

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 согласуются 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 $T_C = 279$ К [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

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

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 взаимодействия 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 соответствии с экспериментом [5], при превышении внешним магнитным полем критической величины h 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 поляризованного 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.

Следует отметить, что в случае MnSi выше температуры T_C были зафиксированы флуктуации спиновых

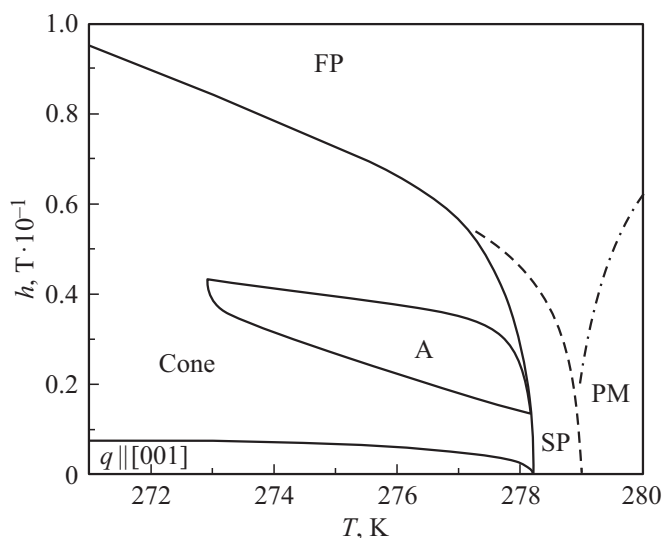


Рис. 1. Схематическое изображение фазовой диаграммы FeGe, построенное на основании экспериментальных данных работ вблизи температуры фазового перехода [5,9–11,14,15]. FP — спин-поляризованная область; A — скирмионная фаза; $q \parallel [001]$ — фаза плоской геликоидальной спирали; Cone — коническая фаза;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

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 C_p (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 $\text{Co}_{1+x}\text{Si}_{1-x}$ [4].

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

$$H = H_0 + H_U + H_{DM} + H_h, \quad (2)$$

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

$$\mathbf{h}_v^{(D)} = \sum_{v'} [\mathbf{d}_{v,v'} \times \mathbf{S}_{v'}]. \quad (3)$$

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

$$Z = Sp T_\tau \exp\left(-\int_0^\beta H(\tau) d\tau\right), \quad (4)$$

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]:

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

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:

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

где $X_q = U(\chi_0^{(0)} - \chi_q^{(0)})$ — поправка, необходимая для учета пространственно-временной неоднородности, определяется функцией Линдхарда (см. (15) ниже); $(d\xi, d\eta) = d\xi_0, d\eta_0 \left[\prod_{q \neq 0, j} d\xi_q^{(j)}, d\eta_q^{(j)} \right]$; $d\eta_q^{(j)}, d\xi_q^{(j)}$ — реальная ($j = 1$) и мнимая ($j = 2$) части Фурье-образов зарядового поля $\eta_v(\tau)$ и вектора обменного поля $\xi_v(\tau)$; $q = (\mathbf{q}, \omega_{2n})$; \mathbf{q} — квазиимпульс; ω_{2n} — мацубаровская Бозе-частота; $\Phi(\xi, \eta)$ — функционал свободной энергии d -электронов, движущихся во флуктуирующих обменных и зарядовых полях [13]:

$$\Phi(\xi, \eta) = \int_0^\beta \sum_{v, \alpha(\pm 1)} \int g_0(\varepsilon) \times \ln\left(1 + \exp(T^{-1}(\mu - \varepsilon + \alpha(UT)^{1/2}|\xi_v(\tau)| + i(UT)^{1/2}\tilde{\eta}_v(\tau)))\right), \quad (7)$$

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:

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

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

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

$g^{(n)}(\mu)$ — 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; $\mathbf{h}_q^{(D)} = -id \sum_{\mathbf{q}} \langle \mathbf{S}_{\mathbf{q}} \rangle \times \mathbf{q}$.

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:

$$\mathbf{M}_q^{(\gamma)} = (U^{-1})\xi_q^{(\gamma)} - \mathbf{h}_q^{(\gamma)},$$

получаем уравнения магнитного состояния в виде:

$$\begin{aligned} M_0^{(z)} \left(D^{-1} + 2\kappa \sum_q \mathbf{M}_q^{(z)} \right) + 2\kappa \sum_{q^{(1)}, q^{(2)}, q^{(3)}} M_{q^{(2)}}^{(z)} (\mathbf{M}_{q^{(2)}} \mathbf{M}_{q^{(3)}}) \delta_{\Sigma_{n=1}^3 q^{(n)}=0} &= h/U, \quad (11) \\ M_q^{(\gamma)} \left(D^{-1} + 2\kappa M_0^{(z)} + \kappa \sum_{q^{(n)} \neq 0} (\mathbf{M}_q^{(1)})^2 + Aq^2 \right) + \kappa \sum_{q^{(1)}, q^{(2)}, q^{(3)} \neq 0} \mathbf{M}_{q^{(3)}}^{(\gamma)} (\mathbf{M}_{q^{(3)}} \mathbf{M}_{q^{(3)}}) (1 - \delta_{q^{(3)}, q}) \delta_{\Sigma_{j=1}^3 q^{(j)}, q} &= h_{q, \gamma}^{(D)}/U. \quad (12) \end{aligned}$$

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

Учитывая условия возникновения 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

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

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

$$\langle m^2 \rangle = U^{-1} \left(\sum_{\mathbf{q}} \int_0^\infty d\omega (1/2 + f_B(\omega)) \right)$$

$$\times \text{Im} \left[(D_{\mathbf{q}, \omega}^{(0)})^{-1} + \kappa (M_0^2 + \langle M_S \rangle - \langle \delta \eta^2 / 4 \rangle + \langle m^2 \rangle) \right]^{-1}$$

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

$$\begin{aligned} \langle \delta \eta^2 / 4 \rangle &= N_0^{-1} \sum_q \langle (n_q - \langle n_q \rangle)^2 \rangle \\ &= \langle M_S \rangle - \kappa^{-1} \left[2 - D_0^{(0)-1} - \kappa (M_0^2 + 5 \langle m^2 \rangle / 3) \right] \end{aligned}$$

— пространственные флуктуации спиновой плотности.

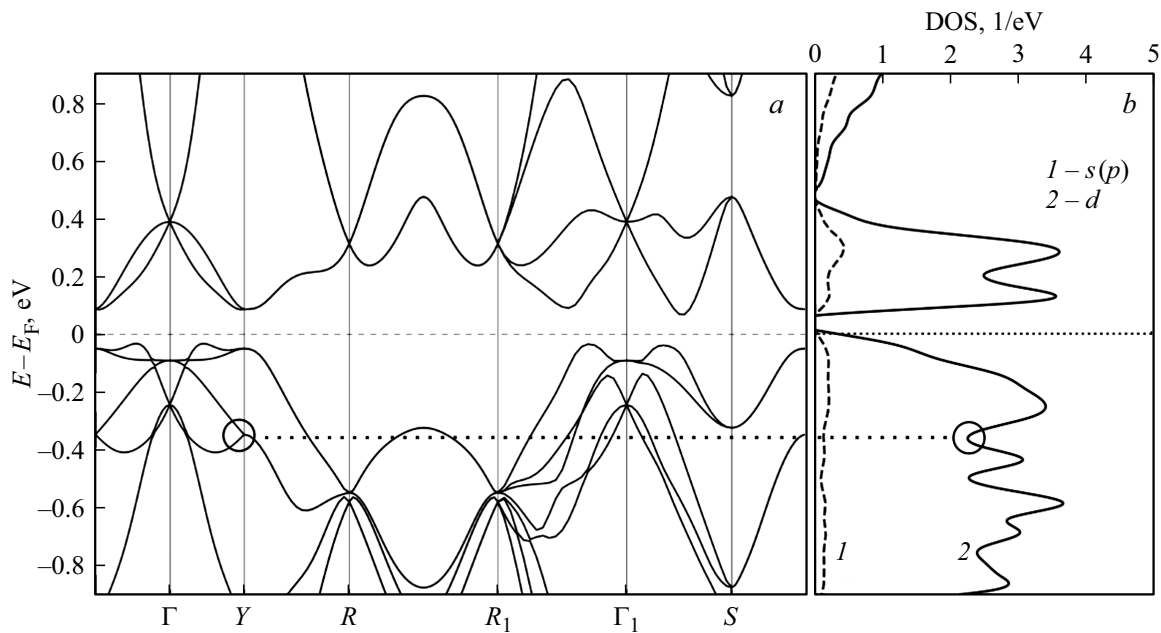


Рис. 2. *a* — электронный энергетический спектр FeGe. *b* — кривая плотности электронных состояний FeGe. Кружком отмечена точка с пересечением линий спектра, соответствующая ближайшему локальному минимуму на кривой плотности электронных состояний (пояснение см. ниже).

При этом функционал (8), записанный с учетом разложений Гинзбурга–Ландау, указывает на два возможных сценария магнитных фазовых переходов в киральных ферромагнетиках, характеризующихся 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 А-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 \AA [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 $g(\epsilon)$ с помощью (13) можно получить, что химический потенциал системы коллективизированных электронов FeGe локализован в точке $\epsilon = 0.37 \text{ eV}$ одного из ближайших к E_F локальных минимумов $g(\epsilon)$.

Полином, построенный для определения тонкой структуры кривой плотности электронных состояний от уровня энергии ε вблизи локализации химического потенциала (в области $\varepsilon = -(0.39-0.28)$ 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 $\mu_0 = -0.37$ eV отмечаем, что на уровне $\varepsilon = -0.37 \pm 0.012$ eV есть точка, содержащая топологические особенности электронного спектра FeGe, (расщепление линии электронного спектра). Область $\varepsilon = -0.37 \pm 0.012$ 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

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

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 $U = 0.5$ 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 $\chi = 2U^{-1}(1 - (D^{-1} + 2\kappa M_0^2)^{-1})$ (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]:

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

5. Индуцированный полем переход в скирмионную фазу

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

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. При этом 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 А-фазы между состояниями со спиновыми конусами и с индуцированным ферромагнетизмом.

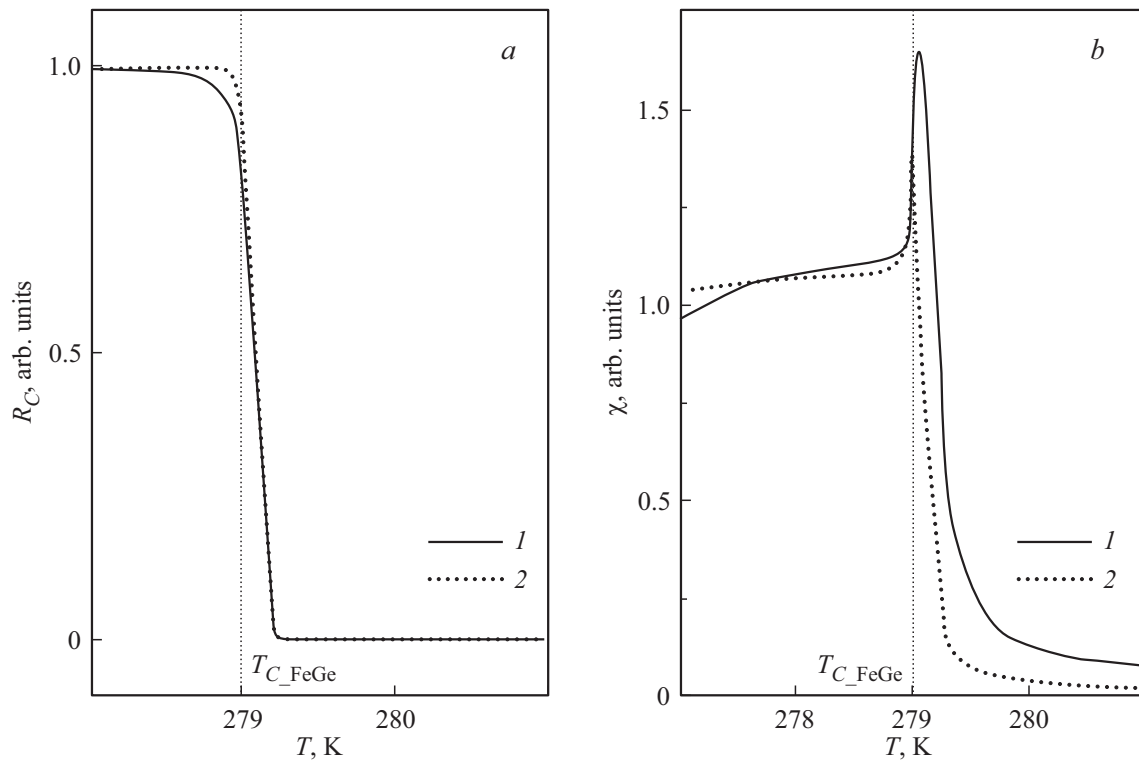


Рис. 3. *a* — температурная зависимость радиуса спиновых корреляций FeGe относительно периода геликоидальной спирали $\lambda \approx 700 \text{ \AA}$. Пунктирной линией отмечена температура фазового перехода: 1 — данные, полученные из расчетов, выполненных в этой работе; 2 — экспериментальные данные [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].

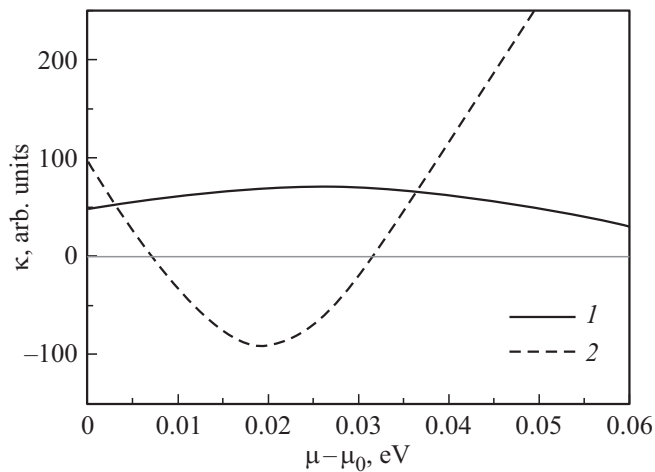


Рис. 4. Зависимости безразмерных величин $\kappa(\mu)$ (9) (1 — FeGe, 2 — MnSi). Для FeGe $\mu_0 = -0.37 \text{ eV}$; для MnSi $\mu_0 = -0.02 \text{ eV}$ (относительно E_F данных соединений, соответственно).

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 $M_S = (\sum_{\mathbf{q}} (\mathbf{M}_{\mathbf{q}})^2)^{1/2}$ и оди-

наковыми по модулю тремя волновыми векторами $\mathbf{q}_{0,i}$, повернутыми относительно друг друга на угол 120° ,

$$M^{(x)} \cong M_S \cos(\mathbf{q}_{0,i} \mathbf{r}_v + \varphi),$$

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

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

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

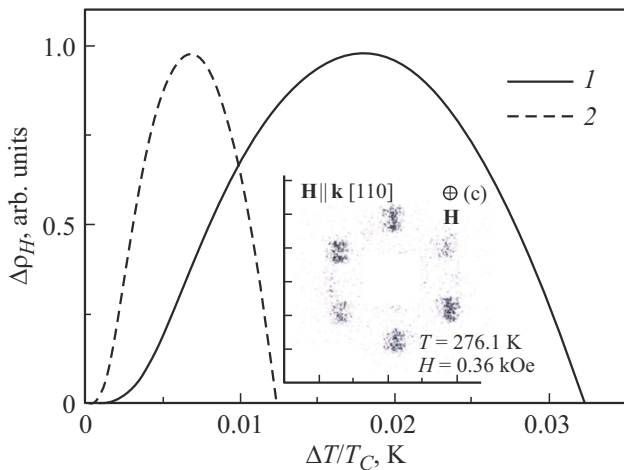


Рис. 5. Теоретическая кривая температурной зависимости топологического эффекта Холла $\Delta\rho_{xy}$ (18) (1 — FeGe ($T_C = 279$ K), 2 — MnSi ($T_C = 29.1$ K)). На вставке показана карта нейтронного рассеяния в области А-фазы FeGe, содержащая группы брэгговских рефлексов [10,11].

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

Особенность возникновения χ_C эквивалентна включению магнитного поля \mathbf{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:

$$\Delta\rho_{xy} = R_0 \chi_C, \quad (18)$$

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 А-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 В20 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 В20 с высокими температурами фазового перехода (FeGe, $\text{Co}_{1+x}\text{Si}_{1-x}$, 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. Lebeck, 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. Moskvina, 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](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.110.207201)
- [10] S.A. Siegfried, A.S. Sukhanov, E.V. Altyntayev, D. Honnecker, A. Heinemann, A.V. Tsvyashchenko, S.V. Grigoriev. *Phys. Rev. B* **95**, 134415 (2017). DOI: [10.1103/PhysRevB.95.134415](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.95.134415)
- [11] E. Moskvina, S. Grigoriev, V. Dyadkin, H. Eckerlebe, M. Baenitz, M. Schmidt, H. Wilhelm. *Phys. Rev. Lett.* **110**, 077207 (2013). DOI: [10.1103/PhysRevLett.110.077207](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.110.077207)
- [12] S.V. Grigoriev, S.V. Maleyev, E.V. Moskvina, V.A. Dyadkin, P. Fouquet, H. Eckerlebe. *Phys. Rev. B* **81**, 144413 (2010). DOI: [10.1103/PhysRevB.81.144413](https://doi.org/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](https://doi.org/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](https://doi.org/10.1002/pssb.201200632)
- [15] H. Wilhelm, M. Baenitz, M. Schmidt, C. Naylor, R. Lortz, U.K. Röbler, A.A. Leonov, A.N. Bogdanov. *J. Phys. Condens. Matter* **24**, 294204 (2012). DOI: [10.1088/0953-8984/24/29/294204](https://doi.org/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. Doderhöft, 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](https://doi.org/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](https://doi.org/10.1088/1361-648X/aa8f79)
- [19] J. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof. *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996). DOI: [10.1103/PhysRevLett.77.3865](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.3865)
- [20] L. Haggstrom, T. Ericsson, R. Wappling, E. Karlsson, K. Chandra. *J. Phys.* **35**, C6, 603 (1974).

Редактор А.Н. Смирнов