

05,12

Электронный транспорт в топологическом геликоидальном магнетике© Ю.Б. Кудасов^{1,2}¹ Саровский физико-технический институт, Национальный исследовательский ядерный университет „МИФИ“, Саров, Россия² Российский федеральный ядерный центр — Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики, Саров, Россия

E-mail: kudasov@ntc.vniief.ru

Поступила в Редакцию 6 марта 2025 г.

В окончательной редакции 6 марта 2025 г.

Принята к публикации 5 мая 2025 г.

Зонный магнетик с геликоидальным упорядочением может обладать нетривиальной топологией зонной структуры. Примером такой системы может служить металлический делафоссит PdCrO_2 . Для описания его транспортных свойств, предложена простая двумерная квазиизотропная модель поверхности Ферми, которая учитывает возникновение спиновой текстуры, т.е. состоит из чередующихся фрагментов с противоположной спиновой поляризацией. Показано, что в рамках модели можно объяснить возникновение невзаимности электронного транспорта, наблюдавшуюся в металлическом делафоссите PdCrO_2 , а также необычный аномальный эффект Холла.

Ключевые слова: геликоидальное упорядочение, зонная структура, поверхность Ферми, электронный транспорт, металлические делафосситы, PdCrO_2 .

DOI: 10.61011/FTT.2025.07.61191.25NN-25

1. Введение

Согласно теореме Блоха, дисперсионные зависимости электронов в кристаллических структурах должны быть периодическими функциями в импульсном пространстве, причем их периодичность определяется размерами зоны Бриллюэна [1]. Таким образом, границы зоны можно „склеить“ так, чтобы в явном виде задать периодичность дисперсионных зависимостей, которые в этом случае будут определены на цилиндре для одномерных (1D) систем, на торе для двумерных (2D) и гиперторе для трехмерных (3D) структур [2]. Топологическая нетривиальность этих объектов приводит к тому, что зонная структура может принадлежать к различным топологическим классам [3]. Традиционно предполагается, что нетривиальная зонная структура возникает вследствие специфического распределения фазы волновой функции в зоне Бриллюэна [4]. Вариация фазы может быть представлена в виде векторного поля — векторного потенциала (или связности) Берри. Он имеет свойства сходные с векторным потенциалом магнитного поля, в частности, неоднозначность, связанную с калибровочной инвариантностью. Удобно перейти от него к другому векторному полю — кривизне Берри, которая по своим свойствам аналогична индукции магнитного поля. Распределение кривизны Берри в зоне Бриллюэна может иметь различную топологию. Это легко видеть, например, для 2D систем: на поверхности тора кривизна Берри как векторное поле может принадлежать различным топологическим классам в случаях, когда „монополь“ находится внутри тора или вне его [3].

В последние десятилетия основные усилия исследователей были сосредоточены на изучении топологических изоляторов (ТИ) и краевых состояниях в них, поскольку здесь возникают необычные наблюдаемые эффекты [5,6], которые определяются с поверхностными состояниями с огромной подвижностью носителей заряда.

Недавно было показано, что в магнитных геликоидальных системах может существовать новый тип нетривиальных топологических структур, не связанных с векторным потенциалом Берри [7]. Они возникают вследствие двух причин. Во-первых, в геликоидальном магнитном поле дисперсионные зависимости $\epsilon_{\mathbf{k},\sigma}$ обладают специфической симметрией [8]:

$$\epsilon_{\mathbf{k},\langle\sigma\rangle} = \epsilon_{-\mathbf{k},-\langle\sigma\rangle}, \quad (1)$$

где \mathbf{k} — волновой вектор, $\langle\sigma\rangle$ — среднее значение спина. Во-вторых, два характерных периода структуры, т.е. кристаллографический и магнитный, вместе с периодическими граничными условиями Борна-Кармана в геликоидальной системе приводят к тому, что в пределах магнитной зоны Бриллюэна дисперсионная зависимость не является периодической и образует группу ветвей (многолистовую дисперсионную поверхность), которая, в свою очередь обладает нетривиальной топологией [7]. В качестве примера такой зонной структуры рассматривалась 2D модель слоев палладия в металлическом делафоссите PdCrO_2 . Одной из особенностей зонной структуры с нетривиальной топологией оказалась спиновая текстура поверхности Ферми [8,9].

Металлические делафосситы (PdCoO_2 , PtCoO_2 , PdCrO_2) обладают рекордной для металлических

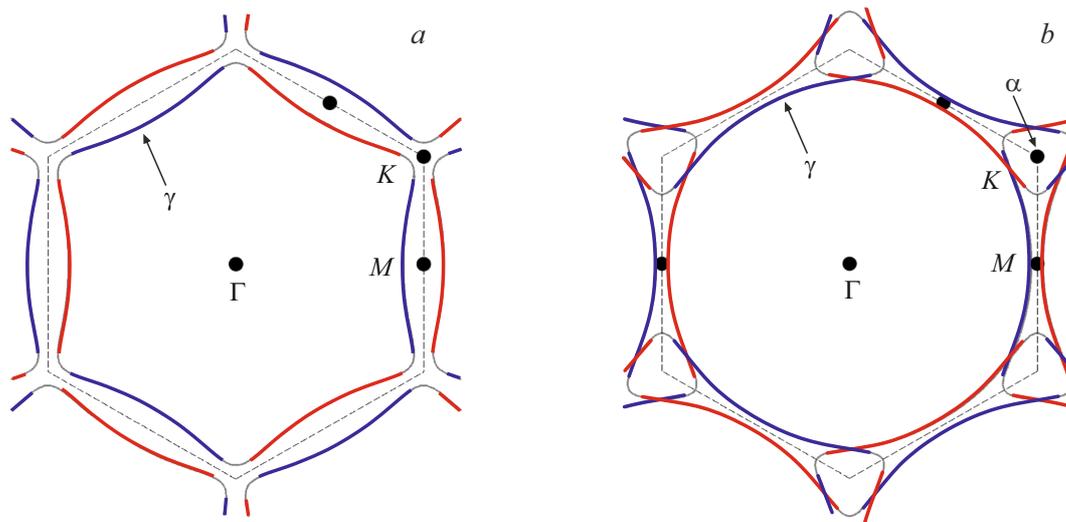


Рис. 1. Текстурированная по спину поверхность Ферми в 2D модели почти свободных электронов для гексагонального слоя палладия, полученная при различных значениях уровня Ферми (*a* и *b*) [8,9]. Обозначены листы α и γ . Спиновая поляризация показана цветом (синий и красный) для поляризации спин-вверх и спин-вниз.

оксидов электропроводностью сравнимой со значениями характерными для элементарных металлов, таких как медь и серебро [10]. Эти соединения обладают слоистой структурой, в которой диэлектрические прослойки CoO_2 и CrO_2 чередуются с проводящими слоями платины или палладия [11]. Относительно низкая концентрация подвижных носителей заряда и высокая электропроводность приводят к аномальным величинам длины свободного пробега. Это предполагает необычный механизм электронного транспорта [12].

Среди металлических дельтафосфитов PdCrO_2 — единственное соединение, в котором возникает дальний магнитный порядок при $T_N = 38$ К [13]. Магнитная структура оказывается крайне сложной: ионы хрома в прослойках CrO_2 формируют 120° -ое упорядочение с чередующейся киральностью в соседних прослойках. Всего магнитная структура состоит из 18 подрешеток [13]. Переход в магнитоупорядоченное состояние приводит к резкому падению удельного сопротивления. Кроме крайне высокой проводимости PdCrO_2 обладает рядом других неожиданных транспортных свойств: невязанность электронной проводимости [14] и необычный аномальный эффект Холла (УАНЕ) [15].

В настоящей работе показано, что все указанные выше транспортные свойства могут быть объяснены в рамках 2D модели поверхности Ферми со спиновой текстурой.

2. Квазиизотропная двумерная модель поверхности Ферми

Поверхность Ферми в PdCrO_2 в настоящее время хорошо изучена, как в парамагнитной (ПМ), так и в магнитоупорядоченной фазах [10,16–18]. В первом случае имеется единственный лист (α) квазидвумерной

поверхности Ферми с электронным характером проводимости. В магнитоупорядоченной фазе ниже T_N вследствие перехода к магнитной зоне Бриллюэна происходит реконструкция поверхности Ферми [17,18], в результате которой основной α лист становится дырочным листом γ и возникает электронный лист α (карман) вблизи К-точки.

В работе [7] было, в частности, доказано, что для электронов в двумерном гексагональном слое под действием 120° -ого магнитного (молекулярного) поля появляется нетривиальная зонная структура, при которой отдельный лист дисперсионной поверхности является неперiodическим в магнитной зоне Бриллюэна. При этом зонная структура в целом оказывается периодической, как этого требует теорема Блоха.

Таким образом, одним из основных результатов работ [7–9] был вывод о том, что в режиме топологического металла возможно возникновение однолистной поверхности Ферми со спиновой текстурой, отвечающей соотношению (1). При этом она является невырожденной по спину, возможно, за исключением изолированных точек. Иначе говоря, спиновое состояние электрона на поверхности Ферми зависит от волнового вектора (спиновая текстура) и при этом однозначно им определяется (отсутствие вырождения). Тогда можно опустить спиновый индекс, что мы будем делать в дальнейшем.

Зонная структура гексагонального металлического 2D слоя в геликоидальном магнитном поле в приближении почти свободных электронов [8,9], предложенная в качестве модели проводящих слоев в PdCrO_2 , показана на рис. 1. Под воздействием эффективного поля магнитоупорядоченных слоев ионов хрома появляется и основная γ лист поверхности Ферми и карманы (α лист), которые хорошо согласуются с экспериментальными данными.

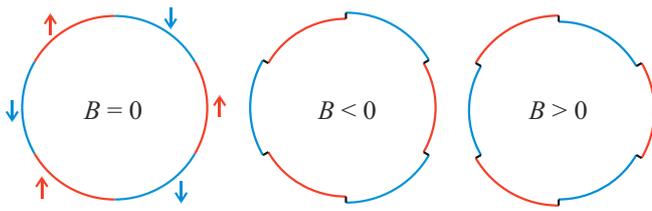


Рис. 2. Квазиизотропная 2D модель текстурированной поверхности Ферми (поляризация показана цветом) при различных значениях магнитного поля (B).

Также возникает и спиновая текстура поверхности Ферми, соответствующая режиму топологического металла, которая представляет собой шесть чередующихся арок с противоположной спиновой поляризацией. Аналогичная структура в некоторых случаях возникает в краевых состояниях ТИ.

Транспортные свойства зонной структуры в значительной степени определяются основным γ листом. При этом его приближенно можно считать изотропным. Тогда, если пренебречь карманами вблизи К точек, можно перейти к следующему модельному 2D представлению: поверхность Ферми в отсутствие магнитного поля изотропна по форме и имеет спиновую структуру. В случае ненулевого магнитного поля, которое предполагается перпендикулярным спиновой плоскости, арки поверхности Ферми, соответствующие различным направлениям спиновой поляризации, смещаются в противоположных направлениях за счет эффекта Зеемана. Поэтому мы будем называть модель квазиизотропной. Эта модель позволяет выполнять аналитические вычисления для транспортных свойств с учетом спиновой текстуры. Мы также будем предполагать параболический закон дисперсии. На рис. 2 показана модельная поверхность Ферми со спиновой текстурой для случаев без магнитного поля и магнитного поля, ориентированного перпендикулярно спиновой плоскости.

Как было показано ранее [19], спиновая текстура частично подавляет процессы электрон-фононного рассеяния с перебросом и поэтому приводит к аномальной проводимости в области низких температур. В следующем разделе показано, что она также приводит к невзаимности электронного транспорта.

3. Невзаимность электронного транспорта в PdCrO_2 в магнитном поле

В работе [20] было показано, что в случае киральных систем в магнитном поле из соотношения Онзагера вытекает следующее условие: электропроводность должна быть инвариантна относительно одновременной смены знака тока и магнитного поля. Это означает, что условие взаимности электронного транспорта может

быть нарушено в магнитном поле. После этого, начавшись активный поиск киральных структур, обладающих невзаимным электронным транспортом. В частности, он был обнаружен в магнитоупорядоченной фазе PdCrO_2 для ориентации тока и магнитного поля вдоль кристаллографической оси \mathbf{a} [14], которое соответствует направлению Г-М в магнитной зоне Бриллюэна.

Когда внешнее однородное электрическое поле ориентировано вдоль направления магнитного поля ($\mathbf{E} \parallel \mathbf{B}$), кинетическое уравнение приобретает простой вид [21]

$$\frac{e}{\hbar} \mathbf{E} \nabla_{\mathbf{k}} f = -\frac{\delta f}{\tau}, \quad (2)$$

где f и δf — функция распределения и ее отклонение от равновесного состояния, \mathbf{k} — волновой вектор электрона, τ — время релаксации, которое считается изотропным, e — заряд электрона. Магнитное поле в явном виде не входит в выражение (2), однако оно изменяет равновесную функцию распределения (см. рис. 2). Здесь и ниже мы предполагаем, что спиновая плоскость ориентирована перпендикулярно магнитному полю. Это условие всегда приближенно выполняется в сильных магнитных полях, т.е. выше поля спин-флоп перехода B_{sf} . Для PdCrO_2 значение B_{sf} составляет порядка 7 Т [18].

Как обычно, отклонение функции распределения от равновесного f_0 состояния в металле считается малым. Тогда линейное по электрическому полю отклонение от равновесного состояния можно записать как

$$f_1 = e\tau E_x v_x \frac{df_0}{d\varepsilon}, \quad (3)$$

где E_x и v_x — компоненты электрического поля и скорости вдоль оси x (вдоль кристаллографического направления \mathbf{a}). Энергия частиц предполагается в стандартной форме $\varepsilon = \hbar^2 k^2 / (2m)$, а скорость частиц $\mathbf{v} = \hbar^{-1} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon$.

Плотность тока в 2D модели определяется следующим выражением:

$$j_x = \frac{e}{4\pi^2} \int v_x f d\mathbf{k}. \quad (4)$$

Поправка первого порядка f_1 дает линейный отклик системы на электрическое поле, т.е. обычную проводимость с незначительными поправками из-за отклонения поверхности Ферми от изотропной формы в случае наличия внешнего магнитного поля.

В нормальных металлах равновесная функция распределения центрально симметрична, т.е. $f_0(\mathbf{k}) = f_0(-\mathbf{k})$. Тогда поправка первого порядка должна быть антисимметричной: $f_1(\mathbf{k}) = -f_1(-\mathbf{k})$, а второго порядка — опять центрально симметричной $f_2(\mathbf{k}) = f_2(-\mathbf{k})$. Тогда поправка второго порядка по E в плотности тока исчезает, поскольку подынтегральное выражение в формуле (4) оказывается нечетной функцией (\mathbf{k} , и, таким образом, транспорт оказывается взаимным. Однако этот вывод несправедлив для текстурированной по спину

поверхности Ферми при наличие магнитного поля, поскольку в этом случае под действием эффекта Зеемана $f_0(\mathbf{k}) \neq f_0(-\mathbf{k})$, как видно на рис. 2.

Поправка к функции распределения второго порядка может быть получена подстановкой $f_1 \rightarrow f$ в левую часть уравнения (1). Тогда получаем

$$f_2 = (e\tau E_x)^2 \left[\frac{d^2 f_0}{d^2 \varepsilon} v_x^2 + \frac{1}{m} \frac{df_0}{d\varepsilon} \right]. \quad (5)$$

Подстановка (5) в (4) после некоторых преобразований приводит к выражению поправки к плотности тока во втором порядке по E в виде:

$$j_2 = \frac{e(e\tau E_x)^2}{\sqrt{2}\pi^2 m^{1/2} \hbar^2} \iint \frac{d^2 f_0}{d^2 \varepsilon} \varepsilon^{3/2} d\varepsilon \cos^3(\varphi) d\varphi, \quad (6)$$

где φ — угол в полярных координатах. В пределе низких температур $(k_B T)/\varepsilon_F \ll 1$ интеграл вычисляется аналитически и при $B \neq 0$ значение нелинейной части тока оказывается отличной от нуля

$$j_2 = -\frac{e(e\tau E_x)^2}{8\pi^2 \hbar^2} \Delta v_F, \quad (7)$$

где $\Delta v_F = 2\mu_B B/(mv_{F0})$ — разность фермиевских скоростей для различных направлений спина для квазиизотропной модели, v_{F0} — скорость Ферми при отсутствии магнитного поля, μ_B — магнетон Бора. Предполагается также, что $\Delta v_F/v_{F0} \ll 1$.

Поскольку в работе [14] результаты измерения невзаимного электронного транспорта были представлены через нелинейное удельное сопротивление

$$\rho = \rho_0 + \rho_2 j, \quad (8)$$

удобно преобразовать выражение (7) к этому виду. Нелинейная поправка мала по сравнению с линейной частью удельного сопротивления. Тогда можно показать, что

$$\rho_2 \propto B/\tau. \quad (9)$$

Из выражения (9) видно, что ρ_2 пропорциональна магнитному полю, что согласуется с экспериментальными данными в сильных полях [14]. Кроме того, возникает сильная и немонотонная зависимость ρ_2 от температуры через время релаксации, которая должна быть пропорциональна $\rho_0(T)$ до T_N , а затем при переходе в парамагнитную фазу, когда спиновая текстура исчезает, нелинейная часть удельного сопротивления должна обратиться в ноль. Такое поведение также качественно наблюдается экспериментально [14].

В работе [22] был исследован эффект невзаимности при протекании тока в периодических магнитных структурах, и из довольно общих соображений было показано, что для его возникновения необходима некомпланарная магнитная структура. На первый взгляд, это противоречит результатам, полученным в настоящем разделе. Однако, следует заметить, что в работе [22] допускалось отсутствие внешнего магнитного поля, тогда как в подходе,

использованном выше, его присутствие было необходимым условием невзаимности транспортных свойств. Из анализа симметрии кинетических коэффициентов можно показать [20], что в киральной системе сопротивление двухполосника может содержать член вида $a\mathbf{I}\mathbf{B}$, где a — коэффициент, \mathbf{I} и \mathbf{B} — это ток и индукция магнитного поля, причем при смене киральности (с левой на правую и наоборот) коэффициент a должен менять знак. Этот вклад отвечает магнитокиральной анизотропии [20], и полученная выше зависимость (9) как раз ей и соответствует.

4. Необычный аномальный эффект Холла

В магнитоупорядоченной фазе в PdCrO_2 наблюдается аномальный эффект Холла, причем холловское сопротивление невозможно представить в виде суммы двух слагаемых, линейных по магнитному полю и намагниченности [15]. Поэтому его относят к УАНЕ. На рис. 3 представлены экспериментальные зависимости холловского сопротивления в PdCrO_2 в магнитоупорядоченной $T = 2\text{ К}$ и парамагнитной фазах $T = 40\text{ К}$. Существуют сложные модели этого эффекта с привлечением представлений о фазе Берри, рассеяния в некомпланарных магнитных системах и т.д. С другой стороны, ниже показано, что можно дать довольно простое объяснение, имея в виду несколько типов подвижных носителей заряда в магнитоупорядоченной фазе.

Выше уже отмечалось, что магнитный порядок приводит к реконструкции поверхности Ферми и появлению дырочного γ и электронного α листов. Причем подвижность дырок может быть значительно выше, чем электронов из-за спиновой текстуры (аномальная

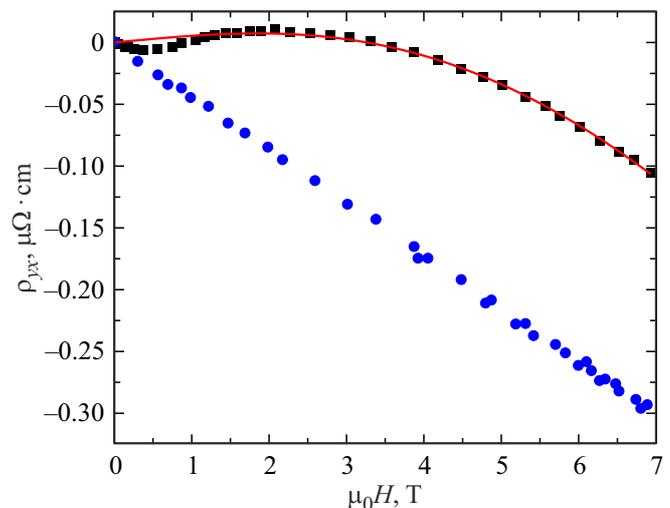


Рис. 3. Холловское сопротивление PdCrO_2 как функция магнитного поля при $T = 40\text{ К}$ (синий кружок), $T = 2\text{ К}$ (черный квадрат) из работы [15] и зависимость в двухзонной модели (сплошная линия).

проводимость) и блокировки процессов рассеяния с перебросом [19]. Тогда в рамках двухзонной модели коэффициент Холла в металле имеет хорошо известный вид [1]

$$R(H) = \frac{R_e \rho_h^2 + R_h \rho_e^2 + R_e R_h (R_e + R_h) B^2}{(\rho_e + \rho_h)^2 + (R_e + R_h)^2 B^2}, \quad (9)$$

где $\rho_{e(h)}$ и $R_{e(h)}$ — удельное сопротивление и константа Холла для электронной (e) и дырочной (h) зон, соответственно. При этом константа Холла, определенная в выражении (9), становится функцией магнитного поля [1].

На рис. 3 приведена зависимость $\rho_{yx} = BR$, где константа Холла определяется формулой (9) со следующими параметрами: $\rho_e = 3.76 \cdot 10^{-8} \text{ Ohm} \cdot \text{m}$, $\rho_h = 1.93 \cdot 10^{-7} \text{ Ohm} \cdot \text{m}$, $R_e = -7.08 \cdot 10^{-10} (\text{C} \cdot \text{m}^3)^{-1}$, $R_h = 2.09 \cdot 10^{-8} (\text{C} \cdot \text{m}^3)^{-1}$. Следует отметить, что подвижности электронов и дырок ($\mu = |R|/\rho$) при этом сильно отличаются: $\mu_e = 0.019 \text{ m}^2/\text{V} \cdot \text{s}$ и $\mu_h = 0.11 \text{ m}^2/\text{V} \cdot \text{s}$.

Приведенный выше пример показывает, что двухзонная модель хотя и является, видимо, слишком упрощенной для электронной структуры PdCrO_2 , тем не менее, позволяет описать УАНЕ в этом соединении естественным образом без привлечения сложных теоретических моделей.

5. Заключение

В настоящей работе предложена простая двумерная модель квазиизотропной текстурированной поверхности Ферми, соответствующая нетривиальной топологии зонной структуры гексагональных проводящих слоев в киральном магнитном (молекулярном) поле. Показано, что она позволяет объяснить все основные аномальные транспортные свойства магнитного металлического дельтафосфита PdCrO_2 . В частности, с микроскопической точки зрения, невзаимность электронного транспорта связана с тем обстоятельством, что поверхность Ферми со спиновой текстурой в магнитном поле становится асимметричной (без центра инверсии). Ранее было показано [19], что текстура поверхности Ферми приводит к аномально высокой проводимости, наблюдавшейся в PdCrO_2 . Давно известно, что в двухзонной модели металла константа Холла становится зависимой от магнитного поля [1]. Это дает возможность описать УАНЕ в PdCrO_2 в магнитной фазе.

Финансирование работы

Работа выполнена в рамках научной программы Национального центра физики и математики по направлению № 7 „Исследование в сильных и сверхсильных магнитных полях“.

Конфликт интересов

Автор заявляет, что у него нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] Н. Ашкрофт, Н. Мермин. Физика твердого тела. Т. 1, М.: Мир, 1979.
- [2] G. Tkachev. Topological Insulators, The Physics of Spin Helicity in Quantum Transport. Taylor & Francis Group LLC, Boca Raton, 2016.
- [3] C.-K. Chiu, J.C. Teo, A.P. Schnyder, S. Ryu. Rev. Mod. Phys. **88**, 035005 (2016).
- [4] M.V. Berry. Proc. R. Soc. Lond. **A 392**, 45 (1984).
- [5] B.A. Bernevig, C. Felser, H. Beidenkopf. Nature **603**, 41 (2022).
- [6] X. Yao, J. Gaudet, R. Verma, D.E. Graf, H.-Y. Yang, F. Bahrami, R. Zhang, A.A. Aczel, S. Subedi, D.H. Torchinsky, J. Sun, A. Bansil, S.-M. Huang, B. Singh, P. Blaha, P. Nikolic, F. Tafti. Rev. Rev. X **13**, 011035 (2023).
- [7] Ю.Б. Кудасов. Письма в ЖЭТФ **120**, 430 (2024).
- [8] Yu.B. Kudasov. Phys. Rev. B **109**, L140402 (2024).
- [9] Ю.Б. Кудасов. ФТТ **65**, 937 (2023).
- [10] A.P. Mackenzie. Rep. Prog. Phys. **80**, 032501 (2017).
- [11] F. Lechermann. Phys. Rev. Mater. **2**, 085004 (2018).
- [12] H. Usui, M. Ochi, S. Kitamura, T. Oka, D. Ogura, H. Rosner, M.W. Haverkort, V. Sunko, P.D.C. King, A.P. Mackenzie, K. Kuroki. Phys. Rev. Mat. **3**, 045002 (2019).
- [13] H. Takatsu, G. Nener, H. Kadowaki, H. Yoshizawa, M. Enderle, S. Yonezawa, Y. Maeno, J. Kim, N. Tsuji, M. Takata, Y. Zhao, M. Green, C. Broholm. Phys. Rev. B **89**, 104408 (2014).
- [14] M. Akaike, Y. Nii, H. Masuda, Y. Onose. Phys. Rev. B **103**, 184428 (2021).
- [15] H. Takatsu, S. Yonezawa, S. Fujimoto, Y. Maeno. Phys. Rev. Lett. **105**, 137201 (2010).
- [16] C.W. Hicks, A.S. Gibbs, A.P. Mackenzie, H. Takatsu, Y. Maeno, E.A. Yelland. Phys. Rev. Lett. **109**, 116401 (2012).
- [17] D. Billington, D. Ernting, T.E. Millichamp, C. Lester, S.B. Dugdale, D. Kersh, J.A. Duffy, S.R. Giblin, J.W. Taylor, P. Manuel, D.D. Khalyavin, H. Takatsu. Sci. Rep. **5**, 12428 (2015).
- [18] C.W. Hicks, A.S. Gibbs, L. Zhao, P. Kushwaha, H. Borrmann, A.P. Mackenzie, H. Takatsu, S. Yonezawa, Y. Maeno, E.A. Yelland. Phys. Rev. B **92**, 014425 (2015).
- [19] Ю.Б. Кудасов. Письма в ЖЭТФ **113**, 168 (2021).
- [20] G.L.J.A. Rikken, J. Fölling, P. Wyder. Phys. Rev. Lett. **87**, 236602 (2001).
- [21] Ф. Блатт. Физика электронной проводимости в твердых тела, М.: Мир, 1971.
- [22] A.A. Fraerman, O.G. Udalov. Phys. Rev. B **77**, 094401 (2008).

Редактор В.В. Емцев