

01,11

Спиновые и зарядовые флуктуации в твердых растворах замещения титана металлами группы железа

© А.А. Повзнер, А.Г. Волков, Н.А. Зайцева

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

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

Поступила в Редакцию 30 июня 2022 г.

В окончательной редакции 30 июня 2022 г.

Принята к публикации 9 августа 2022 г.

Рассмотрены возникающие при увеличении концентрации атомов замещения в твердых растворах титана с металлами группы железа топологические электронные переходы из омега- в альфа-фазу и из альфа- в бета-фазу. Получено, что вследствие различия потенциалов хаббардовского отталкивания титана и атомов замещения, а также температурных бозе-возбуждений, в топологической альфа-фазе усиливаются спиновые и зарядовые флуктуации электронной плотности. Учет флуктуаций позволяет описать концентрационное возрастание энтропии фаз, рассматриваемых титановых сплавов при различных температурах. Усиление электронных флуктуаций с увеличением температуры и концентрации, сдвигает химический потенциал за пределы топологической области электронного спектра, тем самым подавляя альфа-фазу и индуцируя электронный переход в бета-фазу. На примере расчетов энтропии сплавов замещения титана железом при различных температурах построена $x-T$ диаграмма их структурных фаз, которая согласуется с имеющимися экспериментальными данными.

Ключевые слова: твердые растворы, топологические электронные переходы, спиновые и зарядовые флуктуации, энтропия, структурные фазы.

DOI: 10.21883/FTT.2022.12.53635.432

1. Введение

Известно, что альфа-фаза титана возникает из омега-фазы вследствие вызванного изменением температуры или давления, энергетического сдвига уровня химического потенциала в область топологических особенностей электронного спектра [1–3]. При этом, как было показано в [2,3] возникает связанная с изменением знака параметра мода-мода термодинамическая неустойчивость волн спиновой и зарядовой плотности, приводящая к возникновению топологически индуцированных электронных флуктуаций. Переход в бета-фазу, напротив характеризуется исчезновением этой неустойчивости, что приводит в соответствии с принципом максимума энтропии к переходу в ОЦК-структуру. При этом попытки объяснения возникновения термодинамически устойчивой бета-фазы, основанные на представлении об аномально большой колебательной энтропии, связанной с решеточным ангармонизмом, оказываются противоречивыми поскольку приводят к мнимым фоннным модам [4]. Прямые первопринципные GGA + U расчеты фоннного и электронного спектров титана [5] указывают на значительный вклад в термодинамический потенциал бета-фазы связанный с d -электронами.

В работе [6] на основе первопринципных расчетов теплот образования было показано, что при замещении атомов титана переходными металлами возникают концентрационные электронные превращения между альфа-, бета- и омега структурными фазами. Однако

в выполненных расчетах не были рассмотрены топологические особенности электронной структуры альфа-фазы, приводящие к резкому усилению флуктуаций электронной плотности и к возникновению значительного флуктуационного вклада в энтропию. Поэтому в таком подходе описывается только метастабильное состояние структурной альфа-фазы, и возникают трудности в понимании температурно-концентрационных переходов между структурными фазами взаимных твердых растворов замещения титана переходными металлами. В частности не было получено согласие с экспериментальными данными об $x-T$ диаграмме сплавов возникающих при замещении титана примесями железа ($x \ll 1$) в температурной области перехода из альфа- в бета-фазу.

Остается открытым вопрос об особенностях влияния на энтропию структурных фаз рассматриваемых сплавов титана, хаббардовских корреляций в системе d -электронов. При этом вследствие различия параметров хаббардовского внутриатомного отталкивания (U) для атомов титана и атомов замещения, должны возникать флуктуации U на узлах, влияние которых на термодинамическую устойчивость структурных фаз до сих пор не изучено.

В настоящей работе развивается модель электронной структуры твердых растворов замещения титана переходными металлами, на основе результатов DFT + U первопринципных расчетов зонной структуры титана с дополнительным учетом хаббардовских корреляций и флуктуаций хаббардовских потенциалов. Показано, что

при увеличении концентрации (x) $3d$ -атомов замещения, в рассматриваемых сплавах реализуется картина концентрационного топологического электронного перехода (ТЭП) из омега- в бета-состояние через промежуточную альфа-фазу. Анализ концентрационных зависимостей энтропии, приводит к $x-T$ диаграмме структурных фаз взаимных твердых растворов замещения титана железом, согласующейся с экспериментальными данными.

2. Модель

Рассмотрим модель электронной системы хаотических сплавов титана с переходными металлами с гамильтонианом, включающим слагаемое зонного движения s -, p -, d -электронов и слагаемое хаббардовских корреляций d -электронов Ti и атомов замещения

$$H = H_{s,p} + H_d. \quad (1)$$

Здесь, $H_{s,p}$ — гамильтониан почти свободных s -, p -электронов, а подсистема d -электронов описывается моделью Хаббарда, в которой наряду со слагаемым зонного движения учитываются межэлектронные корреляции, связанные с внутриатомным кулоновским взаимодействием на узлах, занятых титаном, со значением параметра хаббардовского взаимодействия U_1 , и атомами замещения, со значением параметра хаббардовского отталкивания U_2 :

$$H_d = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}}(V) a_{\mathbf{k}, \sigma}^+ a_{\mathbf{k}, \sigma} + \bar{U} \sum_{\mathbf{q}} (|n_{\mathbf{q}}/2|^2 - |S_{\mathbf{q}}^{(z)}|^2) + \sum_{\mathbf{v}} \Delta U_{\mathbf{v}} (|n_{\mathbf{v}}/2|^2 - |S_{\mathbf{v}}^{(z)}|^2), \quad (2)$$

где

$$n_{\mathbf{q}} = \sum_{\sigma=\pm 1} n_{\mathbf{q}, \sigma}, \quad S_{\mathbf{q}}^{(z)} = 2^{-1} \sum_{\sigma=\pm 1} \sigma n_{\mathbf{q}, \sigma},$$

$$n_{\mathbf{q}, \sigma} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} a_{\mathbf{k}, \sigma}^+ a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}$$

— Фурье-образ оператора числа d -электронов на узле \mathbf{v} со спином $\sigma/2$: $n_{\mathbf{v}} = a_{\mathbf{v}, \sigma}^+ a_{\mathbf{v}, \sigma}$; $a_{\mathbf{k}, \sigma}^+$ ($a_{\mathbf{k}, \sigma}$) — оператор рождения (уничтожения) электрона с квазиимпульсом \mathbf{k} и спином $\sigma/2$; $\sigma = \pm 1$ — спиновый индекс; $\varepsilon_{\mathbf{k}}(V)$ — DFT+U-электронный спектр d -электронов, $\bar{U} = U_1(1-x) + U_2x$ — среднее значение параметра хаббардовского отталкивания на узле; $x = N_0^{-1} \sum_{\mathbf{v}} p_{\mathbf{v}}$ — атомная концентрация d -примесей замещения; $p_{\mathbf{v}}$ — проекционный оператор равный „+1“, если узел занят ионом титана и „-1“ — в противном случае; $\Delta U_{\mathbf{v}} = (U_1 - U_2)(p_{\mathbf{v}} - x)$. Зависимость электронного спектра от объема описывается в модели Хейне [7] для негибридизованных d -электронов, согласно которой при изменении объема от V_0 до V : $\varepsilon_{\mathbf{k}}(V) = (V/V_0)^{-5/3} \varepsilon_{\mathbf{k}}^{(\text{DFT})}$.

Статистическая сумма рассматриваемой электронной системы выражается через статистические суммы s -, p -

и d -электронов и описывается выражением

$$Z = Sp\{\exp(-H/T)\} = Z_d Z_{s,p}.$$

Здесь статистическая сумма почти свободных s -, p -электронов определяется через их плотность состояний ($g_{s,p}^{(0)}(\varepsilon)$) рассчитанную в приближении DFT+U [3] и описывается известным выражением, содержащим функцию распределения Ферми–Дирака ($f_F(\varepsilon, \mu)$),

$$Z_{s,p} = \exp\left\{-\int d\varepsilon g_{s,p}^{(0)}(\varepsilon) \ln(1 - f_F(\varepsilon, \mu))\right\}.$$

Статистическая сумма сильно коррелированных d -электронов с гамильтонианом Хаббарда (2) вычисляется с использованием преобразований Стратоновича–Хаббарда, сводящих учет хаббардовского взаимодействия, представленного в виде квадратичных форм по операторам спиновой и зарядовой плотности к исследованию движения электронов во флуктуирующих в пространстве и во времени обменных (ξ) и зарядовых (η) полях [8]. При этом используя для учета динамических флуктуаций представление мацубаровских четырех импульсов $q = (\mathbf{q}, \omega_{2m})$ [9], и разлагая по флуктуирующим полям, имеем

$$Z_d = Z_d^{(\text{DFT})} \times \int (d\eta d\xi) \exp\left\{-\sum_{q(\neq 0)} (|\eta_q|^2 - |\xi_q|^2) - T^{-1} \Phi_d(\xi, \eta)\right\}. \quad (3)$$

Здесь

$$\Phi_d(\xi, \eta) = T \sum_q \chi_q^{(0)} (|\xi_q|^2 - |\hat{\eta}_q|^2) + (4!)^{-1} \kappa(\mu, V) T \times \sum_{q_1, q_2, q_3, q_4} \delta_{\Sigma, q_i; 0} (\xi_{q_1} \xi_{q_2} \xi_{q_3} \xi_{q_4} - 2\xi_{q_1} \xi_{q_2} \hat{\eta}_{q_3} \hat{\eta}_{q_4} + \hat{\eta}_{q_1} \hat{\eta}_{q_2} \hat{\eta}_{q_3} \hat{\eta}_{q_4})$$

учитывает пространственно-временные зависимости флуктуирующих полей описываемых введением функция Линдхарда $\chi_z^{(0)}(V)$,

$$\hat{\eta}_q = \eta_q + \Delta u \sum_q \Delta p_{q+q'} \eta_{q'}, \quad \eta_q = \eta_q^{(1)} + i\eta_q^{(2)},$$

$$\xi_q = \xi_q + \Delta u \sum_q \Delta p_{q+q'} \xi_{q'}, \quad \xi_q = \xi_q^{(1)} + i\xi_q^{(2)},$$

$$\xi_q = r_q \exp(i\varphi_q), \quad \Delta u = \bar{U}^{-1/2} (U_1^{1/2} - U_2^{1/2}), \quad \Delta p_q (\sim \delta_{\omega, 0})$$

— Фурье-образ проекционного оператора,

$$(d\xi d\eta) = d\xi_0 d\eta_0 \prod_{q \neq 0, j=1,2} d\xi_q^{(j)} d\eta_q^{(j)}$$

(индекс j нумерует реальную и мнимую части), μ — химический потенциал, самосогласованное определение которого рассмотрено ниже.

Выражение (3) включает межмодовые взаимодействия с параметром

$$\kappa(\mu, V) = \bar{U}^3 \left((g_d^{(1)}(\mu))^2 / g_d^{(0)}(\mu) - g_d^{(2)}(\mu) \right), \quad (4)$$

определяемым через плотность электронных состояний d -электронов (DOS) чистого титана и ее l -ых производных: $g_d^{(0)}(\varepsilon)$ и $g_d^{(l)}(\varepsilon)$, в DFT+U-приближении [2,3]. Аналогичный параметр фигурирует в функционале Гинзбурга–Ландау–Бразовского [10], причем в случае смены знака этого параметра с положительного на отрицательный этот функционал описывает индуцированный флуктуациями затянутый фазовый переход первого рода. Согласно (4) знак параметра мода-мода определяется производными DOS, которые могут быть связаны с топологическими особенностями электронного спектра.

3. Функционал свободной энергии и энтропия

Используя выражение для статистической суммы (3), рассмотрим состояние термодинамического равновесия электронной системы, на основе принципов минимума термодинамического потенциала при постоянном давлении

$$G_{el} = T \ln Z + KV^2/2 + \mu N,$$

где K — модуль всестороннего сжатия.

Определение термодинамического минимума свободной энергии сводится к вычислению статистической суммы с использованием условий седловой точки по переменным $\eta_q^{(j)}$, $\xi_q^{(1,2)}$ и $r_q = |\xi_q|$ ($\xi_q = r_q \exp(i\phi_q)$), с сохранением интегрирования по ω при $\omega_{2m} \neq 0$, которые следует дополнить условием минимизации по объему. В приближении седловой точки получаем функционал свободной энергии типа Гинзбурга–Ландау

$$\begin{aligned} F_{el} = & 2T \int (g_d(\varepsilon, x, \Delta u) + g_{s,p}(\varepsilon)) \ln(1 + \exp((\mu - \varepsilon)/T)) \\ & \times d\varepsilon + T\lambda(\mu) (\langle \xi^2 \rangle + \langle m^2 \rangle - \langle \eta^2 \rangle) + T(4!)^{-1} \\ & \times \kappa(\mu) (\langle \xi^2 \rangle - \langle \eta^2 \rangle)^2 + \lim_{\delta \rightarrow 0} \sum_{\mathbf{q}} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega f_B(\omega/T) \\ & \times \ln[1 - \bar{U}\chi^{(0)}(\mathbf{q}, \omega + i\delta) + \lambda(\mu)], \end{aligned} \quad (5)$$

описывающий флуктуационную фазу (профаза которой соответствует спиновому и/или зарядовому упорядочению в системе d -электронов) с пространственными флуктуациями волн спиновой (ВСП) — $\langle \xi^2 \rangle$ и зарядовой (ВЗП) — $\langle \eta^2 \rangle$ плотностей, реализуемыми в условиях отрицательной межмодовой связи

$$\begin{aligned} & (\langle \eta^2 \rangle - 2\langle \xi^2 \rangle)(1 + \Delta u^2) \\ & = -\kappa^{-1}(\mu, V)(1 + \bar{U}g_d^{(0)}(\mu)) - 2\langle m^2 \rangle, \end{aligned} \quad (6a)$$

$$\begin{aligned} & (\langle \xi^2 \rangle - 2\langle \eta^2 \rangle)(1 + \Delta u^2) \\ & = -\kappa^{-1}(\mu, V)(1 - \bar{U}g_d^{(0)}(\mu)) + 2\langle m^2 \rangle. \end{aligned} \quad (6b)$$

Причем из условий седловой точки по r_q , следует выражение для среднеквадратической амплитуды тепловых флуктуаций спиновой плотности, согласующиеся с флуктуационно-диссипативной теоремой

$$\begin{aligned} \langle m^2 \rangle & = \langle m^2 \rangle_T + 2\Delta u^2 n_d^2 x(1+x), \\ \langle m^2 \rangle_T & = (T/\bar{U}) \{1 - \bar{U}g_d^{(0)}(\mu) + \lambda(\mu, V)\}^{-1}, \\ \lambda(\mu, V) & = \kappa(\mu, V) (\langle m^2 \rangle + \langle \xi^2 \rangle - \langle \eta^2 \rangle). \end{aligned} \quad (7)$$

Параметр мода-мода, связан с первой и второй производной плотности состояний d -электронов при энергии равной энергии химического потенциала (см. (4)), определяемого условиями электронейтральности, которое при $x \ll 1$ приближенно имеет вид

$$N = \partial F / \partial \mu,$$

$$\begin{aligned} N/N_0 & \approx 2 \int (g_{s,p}^{(0)}(\varepsilon) + g_d(\varepsilon, x, \Delta u)) f(\varepsilon - \mu) d\varepsilon \\ & + \bar{U}g_d^{(1)}(\mu) (\langle m^2 \rangle_T + \langle \xi^2 \rangle - \langle \eta^2 \rangle / 4), \end{aligned} \quad (8)$$

где

$$\begin{aligned} g_d(\varepsilon, x, \Delta u) & = 2^{-1} \sum_{\alpha=\pm 1} g_d^{(0)}(\varepsilon + \alpha \Delta u n_d \sqrt{x(1-x)}) \\ & \approx 2^{-1} \sum_{\alpha=\pm 1} g_d^{(0)}(\varepsilon) + g_d^{(2)}(\varepsilon) \Delta u n_d \sqrt{x(1-x)}. \end{aligned}$$

Кроме того получаем что при переходе из альфа- в омега- или бета-фазу имеет место уменьшение объема которое, в соответствии с условием минимума свободной энергии по объему при фиксированном атмосферном давлении p_0 , определяется выражением

$$\begin{aligned} \Delta V & \cong -|\kappa^{-1}(\mu, V)|^2 (\bar{U}g_d(\mu, x, V))^2 (1 + \Delta U^2/U^2) \\ & \times [\langle \xi^2 \rangle - \langle \eta^2 \rangle] / (3p_0). \end{aligned}$$

Термодинамически устойчивые состояния системы будем определять, в условиях минимума энергии Гиббса, с учетом требования максимума энтропии. Энтропия электронной системы зависит от температуры, объема и концентрации x :

$$S_{el} = S_F + S_{fl} + S_{pm}, \quad (9)$$

и наряду с энтропией фермиевских возбуждений d - и s - p -электронов

$$\begin{aligned} S_F = & \int d\varepsilon g_d(\varepsilon, x, \Delta u) \left[f(\varepsilon - \mu) \ln f(\varepsilon - \mu) \right. \\ & \left. + (1 - f(\varepsilon - \mu)) \ln(1 - f(\varepsilon - \mu)) \right], \end{aligned} \quad (9a)$$

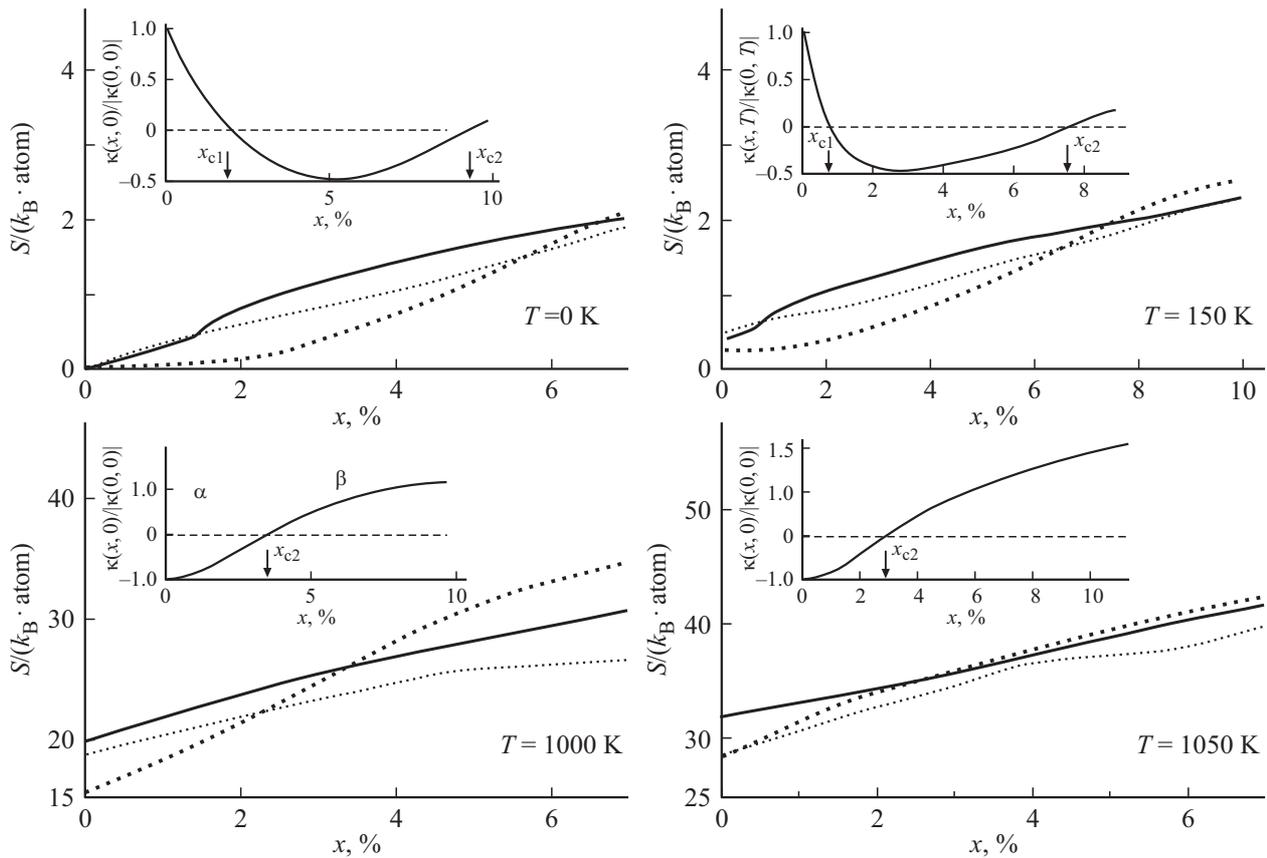


Рис. 1. Зависимости энтропии сплавов $\text{Ti}_{1-x}\text{Fe}_x$ от концентрации железа (x) при фиксированных температурах, полученные с учетом результатов DFT + U расчетов $g_{s,p,d}^{(0)}(\varepsilon)$ [1,2] для α -фазы (сплошная линия), β -фазы (точки), ω -фазы (пунктир), отсчитанные от значения энтропии ω -фазы при $x = 0$ и $T = 0$ К. На вставках показаны концентрационные зависимости коэффициента межмодового взаимодействия (4) при фиксированных температурах.

содержит флуктуационный и парамагнетонный вклады

$$S_{fl} = -\kappa(\mu)^2 \left(\langle \xi^2 \rangle - \langle \eta^2 \rangle + \langle m^2 \rangle_T - \Delta u^2 n_d^2 x(1-x) \right)^2, \quad (9b)$$

$$S_{pm} = \lim_{\delta \rightarrow 0} \sum_{\mathbf{q}} T^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega f_B(\omega/T) \times \ln [1 - \bar{U} \chi^{(0)}(\mathbf{q}, \omega + i\delta) + \lambda(\mu)]. \quad (9c)$$

Кроме того, для определения концентрационных границ, возникающих в сплавах замещения титана 3d-металлами структурных фаз необходим анализ полученных формул с дополнительным учетом вкладов s -, p -электронов и фононов в свободную энергию и энтропию.

4. Численный анализ

Рассмотрим концентрационный ТЭП, связанный с возникновением (или исчезновением) альфа-фазы в титановых сплавах, на примере замещения титана железом. При этом будем учитывать не только сдвиг

уровня энергии химического потенциала за счет изменения числа d -электронов, но и энергетический сдвиг химического потенциала связанный с флуктуациями электронной плотности (6), (7) и различием хаббардовских потенциалов титана ($U_1 = 1.75$ eV) и атомов замещения железа ($U_2 = 1.2$ eV). Плотности электронных состояний альфа-, бета- и омега-фазах чистого титана рассчитанные в приближении DFT + U совпадают с полученными и описанными в работах [1–3]. При этом осуществляя аппроксимацию DOS d -электронов в энергетической окрестности химического потенциала полиномами (см. [2,3]), можно описать смену знака параметров мода-мода при переходах между фазами.

В выражение для энергии Гиббс $G = G_d + G_{sp} + G_{ph}$ наряду со слагаемым связанным с d -подсистемой рассматривается вклад s -, p -электронов и дополнительно учтен фононный вклад, который рассматривается в модели Дебая: $G_{ph} = TD(T/\theta_D)$, где $D(T/\theta_D)$ — интеграл Дебая, с характерной температурой

$$\theta_D(x) = (1-x)\theta_D^{(\text{Ti})} + x\theta_D^{(\text{Fe})} \quad [11].$$

Кроме того, учтем, что в соответствии с термодинамическим определением энтропии его выражение

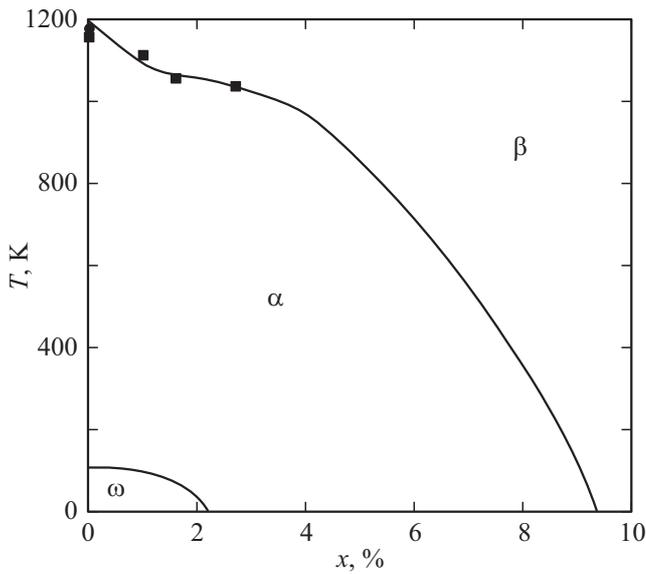


Рис. 2. Сплошные линии — концентрационно температурные границы структурных фаз $x_{c1}(T)$ и $x_{c2}(T)$. Экспериментальные данные: круг — [12], квадраты — [6].

$S = S_{el} + S_{ph}$, наряду с электронным вкладом (9), включает фоновый

$$S_{ph} = 36D(\theta_D/T) - 9(\theta_D/T)(\exp(\theta_D/T) - 1)^{-1}.$$

При расчетах концентрационных зависимостей энтропии, учитывались особенности кривизны плотности состояний вблизи энергий химического потенциала, приводящие к смене знака параметра мода-мода и к возникновению пространственных флуктуаций (6), а также условие электронейтральности (8).

На рис. 1 представлены результаты расчетов энтропии фаз твердых растворов замещения титана железом при различных температурах. Из результатов расчетов энтропии можно видеть что возникающий при значениях x_{c1} переход из ГУ ω -фазы в топологическую ГПУ α -фазу, сопровождается изменением знака параметра мода-мода с положительного на отрицательный (вставки на рис. 1), причем имеет место выигрыш в энтропии альфа-фазы за счет флуктуационного вклада (9b). При $x_{c2}(T)$ ГПУ альфа-фаза теряет термодинамическую устойчивость (рис. 1) и возникает ОЦК бета-фаза. Этот фазовый переход сопровождается изменением знака параметра мода-мода с отрицательного на положительный. В результате энтропия бета-фазы начинает превалировать по сравнению с энтропией других фаз.

На рис. 2 представлена $x-T$ диаграмма структурных фаз твердого раствора замещения атомов титана железом. Видно, что омега-фаза сохраняется вблизи основного состояния вплоть до концентрации $x_{c1} = 2.1\%$ (см. также рис. 1). Однако с увеличением температуры возникает флуктуационный сдвиг химпотенциала, в сторону топологически обусловленных особенностей DOS, что ведет к сокращению концентрационного интервала

Значения критических концентраций $\omega-\alpha$ и $\alpha-\beta$ фазовых переходов x_{c1} и x_{c2} при $T \rightarrow 0$ К

$Ti_{1-x}Fe_x$	Переход	Расчет в настоящей работе		Результаты расчетов в [6]
		Без учета $\langle \Delta p^2 \rangle$	С учетом $\langle \Delta p^2 \rangle$	
	$\omega - \alpha$	3.5	2.1	2.15
	$\alpha - \beta$	15.4	9.41	7.5

омега-фазы (рис. 2). Интервал альфа-фазы вблизи основного состояния сохраняется вплоть до $x_{c2} = 9.41\%$, после чего реализуется бета-фаза (см. рис. 1, 2).

Таким образом видно, что рассмотренный на примере твердых растворов замещения титана железом концентрационный переход из ГУ омега-фазы в ОЦК бета-фазу осуществляется через индуцированную флуктуациями электронной плотности топологическую альфа-фазу. При этом температурно-концентрационные границы термодинамически стабильных фаз найденные в настоящей работе и фаз метастабильных сплавов замещения титана железом полученных в [6] (и по-видимому и другими переходными металлами!) количественно отличаются (см. таблицу).

5. Заключение

Рассмотренные здесь электронные переходы между структурными состояниями титановых сплавов связаны с изменением знака межмодового взаимодействия флуктуаций электронной плотности. Переход из омега- в альфа-фазу сопровождается заменой ГУ на ГПУ кристаллическую структуру и является мартенситным. При этом знак параметра мода-мода меняется с положительного на отрицательный, что отражает усиление взаимодействия флуктуационных мод. Как известно из флуктуационной теории фазовых переходов последнее должно индуцировать замену топологического перехода второго рода на слабый переход первого рода [10]. Переход из ГПУ альфа-фазы в ОЦК бета-фазу по-видимому является антимагнетическим переходом. При этом знак параметра межмодового взаимодействия флуктуаций меняется на положительный, и реализуется топологический фазовый переход второго рода.

Наряду с топологическим усилением термодинамических флуктуаций, важную роль при формировании $x-T$ диаграммы, играют концентрационные флуктуации хаббардовских потенциалов. В частности, при увеличении различия параметров хаббардовского взаимодействия в атоме замещения примерно в 1.1 раза должно иметь место подавление топологической альфа-фазы и концентрационного ТЭП уже в основном состоянии, что является дополнительным механизмом стабилизации бета-фазы.

Финансирование работы

Результаты получены в рамках задания Министерства науки и высшего образования, контракт № FEUZ-2020-0020.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] Topological Materials Database: <https://topologicalquantumchemistry.com>. Nature **566**, 480 (2019).
- [2] A.A. Povzner, A.G. Volkov. Solid State Commun. **342**, 114639 (2022).
- [3] A.A. Povzner, A.G. Volkov. Phys. Solid State **63**, 10, 1625 (2021).
- [4] G. Grimvall, B. Magyari-Köpe, V. Ozoliņš, K.A. Persson. Rev. Mod. Phys. **84**, 945 (2012).
- [5] Zhi-Gang Mei, Shun-Li Shang, Yi Wang, Zi-Kui Liu. Phys. Rev. B **80**, 104116 (2009).
- [6] Liang-Feng Huang, Blazej Grabowski, Jian Zhang, Min-Jie Lai, C. Cem Tasan, Stefanie Sandlobes, Dierk Raabe, Jorg Neugebauer. Acta Mater. **113**, 311 (2016).
- [7] V. Heine. Phys. Rev. **153**, 673 (1967).
- [8] Т. Мория. Спиновые флуктуации в магнетиках с коллективизированными электронами. Мир, М. (1988). 288 с.
- [9] А.А. Абрикосов, Л.И. Горьков, И.Е. Дзялошинский. Методы квантовой теории поля в статистической физике. ГИФМЛ, М. (1962). 444 с.
- [10] А. Brazovskii. ZETP **68**, 175 (1975).
- [11] М.Н. Магомедов. ФТТ **60**, 5, 970 (2018).
- [12] P.D. Desa. Int. J. Thermophys. **8**, 6, 781 (1987).

Редактор Т.Н. Василевская