

Магнитный момент атомов железа в ОЦК-сплавах Fe—Al в зависимости от ближайшего окружения

© А.К. Аржников, Л.В. Добышева

Физико-технический институт Уральского отделения Российской академии наук,
426001 Ижевск, Россия

E-mail: arzhnikov@otf.pti.udm.ru

(Поступила в Редакцию 19 ноября 2007 г.

В окончательной редакции 6 февраля 2008 г.)

Системы Fe—Al в области концентраций от 29 до 44 at.% Al исследуются с помощью теории функционала плотности. Показано, что в системе могут существовать три магнитных состояния, близкие по энергии. Два из них имеют коллинеарные магнитные моменты (ферромагнитное и антиферромагнитное), третье является спин-спиральным. В коллинеарных магнитных структурах величины локальных магнитных моментов определяются ближайшим химическим окружением, при этом в антиферромагнитном состоянии отрицательный магнитный момент имеют атомы железа, в окружении которых находится большое число атомов алюминия. Полученные результаты обосновывают использование модифицированных моделей типа Джаккарينو—Уолкера для интерпретации экспериментов в сплавах Fe-Al. Расчеты также указывают на большую роль стонеровских возбуждений в формировании магнитного порядка в этих сплавах.

Работа выполнена при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 06-02-16179).

PACS: 75.20.Hr, 75.50.Bb, 71.15.Ap

1. Введение

Практически вся история развития магнетизма в той или иной степени связана с исследованиями сплавов переходных металлов с *sp*-элементами. В настоящее время накоплен огромный экспериментальный и теоретический материал. Однако до сих пор интерпретация экспериментальных результатов вступает в противоречие с основами, на которых базируется теоретическое описание. Теория магнетизма переходных металлов опирается на положение о коллективизированном характере электронов, формирующих магнитный момент, в то время как интерпретация экспериментов в сложных системах исходит из локальности магнитных моментов и их парного взаимодействия. В ряде случаев эти противоречия удается обойти и получить теоретические результаты, которыми удобно пользоваться для описания экспериментов (см., например, [1,2]). В начале 90-х годов с помощью двухзонной модели Хаббарда удалось дать некоторое обоснование использования феноменологической модели Джаккарينو—Уолкера [3] в неупорядоченных сплавах переходных металлов с *sp*-элементами [4]. В дальнейшем для сплавов Fe—Si, Fe—Sn правомерность этого подхода была подтверждена расчетами на основе теории функционала плотности [5,6].

Основная идея модели Джаккарينو—Уолкера состоит в том, что в сплавах величина локального магнитного момента на атоме переходного металла определяется лишь химическим составом ближайшего окружения и слабо зависит от концентрации [3]. Именно этот основной вывод и следует из рассмотрения двухзонной модели Хаббарда для неупорядоченных сплавов переходных металлов с *sp*-элементами [4]. Также в [4] было указано,

что в такой модели не только величина локального магнитного момента зависит от ближайшего окружения, но и его направление: при некоторых параметрах модели с увеличением числа немагнитных атомов в ближайшем окружении локальный магнитный момент уменьшается и переворачивается противоположно направлению общей намагниченности. Модифицировав таким образом модель Джаккарينو—Уолкера, авторы работы [7] смогли хорошо описать в совокупности экспериментальные данные магнитных и мессбауэровских измерений в разупорядоченных и частично разупорядоченных сплавах Fe—Al.

Понятно, что модели, описывающие магнитный порядок в терминах локального окружения, в сплавах переходных металлов не могут претендовать на высокую точность. Тем не менее такие модели являются шагом вперед по сравнению с наиболее часто используемой сегодня моделью гайзенберговского типа, в которой магнитные моменты ближайших атомов взаимодействуют ферромагнитно, а магнитные моменты атомов железа, между которыми находится атом алюминия, взаимодействуют антиферромагнитно (см., например, [8]). Эта модель появилась еще в конце 50-х годов [9] и позволила объяснить некоторые зависимости магнитного упорядочения в сплавах Fe—Al.

С течением времени был выявлен ряд дополнительных особенностей поведения намагниченности в этих сплавах, при этом основное внимание сосредоточилось на наиболее интересной области концентраций от 29 до 50 at.% Al для квазиупорядоченных и от 40 до 60 at.% Al для неупорядоченных сплавов. Достаточно надежно было установлено, что ниже и выше этих концентраций сплавы находятся соответственно в фер-

ромагнитном и парамагнитном состояниях, а в промежуточной области реализуются магнитные состояния более сложного типа.

К началу 80-х годов большинство исследователей было уверено, что в промежуточной области при низких температурах сплавы являются спиновыми стеклами. Однако некоторые экспериментальные данные, которые традиционно связывались с состоянием спинового стекла, как выяснилось, имеют иную природу. Например, термополевой гистерезис в этих сплавах, который рассматривался как прямое доказательство присутствия спинового стекла [10], на самом деле является следствием обычного магнитного гистерезиса [11].

Недавно с помощью нейтронографических исследований было показано, что при низких температурах существенный вклад в магнитное упорядочение вносят волны спиновой плотности [8]. В то же время при высоких температурах сплавы являются супермагнитными со сложным распределением магнитных кластеров по размерам [11,12].

Таким образом, успехи интерпретации экспериментальных данных на основе достаточно простой модели, с одной стороны, и дополнительные сведения о сложном концентрационном и температурном поведении магнитного порядка в сплавах Fe–Al, с другой стороны, стимулировали наши теоретические исследования.

В настоящей работе на основе теории функционала плотности проведено исследование поведения магнитных моментов на атомах железа ряда периодических систем Fe_nAl_m . Системы выбирались таким образом, чтобы охватить интересующий нас интервал концентраций и получить набор различных химических конфигураций ближайшего окружения атома железа.

2. Модели

Как показывает эксперимент, неупорядоченные и квазиупорядоченные сплавы Fe–Al сохраняют ОЦК-решетку при концентрациях Al от 0 до 60 at.% [13]. Поэтому мы моделировали системы на ОЦК-решетке, в узлах которой располагали атомы железа и алюминия (см., например, рис. 1). Нами проведены расчеты модельных систем $Fe_{38}Al_{16}$ (29.6 at.% Al, $3 \times 3 \times 3$ суперъячейка с 54 атомами, 10 неэквивалентных позиций атома железа Fe: с 0, 3, 4, 6 и 8 атомами Al в ближайшем окружении (NN)), $Fe_{22}Al_{10}$ (31.3 at.% Al, $\sqrt{2} \times 2\sqrt{2} \times 4$ суперъячейка с 32 атомами, 5 неэквивалентных позиций Fe: с 0, 4, 5 и 6 Al в NN), $Fe_{34}Al_{20}$ (37.0 at.% Al $3 \times 3 \times 3$ суперъячейка с 54 атомами, 6 неэквивалентных позиций Fe: с 0, 4, 6 и 8 Al в NN), $Fe_{10}Al_6$ (37.5 at.% Al, $2 \times 2 \times 2$ суперъячейка с 16 атомами, две неэквивалентные позиции Fe: с 0 и 6 Al в NN), Fe_9Al_7 (43.8 at.% Al, $2 \times 2 \times 2$ суперъячейка с 16 атомами, две неэквивалентные позиции Fe: с 0 и 7 Al в NN). Расчеты проводились полнопотенциальным методом линейаризованных плоских волн FP LAPW (пакет программ WIEN2k [14]).

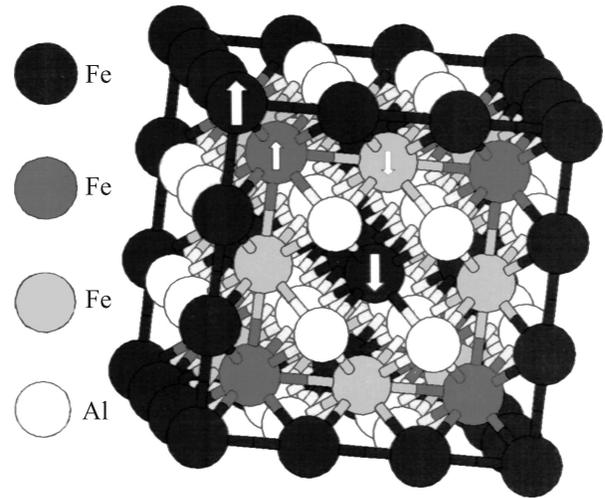


Рис. 1. Структура сплава $Fe_{34}Al_{20}$. Показана элементарная ячейка. Белые шары соответствуют атомам Al, черные в углах и на ребрах ячейки — атомам железа с окружением $[00120]$ и $[0480]$, черные в центре ячейки — $[80016]$ и $[80024]$, два типа серых шаров — атомам $[40018]$ и $[60016]$, стрелки показывают направление магнитного момента на атоме (см. таблицу).

Обменно-корреляционный потенциал брался в приближении локальной плотности (LDA) [15], так как известно, что LDA позволяет получать магнитные характеристики, более близкие к эксперименту, чем обобщенное градиентное приближение [16], которое в свою очередь лучше описывает равновесные параметры решетки (решеточные свойства) переходных металлов [17].

В методе FP LAPW волновые функции, зарядовая плотность и потенциал раскладываются по сферическим гармоникам в неперекрывающихся атомных сферах радиуса R_{MT} и по плоским волнам в остальной области элементарной ячейки. Базисный набор функций расщеплен на валентную и остовную части. Уровни $1s$, $2s$, $2p$ и $3s$ для железа и уровни $1s$ и $2s$ для алюминия рассматриваются как остовные. Эти состояния рассчитываются в приближении сферического потенциала, и предполагается, что они имеют сферически-симметричную зарядовую плотность, почти полностью заключенную внутри маффин-тин сферы радиуса R_{MT} . Радиус сфер был выбран $R_{MT} = 2.25$ а.е. для всех атомов. Разложение волновых функций для валентных электронов внутри атомных сфер ограничено $l_{max} = 10$, и они рассчитывались в потенциале, разложенном по сферическим гармоникам до $l = 4$. Мы использовали смешанный LAPW (Fe– sp -состояния)/APW + lo (local orbital) (Fe– d -состояния) базис [18]. Волновые функции в междоузлии раскладываются по плоским волнам с вектором обрезания K_{max} , определенным соотношением $R_{MT}K_{max} = 7$. $R_{MT}K_{max}$ — один из основных параметров, влияющих на точность вычислений; для APW + lo-базиса величина 7 является достаточной. Зарядовая плотность разложена в ряд Фурье до $G_{max} = 20$. Практика по-

казывает, что такой выбор параметров обеспечивает необходимую точность вычислений для исследуемых систем.

Локальным магнитным моментом далее будем называть суммарный магнитный момент внутри маффинтин сферы. Средний магнитный момент равен полному магнитному моменту элементарной ячейки, деленному на число атомов железа в ячейке.

3. Результаты и их обсуждение

Во всех исследуемых системах обнаружены два решения с коллинеарными магнитными моментами. В одном из них направления локальных магнитных моментов совпадают, в другом существуют магнитные моменты с противоположными направлениями. В дальнейшем первое условно будем называть „ферромагнитным“ (FM), второе — „антиферромагнитным“ (AFM). Отметим, что AFM-решение отсутствует, если в системе нет конфигураций с шестью и более атомами Al в ближайшем окружении; например, такое распределение атомов Al по координационным схемам можно смоделировать в системе с 31.3at.% Al, используя элементарную ячейку Fe₁₁Al₅.

Причиной переворота магнитного момента в AFM-состоянии не является изменение знака прямого обменного взаимодействия между электронами соседних узлов, так как симметрии волновых функций и распределение плотности электронов на атомах железа практически не зависят от числа атомов Al в окружении. Переворот локального магнитного момента происходит вследствие квантовых эффектов взаимодействия частично локализованных состояний электронов в конфигурациях с большим числом атомов Al в ближайшем окружении с коллективизированными состояниями в зоне, как это было показано на примере модельной системы в работе [4].

На рис. 2 для примера представлены зависимости полных энергий, приходящихся на элементарную ячейку, от параметра кристаллической решетки для систем Fe₂₂Al₁₀, Fe₁₀Al₆ и Fe₉Al₇. Аналогичные зависимости получены и для других исследуемых систем. Эти зависимости позволяют определить, какое из двух состояний имеет наименьшую энергию, и получить равновесный параметр кристаллической решетки. FM- и AFM-решения исследовались при разных параметрах решетки — начиная от экспериментального и до равновесного (т.е. параметра, при котором реализуется минимум полной энергии). Для всех представленных структур существует область параметра решетки, в которой оба решения стабильны. При уменьшении параметра решетки FM-решение может стать нестабильным, при этом точность вычислений ухудшается до тех пор, пока решение полностью не исчезнет. Например, это относится к ферромагнитному решению в системе Fe₁₀Al₆ (рис. 2).

Рассчитанные значения равновесных параметров решетки для FM- и AFM-упорядочения близки (рис. 2, си-

стема Fe₉Al₇), но меньше экспериментально наблюдаемых [7,13]. Зависимость равновесного параметра решетки от концентрации качественно соответствует экспериментальной. Вероятнее всего, систематические различия

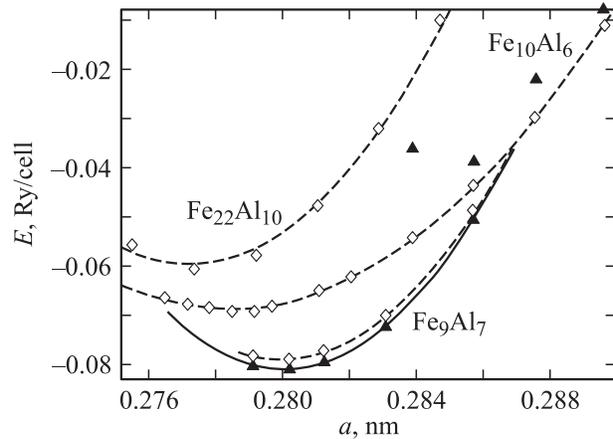


Рис. 2. Зависимость полной энергии от параметра решетки. Треугольники и сплошная линия относятся к FM-состоянию, ромбы и штриховые линии — к AFM-состоянию. Кривые, относящиеся к разным системам, сдвинуты по энергии относительно друг друга.

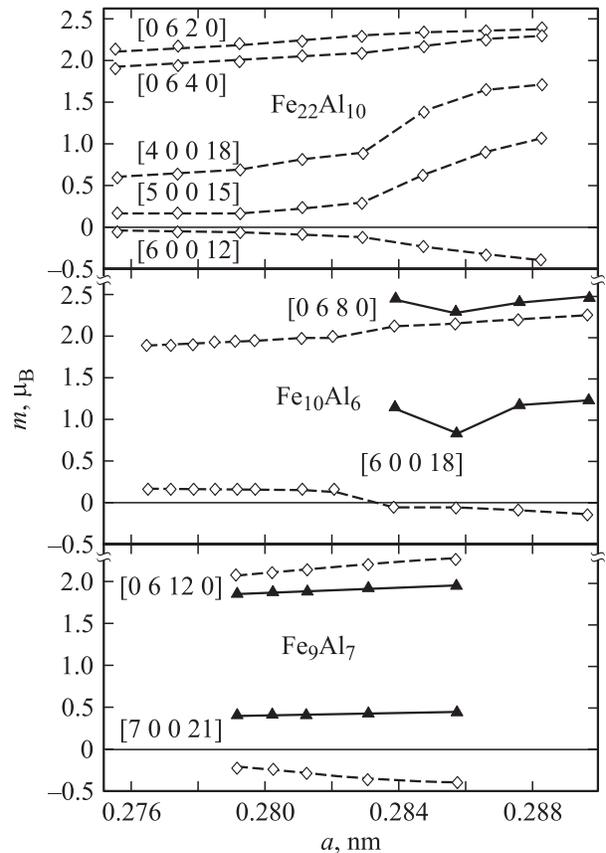


Рис. 3. Зависимость локальных магнитных моментов от параметра решетки для разных конфигураций ближайшего окружения. Треугольники и сплошные линии относятся к FM-состоянию, ромбы и штриховые линии — к AFM-состоянию.

Периодическая структура и соответствующая ей концентрация Al; равновесный параметр решетки и средний магнитный момент; конфигурация окружения атома железа $[klmn]$ (число атомов Al в 1–4 координационных сферах), его магнитный момент, число атомов этого типа в элементарной ячейке

Fe ₃₈ Al ₁₆ (29.6%) 0.2776 nm, 0.78μ _B	Fe ₂₂ Al ₁₀ (31.3%) 0.2776 nm, 0.70μ _B	Fe ₃₄ Al ₂₀ (37.0%) 0.2789 nm, 0.45μ _B	Fe ₁₀ Al ₆ (37.5%) 0.2789 nm, 0.51μ _B	Fe ₉ Al ₇ (43.8%) 0.2802 nm, 0.03μ _B
[0 0 8 0], 2.17μ _B × 1	[0 6 2 0], 2.16μ _B × 1	[0 0 12 0], 2.22μ _B × 1	[0 6 8 0], 1.93μ _B × 2	[0 6 12 0], 2.12μ _B × 1
[0 2 6 0], 2.12μ _B × 4	[0 6 4 0], 1.96μ _B × 2	[0 4 8 0], 2.08μ _B × 6		
[0 2 8 0], 2.12μ _B × 4				
[0 4 8 0], 2.03μ _B × 2				
[3 0 0 14], 0.92μ _B × 8				
[4 0 0 14], 0.31μ _B × 8	[4 0 0 18], 0.63μ _B × 2	[4 0 0 18], 0.66μ _B × 8		
[4 0 0 16], 0.47μ _B × 2				
[6 0 0 16], −0.15μ _B × 4	[5 0 0 15], 0.15μ _B × 4	[6 0 0 16], −0.09μ _B × 12	[6 0 0 18], 0.17μ _B × 8	[7 0 0 21], −0.24μ _B × 8
[8 0 0 12], −0.56μ _B × 4	[6 0 0 12], −0.06μ _B × 2	[8 0 0 16], −0.45μ _B × 6		
[8 0 0 16], −0.59μ _B × 1		[8 0 0 24], −0.74μ _B × 1		

расчетных и экспериментальных значений связаны с приближением LDA, которое использовалось в нашей работе (см. раздел 2).

На рис. 3 для тех же систем представлены зависимости величин локальных магнитных моментов от параметра кристаллической решетки для различных конфигураций ближайшего окружения. Увеличение числа атомов Al в ближайшем окружении приводит к усилению *sp-d*-гибридизации, уширению пиков и уменьшению величины магнитного момента. На атомах железа с четырьмя, пятью и шестью атомами Al в ближайшем окружении распределение по энергии электронов со спином вверх в AFM-решении имеет глубокий минимум вблизи уровня Ферми, что и определяет существенные изменения величины магнитного момента на этих атомах при изменении параметра решетки от 0.282 до 0.286 nm (рис. 3).

Для систем Fe₂₂Al₁₀, Fe₃₄Al₂₀, Fe₁₀Al₆ полная энергия состояния с AFM-типом упорядочения лежит ниже на 3–25 mRy/cell, чем энергия FM-состояния. В системах Fe₃₈Al₁₆ и Fe₉Al₇ FM-упорядочение предпочтительней (рис. 2).

В таблице приведены результаты, касающиеся состояний с AFM-типом упорядочения при равновесных

параметрах решетки. Изменения величины магнитного момента и его направления с хорошей точностью определяются химической конфигурацией первой координационной сферы, что подтверждает наши выводы, сделанные ранее в работе [4]. Особенно наглядно это демонстрирует рис. 4, который показывает практически линейный характер этой зависимости. Следует отметить, что полученная зависимость несколько отличается от модифицированной модели Джаккарино–Уолкера [7], используемой для описания экспериментальных данных, хотя и сохраняет главную черту: уменьшение локального магнитного момента железа и его переворот с увеличением числа атомов алюминия в ближайшем окружении.

На рис. 5 приведены средние магнитные моменты, рассчитанные в настоящей работе, и экспериментальные данные для квазиупорядоченных сплавов [7,19]. Учитывая то, что мы исследовали периодические системы, а экспериментальные образцы частично разупорядочены, можно считать согласие с экспериментом вполне удовлетворительным. Особенно это проявляется для концентраций алюминия выше 35–40 at.%. Как показано в [19], в этой области в упорядоченных сплавах средний магнитный момент на атомах железа равен нулю, что

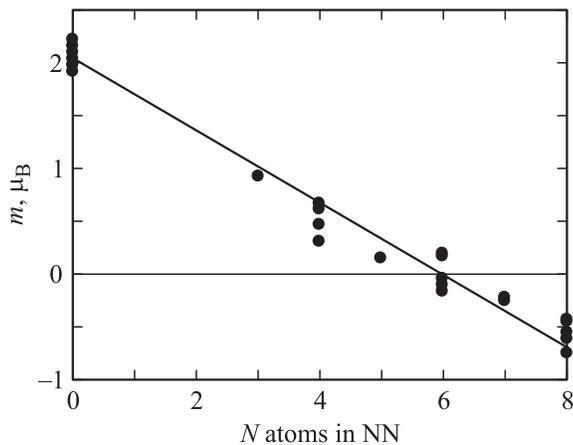


Рис. 4. Зависимость локального магнитного момента на атоме железа от числа атомов Al в первой координационной сфере (AFM-решения).

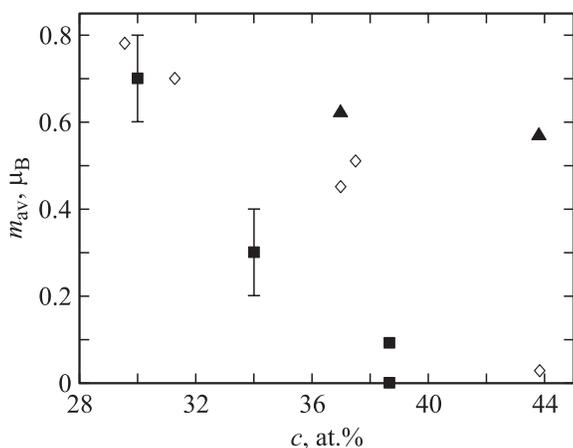


Рис. 5. Зависимость среднего магнитного момента на атоме железа от концентрации Al в сплаве. Треугольники — результаты настоящей работы для FM-состояний, ромбы — для AFM-состояний, квадраты — экспериментальные значения [7,19].

согласуется с AFM-упорядочением, FM-решение дает $0.5–0.6\mu_B$.

На рис. 6 для системы $Fe_{34}Al_{20}$ приведены значения локальных магнитных моментов и полной энергии элементарной ячейки в зависимости от температуры электронной подсистемы (при расчете уровня Ферми заполнение уровней энергетического спектра проводится с использованием функции Ферми, что можно выполнить в рамках пакета программ [14]). Этот способ моделирует термодинамические возбуждения стонеровского типа [20]. Результат показывает, что их влияние велико и сравнимо по величине с гайзенберговскими возбуждениями. Напомним, что для переходных металлов характерная энергия стонеровских возбуждений составляет десятки тысяч градусов, и считается, что в обычных условиях они не существенны [1]. В данном случае с ростом электронной температуры энергетиче-

ский спектр претерпевает изменения, что приводит к изменению магнитного упорядочения от AFM к FM при относительно низких температурах (рис. 6). Этот результат подтверждает аналогичные выводы для неупорядоченных сплавов переходных металлов с *sp*-элементами, которые были получены ранее в модельном расчете с гамилтонианом Хаббарда [21].

Нейтроннографические исследования [8] показали, что при температурах менее 120 К в сплавах Fe–Al существуют волны спиновой плотности. Следует отметить, что в этих исследованиях нельзя различить волну спиновой плотности в коллинеарной структуре и спиральную волну. Отсутствие физических причин возникновения коллинеарной волны спиновой плотности, таких как нестинг в поверхности Ферми, и наличие беспорядка позволяют предположить, что в этом сплаве реализуется спиральная волна спиновой плотности. В работе [12] мы проводили расчеты неколлинеарных спин-спиральных состояний в зависимости от волнового вектора *q*, определяющего угол поворота магнитных

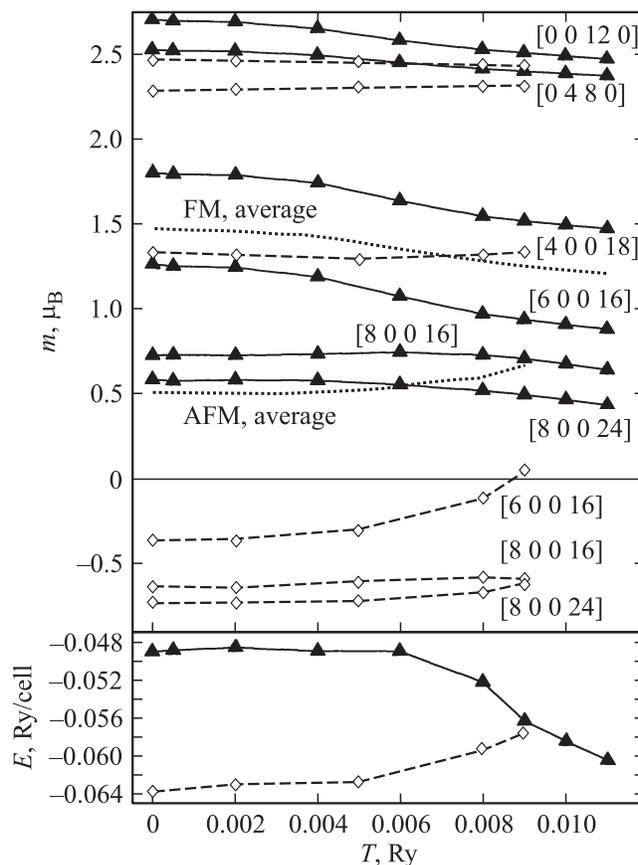


Рис. 6. Зависимость локальных магнитных моментов на атомах железа и полной энергии в системе $Fe_{34}Al_{20}$ от температуры электронной подсистемы (расчет при экспериментальном параметре решетки). Треугольники и сплошные линии относятся к FM-состоянию, ромбы и штриховые линии — к AFM-состоянию. Жирные пунктирные линии показывают поведение среднего магнитного момента, приходящегося на атом железа, в FM- и AFM-состояниях.

моментов в пространстве. Методика расчета [22,23] связана с использованием обобщенной теоремы Блоха, расчеты проводились на тех же ячейках, что и расчеты коллинеарных состояний для $\text{Fe}_{10}\text{Al}_6$ и Fe_9Al_7 , что позволяет сравнивать энергии коллинеарных состояний со спин-спиральными. Данные [12] и расчет в системе Fe_9Al_7 авторов [24] показывают, что энергия спиральной волны ниже энергии АФМ-состояния на 2–3 mRy/cell. В условиях близости по энергии различных магнитных состояний и при наличии беспорядка естественно ожидать, что наложение магнитного поля или повышение температуры будут приводить к переходам от одного типа магнитного упорядочения к другому.

4. Заключение

Таким образом, показано, что в области концентраций от 29 до 43 at.% в сплавах Fe–Al существуют два коллинеарных магнитных состояния: ферромагнитного и антиферромагнитного типа. Ранее для двух систем, Fe_9Al_7 и $\text{Fe}_{10}\text{Al}_6$, нами были исследованы неколлинеарные магнитные упорядочения в виде спиральных спиновых структур [12]. Для каждой системы энергии трех состояний близки, и это позволяет утверждать, что при внешних воздействиях (температура, магнитное поле) малой интенсивности сплав может переходить из одного магнитного состояния в другое. Характер перехода не ясен, но очевидно, что стонеровские возбуждения играют существенную роль в перестройке локальной электронной структуры и изменении магнитного порядка.

Как показывает эксперимент, при температурах ниже 120 К магнитное состояние определяется спиральными магнитными структурами. Выше этих температур или в сильных магнитных полях намагниченность сплавов описывается на основе модифицированных моделей Джаккарино–Уолкера, т.е. с помощью коллинеарных моделей. Наш расчет подтверждает возможность использования моделей, в которых величина магнитного момента на атоме железа и его направление определяются химическим составом ближайшего окружения. Эта зависимость (рис. 4), полученная для упорядоченных систем, может быть с полным основанием использована для неупорядоченных систем, так как локализация электронов за счет беспорядка значительно ослабляет влияние дальних координационных сфер.

Список литературы

- [1] Т. Мория. Спиновые флуктуации в магнетиках с коллективизированными электронами. Мир, М. (1988).
- [2] А.К. Аржников, Л.В. Добышева, Е.П. Елсуков, А.В. Загайнов. ЖЭТФ **110**, 1127 (1996).
- [3] V. Jaccarino, L.R. Walker. Phys. Rev. Lett. **15**, 258 (1965).
- [4] А.К. Аржников, Л.В. Добышева. J. Magn. Magn. Mater. **117**, 87 (1992).
- [5] А.К. Аржников, Л.В. Добышева, Ф. Брауэрс. ФТТ **42**, 86 (2000).

- [6] A.K. Arzhnikov, L.V. Dobysheva. Phys. Rev. B **62**, 5324 (2000).
- [7] E.P. Elsukov, E.V. Voronina, A.V. Korolev, A.E. Elsukova, S.K. Gorodikov. Phys. Met. Metallogr. **104**, 35 (2007).
- [8] D.R. Noakes, A.S. Arrott, M.G. Belk, S.C. Deevi, Q.Z. Huang, J.W. Lynn, R.D. Shull, D. Wu. Phys. Rev. Lett. **91**, 217 201 (2003).
- [9] H. Sato, A. Arrott. Phys. Rev. **114**, 1427 (1957).
- [10] S. Takahashi, X.G. Li, A. Chiba. J. Phys.: Cond. Matter **8**, 11 243 (1996).
- [11] Е.П. Елсуков, Е.В. Воронина, А.В. Королев, P. Gaczynski, H. Drulis. ФММ **98**, 5, 30 (2004).
- [12] A.K. Arzhnikov, L.V. Dobysheva, M.A. Timirgazin. Condmat/09070793 v1 (2007); <http://arxiv.org/abs/0709.0793>.
- [13] A. Taylor, R.M. Jones. J. Phys. Chem. Solids **6**, 16 (1958).
- [14] P. Blaha, K. Schwarz, G.K.H. Madsen, D. Kvasnicka, J. Luitz. WIEN2k. An augmented plane wave + local orbital program for calculating crystal properties/Karlheinz Schwarz. Techn. Universität Wien, Austria (2001).
- [15] J.P. Perdew, Y. Wang. Phys. Rev. B **45**, 13 244 (1992).
- [16] J.P. Perdew, S. Burke, M. Ernzerhof. Phys. Rev. Lett. **77**, 3865 (1996).
- [17] S. Cottenier, B. De Vries, J. Meersschant, M. Rots. J. Phys.: Cond. Matter **14**, 3275 (2002).
- [18] G.K.H. Madsen, P. Blaha, K. Schwarz, E. Sjøstedt, L. Nordstrom. Phys. Rev. B **64**, 195 134 (2001).
- [19] H. Gengnagel, M.J. Besnus, H. Danan. Phys. Status Solidi A **13**, 499 (1972).
- [20] П. Уайт. Квантовая теория магнетизма. Мир, М. (1985). 304 с.
- [21] A.K. Arzhnikov, L.V. Dobysheva. Phys. Lett. A **195**, 176 (1994).
- [22] R. Laskowski, G.K.H. Madsen, P. Blaha, K. Schwarz. Phys. Rev. B **69**, 140 408 (R) (2004).
- [23] J. Kunes, R. Laskowski. Phys. Rev. B **70**, 174 415 (2004).
- [24] J. Bogner, W. Steiner, M. Reissner, P. Mohn, P. Blaha, K. Schwarz, R. Krachler, H. Ipsen, B. Sepiol. Phys. Rev. B **58**, 14 922 (1998).