05,11

Топологические особенности электронной структуры и фазовая диаграмма кирального ферромагнетика MnSi

© А.А. Повзнер, А.Г. Волков, М.А. Черникова

Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина,
Екатеринбург, Россия

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

Поступила в Редакцию 28 августа 2023 г.
В окончательной редакции 16 октября 2023 г.
Принята к публикации 19 октября 2023 г.

Показано, что причиной возникновения наблюдаемой в геликоидальном ферромагнетике MnSi, сложной картины кирального спинового ближнего порядка является топологический электронный переход (ТЭП). ТЭП возникает в условиях возникновения термодинамической не устойчивости ферромагнетизма, когда параметр мода-мода в функционале Гинзбурга–Ландау становится отрицательным, а химический потенциал попадает в энергетическую область кривизны Берри. Получено, что топологические особенности электронной структуры ведут к возникновению фаз скирмионных решеток и флуктуаций левокиральных спиновых спиралей. В парамагнитной области возникает фаза флуктуаций лево- и правокиральных спиновых спиралей. Возникновение термодинамически устойчивой не киральной парамагнитной фазы сопровождается сдвигом химического потенциала за пределы энергетической области кривизны Берри и скачкообразным исчезновением локальной намагниченности (отложенный магнитный фазовый переход). Построенная фазовая $h-T$-диаграмма (h — напряженность магнитного поля, T — температура) согласуется с экспериментом.

Ключевые слова: фазы Берри, флуктуации, киральные спиновые спирали, скирмионы.

DOI: 10.61011/FTT.2023.12.56769.189

1. Введение

Одним из наиболее изученных прототипов спинтронных материалов с кристаллической структурой типа B20, в которой отсутствует центр инверсии, является моносилицид марганца MnSi [1–3]. Ферромагнитное состояние спиновой подсистемы MnSi является киральным поскольку в нем наряду с обменным взаимодействием возникает антисимметричный обмен Дзялошинского–Мория (ДМ). В работе Янсена–Бака [4] было показано, что конкуренция ДМ-взаимодействия с неоднородным обменным взаимодействием приводит к возникновению ферромагнитных длиннопериодических спиновых спиралей с волновым вектором $\mathbf{q}_0$, причем переход из геликоидальной ферромагнитной фазы в парамагнитную не является фазовым переходом второго рода. Как было показано в [5], одной и причин срыва перехода второго рода является взаимодействие спиновых флуктуаций с фононными.

С другой стороны, анализ результатов DFT-расчетов электронной структуры показывает [6,7], что в основном состоянии MnSi возникает значительное усиление нулевых спиновых флуктуаций. Температурный рост тепловых флуктуаций приводит к подавлению нулевых флуктуаций [6]. В результате имеет место смена знака параметра мода-мода, что, согласно модели Гинзбурга–Ландау [8], должно вести к термодинамической неустойчивости кирального ферромагнетизма к магнитному фазовому переходу первого рода.

Однако природа возникающего фазового перехода остается не выясненной. В частности, окончательно не выяснены причины того, почему наблюдаемый фазовый переход сопровождается возникновением топологического эффекта Холла (THE) [9]. Причем в [9,10] отмечалось, что причиной возникновения THE в MnSi являются топологические особенности электронной структуры, связанные с кривизной Берри на его поверхности Ферми.

Экспериментально установленная $h-T$-диаграмма магнитных состояний MnSi (см., например, [1]), наряду с областями геликоидальных ферромагнитных спиралей и индуцированного магнитным полем ферромагнетизма, также содержит фазы скирмионных решеток и флуктуаций спиновых спиралей. При этом ее следует дополнить учетом обнаруженной при малоугловом рассеянии поляризованных нейтронов необычной промежуточной фазы с частичной спиновой киральностью [11].

Для выяснения природы возникающих с изменением температуры и магнитного поля фазовых переходов, в частности приводящих к формированию фазы с частичной спиновой киральностью, требуется развитие спин-флуктуационного подхода к изучению кирального зонного ферромагнетизма с учетом топологических особенностей электронной структуры. В настоящей работе такой подход развивается на основе интерполяционной спин-флуктуационной теории зонного магнетизма [12]. С учетом представлений об электронной структуре MnSi, вытекающих из *ab initio* GGA-моделирования, выясняется топологическая природа фаз кирального спинового ближнего порядка на $h{-}T$-диаграмме исследуемого кирального ферромагнетика.

2. Модель

Рассмотрим гамильтониан Хаббарда (H) для сильно коррелированных электронов кирального ферромагнетика, в котором топологические особенности электронного спектра учтем в слагаемом гамильтониана ответственным за зонное движение (H_0). При этом, наряду со слагаемым внутриатомного кулоновского отталкивания (δH_U) с параметром хаббардовского взаимодействия (U), будем рассматривать антисимметричное спин-спиновое DM-взаимодействие (δH_D). Тогда

$$H = H_0 + \delta H_U + \delta H_D, \tag{1}$$

где

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} a^{+}_{\mathbf{k},\sigma} a_{\mathbf{k},\sigma},$$

причем топологические особенности спектра d-электронов $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ учитываются в DFT-приближении;

$$\delta H_U = U \sum_{\mathbf{q}} \Big(4^{-1}|\delta n_q|^2 - |S^{(z)}_q|^2\Big)$$

— гамильтониан хаббардовского взаимодействия, записанный через операторы спиновой и зарядовой плотности;

$$\delta H_D = \sum_{\mathbf{q}} \mathbf{h}^{(D)}_{\mathbf{q}} \mathbf{S}_{-\mathbf{q}}$$

— гамильтониан DM-взаимодействия, представленный в приближении среднего поля $\mathbf{h}^{(D)}_{\mathbf{q}} = -id[\mathbf{M}_{\mathbf{q}} \times \mathbf{q}]$ (поле Дзялошинского), в котором d — константа DM-взаимодействия, $\mathbf{M}_{\mathbf{q}} = \langle \mathbf{S}_{\mathbf{q}} \rangle$ — вектор Фурье-образа неоднородной намагниченности спиновой конфигурации с волновым вектором $\mathbf{q}$;

$$S^{(z)}_{\mathbf{q}} = \sum_{\sigma} \sigma n_{\mathbf{q},\sigma}/2, \;\; \delta n_{\mathbf{q}} = \sum_{\sigma} n_{\mathbf{q},\sigma} - \delta_{\mathbf{q},0} n,$$

$$n_{\mathbf{q},\sigma} = \sum_{\mathbf{k}} a^{+}_{\mathbf{k},\sigma} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}, \;\; a^{+}_{\mathbf{k},\sigma}(a_{\mathbf{k},\sigma})$$

— операторы рождения (уничтожения) d-электрона в состоянии с квазиимпульсом $\mathbf{k}$ и спиновым квантовым числом σ, n — число d-электронов приходящееся на узел Mn.

Статистическую сумму рассматриваемой динамической системы сильно коррелированных d-электронов запишем в мацубаровском представлении [13]:

$$Z = \mathrm{Sp} T_\tau \exp\Big(-\int_0^\beta H(\tau) d\tau\Big),$$

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

Для термодинамического потенциала воспользуемся известным термодинамическим соотношением $\Omega = T \ln Z$. При этом, применяя преобразования Стратоновича–Хаббарда [12], сведем исходную многочастичную задачу о движении и взаимодействии d-электронов, к описанию их движения во флуктуирующих в пространстве и времени обменных ($\xi_\nu(\tau)$) и зарядовых ($\eta_\nu(\tau)$) полях. В результате, дополнительно учитывая поля Дзялошинского, имеем

$$\Omega = \Omega_0 + \Delta\Omega. \tag{2}$$

Здесь Ω_0 — термодинамический потенциал невзаимодействующих электронов, описываемых гамильтонианом H_0;

$$\langle(\ldots)\rangle = \mathrm{Sp}\Big\{(\ldots)\exp\Big(\beta\Omega_0 - \int_0^\beta\Big(H_0(\tau) - \mu\sum_q |n_q|^2\Big)\Big)\Big\};$$

$$\Delta\Omega = T \ln\Big\langle T_\tau \int (d\eta d\boldsymbol{\xi}) \exp\Big[-\sum_q (|\boldsymbol{\xi}_q - \mathbf{h}^{(D)}_q/c|^2 + |\tilde{\eta}_q|^2)$$
$$- (U/T)^{1/2} \sum_q (\delta n_q(i\tilde{\eta}_q/2) - \mathbf{S}_q \boldsymbol{\xi}_{-q})\Big]\Big\rangle_0, \tag{3}$$

$c = (UT)^{1/2}$; $q = (\mathbf{q}, \omega_{2n})$, ω_{2n} — мацубаровская Бозе-частота; $\tilde{\eta}_q = \eta_q(1 - \delta_{q,0})$;

$$(d\eta d\boldsymbol{\xi}) = d\boldsymbol{\xi}_0 \Big[\prod_{q\neq 0,\, j} d\xi^{(j)}_q d\eta^{(j)}_q\Big],$$

$d\eta^{(j)}_q$ и $d\boldsymbol{\xi}^{(j)}_q$ — реальная ($j = 1$), мнимая ($j = 2$) части Фурье-образов зарядового ($\eta_\nu(\tau)$) и вектора обменного ($\boldsymbol{\xi}_\nu(\tau)$) полей, соответственно; $\mathbf{h}_q = (\mathbf{h}\delta_{q,0} + \mathbf{h}^{(D)}_{\mathbf{q}})\delta_{q,\mathbf{q}}$, $\mathbf{h}$ — однородное внешнее магнитное поле в единицах два магнетона Бора (μ_B).

Далее следуя интерполяционной теории [12], будем разбивать $\Delta\Omega$ на однородную и неоднородную часть (которая соответствует градиентным слагаемым в функционале Гинзбурга–Ландау [8]). В результате получим выражение

$$\Omega = -T \ln \int_{-\infty}^{\infty} (d\boldsymbol{\xi}, d\eta) \exp\Big(-\sum_q \big((1 - X_q)|\eta_q|^2$$
$$+ (1 + X_q)|\boldsymbol{\xi}_q - c^{-1}\mathbf{h}_q|^2\big) - \Phi(\boldsymbol{\xi}, \eta)\Big), \tag{4}$$

в котором $\Phi(\boldsymbol{\xi}, \eta)$ — функционал свободной энергии d-электронов, движущихся во флуктуирующих в пространстве и времени стохастических зарядовых и обменных полях

$$\Phi(\boldsymbol{\xi}, \eta) = \int_0^\beta d\tau \sum_{\mathbf{v},\alpha(=\pm 1)} \int g_0(\varepsilon)$$
$$\times \ln\Big(1 + \exp T^{-1}\big(\mu - \varepsilon + \alpha c|\boldsymbol{\xi}_\nu(\tau)| + ic\tilde{\eta}_\nu)\big)\Big) d\varepsilon; \tag{5}$$

а поправка $X_q = U(\chi_0^{(0)} - \chi_q^{(0)})$, учитывающая неоднородность изотропного обменного взаимодействия, определяется через паулиевскую восприимчивость d-электронов и описывается функцией Линдхарда [9]:

$$\chi_q^{(0)} = \chi_0^{(0)}\Big(1 - A\mathbf{q}^2 - iB\,\frac{\omega}{|q|}\Big),$$

где однородная статическая компонента $\chi_0^{(0)}$ соответствует плотности d-состояний $g_0(\varepsilon)$ при $\varepsilon = \mu$ (химический потенциал).

3. Уравнение магнитного состояния

Для оценки функциональных интегралов в выражении термодинамического потенциала (4) будем использовать процедуру метода перевала по реальной и мнимой частям зарядовых (с $q \neq 0$) и статических (с $q = \mathbf{q}$) обменных полей η_q и $\xi_q^{(\gamma)}$; а также по модулю динамических (с $\omega_{2n} \neq 0$) обменных полей: $|\xi_q^{(\gamma)}| = r_q^{(\gamma)}$, где γ — индекс пространственных координатных осей.

При этом, имея ввиду связь перевальных значений обменных полей $\xi_{\mathbf{q}}^{(\gamma)}$ со средними от операторов спиновой плотности, совпадающими с намагниченностью ($\mathbf{M}_q$), а также связь $r_q^{(\gamma)}$ со среднеквадратическими амплитудами спиновых флуктуаций [9], получаем уравнения магнитного состояния в виде

$$M_0^{(z)}(D^{-1} + 2\kappa\sum_{\mathbf{q}}|\mathbf{M}_{\mathbf{q}}|^2) + 2\kappa\sum_{\mathbf{q}^{(1)},\mathbf{q}^{(2)},\mathbf{q}^{(3)}} M_{\mathbf{q}^{(1)}}^{(z)}(\mathbf{M}_{\mathbf{q}^{(2)}}\mathbf{M}_{\mathbf{q}^{(3)}})\delta_{\sum_1^3 \mathbf{q}^{(1)}=0} = h/U, \quad (6a)$$

$$M_{\mathbf{q}}^{(\gamma)}\Big(D^{-1} + 2\kappa M_0^{(z)} + \kappa\sum_{\mathbf{q}^{(1)}\neq 0}|\mathbf{M}_{\mathbf{q}}^{(1)}|^2 + A\mathbf{q}^2\Big) + \kappa\sum_{\mathbf{q}^{(1)},\mathbf{q}^{(2)},\mathbf{q}^{(3)}\neq 0}(\mathbf{M}_{\mathbf{q}^{(1)}}\mathbf{M}_{\mathbf{q}^{(2)}})M_{\mathbf{q}^{(3)}}^{(\gamma)}(1 - \delta_{\mathbf{q}^{(3)},\mathbf{q}})\delta_{\sum_{j=1}^3 \mathbf{q}^{(j)};\mathbf{q}} = h_{\mathbf{q},\gamma}^{(D)}/(U), \quad (6b)$$

учитывающем обменное усиление зонного магнетизма (с фактором D) и взаимодействия спиновых мод с параметрами мода-мода (κ):

$$D = (1 - U\chi_\perp + \kappa(\langle\delta\mathbf{M}^2\rangle + \langle m^2\rangle/3))^{-1}$$

и

$$\kappa = U(\chi_\perp - \chi_\parallel)/(2M^2).$$

Здесь

$$\chi_\perp = (2UM)^{-1}\sum_{\alpha=\pm1}\alpha\int d\varepsilon\, f(\varepsilon - \mu - \alpha UM)g_0(\varepsilon)$$

и

$$\chi_\parallel = 2\Big(\sum_{\alpha=\pm1} g_\alpha(\mu)\Big)^{-1}\prod_{\alpha=\pm1} g_\alpha(\mu),$$

где

$$g_0(\varepsilon) = g_0(\varepsilon + \alpha UM),$$

$$g_\alpha^{(n)}(\mu) = (-1)^{n+1}\int_{-\infty}^{\infty} g_\alpha(\varepsilon)(d^{n+1}f(\varepsilon - \mu)/d^{n+1}\varepsilon)d\varepsilon,$$

соответствуют поперечной и продольной восприимчивости электронов, $M = (M_0^2 + \langle\delta M^2\rangle + \langle m^2\rangle)^{1/2}$ — среднеквадратический магнитный момент, амплитуда динамических спиновых флуктуаций определяется выражением, совпадающим с флуктуационно-диссипативной теоремой

$$\langle\mathbf{m}^2\rangle = 2U^{-1}\sum_{\mathbf{q},\gamma}\int_0^{\infty}\Big(\frac{1}{2} + f_{\mathrm{B}}(\omega/T)\Big) \times \operatorname{Im}\big(D^{-1} + 2\kappa(M)|M_{\mathbf{q},\gamma}|^2 + X_{\mathbf{q},\omega}\big)^{-1}d\omega, \quad (7a)$$

и возникает вклад флуктуаций волн спиновой плотности (ВСП), со средним квадратом амплитуды

$$\langle\delta M^2|\rangle = \sum_q |\mathbf{M}_{\mathbf{q}}|^2. \quad (7b)$$

Решения для динамических тепловых и нулевых спиновых флуктуаций (7a) и для пространственных флуктуаций ВСП (7b) соответствуют перевальным переменным $|\xi_q^{(\gamma)}| = r_q^{(\gamma)}$.

Волновой вектор $\mathbf{q}_0$, реализуемых спиновых конфигураций, определяется из условий минимума термодинамического потенциала и оказывается зависящим от проекций на координатные оси намагниченности $M_{\mathbf{q}}^{(\gamma)}$:

$$q_0^{(x)} = |\mathbf{q}_0|\bigg(\frac{(M_{\mathbf{q}_0}^{(+)}M_{-\mathbf{q}_0}^{(-)})^{1/2}}{|\mathbf{M}_{\mathbf{q}_0}|^2}\bigg)\operatorname{Re}M_{+\mathbf{q}_0}^{(z)};$$

$$q_0^{(y)} = |\mathbf{q}_0|\bigg(\frac{(M_{\mathbf{q}_0}^{(+)}M_{-\mathbf{q}_0}^{(-)})^{1/2}}{|\mathbf{M}_{\mathbf{q}_0}|^2}\bigg)\operatorname{Im}M_{\mathbf{q}_0}^{(z)};$$

$$q_0^{(z)} = \pm|\mathbf{q}_0|\bigg(\frac{M_{\mathbf{q}_0}^{(+)}M_{-\mathbf{q}_0}^{(-)}}{|\mathbf{M}_{\mathbf{q}_0}|^2}\bigg), \quad (8)$$

где $|\mathbf{q}_0| = d/2AU$, $M_{q_0}^{(+)} = (M_{-q_0}^{(-)})^* = M_{q_0}^{(x)} + iM_{q_0}^{(y)}$ — циркулярные компоненты вектора $\mathbf{M}_{q_0}$.

Решение уравнений магнитного состояния может быть выполнено только численно с учетом особенностей электронного спектра и DOS d-электронов. Причем, для анализа возможностей возникновения термодинамических и топологических фаз необходима информация о зависимости химического потенциала μ от температуры и магнитного поля. Последнюю можно получить из условия седловой точки по η_0 и требования электронейтральности для числа s- и d-электронов

$$N_e = N_S + \sum_{\alpha=\pm1}\int d\varepsilon\, f(\varepsilon - \mu + \alpha UM)g(\varepsilon), \quad (9)$$

где N_e — общее число электронов, N_S — число s-электронов, $f(\varepsilon)$ — функция Ферми–Дирака.

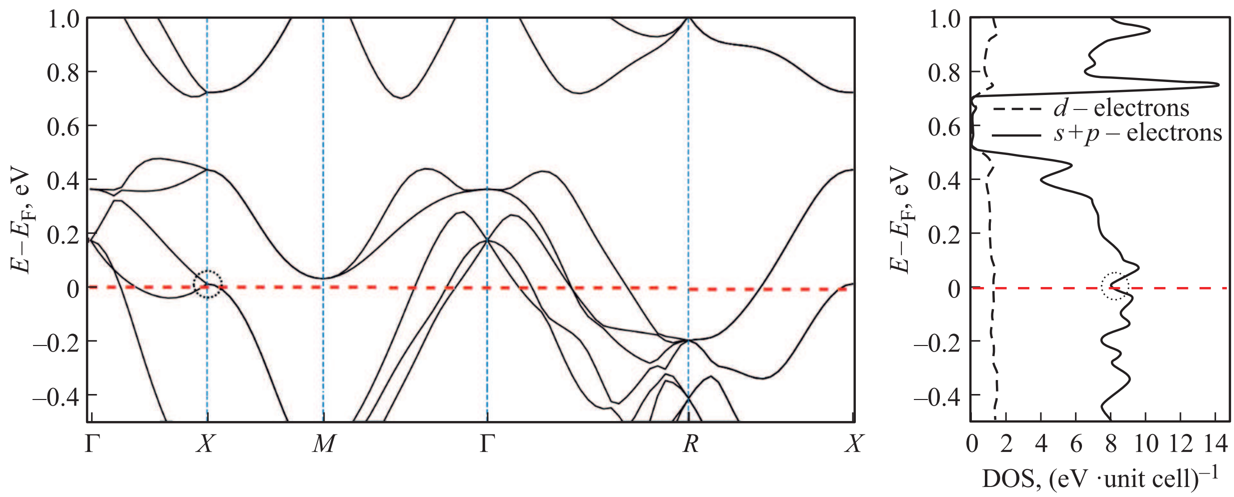

Рис. 1. Электронный спектр (слева) и плотность состояний MnSi (справа). Кривая плотности состояний (DOS) изображенная сплошной линией соответствует d-электронам, а пунктирной линией — sp-электронам. Положение уровня Ферми совпадает с началом отсчета энергии. Энергетическая область кривизны Берри и DOS обведена кружком. Также кружком выделена X-точка пересечения ветвей, в которой возникает кривизна Берри.

4. $h-T$-диаграмма спиновых состояний

Численный анализ киральных спиновых состояний MnSi выполним используя, при решении уравнений магнитного состояния, результаты первопринципных расчетов электронной структуры. Такие расчёты для электронного спектра и плотности электронных состояний (DOS) в настоящей работе были выполнены с учетом особенностей кристаллической структуры MnSi в приближении GGA (рис. 1). При расчетах был использован код Elk, в котором реализован полно потенциальный метод присоединенных плоских волн. Обменно-корреляционный потенциал был выбран в виде GGA. Волновые функции были отобраны на сетке $16 \times 16 \times 16k$-точек, а длина отсечки обратного волнового вектора G была установлена на 3.77 a.u.$^{-1}$.

Полученные нами результаты GGA расчётов DOS неплохо согласуются с приведенными в базах данных по топологическим материалам [14]. Однако они недостаточны для определения температурно-полевой зависимости параметра мода-мода, которая в условиях затянутого по температуре фазового перехода в MnSi определяется только после учета особенностей тонкой структуры DOS. Поэтому было проведено моделирование тонкой структуры DOS d-электронов в интервале энергий $|\varepsilon - \varepsilon_F| \leq 0.1$ eV, которое привело к приближенному выражению

$$g(\varepsilon) = 147.05\varepsilon^6 + 61.9\varepsilon^5 - \varepsilon^4 - 19.9\varepsilon^3 - 6.96\varepsilon^2 + 0.21\varepsilon + 0.03,\ \text{eV}^{-1}.$$

Сопоставление результатов моделирования тонкой структуры DOS с расчетами электронных спектров (рис. 1) показывает, что в рассмотренном интервале энергий, вблизи энергии Ферми, имеет место пересечение ветвей электронного спектра, приводящее к вырождению Берри [10]. При этом кривизна DOS, определяемая его второй производной по энергии в рассматриваемом интервале является отрицательной.

Основные результаты численного анализа решений уравнений магнитного состояния (6) в рассмотренной модели электронной структуры сводятся к следующим.

1. Если химический потенциал, определяемый условием электронейтральности (9), оказывается за пределами кривизны Берри электронного спектра, а значение параметра межмодового взаимодействия положительно ($\kappa > 0$), то получаем решения, соответствующие спиновому геликоиду с левой киральностью

$$M_\nu^{(x)} = M_S \sin(\mathbf{q}_0 \boldsymbol{\nu}),$$
$$\nu^{(y)} = -M_S \cos(\mathbf{q}_0 \boldsymbol{\nu}), \quad M_\nu^{(z)} = \chi h. \tag{10}$$

Здесь локальная намагниченность

$$M_S^2 = (2\kappa)^{-1}\Big(\big(D^{-1} + 2\kappa M_0^2 + X(\mathbf{q}_0, 0)\big)^2 - (d|\mathbf{q}_0|/U)^2\Big)^{1/2}. \tag{11a}$$

магнитная восприимчивость

$$\chi = 2U^{-1}\big(1 - (D^{-1} + 2\kappa M_0^2)^{-1}\big), \tag{11b}$$

а флуктуации волн спиновой плотности (7б) не имеют места: $\langle \delta M^2 \rangle = 0$.

При этом, также как при LDA+U+SO-моделировании в [6,7], термодинамически равновесное киральное ферромагнитное состояние реализуется только при наличие нулевых спиновых флуктуаций со среднеквадратичной амплитудой, которая сравнима с модулем намагниченности $\mathbf{M_q}$. Условие существования подобных решений определяется неравенством

$$D^{-1} + 2\kappa M_0^{(z)} < -3dq_0/4U.$$

Волновой вектор $\mathbf{q}_0$ геликоида (8) оказывается фиксированным по модулю (см. (6)) и перпендикулярным плоскости спирали, в которой происходит вращение xy-проекции локальной намагниченности $\mathbf{M}_{\boldsymbol{\nu}}$. Во внешнем однородном магнитном поле, перпендикулярном xy-плоскости, возникают спиновые конусы. При этом локальная намагниченность приобретает z-компоненту, а ее x- и y-составляющие убывают с увеличением поля $\mathbf{h}$.

На рассчитанной нами фазовой диаграмме (рис. 2) эти решения уравнений магнитного состояния (11), описывают фазу 1.

Во внешнем магнитном поле $h > h_C$, где критическое поле h_C определяется условием

$$2\kappa M_0^2(h_C) = -D^{-1} - \frac{3d|\mathbf{q}_0|}{U},$$

происходит „схлопывание“ геликоидального конуса и возникает индуцированный полем ферромагнетизм (фаза 2).

2. Анализ условия электронейтральности и решений уравнения магнитного состояния показывает, что изменение параметра мода-мода при температурно-полевом сдвиге химического потенциала в область с отрицательной кривизной DOS приводит к подавлению нулевых флуктуаций. При этом амплитуда среднеквадратичного момента становится малой. В результате для параметров межмодового взаимодействия и обменного усиления, приближенно имеем

$$\kappa \approx U^3\big(g^{-1}(\mu)(g^{(1)}(\mu))^2 - g^{(2)}(\mu)\big)$$

и

$$D_0 \approx (1 - U\chi_0^{(0)})^{-1}. \qquad (12)$$

Согласно (12) κ меняет знак при сдвиге химического потенциала в область отрицательной кривизны DOS без изменения знака параметра обменного усиления. Поскольку химический потенциал при этом сдвигается в энергетическую область кривизны Берри, то в системе индуцируется ТЭП.

В результате ТЭП наряду, со слабыми тепловыми спиновыми флуктуациями, возникают топологически обусловленные пространственные флуктуации ВСП (7b) и флуктуации зарядовых полей η со средним квадратом $\langle\delta\eta^2\rangle = N_0^{-1}\sum_\nu(\eta_\nu - \nu_0)^2$:

$$\langle\delta\mathbf{M}^2\rangle = \langle\delta\eta^2/4\rangle - \big[D_0^{-1} + \kappa\big(\mathbf{M}_0^2 + 5\langle m^2\rangle/3\big)\big]/\kappa, \quad (13a)$$

$$\left\langle\frac{\delta\eta^2}{4}\right\rangle = \langle\delta\mathbf{M}^2\rangle - \frac{[2 - D_0^{-1} - \kappa(\mathbf{M}_0^2 + \langle m^2\rangle)]}{\kappa}. \quad (13b)$$

Согласно рассматриваемой модели электронной структуры, если при $\kappa < 0$ и $D < 0$ выполняется условие $D_0^{-1} - 2|\kappa|M_0^2 < -3d|\mathbf{q}_0|/4U$, то для индукции магнитного поля $b < \frac{d|\mathbf{q}_0|M_S}{4}$ решения уравнений (6) описывают скирмионную решетку

$$M_\nu^{(x)} \cong M_S\cos(q_{0,i}\nu + \phi),\ \ M_\nu^{(y)} \cong M_S\sin(q_{0,i}\nu + \Phi),$$

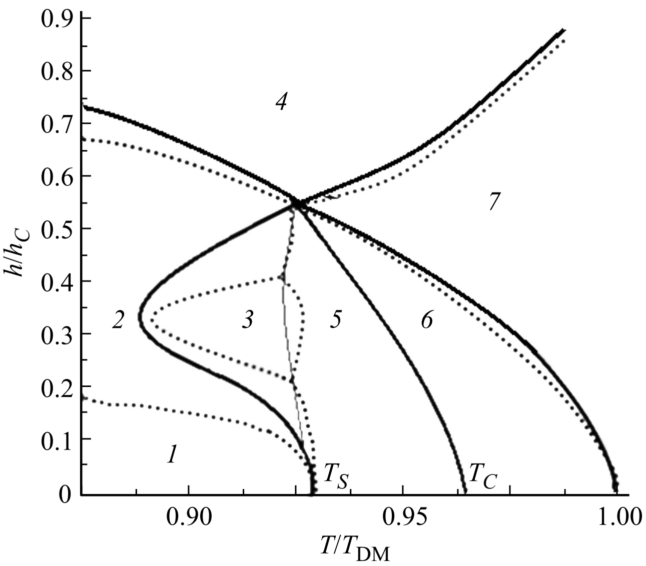

Рис. 2. Фазовая диаграмма MnSi. Сплошные линии — результаты расчета, пунктир — экспериментальные данные [1,15]. *1* — геликоидальный (спиральный) магнетизм, *2* — геликоидальный конус, *3* — скирмионная A-фаза, *4* — индуцированный полем **h** ферромагнетизм, *5* — ферромагнитный геликоидальный флуктуационный беспорядок, *6* — парамагнитный геликоидальный беспорядок, *7* — парамагнетизм. Используются расчетные значения магнитного поля „схлопывания“ геликоидального конуса при $T \to 0$ $\mu_B h_C = 0.60T$. На горизонтальной оси в относительных единицах показаны расчетные значения температуры $T_S = 0.93T_{\mathrm{DM}}$ формирования лево киральных ферромагнитных флуктуаций спиновых спиралей и температуры возникновения парамагнитной спиновой жидкости со смешанной (правой и левой) спиновой киральностью — $T_C = 0.96T_{\mathrm{DM}}$. $T_{\mathrm{DM}} = 31.08\,\mathrm{K}$ — расчетное значение температуры исчезновения спиновой киральности и возникновения парамагнетизма при $h = 0$. При расчетах используются параметры $U = 0.93\,\mathrm{eV}$, $A = 0.07$ и $B = \pi/2.45$ из [16,17].

$$M_\nu^{(z)} = |M_{q_0}^{(z)}|\cos(\mathbf{q}_{0,i}\boldsymbol{\nu} + \phi) + M_0^{(z)}, \qquad (14a)$$

$$M_S^2 = (2|\kappa|)^{-1}\Big((D_0^{-1} - 2|\kappa|M_0^2 - |\kappa|(\langle\delta M^2\rangle - \langle\delta\eta^2/4\rangle) + X(\mathbf{q}_0, 0))^2 - (d|\mathbf{q}_0|/U)^2\Big)^{1/2}, \quad (14b)$$

Особенностью скирмионных решений является возникновение намагниченности в направлении перпендикулярном плоскости спиралей. Однако согласно проведенным оценкам

$$|\mathbf{M}_{\mathbf{q}_0}^{(z)}|^2 = (4U)^{-2}(|\kappa|dq_0)^2\langle\delta\mathbf{M}^2\rangle - (h/U)^2 \ll M_S^2, \quad (15b)$$

в силу чего рассматриваемые спиновые конфигурации являются квазипланарными.

Согласно анализу слагаемых межмодовой связи в уравнении магнитного состояния тройка волновых векторов $q_{0,i}$ в выражениях (14a) в сумме равна нулю. Поэтому угол между соседними волновыми векторами спиновых мод $M_{\mathbf{q}}^{(\gamma)}$ составляет 120°, что в соответствии с [1,15] отвечает условию возникновения скирмионной решетки, которая является результатом наложения трех геликоидальных мод.

Рассчитанная область существования скирмионной фазы 3 приведена на рис. 2. Фазы 4 и 5 на рассчитанной нами диаграмме (рис. 2) наблюдаются и на эксперименте [1,15]. Однако в отличие от [1,15] мы показываем, что следует различать спиновые жидкости с ферромагнитными и с парамагнитными флуктуациями спиновых спиралей.

Ферромагнитные флуктуации спиновых спиралей возникают при условиях и $0 > D_0^{-1} + 2\kappa M_0^{(z)} > -3dq_0/4U$ и $\kappa < 0$, описываются решениями уравнения магнитного состояния

$$M_{\boldsymbol{\nu}}^{(x)} = M_S \cos(\mathbf{q}_0 \boldsymbol{\nu} + \phi),$$

$$M_{\boldsymbol{\nu}}^{(y)} = M_S \sin(\mathbf{q}_0 \boldsymbol{\nu} + \phi), \ M_{\nu}^{(z)} = \chi h, \tag{16}$$

в которых фигурируют стохастически меняющиеся фазы ϕ. Также как и для спиновых спиралей (11), здесь сохраняется левая спиновая киральность.

Если же выполняется условие $0 < D_0^{-1} + 2\kappa M_0^2 < 3d|\mathbf{q}_0|/U$ и $\kappa < 0$, то возникает фаза 5, которая соответствует парамагнитной спиновой жидкости со смешанной (правой и левой) спиновой киральностью. В этой области, получаем следующие решения уравнения магнитного состояния

$$M_{\boldsymbol{\nu}}^{(x)} = M_S \cos(\mathbf{q}_0 \boldsymbol{\nu} + \phi),$$

$$M_{\boldsymbol{\nu}}^{(y)} = \pm M_S \sin(\mathbf{q}_0 \boldsymbol{\nu} + \phi), \ M_{\nu}^{(z)} = \chi h. \tag{17}$$

Отметим, что, как и в обычном (не киральном) парамагнитном состоянии, в фазе 5 система электронов не намагничена при $h = 0$. Однако во внешнем магнитном поле возникает намагниченность пропорциональная h. Подобное состояние спиновой системы MnSi наблюдалось в экспериментах по малоугловому рассеянию поляризованных нейтронов в [11], где фиксировали смешанную левую и правую спиновую киральности.

Отметим, что киральные спиральные моды $M_{\mathbf{q}}^{(\gamma)}$ с фиксированными фазами Берри должны сохраняться в пределах радиусов корреляций, описываемых выражениями

$$R_C = 2\pi k_{\mathrm{F}}^{-1} (AU\chi)^{1/2}, \tag{19}$$

где магнитная восприимчивость

$$\chi = 2\chi_0^{(0)} \big(D_0^{-1} + \kappa(2M_0^2 + \langle \delta M^2 \rangle + 5\langle m^2 \rangle/3)\big)^{-1}.$$

Проведенные оценки с учетом параметров электронной и магнитной подсистем [16,17] показывают, что величина $R_C \approx 50$ ангстрем, причем слабо зависит от внешнего магнитного поля.

Наконец следует отметить, что не киральная парамагнитная фаза 6 (рис. 2) возникает в условиях, когда вследствии изменения температуры и магнитного поля, химический потенциал сдвигается за пределы области Берри-кривизны. При этом, имеет место отложенный магнитный фазовый переход в парамагнитное состояние, сопровождаемый изменением отрицательного знака параметра мода-мода на положительный, исчезновением пространственных флуктуаций электронной плотности (13) и локальных намагниченностей. Вследствие исчезновения локальных намагниченностей киральные эффекты DM-взаимодействия также исчезают.

5. Заключение

Таким образом, мы показываем, что топологические особенности электронной структуры приводят к возникновению на $h-T$-диаграмме MnSi фаз топологического магнетизма. Причиной возникновения скирмионной фазы, а также фаз с ферро- и парамагнитными киральными спиновыми жидкостями является топологический электронный переход. При этом ТЭП вызван индуцированным температурой и внешним магнитным полем сдвигом химического потенциала электронной системы в область кривизны Берри.

ТЭП сопровождается возникновением пространственных флуктуаций волн спиновой и зарядовой плотности, которые являются необходимым условием формирования топологического магнетизма. При этом сопоставление особенностей электронных спектров, приводящих к кривизне Берри с особенностями DOS, приводит к выводу о взаимосвязи знака параметра мода-мода с рассмотренными топологическими особенностями электронной структуры.

Поскольку вырождение электронных состояний, связанное с кривизной Берри, является причиной топологического эффекта Холла (THE) [9], постольку в соответствии с найденной фазовой диаграммой можно ожидать, что даже незначительные изменения электронной структуры будут оказывать существенное влияние на THE. В частности, мы ожидаем, что экспериментальные результаты, описывающие обнаруженный THE [9], будут существенно дополнены после дальнейшего, и прежде всего экспериментального, его изучения на образцах MnSi, допированных различными примесями.

Поэтому исследование топологически обусловленных особенностей тонкой электронной структуры и спиновых корреляций в киральных ферромагнетиках, относящихся к структурному типу B20, является актуальным для дальнейшего развития спинтронных технологий.

Финансирование работы

Результаты получены в рамках задания Министерства науки и высшего образования, контракт № FEUZ-2023-0015.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

[1] A. Bauer, C. Pfleiderer. Springer Ser. Mater. Sci. **228**, 1–28 (2016).
[2] С.М. Стишов, А.Е. Петрова. УФН **187**, *12*, 1365 (2017).
[3] С.М. Стишов, А.Е. Петрова. УФН **193**, 614 (2023).
[4] P. Bak, M.H. Jensen. J. Phys. C **13**, L1881 (1980).
[5] S.A. Pikin. JETP Lett. **106**, 793 (2017).
[6] A.A. Povzner, A.G. Volkov, T.A. Nogovitsyna. Physica B: Condens. Matter **536**, 408 (2018). https://doi.org/10.1016/j.physb.2017.10.112
[7] А.А. Повзнер, А.Г. Волков, И.А. Ясюлевич. ФТТ **58**, 1283 (2016).
[8] M. Brando, D. Belitz, F.M. Grosche, T.R. Kirkpatrick. Rev. Mod. Phys. **88**, 25006 (2016). https://doi.org/10.1103/RevModPhys.88.025006
[9] A. Neubauer, C. Pfleiderer, B. Binz, A. Rosch, R. Ritz, P.G. Niklowitz, P. Böni. Phys. Rev. Lett. **102**, 186602 (2009).
[10] M.A. Wilde, M. Dodenhöft, A. Niedermayr, A. Bauer, M.M. Hirschmann, K. Alpin, A.P. Schnyder, C. Pfleiderer. Nature **594**, 374 (2021).
[11] C. Pappas, E. Leliévre-Berna, P. Falus, P.M. Bentley, E. Moskvin, S. Grigoriev, P. Fouquet, B. Farago. Phys. Rev. Lett. **102**, 197202 (2009).
[12] Т. Мория. Спиновые флуктуации в магнетиках с коллективизированными электронами. Мир, М. (1988). 288 с.
[13] А.А. Абрикосов, Л.П. Горьков, И.Е. Дзялошинский. Методы квантовой теории поля в статистической физике. Физматгиз, М. (1962). 444 с.
[14] M.G. Vergniory, L. Elcoro, C. Felser, N. Regnault, B.A. Bernevig, Z. Wang. Nature **566**, 480 (2019). https://doi.org/10.1038/s41586-019-0954-4
[15] Y. Luo, S. Lin, D.M. Fobes, Z. Liu, E.D. Bauer, J.B. Betts, A. Migliori, J.D. Yhompson, M. Janoshek, B. Maiorov. Phys. Rev. B **97**, 104423 (2018).
[16] A.A. Povzner, A.G. Volkov, T.M. Nuretdinov. J. Magn. Magn. Mater. **507**, 166826 (2020).
[17] A.A. Povzner, A.G. Volkov, M.A. Chernikova, T.A. Nogovitsyna. Solid State. Commun. **371**, 115279 (2023).

Редактор Ю.Э. Китаев