ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ «МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ имени М. В. ЛОМОНОСОВА»

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Кафедра общей физики

Метод многочастичной квантовой гидродинамики в

задачах теоретического описания

магнитоэлектрического эффекта в мультиферроиках

второго рода

Выполнил студент 405 группы:

Скорик Сергей Павлович

Научный руководитель:

к.ф.-м.н. Труханова Мария Ивановна

Допущен к защите Зав. кафедрой

д.ф.-м.н., профессор А. М. Салецкий

(подпись зав. кафедрой)

Москва 2023

Оглавление

1 Введение	3
2 Обзор литературы	6
2.1 Мультиферроики	6
2.2 Магнитоэлектрический эффект	7
2.3 Механизмы теоретического описание магнитоэлектрического эф-	
фекта в мультиферроиках II рода	9
2.4 Механизм, основанный на спин-орбитальном взаимодействии	12
2.4.1 Модель обратного взаимодействия Дзялошинского-Мория	13
2.4.2 Спин-токовая модель	15
2.4.3 Метод многочастичной квантовой гидродинамики	16
2.4.4 Спин-орбитальное взаимодействие	17
3 Результаты	20
3.1 Постановка задачи	20
3.2 Вывод уравнений	21
3.2.1 Уравнение непрерывности	22
3.2.2 Уравнение динамики плотности тока	25
3.2.3 Поле скоростей в уравнениях квантовой гидродинамики	29
4 Выводы	33
5 Список литературы	35

Введение

В последние годы наблюдается подъем интереса к исследованию мультиферроиков и сегнетоэлектриков, что в основном обусловлено разработкой новых методов синтеза, в особенности наноразмерных структур, тонких пленок и гетероструктур, и возможным потенциалом обширного практического применения во всех областях жизни. Создание более эффективных методов и устройств на их основе, а также поиск новых материалов, позволяющих хранить и воспроизводить информацию, является, в настоящее время, важной проблемой на пути развития информационных технологий. Мультиферроики, уникальные материалы, в которых существуют одновременно магнитные и электрические дипольные состояния упорядоченности. В мультифероиках возможна реализация магнитоэлектрического эффекта, связанного с возникновением электрической дипольной поляризации под влиянием магнитного поля и намагниченности под действием электрического поля. Особый интерес представляют мультиферроики второго рода, в которых возможна реализация сильного магнитоэлектрического эффекта, в результате появления сегнетоэлектрического упорядочения в нетривиальных магнитных структурах.

Одним из механизмов взаимосвязи неколлинеарной магнитной структуры вещества с появлением электрической дипольной поляризации, является антисимметричный обмен, основанный на обратном взаимодействии Дзялошинского-Мория. Антисимметричный обмен возникает за счет спинорбитальной поправки к суперобмену Андерсона [1]. Для объяснения микроскопического механизма появления электрической поляризации и описания её взаимосвязи с нетривиальной магнитной структурой, были предложены различные теоретические подходы и построены модели описания магнитоэлектрического эффекта, причиной возникновения которого является определенная спиновая структура вещества. Например, феноменоло-

3

гическая модель описания поляризации в спиральных магнитных структурах, развитая в работе М. Мостового [2] или спин-токовая модель Катсуры–Нагаоши–Балатского [3]. Важно понимать, что теоретические модели описания поляризации в спиральных магнетиках носят либо феноменологический характер, либо основаны на моделировании одночастичной динамики в локальных полях, а в спин-токовой модели взаимосвязь спинового тока со спин-орбитальным взаимодействием не определена однозначно. Можно выделить важное направление развития теоретических подходов для описания магнитоэлектрического эффекта, причиной возникновения которого является спиновая структура. В первую очередь, это построение макроскопической не феноменологической модели описания взаимосвязи поляризации с нетривиальной магнитной структурой образца, которая будет обладать предсказательной силой.

Цели и задачи исследования

Цели исследования. Научная работа нацелена на изучение и построение теоретической модели описания системы многих частиц со спин-орбитальным взаимодействием и дипольными моментами, а также на описание взаимосвязи спинового тока со спин-орбитальным взаимодействием в рамках метода много - частичной квантовой гидродинамики в приближении самосогласованного поля Хартри.

Задачи исследования

- 1. Развитие метода многочастичной квантовой гидродинамики для систем частиц со спин-орбитальным взаимодействием и электрическими дипольными моментами.
- 2. Построение новой теоретической модели спин-токового описания возникновения электрической дипольной поляризации в мультиферроиках второго рода со спин-орбитальным взаимодействием.
- 3. В рамках предложенной модели, вывод взаимосвязи электрической по-

ляризации со спиновым током.

Методы и подходы

Используется метод квантовой многочастичной гидродинамики, позволяющий исследовать физические коллективные неравновесные свойства систем. Первым шагом данного метода является введение многочастичного уравнения Шредингера, учитывающего вклад взаимодействий в системе и действия внешних полей. Второй шаг заключается в определении макроскопических функций наблюдаемых физических величин с помощью задания операторов плотности числа частиц, плотности магнитных моментов и плотности электрического дипольного момента. Данный метод позволяет перейти от описания большого числа частиц в многомерном конфигурационном пространстве к описанию в реальном физическом пространстве на языке полевых функций различной тензорной размерности.

Обзор литературы

Мультиферроики

Мультифероики, вещества, в которых существуют одновременно хотя бы два вида упорядочения: ферромагнетизм, сегнетоэлектричество, сегнетоэластичность. В определение дополнительно включают и антиферромагнитное упорядочение, а также композитные материалы, хотя чаще всего под мультиферроиками понимают вещества сочетающие сегнетоэлектрическое и магнитное поведение [4], [5]. Мультиферроики принято разделять на два основных типа. Мультифероики I рода, вещества, в которых сегнетоэлектрические и магнитные свойства проявляются независимо. Наиболее известным представителем этой группы материалов является *BiFeO*₃, в котором температура сегнетоэлектрического перехода $T_{FE} \sim 1100 K$, а температура магнитного перехода $T_N \sim 100 K$. В мультиферроиках II рода сегнетоэлектрические и магнитные свойства сильно связаны, и электрическая дипольная поляризация появляется в результате определенного магнитного упорядочения. При этом температура сегнетоэлектрического перехода ниже или совпадает с температурой магнитного упорядочения. Ярким примером такого мультиферроика является оксид перовскита с орторомбической структурой, *TbMnO*₃, магнитоэлектрический эффект в котором был открыт в 2003 году [6]. Эксперименты Кимуры с коллегами показали, что образец приобретает антиферромагнитный порядок при температурах $T_N \sim 41 K$ со структурой магнитных моментов ионов марганца Mn^{3+} синусоидального типа. При температурах около $T_{FE} \sim 28 K$ магнитная структура ионов Mn^{3+} трансформируется в циклоидную спираль, что сопровождается появлением электрической дипольной поляризации.

Магнитоэлектрический эффект

Предположение о возможности возникновения намагниченности под действием электрического поля и поляризации под действием магнитного поля было впервые высказано Пьером Кюри [7]. Теоретически магнитоэлектрический эффект (МЭ) был предсказан И. Е. Дзялошинским [8], и обнаружен годом позднее (1960 г.) в антиферромагнетике Cr_2O_3 Д. Астровым [9]. В своей работе Дзялошинский применил феноменологический подход Л.Д. Ландау [10]. После этого, В. Фолен и Г. Радо [11] измерили электрическую поляризацию в образцах Cr_2O_3 , наведенную магнитным полем.

Для возникновения магнитоэлектрического эффекта необходимо, чтобы в материале была нарушена пространственная и временная четности. Поскольку электрический дипольный момент $\vec{d} = \sum_i q_i \vec{r_i}$ пропорционален пространственной производной, то он изменяет знак при инверсии пространства (всех координат) $\vec{r} \to -\vec{r}$ (*P*-нечетный), но остаётся постоянным при инверсии времени $t \to -t$ (*T*-четный). Магнитный момент, наоборот, является *P*-четным и *T*-нечётным аксиальным вектором.

В 1956 году Л.Д. Ландау и Е.М. Лифшиц [10] охарактеризовали магнитоэлектрические материалы, как среды, симметрия которых допускает существование линейного магнитоэлектрического эффекта. В этом случае, электрическая поляризация пропорциональна магнитному полю и намагниченность пропорциональна электрическому полю

$$P_{\alpha} = a_{\alpha\beta} H^{\beta}, \qquad M_{\beta} = a_{\beta\alpha} E^{\alpha}, \tag{1.1}$$

где $a_{\alpha\beta}$ - магнитоэлектрический тензор, P^{α} - поляризация среды, M^{β} - намагниченность, E^{α}, H^{α} - напряженности электрического и магнитного полей. Здесь и далее пространственные координаты представлены греческими буквами $\alpha, \beta, \gamma = x, y, z$.

Нужно обратить внимание на то, что формулы магнитоэлектрического эффекта (1.1) связывают полярный и аксиальный векторы, т.е. они облада-

ют различными трансформационными свойствами относительно операций инверсии пространства P и времени T. Таким образом, для того чтобы магнитоэлектрический тензор был отличен от нуля в кристалле должна существовать определённая симметрия, при которой нарушается P и T- четности, но сохраняется комбинация PT- четности [10, 4].

Выражения (1.1) описывают только линейный МЭ эффект и, в общем случае, следуют из выражения для свободной энергии системы в однородном электромагнитном поле

$$F(E,H) = F_0 - P^s_{\alpha} E^{\alpha} - M^s_{\alpha} H^{\alpha} - \frac{1}{2} \varepsilon_0 \varepsilon_{\alpha\beta} E^{\alpha} E^{\beta} - \frac{1}{2} \mu_0 \mu_{\alpha\beta} H^{\alpha} H^{\beta} - \alpha_{\alpha\beta} E^{\alpha} H^{\beta} - \frac{1}{2} \beta_{\alpha\beta\gamma} E^{\alpha} H^{\beta} H^{\gamma} - \frac{1}{2} \gamma_{\alpha\beta\gamma} H^{\alpha} E^{\beta} E^{\gamma} - \dots, \quad (1.2)$$

где P^s и M^s - спонтанные поляризация и намагниченность, $\varepsilon_{\alpha\beta}$ и $\mu_{\alpha\beta}$ тензоры диэлектрической проницаемости и магнитной проницаемости, ε_0 и μ_0 - электрическая и магнитная постоянные; $\alpha_{\alpha\beta}$, $\beta_{\alpha\beta\gamma}$ и $\gamma_{\alpha\beta\gamma}$ - тензоры МЭ эффектов. Продифференцировав функционал свободной энергии (1.2) по электрическому полю E_{α} и магнитному полю H_{α} , приходим к следующим выражениям для поляризации [12]

$$P_{i}(E,H) = -\frac{\partial F}{\partial E_{\alpha}} =$$
$$= P_{\alpha}^{s} + \varepsilon_{0}\varepsilon_{\alpha\beta}E_{\beta} + \alpha_{\alpha\beta}H_{\beta} + \frac{1}{2}\beta_{\alpha\beta\gamma}H_{\beta}H_{\gamma} + \gamma_{\alpha\beta\gamma}H_{\beta}E_{\gamma} - \dots \quad (1.3)$$

и намагниченности

$$M_{\alpha}(E,H) = -\frac{\partial F}{\partial H_{\alpha}} =$$

= $M_{\alpha}^{s} + \mu_{0}\mu_{\alpha\beta}H_{\beta} + \alpha_{\alpha\beta}E_{\beta} + \beta_{\alpha\beta\gamma}E_{\beta}H_{\gamma} + \frac{1}{2}\gamma_{\alpha\beta\gamma}E_{\beta}E_{\gamma} - \dots$ (1.4)

Таким образом, линейный МЭ эффект является приближением магнитоэлектрического эффекта в случае малости последующих членов.

Механизмы теоретического описание магнитоэлектрического эффекта в мультиферроиках II рода

Для мультиферроиков второго рода микроскопические механизмы возникновения электрической поляризации можно разделить на три типа: симметричное обменное взаимодействие или обменно-стрикционный механизм; антисимметричное обменное взаимодействие, описываемое на основе спинтоковой модели или модели обратного взаимодействия Дзялошинского-Мория; и спин-зависимая p - d гибридизация $\vec{P}_{ij} \propto (\vec{e}_{il} \cdot \vec{S}_i)^2 \vec{e}_{il}$ [13] (рисунок (1.1).

Симметричное или кулоновское обменное взаимодействие может быть описано гамильтонианом Гейзенберга $H = -\sum J_{ij}(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j)$, и его результатом является выстраивание спинов параллельно или антипараллельно друг другу [14]. Обменное взаимодействие, действующее между соседними магнитными ионами со спинами \vec{S}_i и \vec{S}_j , может вызвать сдвиг ионов вдоль определённого кристаллографического направления $\vec{\Pi}_{ij}$. Важным условием для возникновения поляризации является наличие неэквивалентных магнитных ионов с различными зарядами. Для того чтобы сдвиг ионов привел к возникновению макроскопической поляризации \vec{P} , спиновая модуляция должна быть соизмерима с кристаллической решёткой, и индуцированная стрикция не должна компенсироваться после суммирования по всей кристаллической решётке. Например, в системе спинов магнитных ионов ↑↑↓↓ вдоль чередующейся атомарной решетки А-В, благодаря кулоновскому обменному взаимодействию, может произойти смещение между парой спинов $\uparrow\uparrow$ (или $\downarrow\downarrow$) с образованием димеров, что в свою очередь, приводит к индуцированию электрической поляризации (или правильнее, дипольного момента ячейки кристалла) вдоль кристаллографического направления (рисунок



Рис. 1.1: Три основных механизма сегнетоэлектричества спинового происхождения [13]. (a) - (c) расположение магнитных ионов в магнитострикционном механизме (красными стрелками указана ориентация спинов, синими стрелками, направление индуцированной электрической поляризации Р. Обменно-стрикционный механизм предсказывает появление поляризации вдоль направления связи для решетки M_AM_B (т.е. массива из двух разных магнитных ионов). (d) - (f) возникновение поляризации в спинтоковой модели. Кластеры M - X - M из трех ионов кристаллической решетки, и поляризация появляется перпендикулярно к направлению связи между магнитными ионами со спинами S_i и S_j . (e) сдвиг распределения заряда, чтобы максимизировать выигрыш в энергии за счет взаимодействия Дзялошинского-Мория. (f) появление поляризации на основе спин-токовой модели, где эффективное электрическое поле вызвано спиновым током j_s , протекающим между двумя магнитными ионами. (g) - (i) спинзависимая p - d гибридизация.

(1.1) (a) - (c)) $\vec{P}_{ij} \propto \vec{\Pi}_{ij} (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j).$ (1.5)

В качестве примера можно рассмотреть образец Ca_3CoMnO_6 , который со-

стоит из квазиодномерных цепей Co - Mn вдоль кристаллографической оси c. Ниже температуры 16,5 К спины образуют особый $\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow$ порядок. Вследствие этого, расстояние между ионами Co - Mn уменьшается или удлиняется для соседних параллельных и антипараллельных спиновых пар (рисунок (1.2)). Поскольку валентности ионов Co^{2+} и Mn^{4+} различны, ионные смещения вдоль цепочки Co - Mn согласованно выровнены, вызывая суммарную поляризацию вдоль оси c.



Рис. 1.2: Структура и свойства Ca₃CoMnO₆ [13]. (а) кристаллографическая структура образца. (d) зависимость индуцированной электрической поляризации от температуры для различных значений внешнего магнитного поля.

Антисимметричное обменное взаимодействие, в отличие от симметричного, является релятивистским эффектом, в котором поляризация индуцируется в результате спин-орбитального взаимодействия. Существуют две модели описания антисимметричного обменного взаимодействия: спин-токовая модель и модель обратного взаимодействия Дзялошинского-Мория.

Феноменологическая спин-токовая модель была разработана Катсурой, Нагаоши и Балатским [3]. Причиной появления поляризации, в данной мо-

дели, является косвенное обменное взаимодействие между двумя соседними положительно заряженными магнитными ионами через отрицательно заряженный ион лиганда (например, кислорода O^{2-}), в результате ковалентной связи d- и p- электронов. Обязательным условием является не коллинеарность спинов электронов на d-орбиталях магнитных ионов, между которыми, в результате, возникает спиновый ток. Согласно данной модели, спиновый ток отвечает за прецессию спина \vec{S}_i в обменном поле соседнего спина \vec{S}_i [14].

Модель обратного взаимодействия Дзялошинского-Мория была развита в работе Сергиенко и Даготто [15], [16]. Для системы неколлинеарных спинов, для выигрыша в энергии, оказывается выгодным искажение кристаллической решетки. Энергетически выгодно, чтобы отрицательно заряженный немагнитный ион лиганда сместился из положения центра масс на расстояние, перпендикулярное связи положительно заряженных магнитных ионов переходных металлов. В такой ячейке возникает дипольный момент

$$\vec{P}_{ij} \propto \vec{r}_{ij} \times (\vec{S}_i \times \vec{S}_j),$$
 (1.6)

где \vec{r}_{ij} - расстояние между соседними положительно заряженными магнитными ионами.

Механизмы, основанные на спин-орбитальном взаимодействии

На данный момент существуют две основных теоретических модели, объясняющие появление сегнетоэлектричества в магнитных структурах с неколлинеарными спинами. Прежде всего, это феноменологическая модель, развитая в статье М. Мостового [2]. В работе представлена простая феноменологическая теория, описывающая направление наведенной электрической поляризации для различных магнитных состояний, ее зависимость от температуры и магнитного поля, а так же аномалии диэлектрической восприимчивости при магнитных переходах. Мостовой показал, что электрическая дипольная поляризация \vec{P} , в спиральных магнитах, связана с намагниченностью \vec{M} соотношением

$$\vec{P} \sim \vec{M} \times (\vec{\nabla} \times \vec{M}).$$
 (1.7)

Во второй модели, развитой И. Сергиенко [15], показано, что взаимодействие Дзялошинского-Мория лежит в основе микроскопического механизма сильной связи между сегнетоэлектричеством и магнетизмом.

Модель обратного взаимодействия Дзялошинского-Мория

Обменная энергия представляет собой добавку к энергии системы взаимодействующих частиц со спинами, обусловленную перекрытием их волновых функций. Прямой обмен Гейзенберга характеризуется непосредственным перекрытием волновых функций электронов. Непрямой обмен реализуется, когда в системе из двух частиц появляется частица-посредник, через которую осуществляется взаимодействие [17, 18]. В некоторых мультиферроиках электрический диполь индуцируется в кластере или ячейке, состоящей из двух положительно заряженных магнитных ионов с частично заполненными *d*-орбиталями, и разделенными диамагнитным ионом, например ионом кислорода O^{2-} (рисунок (1.3)). Поскольку расстояние между электронами *d*-орбиталей магнитных ионов достаточно велико, обменное взаимодействие осуществляется в результате ковалентной связи между электронами dорбиталей магнитных ионов и *p*-орбиталей диамагнитного иона-посредника, иными словами, их волновые функции перекрываются [15]. Такое взаимодействие получило название супер-обменного. Микроскопическим механизмом происхождения данного обмена является вклад обменных эффектов в спин-орбитальное взаимодействие.



Рис. 1.3: Неколлинеарная структура спинов частиц (ячейка/кластер), состоящая из положительно заряженных ионов металла (синие сферы) и отрицательно заряженного иона лиганда (зеленые сферы).

Возьмём оксиды перовскита в качестве примеров, чтобы проиллюстрировать, как взаимодействие Дзялошинского-Мория обеспечивает связь между магнетизмом и сегнетоэлектричеством. Рассмотрим перовскит ABO3 с идеальной кубической структурой связи, где ионы B - O - B расположены на прямой. Каждая из таких связей имеет симметрию вращения относительно одной B - B-оси. Однако, в большинстве случаев, несоответствие размеров между ионами A и B обычно заставляет кислородные октаэдры наклоняться и вращаться, что приводит к искажению кристаллической структуры. Следовательно, каждый ион кислорода, зажатый между двумя соседними ионами B, может удаляться от точки центра масс, создавая изогнутую связь B - O - B и нарушая симметрию вращения оси B - B. Эта изогнутая связь B - O - B будет индуцировать взаимодействие Дзялошинского-Мория (ДМ). Гамильтониан такого взаимодействия может быть получен в виде [6]

$$H_{DM} = \vec{D}_{ij} \cdot (\vec{S}_i \times \vec{S}_j), \qquad (1.8)$$

где \vec{D}_{ij} - коэффициент взаимодействия ДМ между соседними спинами \vec{S}_i и \vec{S}_j . Для структуры с изогнутыми B - O - B связями вектор \vec{D}_{ij} должен быть перпендикулярен плоскости B - O - B. В приближении первого порядка

величина \vec{D}_{ij} пропорциональна смещению иона кислорода (d_0) от "исходной" средней точки

$$\vec{D}_{ij} = \zeta \vec{r}_{ij} \times \vec{d}_o, \tag{1.9}$$

где - ζ коэффициент; $\vec{r_{ij}}$ - вектор, проведённый от iкj.

Спин-токовая модель.

Механизм возникновения электрической поляризации в спиральных магнитах может быть описан на основе спин-токовой модели [3, 19] Предполагается, что электрическая поляризация, индуцированная в образце мультиферроика, должна быть связана со спиновым током соотношением [3]

$$P_{\alpha} \propto \varepsilon_{\alpha\mu\beta} J^{\mu\beta} \tag{1.10}$$

поскольку $P_{\alpha} \propto \frac{\partial L}{\partial E_{\alpha}}$, где L - функция Лагранжа. Считается, что спиновый ток создаёт электрическую поляризацию в направлении, перпендикулярном как спиновой поляризации, так и направлению спинового тока.

Обменное взаимодействие между соседними спинами может быть описано на основе Гамильтониана Гейзенберга $H = -\sum_{ij} J_{i,j} S_i \cdot S_j$. В спин-токовой модели спиновый ток может быть определён из закона сохранения спина [3, 6], который может быть получен из уравнения движения Гейзенберга для S_i^z в поле соседних ионов

$$\frac{dS_i^z}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [S_i^z, H] = -2\sum_{\delta} J_{i,i+\delta} \varepsilon^{z\alpha\beta} S_{i+\delta}^{\alpha} S_i^{\beta}.$$
(1.11)

Оператор так называемого спинового тока $j^z_{\delta}(i)$ может быть определен в процессе вывода уравнения (1.11) в виде [6]

$$j_{\delta}^{z}(i) = 2J_{ii+\delta}(S_{i+\delta}^{x}S_{i}^{y} - S_{i+\delta}^{y}S_{i}^{x}).$$
(1.12)

Уравнение (1.11) можно записать в виде $\frac{dS_i^z}{dt} + \sum_{\delta} j_{\delta}^z(i) = 0$. Подставляя выражение (1.12) в соотношение (1.10), приходим к определению электри-

ческой поляризации, индуцированной спиновым током

$$P^{\alpha} \propto \sum_{i} \varepsilon_{\alpha a \beta} \varepsilon^{a b c} S^{b}_{i+\delta} S^{c}_{i} \propto \sum_{i} [e_{\beta} \times (S_{i+\delta} \times S_{i})]^{\alpha}, \qquad (1.13)$$

где e_{δ} - единичный вектор в направлении иона δ .

Несмотря на первоначальную простоту, спин-токовая модель имеет ряд недостатков и противоречий. В первую очередь, зависимость поляризации от спинового тока (1.10) задается из общих соображений, и, вообще говоря, должна быть выведена из основ теоретической модели. Во-вторых, нет четкого понимания связи спинового тока со спин-орбитальным взаимодействием, а спиновый ток, который получают из уравнения непрерывности для спина, не является спиновым током в общепринятом понимании.

Метод многочастичной квантовой гидродинамики

Метод квантовой гидродинамики представляет собой эффективный метод исследования процессов в неравновесных системах взаимодействующих частиц. В работе [20], на основе многочастичного уравнения Шредингера с Гамильтонианом взаимодействий, включающим взаимодействие заряженных частиц, находящихся во внешнем электромагнитном поле, была выведена система уравнений баланса (локальных законов сохранения): уравнение баланса числа частиц (уравнение непрерывности), уравнение баланса импульса и уравнение баланса энергии. Для систем частиц с собственными магнитными моментами и спин - спиновым взаимодействием, наряду с кулоновским взаимодействием, теоретическое описание, на основе метода многочастичной квантовой гидродинамики, было представлено в работах [21, 22].

Для систем фермионов с короткодействующим потенциалом взаимодействия, в третьем порядке по радиусу взаимодействия, исследована динамика на основе данного метода [23, 24]. Рассмотрен случай вырожденной Ферми жидкости и выведено нелинейное уравнение Шредингера. Авторами выведены выражения для поля сил взаимодействия между различными компонентами смеси, для бозон- фермионной, бозон-бозонной, фермионфермионной систем. На основе развитой модели и полученных уравнений исследована дисперсия волн в ультрахолодной бозон-фермионной системе частиц в третьем порядке по радиусу взаимодействия.

В статье [25] рассмотрено возбуждение собственных волн в двухсортной вырожденной системе заряженных частиц, локализованных во внешнем однородном магнитном поле. Показано, что данный тип волн может возбуждаться как моноэнергитическим, так и имеющим конечную температуру, пучком нейтронов.

Таким образом, для изучения физических эффектов, в которых исследуется динамика пространственно-временных распределений частиц и полей, очень полезен метод многочастичной квантовой гидродинамики [26]. В основе метода лежат уравнения квантовой гидродинамики, в которых физические характеристики системы взаимодействующих частиц представлены в виде материальных полей в трёхмерном физическом пространстве. Данный метод может быть применен в задачах спинтроники, связаных с движением частиц с собственными магнитными моментами, а также при возбуждении и распространении спиновых волн.

Авторами статьи [27] исследуется влияния спин-орбитального взаимодействия на возмущения зарядовой и спиновой плотности в электронном газе. Системы частиц с электрической дипольной поляризацией были рассмотрены в статье [28] и волны поляризации были предсказаны.

Спин-орбитальное взаимодействие

Преобразование Фолди—Вутхайзена.

Для того чтобы получить поправку к энергии, вызванную спин-орбитальным

взаимодействием, необходимо начать с рассмотрения релятивистского электрона в заданном внешнем электромагнитном поле. Такой электрон подчиняется уравнению Дирака, представленному в форме, разрешенной относительно производной по времени

$$\hat{H}\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}, \qquad \hat{H} = \beta mc^2 + c\vec{\alpha} \cdot (\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}) + e\phi, \qquad (1.14)$$

где ϕ , \vec{A} - скалярный и векторный потенциалы электромагнитного поля, матрицы $\vec{\alpha}$, и β антикоммутируют друг с другом и в стандартном представлении имею вид

$$\beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \qquad \vec{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \qquad (1.15)$$

ज - матрицы Паули, которые будут определены ниже. Волновая функция представлена 4-компонентным спинором (би-спинором)

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}. \tag{1.16}$$

Преобразование Фолди—Вутхайзена представляет собой унитарное преобразование, разделяющее положительные и отрицательные компоненты биспинора

$$\Psi' = U\Psi = e^{iS}\Psi. \tag{1.17}$$

Оператор *S* разлагается в ряд по 1/*m* и является "малым"в нерелятивистском пределе. После преобразований, подробно описанных в публикациях [29, 30], оператор Гамильтона приобретает вид

$$\hat{H} = e\phi + \beta \left(mc^2 + \frac{(\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c}\vec{A}^2)}{2m} - \underbrace{\frac{1}{8m^3c^6}\hat{\vec{p}}^4}_{\frac{1}{8m^3c^6}\hat{\vec{p}}^4} \right) +$$

$$+ \underbrace{\frac{e\hbar^2}{8m^2c^4}\vec{\nabla}\cdot\vec{E}}_{Darwin-term} + \underbrace{\frac{ie\hbar^2c^2}{8m^2c^2}\hat{\vec{\sigma}}\cdot(\vec{\nabla}\times\vec{E}) + \frac{e\hbar}{4m^2c^2}\hat{\vec{\sigma}}\cdot(\vec{E}\times\hat{\vec{p}})}_{Spin-orbital\ coupling}.$$

$$(1.18)$$

Последние два слагаемых в операторе Гамильтониана представляют собой спин-орбитальное взаимодействие, где $\vec{E} = -\vec{\nabla}\phi - \frac{1}{c}\frac{\partial \vec{A}}{\partial t}$.

Результаты

Постановка задачи

Одним из микроскопических механизмов, лежащих в основе появления электрической поляризации спинового происхождения, является механизм, в основе которого лежит спин-орбитальное взаимодействие. Спин-токовая модель, связывающая поляризацию со спиновым током [3], имеет ряд недостатков и противоречий. Первый серьёзный недостаток заключается в том, что зависимость поляризации от спинового тока (1.10) задается из общих соображений, и не выведена из основ теоретической модели. Во-вторых, нет четкого понимания связи спинового тока со спин-орбитальным взаимодействием. Спиновый ток, который получают из уравнения непрерывности для спина, не является спиновым током в общепринятом понимании. Таким образом, в теоретическом описании существует недостаточное определение понятия спинового тока в системе со спин-орбитальной связью. Более того, в известной на сегодняшний день спин-токовой, основанной на описании динамики спина одной частицы во внешнем поле [3], отсутствует возможность количественного прогнозирования результатов. Другие теоретические модели описания поляризации в спиральных магнетиках носят либо феноменологический характер, либо также связаны с изучением одночастичной динамики в локальных полях.

Важной задачей является построение новой макроскопической теоретической модели, связывающей спиновый ток и электрическую дипольную поляризацию в средах со спин-орбитальным взаимодействием. Метод многочастичной квантовой гидродинамики выглядит весьма привлекательным для построения такой модели. Используя многочастичное уравнение Шредингера и основные принципы квантовой механики, данный метод позволяет получить замкнутую систему уравнений. В

20

первую очередь, уравнение непрерывности, уравнение баланса импульса, динамики намагниченности, эволюции спинового тока, динамики поляризации и потока поляризации. Метод позволяет учитывать механизмы релаксации импульса, поляризации, спина и энергии, а также позволяет учесть квантовые эффекты, обусловленные квантовым потенциалом Бома и спиновой частью квантового потенциала Бома. Метод позволяет учесть коллективные тепловые эффекты и вклад различных взаимодействий между частицами среды [21, 25].

Для поставленных целей мы рассматриваем модель системы частиц с Гамильтонианом, содержащим взаимодействие дипольного момента ячейки с электрическим полем и спин-орбитальное взаимодействие. Как следствие, в методе многочастичной квантовой гидродинамики в уравнениях одновременно присутствует динамика электрического дипольного момента и спин-орбитального взаимодействия под действием электрического поля, что должно помочь в анализе их связи. Дополнительный интерес вызван тем, что появляется возможность описания коллективных процессов, что, возможно, в будущем позволит сделать дополнительные интересные выводы.

Вывод уравнений

В определенных типах мультиферроиков второго рода, электрический дипольный момент возникает в ячейке/кластере, представляющей собой систему двух соседних положительно заряженных магнитных ионов переходных металлов с неколлинеарными спинами и отрицательно заряженного иона лиганда (Раздел 2.4.1.). Рассмотрим систему N взаимодействующих ячеек, обладающих массами m_i , индуцированными дипольными моментами $\vec{d_i}$, в которой реализуется спин-орбитальное взаимодействие. i, j, k обозначают номер ячейки, в дальнейшем, мы будем писать "частица". Вывод системы уравнений квантовой гидродинамики начинается с введения многочастичного Гамильтониана взаимодействий

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{\hat{\vec{p}_{i}}^{2}}{2m_{i}} - \alpha_{i} \hat{\vec{\sigma}_{i}} [\vec{E}_{i} \times \hat{\vec{p}_{i}}] - \vec{d}_{i} \vec{E}_{i} \right)$$
(1.19)

где учтено, что

$$\alpha_i = \frac{\gamma_i}{m_i c}, \qquad \hat{\vec{p}}_i = -i\hbar \hat{\vec{\nabla}}_i, \qquad (1.20)$$

где γ_i - гиромагнитное отношение, для электрона имеющее вид $\gamma_i = e_i \hbar/2m_i c$, m_i - масса частицы, $\hat{\vec{p}_i}$ - оператор импульса *i*-ой частицы, $\vec{E_i}$ - электрическое поле, $\vec{d_i}$ дипольный момент и $\vec{\sigma_i}$ матрицы Паули

$$\hat{\sigma}_i^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \ \hat{\sigma}_i^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \ \hat{\sigma}_i^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$
(1.21)

Состояние системы N частиц задаётся многочастичной волновой функцией в 3N - мерном конфигурационном пространстве $\Psi = \Psi(R, t)$, где $R = \{\vec{r}_1, ..., \vec{r}_N\}$.

Уравнение непрерывности

Вывод уравнений динамики на основе метода квантовой гидродинамики начинается с введения поля концентрации частиц в окрестности точки \vec{r} физического трёхмерного пространства

$$n(\vec{r},t) = \int dR \sum_{i=1}^{N} \delta(\vec{r} - \vec{r_i}) \Psi^{\dagger}(R,t) \Psi(R,t)$$
(1.22)

где $dR = \prod_{j=1}^{N} dr_j$. Дифференцируя по времени выражение для концентрации (1.22), и, применяя многочастичное уравнение Шрёдингера

$$i\hbar\partial_t\Psi(R,t) = \hat{H}\Psi(R,t)$$

с Гамильтонианом взаимодействий (1.19), приходим к выражению

$$\partial_t n(\vec{r},t) = \int dR \sum_i \delta(\vec{r} - \vec{r_i}) \left(\frac{\partial \Psi^{\dagger}(R,t)}{\partial t} \Psi(R,t) + \Psi^{\dagger}(R,t) \frac{\partial \Psi(R,t)}{\partial t}\right), \quad (1.23)$$

и, далее, подставляем частную производную по времени от многочастичной волновой функции из уравнения Шредингера

$$\partial_t n = \int dR \sum_i \delta(\vec{r} - \vec{r_i}) \cdot \left(-\frac{i}{\hbar} \Psi^{\dagger}(\hat{H}\Psi) + \frac{i}{\hbar} (\hat{H}\Psi)^{\dagger}\Psi\right) = (1.24)$$

$$=\frac{i}{\hbar}\int dR \sum_{i} \delta(\vec{r}-\vec{r_{i}}) (\Psi^{+}(\frac{(\hat{p_{i}}^{\dagger})^{2}}{2m_{i}}-\alpha_{i}\hat{\vec{\sigma}_{i}}^{\dagger}[\vec{E_{i}}\times\hat{\vec{p_{i}}}] - \vec{d_{i}}\vec{E_{i}})\Psi - \Psi^{\dagger}(\frac{\hat{p_{i}}^{2}}{2m_{i}}-\alpha_{i}\hat{\vec{\sigma}_{i}}[\vec{E_{i}}\times\hat{\vec{p_{i}}}] - \vec{d_{i}}\vec{E_{i}})\Psi) \quad (1.25)$$

$$\partial_t n = \frac{i}{\hbar} \int dR \sum_i \delta(\vec{r} - \vec{r_i}) \frac{1}{2m_i} ((\Psi^{\dagger}(\hat{p}_i^{\dagger})^2) \Psi - \Psi^{\dagger} \hat{p}_i^2 \Psi - (2\alpha_i \hat{\vec{\sigma}_i} [\vec{E_i} \times \hat{\vec{p_i}}] \Psi)^{\dagger} \Psi + \Psi^{\dagger} 2\alpha_i \hat{\vec{\sigma}_i} [\vec{E_i} \times \hat{\vec{p_i}}] \Psi - 2m_i \vec{d_i} \vec{E_i} \Psi^{\dagger} \Psi + 2m_i \Psi^{\dagger} \vec{d_i} \vec{E_i} \Psi). \quad (1.26)$$

В первую очередь, рассмотрим слагаемые, связанные с кинетической энергией, и пропорциональные квадрату оператора импульса

$$(\Psi^{\dagger}(\hat{p}_{i}^{\dagger})^{2})\Psi - \Psi^{\dagger}\hat{p}_{i}^{2}\Psi = (\Psi^{\dagger}\hat{p}_{i}^{\alpha\dagger}\hat{p}_{i\alpha}^{\dagger})\Psi - \Psi^{\dagger}\hat{p}_{i}^{2}\Psi = i\hbar\nabla_{i\alpha}(\Psi^{\dagger}\hat{p}_{i}^{\alpha\dagger})\Psi - \Psi^{\dagger}\hat{p}_{i}^{2}\Psi$$
$$= i\hbar\nabla_{i\alpha}((\Psi^{\dagger}\hat{p}_{i}^{\alpha\dagger})\Psi) + (\Psi^{\dagger}\hat{p}_{i}^{\alpha\dagger})\hat{p}_{i\alpha}\Psi - \Psi^{\dagger}\hat{p}_{i}^{2}\Psi$$
$$= i\hbar\nabla_{i\alpha}((\Psi^{\dagger}\hat{p}_{i}^{\alpha\dagger})\Psi) + i\hbar\nabla_{i}^{\alpha}(\Psi^{\dagger}\hat{p}_{i\alpha}\Psi) + \Psi^{\dagger}\hat{p}_{i}^{2}\Psi - \Psi^{\dagger}\hat{p}_{i}^{2}\Psi$$
$$= i\hbar\sum_{\alpha}\nabla_{i}^{\alpha}((\hat{p}_{i}^{\alpha}\Psi)^{\dagger}\Psi + \Psi^{\dagger}\hat{p}_{i}^{\alpha}\Psi). \quad (1.27)$$

В дальнейшем учтем, что для эрмитово сопряженных операторов действует правило $(\hat{A}_i^{\mu}\Psi)^{\dagger} = \Psi^{\dagger}\hat{A}_i^{\mu\dagger}$. Теперь рассмотрим вклад спин-орбитального взаимодействия в плотность тока

$$-\Psi^{\dagger}2m_{i}\alpha_{i}\sum_{\alpha\beta\gamma}\epsilon_{\alpha\beta\gamma}p_{i}^{\gamma\dagger}E_{i}^{\beta}\sigma_{i}^{\dagger\alpha}\Psi + \Psi^{\dagger}2m_{i}\alpha_{i}\sum_{\alpha\beta\gamma}\epsilon_{\alpha\beta\gamma}\sigma_{i}^{\alpha}E_{i}^{\beta}p_{i}^{\gamma}\Psi$$
$$= 2m_{i}\alpha_{i}\sum_{\alpha\beta\gamma}(\Psi^{\dagger}\epsilon_{\alpha\beta\gamma}\sigma_{i}^{\alpha}E_{i}^{\beta}(-i\hbar\nabla_{i}^{\gamma})\Psi - \Psi^{\dagger}\epsilon_{\alpha\beta\gamma}p_{i}^{\gamma\dagger}E_{i}^{\beta}\sigma_{i}^{\alpha}\Psi)$$
$$= 2m_{i}\alpha_{i}\sum_{\alpha\beta\gamma}(-i\hbar\epsilon_{\alpha\beta\gamma}\nabla_{i}^{\gamma}(\Psi^{\dagger}\sigma_{i}^{\alpha}E_{i}^{\beta}\Psi) + \Psi^{\dagger}\epsilon_{\alpha\beta\gamma}i\hbar\sigma_{i}^{\alpha}(\nabla_{i}^{\gamma}E_{i}^{\beta})\Psi$$

$$+ \Psi^{\dagger} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} p_{i}^{\gamma\dagger} E_{i}^{\beta} \sigma_{i}^{\alpha} \Psi - \Psi^{\dagger} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} p_{i}^{\gamma\dagger} E_{i}^{\beta} \sigma_{i}^{\alpha} \Psi) = -2m_{i} \alpha_{i} i\hbar \sum_{\alpha\beta\gamma} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \nabla_{i}^{\gamma} (\Psi^{\dagger} \sigma_{i}^{\alpha} E_{i}^{\beta} \Psi)$$
$$= -2m_{i} \alpha_{i} i\hbar \sum_{\alpha\beta\gamma} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \nabla_{i}^{\alpha} (\Psi^{\dagger} \sigma_{i}^{\beta} E_{i}^{\gamma} \Psi). \quad (1.28)$$

Таким образом,

$$\partial_t n = -\int dR \sum_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \frac{1}{2m_i} \sum_{\alpha} \nabla_i^{\alpha} ((p_i^{\alpha} \Psi)^{\dagger} \Psi + \Psi^{\dagger} p_i^{\alpha} \Psi - 2m_i \alpha_i \sum_{\beta\gamma} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \Psi^{\dagger} \sigma_i^{\beta} E_i^{\gamma} \Psi). \quad (1.29)$$

Учтём, что итоговое выражение (1.29) можно представить как

$$\partial_t n = -\int dR \sum_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \frac{1}{2m_i} \sum_{\alpha} \nabla_i^{\alpha} (\Psi^{\dagger} p_i^{\dagger \alpha} \Psi + \Psi^{\dagger} p_i^{\alpha} \Psi - m_i \alpha_i \sum_{\beta\gamma} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \Psi^{\dagger} \sigma_i^{\beta} E_i^{\gamma} \Psi) - m_i \alpha_i \sum_{\beta\gamma} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \Psi^{\dagger} \sigma_i^{\beta\dagger} E_i^{\gamma} \Psi). \quad (1.30)$$

Вводя ковариантную производную *i*-той частицы в форме

$$j_i^{\alpha} = p_i^{\alpha} - \alpha_i m_i \sum_{\beta,\gamma} \epsilon^{\alpha\beta\gamma} E_i^{\gamma} \sigma_i^{\beta}, \qquad (1.31)$$

выражение (1.24) можно привести к виду

$$\partial_t n = -\int dR \sum_i \delta(\vec{r} - \vec{r_i}) \frac{1}{2m_i} \sum_{\alpha} \nabla_i^{\alpha} ((j_i^{\alpha} \Psi)^{\dagger} \Psi + h.c.) =$$

$$= -\sum_{\alpha} \int dR \sum_i \nabla_i^{\alpha} (\delta(\vec{r} - \vec{r_i}) \frac{1}{2m_i} ((j_i^{\alpha} \Psi)^{\dagger} \Psi + h.c.)) +$$

$$+ \sum_{\alpha} \int dR \sum_i (\nabla_i^{\alpha} \delta(\vec{r} - \vec{r_i})) \frac{1}{2m_i} ((j_i^{\alpha} \Psi)^{\dagger} \Psi + \Psi^{\dagger} j_i^{\alpha} \Psi). \quad (1.32)$$

Учитывая, что

$$\nabla_i^{\alpha} \delta(\vec{r} - \vec{r_i}) = -\nabla^{\alpha} \delta(\vec{r} - \vec{r_i})$$
(1.33)

И

$$\int dR_N \nabla_i^\alpha f(R) = \int dR_{N-1} dr_i \nabla_i^\alpha f(R) = 0, \qquad (1.34)$$

получим следующее уравнение

$$\partial_t n = -\sum_{\alpha} \nabla^{\alpha} \int dR \sum_i \delta(\vec{r} - \vec{r_i}) \frac{1}{2m_i} ((j_i^{\alpha} \Psi)^{\dagger} \Psi + \Psi^{\dagger} j_i^{\alpha} \Phi), \qquad (1.35)$$

которое и является уравнением непрерывности

$$\partial_t n(\vec{r}, t) + \nabla_\alpha j^\alpha(\vec{r}, t) = 0.$$
(1.36)

При выводе уравнения (1.36) было получено микроскопическое представление плотности тока

$$j^{\alpha}(\vec{r},t) = \int dR \sum_{i} \delta(\vec{r}-\vec{r_{i}}) \frac{1}{2m_{i}} ((j_{i}^{\alpha}\Psi)^{\dagger}\Psi + \Psi^{\dagger}j_{i}^{\alpha}\Psi).$$
(1.37)

Уравнение динамики плотности тока

Уравнение баланса импульса для рассматриваемой системы частиц можно получить, дифференцируя по времени определение плотности тока (1.37) и используя уравнение Шредингера

$$\partial_t j^{\alpha} = \int dR \sum_i \delta(\vec{r} - \vec{r_i}) \frac{1}{2m_i} (\partial_t \Psi^{\dagger} p_i^{\alpha \dagger} \Psi + \Psi^{\dagger} p_i^{\alpha \dagger} \partial_t \Psi + \partial_t \Psi^{\dagger} p_i^{\alpha} \Psi + \Psi^{\dagger} p_i^{\alpha} \partial_t \Psi - \partial_t \Psi^{\dagger} 2m_i \alpha_i \sum_{\beta \gamma} \epsilon_{\alpha \beta \gamma} E_i^{\gamma} \sigma_i^{\beta} \Psi - \Psi^{\dagger} 2m_i \alpha_i \sum_{\beta \gamma} \epsilon_{\alpha \beta \gamma} E_i^{\gamma} \sigma_i^{\beta} \partial_t \Psi). \quad (1.38)$$

Рассмотрим пятое и шестое слагаемые в правой части уравнения (1.38), содержащие спин-орбитальное взаимодействие, отдельно, и преобразуем, подставив производные по времени от волновых функций из уравнения Шредингера

$$-\frac{\partial\Psi^{\dagger}}{\partial t}2m_{i}\alpha_{i}\sum_{\beta\gamma}\epsilon_{\alpha\beta\gamma}E_{i}^{\gamma}\sigma_{i}^{\beta}\Psi-\Psi^{\dagger}2m_{i}\alpha_{i}\sum_{\beta\gamma}\epsilon_{\alpha\beta\gamma}E_{i}^{\gamma}\sigma_{i}^{\beta}\frac{\partial\Psi}{\partial t}=$$

$$=-2m_{i}\alpha_{i}\frac{i}{\hbar}\sum_{k}(\Psi^{\dagger}(\frac{(p_{k}^{\dagger})^{2}}{2m_{k}}-\vec{d_{k}}\vec{E_{k}}-\alpha_{k}\sum_{\mu\nu\eta}\epsilon_{\mu\nu\eta}p_{k}^{\eta\dagger}E_{k}^{\nu}\sigma_{k}^{\dagger\mu})\sum_{\beta\gamma}\epsilon_{\alpha\beta\gamma}E_{i}^{\gamma}\sigma_{i}^{\beta}\Psi,$$

$$-\Psi^{\dagger}\sum_{\beta\gamma}\epsilon_{\alpha\beta\gamma}\sigma_{i}^{\beta}E_{i}^{\gamma}(\frac{p_{k}^{2}}{2m_{k}}-\vec{d_{k}}\vec{E_{k}}-\alpha_{k}\sum_{\mu\nu\eta}\epsilon_{\mu\nu\eta}\sigma_{k}^{\mu}E_{k}^{\nu}p_{k}^{\eta})\Psi). \quad (1.39)$$

Рассмотрим и преобразуем слагаемые в выражении (1.39), пропорциональные α_k

$$-\Psi^{\dagger}\alpha_{k}\sum_{\mu\nu\eta}\epsilon_{\mu\nu\eta}p_{k}^{\eta\dagger}E_{k}^{\nu}\sigma_{k}^{\mu}\sum_{\beta\gamma}\epsilon_{\alpha\beta\gamma}\sigma_{i}^{\beta}E_{i}^{\gamma}\Psi+\Psi^{\dagger}\sum_{\beta\gamma}\epsilon_{\alpha\beta\gamma}\sigma_{i}^{\beta}E_{i}^{\gamma}\alpha_{k}\sum_{\mu\nu\eta}\epsilon_{\mu\nu\eta}\sigma_{k}^{\mu}E_{k}^{\nu}p_{k}^{\eta}\Psi$$

$$=-i\hbar\sum_{\mu\nu\eta}\nabla_{k}^{\eta}(\Psi^{\dagger}\epsilon_{\mu\nu\eta}E_{k}^{\nu}\sigma_{k}^{\mu}\sum_{\beta\gamma}\epsilon_{\alpha\beta\gamma}\sigma_{i}^{\beta}E_{i}^{\gamma}\Psi)$$

$$+i\hbar\Psi^{\dagger}\sum_{\mu\nu\eta}\epsilon_{\mu\nu\eta}E_{k}^{\nu}\sigma_{k}^{\mu}\sum_{\beta\gamma}\epsilon_{\alpha\beta\gamma}\sigma_{i}^{\beta}E_{i}^{\gamma}\alpha_{k}\sum_{\mu\nu\eta}\epsilon_{\mu\nu\eta}\sigma_{k}^{\mu}E_{k}^{\nu}p_{k}^{\eta}\Psi+\Psi^{\dagger}\sum_{\beta\gamma}\epsilon_{\alpha\beta\gamma}\sigma_{i}^{\beta}E_{i}^{\gamma}\alpha_{k}\sum_{\mu\nu\eta}\epsilon_{\mu\nu\eta}\sigma_{k}^{\mu}E_{k}^{\nu}p_{k}^{\eta}\Psi$$

$$=-i\hbar\sum_{\mu\nu\eta}\nabla_{k}^{\eta}(\Psi^{\dagger}\epsilon_{\mu\nu\eta}E_{k}^{\nu}\sigma_{k}^{\mu}\sum_{\beta\gamma}\epsilon_{\alpha\beta\gamma}\sigma_{i}^{\beta}E_{i}^{\gamma}\Psi)$$

$$+i\hbar\Psi^{\dagger}\sum_{\mu\nu\eta}\epsilon_{\mu\nu\eta}E_{k}^{\nu}\sigma_{k}^{\mu}\sum_{\beta\gamma}\epsilon_{\alpha\beta\gamma}\sigma_{i}^{\beta}(\nabla_{k}^{\eta}E_{i}^{\gamma})\Psi, \quad (1.40)$$

Далее,

$$\begin{split} \Psi^{\dagger} \frac{(p_{k}^{\dagger})^{2}}{2m_{k}} &\sum_{\beta\gamma} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \sigma_{i}^{\beta} E_{i}^{\gamma} \Psi - \Psi^{\dagger} \sum_{\beta\gamma} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \sigma_{i}^{\beta} E_{i}^{\gamma} \frac{p_{k}^{2}}{2m_{k}} \Psi \\ &= \frac{1}{2m_{k}} (i\hbar \sum_{\eta} \nabla_{k}^{\eta} (\Psi^{\dagger} p_{k}^{\eta\dagger}) \sum_{\beta\gamma} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \sigma_{i}^{\beta} E_{i}^{\gamma} \Psi - \Psi^{\dagger} \sum_{\beta\gamma} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \sigma_{i}^{\beta} E_{i}^{\gamma} \sum_{\eta} p_{k}^{\eta} p_{k}^{\eta} \Psi) \\ &= \frac{1}{2m_{k}} (i\hbar \sum_{\eta} \nabla_{k}^{\eta} (\Psi^{\dagger} p_{k}^{\eta\dagger} \sum_{\beta\gamma} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \sigma_{i}^{\beta} E_{i}^{\gamma} \Psi) - i\hbar \sum_{\eta} \Psi^{\dagger} p_{k}^{\eta\dagger} \sum_{\beta\gamma} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \sigma_{i}^{\beta} (\nabla_{k}^{\eta} E_{i}^{\gamma}) \Psi \\ &\quad - i\hbar \sum_{\eta} \Psi^{\dagger} p_{k}^{\eta\dagger} \sum_{\beta\gamma} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \sigma_{i}^{\beta} E_{i}^{\gamma} \nabla_{k}^{\eta} \Psi - \Psi^{\dagger} \sum_{\beta\gamma} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \sigma_{i}^{\beta} E_{i}^{\gamma} \sum_{\eta} p_{k}^{\eta} p_{k}^{\eta} \Psi) \\ &= \frac{1}{2m_{k}} (i\hbar \sum_{\eta} \nabla_{k}^{\eta} (\Psi^{\dagger} p_{k}^{\eta\dagger} \sum_{\beta\gamma} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \sigma_{i}^{\beta} E_{i}^{\gamma} \Psi) - i\hbar \sum_{\eta} \Psi^{\dagger} p_{k}^{\eta\dagger} \sum_{\beta\gamma} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \sigma_{i}^{\beta} (\nabla_{k}^{\eta} E_{i}^{\gamma}) \Psi \\ &\quad + i\hbar \sum_{\eta} \nabla_{k}^{\eta} (\Psi^{\dagger} \sum_{\beta\gamma} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \sigma_{i}^{\beta} E_{i}^{\gamma} p_{k}^{\eta} \Psi) - i\hbar \sum_{\eta} \sum_{\beta\gamma} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \sigma_{i}^{\beta} (\nabla_{k}^{\eta} E_{i}^{\gamma}) p_{k}^{\eta} \Psi). \quad (1.41) \end{split}$$

Теперь рассмотрим первые четыре слагаемых в правой части уравнения (1.38) и проведем аналогичную процедуру их преобразования, подставив производную по времени от волновой функции из уравнения Шредингера

$$\frac{\partial \Psi^{\dagger}}{\partial t} p_i^{\alpha \dagger} \Psi + \Psi^{\dagger} p_i^{\alpha \dagger} \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial \Psi^{\dagger}}{\partial t} p_i^{\alpha} \Psi + \Psi^{\dagger} p_i^{\alpha} \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

$$=\frac{i}{\hbar}\sum_{k}(\Psi^{\dagger}(\frac{(p_{k}^{\dagger})^{2}}{2m_{k}}-\vec{d_{k}}\vec{E_{k}}-\alpha_{k}\sum_{\mu\nu\eta}\epsilon_{\mu\nu\eta}p_{k}^{\eta\dagger}E_{k}^{\nu}\sigma_{k}^{\mu\dagger})p_{i}^{\alpha\dagger}\Psi$$

$$-\Psi^{\dagger}p_{i}^{\alpha\dagger}\left(\frac{p_{k}^{2}}{2m_{k}}-\vec{d_{k}}\vec{E_{k}}-\alpha_{k}\sum_{\mu\nu\eta}\epsilon_{\mu\nu\eta}\sigma_{k}^{\mu}E_{k}^{\nu}p_{k}^{\eta}\right)\Psi$$

$$+\Psi^{\dagger}\left(\frac{(p_{k}^{\dagger})^{2}}{2m_{k}}-\vec{d_{k}}\vec{E_{k}}-\alpha_{k}\sum_{\mu\nu\eta}\epsilon_{\mu\nu\eta}p_{k}^{\eta\dagger}E_{k}^{\nu}\sigma_{k}^{\mu\dagger}\right)p_{i}^{\alpha}\Psi$$

$$-\Psi^{\dagger}p_{i}^{\alpha}\left(\frac{p_{k}^{2}}{2m_{k}}-\vec{d_{k}}\vec{E_{k}}-\alpha_{k}\sum_{\mu\nu\eta}\epsilon_{\mu\nu\eta}\sigma_{k}^{\mu}E_{k}^{\nu}p_{k}^{\eta}\right)\Psi). \quad (1.42)$$

Преобразуем отдельно слагаемые в выражении (1.42), содержащие энергию электрического дипольного момента k-ой частицы во внешнем электрическом поле $-\vec{d_k}\vec{E_k}$

$$\sum_{\beta} (-\Psi^{\dagger} d_k^{\beta} E_k^{\beta} p_i^{\alpha \dagger} \Psi + \Psi^{\dagger} p_i^{\alpha \dagger} d_k^{\beta} E_k^{\beta} \Psi - \Psi^{\dagger} d_k^{\beta} E_k^{\beta} p_i^{\alpha} \Psi + \Psi^{\dagger} p_i^{\alpha} d_k^{\beta} E_k^{\beta} \Psi) =$$

$$= \sum_{\beta} (-i\hbar d_k^{\beta} (\nabla_i^{\alpha} E_k^{\beta}) \Psi - \Psi^{\dagger} p_i^{\alpha} d_k^{\beta} E_k^{\beta} \Psi + \Psi^{\dagger} p_i^{\alpha} d_k^{\beta} E_k^{\beta} \Psi -$$

$$-\Psi^{\dagger} d_k^{\beta} E_k^{\beta} p_i^{\alpha} \Psi - \Psi^{\dagger} i\hbar d_k^{\beta} (\nabla_i^{\alpha} E_k^{\beta}) \Psi + \Psi^{\dagger} d_k^{\beta} E_k^{\beta} p_i^{\alpha} \Psi) =$$

$$= -2i\hbar \sum_{\beta} \Psi^{\dagger} d_k^{\beta} (\nabla_i^{\alpha} E_k^{\beta}) \Psi. \quad (1.43)$$

Преобразуем слагаемые в выражении (1.42), которые вытекают из учета кинетической энергии частиц

$$\frac{1}{2m_k} (\Psi^{\dagger}(p_k^{\dagger})^2 p_i^{\alpha^{\dagger}} \Psi - \Psi^{\dagger} p_i^{\alpha^{\dagger}} p_k^2 \Psi + \Psi^{\dagger}(p_k^{\dagger})^2 p_i^{\alpha^{\dagger}} \Psi - \Psi^{\dagger} p_i^{\alpha} p_k^2 \Psi) =$$

$$= \frac{1}{2m_k} (i\hbar \sum_{\eta} \nabla_k^{\eta} (\Psi^{\dagger} p_k^{\eta^{\dagger}} p_i^{\alpha^{\dagger}} \Psi) + \sum_{\eta} \Psi^{\dagger} p_k^{\eta^{\dagger}} p_i^{\alpha^{\dagger}} p_k^{\eta} \Psi - \Psi^{\dagger} p_i^{\alpha^{\dagger}} p_k^2 \Psi +$$

$$+ i\hbar \sum_{\eta} \nabla_k^{\eta} (\Psi^{\dagger} p_k^{\eta^{\dagger}}) p_i^{\alpha} \Psi - \Psi^{\dagger} p_i^{\alpha} p_k^2 \Psi) =$$

$$= \frac{i\hbar}{2m_k} \sum_{\eta} \nabla_k^{\eta} (\Psi^{\dagger} p_k^{\eta^{\dagger}} p_i^{\alpha^{\dagger}} \Psi + \Psi^{\dagger} p_i^{\alpha^{\dagger}} p_k^{\eta} \Psi + \Psi^{\dagger} p_k^{\eta^{\dagger}} p_i^{\alpha} \Psi + \Psi^{\dagger} p_i^{\alpha} p_k^{\eta} \Psi) \quad (1.44)$$

И, наконец, рассмотрим оставшиеся слагаемые

$$-\alpha_k \sum_{\mu\nu\eta} \epsilon_{\mu\nu\eta} (\Psi^{\dagger} p_k^{\eta\dagger} E_k^{\nu} \sigma_k^{\mu\dagger} p_i^{\alpha} \Psi + (\Psi^{\dagger} p_k^{\eta\dagger} E_k^{\nu} \sigma_k^{\mu\dagger}) p_i^{\alpha\dagger} \Psi$$

$$-\Psi^{\dagger}p_{i}^{\alpha}(\sigma_{k}^{\mu}E_{k}^{\nu}p_{k}^{\eta}\Psi) - \Psi^{\dagger}p_{i}^{\alpha\dagger}\sigma_{k}^{\mu}E_{k}^{\nu}p_{k}^{\eta}\Psi)$$

$$= \alpha_{k}\sum_{\mu\nu\eta}\epsilon_{\mu\nu\eta}p_{i}^{\alpha}E_{k}^{\nu}(\Psi^{\dagger}\sigma_{k}^{\mu}p_{k}^{\eta}\Psi + \Psi^{\dagger}p_{k}^{\eta\dagger}\sigma_{k}^{\mu}\Psi)$$

$$- \alpha_{k}\sum_{\mu\nu\eta}\epsilon_{\mu\nu\eta}E_{k}^{\nu}(\Psi^{\dagger}p_{k}^{\eta\dagger}\sigma_{k}^{\mu}p_{i}^{\alpha}\Psi + \Psi^{\dagger}p_{k}^{\eta\dagger}\sigma_{k}^{\mu}\Psi)$$

$$= \alpha_{k}\sum_{\mu\nu\eta}\epsilon_{\mu\nu\eta}(-i\hbar\nabla_{i}^{\alpha}E_{k}^{\nu})(\Psi^{\dagger}\sigma_{k}^{\mu}p_{k}^{\eta}\Psi + \Psi^{\dagger}p_{k}^{\eta\dagger}\sigma_{k}^{\mu}\Psi)$$

$$+ \alpha_{k}\sum_{\mu\nu\eta}\epsilon_{\mu\nu\eta}E_{k}^{\nu}p_{k}^{\eta}(\Psi^{\dagger}\sigma_{k}^{\mu}p_{i}^{\alpha}\Psi + \Psi^{\dagger}p_{i}^{\alpha\dagger}\sigma_{k}^{\mu}\Psi) \quad (1.45)$$

Подставим преобразованные выше выражения обратно в уравнение (1.38) и выделим слагаемое, содержащее поляризацию. Для этого проведем процедуру усреднения

$$\int dR \sum_{i} \delta(\vec{r} - \vec{r_{i}}) \frac{1}{2m_{i}} \sum_{k} (2\Psi^{\dagger} d_{k}^{\mu} \Psi \nabla_{i}^{\alpha} E_{k}^{\mu}) =$$

$$= \int dR \sum_{i} \delta(\vec{r} - \vec{r_{i}}) \frac{1}{m_{i}} \Psi^{\dagger} d_{i}^{\mu} \Psi \nabla_{i}^{\alpha} E_{i}^{\mu} =$$

$$= \int dR \sum_{i} \delta(\vec{r} - \vec{r_{i}}) \nabla^{\alpha} E^{\mu} \frac{1}{m_{i}} \Psi^{\dagger} d_{i}^{\mu} \Psi =$$

$$= \frac{1}{m} \nabla^{\alpha} E^{\mu} \int dR \sum_{i} \delta(\vec{r} - \vec{r_{i}}) \Psi^{\dagger} d_{i}^{\mu} \Psi. \quad (1.46)$$

В выражении (1.46) можно ввести плотность дипольного момента или электрическую поляризацию, заданную в окрестности точки \vec{r} трёхмерного пространства, в виде

$$P^{\alpha} = \int dR \sum_{i}^{N} \delta(\vec{r} - \vec{r_i}) \Psi^{\dagger} d_i^{\alpha} \Psi.$$
 (1.47)

После подстановки всех выведенных выражений в правую часть уравнения (1.38), и проведения процедуры усреднения, мы приходим к окончательному виду уравнения эволюции плотности тока

$$\partial_t j^{\alpha}(\vec{r},t) + \partial_{\beta} \Pi^{\alpha\beta}(\vec{r},t) = \frac{1}{m} P_{\beta}(\vec{r},t) \partial^{\alpha} E^{\beta}(\vec{r},t) + F^{\alpha}_{so}(\vec{r},t), \qquad (1.48)$$

где поле силы, вызванной спин-орбитальным взаимодействием выведено в виде

$$F_{so}^{\alpha} = -\frac{\gamma}{mc} \epsilon^{\alpha\beta\gamma} \partial^{\delta} E_{\gamma}(\vec{r},t) J_{s}^{\beta\delta}(\vec{r},t) + \frac{\gamma}{mc} \epsilon^{\beta\delta\gamma} \partial^{\alpha} E_{\delta}(\vec{r},t) J_{s}^{\beta\gamma}(\vec{r},t). \quad (1.49)$$

Микроскопическое представление спинового тока было получено при выводе уравнения (1.48) в виде

$$J_s^{\alpha\beta}(\vec{r},t) = \int dR \sum_i^N \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \frac{1}{2m_i} \bigg((\sigma_i^\alpha \hat{j}_i^\beta \Psi)^\dagger \Psi + \Psi^\dagger (\sigma_i^\alpha \hat{j}_i^\beta \Psi) \bigg), \quad (1.50)$$

где оператор тока определяется выражением

$$\hat{j}^{\alpha} = -i\hbar\partial_i^{\alpha} - \alpha_i m_i \sum_{\beta,\gamma} \epsilon^{\alpha\beta\gamma} E_i^{\gamma} \sigma_i^{\beta}.$$
(1.51)

Рассмотрим уравнение динамики плотности тока (1.48) подробно. Второе слагаемое в левой части уравнения представляет собой пространственную производную от тензора плотности потока импульса, микроскопическое представление которого получено в виде

$$\Pi^{\alpha\beta} = \int dR \sum_{i}^{N} \delta(\vec{r} - \vec{r}_{i}) \frac{1}{4m_{i}} \left(\Psi^{\dagger} \hat{j}_{i}^{\alpha} \hat{j}_{i}^{\beta} \Psi + (\hat{j}_{i}^{\alpha} \Psi)^{\dagger} \hat{j}_{i}^{\beta} \Psi + h.c. \right). \quad (1.52)$$

Первое слагаемое в правой части уравнения (1.48) есть поле плотности силы, действующей со стороны неоднородного электрического поля на плотность дипольных моментов или поляризацию. В уравнении появляется влияние спин-орбитального взаимодействия, которое представлено полем плотности силы F_{so}^{α} (1.49).

Поле скоростей в уравнениях квантовой гидродинамики

Для выделения векторного поля скоростей в уравнениях квантовой гидродинамики необходимо представить волновую функцию N частиц в виде разложения Маделунга [21]

$$\Psi = a(R,t)exp(\frac{i}{\hbar}\xi(R,t))\phi(R,t), \qquad (1.53)$$

где a(R,t) — амплитуда, ξ — фаза, ϕ — нормированный спинор ($\phi^{\dagger}\phi = 1$). Разложение Маделунга, впервые примененное для бесспиновых частиц [21], помогает получить явную форму квантового потенциала Бома. Подстановка волновой функции в явном виде в определение основных величин, таких как плотность тока j^{α} , плотность потока импульса $\Pi^{\alpha\beta}$ и плотность спинового тока $J_s^{\alpha\beta}$ приводит к их макроскопическому представлению

$$j^{\alpha}(r,t) = n(r,t)v^{\alpha}(r,t),$$

$$\Pi^{\alpha\beta}(r,t) = mn(r,t)v^{\alpha}(r,t)v^{\beta}(r,t) + \overbrace{p^{\alpha\beta}(r,t)}^{kinetic \ pressure \ tensor} + \Sigma_{s}^{\alpha\beta}(r,t)$$

$$J_{s}^{\alpha\beta}(r,t) = \gamma S^{\alpha}(r,t)v^{\beta}(r,t) + J_{therm}^{\alpha\beta} + \Omega_{s}^{\alpha\beta}(r,t). \quad (1.54)$$

Выражение для плотности тока j^{α} содержит гидродинамическую скорость v^{α} , которая связана со скоростью *i*-частицы соотношением $z_i^{\alpha} = v_i^{\alpha} - v^{\alpha}$, где z_i^{α} - это тепловая скорость. Разложение Маделунга подразумевает для микроскопической скорости *i*-й частицы зависимость

$$v_i^{\alpha}(R,t) = \frac{1}{m} \partial^{\alpha} \xi(R,t) - \frac{i\hbar}{m} \phi^{\dagger} \partial_i^{\alpha} \phi.$$
 (1.55)

В разложении тензора плотности потока импульса появляется тензор кинетического давления

$$p^{\alpha\beta} = \int dR \sum_{i}^{N} \delta(\vec{r} - \vec{r_i}) a^2 m_i z_i^{\alpha} z_i^{\beta}.$$
(1.56)

Тензор $\Sigma_s^{\alpha\beta}$ связан с квантовыми и спиновыми эффектами, и его учет приводит к появлению в уравнении динамики плотности тока квантового потенциала Бома и спиновой части потенциала Бома

 $Bohm\ potantial,\ quantum\ effect$

$$\Sigma_{s}^{\alpha\beta} = \int dR \sum_{i}^{N} \delta(\vec{r} - \vec{r_{i}}) \frac{\hbar^{2}}{2m_{i}} \left(\partial_{i}^{\alpha} a(R, t) \partial_{i}^{\beta} a(R, t) - a(R, t) \partial_{i}^{\alpha} \partial_{i}^{\beta} a(R, t) \right)$$

$$Spin \ part \ of \ Bohm \ potential}$$

$$+ \int dR \sum_{i}^{N} \delta(\vec{r} - \vec{r_{i}}) \frac{\hbar^{2}}{4m_{i}} a^{2} \partial_{i}^{\alpha} s_{i}^{\mu} \partial_{i}^{\beta} s_{i}^{\mu} . \quad (1.57)$$

В выражении для плотности спинового тока $J_s^{\alpha\beta}$ (1.54) первое слагаемое характеризует спиновый ток, возникающий в результате движения спинов, обладающих гидродинамической скоростью v^{α} . Второе слагаемое является тепловым спиновым током

$$J_{therm}^{\alpha\beta} = \int dR \sum_{i}^{N} \delta(\vec{r} - \vec{r_i}) a^2 z_i^{\beta} s_i^{\alpha}, \qquad (1.58)$$

где спин *i*-ой частицы s_i^{α} связан с тепловыми флуктуациями спина w_i^{α} относительно среднего макроскопического значения соотношением $w_i^{\alpha} = s_i^{\alpha} - S^{\alpha}$. Последнее слагаемое в макроскопическом выражении плотности спинового тока $\Omega_s^{\alpha\beta}$ связано с квантовыми и спиновыми эффектами, и было получено ранее в работе [31]

$$\Omega_{s}^{\alpha\beta} = -\int dR \sum_{i}^{N} \delta(\vec{r} - \vec{r_{i}}) \frac{\hbar^{2}}{2m_{i}} a^{2} \epsilon^{\alpha\mu\nu} s_{i}^{\mu} \partial_{i}^{\beta} s_{i}^{\nu}$$
$$= -\frac{\hbar^{2}}{2m} \epsilon^{\alpha\mu\nu} \frac{S^{\mu}}{n} \partial^{\beta} S^{\nu} + spin - thermal \ coupling, \ (1.59)$$

где первое слагаемое является макроскопическим представлением части спинового тока, возникающего в среде со спиральной структурой спинов частиц, но не связанного с движением спинов в пространстве. Второе слагаемое в правой части (1.59) появляется из учета влияния тепловых эффектов и имеет сложную структуру [31]. Если мы пренебрегаем тепловыми эффектами, то второе слагаемое можно не учитывать.

Рассмотрим равновесное состояние, которое обычно реализуется в кристаллической структуре мультиферроика, когда $v^{\alpha} = 0$, $\partial_t n = 0$, а также пренебрегая тепловыми эффектами. Подставим плотности силы, возникающей в результате спин-орбитального взаимодействия (1.49), в правую часть уравнения (1.48), и учтем, что спиновый ток определяется только неоднородной спиновой структурой вещества (1.59) и не связан с движением спинов в пространстве

$$P_{\beta}\partial^{\alpha}E^{\beta} - \frac{\gamma}{mc}\epsilon^{\alpha\beta\gamma}\partial^{\delta}E_{\gamma}J_{s}^{\beta\delta} + \frac{\gamma}{mc}\epsilon^{\beta\delta\gamma}\partial^{\alpha}E_{\delta}J_{s}^{\beta\gamma}$$
$$= P_{\beta}\partial^{\alpha}E^{\beta} + \frac{\gamma\hbar^{2}}{2m^{2}c}\epsilon^{\beta\mu\nu}\frac{S^{\mu}}{n}\left(\epsilon^{\alpha\beta\gamma}\partial^{\delta}E^{\gamma}\partial^{\delta} - \epsilon^{\beta\delta\gamma}\partial^{\alpha}E^{\delta}\partial^{\gamma}\right)S^{\nu} = 0. \quad (1.60)$$

Уравнение (1.60) связывает электрическую дипольную поляризацию, индуцированную в результате спин-орбитального взаимодействия, и плотность спинового тока (1.59), не связанную с движением спинов в пространстве. Данная зависимость была получена из основных принципов теоретической модели, в процессе её построения, впервые, и представляет фундаментальный результат, в контексте развития спин-токовой модели магнитоэлектрического эффекта в мультиферроиках с антисимметричным обменным взаимодействием.

В общем случае, электрическое поле E_{γ} в уравнении (1.60) складывается из внешнего поля E_{ext}^{γ} и поля, создаваемого ионами среды E_{int}^{γ}

$$E_{int}^{\alpha} = \int d\vec{r}' G^{\alpha\beta}(\vec{r},\vec{r}') P^{\beta}(\vec{r}',t) + e\partial_{\beta} \int d\vec{r}' G(\vec{r},\vec{r}') n(\vec{r}',t), \qquad (1.61)$$

где функции Грина кулоновского и диполь-дипольного взаимодействий определяются в форме

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|}, \qquad G^{\alpha\beta}(\vec{r}, \vec{r}') = \partial^{\alpha}\partial^{\beta}\left(\frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|}\right).$$
(1.62)

Электрическое поле, создаваемое частицами среды, подчиняется уравнению Максвелла

$$div\vec{E}_{int}(\vec{r},t) = 4\pi\rho(\vec{r},t) - 4\pi div\vec{P}(\vec{r},t).$$
(1.63)

Выводы

В рамках проведения научной работы были изучены механизмы возникновения магнитоэлектрического эффекта в мультиферроиках второго типа. Были исследованы теоретические модели описания электрической дипольной поляризации, возникающей в средах с определенной магнитной структурой, а также её контроль. В качестве основного направления исследований был выбрал механизм, основанный на спин-орбитальном взаимодействии. В настоящее время существует две основных теоретических модели, позволяющие вычислить значение электрической поляризации: феноменологическая модель М. Мостового и спин-токовая модель, разработанная Катсурой, Нагаоши и Балатским. Как было замечено в процессе изучения спинтоковой модели, спиновый ток в контексте спин-орбитального взаимодействия определен неоднозначно, его связь с поляризацией не была выведена. В попытке устранить существующие противоречия, была поставлена и решена задача о построении новой теоретической модели описания электрической дипольной поляризации на основе метода многочастичной квантовой гидродинамики.

- Была рассмотрена система частиц, обладающих индуцированными дипольными моментами и спинами, ориентированными произвольным образом. В системе реализуется спин-орбитальное взаимодействие спиновых магнитных моментов с внешними электрическими полями и полями, генерируемыми диполями и зарядами среды. Был задан многочастичный Гамильтониан и определены основные функции координат и времени, такие как концентрация частиц в окрестности точки пространства, плотность спина и электрическая поляризация.
- На основе метода многочастичной квантовой гидродинамики были выведены уравнение непрерывности и уравнение динамики плотности тока. При получении уравнения непрерывности в нем возникает плотность

тока в микроскопическом представлении. При выводе уравнения динамики плотности тока, было получено микроскопическое представление для плотности потока импульса, электрической поляризации, плотности спинового тока.

- 3. Уравнение динамики плотности тока, для рассматриваемой системы, полученное впервые, содержит слагаемые, характеризующие действие электрических полей на поляризацию среды и эффекты спин-орбитального взаимодействия. Поле силы, возникающей в результате спин-орбитального взаимодействия, содержит выражение для плотности спинового тока.
- 4. Было показано, что в системах с неоднородной структурой намагниченности, возникает дополнительный спиновый ток, который при учете спин-орбитального взаимодействия приводит к появлению электрической дипольной поляризации.

Таким образом, была предложена гидродинамическая модель, позволяющая определить прямую взаимосвязь электрической поляризации со спиновым током, в среде с неоднородным распределением спинов частиц и спинорбитальным взаимодействием.

Список литературы

Литература

- P. W. Anderson, New Approach to the Theory of Superexchange Interactions Phys. Rev. 115, 2 (1959).
- [2] Maxim Mostovoy, Ferroelectricity in Spiral Magnets, Phys. Rev. Lett. 96, 067601 (2006).
- [3] H. Katsura, N. Nagaosa, A. V. Balatsky, Spin Current and Magnetoelectric Effect in Noncollinear Magnets, Phys. Rev. Lett. 95, Iss. 5. 057205 (2006).
- [4] А. П. Пятаков, А. К. Звездин, Магнитоэлектрические материалы и мультиферроики, УФН, 182, 593 (2012).
- [5] Daniel Khomskii, Classifying multiferroics: Mechanisms and effects, Physics 2, 20 (2009).
- [6] T. Kimura, T. Goto, H. Shintani, et al., Magnetic control of ferroelectric polarization, Nature 426, 55 (2003).
- [7] P. Curie, Sur la symetrie dans les phenomenes physiques, symetrie d'un champ electrique, Journal of Theoretical and Applied Physics 393 (1894).
- [8] I. E. Dzyaloshinskii, On the Magneto-electrical effect in antiferromagnets, Journal of Experimental and Theoretical Physics 10, 628 (1959).
- [9] D. N. Astrov, The Magnetoelectric effect in Antiferromagnetics, JETF 11, No. 3, 708 (1960).
- [10] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевским, Теоретическая физика: Электродинамика сплошных сред, – М.: Наука. 1986. Т.VIII. 629с.

- [11] V. J. Folen, G. T. Rado, E. W. Stalder, Anisotropy of the Magnetoelectric Effect in Cr2O3, Phys. Rev. Lett. 6, 607 (1961).
- [12] А. В. Калгин, Е. С. Григорьев, З. Х. Граби, Магнитоэлектрический эффект: история, современное состояние исследований и перспективы применения, АЭЭ № 3-2, 122 (2013).
- [13] Y. Tokura, S. Seki and N. Nagaosa, Multiferroics of spin origin, Reports on Progress in Physics, 77(7), 076501 (2014).
- [14] https://www.phys.msu.ru/rus/about/sovphys/ISSUES-2018/02(130)-2018/27016/
- [15] I. A. Sergienko, E. Dagotto, Role of the Dzyaloshinskii-Moriya interaction in multiferroic perovskites, Physical Review B 73, Iss. 9, 094434 (2006).
- [16] А. С. Москвин, И. Г. Бострем, Некоторые особенности обменного взаимодействия в ортоферритах ортохромитах, Физика твердого тела 19, 1616 (1977).
- [17] P. W. Anderson and H. Hasegawa, Considerations on Double Exchange, Phys. Rev. 100, 675 (1955).
- [18] T. Moriya, Anisotropic Superexchange Interaction and Weak Ferromagnetism, Phys. Rev. 120, 91 (1960).
- [19] Jiangping Hu, Microscopic Origin of Magnetoelectric Coupling in Noncollinear Multiferroics, Phys. Rev. Lett. 100, 077202 (2008).
- [20] L. S. Kuz'menkov, S. G. Maksimov, Quantum hydrodynamics of particle systems with Coulomb interaction and quantum Bohm potential, Theoret. and Math. Phys. 118:2, 227 (1999).

- [21] P. A. Andreev, L. S. Kuzmenkov, Problem with the single-particle description and the spectra of intrinsic modes of degenerate boson-fermion systems, Phys. Rev. A. 78, 053624 (2008).
- [22] L. S. Kuz'menkov, S. G. Maksimov, V. V. Fedoseev, Microscopic Quantum Hydrodynamics of Systems of Fermions: Part I, Theoret. and Math. Phys. 126:1, 110 (2001).
- [23] Pavel A. Andreev, Quantum hydrodynamic theory of quantum fluctuations in dipolar Bose–Einstein condensate, Chaos 31 (2), 023120 (2021).
- [24] Pavel A. Andreev, I. N. Mosaki, Mariya Iv. Trukhanova, Quantum hydrodynamics of the spinor Bose–Einstein condensate at non-zero temperatures, Physics of Fluids 33(6), 067108 (2021).
- [25] Pavel A. Andreev, Spin-electron acoustic soliton and exchange interaction in separate spin evolution quantum plasmas. Physics of Plasmas 23(1), 012106 (2016).
- [26] P. Andreev and M. Trukhanova, Separated spin evolution quantum hydrodynamics of degenerate electrons with spin–orbit interaction and extraordinary wave spectrum. Journal of Plasma Physics 84(5), 905840504 (2018).
- [27] Chia-Hui Lin, Chi-Shung Tang, Yia-Chung Chang, Nonmagnetic control of spin flow: Generation of pure spin current in a Rashba-Dresselhaus quantum channel, Phys. Rev. B 78, 245312 (2008).
- [28] P. A. Andreev, L. S. Kuzmenkov, and M. I. Trukhanova, Quantum hydrodynamics approach to the formation of waves in polarized twodimensional systems of charged and neutral particles, Phys. Rev. B 84, 245401 (2011).

- [29] Foldy Leslie, Wouthuysen Siegfried, On the Dirac Theory of Spin 1/2 Particles and Its Non-Relativistic Limit, Phys. Rev. 78, 29 (1950).
- [30] К. Ициксон, Ж. Б. Зюбер, Квантовая теория поля: Пер. с англ. —М.: Мир, 1984. Т.1, 448с.
- [31] L. S. Kuz'menkov, F. Asenjo, S. M. Mahajan, P. A. Andreev, Exchange interaction in quantum hydrodynamics, Joint ICTP-IAEA College on plasma physics, Miramare - Trieste, Italy, 2012.