

# Исследование сверхтонких квадрупольных взаимодействий в соединениях $UGe_2$ и $UAl_2$ на пробных ядрах $^{111}Cd$ методом возмущенных угловых корреляций

А. В. Цвященко<sup>+∇</sup>, Л. Н. Фомичева<sup>+</sup>, А. В. Саламатин<sup>\*</sup>, А. И. Величков<sup>\*</sup>, О. И. Кочетов<sup>\*</sup>, Г. К. Рясный<sup>∇</sup>,  
А. А. Сорокин<sup>∇</sup>, М. Будзински<sup>□</sup>

<sup>+</sup> Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН, 142190 Троицк, Московская обл., Россия

<sup>\*</sup> Объединенный институт ядерных исследований, 141980 Дубна, Московская обл., Россия

<sup>∇</sup> Научно-исследовательский институт ядерной физики им. Д.В. Скобельцына МГУ им. М.В. Ломоносова, 119899 Москва, Россия

<sup>□</sup> Institute of Physics, M. Curie-Skłodowska University, 20-031, Lublin, Poland

Поступила в редакцию 14 декабря 2008 г.

После переработки 11 февраля 2009 г.

Методом возмущенных угловых  $\gamma\gamma$ -корреляций на пробных ядрах  $^{111}Cd$  в интерметаллических соединениях  $UGe_2$  и  $UAl_2$  в диапазоне температур 100–300 К измерены параметры ядерного квадрупольного сверхтонкого взаимодействия. Результаты, полученные для  $UGe_2$ , указывают на выраженный анизотропный характер в распределении  $f$ -электронов, что согласуется с данными по расчету электронной структуры этого соединения. В  $UAl_2$  наблюдается менее значительная степень гибридизации между  $f$ -электронами U и  $p$ -электронами Al, чем степень гибридизации между  $f$ -электронами U и  $p$ -электронами Ge в  $UGe_2$ .

PACS: 71.20.Lp, 71.27.+a, 76.80.+y

Распределение заряда в твердом теле является важным фактором для понимания таких явлений, как сверхпроводимость, смешанная валентность и др. В кристаллических решетках в позициях атомов с некубической симметрией распределение заряда создает градиент электрического поля (ГЭП). Квадрупольное сверхтонкое взаимодействие (КСТВ) между ядерным квадрупольным моментом  $Q$  и ГЭП в месте расположения ядра приводит к расщеплению ядерных уровней. Исследование таких взаимодействий в металлах и сплавах выполняется различными широко распространенными методами (эффект Мессбауэра, ЯКР и др.). Менее известным среди них является дифференциальный метод возмущенных угловых корреляций (ДВУК), позволяющий работать с источниками (объектами исследования) в любых агрегатных состояниях. Используя этот метод, можно измерять зависимость параметров сверхтонких взаимодействий от температуры и давления в соединениях с минимальной концентрацией пробных радиоактивных атомов.

В методе ДВУК радиоактивные атомы, в распаде ядер которых имеется подходящий каскад гамма-переходов, вводятся в исследуемый объект (в кристаллическую решетку металлов, соединений, в органические вещества, жидкости и др.). Такие ядра по-

лучили название “пробных” ядер. В экспериментах ДВУК на временном спектре задержанных совпадений прослеживается процесс распада промежуточного состояния гамма-каскада в условиях взаимодействия ядра в этом состоянии с внеядерными полями, созданными окружающей средой. При взаимодействии с внеядерными полями (магнитным и/или градиентом электрического поля) в кристаллах промежуточное состояние расщепляется на сверхтонкие подуровни, переходы между которыми проявляются как прецессия спина ядра вокруг главной оси поля. Экспонента распада промежуточного состояния пробного ядра оказывается промодулированной частотами, соответствующими энергиям переходов. Модуляция описывается фактором (функцией) возмущения  $G_{22}(t)$  и экспериментальная дифференциальная угловая анизотропия  $R(t) = -Q_2 A_{22} G_{22}(t)$  содержит всю информацию о сверхтонком взаимодействии в исследуемом образце. Фактор возмущения  $G_{22}(t)$  получают из экспериментальной угловой анизотропии  $R(f) = -Q_2 A_{22} G_{22}(t)$ , которая определяется комбинацией спектров совпадений  $N(90^\circ, t)$  и  $N(180^\circ, t)$ , зарегистрированных детекторами, расположенными друг к другу под углами  $90^\circ$  и  $180^\circ$  [1]:

$$R(t) = 2[N(180^\circ, t) - N(90^\circ, t)] / [N(180^\circ, t) + 2N(90^\circ, t)].$$

В настоящей работе пробным является ядро  $^{111}\text{Cd}$ , которое образуется при распаде  $^{111}\text{In}$  с периодом полураспада  $T_{1/2} = 65$  ч и каскадом гамма-квантов 172–247 кэВ с промежуточным состоянием 247 кэВ, которое имеет период полураспада  $T_{1/2} = 84$  нс и ядерный спин  $I = 5/2$ . Материнский изотоп  $^{111}\text{In}$  получался активацией естественного серебра (Ag) по реакции  $^{109}\text{Ag}(\alpha, 2n)^{111}\text{In}$  в потоке  $\alpha$ -частиц с энергией 30 МэВ.

Методом ДВУК нами были исследованы параметры квадрупольного сверхтонкого взаимодействия в интерметаллических соединениях  $\text{UGe}_2$  и  $\text{UAl}_2$ . В последнее время в зонном ферромагнетике  $\text{UGe}_2$  с температурой Кюри 52 К была открыта сверхпроводимость, индуцированная давлением [2, 3]. Сверхпроводящее состояние в  $\text{UGe}_2$  появляется в диапазоне давлений 1–1.6 ГПа с максимальной температурой сверхпроводящего перехода  $T_c \approx 0.7$  К при давлении  $P_c \approx 1.2$  ГПа [2–7].

Кристаллическая структура  $\text{UGe}_2$  была определена методом рентгеновской дифракции на монокристалле [8] и методом нейтронной дифракции на поликристаллическом образце [9]. Было обнаружено, что соединение  $\text{UGe}_2$  имеет объемно-центрированную орторомбическую кристаллическую структуру типа  $\text{ZrGa}_2$  (пространственная группа  $Cm\bar{m}$ ). Она состоит из атомных слоев, чередующихся вдоль  $b$ -оси в последовательности U-Ge(1)-Ge(1)-U-Ge(2), Ge(3)-U-Ge(1)-Ge(1)-U-Ge(2), Ge(3)-...

Расчеты электронной зонной структуры соединения  $\text{UGe}_2$  [10] показали, что уровень Ферми пересечен зонами, образованными  $5f$ -электронами урана, которые имеют низкую дисперсию вдоль  $k_y$  ( $\hat{b}$ -направление), что предполагает квази-двумерный (в плоскости  $\hat{a}-\hat{c}$ ) характер электронной структуры вблизи энергии Ферми. На анизотропию электронной структуры в соединении  $\text{UGe}_2$  указывают также измерения сверхтонких параметров на ядре  $^{119}\text{Sn}$  методом эффекта Мессбауэра (ЭМ) [11]. В этой работе было обнаружено, что ГЭП в позиции Ge(1) характеризуется параметром асимметрии  $\eta$ , равным 1. Исследование  $\text{UGe}_2$ , проведенное методом ядерного квадрупольного резонанса (ЯКР) [7] на ядрах  $^{73}\text{Ge}$ , также показало, что параметр асимметрии для узла Ge(1)  $\eta = 0.98$ . Однако детального исследования параметров сверхтонкого квадрупольного взаимодействия в этих работах не проводилось. Для получения более полной информации о параметрах КСТВ мы продолжили их изучение методом ДВУК, который, по сравнению с другими ядерно-физическими методами, позволяет достаточно надежно определять эти параметры. Ранее методом ДВУК на пробных яд-

рах  $^{111}\text{Cd}$ , локализованных в узлах алюминия, было изучено достаточно много соединений редкоземельных металлов составов  $\text{REAl}_2$  [12–14] и  $\text{RERu}_2$  (где RE – редкоземельные металлы) [15, 16] с кристаллической структурой типа  $\text{MgCu}_2$ . Соединение  $\text{UAl}_2$  (тип  $\text{MgCu}_2$ ) с электронной структурой, в которой  $5f$ -зона перекрывается  $6d$ -зоной [17] и в котором при низких температурах проявляется ферромагнитная спиновая флуктуация [18], всегда вызывало большой интерес, но методом ДВУК не изучалось. Поскольку работ по изучению урановых соединений методом ДВУК в литературе известно ограниченное количество, мы решили сначала исследовать соединение  $\text{UAl}_2$ , которое является наиболее простым, по сравнению с  $\text{UGe}_2$ , поскольку имеет только один неэквивалентный узел алюминия с  $3m$  симметрией и не является слоистым. Результаты предыдущих работ [12–14] дали нам основание сделать предположение, что в соединении  $\text{UAl}_2$  пробное ядро  $^{111}\text{Cd}$  также должно локализоваться в кристаллографическом узле алюминия. Мы полагали, что это позволит нам провести сравнение параметров КСТВ, полученных методом ДВУК для кубического  $\text{UAl}_2$  и для более сложного слоистого орторомбического соединения  $\text{UGe}_2$ .

Соединение  $\text{UGe}_2$  было приготовлено в дуговой печи плавлением смеси исходных компонентов, имеющей состав, близкий к стехиометрическому (U брали с избытком  $\approx 3$  вес. %). Пробные атомы  $^{111}\text{In}$  вводились в  $\text{UGe}_2$  повторным плавлением смеси соединения  $\text{UGe}_2$  ( $\approx 600$  мг) с кусочками активированной серебряной фольги, содержащей  $^{111}\text{In}$  ( $\approx 0.5$  мг). Источники  $\text{UAl}_2$  были получены, как и другие фазы Лавеса, способом, описанным в работе [18]. Рентгеноструктурный анализ образцов  $\text{UAl}_2$  и  $\text{UGe}_2$  показал, что они являются однофазными. Соединение  $\text{UAl}_2$  имеет кубическую структуру типа  $\text{MgCu}_2$  (пр. гр.  $Fd\bar{3}m$ ) с параметром элементарной ячейки  $a_0 = 7.763$  Å; соединение  $\text{UGe}_2$  имеет орторомбическую структуру типа  $\text{ZrGa}_2$  с параметрами элементарной ячейки  $a_0 = 3.99$  Å,  $b_0 = 15.09$  Å и  $c_0 = 4.11$  Å.

Спектры ДВУК измерялись на 4-детекторном спектрометре [19] в диапазоне температур от 100 до 300 К. При этих температурах соединения  $\text{UGe}_2$  и  $\text{UAl}_2$  находятся в парамагнитном состоянии. Временная модуляция (возмущение) угловой гамма-гамма корреляции статическим электрическим квадрупольным взаимодействием для поликристаллического источника в парамагнитном состоянии описывается функцией возмущения [1]

$$G_{22}(t, \nu_Q, \eta, \Lambda) = s_{20} + \sum_{n=1}^3 s_{2n} \cos(\omega_n t) \exp(-\Lambda \omega_n t),$$

где  $\nu_Q = eQV_{ZZ}/h$  является константой квадрупольного взаимодействия (или квадрупольной частотой). Здесь  $e$  – элементарный заряд,  $Q = 0.83$  б – квадрупольный момент ядра,  $V_{ZZ}$  – главная компонента тензора ГЭП, характеризуемого также параметром асимметрии  $\eta = (V_{xx} - V_{yy})/V_{zz}$ , где  $V_{ii} = \delta^2 V / \delta i^2$  ( $i = x, y, z$ ) – компоненты тензора ГЭП с  $|V_{xx}| \leq |V_{yy}| \leq |V_{zz}|$ . От параметра  $\eta$  зависит соотношение частот  $\omega_1/\omega_2$ , что позволяет вычислить параметр  $\eta$  по результатам эксперимента. Коэффициенты  $s_{2n}$  представляют амплитуды парциальных частот  $\omega_n$ . В нашем случае, когда  $I = 5/2$ ,  $n = 3$ . При этом  $s_{20}$  отражает вклад невозмущенных ядер. Экспонента учитывает возможный разброс ГЭП от ядра к ядру из-за дефектов кристаллической структуры. Дисперсия этого разброса описывается распределением Лоренца с полушириной  $\Lambda$ . Обработка измеренной экспериментальной дифференциальной анизотропии  $R(t) = -A_{22}Q_{22}G_{22}(t)$  состоит в ее аппроксимации теоретической функцией  $G_{22}(t)$  методом наименьших квадратов.

Спектры ДВУК (анизотропия  $R(t)$ ) для ядер  $^{111}\text{Cd}$  в соединениях  $\text{UGe}_2$  и  $\text{UAl}_2$ , измеренные при различных температурах, показаны на рис.1 и 2. Ана-

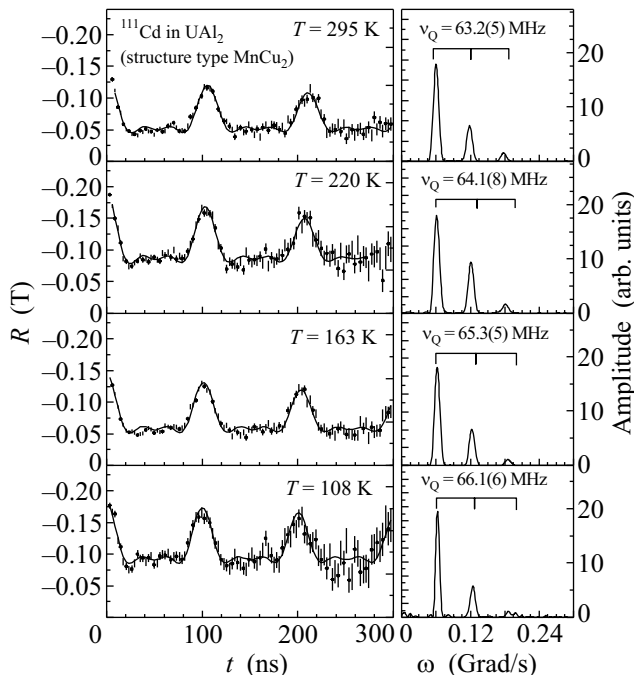


Рис.2. Временные спектры дифференциальной анизотропии  $R(t)$  (левая панель) и их преобразования Фурье (правая панель) для пробных ядер  $^{111}\text{Cd}$  в  $\text{UAl}_2$ , измеренные при различных температурах

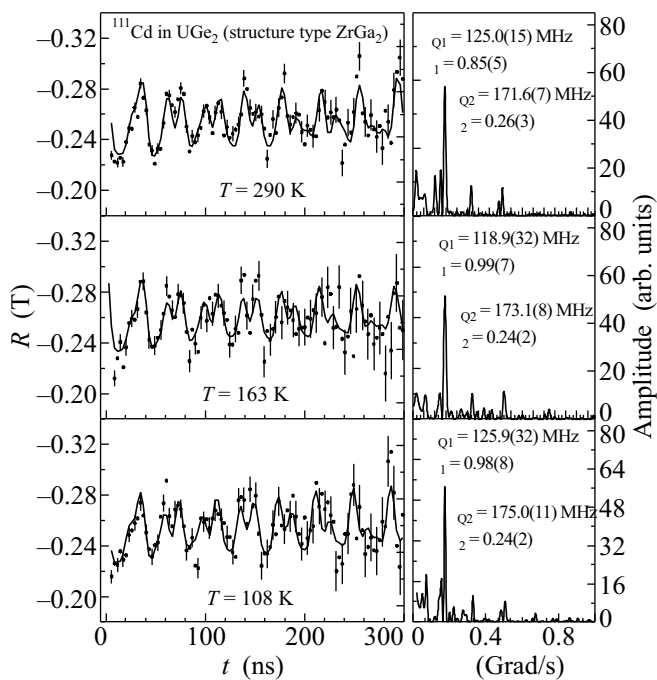


Рис.1. Временные спектры дифференциальной анизотропии  $R(t)$  (левая панель) и их преобразования Фурье (правая панель) для пробных ядер  $^{111}\text{Cd}$  в  $\text{UGe}_2$ , измеренные при различных температурах

лиз спектров  $\text{UGe}_2$  показал, что пробные ядра  $^{111}\text{Cd}$  локализованы в трех неэквивалентных кристаллогра-

фических положениях: Ge(1) – позиция 4i; Ge(2) – позиция 2a и Ge(3) – позиция 2c. Структурные данные [8, 9] показывают, что симметрии позиций Ge(2) и Ge(3) близки. Число атомов Ge, занимающих каждую из этих двух позиций, одинаково и их сумма равна числу атомов Ge в позиции Ge(1). Это объясняет присутствие в спектрах анизотропии двух квадрупольных частот равной интенсивности, то есть половина пробных ядер  $^{111}\text{Cd}$  локализована в позиции Ge(1), а другая половина – в позициях Ge(2) и Ge(3). Однако значения квадрупольных частот заметно отличаются друг от друга:  $\nu_{Q1} = 125$  МГц ( $V_{ZZ} = 6.24(9) \cdot 10^{21} \text{ В} \cdot \text{м}^{-2}$ ) и  $\nu_{Q23} = 171.6$  МГц ( $V_{ZZ} = 8.56(6) \cdot 10^{21} \text{ В} \cdot \text{м}^{-2}$ ). Парциальному спектру с квадрупольной частотой  $\nu_{Q1}$  соответствует параметр асимметрии  $\eta_1$  близкий к 1, а спектру с частотой  $\nu_{Q23}$  – параметр асимметрии  $\eta_2 \approx 0.25$ .

Учитывая измерения параметров асимметрии  $\eta$ , выполненные в работах [7, 11] методами ЯКР и ЭМ, можно утверждать, что в нашем случае вклад в спектр временной анизотропии с квадрупольной частотой  $\nu_{Q1} = 125$  МГц и  $\eta \approx 1$  точно возникает от пробных атомов  $^{111}\text{Cd}$ , расположенных в узлах Ge(1), а вклад с квадрупольной частотой  $\nu_{Q23} = 171.6$  МГц – от пробных атомов  $^{111}\text{Cd}$ , расположенных в узлах Ge(2) и Ge(3). Было обнаружено, что температур-

ные зависимости (в диапазоне от 100 до 300 К) для двух частот различны: квадрупольная частота  $\nu_{Q1}$  слабо падает с понижением температуры, в то время как частота  $\nu_{Q23}$ , наоборот, растет (см. рис.3). Обычно, когда температура падает, квадрупольная

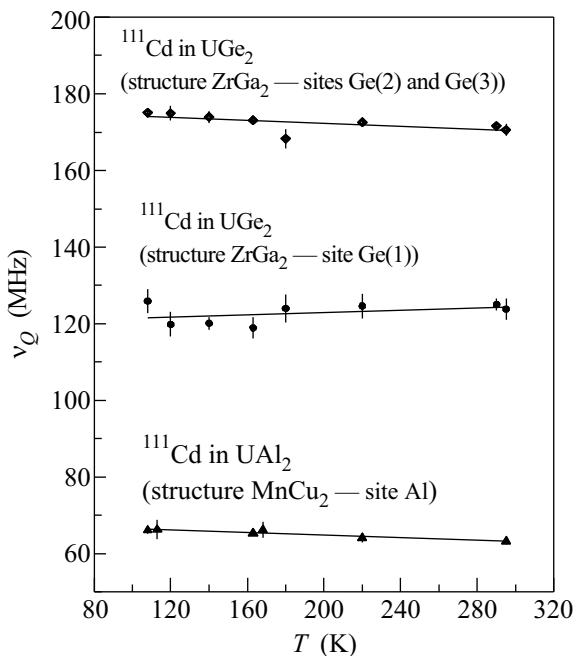


Рис.3. Температурные зависимости квадрупольных частот  $\nu_Q = eQV_{zz}/h$  для  $\text{UGe}_2$  и  $\text{UAl}_2$

частота возрастает [14, 20, 21], что можно объяснить эффектом уменьшения межатомного расстояния. Таким образом, имеются основания предполагать, что аномальное уменьшение квадрупольной частоты для  $^{111}\text{Cd}$  в позиции Ge(1) связано с ростом межатомного расстояния Ge(1) – U.

Спектры временной анизотропии  $R(t)$  для  $^{111}\text{Cd}$  в  $\text{UAl}_2$ , измеренные в диапазоне температур от 100 до 300 К, описываются одной квадрупольной частотой аналогично спектрам  $R(t)$  для  $^{111}\text{Cd}$  в  $\text{REAl}_2$  [12–14]. При  $T = 290$  К значение  $\nu_Q = 63$  МГц (соответственно  $V_{zz} = 3.15(5) \cdot 10^{21}$  В · м<sup>-2</sup>) с параметром асимметрии  $\eta = 0$  (см. рис.2). Значения квадрупольной частоты, полученные для  $\text{UAl}_2$ , оказались достаточно близкими к значениям, наблюдаемым для соединений ряда  $\text{REAl}_2$ . Поэтому из температурной зависимости квадрупольной частоты  $\nu_Q$  для  $\text{UAl}_2$  и результатов работ [12–14] для  $\text{REAl}_2$  можно предполагать, что электронная конфигурация в  $\text{UAl}_2$  близка к электронной конфигурации тяжелых трехвалентных редкоземельных металлов.

Блаха и др. [22] развили метод FP-LMTO для вычисления ГЭП из первых принципов. Они вычислили

ГЭП из плотности заряда, решая уравнение Пуассона без введения факторов антиэкранирования. При проведении численного анализа экспериментальных данных ГЭП [23], определенных методом ДВУК на  $^{111}\text{Cd}$  в соединениях  $\text{YbIn}_3$ ,  $\text{YbSn}_3$  и  $\text{EuSn}_3$ , авторы [24] использовали метод FP-LMTO [22, 25]. Они показали, что величина ГЭП (или квадрупольная частота  $\nu_Q$ ) зависит только от поляризации  $p$ -электронов кадмия, которая, в свою очередь, находится в зависимости от степени гибридизации, возникающей между  $f$ - и  $p$ -электронами. В работе [13] было показано, что увеличение степени гибридизации между  $f$ - и  $p$ -электронами, то есть увеличение валентности ионов Yb в соединении  $\text{YbAl}_2$ , вызванное увеличением внешнего давления, приводит к линейному увеличению ГЭП на пробных ядрах  $^{111}\text{Cd}$ . Эти работы позволяют нам на основании экспериментально измеренных величин квадрупольных частот (ГЭП) проводить качественное сравнение степени гибридизации, возникающей между  $f$ - и  $p$ -электронами как для разных кристаллографических узлов, так и для различных кристаллических структур.

Измерения дифференциальной угловой анизотропии показали, что для соединения  $\text{UGe}_2$  при локализации  $^{111}\text{Cd}$  в позиции Ge(1) значение квадрупольной частоты  $\nu_{Q1} = 125$  МГц почти в два раза больше, чем значение  $\nu_Q = 63$  МГц, наблюдаемое для  $^{111}\text{Cd}$ , локализованного в узле алюминия в  $\text{UAl}_2$ . Это указывает на то, что в  $\text{UGe}_2$  возникает более высокая степень гибридизации между  $f$ -электронами урана и  $p$ -электронами германия, чем между  $f$ -электронами урана и  $p$ -электронами Al в  $\text{UAl}_2$ . Полученные данные о величинах ГЭП для разных кристаллографических узлов германия в  $\text{UGe}_2$  показывают, что степень гибридизации  $f$ -электронов урана с  $p$ -электронами германия различна для различных кристаллографических позиций атомов Ge в решетке. Действительно, степень гибридизации  $f$ -электронов U с  $p$ -электронами Ge в позициях Ge(2) и Ge(3) почти в 1.4 раза выше, чем гибридизация в узлах Ge(1). Из полученных результатов также видно, что для атомов  $^{111}\text{Cd}$ , локализованных в позиции Ge(1), ось зарядовой анизотропии ориентирована в плоскости  $xz$  ( $V_{zz} \approx V_{xx}$ , а  $V_{yy} \approx 0$ ). В то же время, для пробных атомов  $^{111}\text{Cd}$ , локализованных в позициях Ge(2) и Ge(3), распределение заряда почти аксиально относительно оси  $z$ .

В заключение отметим, что нами методом ДВУК для слоистого орторомбического соединения  $\text{UGe}_2$  и кубической фазы Лавеса  $\text{UAl}_2$  на пробных ядрах  $^{111}\text{Cd}$ , локализованных в кристаллографических позициях Ge и Al, были определены параметры квад-

рупольного сверхтонкого взаимодействия в интервале температур от 100 до 300 К. Для позиций Ge(2) и Ge(3) было обнаружено, что значения квадрупольных частот (значения ГЭП) и значения параметров асимметрии совпадают ( $\nu_{Q23} = 171.6$  МГц и  $\eta \approx 0.25$ ). Для позиции Ge(1) значение квадрупольной частоты  $\nu_{Q1}$  (значение ГЭП) примерно в 1.4 раза ниже, чем соответствующие значения для позиций Ge(2) и Ge(3), а параметр асимметрии почти равен 1. Полученные экспериментальные данные позволяют нам сделать заключение о том, что электронная структура  $U\text{Ge}_2$  имеет выраженный анизотропный характер в распределении  $f$ -электронов, что согласуется с выводами, полученными в теоретической работе [10].

Полученные для кубического соединения  $U\text{Al}_2$  параметры КСТВ демонстрируют, что вклад  $5f$ -электронов U в ГЭП на узле Al является подобным вкладу  $4f$ -электронов трехвалентных редкоземельных элементов в аналогичных соединениях. Также было обнаружено, что в  $U\text{Al}_2$  степень гибридизации между  $f$ -электронами U и  $p$ -электронами Al менее значительна, чем наблюдаемая гибридизация между  $f$ -электронами U и  $p$ -электронами Ge в  $U\text{Ge}_2$ .

Авторы благодарят академика С.М. Стишова за поддержку работы и полезную дискуссию. Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований, грант # 07-02-00280 и специальной программой Отделения физики РАН. В Объединенном институте ядерных исследований работа выполнялась при поддержке Представительства Польши в ОИЯИ.

1. R. M. Steffen and H. Frauenfelder, in *Perturbed Angular Correlations*, Eds. E. Karlsson, E. Matthias, and K. Siegbahn, North-Holland, Amsterdam, 1964.
2. S. S. Saxena et al., *Nature* **406**, 587 (2000).
3. A. D. Huxley, I. Sheikin, E. Ressouche et al., *Phys. Rev. B* **63**, 144519 (2001).
4. T. C. Kobayashi, K. Hanazono, N. Tateiwa et al., *J. Phys.: Condens. Matter* **14**, 10779 (2002).
5. Y. Haga, M. Nakashima, R. Settai et al., *J. Phys.: Condens. Matter* **14**, LI25 (2002).

6. C. Pfeleiderer and A. D. Huxley, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 147005 (2002).
7. Y. Kitaoka, H. Kotegawa, A. Harada et al., *J. Phys.: Condens. Matter* **17**, 8975 (2005).
8. K. Oikawa, T. Kamiyama, H. Asano et al., *J. Phys. Soc. Jpn.* **65**, 3229 (1996).
9. P. Boulet, A. Daoudi, M. Potel et al., *J. Alloys and Compounds* **247**, 104 (1997).
10. A. B. Shick and W. E. Pickett, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 300 (2001).
11. V. I. Krylov, N. N. Delyagin, S. I. Reyman et al., *J. Alloys and Compounds* **343**, 32 (2002).
12. S. N. Mishra, R. G. Pillay, K. Raghunathan et al., *Phys. Lett. A* **91**, 193 (1982).
13. A. V. Tsvyashchenko, L. N. Fomicheva, V. B. Bradanin et al., *Phys. Rev. B* **76**, 045112 (2007).
14. M. Forker and P. de la Presa, *Phys. Rev. B* **76**, 11511 (2007).
15. S. H. Devare, H. G. Devare, S. Scholtz et al., *Hyperfme Interact.* **15/16**, 629 (1983).
16. A. V. Tsvyashchenko, L. N. Fomicheva, A. A. Sorokin et al., *Phys. Rev. B* **65**, 174513 (2002).
17. A. Michael Boring, R. C. Albers, G. R. Stewart et al., *Phys. Rev. B* **31**, 3251 (1985).
18. R. J. Trainor, M. B. Brodsky, and H. V. Culbert, *Phys. Rev. Lett.* **34**, 1019 (1975).
19. V. B. Bradanin, D. V. Filosofov, O. I. Kochetov et al., *Nucl. Instr. And Meth. in Physics Research A* **547**, 389 (2005).
20. V. V. Krishnamurthy, S. N. Mishra, S. H. Devare et al., *Hyp. Int.* **80**, 1005 (1993).
21. A. A. Sorokin, G. K. Ryasny, B. A. Komissarova et al., *Hyp. Int.* **171**, 269 (2006).
22. P. Blaha, K. Schwarz, and P. Herzig, *Phys. Rev. Lett.* **54**, 1192 (1985); P. Blaha and K. Schwarz, *J. Phys. F* **17**, 899 (1987); P. Blaha, K. Schwarz, and P. H. Dederichs, *Phys. Rev. B* **37**, 2792 (1988).
23. S. Schwarz and D. Shirley, *Hyperfme Interact.* **3**, 67 (1977).
24. S. J. Asabadi, S. Cottenier, H. Akbarzadeh et al., *Phys. Rev. B* **66**, 95103 (2002).
25. P. Blaha, K. Schwarz, G. Madsen et al., *WIEN2k, An Augmented Plane Wave + Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties*, Karlheinz Schwarz, Tech. Univ. Wien, Vienna, 2001.