

05,07

Киральный эффект Холла при фазовом переходе первого рода в ферромагнитных мanganитах лантана

© А.А. Повзнер, А.Н. Филанович, Э.И. Лопатко, Н.А. Зайцева

Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина,
Екатеринбург, Россия

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

Поступила в Редакцию 9 июля 2025 г.

В окончательной редакции 11 августа 2025 г.

Принята к публикации 14 августа 2025 г.

На основе результатов проведенного *ab initio* моделирования электронной структуры изучается расслоение фаз при магнитных фазовых переходах первого рода в ферромагнитных мanganитах лантана ($\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$). Получено, что причиной расслоения является возникновение в спиновой системе отрицательного взаимодействия мода-мода, которое является условием фазового перехода первого рода в теории Гинзбурга–Ландау. Показано, что вследствие особенностей электронной структуры, возникающих при расслоении фаз, металлические капли обладают скалярной спиновой киральностью. При этом *sd*-рассеяние на спиновых неоднородностях приводит вблизи температуры Кюри к андерсоновскому переходу металл–полупроводник, который сопровождается возникновением кирального эффекта Холла.

Ключевые слова: фазовый переход первого рода, флуктуации спиновой плотности, расслоение фаз, локализация Андерсена, спиновая киральность, эффект Холла.

DOI: 10.61011/FTT.2025.08.61326.181-25

1. Введение

Давно известно, что ферромагнитные мanganиты лантана и другие магнитные полупроводники с колоссальным магнетосопротивлением (КМС), характеризуются аномальной связью спиновой и электронной подсистем (см., например, обзоры [1,2] и ссылки в них). При этом установлено, что область ферромагнитного дальнего порядка возникает вследствие двойного *sd*-обмена Зинера, приводящего за счет движения свободных *s* (*p*)-носителей со спином параллельным спинам *d*-электронов магнитного иона, к корреляционному эффекту понижения полной энергии системы. Однако, при магнитных фазовых переходах первого рода эффективные магнитные поля, связанные с двойным обменом, исчезают и возникает расслоение электронных фаз, приводящее к КМС [1].

Эксперимент указывает, что причиной расслоения фаз является кроссовер магнитного фазового перехода первого рода и андерсоновского электронного перехода металл–полупроводник, приводящего к формированию полупроводниковой матрицы с металлическими спиновыми каплями [1]. Однако, микроскопическая природа наблюдаемого расслоения фаз, а, следовательно, и кроссовера магнитного и электронного переходов, требует дополнительных исследований. В особенности это касается еще не выясненных механизмов формирования локальной намагниченности [3], а также неординарного аномального эффекта Холла, наблюдаемого в ферромагнитных мanganитах лантана [4,5].

В [6] развивалась зонная модель ферромагнетизма мanganитов лантана, в которой наряду с эффектом

двойного обмена, исследовалась роль хаббардовских корреляций, являющихся главной причиной ферромагнитного упорядочения в переходных металлах. При этом были получены указания на то, что двойной обмен оказывает решающее влияние только на формирование ферромагнитного дальнего порядка мanganитов лантана, а в наблюдаемой выше температуры Кюри (T_C) области расслоения фаз наряду с сильным *sd*-рассеянием важную роль начинают играть хаббардовские корреляции.

Однако, сделанные в рамках зонной модели ферромагнетизма предположения и оценки недостаточно обоснованы. В значительной степени это связано с тем, что особенности энергетического электронного спектра и тонкой структуры плотности электронных состояний (DOS) ферромагнитных мanganитов лантана, как и других ферромагнитных полупроводников с КМС все еще не установлены (см., например, [7,8]). Поэтому параметры функционала Гинзбурга–Ландау, определяющие критерий возникновения переходов первого и второго рода [9], не определены. В частности, это касается параметра межмодовой связи, который при переходе первого рода, согласно функционалу Гинзбурга–Ландау [9] должен менять знак с положительного на отрицательный.

В настоящей работе, на основе проведенного *ab initio* моделирования электронной структуры без спиновой поляризации, рассматривается расслоение фаз в $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$. На примере $\text{La}_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{MnO}_3$ выяснено, что причинами расслоения фаз при магнитном фазовом переходе первого рода являются возникающие отрицательная межмодовая связь и кривизна Берри, приводящие к киральному эффекту Холла.

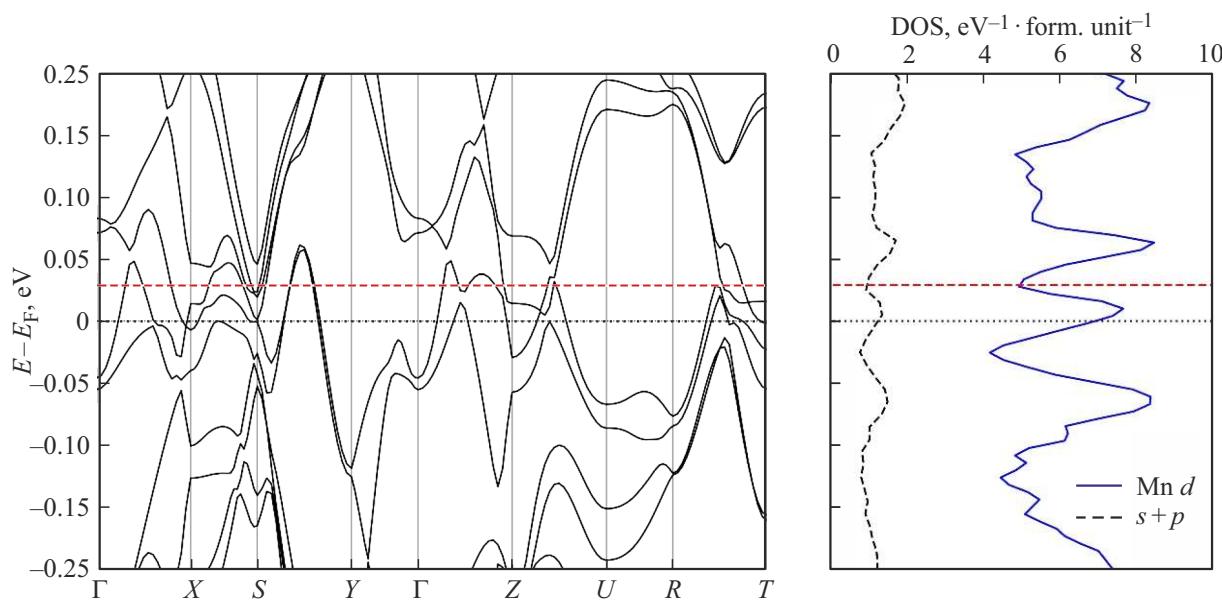


Рис. 1. Плотность электронных состояний и энергетический спектр $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ вблизи уровня Ферми. Пунктиром показан уровень Ферми, соответствующий $x = 0.25$ (непосредственно из DFT-расчета), штриховой линией — уровень Ферми, соответствующий $x = 0.30$.

2. Моделирование электронной структуры

Ранее в [10] электронная структура $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ моделировалась в рамках приближения локальной плотности (LDA). При этом использовалась кристаллическая структура кубического перовскита, что не согласуется с экспериментальными данными [11], согласно которым рассматриваемые кристаллические системы обладают орторомбической структурой с пространственной группой № 62 — той же, что у беспримесного LaMnO_3 . Поэтому в настоящей работе электронная структура основного состояния $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ моделировалась с учетом орторомбической кристаллической структуры и в рамках более точного приближения для функционала электронной плотности GGA PBE [12].

В проведенном нами *ab initio* моделировании рассмотрена электронная структура неполяризованного по спину основного состояния, соответствующего области расслоения фаз, которое возникает в парамагнитной области. Это позволило рассмотреть корреляцию между высокосимметричными точками электронного спектра, в окрестности которых возникает кривизна Берри [13], и тонкой структурой плотности электронных состояний, определяющих знак параметра межмодовой связи.

Моделирование электронной структуры было выполнено в программном пакете Quantum Espresso [14] с использованием псевдопотенциала электрон-ионного взаимодействия на основе метода проекционных присоединенных волн (PAW). Энергия обрезания плоских волн для волновых функций и зарядовой плотности/потенциала составляла 100 и 400 Ry, соответственно.

Расчеты из первых принципов первоначально проводились для $\text{La}_{0.75}\text{Ca}_{0.25}\text{MnO}_3$ путем замены в элементарной ячейке LaMnO_3 одного из четырех атомов лантана на атом кальция. Для перехода к составу наиболее изученного ферромагнитного полупроводника $\text{La}_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{MnO}_3$ использовалось приближение жесткой полосы, в рамках которого производился небольшой энергетический сдвиг уровня Ферми относительно значения для $\text{La}_{0.75}\text{Ca}_{0.25}\text{MnO}_3$ в соответствии с условием электронейтральности.

На рис. 1 представлены результаты расчета энергетического спектра и плотности электронных состояний (DOS) $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ вблизи уровня Ферми, а

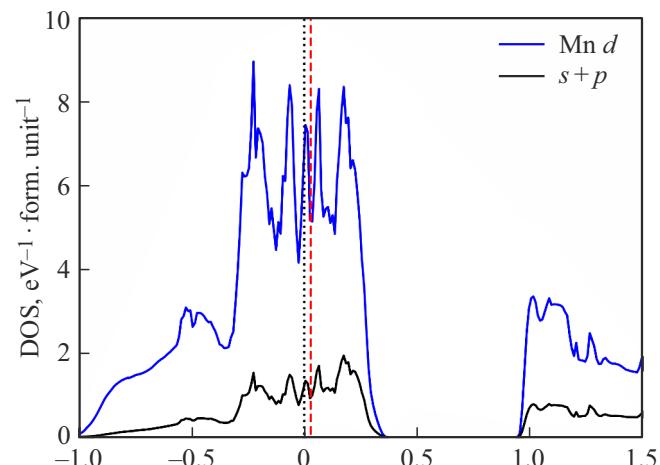


Рис. 2. Парциальная плотность электронных состояний $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ (обозначения уровней Ферми те же что на рис. 1).

на рис. 2 — парциальные плотности электронных состояний в более широком энергетическом интервале, охватывающем запрещенную зону.

Из графиков на рис. 1 и 2 видно, что в области перехода от состава $\text{La}_{0.75}\text{Ca}_{0.25}\text{MnO}_3$, в котором происходит магнитный фазовый переход второго рода, к $\text{La}_{0.70}\text{Ca}_{0.30}\text{MnO}_3$ с переходом первого рода [1], имеет место смена знака кривизны зависимости плотности состояний d -электронов от энергии ($g(\varepsilon)$) вблизи уровня Ферми, лежащего в пределах области вырождения Берри.

Учет фаз Берри и тонкой структуры плотности электронных состояний позволяет сформулировать модель фазовых переходов первого рода в рассматриваемых ферромагнитных мanganитах лантана.

3. Модель расслоения электронных фаз выше T_C

Для исследования расслоения фаз, возникающего при переходе первого рода, необходимо рассмотреть микроскопическую модель спиновой подсистемы, с учетом установленных в разд. 2 особенностей электронной структуры.

При изучении области ферромагнетизма в [6] мы исходили из зонной модели двойного sd -обмена, в которой учитывались хаббардовские корреляции d -электронов. В хорошем численном согласии с экспериментом было показано, что решающее влияние на формирование ферромагнетизма мanganитов лантана оказывает двойной sd -обмен, который в рамках развивающейся зонной модели был рассмотрен в приближении среднего поля.

В настоящей работе используется обобщенный гамильтониан Хаббарда

$$H = \sum_{l=3,p,d} H_0^{(l)} + H_{dd} + H_{sd}, \quad (1)$$

в котором слагаемое двойного обмена (J_{sd}) записанное в приближении среднего поля

$$H_{sd} = -J_{sd}\Sigma_v \mathbf{S}_v \mathbf{s}_v \approx -J_{sd}\Sigma_v (\langle \mathbf{S}_v \rangle \mathbf{s}_v + \mathbf{S}_v \langle \mathbf{s}_v \rangle),$$

дополнено учетом зонного движения $s(p)$ - и d -электронов — $H_0^{(l)}$, и гамильтонианом внутриатомного отталкивания $H_{dd} = -J_{dd}\Sigma_v (S_v^2 - \frac{n_v^2}{4})$, \mathbf{S}_v и \mathbf{s}_v — операторы вектора спина d - и $s(p)$ -электрона, n_v — оператор зарядовой плотности d -электронов на узле v .

Причем можно показать, что в области температур выше T_C , где спонтанная намагниченность, приводящая к эффективным полям $I_{sd}\langle \mathbf{S}_v \rangle$ исчезает, sd -рассеянием носителей электрического тока пренебречь нельзя (см. ниже формулу (8) и работу [6]).

При записи выражения статистической суммы параметрического состояния, для H_{dd} с квадратичными по операторам спиновой и зарядовой плотности слагаемыми, проводились преобразования Стратоновича-Хаббарда, приводящие к картине движения электронов

во флюктуирующих ξ - и η -полях [15]

$$\exp(-|A|^2) = \int d\zeta \cdot \exp(-|\zeta|^2 + \mathbf{A} \cdot \zeta), \quad (2)$$

где ($\zeta = \xi, \eta, A = \mathbf{S}_v, n_v$).

После этих преобразований статистическая сумма системы коллективизированных d -электронов, во внешнем магнитном поле с напряженностью H , записывается в виде:

$$Z = Z_0 \int (d\xi d\eta) \exp(-\Phi(\xi, \eta)), \quad (3)$$

Здесь

$$(d\eta d\xi) = d\xi_0 d\eta_0 \left[\prod_{q \neq 0,j} d\xi_q^{(l)} d\eta_q^{(l)} \right],$$

Z_0 — статистическая сумма d -электронов с энергетическим спектром полученным при первоосновном GGA-моделировании (см. рис. 1), j — индекс реальной (=1) и мнимой (=2) части ξ - и η -полей, $q = (q, \omega_{2n})$, q — квазимпульс, ω_{2n} — мацубаровская Бозе частота, а функционал электронов во флюктуирующих обменных и зарядовых полях

$$\begin{aligned} \Phi(\xi, \eta) = \sum_q & \left[(1 + \chi_q^{(0)}) |\eta_q|^2 \right. \\ & + D_q^{(0)-1} |\xi_q - 2c^{-1}(H\delta_{q,0})|^2 \Big] + (4!)^{-1} \sum_q \delta_{\sum_{i=1}^4 q_i, 0} \kappa(\mu) \\ & \times \left(\xi_{q_1} \xi_{q_2} \xi_{q_3} \xi_{q_4} - \frac{3!}{2!2!} \xi_{q_1} \xi_{q_{2,m}} \eta_{q_3} \eta_{q_4} + \eta_{q_1} \eta_{q_2} \eta_{q_3} \eta_{q_4} \right) \end{aligned} \quad (4)$$

также, как и функционал Гинзбурга-Ландау (с разложениями по степеням параметра порядка) содержит наряду со слагаемыми второго порядка с функцией Линдхарда $\chi_q^{(0)}$ и фактором Стонера $D_q^{(0)} = (1 - U\chi_q^{(0)})^{-1}$, слагаемые четвертого порядка с параметром мода-мода

$$\kappa(\mu) = 4^{-1} J_{dd}^3 \left(\frac{g^{(2)}(\mu) - (g^{(1)}(\mu))^2}{g(\mu)} \right), \quad (5)$$

определенные через плотность d -электронных состояний g (рис. 1, 2) и ее производные $g^{(1)}$ и $g^{(2)}$ при $\varepsilon = \mu$ (ν — химический потенциал всей системы электронов), $c = (J_{dd}T)^{1/2}$.

При оценках функциональных интегралов в записи статистической суммы (3), использовалась процедура перевала по статическим зарядовым ($\eta_q^{(f)}$) и обменным ($\xi_q^{(y)}$) (y — индекс координатных осей) полям, а также по модулю динамических обменных полей $r_q^{(y)} = |\xi_q^{(y)}|$, $\xi_q^{(y)} = |\xi_q^{(y)}| \exp(\phi_{q,y})$ (см. [14]):

$$\partial Z / \partial \xi_q^{(y)} = 0, \quad \partial Z / \partial \eta_q^{(j)} = 0, \quad \partial Z / \partial r_q^{(y)} = 0$$

и учитывалась связь обменных полей со средними от операторов спиновой плотности [15].

При этом согласно перевальным условиям, для области отрицательной межмодовой связи ($\kappa < 0$) получено, что ненулевые значения намагниченности на узлах

$$M_{v,y}^{(d)} = \sum_q M_s \exp(iqv + i\phi_{q,y}) \quad (6)$$

возникают только при фиксированных значениях фаз $\varphi_{q,\gamma}$, совпадающих с разностями электронных фаз Берри (см. разд. 2). Модуль локальной намагниченности определяется как среднеквадратическое значение амплитуды статических флуктуаций $M_s = \langle \delta M^2 \rangle^{1/2}$, для которых имеем

$$\begin{aligned} \langle \delta M \rangle^2 &= N_0^{-1} \sum_v \langle (S_v - \langle S_v \rangle)^2 \rangle \\ &= \langle \delta \eta^2 / 4 \rangle - \kappa^{-1} \left[D_0^{(0)-1} + \kappa(M^2 + 5\langle m^2 \rangle / 3) \right], \end{aligned} \quad (6a)$$

$$\begin{aligned} \langle \delta \eta^2 / 4 \rangle &= N_0^{-1} \sum_v \langle (n_v - \langle n_v \rangle)^2 \rangle \\ &= \langle \delta M^2 \rangle - \kappa^{-1} \left[2 - D_0^{(0)-1} - \kappa(M^2 + 5\langle m^2 \rangle / 3) \right], \end{aligned} \quad (6b)$$

где M — намагниченность.

После аналитического продолжения $D_q^{(0)}$ и $\chi_q^{(0)}$ на ось действительных частот, используя модель Линдхарда $\chi_{q,\omega}^{(0)} = \chi_{0,0}^{(0)} + Aq^2 + iC(\omega/|q|)$ также находим парный коррелятор $\langle S_\nu S_\mu \rangle \sim \langle \delta M^2 \rangle \left(\exp(-\frac{r}{R_C}) / r \right)$, отражающий возникновение спиновых капель в системе d -электронов с радиусом корреляции $R_C \sim (AJ_{dd}\chi)^{1/2}$.

Здесь парамагнитная восприимчивость

$$\chi = 2\chi_0^{(0)} \left(D_1^{-1} + \kappa(2M^2 + \langle \delta M^2 \rangle + 5\langle m^2 \rangle / 3) \right)^{-1}$$

резко возрастает при приближении к точке Кюри со стороны парамагнитной области. Причем, согласно флюктуационно-диссипативной теореме (совпадающей с условиями перевала для $r_q^{(y)}$) средний квадрат амплитуды термодинамических флуктуаций

$$\langle m^2 \rangle = B \left(\frac{T}{J_{dd}} \right)^2 \left(|\kappa|(M^2(H) - \langle \delta \eta^2 \rangle + \langle \delta M^2 \rangle) - A \right)^{-2} \quad (7)$$

в области расслоения фаз оказывается в $(J_{dd}/T)^2$ меньше, чем $\langle \delta M^2 \rangle$.

Кроме того, рассматривая рассеяние $s(p)$ -носителей электрического тока на сильных пространственных неоднородностях распределения электронной плотности (6), находим, что в области расслоения фаз возникает кроссовер магнитного фазового перехода первого рода с андерсоновским электронным переходом металл-полупроводник [16].

При этом, в соответствии с [6], в системе $s(p)$ -электронов формируется порог протекания $E_C \sim J_{dd}\langle \delta M^2 \rangle$, пересечение которого химическим потенциалом, ведет к прыжковой проводимости. В результате этого сразу выше температуры Кюри электропроводность начинает меняться с температурой по экспоненциальному закону:

$$\sigma(T) = \sigma_0 \exp(-E_A/T), \quad (8)$$

где $E_A = (E_C - \varepsilon_c + \mu)$ — энергия активации, ε_c — энергия верхнего края частично заполненной d -зоны (рис. 2).

Для определения температурных границ области расслоения фаз $T_c < T < T_s$, необходимо рассмотреть температурную зависимость химического потенциала, которая определит условия возникновения отрицательной межмодовой связи с параметром (5). Эту зависимость можно найти из требования электронейтральности для суммарной концентрации s -, p - и d -электронов

$$\begin{aligned} n &= 2 \int d\varepsilon n(g_{s,p}(\varepsilon) + g(\varepsilon)) f(\varepsilon - \mu) \\ &\quad - 2U^2 g^{(1)} [\langle \delta M^2 \rangle + \langle m^2 \rangle - \langle \eta^2 \rangle / 4]. \end{aligned} \quad (9)$$

4. Эффект Холла в области расслоения фаз

Согласно развитой модели расслоения фаз, прямым следствием пространственных неоднородностей распределения спиновой плотности (6) и особенностей электронной структуры разд. 2) является возникновение скалярной спиновой киральности, определяемой киральным зарядом χ_c (см. [17]). В случае ферромагнитных спиновых капель

$$\chi_c = \sum_{\nu_1, \nu_2, \nu_3} \langle \mathbf{S}_{\nu_1} [\mathbf{S}_{\nu_2} \times \mathbf{S}_{\nu_3}] \rangle = \pm M (\langle \delta M^2 \rangle), \quad (10)$$

где $M = \chi H$.

При этом учитывая связь локальной намагниченности (6) с фазами Берри, можно предположить, что при обходе контура узлов, относящихся к любым трем разным спиновым каплям с радиусом R_C , осуществляется набег фаз локальных намагниченостей. Эта особенность эквивалентна тому, что происходит при включении магнитного поля, приводящего к холловскому отклонению [4, 17, 18]. Поэтому, следуя [4], в рассматриваемом случае термодинамически неустойчивого ферромагнетизма, при котором возникает расслоение фаз, можно ввести перпендикулярное плоскости планарного образца фиктивное поле (вставка к рис. 3), приводящее к холловскому отклонению

$$\mathbf{b} = \pm \sum_{\nu_1, \nu_2, \nu_3} \langle \mathbf{S}_{\nu_1} [\mathbf{S}_{\nu_2} \times \mathbf{S}_{\nu_3}] \mathbf{n}_{\nu_1, \nu_2, \nu_3} \rangle,$$

где $\mathbf{n}_{\nu_1, \nu_2, \nu_3}$ — единичный вектор перпендикулярный плоскости треугольника, построенного на узлах.

В результате этого имеем, что возникающее расслоение фаз приводит к киральному вкладу в холловское сопротивление, который так же, как и вклад аномального эффекта Холла, приближенно пропорционален намагниченности

$$\rho_{xy} = R_0 \chi_c = R_s M, \quad (12)$$

но с холловской постоянной

$$R_s = R_0 \exp(T^{-1} E_A) \langle \delta M^2 \rangle, \quad (13)$$

связанной со скалярной спиновой киральностью, пропорциональной постоянной нормального эффекта (R_0).

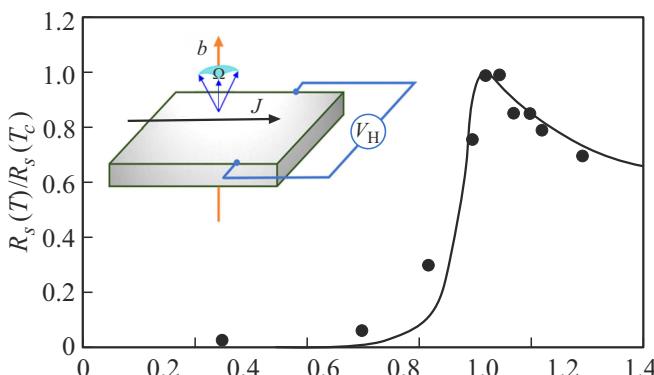


Рис. 3. Температурная зависимость параметров аномального и топологического эффектов Холла для $\text{La}_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{MnO}_3$. Сплошная линия — расчет, точки — экспериментальные данные [5]. На вставке схематически показан механизм, приводящий к возникновению кирального эффекта Холла (заимствовано из [4]), где J — величина тока.

На рис. 3 сравнивается рассчитанная температурная зависимость холловской постоянной R_s с экспериментальными данными для $\text{La}_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{MnO}_3$ [5]. При этом оказывается, что в металлической ферромагнитной области имеет место ее резкое возрастание с температурой, связанное с термодинамическими спиновыми флуктуациями (7). Выше температуры Кюри возникает расслоение фаз, при котором подавляются термодинамические спиновые флуктуации, что приводит к температурной зависимости холловской постоянной (13), связанной не только с переходом металл-полупроводник, но и с эффектом возникновения спиновой киральности.

При расчетах зависимости $R_s(T)$ использовались параметры взаимодействия из [6] $J_{dd} = 1.2$ и $J_{sd} = 0.6$ eV, параметры функции Линдхарда $A = 0.07$ и $C = 1.28$, получаемые в приближении эффективных масс, а также результаты расчетов электронной структуры представленные в разд. 2. При этом для области расслоения фаз $T_c < T < T_s$, получены значения $T_c = 220$ и $T_s = 310$ K, тогда как согласно обработке эксперимента [4,5], проведенного на планарных образцах толщиной 150 nm, они составляют 250 и 350 K соответственно.

При $T > T_s$, в соответствии с (9), происходит температурный сдвиг химического потенциала за пределы энергетической области кривизны Берри, вследствие чего спиновая киральность исчезает.

5. Заключение

Таким образом, из результатов проведенного *ab initio* моделирования электронной структуры видим, что вследствие тонкой структуры плотности электронных состояний при фазовом магнитном переходе первого рода в ферромагнитных мanganитах лантана возникает отрицательная межмодовая связь и кривизна Берри. Показано, что это приводит к формированию области

расслоения электронных фаз, состоящей из полупроводникового матрицы $s(p)$ -электронов и „погруженных“ в нее металлических капель d -электронов со скалярной спиновой киральностью.

При этом показано, что в температурном интервале расслоения фаз ($T_c < T < T_s$) формируется киральный эффект Холла.

Из анализа полученных результатов видим, что незначительный энергетический концентрационный сдвиг химического потенциала относительно области отрицательной кривизны плотности электронных состояний (рис. 1) может привести к кардинальному изменению спинtronических свойств $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ (например, для составов, с концентрациями допирования кальцием от $x_1 = 0.25$ до $x_2 = 0.30$).

При этом представляет интерес дальнейшее экспериментальное исследование допирования примесями кальция манганита $\text{La}_{0.75}\text{Ca}_{0.25}\text{MnO}_3$, находящегося в трикритическом состоянии. Это позволило бы не только уточнить границы областей составов с фазовым переходом первого рода, но и изучить взаимосвязь возникновения КМС и кирального эффекта Холла.

Дальнейшее (прежде всего экспериментальное) исследование спинtronических свойств в области расслоения фаз ферромагнитных мanganитах лантана представляет важным при создании генераторов спиновых токов.

Финансирование работы

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

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] Н.Г. Бебенин, Р.И. Зайнуллина, В.В. Устинов. УФН **188**, 8, 801 (2018).
- [2] Ю.А. Изюмов, Ю.Н. Скрябин. УФН **171**, 2, 121 (2001).
- [3] D. Pchelina, V. Sedykh, N. Chistyakova, V. Rusakov, Y. Alekhina, A. Tselebrovskiy, B. Fraisse, L. Stievano, M.T. Sougrati. J. Phys. Chem. Sol. **159**, 110268 (2021).
- [4] H. Wang, Y. Dai, G.-M. Chow, J. Che. Prog. Mater. Sci. **130**, 100971 (2022).
- [5] P. Matl, N.P. Ong, Y.F. Yan, Y.Q. Li, D. Studebaker, T. Baum, G. Doublinina. Phys. Rev. B **57**, 10248 (1998).
- [6] А.А. Повзнер, А.Г. Волков, Э.И. Лопатко, Н.А. Зайцева. ФТТ **65**, 4, 545 (2023).
- [7] Topological Magnetic Materials Database: <https://www.topologicalquantumchemistry.fr/magnetic>.
- [8] Topological Materials Database: <https://topologicalquantumchemistry.com>.
- [9] M. Brando, D. Belitz, F.M. Grosche, T.R. Kirkpatrick. Rev. Mod. Phys. **88**, 25006 (2016).
- [10] W.E. Pickett, D.J. Singh. Phys. Rev. B **53**, 3, 1147 (1996).

- [11] W. Tang, W. Lu, X. Luo, B. Wang, X.B. Zhu, W. Song, Z. Yang, Y. Sun. J. Magn. Magn. Mater. **322**, 2360 (2010).
- [12] J. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof. Phys. Rev. Lett. **77**, 3865 (1996).
- [13] M.A. Wilde, M. Dodenhof, A. Niedermayr, A. Bauer, M.M. Hirschmann, K. Alpin, A.P. Schnyder, C. Pfleiderer. Nature **594**, 374 (2021).
- [14] P. Giannozzi, O. Andreussi, T. Brumme и др. J. Phys.: Condens. Matter **29**, 465901 (2017).
- [15] Т. Мория. Спиновые флуктуации в магнетиках с коллективизированными электронами. Мир, М. (1988). 288 с.
- [16] Ф. Андерсон. УФН **127**, 1, 19 (1979).
- [17] K.S. Denisov, I.V. Rozhansky, N.S. Averkiev, E. Lähderanta. Phys. Rev. Lett. **117**, 027202 (2016).
- [18] А.Ф. Барабанов, Ю.М. Каган, Л.А. Максимов, А.В. Михенков, Т.В. Хабарова. УФН **185**, 5, 479 (2015).

Редактор Ю.Э. Китаев