01,07

Топологические особенности электронной структуры и фазовый магнитный переход в киральном ферромагнетике FeGe

© А.А. Повзнер, И.Д. Манько

Уральский федеральный университет,
Екатеринбург, Россия

E-mail: a.a.povzner@urfu.ru

Поступила в Редакцию 11 февраля 2026 г.
В окончательной редакции 27 апреля 2026 г.
Принята к публикации 27 апреля 2026 г.

Исследуется роль топологических особенностей электронной структуры при фазовом магнитном переходе в киральном ферромагнетике FeGe, с рекордным среди соединений группы B20 значением температуры Кюри–Нееля (T_C). Показано, что высокие значения T_C связаны с аномальной малостью параметра взаимодействия флуктуационных мод в функционале Гинзбурга–Ландау, что также является причиной отсутствия в этом киральном магнетике флуктуационной фазы. При этом получено, что спиновые скирмионы возникают вблизи, но чуть ниже температуры T_C вследствие топологического электронного перехода во внешнем магнитном поле, при котором химический потенциал электронной системы попадает в энергетическую область на электронном спектре FeGe с кривизной Берри. Развитые представления о фазовом переходе в киральном ферромагнетике FeGe согласуется с экспериментальными данными по малоугловому рассеянию нейтронов и предсказывают возникновение в аномальной скирмионной фазе топологического эффекта Холла.

Ключевые слова: фазовый переход, межмодовое взаимодействие, кривизна Берри, киральность, электронный спектр, топологические особенности.

DOI: 10.61011/FTT.2026.04.63316.9090

1. Введение

Соединения переходных металлов с нецентросимметричной кубической кристаллической структурой типа B20 образуют группу киральных зонных ферромагнетиков MnSi, $Fe_{1-x}Co_xSi$ и др. [1–4], при фазовом магнитном переходе в которых наблюдаются спиновые скирмионы. При этом важным обстоятельством, которое сдерживает непосредственное применение этих материалов в спинтронике, являются сравнительно малые (порядка десятков Кельвин) значения температур, при которых во внешних магнитных полях формируются скирмионные решетки.

Одним из исключений является киральный ферромагнетик FeGe, в котором скирмионы возникают чуть ниже $T_C = 279\,\mathrm{K}$ [5].

Причиной кирального ферромагнетизма FeGe, как и ряда других ферромагнетиков с нецентросимметричной кристаллической структурой B20 является взаимодействие Дзялошинского–Мория (ДМ), обусловленное спин-орбитальной связью при отсутствии инверсной кристаллической симметрии.

В работе [6] на примере MnSi и FeGe было впервые показано, что конкуренция изотропного обменного взаимодействия и антисимметричного обменного ДМ взаимодействия, возникающая в данных соединениях, приводит к формированию спиновых спиралей

$$M^{(x)} = M_S \cos(\mathbf{q}_0\mathbf{r}_v), \quad M^{(y)} = -M_S \sin(\mathbf{q}_0\mathbf{r}_v), \qquad (1)$$

где M_S — локальная намагниченность ферромагнитной профазы; $\mathbf{r}_v$ — радиус-вектор узла кристаллической решетки с индексом v; $\mathbf{q}_0$ — волновой вектор, перпендикулярный плоскостям спиралей, модуль которого пропорционален соотношению параметров ДМ и обменного взаимодействий d/U и связан с периодом спиновой спирали $\lambda = 2\pi/|q_0|$, составляющим для FeGe — 700 Å [7]. При включении внешнего магнитного поля волновые вектора отклоняются в направлении, перпендикулярном плоскости спирали (1). Образуется спиновый конус.

Согласно развитой модели геликоидального ферромагнетизма [8] и в соответствие с экспериментом [5], при превышении внешним магнитным полем критической величины h_C происходит „схлопывание“ конуса и возникает индуцированное ферромагнитное состояние (рис. 1).

Прямое подтверждение указанных модельных представлений дают эксперименты по малоугловому рассеянию нейтронов (МУРН) [9–11], методика проведения которых основана на взаимодействии поляризованных нейтронов со спиновыми конфигурациями. Это приводит к появлению в параметре сечения рассеяния нейтронов поляризационно-зависящего вклада P, выражаемого в разности интенсивности нейтронного рассеяния параллельно и антипараллельно вектору поляризационного магнитного поля $\mathbf{P}$. Согласно МУРН ниже температуры фазового магнитного перехода T_C в FeGe как и других киральных ферромагнетиках действительно наблюдаются спиновые спирали с правой или левой киральностью.

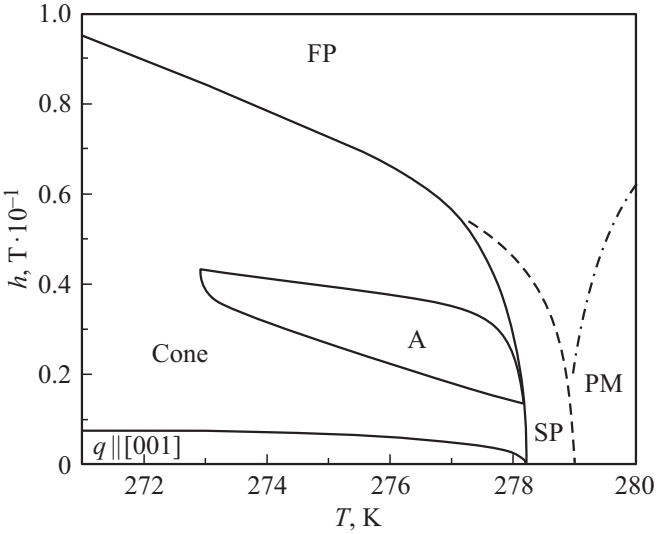

Рис. 1. Схематическое изображение фазовой диаграммы FeGe, построенное на основании экспериментальных данных работ вблизи температуры фазового перехода [5,9–11,14,15]. FP — спин-поляризованная область; A — скирмионная фаза; $q \parallel [001]$ — фаза плоской геликоидальной спирали; Cone — коническая фаза; SP — флуктуационная фаза [14,15]; PM — область парамагнетизма.

Следует отметить, что в случае MnSi выше температуры T_C были зафиксированы флуктуации спиновых спиралей, приводящие к диффузному рассеянию поляризованных нейтронов [8]. Наличие флуктуационной фазы в MnSi обсуждалось в работах [2,8,12,13], как следствие размытого по температуре фазового перехода, при котором формируются „обрывки“ спиновых спиралей на флуктуирующих по направлению волновых векторах.

В работах [14,15] было дано указание на существование в FeGe флуктуационной фазы, наблюдаемой в виде характерного плеча на температурно-полевой зависимости теплоемкости Cp (Область SP на рис. 1). Однако на экспериментах по малоугловому рассеянию нейтронов в FeGe флуктуационная фаза не была обнаружена [9–11].

Вблизи и ниже T_C на картах рассеяния как FeGe, так и других киральных ферромагнетиков фиксируются следы аномальной A-фазы (топологических скирмионных состояний) [10,11], которые характеризуются группой брэгговских рефлексов, лежащих на трех волновых векторах и направленных в плоскости под углом 120 градусов друг к другу. Связь механизма формирования A-фазы с особенностями фазового перехода также окончательно не установлена.

В настоящей работе показывается, что особенности фазового магнитного перехода в FeGe обусловлены особенностями тонкой структуры его плотности электронных состояний вблизи уровня Ферми, приводящими во внешнем магнитном поле к сдвигу химического потенциала в энергетическую область электронного спектра с кривизной Берри (топологический электронный переход).

2. Модель фазового перехода в киральных ферромагнетиках

Для исследования магнитных свойств FeGe вблизи температуры фазового перехода воспользуемся анализом полученных ранее в работах уравнений магнитного состояния, на примере кирального ферромагнетизма в MnSi [13] и $Co_{1+x}Si_{1-x}$ [4].

Опишем систему сильно коррелированных d-электронов FeGe, используя модель Хаббарда [16]:

$$H = H_0 + H_U + H_{\mathrm{DM}} + H_h, \tag{2}$$

здесь $H_0 = \sum_{k,\sigma} \varepsilon_k a^+_{k,\sigma} a_{k,\sigma}$ — слагаемое, связанное с зонным движением d-электронов с энергией ε_k, определяемой зонными расчетами (DFT); $H_U = U \sum_v (n_v^2/4 - (\mathbf{S}_v^z)^2)$ (U — константа межэлектронного взаимодействия, $\mathbf{S}_v, n_v$ — операторы спиновой и зарядовой плотности на узле кристаллической решетки v); $H_{\mathrm{DM}} = -\sum_{v,v'} \mathbf{d}_{v,v'} \lfloor \mathbf{S}_v \times \mathbf{S}_{v'} \rfloor$ — гамильтониан взаимодействия Дзялошинского–Мория (ДМ-взаимодействие) ($\mathbf{d}_{v,v'}$ — вектор взаимодействия Дзялошинского–Мория); $H_{\mathrm{h}} = \sum_v \mathbf{S}_v \mathbf{h}_v$ — гамильтониан зеемановского взаимодействия, $\mathbf{h}_v$ — вектор магнитного поля на узле кристаллической решетки.

В следствии того, что H_{DM} мало по отношению к межэлектронному взаимодействию, введем замену H_{DM} — среднее поле Дзялошинского на узле v:

$$\mathbf{h}_v^{(\mathrm{D})} = \sum_{v'} \lfloor \mathbf{d}_{v,v'} \times \mathbf{S}_{v'} \rfloor. \tag{3}$$

Статистическую сумму рассматриваемой системы коллективизированных электронов запишем в мацубаровском представлении [16]:

$$Z = SpT_\tau \exp\Big(-\int_0^\beta H(\tau) d\tau\Big), \tag{4}$$

где $\beta = 1/T$, T — температура в энергетических единицах, T_τ — оператор упорядочения по мацубаровскому времени τ, $H(\tau) = e^{H_0\tau} H e^{-H_0\tau}$.

Далее воспользуемся преобразованием Стратоновича–Хаббарда [16]:

$$\exp(G^2) = \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \exp(-\pi\xi^2 - 2\sqrt{\pi}\xi G), \tag{5}$$

где $\xi = \xi, \eta$; $G = \mathbf{S}_v, n_v$.

Сводя учет хаббардовских корреляций d-электронов к картине их движения во флуктуирующих обменных (ξ)

и зарядовых (η) полях вблизи температуры фазового перехода T_C для термодинамического потенциала $\Omega = -T\ln Z$ имеем:

$$\Omega = -T\ln\int\limits_{-\infty}^{\infty}(d\xi, d\eta)\exp\Big(-\sum_q\big((1-X_q)|\eta_q|^2 + (1+X_q)|\xi_q - (UT)^{-1/2}\mathbf{h}_q|^2\big) - \Phi(\boldsymbol{\xi},\eta)\Big), \quad (6)$$

где $X_q = U(\chi_0^{(0)} - \chi_q^{(0)})$ — поправка, необходимая для учета пространственно-временной неоднородности, определяется функцией Линдхарда (см. (15) ниже); $(d\boldsymbol{\xi}, d\eta) = d\boldsymbol{\xi}_0, d\eta_0\Big[\prod_{q\neq 0,j} d\boldsymbol{\xi}_q^{(j)}, d\eta_q^{(j)}\Big]$; $d\eta_q^{(j)}, d\boldsymbol{\xi}_q^{(j)}$ — реальная ($j=1$) и мнимая ($j=2$) части Фурье-образов зарядового поля $\eta_v(\tau)$ и вектора обменного поля $\boldsymbol{\xi}_v(\tau)$; $q = (\mathbf{q}, \omega_{2n})$; $\mathbf{q}$ — квазиимпульс; ω_{2n} — мацубаровская Бозе-частота; $\Phi(\boldsymbol{\xi},\eta)$ — функционал свободной энергии d-электронов, движущихся во флуктуирующих обменных и зарядовых полях [13]:

$$\Phi(\boldsymbol{\xi},\eta) = \int\limits_0^{\beta}\sum_{v,\alpha(=\pm1)}\int g_0(\varepsilon) \times \ln\Big(1+\exp\big(T^{-1}(\mu-\varepsilon+\alpha(UT)^{1/2}|\boldsymbol{\xi}_v(\tau)| + i(UT)^{1/2}\tilde{\eta}_v(\tau))\big)\Big), \quad (7)$$

здесь $g_0(\varepsilon)$ — DOS d-электронов от энергии ε.

Вблизи температуры фазового перехода T_C можно воспользоваться разложением Гинзбурга–Ландау для учета взаимодействия спиновых и зарядовых флуктуационных мод и привести $\Phi(\xi,\eta)$, в соответствии с данными работы [17], к виду:

$$\Phi(\xi,\eta) = \sum_q\Big[(1+U\chi_q^{(0)})\eta_q^2 + D_q^{(0)^{-1}}(\xi_q - 2(UT)^{-1/2}\mathbf{h_q})^2\Big] + (4!)^{-1}\sum_q\delta_{\Sigma_{i=1}^4 q_{i,0}} \times \kappa(\mu)\Big(\xi_{q1}\xi_{q2}\xi_{q3}\xi_{q4} - \frac{3}{2}\xi_{q1}\xi_{q2}\eta_{q3}\xi_{q4} + \eta_{q1}\eta_{q2}\eta_{q3}\eta_{q4}\Big). \quad (8)$$

Параметр межмодового взаимодействия (параметр мода-мода) $\kappa(\mu)$ из выражения (8) определяется температурной и полевой зависимостью химического потенциала $\mu = \mu(h,T)$

$$\kappa(\mu) = U^3\big(g^{(2)}(\mu) - (g^{(1)}(\mu))^2/g(\mu)\big), \quad (9)$$

$g^{(n)}(\mu)$ — n-я производная DOS d-электронов по энергии ε при $\varepsilon = \mu$. $D_q^{(0)} = (1-U\chi_q^{(0)})^{-1}$ — фактор обменного усиления; $\chi_q^{(0)}$ — функция Линдхарда; $\mathbf{h_q} = (\mathbf{h} + \mathbf{h_q}^{(D)})$, $\mathbf{h}$ — внешнее магнитное поле; $\mathbf{h}_q^{(D)} = -id\sum_{\mathbf{q}}\langle\mathbf{S_q}\rangle\times\mathbf{q}$.

При оценках функциональных интегралов в записи статистической суммы Z (6) воспользуемся процедурой метода перевала по реальной и мнимой частям зарядовых η_q и векторов статических обменных $\xi_q^{(\gamma)}$ полей (γ — индекс координатных осей), а также по модулю динамических ($\xi_q^{(\gamma)}$ с $\omega_{2n}\neq 0$) обменных полей $r_q^{(\gamma)} = |\xi_q^{(\gamma)}|$.

Учитывая связь значений обменных полей в перевальных точках с локальными намагниченностями через соотношение:

$$M_{\mathbf{q}}^{(\gamma)} = (U^{-1})\xi_{\mathbf{q}}^{(\gamma)} - \mathbf{h}_{\mathbf{q}}^{(\gamma)},$$

получаем уравнения магнитного состояния в виде:

$$M_0^{(z)}\Big(D^{-1} + 2\kappa\sum_q\mathbf{M}_q^2\Big) + 2\kappa\sum_{q^{(1)},q^{(2)},q^{(3)}}M_{q^{(2)}}^{(z)}(\mathbf{M}_{q^{(2)}}\mathbf{M}_{q^{(3)}})\delta_{\Sigma_{n=1}^3 q^{(1)}=0} = h/U, \quad (11)$$

$$M_q^{(\gamma)}\Big(D^{-1} + 2\kappa M_0^{(z)} + \kappa\sum_{q^{(n)}\neq 0}(\mathbf{M}_q^{(1)})^2 + A\mathbf{q}^2\Big) + \kappa\sum_{q^{(1)},q^{(2)},q^{(3)}\neq 0}\mathbf{M}_{q^{(3)}}^{(\gamma)}(\mathbf{M}_{q^{(3)}}\mathbf{M}_{q^{(3)}})(1-\delta_{q^{(3)},q})\delta_{\Sigma_{j=1}^3 q^{(j)},q} = h_{q,\gamma}^{(D)}/U. \quad (12)$$

Здесь $D^{-1} = (1-U\chi_0^{(0)})$ — фактор обменного усиления; $\chi_0^{(0)}$ — множитель, следующий из аппроксимации функции Линдхарда (см. ниже).

Учитывая условия возникновений перевальных точек для зарядовых полей (с мнимой и действительной частью), входящих в функционал (8), получаем также требование электронейтральности для суммарной концентрации $s(p)$- и d-электронов, необходимое для определения химического потенциала μ электронной системы

$$N_0 = 2\int d\varepsilon(g_{s,p}(\varepsilon) + g(\varepsilon))f(\varepsilon-\mu) - 2U^2 g^{(1)}(M_S + \langle m^2\rangle - \langle\eta^2\rangle/4). \quad (13)$$

Здесь N_0 — суммарная концентрация s-, p- и d-электронов; $M_S = \big(\sum_q(\mathbf{M}_q)^2\big)^{1/2}$;

$$\langle m^2\rangle = U^{-1}\Big(\sum_{\mathbf{q}}\int\limits_0^{\infty}d\omega(1/2 + f_B(\omega)) \times \mathrm{Im}\Big[(D_{\mathbf{q},\omega}^{(0)})^{-1} + \kappa(M_0^2 + \langle M_S\rangle - \langle\delta\eta^2/4\rangle + \langle m^2\rangle)\Big]^{-1}\Big)$$

— средний квадрат амплитуды тепловых флуктуаций, определяемый из флуктуационно-диссипативной теоремы,

$$\langle\delta\eta^2/4\rangle = N_0^{-1}\sum_q\big\langle(n_q - \langle n_q\rangle)^2\big\rangle = \langle M_S\rangle - \kappa^{-1}\Big[2 - D_0^{(0)^{-1}} - \kappa(M_0^2 + 5\langle m^2\rangle/3\Big]$$

— пространственные флуктуации спиновой плотности.

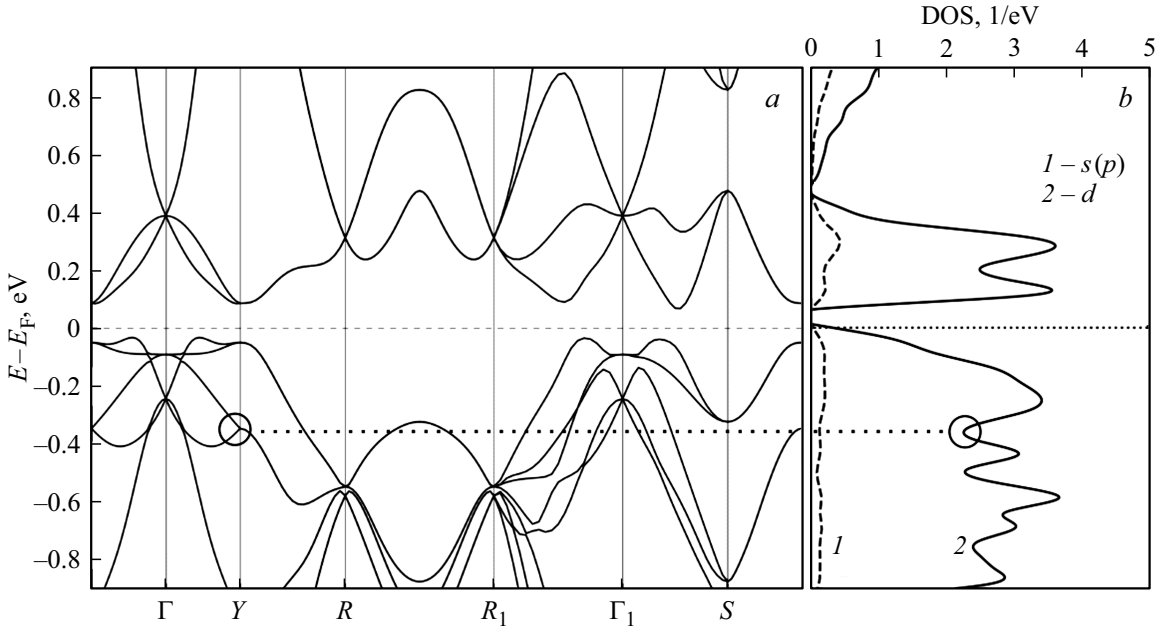

Рис. 2. *a* — электронный энергетический спектр FeGe. *b* — кривая плотности электронных состояний FeGe. Кружком отмечена точка с пересечением линий спектра, соответствующая ближайшему локальному минимуму на кривой плотности электронных состояний (пояснение см. ниже).

При этом функционал (8), записанный с учетом разложений Гинзбурга–Ландау, указывает на два возможных сценария магнитных фазовых переходов в киральных ферромагнетиках, характеризуемых знаками D и κ.

В первом случае фазовый магнитный переход сопровождается сменой знака как фактора обменного усиления, так и параметра мода-мода κ (например, в MnSi [13]).

Во втором-параметр мода-мода при фазовом переходе не меняет знак. При этом уравнения магнитного состояния (11), (12) вместе с условием электронейтральности дают равенство $\mathbf{M_q} = 0$ выше температуры T_C, поэтому флуктуации спиновых спиралей при таком фазовом переходе возникать не будут [13].

Для выяснения природы магнитного фазового перехода в FeGe нужно сопоставить развитую модель с результатами первопринципных расчетов его электронной структуры.

3. Электронная структура FeGe

В работе [17] было указано на связь участков электронного спектра, содержащих наложение, сближение или пересечение линий электронного спектра, вызывающее возникновение кривизны Берри (наличие вейлевских и дираковских точек на электронном спектре, соответственно). При этом было установлено, что подобные топологические особенности приводят при магнитном фазовом переходе к скирмионному эффекту Холла, связанному с A-фазой, содержащей спиновые скирмионы. При этом расчеты плотности электронных состояний DOS в работе [17] не проводились.

В настоящей работе проводится, совместно с расчетами плотности электронных состояний, DFT-моделирование топологических особенностей энергетического электронного спектра.

Первопринципные расчеты были выполнены в исходном ферромагнитном состоянии FeGe в программном пакете Quantum Espresso, принцип работы которого указан в работе [18]. При этом обменно-корреляционный функционал был выбран в форме GGA [19].

При проведении первопринципного моделирования были использованы экспериментальные данные о кристаллической структуре FeGe: пространственная группа симметрии $P2_13$, с параметром решетки 4.698 Å [9].

Используемая при моделировании энергия обрезания плоских волн для электронных волновых функций и зарядовой плотности/потенциала составляла 100 и 400 Ry соответственно, а сетка в k-пространстве — $8 \times 8 \times 8$. В результате были получены электронный спектр и кривая плотности электронных состояний, приведенные рис. 2.

Из построенного для FeGe электронного спектра видим, что он содержит области со сближением и пересечением линий электронного спектра.

Рассчитанный магнитный момент составляет $1.6\,\mu$B, что согласуется с величиной магнитного момента, полученной из экспериментальных данных [20].

Анализируя с помощью численного анализа (см. п. 4) кривую плотности электронных состояний $g(\varepsilon)$ с помощью (13) можно получить, что химический потенциал системы коллективизированных электронов FeGe локализован в точке $\varepsilon = 0.37$ eV одного из ближайших к E_F локальных минимумов $g(\varepsilon)$.

Полином, построенный для определения тонкой структуры кривой плотности электронных состояний от уровня энергии ε вблизи локализации химического потенциала (в области $\varepsilon = -(0.39-0.28)\,\mathrm{eV}$) μ был получен в виде:

$$g(\varepsilon) = 274.6 - 4776.7\varepsilon + 32939.8\varepsilon^2 + 110955.5\varepsilon^3 + 182314.6\varepsilon^4 + 116955.5\varepsilon^5. \quad (14)$$

В отличие от тонкой структуры плотности d-состояний ряда слабых зонных ферромагнетиков группы B20 (MnSi, $Fe_{1-x}Co_xSi$) [4,13], FeGe (14) не дает указаний на возможность смены знака $\kappa(\mu)$ при магнитном фазовом переходе, а также имеет вблизи нижней границы щели глубокий локальный минимум.

Сопоставляя $g(\varepsilon)$ с электронным спектром FeGe (рис. 2, a) вблизи энергетического уровня локализации химического потенциала $\mu_0 = -0.37\,\mathrm{eV}$ отмечаем, что на уровне $\varepsilon = -0.37 \pm 0.012\,\mathrm{eV}$ есть точка, содержащая топологические особенности электронного спектра FeGe, (расщепление линии электронного спектра). Область $\varepsilon = -0.37 \pm 0.012\,\mathrm{eV}$ отмечена кружком на рис. 2, a.

4. Численный анализ решений уравнений магнитного состояния

Рассмотрим решения уравнений магнитного состояния (11), (12) вблизи температуры фазового перехода численно, с учетом параметров электронной структуры FeGe. При этом воспользуемся температурной зависимостью химического потенциала, которая следует из решения уравнения магнитного состояния и условия электронейтральности (13).

При расчетах нами была использована аппроксимация функции Линдхарда

$$\chi_q^{(0)} = \chi_0^{(0)}\left(1 + A\mathbf{q}^2 + iB\left(\frac{\omega}{|\mathbf{q}|}\right)\right), \quad (15)$$

с выбранными параметрами $A = 0.07$, $B = \pi/2.45$. Параметр обменного взаимодействия U был выбран равным 0.5 eV.

Принимая во внимание соотношение периодов геликоидальной спирали FeGe (700 Å) и MnSi (180 Å) [8] следует отметить, что даже при выбранном значении $U = 0.5\,\mathrm{eV}$ (почти вдвое меньше, чем для MnSi [13]). Параметр ДМ-взаимодействия d составляет 0.3 meV, что позволяет также, как и в работе [13] пренебречь его вкладом при последующем численном анализе магнитных свойств FeGe.

Нетрудно показать, что в области дальнего порядка в рассматриваемой модели кирального зонного ферромагнетика в нулевом магнитном поле возникают плоские спиновые спирали (1). Причем, как это и следует из функционала Гинзбурга–Ландау, $D^{-1} < 0$, $\kappa > 0$.

На рис. 3 приведены результаты расчета радиуса спиновых корреляций и магнитной восприимчивости FeGe в модели электронной структуры, вытекающей из первопринципных зонных расчетов. При этом результат расчета радиуса спиновых корреляций $R_c = a(AU\chi)^{1/2}$ (где a — параметр решетки) (сплошная линия на рис. 3, a) и магнитной восприимчивости $\chi = 2U^{-1}\left(1 - (D^{-1} + 2\kappa M_0^2)^{-1}\right)$ (сплошная линия на рис. 3, b) неплохо согласуется с результатами нейтронного эксперимента [11] и эксперимента по измерению магнитной восприимчивости [5]. Величина радиуса спиновых корреляций ниже T_C примерно совпадает с магнитным периодом спирали λ, а выше области дальнего порядка резко спадает к нулю.

При этом из приведенных на рис. 3 результатов видим неплохое согласие расчетного значения температуры фазового перехода (температуры Кюри–Нееля) с опытными данными [5,9–11].

Численный анализ $\kappa(\mu)$ по формуле (9) на основании полинома кривой плотности электронных состояний FeGe (14) указывает на то, что при фазовом переходе в FeGe параметр κ не меняет знак (в отличие от MnSi [13] (см. рис. 4)), и поэтому флуктуационная фаза не возникает. Также видно, что высокие температуры T_C FeGe связаны с меньшими значениями параметра мода-мода в функционале Гинзбурга–Ландау (8) по сравнению с MnSi. Согласно нашим оценкам, соотношение параметра межмодового взаимодействия (κ) и фактора обменного усиления (D) FeGe оказывается почти на порядок больше в упорядоченной фазе, чем в MnSi [13]:

$$1/(D_\mathrm{FeGe}\kappa_\mathrm{FeGe}) \cong 9.5/(D_\mathrm{MnSi}\kappa_\mathrm{MnSi}).$$

5. Индуцированный полем переход в скирмионную фазу

Согласно решению уравнений магнитного состояния (11) и (12) во внешнем поле, перпендикулярном плоским спиралям, возникают спиновые конусы. При этом в сильных полях происходит „схлопывание“ спиновых конусов, приводящее к формированию индуцированной полем ферромагнитной фазе.

Особый интерес при этом представляет анализ условий возникновения спиновых конусов в области температур вблизи и чуть ниже температуры Кюри, в которой, казалось бы, могла возникнуть термодинамическая неустойчивость (смена знака параметра κ), приводящая к флуктуациям спиновых спиралей.

Однако в рассматриваемой электронной структуре FeGe флуктуаций спиновых спиралей не возникает. Причем анализ условия электронейтральности (13) указывает на наличие индуцированного температурой сдвига химического потенциала в энергетическую область с наличием кривизны Берри на электронном спектре. В результате осуществляется топологическая защита спиральных структур, приводящая к возникновению промежуточной A-фазы между состояниями со спиновыми конусами и с индуцированным ферромагнетизмом.

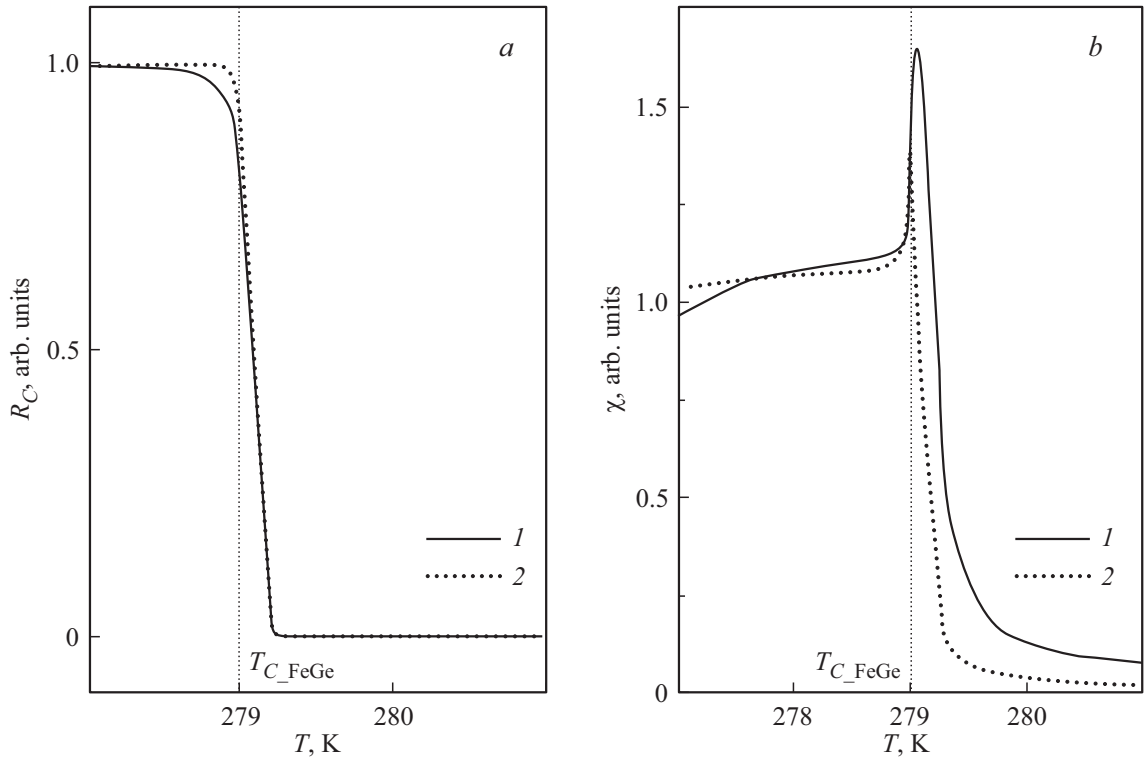

Рис. 3. *a* — температурная зависимость радиуса спиновых корреляций FeGe относительно периода геликоидальной спирали $\lambda \approx 700$ Å. Пунктирной линией отмечена температура фазового перехода: *1* — данные, полученные из расчетов, выполненных в этой работе; *2* — экспериментальные данные [10]. *b* — температурная зависимость магнитной восприимчивости FeGe в относительных единицах. Пунктирной линией отмечена температура фазового перехода: *1* — данные, полученные из расчетов в этой работе; *2* — экспериментальные данные [5].

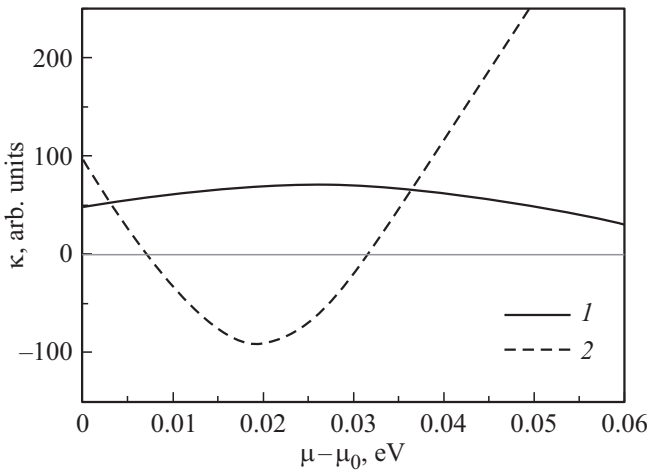

Рис. 4. Зависимости безразмерных величин $\kappa(\mu)$ (9) (*1* — FeGe, *2* — MnSi). Для FeGe $\mu_0 = -0.37$ eV; для MnSi $\mu_0 = -0.02$ eV (относительно E_F данных соединений, соответственно).

ДМ-взаимодействие формирует на узлах v кристаллической решетки в пределах областей радиусом $R_C = \lambda$ (с $|\mathbf{q}_0| = d/2AU$) квазипланарные спиновые спирали с локальной намагниченностью $M_S = \left(\sum_{\mathbf{q}} (\mathbf{M}_{\mathbf{q}})^2\right)^{1/2}$ и одинаковыми по модулю тремя волновыми векторами $\mathbf{q}_{0,i}$, повернутыми относительно друг друга на угол 120°,

$$M^{(x)} \cong M_S \cos(\mathbf{q}_{0,i}\mathbf{r}_v + \varphi),$$
$$M^{(y)} \cong M_S \sin(\mathbf{q}_{0,i}\mathbf{r}_v + \varphi), \;\; M^{(z)} \ll M_S, \qquad (16)$$

что соответствует картине нейтронного рассеяния, наблюдаемой при МУРН [10,11].

Каждая спиновая спираль (16) характеризуется фиксированной ненулевой фазой φ. Данная фаза является разностью электронных фаз Берри, возникающих при обходе контура узлов в объеме кристаллической решетки.

В результате, обусловленная наличием топологического вырождения в спектре FeGe, кривизна Берри действует на его спиновую конфигурацию как дополнительное векторное поле.

Последнее позволяет описать образование группы брэгговских рефлексов, соответствующих скирмионной решетке с гексагональной симметрией.

Из-за появления дополнительной фазы при обходе узлов спиновых корреляций с суперпозицией трех спиральных мод (16) в скирмионной решетке формируется дополнительный потенциал — спиновая киральность, характеризуемая киральным зарядом

$$\chi_C = \sum_{v_1, v_2, v_3} \left\langle \mathbf{M}_{v_1} [\mathbf{M}_{v_2} \times \mathbf{M}_{v_3}] \right\rangle. \qquad (17)$$

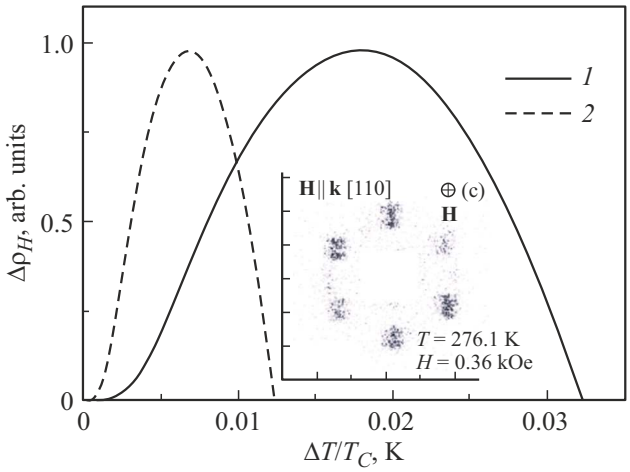

Рис. 5. Теоретическая кривая температурной зависимости топологического эффекта Холла $\Delta\rho_{xy}$ (18) (*1* — FeGe ($T_C = 279$ K), *2* — MnSi ($T_C = 29.1$ K)). На вставке показана карта нейтронного рассеяния в области A-фазы FeGe, содержащая группы брэгговских рефлексов [10,11].

В результате анализа температурной зависимости χ_C (рис. 5) было получено, что данная спиновая киральность возникает в температурном интервале, соответствующем области A-фазы.

Особенность возникновения χ_C эквивалентна включению магнитного поля **b**, приводящего к холловскому отклонению [4]:

$$\mathbf{b} = \sum_{v_1,v_2,v_3} \langle \mathbf{M}_{v_1}[\mathbf{M}_{v_2} \times \mathbf{M}_{v_3}]\mathbf{n}_{v_1,v_2,v_3}\rangle,$$

где $\mathbf{n}_{v_1,v_2,v_3}$ — единичный вектор. В таком случае, скирмионный эффект Холла [11] можно описать через сопротивление, содержащее киральный вклад:

$$\Delta\rho_{xy} = R_0\chi_C, \tag{18}$$

здесь R_0 — константа постоянной нормального эффекта Холла.

В таком случае температурная зависимость топологического (скирмионного) эффекта Холла $\Delta\rho_{xy}$ (в диапазоне температур 271–279 K) для кристалла FeGe близка по величине температурного диапазона к температурному периоду A-фазы, наблюдаемой на эксперименте МУРН группой брэгговских рефлексов (274–278.7 K) [10,11] (рис. 5).

6. Заключение

Таким образом установлено, что электронная структура FeGe обладает топологическими особенностями, приводящими к отличной от других киральных ферромагнетиков семейства B20 картине рассеяния нейтронов.

При этом, анализ роли топологических особенностей FeGe показал:

1. Смена знака межмодового взаимодействия при фазовом переходе в FeGe, в отличие от MnSi, не имеет места, и флуктуационная фаза не возникает. Отсутствие флуктуационной фазы связано с положительным межмодовым взаимодействием как ниже, так и выше T_C FeGe.

2. Проведенный численный анализ зависящих от плотности электронных состояний параметров межмодового взаимодействия (κ) и фактора обменного усиления (D) дает соотношение, объясняющее различие температур фазового перехода в FeGe и MnSi почти на порядок.

3. На интервале полей, близких по значению к критическому полю „схлопывания“ спиновых конусов, в FeGe за счет топологического электронного перехода в энергетическую область на электронном спектре с кривизной Берри возникает промежуточная фаза спиновых скирмионов, представляющих суперпозицию трех геликоидальных мод, позволяющих описать положение брэгговских рефлексов в скирмионной области на картах рассеяния нейтронов [10,11].

4. Возникновение этой суперпозиции связано с топологическим электронным переходом, приводящим к сдвигу химического потенциала в область с кривизной Берри. Величина кирального заряда χ_C определяется тройными спиновыми корреляторами, которые должны приводить к скирмионному эффекту Холла $\Delta\rho_{xy}$ в монокристаллах FeGe.

Дальнейшее исследование топологических спиновых фаз в киральных ферромагнетиках семейства B20 с высокими температурами фазового перехода (FeGe, $Co_{1+x}Si_{1-x}$, MnGe) представляет интерес для разработки новых спинтронных материалов.

Финансирование работы

Результаты получены в рамках задания Министерства науки и высшего образования, контракт № FEUZ-2026-0013.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

[1] A. Bauer, C. Pfleiderer. Springer Ser. Mater. Sci. **228**, 1 (2016). DOI: 10.1007/978-3-319-25301-51
[2] С.М. Стишов, А.Е. Петрова. УФН **181**, 1157 (2011). DOI: 10.3367/UFNr.0181.201111b.1157
[3] V. Pomjakushin, I. Plokhikh, J.S. White, Y. Fujishiro, N. Kanazawa, Y. Tokura, E. Pomjakushina. Phys. Rev. B **107**, 024410 (2023). DOI: 10.48550/arXiv.2209.15468
[4] А.А. Повзнер, А.Г. Волков, А.Р. Кузнецов, Ю.Н. Горностырев, Э.И. Лопатко. Письма в ЭЧАЯ **22**, *3*, 383 (2025). DOI: 10.1134/S1547477125700025
[5] J.D. Bocarsly, R.F. Need, R. Seshadri, S.D. Wilson. Phys. Rev. B **97**, 100404(R) (2018). DOI: 10.1103/PhysRevB.97.100404
[6] P. Bak, M.H. Jensen. Journal **13**, *31*, L881 (1980). DOI: 10.1088/0022-3719/13/31/002
[7] B. Lebech, J. Bernhard, T. Freltoft. J. Phys. **1**, *35*, 6105 (1989). DOI: 10.1088/0953-8984/1/35/010

[8] M. Janoschek, M. Garst, A. Bauer, P. Krautscheid, R. Georgii, P. Böni, C. Pfleiderer. Phys. Rev. B **87**, 134407 (2013). DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevB.87.134407
[9] S.V. Grigoriev, N.M. Potapova, S.A. Siegfried, V.A. Dyadkin, E.V. Moskvin, V. Dmitriev, D. Menzel, D. Dewhurst, D. Chernyshov, R.A. Sadykov, L.N. Fomicheva, A.V. Tsvyashchenko. Phys. Rev. Lett. **110**, 207201 (2013). DOI: 10.1103/PhysRevLett.110.207201
[10] S.A. Siegfried, A.S. Sukhanov, E.V. Altynbaev, D. Honnecker, A. Heinemann, A.V. Tsvyashchenko, S.V. Grigoriev. Phys. Rev. B **95**, 134415 (2017). DOI: 10.1103/PhysRevB.95.134415
[11] E. Moskvin, S. Grigoriev, V. Dyadkin, H. Eckerlebe, M. Baenitz, M. Schmidt, H. Wilhelm. Phys. Rev. Lett. **110**, 077207 (2013). DOI: 10.1103/PhysRevLett.110.077207
[12] S.V. Grigoriev, S.V. Maleyev, E.V. Moskvin, V.A. Dyadkin, P. Fouquet, H. Eckerlebe. Phys. Rev. B **81**, 144413 (2010). DOI: 10.1103/PhysRevB.81.144413
[13] А.А. Повзнер, Т.А. Ноговицына, Э.И. Лопатко. ФТТ **66**, *8*, 1312 (2024). DOI: 10.61011/FTT.2024.08.58594.73
[14] L. Cevey, H. Wilhelm, M. Schmidt, R. Lortz. Phys. Status Solidi B **250**, 650 (2013). DOI: 10.1002/pssb.201200632
[15] H. Wilhelm, M. Baenitz, M. Schmidt, C. Naylor, R. Lortz, U.K. Rößler, A.A. Leonov, A.N. Bogdanov. J. Phys. Condens. Matter **24**, 294204 (2012). DOI: 10.1088/0953-8984/24/29/294204
[16] Т. Мория. Спиновые флуктуации в магнетиках с коллективизированными электронами. Мир, М. (1988). 288 с.
[17] M.A. Wilde, M. Dodenhöft, A. Niedermazr, A. Bauer, M.M. Hirschmann, K. Alpin, A.P. Schnyder, C. Pfleiderer. Nature **594**, 374 (2021). DOI: 10.1038/s41586-021-03543-x
[18] P. Giannozzi, O. Andreussi, T. Brumme, et al. J. Phys. **29**, 465901 (2017). DOI: 10.1088/1361-648X/aa8f79
[19] J. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof. Phys. Rev. Lett. **77**, 3865 (1996). DOI: 10.1103/PhysRevLett.77.3865
[20] L. Haggstrom, T. Ericcsson, R. Wappling, E. Karlsson, K. Chandra. J. Phys. **35**, *Сб*, 603 (1974).

Редактор А.Н. Смирнов