

Тепловое расширение топологического полуметалла CoSi

© А.А. Повзнер, А.Н. Филанович, Т.А. Ноговицына, Э.И. Лопатко

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

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

Поступила в Редакцию 13 мая 2026 г.

В окончательной редакции 8 июня 2026 г.

Принята к публикации 13 июня 2026 г.

Рассматриваются особенности формирования теплового расширения в низкотемпературной парамагнитной фазе топологического полуметалла CoSi с вейлевскими фермионами. При этом показано, что в области низкотемпературно парамагнетизма образуются локальные магнитные моменты, связанные с формированием областей спиновых корреляций, и возникает наблюдаемый на эксперименте отрицательный магнитный вклад в объемный коэффициент теплового расширения (ОКТР). Получено, что индуцированный температурой энергетический сдвиг химического потенциала приводит к топологическому электронному переходу из парамагнитного состояния с локальными магнитными моментами в область обменноусиленного паулиевского парамагнетизма, где магнитный вклад в ОКТР становится положительным. Проведенные методом универсальных потенциалов оценки влияния фононного ангармонизма на ОКТР вместе с рассмотренным магнитным вкладом хорошо согласуются с экспериментальными данными.

Ключевые слова: объемный коэффициент теплового расширения, топологические полуметаллы, вейлевские фермионы, топологический электронный переход, спиновые флуктуации, фазы Берри, фононный ангармонизм, универсальные потенциалы межатомного взаимодействия.

DOI: 10.61011/FTT.2026.06.63578.9844

1. Введение

Топологический полуметалл CoSi обладает сложными электронными, магнитными и решеточными свойствами [1–5]. Наряду с наблюдаемыми новыми вейлевскими фермионами [3] и перспективными термоэлектрическими свойствами [6] он демонстрирует необычные для данного класса материалов особенности теплового расширения, связь которых с электронной структурой до сих пор не установлена [3,7,8].

В [4] отмечалось, что в CoSi с кубической кристаллической структурой типа B20 возможно возникновение низкотемпературного парамагнетизма с локальными магнитными моментами. При этом исследование намагниченности образцов с малым количеством дефектов во внешнем магнитном поле указывало на переход из низкотемпературного парамагнитного в диамагнитное состояние при температуре около 25 K.

Однако природа возникающего в CoSi парамагнитного состояния не выяснена. Важной и еще недостаточно изученной особенностью рассматриваемого топологического полуметалла является температурная зависимость его ОКТР. Точными dilatометрическими измерениями, проведенными в отсутствие внешнего магнитного поля, был обнаружен отрицательный ОКТР [7], который с увеличением температуры меняет знак с отрицательного на положительный при температуре 7–10 K т.е. значительно ниже, чем переход из парамагнитного состояния в диамагнитное (!).

При этом не ясно, является ли низкотемпературный парамагнетизм CoSi следствием самодопирования [4] или это внутреннее свойство связано с топологическими особенностями его электронной структуры, приводящими к образованию вейлевских фермионов [3].

Следует отметить, что результаты проведенного в приближении DFT моделирования фононного ангармонизма (см. [3,8]) приводят к температурной зависимости (Т-зависимости) ОКТР, которую не удастся согласовать с экспериментом (рис. 1).

Полученные в [8] оценки влияния ангармонизма фононного спектра на ОКТР не только не объясняют возникновение отрицательного ОКТР, но и дают для возникающего с ростом температуры положительного ОКТР заметное количественное расхождение с экспериментом [5,7] (рис. 1).

Очевидным недостатком проведенных расчётов фононных спектров [3,8] является предположение о малом смещении атомов от положения равновесия и использование небольшого размера суперъчейки при расчёте силовых постоянных межатомного взаимодействия. Эти недостатки не только не позволяют оценить влияние на температурную зависимость ОКТР фононной подсистемы, но и не дают возможность оценить из анализа экспериментальных данных, какое влияние на формирование теплового расширения оказывает магнитная подсистема.

В настоящей работе с помощью метода универсальных потенциалов межатомного взаимодействия (UMLIP), выполняются более корректные, чем в предыдущих работах (в частности, в [8]), оценки вли-

яния фононного ангармонизма на ОКТР. С учетом результатов проведенного первопринципного моделирования электронной структуры обнаружено что заметное влияние на его формирование оказывает магнитный вклад, который меняет знак в соответствии с результатами дилатометрических измерений. Показывается, что в парамагнитном состоянии происходит топологический электронный переход (ТЭП) в область паулиевского парамагнетизма.

2. Фононный спектр

Как уже отмечалось выше, полученные в рамках DFT оценки влияния ангармонизма фононного спектра [3,8] на ОКТР оказываются неудовлетворительными из-за небольшого размера суперъячейки ($2 \times 2 \times 2$). Малость размера ячейки при проведении DFT-моделирования была продиктована тем, что её увеличение становится причиной быстрого роста объема необходимых вычислительных ресурсов. Последнее, как выяснилось, кардинально сказалось на точности расчёта фононного спектра, и, как следствие, на результатах расчета Т-зависимости ОКТР (рис. 1).

Решить данную проблему стало возможным благодаря появившимся в последнее время универсальным потенциалам межатомного взаимодействия (UMLIP) [9,10]. В отличие от „обычных“ потенциалов межатомного взаимодействия, которые создаются для какого-то конкретного вещества или класса веществ, при фитировании UMLIP используются данные DFT-расчетов для множества веществ с различными химическими составами и кристаллическими структурами. В результате, такие потенциалы позволяют вычислять силовые постоянные для произвольного вещества с точностью, практически не уступающей DFT, требуя при этом значительно меньшего вычислительного времени. В настоящей работе используется универсальный потенциал GRACE-2L-OAM [10], обученный на датасете OMat24, который содержит данные по 110 миллионам DFT-расчетов, покрывающих 89 элементов системы Менделеева. На основе данного потенциала мы определили фононные спектры CoSi и вычислили часть ОКТР, которая обусловлена эффектами решеточного ангармонизма.

Фононные спектры при 10 значениях объема элементарной ячейки в интервале от 0.95 до 1.05 относительно равновесного значения были вычислены методом суперъячейки, реализованном в пакете Phonopy [11]. Для проведения расчета использовались суперъячейки размером $3 \times 3 \times 3$, „смещение“ атомов от положения равновесия производилось на $0.03 \text{ \AA}$. На рис. 2 приведены результаты расчёта дисперсионных кривых для равновесного объема.

При оценке влияния фононного ангармонизма на ОКТР использовался программный пакет QHA [12]. В этом пакете осуществляется расчет решеточной составляющей свободной энергии Гиббса при различных

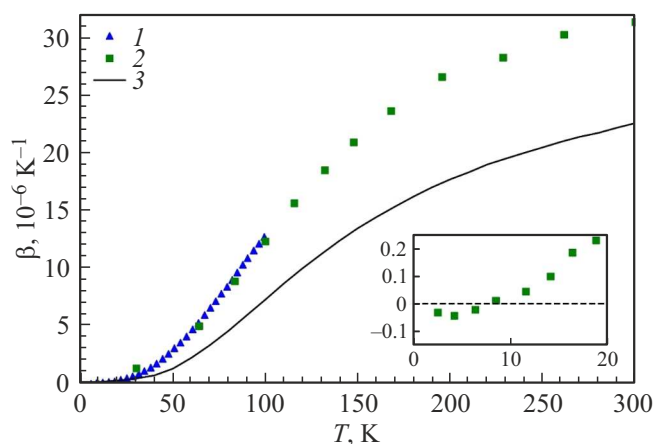


Рис. 1. Температурная зависимость ОКТР CoSi: 1 — экспериментальные данные [5], 2 — экспериментальные данные [7], 3 — расчет [8]. На вставке — экспериментальные данные [7] для области парамагнитных температур.

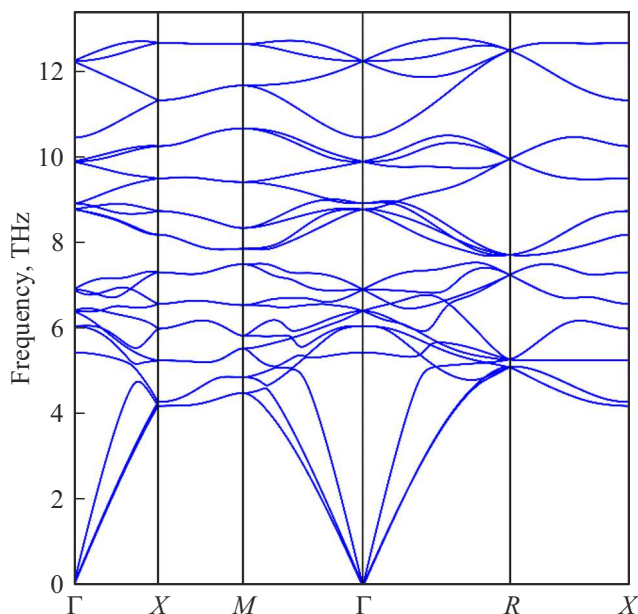


Рис. 2. Фононный спектр CoSi.

температурах на основе данных о фононном спектре вещества.

Результаты расчета ОКТР CoSi в QHA на основе UMLIP-моделирования фононных спектров представлены на рис. 3. Можно видеть, что в высокотемпературном интервале согласие расчетной кривой $\beta(T)$ с экспериментальными данными заметно улучшается по сравнению с [8].

Кроме того, из анализа полученной температурной зависимости ОКТР $\beta(T)$ следует что в низкотемпературной парамагнитной области вклад фононов оказывается настолько малым, что его значения лежат в пределах погрешности измерений. Поэтому требуется

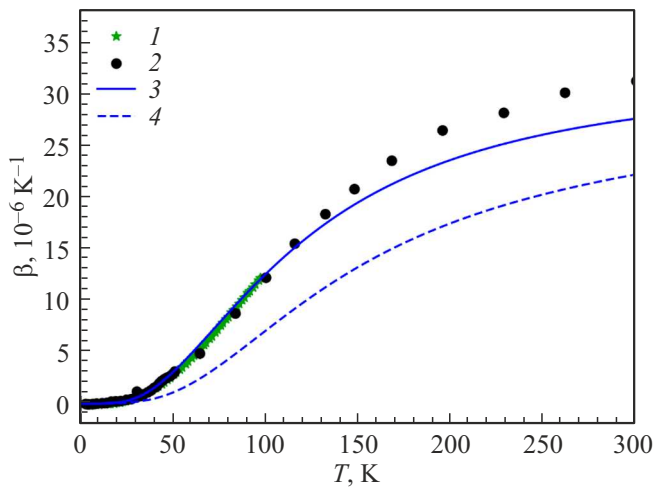


Рис. 3. Результаты расчета ОТКР CoSi в широком интервале температур (с учетом только эффектов решеточного ангармонизма): 1 — экспериментальные данные [5], 2 — экспериментальные данные [7], 3 — вклад решеточного ангармонизма в настоящей работе, 4 — вклад ангармонизма в [8].

исследование вклада, связанного с влиянием на объем кристаллической решетки особенностей электронной и магнитной подсистем CoSi.

3. Особенности электронной структуры

В настоящей работе проводилось первопринципное моделирование не только электронного спектра, но и тонкой структуры плотности электронных состояний (см. также [3,6,13]), которая определяет значения параметров функционала Гинзбурга–Ландау в зонной модели магнетизма [14].

Использовался метод теории функционала плотности (DFT) в программном пакете Quantum Espresso [15]. Псевдопотенциал электрон-ионного взаимодействия определялся с помощью проекционных присоединенных волн (PAW). Для оценки спин-орбитального взаимодействия, приводящего к возникновению в электронном спектре топологических узлов с вейлевскими фермионами [3], применялась релятивистская версия псевдопотенциала.

Энергия обрезания плоских волн для волновых функций и зарядовой плотности/потенциала составляла 100 и 400 Ry, соответственно, а кристаллическая структура изначально задавалась на основе экспериментальных данных [5]. Согласно этим данным, кубическая структура CoSi обладает пространственной группой $P2_13$ и периодом решетки 4.444 Å.

Плотность электронных состояний $g(\varepsilon)$ в зависимости от энергии ε , рассчитывалась для энергетического электронного спектра с топологическими узлами, приводящими к вейлевским фермионам вблизи высокосимметричных Γ - и R-точек [3]. Результаты расчета

представлены на рис. 4. При этом можно видеть, что результаты проведенных расчетов отличаются от ранее выполненных в [3,13], за счет моделирования тонкой структуры плотности состояний $g(\varepsilon)$ с использованием при расчетах шага по энергии 0.01 eV.

При таком моделировании вблизи уровня Ферми обнаруживается узкий пик плотности электронных состояний, образование которого сопровождается перегибом на зависимости плотности d-состояний от энергии. В энергетическом интервале пика, приведенного на рис. 4, имеется топологический узел, связанный с высокосимметричной Γ -точкой (кружки на картине электронного спектра).

4. Модель низкотемпературной парамагнитной фазы CoSi

Для анализа спиновой системы не ферромагнитного, но сильно коррелированного CoSi, воспользуемся методами теории магнетизма коллективизированных электронов в переходных металлах и их соединениях [14].

При этом систему сильно коррелированных d-электронов, будем рассматривать с использованием модели флуктуационной фазы кирального ферромагнетика $\text{Co}_{1+x}\text{Si}_{1-x}$ [16], в которой использовалась запись гамильтониана Хаббарда, в виде квадратичных форм по операторам спиновой (S_v) и зарядовой (n_v) плотности на узле (см. также [14]).

Согласно [14], межэлектронные корреляции в модели Хаббарда можно свести к картине движения d-электронов во флуктуирующих в пространстве и во времени обменных и зарядовых полях (ξ и η) с помощью преобразований Стратоновича-Хаббарда.

Используя этот метод, статистическую сумму рассматриваемой системы электронов можно записать в виде (см. также [16])

$$Z(\xi, \eta) = Z_0 \left\{ \int (d\xi d\eta) \exp(-\Phi(\xi, \eta)) \right\}. \quad (1)$$

Здесь

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

Z_0 — статистическая сумма d-электронов в приближении среднего поля с учетом результатов первопринципного GGA-моделирования (рис. 1), j — индекс реальной (=1) и мнимой (=2) части ξ - и η -полей, $q = (q, \omega_{2n})$, q — квазиимпульс, ω_{2n} — мацубаровская Бозе частота, функционал электронов во флуктуирующих обменных и зарядовых полях

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

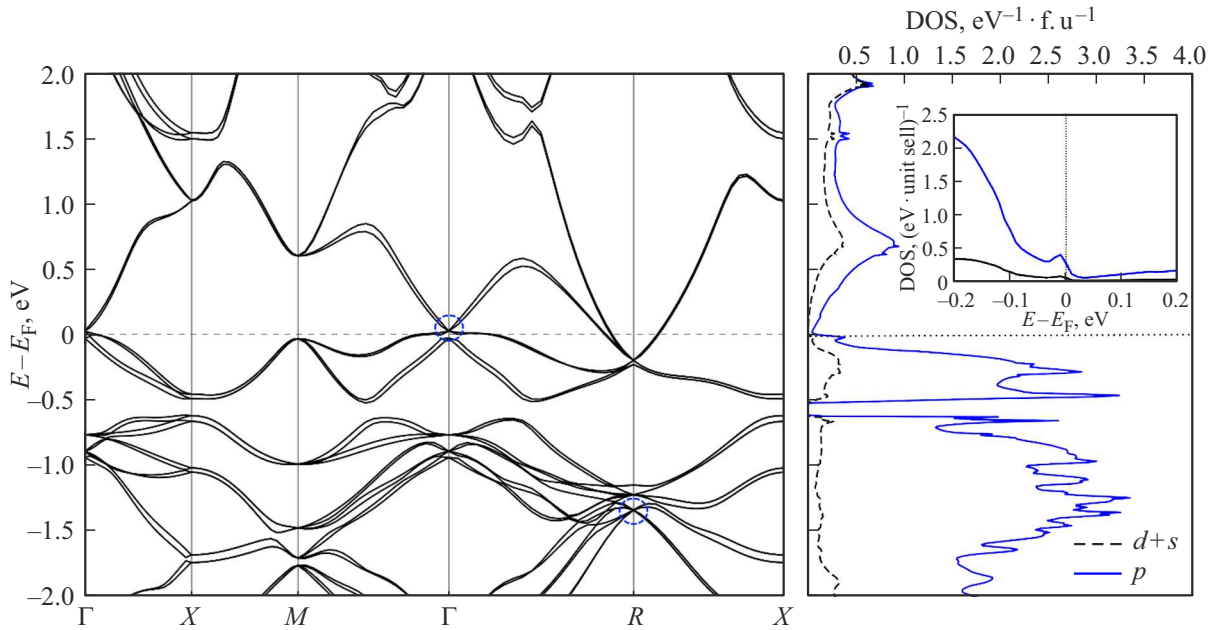


Рис. 4. Электронный спектр (слева) и парциальные плотности состояний (справа) CoSi.

$$D_q^{(0)} = (1 - U\chi_q^{(0)})^{-1} \quad (3)$$

— фактор обменного усиления флуктуирующих мод с квазиимпульсом q , $\chi_q^{(0)}$ — функция Линдхарда, U — параметр внутриатомного хаббардовского взаимодействия,

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

— параметр мода-мода, выражаемый через плотность d-состояний $g(\varepsilon)$ и ее производные при $\varepsilon = \mu$.

Проведенный с учетом п. 3 анализ зависимости параметров функционала Гинзбурга-Ландау (2) от тонкой структуры плотности электронных d-состояний, указывает на ее связь с изменением объема элементарной кристаллической ячейки V . В частности, это следует из известной формулы Хейне [17], которая описывает зависимость от объема энергетического спектра сильно коррелированных d-электронов

$$\varepsilon_k(V) = \theta^{-1} \varepsilon_k(V_0), \quad \theta(\equiv \theta(V)) = (V/V_0)^{5/3}, \quad (5)$$

где $\varepsilon_k(V_0)$ энергетический спектр основного состояния с топологическими узлами (рис. 4).

Поэтому необходимо было провести взаимно согласованное рассмотрение электронной и решеточной системы, с учетом зависимости $\varepsilon_k(V)$. Для этого вводилась свободная энергия Гиббса, в которой учитывается слагаемое упругой деформации кристаллической решетки с параметром изотермической сжимаемости K :

$$F = T \ln Z(\xi, \eta) + K(\Delta V)^2/2, \quad (6)$$

где $\Delta V = V - V_0$.

Для оценок функциональных интегралов в записи статистической суммы (1) использовалась процедура перевала по статическим зарядовым ($\eta_q^{(j)}$) и обменным (ξ_q) полям, а также по модулю динамических обменных полей

$$r_q = |\xi_q|, \quad \xi_q = |\xi_q| \exp(\phi_q) :$$

$$\partial Z / \partial \xi_q = \partial Z / \partial \eta_q = \partial Z / \partial r_q = 0.$$

При этом было получено, что в парамагнитной системе в соответствии с условием перевала по r_q , в системе возникают спиновые флуктуации, средний квадрат амплитуд которых соответствует флуктуационно-диссипативной теореме

$$\langle m^2 \rangle = (4\pi U)^{-1} \Sigma_{qy} \int_0^\infty (1/2 + f_B(\omega/T)) \times (2\kappa \langle \delta M^2 \rangle + X(\mathbf{q}, \omega, V) + D(V)^{-1})^{-1} d\omega, \quad (7)$$

где $f_B(\omega/T)$ — функция Бозе-Эйнштейна, $\langle \delta M^2 \rangle = N_0^{-1} \Sigma_v \langle (S_v - \langle S_v \rangle)^2 \rangle$ (см. ниже), — поправка, связанная с пространственно-временной неоднородностью функции Линдхарда, полученной после аналитического продолжения $D_q^{(0)}$ и $\chi_q^{(0)}$ на ось действительных частот;

$$X(\mathbf{q}, \omega, V) = (\chi^{(0)}(0, 0, V) - \chi^{(0)}(\mathbf{q}, \omega, V)) = Aq^2 + iB(\omega/|q|),$$

фактор обменного усиления

$$D(V) = (1 - U\chi^{(0)}(\mathbf{0}, 0, V))^{-1}.$$

В дальнейших расчетах использовались параметры $U = 1$ eV, $A = 0.07$, $B = \pi/2.45$, заимствованные из результатов численного анализа спинового магнетизма изоструктурного и близкого по составу к моносилциду кобальта, $\text{Co}_{1+x}\text{Si}_{1-x}$ с $0 < x < 0.04$ [16].

Далее отметим, что рассматриваемая картина парамагнетизма зависит от расположения химического потенциала по отношению к особенностям тонкой структуры $g(\varepsilon)$, которые определяют величину и знак параметра мода-мода.

Для парамагнитной области с отрицательным межмодовым взаимодействием ($\kappa < 0$), учитывая связь обменных полей со средними от операторов спиновой плотности [15], получаем модуль локальной намагниченности

$$M_s = \langle \delta M^2 \rangle^{1/2}, \quad (8)$$

который определяется как среднеквадратическое значение амплитуды статических флуктуаций спиновой плотности, связанных с пространственно неоднородным распределением электронной плотности

$$\begin{aligned} \langle \delta M^2 \rangle &= N_0^{-1} \sum_v \langle (S_v - \langle S_v \rangle)^2 \rangle = \left\langle \frac{\delta \eta^2}{4} \right\rangle \\ &- \kappa^{-1} \left[D(V)^{-1} + \kappa \left(\langle \delta M^2 \rangle + \frac{5\langle m^2 \rangle}{3} \right) \right], \quad (9) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\delta \eta^2}{4} \right\rangle &= N_0^{-1} \sum_v \langle (n_v - \langle n_v \rangle)^2 \rangle = \langle \delta M^2 \rangle \\ &- \kappa^{-1} \left[2 - D(V)^{-1} - \kappa \left(\langle \delta M^2 \rangle + \frac{5\langle m^2 \rangle}{3} \right) \right]. \quad (10) \end{aligned}$$

Из вычислений парного спинового коррелятора $\langle S_v S_v \rangle \sim \langle \delta M^2 \rangle (\exp(-\frac{r}{R_C})/r)$, который оказывается пропорциональным M_s^2 , находим что локальные магнитные моменты (8) возникают в областях спиновых корреляций с радиусом $R_C \sim (AU\chi)^{1/2}$ порядка 10 nm.

В парамагнитной области с неотрицательным параметром мод-мода, решения перевальных уравнений приводят к условиям $\langle \delta M^2 \rangle = \langle \delta \eta^2 \rangle = 0$, при которых в спиновой системе формируется обменноусиленный паулиевский парамагнетизм, и возможно только возникновение спиновых флуктуаций (7).

При вычислении (6), наряду с условиями перевала учитывались требования, вытекающие из минимизации свободной энергии по объему элементарной кристаллической ячейки

$$\partial F / \partial V = 0.$$

Причем было получено, что возникновение в описанных парамагнитных системах локальных магнитных моментов (8) и (или) спиновых флуктуаций (7) возможно только при изменении объема элементарной ячейки

$$\Omega = (V - V_0)/V_0 \approx K^{-1} U^{-1} [M_s^2 + \langle m^2 \rangle], \quad (11)$$

которое с учетом условий седловой точки приведет к магнитному вкладу в ОКТР (см. ниже).

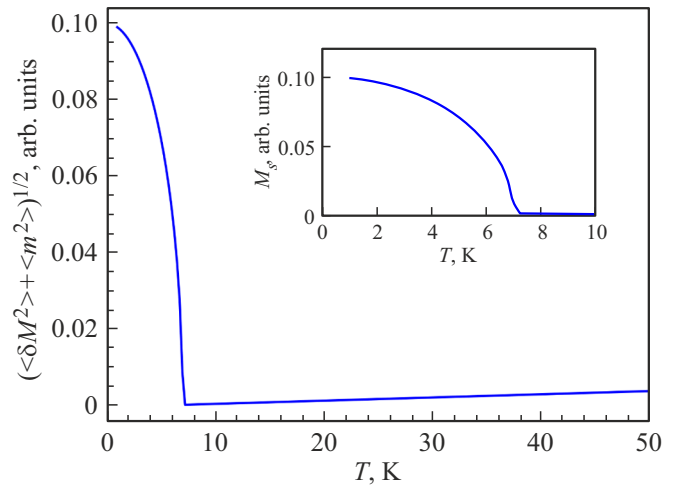


Рис. 5. Т-зависимость среднеквадратической амплитуды суммарной спиновой флуктуации и локальной намагниченности (вставка) при ТЭП.

5. ТЭП и температурная зависимость ОКТР

Для численного анализа эксперимента необходимо определить температурную зависимость химического потенциала $\mu(T)$. Поэтому модель низкотемпературного парамагнитного состояния с отрицательной межмодовой связью следует дополнить требованием электронейтральности для суммарного числа $s(p)$, d -электронов

$$N_e \approx N_S + \sum_{\alpha=\pm 1} \int d\varepsilon f(\varepsilon - \mu + \alpha U M) g(\varepsilon, V). \quad (12)$$

Здесь N_e — общее число электронов, N_S — число $s(p)$ -электронов, $f(\varepsilon - \mu)$ — функция Ферми-Дирака, $M = (\langle \delta M^2 \rangle + \langle m^2 \rangle)^{1/2}$. Численные решения уравнения (12) относительно химического потенциала описывают энергетический сдвиг $\mu(T)$ в энергетические пределы области размытия функции Ферми-Дирака с топологическими узлами электронном спектре, являющимся источником фаз Берри (рис. 4).

При этом можно видеть, что с увеличением температуры неоднородности пространственного распределения электронной плотности и области спиновых корреляций будут исчезать. В результате сдвига химического потенциала будет возникает ТЭП в область обменноусиленного паулиевского парамагнетизма со спиновыми флуктуациями (7) (рис. 5).

Проведенный численный анализ с использованием параметров из [16] (см. также (8)) показывает, что ТЭП будет происходить при температуре $T_s \approx 7$ K, что коррелирует с особенностями Т-зависимости ОКТР (вставка к рис. 1).

Температурная зависимость объемного коэффициента теплового расширения определялась через производную

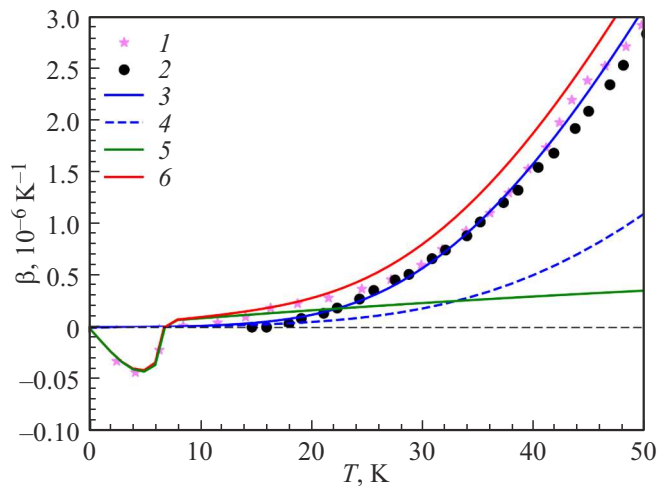


Рис. 6. Температурная зависимость ОКТР CoSi в парамагнитной области: 1 — экспериментальные данные [7], 2 — экспериментальные данные [5], 3 — вклад решеточного ангармонизма в настоящей работе, 4 — вклад решеточного ангармонизма в [8], 5 — вклад магнитной подсистемы, 6 — сумма ангармонического и магнитного вкладов.

относительного изменения объёма по температуре

$$\beta = \partial\Omega/\partial T.$$

Отметим, что в области низкотемпературного парамагнетизма флуктуации локальных магнитных моментов (7), несмотря на малые значения плотности электронных состояний вблизи уровня Ферми, заметно усиливаются вследствие межмодового взаимодействия. В результате оказывается, что в этой области температур спиновая магнитная подсистема оказывает значительно более сильное влияние на зависимость $\beta(T)$, чем фононный ангармонизм (рис. 6). Причем убывающий с ростом температуры вклад локальных магнитных моментов также оказывается значительно больше вклада, связанного с парамагнитными спиновыми флуктуациями (10), который с ростом температуры только растет.

Из формулы (11) и результатов расчета, приведенных на рис. 5 можно получить, что влияние спиновой магнитной подсистемы с локальными магнитными моментами приводит к отрицательному магнитному вкладу ОКТР, а в низкотемпературной парамагнитной области, лежащей выше температуры T_S , магнитный вклад становится положительным (рис. 6).

Выше температуры ТЭП, при котором локальные магнитные моменты исчезают (вставка к рис. 5), имеет место резкое возрастание не только фононного, но и парамагнитного вкладов в Т-зависимость $\beta(T)$. Численный анализ зависимости $\beta(T)$ при этом показывает, что основным механизмом этой зависимости выше температуры T_S остается фононный ангармонизм.

Можно ожидать, что внешнее магнитное поле будет приводить к подавлению спин-флуктуационных эффектов и к усилению влияния спин-орбитального взаимо-

действия. Однако изучение особенностей ТЭП и ОКТР во внешнем магнитном поле выходит за рамки данной работы и требует отдельного рассмотрения.

6. Заключение

Целью настоящей работы было изучение особенностей наблюдаемых на эксперименте парамагнитных фаз CoSi, в электронном спектре которых обнаружены топологические Г- и R-узлы, приводящие к образованию фаз Берри и фермионов Вейля. При этом получено, что в парамагнитной области температур происходит энергетический сдвиг химического потенциала за пределы топологических узлов, что приводит к ТЭП в область паулиевского парамагнетизма.

Использование метода универсальных потенциалов межатомного взаимодействия (UMLIP) позволило провести достаточно корректную оценку влияния на ОКТР фононного ангармонизма и рассмотреть магнитный вклад в ОКТР. Получено, что фононный вклад возрастает с температурой значительно сильнее чем в предыдущих работах (см., например, [8]). Однако это не приводит к качественному согласию с экспериментом в низкотемпературной парамагнитной области, и к количественному в области температур выше T_S .

Развитая с учетом результатов моделирования электронной структуры флуктуационная картина парамагнетизма CoSi описывает возникновение магнитообъемного эффекта, приводящего к отрицательному магнитному вкладу в ОКТР, объясняющему экспериментальные данные ниже температуры T_S . Выше T_S магнитный вклад в ОКТР становится положительным.

Рассмотренные здесь особенности Т-зависимости ОКТР CoSi, в частности, инвариантный эффект, связанный с отрицательным магнитным вкладом в области низких температур, могут оказаться полезными при создании новых многофункциональных материалов на основе топологических полуметаллов. При этом представляет интерес поиск новых материалов с более широким чем в CoSi температурным интервалом инвариантной области. В частности, необходимо изучить магнитообъемный эффект при топологическом электронном фазовом переходе в $\text{Co}_{1+x}\text{Si}_{1-x}$ (с $x = 0,03$), возникающем, как было показано в [16], в области комнатных температур.

Финансирование работы

Результаты получены в рамках задания Министерства науки и высшего образования, контракт № FEUZ-2026-0013.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] H. Wang, Sh. Xu, Xiao-Qin Lu, Xiao-Yan Wang, Xiang-Yu Zeng, Jun-Fa Lin, Kai Liu, Zhong-Yi Lu, Tian-Long Xia. *Phys. Rev. B* **102**, 115129 (2020).
- [2] M.A. Wilde, M. Doderhofs, A. Niedermayr, A. Bauer, M.M. Hirschmann, K. Alpin, A.P. Shnyder, C. Pfleiderer. *Nature* **594**, 374 (2021).
- [3] С.М. Стишов, А.Е. Петрова. *УФН* **193**, 6, 614 (2023).
- [4] S.M. Stishov, A.E. Petrova. *Phys. Rev. B* **86**, 064433 (2012).
- [5] A.E. Petrova, V.N. Krasnorussky, A.A. Shikov, W.M. Yuhasz, T.A. Lograsso, J.C. Lashley, S.M. Stishov. *Phys. Rev. B* **82**, 155124 (2010).
- [6] A.S. Antonov, S.V. Novikov, D.A. Pshenay-Severin, A.T. Burkov. *Semiconductors* **53**, 667 (2019).
- [7] A.A. Povzner, S.V. Kortov, P.V. Geld. *Phys. Status Solidi A* **114**, 1, 315 (1989).
- [8] A.N. Filanovich, A.A. Povzner. *Mater. Sci. Eng. B* **287**, 116133 (2023).
- [9] D. Wines, K. Choudhary. *ACS Mater. Lett.* **7**, 2105 (2025).
- [10] Y. Lysogorskiy, A. Bochkarev, R. Drautz. *npj Comput. Mater.* **12**, 114 (2026).
- [11] A. Togo, I. Tanaka. *Scr. Mater.* **108**, 1 (2015).
- [12] T. Qin, Q. Zhang, R.M. Wentzcovitch, K. Umemoto. *Comput. Phys. Commun.* 237, 199 (2019).
- [13] S. Nikolaev, D. Pshenay-Severin, Y. Ivanov, A. Burkov. *Crystals* **11**, 143 (2021).
- [14] T. Moriya. *Spin Fluctuations in Itinerant Electron Magnetism*. Springer, Berlin (1985). 246 с.
- [15] P. Giannozzi, O. Andreussi, T. Brumme, O. Bunau, M. Buongiorno Nardelli, M. Calandra, R. Car, C. Cavazzoni, D. Ceresoli, M. Cococcioni. *J. Phys.: Condens. Matter.* **29**, 46, 465901 (2017).
- [16] А.А. Повзнер, А.Г. Волков, А.Р. Кузнецов, Ю.Н. Горностырев, Э.И. Лопатко. *Письма в журнал „физика элементарных частиц и атомного ядра“* **22**, 3 (260), 383 (2025).
- [17] V. Heine. *Phys. Rev.* **153**, 673 (1967).

Редактор Ю.Э. Кутаев