \sqrt{\dots}$$

$$\left(\alpha > \frac{|J|}{A^2 S^2}\right)$$

Слабый ферромагнетизм



Hosho Katsura, Naoto Naga, Alexander V. Balatsky “Spin Current and Magnetoelectric Effect in Noncollinear Magnets”. Phys. Rev. Let. 95, 2005, p.057205

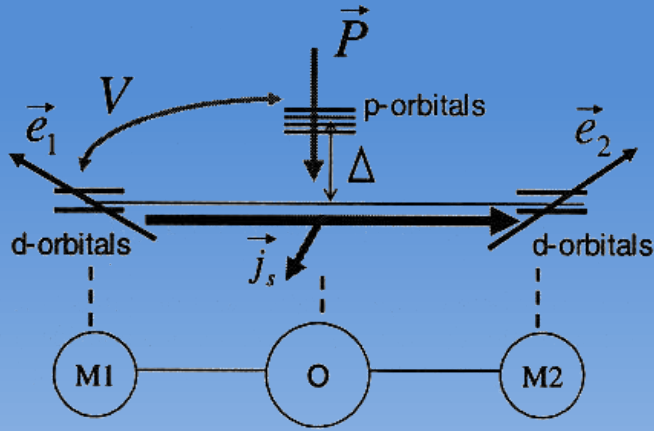


FIG. 1 (color online). The cluster model with two transition metal ions M1, M2 with the oxygen atom O between them. With the noncollinear spin directions \vec{e}_1 and \vec{e}_2 , there arises the spin current $\vec{j}_s \propto \vec{e}_1 \times \vec{e}_2$ between M1 and M2. Here the direction of the vector \vec{j}_s (denoted by the short arrow near the middle of the diagram) is that of the spin polarization carried by the spin current. The direction of the electric polarization \vec{P} is given by $\vec{P} \propto \vec{e}_{12} \times \vec{j}_s$ where \vec{e}_{12} is the unit vector connecting M1 and M2.

$$\vec{P} \sim \vec{e}_{12} \times [\vec{S}_1 \times \vec{S}_2]$$

A.S. Moskvin and S.L. Drechsler “Microscopic mechanisms of spin-dependent electric polarization in 3d oxides”. Phys. Rev. B. 78. 2008. 0241102

$$\vec{P} \sim \vec{\Pi}_{mn} \bullet (\vec{S}_m \bullet \vec{S}_n)$$

MnWO₄:

	x	y	z
Mn ₁	0,5	0,6853	0,25
Mn ₂	0,5	0,3147	0,25

$$\vec{F} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$$

$$\vec{A} = \vec{S}_1 - \vec{S}_2$$

Неприводимые представления:

	C _{2y} (00 ^{1/2})	I(000)	C _{2y} (00 ^{1/2})τ	I(000) τ
F _x , F _y	-1	1	1	-1
A _x , A _y	-1	-1	1	1
F _y	1	1	-1	-1
A _y	1	-1	-1	1
P _x , P _z	-1	-1	-1	-1
P _y	1	-1	1	-1

Магнитоэлектрическое взаимодействие:

$$P_x \cdot A_x \cdot F_y$$

$$P_y \cdot A_x \cdot F_y$$

$$P_z \cdot A_x \cdot F_y$$

$$P_x \cdot A_z \cdot F_y$$

$$P_y \cdot A_x \cdot F_z$$

$$P_z \cdot A_z \cdot F_y$$

$$P_x \cdot A_y \cdot F_x$$

$$P_y \cdot A_z \cdot F_x$$

$$P_z \cdot A_y \cdot F_x$$

$$P_x \cdot A_y \cdot F_y$$

$$P_y \cdot A_z \cdot F_z$$

$$P_z \cdot A_y \cdot F_z$$

$$P_y \cdot A_y \cdot F_y$$

Локальная симметрия Mn – C₂

О.В.Ковалёв «Антиферромагнетики с электрической поляризацией».

Кристаллография. Том 18. Вып. 2. 1973 г. С.221-226

Антиферромагнитные сегнетоэлектрики в кристаллах класса D_{2h}

Space group	Points of the Brillouin zone
D_{2h}^2 (Pnnn)	X, Y, Z, S, T, U
D_{2h}^3 (Pccm)	Z, T, U, R
D_{2h}^4 (Pban)	X, Y, S, T, U, R
D_{2h}^5 (Pmma)	X, S, U, R
D_{2h}^6 (Pnna)	X, Y, Z, U, R
D_{2h}^7 (Pmna)	X, S, Z, T
D_{2h}^8 (Pcca)	X, Z, S, T
D_{2h}^9 (Pbam)	X, Y, T, U
D_{2h}^{10} (Pccn)	X, Y, Z
D_{2h}^{11} (Pbcm)	Y, Z, S, U

Space group	Points of the Brillouin zone
D_{2h}^{12} (Pnnm)	X, Y, Z
D_{2h}^{13} (Pmmn)	X, Y, T, U
D_{2h}^{14} (Pbcn)	X, Y, Z
D_{2h}^{15} (Pbca)	X, Y, Z
D_{2h}^{16} (Pnma)	X, Y, Z
D_{2h}^{17} (Cmcm)	Z
D_{2h}^{18} (Cmca)	Z, T
D_{2h}^{20} (Cccm)	Z, T
D_{2h}^{22} (Ccca)	Z, T
D_{2h}^{24} (Fddd)	Y, Z, T

$$\mathbf{X}: \bar{k}_{20} = \left(\frac{1}{2} 0 0 \right)$$

$$\mathbf{Y}: \bar{k}_{21} = \left(0 \frac{1}{2} 0 \right)$$

$$\mathbf{Z}: \bar{k}_{22} = \left(0 0 \frac{1}{2} \right)$$

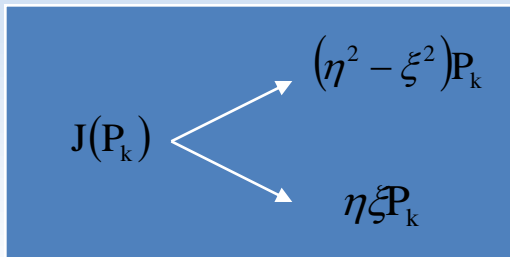
$$\mathbf{T}: \bar{k}_{23} = \left(0 \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right)$$

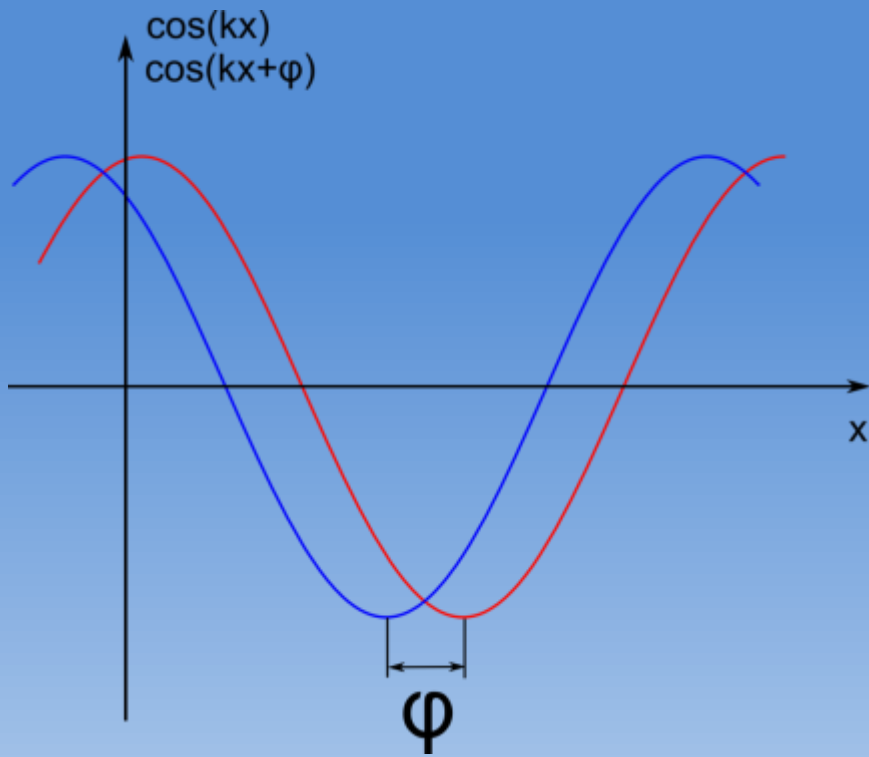
$$\mathbf{U}: \bar{k}_{24} = \left(\frac{1}{2} 0 \frac{1}{2} \right)$$

$$\mathbf{S}: \bar{k}_{25} = \left(\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0 \right)$$

$$\mathbf{R}: \bar{k}_{26} = \left(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right)$$

$$\Phi = \Phi_0 + \frac{1}{V} \int \left\{ \frac{\alpha}{2} (\eta^2 + \xi^2) + \frac{\beta_1}{2} (\eta^4 + \xi^4) + \frac{\beta_2}{2} (\eta^2 + \xi^2)^2 + \frac{1}{2\chi_i} P_i^2 + \frac{1}{2\chi_k} P_k^2 + \right. \\ \left. + \sigma \left(\eta \frac{\partial \xi}{\partial x_i} - \xi \frac{\partial \eta}{\partial x_i} \right) + \delta \left[\left(\frac{\partial \eta}{\partial x_i} \right)^2 + \left(\frac{\partial \xi}{\partial x_i} \right)^2 \right] + f_1 \eta \xi (\eta^2 - \xi^2) P_i + f_2 J(P_k) \right\} dV$$





$$\cos(kx)\cos(kx+\varphi)P = \frac{1}{2}(\cos(2kx+\varphi) + \cos(\varphi))P$$

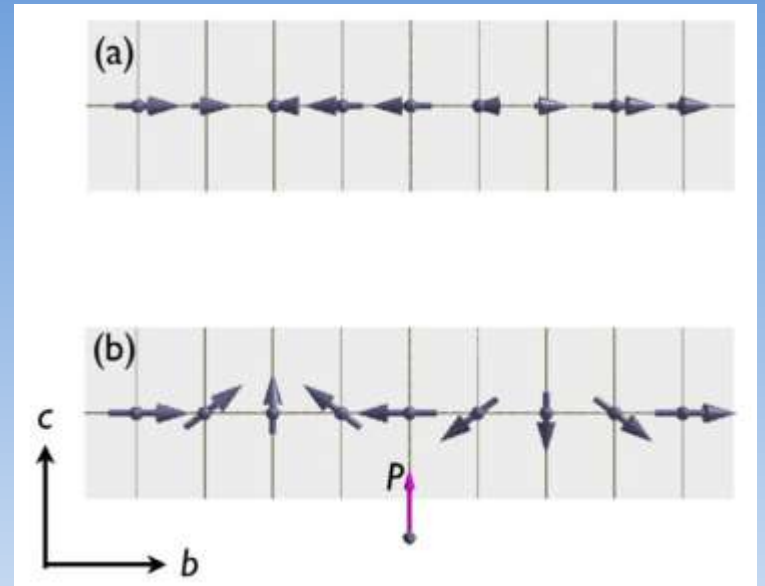
MnWO₄:

$$G_1: (a_1, b_1): a_1 = r_1 \cos(kx); b_1 = r_1 \sin(kx)$$

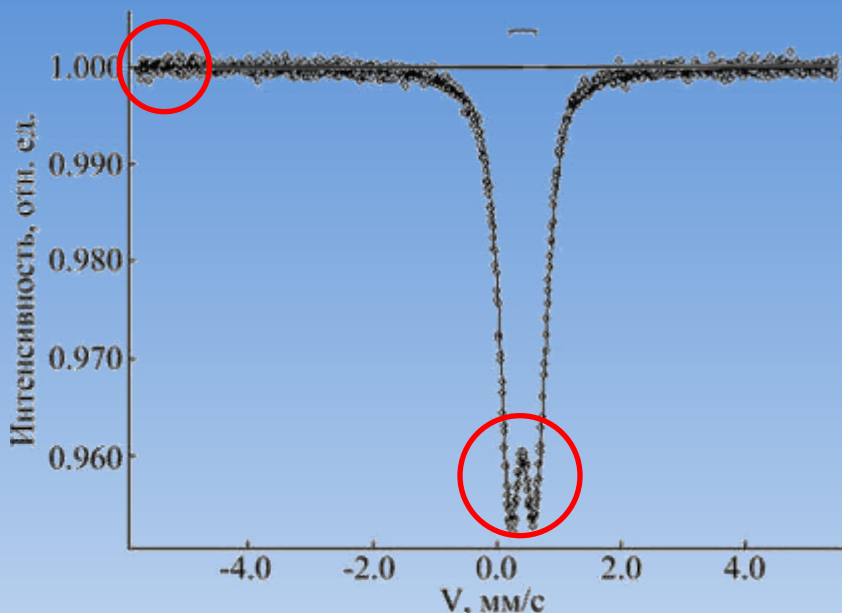
$$G_2: (a_2, b_2): a_2 = r_2 \cos(kx+\varphi); b_2 = r_2 \sin(kx+\varphi)$$

Магнитоэлектрическое взаимодействие:

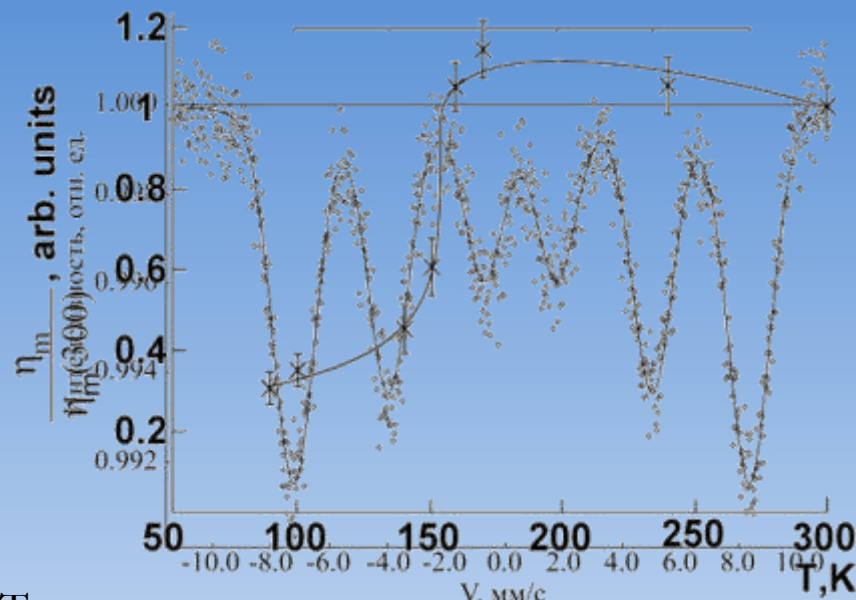
$$(a_1 a_2 + b_1 b_2) \cdot P = r_1 r_2 \cos(\varphi) P$$



$(\text{Pb,Ba,Sr,Ca})\text{Fe}_{1/2}\text{Nb}_{1/2}\text{O}_3$

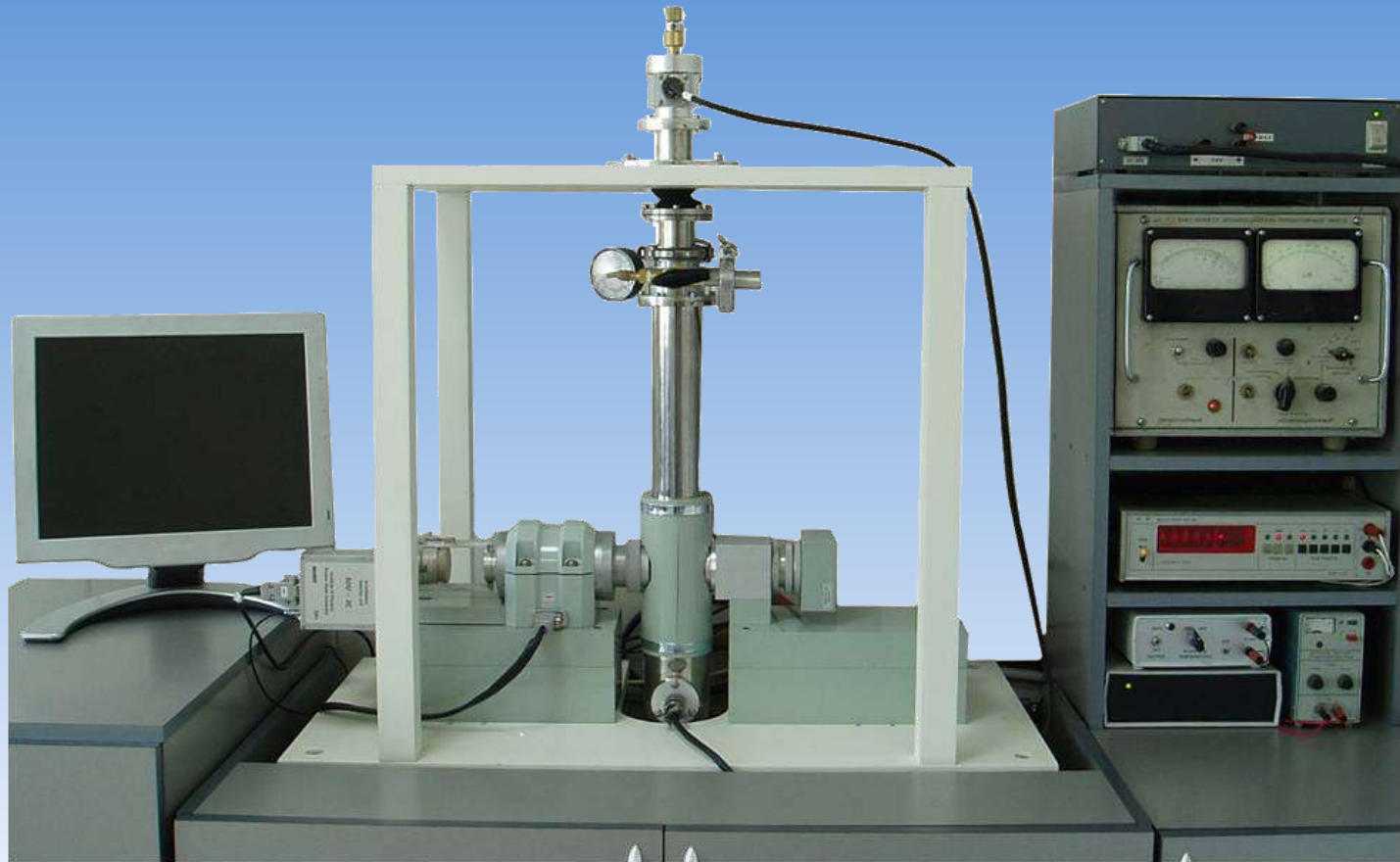


Мессбауэровский спектр образца PFN, измеренный при 300К

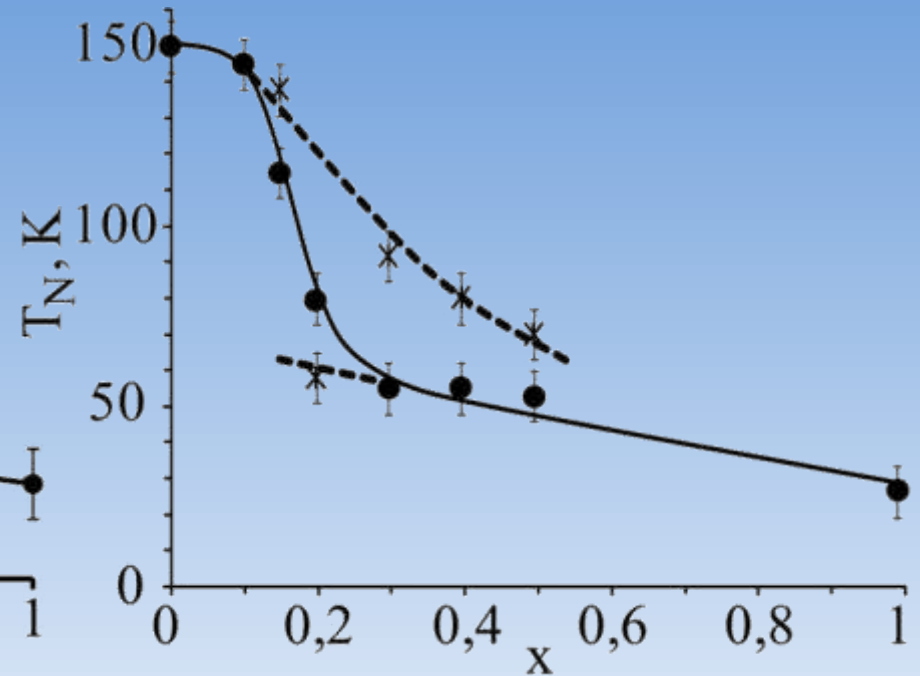
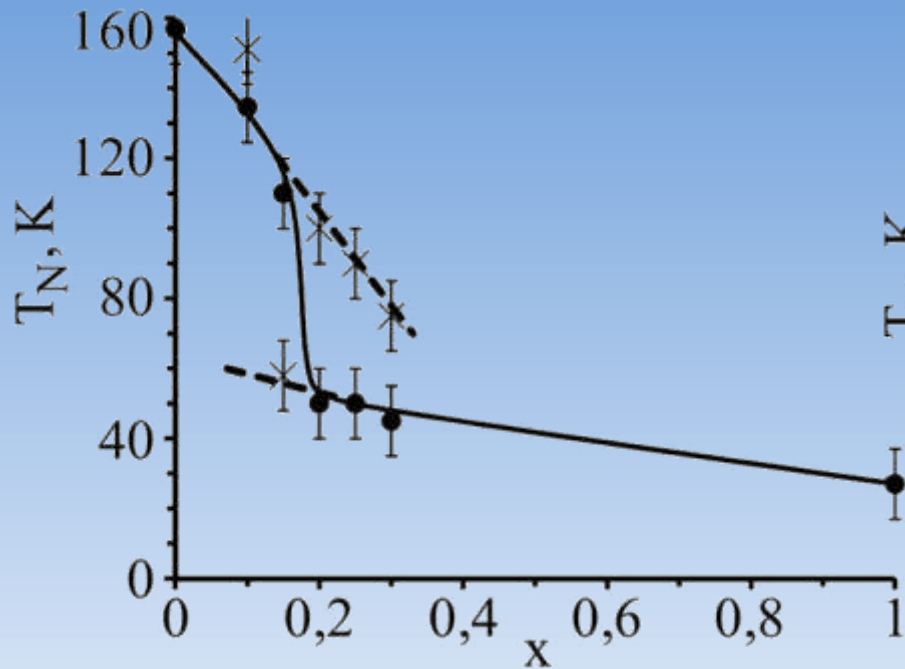


Температурная зависимость относительного максимального значения интенсивности линий мессбауэровского γ -резонансного спектра PFN

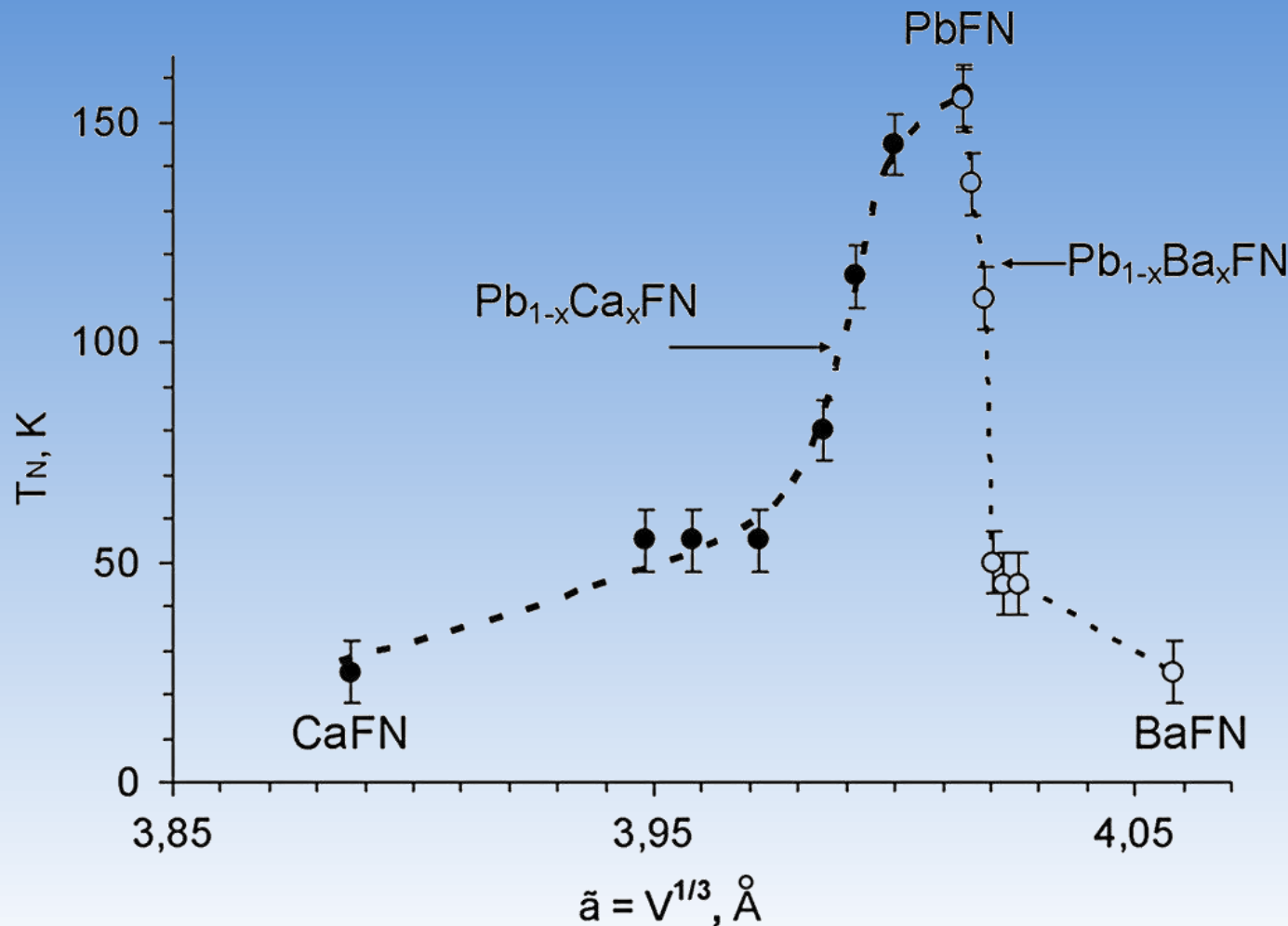
Мессбауэровский спектрометр MS-1104Em, с гелиевым рефрижераторным криостатом, замкнутого цикла



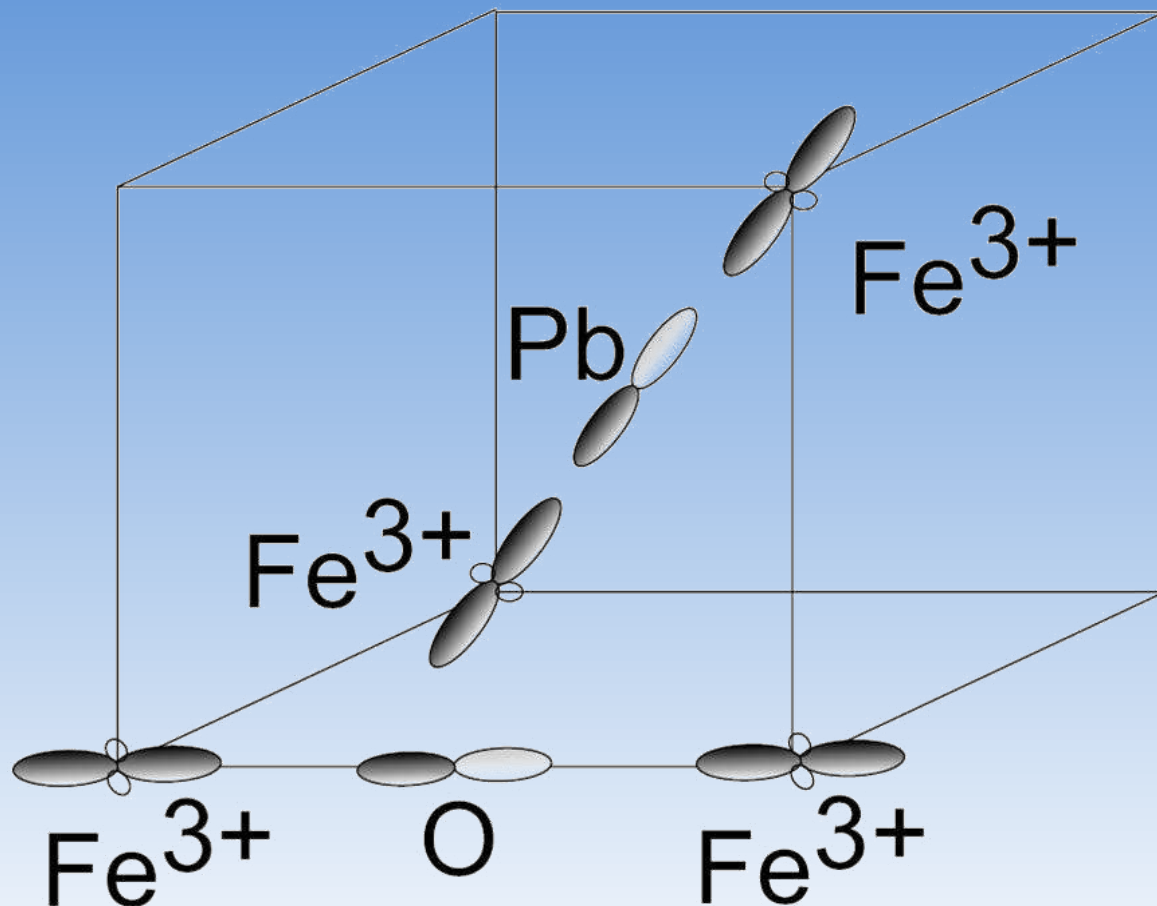
Концентрационные зависимости значений T_N ,
определенных из основных и добавочных аномалий
зависимостей $\eta(T)$, для твердых растворов
 $\text{Pb}_{1-x}\text{Ba}_x\text{Fe}_{0.5}\text{Nb}_{0.5}\text{O}_3$ и $\text{Pb}_{1-x}\text{Ca}_x\text{Fe}_{0.5}\text{Nb}_{0.5}\text{O}_3$



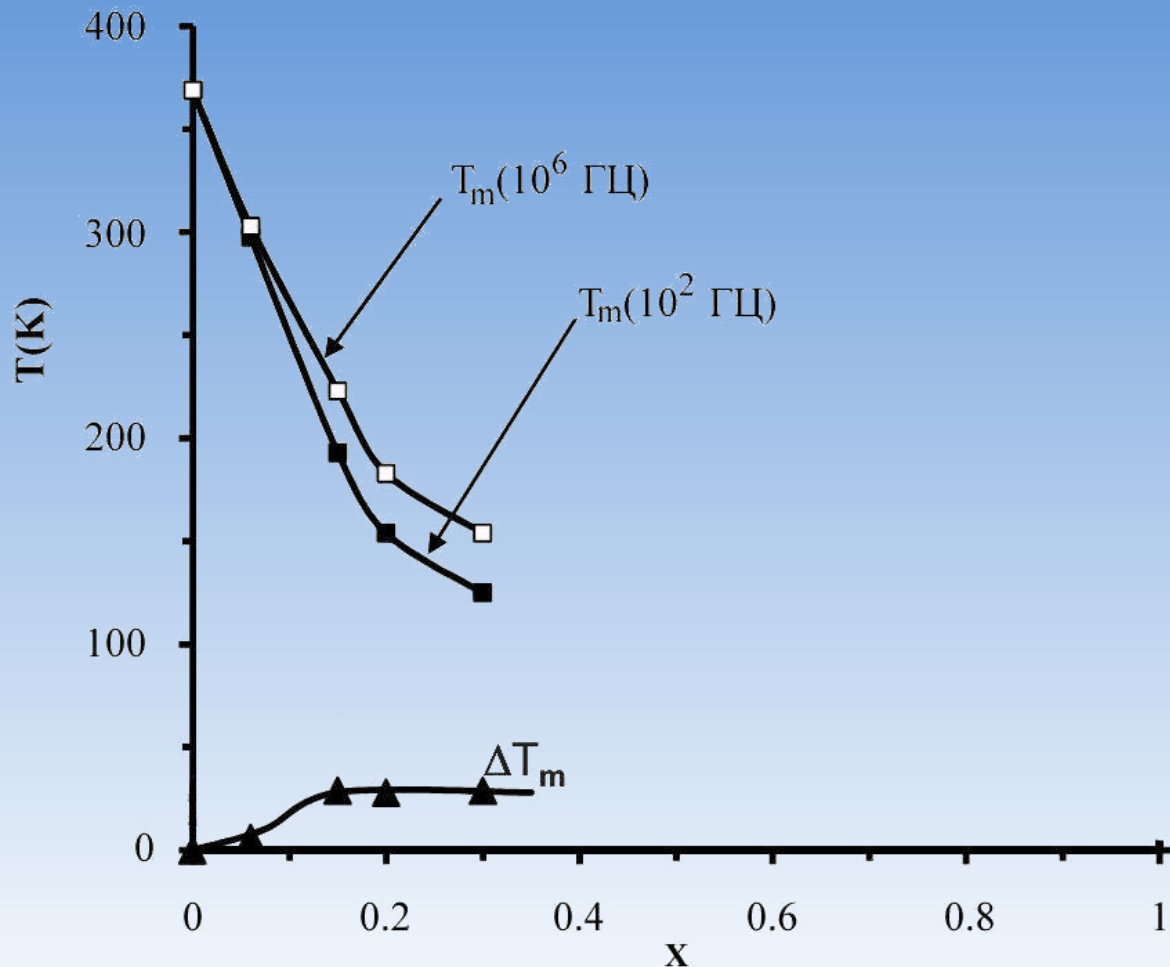
Зависимость температуры магнитных фазовых переходов образцов керамик твердых растворов $\text{Pb}_{1-x}\text{Ba}_x\text{Fe}_{0.5}\text{Nb}_{0.5}\text{O}_3$ и $\text{Pb}_{1-x}\text{Ca}_x\text{Fe}_{0.5}\text{Nb}_{0.5}\text{O}_3$ от значения псевдокубического параметра ячейки



Схематичное изображение магнитного косвенного электронного обмена через ионы Рb и О.



Концентрационная зависимость максимума
диэлектрической проницаемости T_m и частотного
сдвига $\Delta T_m = T_m(10^6 \text{ Гц}) - T_m(10^2 \text{ Гц})$ образцов керамики
твёрдого раствора $\text{Pb}_{1-x}\text{Ba}_x\text{Fe}_{1/2}\text{Nb}_{1/2}\text{O}_3$.



Опубликованные работы:

Experimental evidence of the crucial role of nonmagnetic Pb cations in the enhancement of the Neel temperature in perovskite $\text{Pb}_{1-x}\text{Ba}_x\text{Fe}_{1/2}\text{Nb}_{1/2}\text{O}_3$ / I. P. Raevski, S. P. Kubrin, S. I. Raevskaya, V. V. Titov, D. A. Sarychev, M. A. Malitskaya, I. N. Zakharchenko, S. A. Prosandeev// *Physical Review B*.-2009.-V. 80. -P. 024108-024113.

Экспериментальное свидетельство возможного вклада ионов Вi и Рb в магнитный обмен в перовскитных мультиферроиках/ С. П. Кубрин, И. П. Раевский, Д. А. Сарычев, М. А. Малицкая, С. И. Раевская, И. Н. Захарченко, С. А. Просандеев, В. В. Стащенко// *Труды конференции «Среды со структурным и магнитным упорядочением II»*. 2. Ростов-на-Дону—пос. Лоо. Россия. 2009. Изд-во ПИ ЮФУ. Ростов-на-Дону. –С. 86-89.

Studies of Ferroelectric and Magnetic Phase Transitions in $\text{Pb}_{1-x}\text{A}_x\text{Fe}_{1/2}\text{Nb}_{1/2}\text{O}_3$ (A-Ca, Ba) Solid Solutions/ I. P. Raevski, S. P. Kubrin, S. I. Raevskaya, V. V. Titov, S. A. Prosandeev, D. A. Sarychev, M. A. Malitskaya, V. V. Stashenko and I. N. Zakharchenko// *Ferroelectrics*, **399**, 2010

Является ли электрон «Сегнетомагнетиком»?

$$\Delta L_z \cdot \Delta \varphi \geq \frac{\hbar}{2}$$

1968 г. Май

Том 95, вып. 1

УСПЕХИ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК

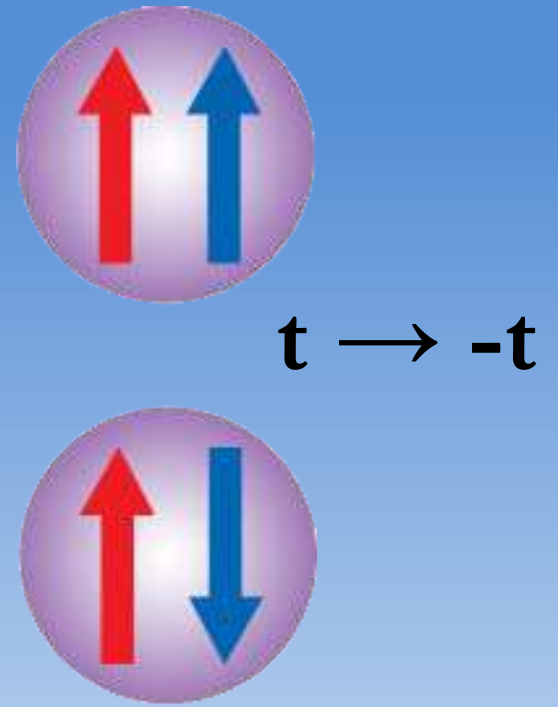
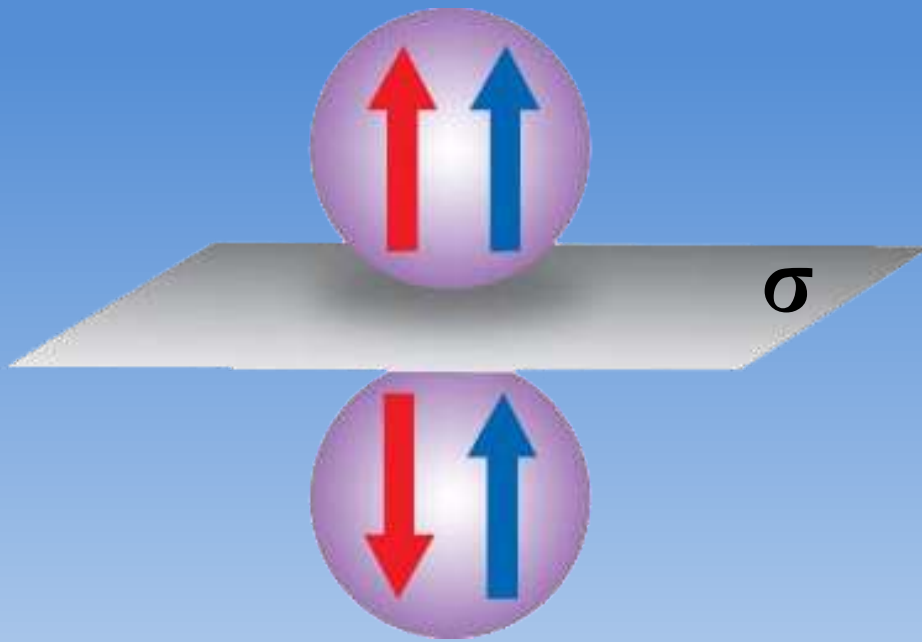
539.124.4

ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ ДИПОЛЬНЫЕ МОМЕНТЫ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ *)

Ф. Л. Шапиро

1. ВВЕДЕНИЕ

Вопрос о существовании постоянных электрических дипольных моментов у элементарных частиц приобрел особую актуальность в связи с недавним открытием видимого нарушения T -инвариантности (инвариантности по отношению к обращению времени) в некоторых процессах распада нейтральных K -мезонов¹⁻³ **).



$\uparrow \vec{d}$ $\uparrow \vec{m}$

$$\text{I: } P = nd \rightarrow E = 4\pi \frac{P}{\varepsilon}$$

При $d=10^{-2}$ е·см, $n=10^{22}$ см⁻³, $\varepsilon=2 \rightarrow E \sim 10^5$ В/см

II:

$$\vec{d}\vec{E} \rightarrow \mu H_{\text{эфф}} = dE$$

μ – магнитный момент атома

$$\Delta B = \mu' \frac{dE}{\mu}$$

$\mu=2 \cdot \mu_B$, $\mu'=10^2$, $d=10^{-21}$ е·см, $E=50$ кВ/см $\rightarrow \Delta B \sim 4 \cdot 10^7$ Гс

$10^{-8} - 10^{-9}$ Гс на фоне $B=10^3$ Гс



Phys. Rev. A 81, 2010, 022104

Phys. Rev. A 79, 2010, 022104

Спасибо за внимание.

