Письма в ЖЭТФ, том 122, вып. 6, с. 351 – 353

URhGe – альтермагнитный ферромагнетик

В. П. Минеев[1)]

Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау, 142432 Черноголовка, Россия

Поступила в редакцию 22 июля 2025 г.
После переработки 12 августа 2025 г.
Принята к публикации 12 августа 2025 г.

Хорошо известно, что аномальный эффект Холла в ферромагнитных и сильно парамагнитных металлах, помимо асимметричного рассеяния электронов на примесях, определяется кривизной Берри – квантово-механическим свойством электронных состояний идеального кристалла. Однако экспериментально было установлено, что холловская компонента сопротивления в ферромагнитном соединении URhGe не зависит от кривизны Берри. Кристаллическая симметрия этого вещества включает операцию обращения времени только в сочетании с поворотами и отражениями кристаллической решетки, что характерно для так называемых альтермагнитных материалов. Показано, что строго нулевая кривизна Берри является следствием несимморфной кристаллической симметрии URhGe.

DOI: 10.31857/S0370274X25090161, EDN: NZLTMI

Металлическое соединение урана URhGe, обладающее множеством необычных свойств, на протяжении длительного времени привлекает внимание исследователей (см. экспериментальный обзор [1] и недавнюю теоретическую работу [2], а также ссылки в них). Оно имеет орторомбическую кристаллическую структуру и анизотропные магнитные свойства. Ниже температуры Кюри $T_c = 9.5\,\mathrm{K}$ URhGe переходит в ферромагнитное состояние с магнитным моментом вдоль c-кристаллографического направления, а затем при $T_{sc} \approx 0.25\,\mathrm{K}$ становится сверхпроводящим. Результаты измерений эффекта Холла в URhGe были представлены в статье Д. Аоки и соавторов [3].

Сопротивление Холла ρ_{xy} в ферромагнитных и сильно парамагнитных веществах описывается уравнением

$$\rho_{xy} = R_0 H + R_s M, \tag{1}$$

где R_0 – нормальный коэффициент Холла, а второй член соответствует аномальному эффекту Холла, возникающему благодаря намагниченности M. Аномальный эффект Холла обусловлен внешней составляющей, определяемой асимметричным рассеянием электронов на примесях (*skew scattring*) и процессами рассеяния, включающими боковые прыжки (*side jumps*), и внутренней составляющей, определяемой кривизной Берри Ω_{xy}, являющейся собственным свойством зонной структуры чистого кристалла [4, 5]. Для определения коэффициента Холла R_0 данные по холловскому сопротивлению для направления поля вдоль оси c были представлены [3] в виде

$$\rho_{xy}/H = R_0 + c\rho M/H, \tag{2}$$

подразумевающем, согласно авторам [3], что аномальный эффект Холла обусловлен главным образом асимметричным рассеянием, т.е. $R_s \propto \rho$. Была обнаружена хорошая линейная зависимость ρ_{xy}/H от $\rho M/H$ в широком диапазоне температур от 300 до 12 К. Аналогичная линейная зависимость имеет место и в ферромагнитном состоянии в интервале температур от 2 до 3 К.

На самом деле, установленная линейная зависимость означает, что при каждой температуре аномальное холловское сопротивление в URhGe полностью определяется процессами электронного рассеяния, включая не только асимметричное рассеяние, но и множество других процессов. Объяснение этому наблюдению в настоящее время отсутствует. Можно лишь сказать вслед за авторами обзора [5]: "Разработка теоретического описания для этих вкладов представляется крайне сложной, если не невозможной задачей".

Таким образом, из результатов [3] следует, что внутренний механизм, определяемый кривизной Берри, не играет никакой роли в объяснении аномального эффекта Холла в URhGe. Соображения симметрии, представленные в настоящем письме, позволяют доказать, что кривизна Берри Ω_{xy} в URhGe строго равна нулю.

URhGe кристаллизуется в орторомбической кристаллической структуре *Pnma* типа TiNiSi, где че-

[1)]e-mail: mineev@itp.ac.ru

тыре атома U (а также 4 атома Ge и 4 атома Rh) расположены в четырех различных положениях

$$U_1 = \left(x, \frac{1}{4}, z\right),\ U_2 = \left(\bar{x}, \frac{3}{4}, \bar{z}\right), \tag{3}$$
$$U_3 = \left(\frac{1}{2} - x, \frac{3}{4}, \frac{1}{2} + z\right),\ U_4 = \left(\frac{1}{2} + x, \frac{1}{4}, \frac{1}{2} - z\right)$$

в элементарной ячейке с параметрами решетки (a, b, c) [6]. Координаты здесь записаны в единицах параметров решетки, $\bar{x} = -x$ и т.д., точки x и $x+1$ и т.д. неразличимы. Все атомы обладают магнитным моментом вдоль направления c, либо наведенным внешним полем в парамагнитном состоянии, либо спонтанным в ферромагнитном состоянии. Несимморфная группа симметрии такого кристалла состоит из 8 элементов g_i, $i = 1, ...8$

$$\mathbf{D}_{2h}^{ns}(\mathbf{C}_{2h}) = \tag{4}$$
$$= (E, I, RC_{2y}, R\sigma_y, t_d RC_{2x}, t_d R\sigma_x, t_{xz}C_{2z}, t_{xz}\sigma_z).$$

Здесь C_{2x}, C_{2y}, C_{2z} – повороты на угол π вокруг осей (x, y, z), направленных вдоль кристаллографических направлений (a, b, c), $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ и т.д. – отражения в плоскостях, перпендикулярных этим осям, R – операция отражения времени, а I – операция пространственной инверсии. Операции $t_d = \{(x, y, z) \to (x + + \frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2})\}$ и $t_{xz} = \{(x, y, z) \to (x + \frac{1}{2}, y, z + \frac{1}{2})\}$ соответствуют сдвигу на полпериода по диагонали элементарной ячейки и на полпериода в плоскости (xz). Под действием операций симметрии атомные позиции переходят друг в друга, как указано в следующей таблице (см. также [7]).

g_i	U_1	U_2	U_3	U_4
E	U_1	U_2	U_3	U_4
I	U_2	U_1	U_4	U_3
RC_{2y}	U_2	U_1	U_4	U_3
$R\sigma_y$	U_1	U_2	U_3	U_4
$t_d RC_{2x}$	U_4	U_3	U_2	U_1
$t_d R\sigma_x$	U_3	U_4	U_1	U_2
$t_{xz}C_{2z}$	U_3	U_4	U_2	U_1
$t_{xz}\sigma_z$	U_4	U_3	U_2	U_1

Электронный спектр металла, группа симметрии которого G (магнитный класс) содержит операцию обращения времени только в сочетании с поворотами или отражениями, имеет вид

$$\varepsilon_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = \varepsilon_{\mathbf{k}}\delta_{\alpha\beta} + \boldsymbol{\gamma}_{\mathbf{k}}\boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta}, \tag{5}$$

инвариантный относительно всех операций группы G. Здесь скалярная часть спектра $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ и векторная часть спектра $\boldsymbol{\gamma}_{\mathbf{k}}$ являются четными функциями импульса $\mathbf{k}$. $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ – матрицы Паули в спиновом пространстве. Такого типа металлы, выглядящие как антиферромагнетики или ферромагнетики в обратном пространстве, называются *альтермагнетиками* [8, 9]. В частности, URhGe является альтермагнитным ферромагнетиком.

Собственные значения матрицы (5) равны

$$\varepsilon_\lambda(\mathbf{k}) = \varepsilon_{\mathbf{k}} + \lambda\gamma, \qquad \lambda = \pm, \tag{6}$$

где $\gamma = |\boldsymbol{\gamma}_{\mathbf{k}}|$. Соответствующие собственные функции даются выражениями

$$\Psi_\alpha^+(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{2\gamma(\gamma + \gamma_z)}} \begin{pmatrix} \gamma + \gamma_z \\ \gamma_+ \end{pmatrix},$$
$$\Psi_\alpha^-(\mathbf{k}) = \frac{t_+^\star}{\sqrt{2\gamma(\gamma + \gamma_z)}} \begin{pmatrix} -\gamma_- \\ \gamma + \gamma_z \end{pmatrix}, \tag{7}$$

где $\gamma_\pm = \gamma_x \pm i\gamma_y$ и $t_+^\star = -\frac{\gamma_+}{\sqrt{\gamma_+\gamma_-}}$. Кривизна Берри для каждой зоны с $\lambda = \pm$ равна [10]

$$\Omega_{xy}^\lambda(\mathbf{k}) = i\left(\frac{\partial\Psi_\alpha^{\lambda\star}}{\partial k_x}\frac{\partial\Psi_\alpha^\lambda}{\partial k_y} - \frac{\partial\Psi_\alpha^{\lambda\star}}{\partial k_y}\frac{\partial\Psi_\alpha^\lambda}{\partial k_x}\right). \tag{8}$$

Межзонная кривизна Берри дается выражением [8]

$$\Omega_{xy}^{\text{int}}(\mathbf{k}) = \frac{\boldsymbol{\gamma}}{\gamma^3}\left(\frac{\partial\boldsymbol{\gamma}}{\partial k_x} \times \frac{\partial\boldsymbol{\gamma}}{\partial k_y}\right). \tag{9}$$

Как внутризонный, так и межзонный вклад в кривизну Берри определяется через векторную часть $\boldsymbol{\gamma}_{\mathbf{k}}$ электронного спектра. Для URhGe вектор $\boldsymbol{\gamma}_{\mathbf{k}}$, инвариантный относительно всех операций группы (4), равен

$$\boldsymbol{\gamma}_{\mathbf{k}} = \tilde{\gamma}_x \sin(k_x a)\sin(k_z c)\hat{x} - h\hat{z}, \tag{10}$$

где $-h\hat{z}$ – зеемановский член, возникающий вследствие спонтанной и индуцированной намагниченности. Здесь мы учли, что операция t_d в координатном пространстве соответствует сдвигу $(\pi/a, \pi/b, \pi/c)$ на половину базисного вектора в обратном пространстве. Операция t_{xz} в координатном пространстве соответствует сдвигу $(\pi/a, 0, \pi/c)$ на половину базисного вектора в обратном пространстве. Уравнение (10), определяющее вектор $\boldsymbol{\gamma}_{\mathbf{k}}$, является простейшим возможным выражением, обладающим необходимыми свойствами симметрии.

Вектор $\boldsymbol{\gamma}_{\mathbf{k}}$ в URhGe не зависит от $\hat{y}$- компоненты, а также от k_y-компоненты импульса. Следовательно, оба вклада в кривизну Берри строго равны нулю

$$\Omega_{xy}^\lambda(\mathbf{k}) = 0, \qquad \Omega_{xy}^{\text{int}}(\mathbf{k}) = 0. \tag{11}$$

Напротив, в металле с симморфной кристаллической симметрией

$$\mathbf{D}_{2h}(\mathbf{C}_{2h}) = (E, C_2^z, RC_2^x, RC_2^y, I, \sigma_z, R\sigma_x, R\sigma_y) \quad (12)$$

оба вклада в кривизну Берри имеют конечное значение. Вектор $\boldsymbol{\gamma}_{\mathbf{k}}$, инвариантный относительно всех операций группы (12), равен

$$\boldsymbol{\gamma}_{\mathbf{k}} = \tilde{\gamma}_x \sin(k_x a)\sin(k_z c)\hat{x} + \\ + \tilde{\gamma}_y \sin(k_y b)\sin(k_z c)\hat{y} - h\hat{z}, \quad (13)$$

кривизна Берри в каждой зоне равна

$$\Omega_{xy}^{\pm}(\mathbf{k}) = \pm\frac{1}{2}\frac{ab\tilde{\gamma}_x\tilde{\gamma}_y c_x c_y s_z^2 h}{[(\tilde{\gamma}_x s_x s_z)^2 + (\tilde{\gamma}_y s_y s_z)^2 + h^2]^{3/2}}, \quad (14)$$

и межзонная кривизна Берри имеет вид

$$\Omega_{xy}^{\mathrm{int}}(\mathbf{k}) = -\frac{ab\tilde{\gamma}_x\tilde{\gamma}_y c_x c_y s_z^2 h}{[(\tilde{\gamma}_x s_x s_z)^2 + (\tilde{\gamma}_y s_y s_z)^2 + h^2]^{3/2}}. \quad (15)$$

Здесь для краткости были введены обозначения $s_x = \sin(k_x a)$, $s_y = \sin(k_y b)$, $s_z = \sin(k_z c)$, $c_x = \cos(k_x a)$, $c_y = \cos(k_y b)$.

На самом деле, URhGe обладает несимморфной симметрией $\mathbf{D}_{2h}^{ns}(\mathbf{C}_{2h})$, и вывод о конечной кривизне Берри электронных состояний в URhGe, основанный на симметрии $\mathbf{D}_{2h}(\mathbf{C}_{2h})$, сделанный в [8], неверен.

Следует отметить, однако, что теоретическое рассмотрение сверхпроводимости в URhGe, основанное на симметрии $\mathbf{D}_{2h}(\mathbf{C}_{2h})$, тем не менее справедливо. Для сверхпроводящих свойств важна симметрия материала на пространственных масштабах, больших по сравнению с межатомными расстояниями, где разница между $\mathbf{D}_{2h}(\mathbf{C}_{2h})$ и $\mathbf{D}_{2h}^{ns}(\mathbf{C}_{2h})$ несущественна. То же самое справедливо и в отношении трактовки пьезомагнетизма в URhGe на основе симметрии $\mathbf{D}_{2h}(\mathbf{C}_{2h})$, предложенной в статье [11] и недавно подтвержденной эксперментально С. Йонезава с соавторами [12].

В заключение сформулирем вывод работы: строго нулевая кривизна Берри электронных состояний в URhGe является прямым следствием несимморфной кристаллической симметрии этого материала.

Финансирование работы. Данная работа финансировалась за счет средств бюджета института. Никаких дополнительных грантов на проведение или руководство данным конкретным исследованием получено не было.

Конфликт интересов. Автор данной работы заявляет, что у него нет конфликта интересов.

1. D. Aoki, K. Ishida, and J. Flouquet, J. Phys. Soc. Jpn. **88**, 022001 (2019).
2. V. P. Mineev, J. Phys. Soc. Jpn. **93**, 064705 (2024).
3. D. Aoki, G. Knebel, and J. Flouquet, J. Phys. Soc. Jpn. **83**, 094719 (2014).
4. N. A. Sinitsyn, Q. Niu, J. Sinova, and K. Nomura, Phys. Rev. B **72**, 045346 (2005).
5. N. Nagaosa, J. Siniva, Sh. Onoda, A. H. MacDonald, and N. P. Ong, Rev. Mod. Phys. **82**, 1539 (2010).
6. V. H. Tran, R. Troc, and G. Andre, J. Magn. Magn. Mater. **186**, 81 (1998).
7. A. B. Shick, Phys. Rev. B **65**, 180509(R) (2002).
8. V. P. Mineev, Pis'ma v ZhETF **121**, 441(2025) [JETP Lett. **121**, 4212025].
9. V. P. Mineev, Phys.-Uspekhi, to be published (2025); arXiv:250401686v2 [cond-mat.str-el].
10. D. Xiao, M.-Ch. Chang, and Q. Niu, Rev. Mod. Phys. **82**, 1959 (2010).
11. V. P. Mineev, ZhETF **159**, 653 (2021) [JETP **132**, 556 (2021)].
12. M. Tomikawa, R. Araki, A. Ikeda, A. Nakamura, D. Aoki, K. Ishida, and S. Yonezawa, Phys. Rev. B **110**, L100408 (2024).