

Исследование магнитных свойств атомных цепочек конечной длины при низких температурах

С. В. Колесников¹⁾

Московский государственный университет им. Ломоносова, 119899 Москва, Россия

Поступила в редакцию 15 марта 2016 г.

После переработки 29 марта 2016 г.

Предложен простой метод, позволяющий в рамках модели Гейзенберга при наличии одноосной магнитной анизотропии вычислять время спонтанного перемагничивания и кривые намагничивания атомных ферромагнитных цепочек конечной длины при низкой температуре. Исследованы пределы применимости метода. Показано, что предложенный метод дает результаты хорошо согласующиеся с результатами моделирования с помощью кинетического метода Монте-Карло. Полученные в рамках нашей модели формулы могут быть также использованы для определения ограничения на температуру Кюри снизу.

DOI: 10.7868/S0370274X16090071

Как известно, согласно теореме Мермина–Вагнера [1] ферромагнетизм в одно- и двумерной изотропной модели Гейзенберга отсутствует. Однако, в атомных цепочках конечной длины при наличии магнитной анизотропии ферромагнетизм был экспериментально обнаружен [2]. Для объяснения ферромагнетизма атомных цепочек был предложен кинетический метод Монте-Карло (КММК) для магнитных моментов [3]. В основе метода лежит гамильтониан Гейзенберга

$$H = - \sum_{i>j} J_{ij} (\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j) - K \sum_i (\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{e})^2 - \mu \sum_i (\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{B}), \quad (1)$$

где \mathbf{s}_i и \mathbf{e} – единичные векторы магнитных моментов атомов и оси легкого намагничивания, соответственно, μ – модуль магнитного момента атома, K – энергия магнитной анизотропии, $J_{ij} = J(\delta_{i,j+1} + \delta_{i,j-1})$ – обменный интеграл. Для ферромагнитной цепочки $J > 0$. Внешнее магнитное поле \mathbf{B} приложено вдоль оси легкого намагничивания \mathbf{e} . Тогда магнитные моменты атомов могут быть направлены либо параллельно, либо антипараллельно оси легкого намагничивания ($\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{e} = \pm 1$ ²⁾. Вращение i -го магнитного момента может происходить двумя различными способами. Если $2K > |h_i|$, где $h_i = \sum_j J_{ij} (\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j) +$

$+\mu(\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{B})$, то частота переверотов магнитных моментов определяется выражением

$$\nu_i = \nu_0 \exp\left(-\frac{(2K + h_i)^2}{4Kk_B T}\right), \quad (2)$$

где k_B – постоянная Больцмана, T – температура системы и ν_0 – частотный префактор. Если же $2K \leq |h_i|$, то энергетический барьер между состояниями $(\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{e}) = \pm 1$ отсутствует, и частота переверотов магнитных моментов может быть вычислена [4] как

$$\nu_i = \nu_0 \frac{\exp(-2h_i/k_B T)}{1 + \exp(-2h_i/k_B T)}. \quad (3)$$

В рамках предложенной КММК модели в последние годы был исследован ряд задач, связанных с магнитными свойствами атомных цепочек [5–7]. В частности, при моделировании магнитных свойств цепочек Au-Co на поверхности Cu(110) [8, 9] было показано, что при $T < T_C$ зависимость времени спонтанного перемагничивания цепочки от температуры может быть с большой точностью аппроксимирована следующей простой формулой

$$\tau \approx \frac{N}{2\nu_0} \exp\left(\frac{2J + K}{k_B T}\right), \quad (4)$$

где N – число атомов Co в цепочке. Столь простая зависимость времени перемагничивания от параметров модели наводит на мысль, что некоторые магнитные свойства атомных цепочек можно объяснить не прибегая к трудоемкому моделированию с помощью КММК. Ниже мы рассмотрим простую теоретическую модель, позволяющую исследовать магнитные свойства атомных цепочек без применения КММК.

¹⁾e-mail: kolesnikov@physics.msu.ru

²⁾Далее будем говорить, что магнитный момент атома направлен “вверх”, если $(\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{e}) = 1$, и “вниз”, если $(\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{e}) = -1$.

При температуре $T \ll T_C$ магнитные моменты всех атомов цепочки большую часть времени направлены в одну сторону. Для определенности будем считать, что все магнитные моменты направлены “вверх”. Переворот магнитного момента внутри цепочки при низкой температуре маловероятен. Поэтому перемагничивание цепочки начнется с переворота магнитного момента одного из крайних атомов, т.е. на краю цепочки образуется доменная стенка. Если эта доменная стенка дойдет до противоположного края цепочки, то магнитные моменты всех атомов цепочки будут направлены “вниз”, т.е. цепочка перемагнитится. Если температура достаточно низкая, то за время блуждания доменной стенки вдоль цепочки вторая доменная стенка появиться не успеет. Таким образом, задача о перемагничивании атомной цепочки конечной длины сводится к задаче о случайном блуждании одной доменной стенки. Если цепочка состоит из N атомов, то доменная стенка может находиться в одном из $N - 1$ положений между атомами $i = 1, \dots, N - 1$. Если магнитные моменты всех атомов направлены “вверх” или “вниз”, то будем считать, что доменная стенка находится в положении $i = 0$ или $i = N$. Для решения задачи о случайном блуждании доменной стенки воспользуемся методом среднего времени, хорошо зарекомендовавшим себя при исследовании случайных блужданий атомов [10].

Рассмотрим сначала перемагничивание атомной цепочки при отсутствии внешнего поля $\mathbf{B} = 0$. Тогда случайное блуждание доменной стенки будет характеризоваться всего тремя частотами: частотой образования доменной стенки на конце цепочки

$$\nu_1 = \begin{cases} \nu_0 \exp\left(-\frac{(2K + J)^2}{4Kk_B T}\right), & \text{если } 2K > |J|; \\ \nu_0 \frac{\exp(-2J/k_B T)}{1 + \exp(-2J/k_B T)}, & \text{если } 2K \leq |J|; \end{cases} \quad (5)$$

частотой исчезновения доменной стенки на конце цепочки

$$\nu_2 = \begin{cases} \nu_0 \exp\left(-\frac{(2K - J)^2}{4Kk_B T}\right), & \text{если } 2K > |J|; \\ \nu_0 \frac{\exp(2J/k_B T)}{1 + \exp(2J/k_B T)}, & \text{если } 2K \leq |J|; \end{cases} \quad (6)$$

и частотой перемещения доменной стенки в соседнее положение внутри цепочки

$$\nu_3 = \nu_0 \exp\left(-\frac{K}{k_B T}\right). \quad (7)$$

Частоту перемещения доменной стенки из положения i в положение $j = i \pm 1$ будем обозначать $\nu_{i \rightarrow j}$, тогда

$$\nu_{0 \rightarrow 1} = \nu_{N \rightarrow N-1} = \nu_1, \quad (8)$$

$$\nu_{1 \rightarrow 0} = \nu_{N-1 \rightarrow N} = \nu_2, \quad (9)$$

$$\begin{aligned} \nu_{1 \rightarrow 2} &= \nu_{2 \rightarrow 1} = \dots = \\ &= \nu_{N-2 \rightarrow N-1} = \nu_{N-1 \rightarrow N-2} = \nu_3. \end{aligned} \quad (10)$$

Обозначим τ_i^1 среднее время нахождения доменной стенки в i -м положении. Очевидно, что

$$\tau_0^1 = \tau_N^1 = \frac{1}{\nu_1}, \quad (11)$$

$$\tau_1^1 = \tau_{N-1}^1 = \frac{1}{\nu_2 + \nu_3}, \quad (12)$$

$$\tau_2^1 = \dots = \tau_{N-2}^1 = \frac{1}{2\nu_3}. \quad (13)$$

Будем считать, что в начальный момент времени доменная стенка находилась в положении $i = 0$. Нам нужно вычислить среднее время, за которое доменная стенка перейдет в положение $i = N$. Для этого введем матрицу переходов T размером $N \times N$, элементы которой равны

$$T_{ij} = \tau_j^1 \nu_{j \rightarrow i}. \quad (14)$$

В нашем случае матрица T имеет простой вид

$$T = \begin{pmatrix} 0 & 1-a & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1/2 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1/2 & 0 & a \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1/2 & 0 \end{pmatrix}, \quad (15)$$

где $a = \nu_3/(\nu_2 + \nu_3)$. Поскольку в начальный момент времени доменная стенка находится в положении $i = 0$, то вероятность ее обнаружения в первых N положениях равна $P_i^{\text{init}} = \delta_{0i}$. Вероятность обнаружения доменной стенки в i -м положении после m случайных перемещений будет пропорциональна величине $P_i^{(m)} = (T^m)_{ij} P_j^{\text{init}}$. Тогда полная вероятность обнаружения доменной стенки в i -м положении после большого числа случайных перемещений будет пропорциональна величине

$$P_i = \sum_{m=0}^{\infty} (T^m)_{ij} P_j^{\text{init}} = (I - T)^{-1}_{ij} P_j^{\text{init}}, \quad (16)$$

т.е. P_i может быть найдена из системы линейных уравнений

$$\sum_{j=0}^{N-1} (\delta_{ij} - T_{ij}) P_j = P_i^{\text{init}}. \quad (17)$$

Используя явный вид (15) матрицы T , легко решить систему линейных уравнений (17). Тогда полное время случайного блуждания доменной стенки равно

$$\tau_{\text{tot}} = \sum_{i=0}^{N-1} \tau_i^1 P_i. \quad (18)$$

Вычисляя время τ_{tot} , мы предполагали, что доменная стенка появляется в положении $i = 0$. Однако, доменная стенка может с одинаковой вероятностью появляться с обоих концов атомной цепочки, поэтому среднее время перематничивания цепочки τ должно быть вдвое меньше времени τ_{tot} . Из (17) и (18), после простых вычислений найдем

$$\tau = \frac{1}{2a} \left\{ \frac{a}{\nu_3} \left(\frac{N-1}{2} \right) \left[N - \frac{2(1-2a)}{1-a} \right] + \frac{1}{\nu_1} [N(1-a) - 2(1-2a)] \right\}. \quad (19)$$

Выражение (19) справедливо не только для длинных $N \gg 1$, но и для достаточно коротких $N \sim 10$ цепочек, при выполнении условия $KN - 2J \gg k_B T$, которое гарантирует нам, что вероятность образования доменной стенки много больше вероятности одновременного переворота всех магнитных моментов. Легко убедиться, что если выполняется условие $\nu_1 \ll \nu_3 \ll \nu_2$, то выражение (19) переходит в выражение (4), полученное в работе [9] в результате аппроксимации данных КММК моделирования.

Обсудим теперь вопрос о применимости использованного выше приближения. Для того, чтобы процесс перематничивания атомной цепочки можно было рассматривать, как случайное блуждание одной доменной стенки, необходимо, чтобы среднее время τ_+ образования свободной доменной стенки было больше среднего времени τ_{walk} ее случайного блуждания по атомной цепочке. Будем считать доменную стенку свободной, если вероятности ее смещения вправо и влево по цепочке одинаковы. В рамках нашей модели доменная стенка является свободной, если она находится в положениях $i = 2, \dots, N-2$.

Для вычисления среднего времени τ_+ образования свободной доменной стенки вместо матрицы (15) нужно взять матрицу

$$T = \begin{pmatrix} 0 & 1-a \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (20)$$

Считая, что в начальный момент времени доменная стенка находится в положении $i = 0$, вероятность ее обнаружения в положениях $i = 0, 1$ равна $P_i^{\text{init}} = \delta_{0i}$. Используя формулы (17) и (18), получим

$$\tau_+ = \frac{1}{2(1-a)\nu_3} \left(1 + \frac{\nu_2 + \nu_3}{\nu_1} \right), \quad (21)$$

где множитель $1/2$ учитывает, что доменная стенка может появляться с равной вероятностью на обоих концах атомной цепочки.

Оценим теперь среднее время τ_{walk} случайного блуждания доменной стенки по области $i = 2, \dots, N-2$. В данном случае матрица T размером $(N-3) \times (N-3)$ имеет следующий вид

$$T = \begin{pmatrix} 0 & 1/2 & \dots & 0 & 0 \\ 1/2 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 1/2 \\ 0 & 0 & \dots & 1/2 & 0 \end{pmatrix}. \quad (22)$$

Считая, что $N - \text{четно}$, и что доменная стенка в начальный момент времени находится ровно посередине цепочки, т.е. $P_i^{\text{init}} = \delta_{N/2, i}$, из (17) и (18), получим

$$\tau_{\text{walk}} = \frac{1}{2\nu_3} \left(\frac{N}{2} - 1 \right)^2. \quad (23)$$

Максимальная температура T_{max} , при которой еще справедливо предположение о случайном блуждании только одной доменной стенки, определяется условием $\tau_+ = \tau_{\text{walk}}$. Подставляя сюда (21) и (23), получим уравнение, из которого можно определить T_{max}

$$\frac{(\nu_1 + \nu_2 + \nu_3)(\nu_2 + \nu_3)}{\nu_1 \nu_2} = \left(\frac{N}{2} - 1 \right)^2. \quad (24)$$

Очевидно, что $T_{\text{max}} < T_C$. При приближении к температуре Кюри число доменных стенок резко возрастает и мы не можем пользоваться нашим простым приближением для вычисления T_C . Однако, используя выражение (24), мы можем получить ограничение на температуру Кюри снизу.

Обобщим теперь формулу (19) на случай ненулевого внешнего магнитного поля. Будем считать, что вектор индукции магнитного поля направлен вдоль оси легкого намагничивания $\mathbf{V} = V\mathbf{e}$. Теперь случайное блуждание доменной стенки будет характеризоваться не тремя, а шестью частотами. Подставляя в (5) $J \pm \mu V$ вместо J , получим частоты $\nu_{1\pm}$. Подстав-

ляя в (6) $J \mp \mu B$ вместо J , получим частоты $\nu_{2\pm}$. Частоты $\nu_{3\pm}$ определим, как

$$\nu_{3\pm} = \begin{cases} \nu_0 \exp\left(-\frac{(2K \pm \mu B)^2}{4Kk_B T}\right), & \text{если } 2K > |\mu B|; \\ \nu_0 \frac{\exp(\mp 2\mu B/k_B T)}{1 + \exp(\mp 2\mu B/k_B T)}, & \text{если } 2K \leq |\mu B|. \end{cases} \quad (25)$$

Частоты перемещения доменной стенки из положений i в положения $j = i \pm 1$ будут тогда равны

$$\nu_{0 \rightarrow 1} = \nu_{1+}, \quad \nu_{N \rightarrow N-1} = \nu_{1-}, \quad (26)$$

$$\nu_{1 \rightarrow 0} = \nu_{2-}, \quad \nu_{N-1 \rightarrow N} = \nu_{2+}, \quad (27)$$

$$\nu_{1 \rightarrow 2} = \dots = \nu_{N-2 \rightarrow N-1} = \nu_{3+}, \quad (28)$$

$$\nu_{2 \rightarrow 1} = \dots = \nu_{N-1 \rightarrow N-2} = \nu_{3-}. \quad (29)$$

Среднее время нахождения доменной стенки в i -м положении τ_i^1 вычисляется по формулам аналогичным (11)–(13). Тогда матрица переходов T размером $N \times N$, вычисленная по формуле (14), будет иметь вид

$$T = \begin{pmatrix} 0 & 1 - a_+ & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 - b & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a_+ & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 - b & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & b & 0 & a_- \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & b & 0 \end{pmatrix}, \quad (30)$$

где $a_+ = \nu_{3+}/(\nu_{2-} + \nu_{3+})$, $a_- = \nu_{3-}/(\nu_{2+} + \nu_{3-})$ и $b = \nu_{3+}/(\nu_{3-} + \nu_{3+})$. Считая, что в начальный момент времени вероятность обнаружения доменной стенки в положениях $i = 0, \dots, N-1$ равна $P_i^{\text{init}} = \delta_{0i}$, из формул (17) и (18), получим

$$\tau(B) = \frac{1}{2(1 - a_-)} \left\{ \frac{a_-}{\nu_{3-}} + \frac{(N-2)(1 - a_-) + (a_- - \alpha)S_{N-2}}{\nu_{3+}(1 - \alpha)} + \frac{S_{N-2} - (a_- + \alpha a_+)S_{N-3} + \alpha a_+ a_- S_{N-4}}{\nu_{1+} a_+} \right\}, \quad (31)$$

где $\alpha = (1 - b)/b$, $S_N = (1 - \alpha^N)/(1 - \alpha)$ и множитель $1/2$ учитывает тот факт, что перемагничивание цепочки может начаться с любого из ее концов. В пределе $B \rightarrow 0$ формула (31) переходит в формулу (19).

Формулу (31) можно использовать для исследования магнитодинамических свойств атомных цепочек при температуре ниже T_{max} . Если магнитная

индукция B зависит от времени $B = B(t)$, то от времени также будут зависеть и частоты перемагничивания атомной цепочки $\nu_{\uparrow \rightarrow \downarrow}(t) = 1/\tau(B(t))$ и $\nu_{\downarrow \rightarrow \uparrow}(t) = 1/\tau(-B(t))$. При этом вероятность нахождения цепочки в состоянии, когда магнитные моменты всех атомов направлены “вверх”, определяется из уравнения кинетического баланса

$$\frac{dP_{\uparrow}}{dt} = P_{\downarrow} \nu_{\downarrow \rightarrow \uparrow} - P_{\uparrow} \nu_{\uparrow \rightarrow \downarrow}, \quad (32)$$

где $P_{\uparrow} + P_{\downarrow} = 1$ ³⁾. Если намагниченность атомной цепочки измерять в безразмерных единицах $M \in [-1, 1]$, то $M = P_{\uparrow} - P_{\downarrow}$, и из уравнения (32) следует уравнение для намагниченности атомной цепочки

$$\frac{dM(t)}{dt} = \mathfrak{A}(t)M(t) + \mathfrak{B}(t), \quad (33)$$

где $\mathfrak{A} = -\nu_{\uparrow \rightarrow \downarrow} - \nu_{\downarrow \rightarrow \uparrow}$ и $\mathfrak{B} = \nu_{\downarrow \rightarrow \uparrow} - \nu_{\uparrow \rightarrow \downarrow}$. Уравнение (33) вместе с начальным условием $M(0) = M_0$ представляет собой задачу Коши, которая может быть решена численно.

Для того чтобы продемонстрировать работоспособность развитого выше формализма и пределы его применимости, рассмотрим магнитные свойства цепочек Au-Co на поверхности Cu(110), исследованные недавно с помощью КММК [8, 9]. Считая, что в таких цепочках только атомы кобальта обладают магнитными моментами, для Au-Co цепочек были получены [8] следующие параметры гамильтониана (1): $J = 5.125$ мэВ, $K = 3$ мэВ и $\mu = 1.76 \mu_B$, где μ_B – магнетон Бора. Частотный префактор ν_0 выберем равным 10^9 Гц [2]. Найдем сначала пределы применимости рассматриваемого нами приближения. На рис. 1а точками показана температура Кюри цепочек различной длины и сплошной линией – температура T_{max} , вычисленная по формуле (24). Видно, что температура T_{max} отличается от температуры Кюри не более, чем в два раза для цепочек, содержащих от 100 до 10000 атомов кобальта. Причем для более коротких цепочек отношение T_C/T_{max} меньше. Область применимости приближения о случайном блуждании одной доменной стенки показана на рис. 1а штриховкой. Для цепочки, содержащей $N = 100$ атомов кобальта, $T_{\text{max}} = 15.7$ К. На рис. 1б показана зависимость времени спонтанного перемагничивания такой цепочки от температуры в интервале от 3.5 до 13 К. Сплошная линия построена по

³⁾ Будем считать, что среднее время блуждания доменной стенки вдоль атомной цепочки много меньше среднего времени образования доменной стенки. Как было показано выше, это условие выполняется при $T < T_{\text{max}}$.

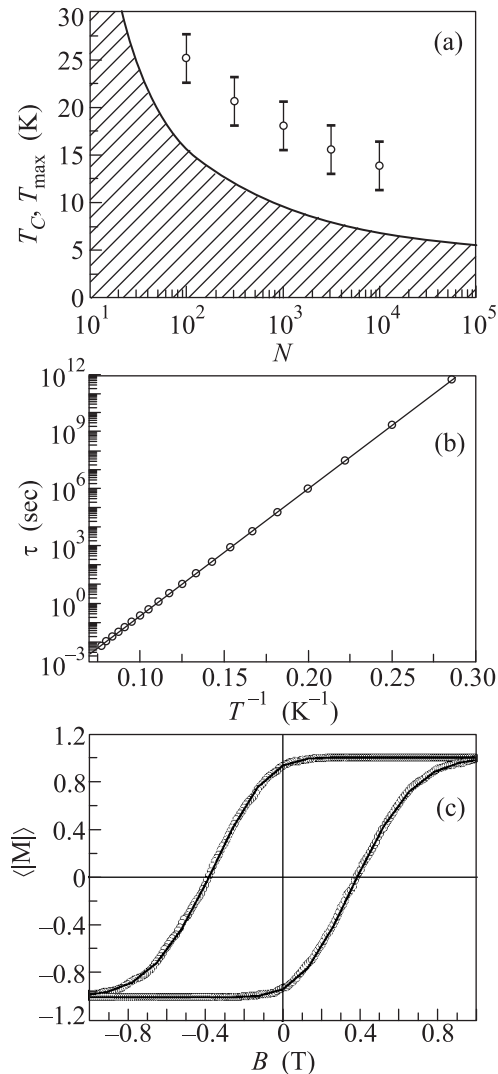


Рис. 1. Магнитные свойства цепочки Au-Co на поверхности Cu(110). (a) – Зависимость температуры Кюри T_C (точки) и температуры T_{max} (сплошная линия) от числа N атомов кобальта. (b) – Зависимость времени спонтанного перемагничивания τ цепочки, содержащей $N = 100$ атомов кобальта, от температуры. (c) – Кривая намагничивания цепочки, содержащей $N = 100$ атомов кобальта, при температуре $T = 12$ К. Параметры гамильтониана Гейзенберга: $J = 5.125$ мэВ, $K = 3$ мэВ и $\mu = 1.76 \mu_B$. Сплошные линии построены по формулам (24), (19) и (33), соответственно. Точки, полученные в результате КММК моделирования, взяты из работы [9]

формуле (19). На рис. 1с изображена кривая намагничивания этой же цепочки при температуре 12 К. Проекция вектора магнитной индукции на ось легкого намагничивания B меняется периодически в пределах от -5 до 5 Тл со скоростью $|dB/dt| = 130$ Тл/с. Сплошной кривой показано численное решение уравнения (33). Мы видим, что в пределах своей приме-

нимости изложенная выше теория дает превосходное согласие с результатами КММК моделирования.

В заключение подчеркнем, что сравнение формул (24), (19) и (33) с результатами КММК расчетов для цепочек Au-Co произведено лишь в качестве примера. В то же время, изложенный выше метод одинаково хорошо работает для любых ферромагнитных атомных цепочек конечной длины, описываемых гамильтонианом (1). При температурах $T < T_{max}$ наш метод позволяет без трудоемкого КММК моделирования получать времена спонтанного перемагничивания цепочек и их кривые намагничивания. Кроме того, формула (24) может быть использована для получения ограничения на температуру Кюри снизу. Для получения кривых намагничивания требуется численно решить уравнение (33), однако компьютерное время, необходимое для этого, несоизмеримо меньше времени, необходимого для КММК моделирования. Отметим также, что формулы (19) и (31) следует использовать с осторожностью для случая коротких $N \sim 10$ цепочек, поскольку магнитные свойства атомов, расположенных на концах цепочки, могут несколько отличаться от свойств атомов в середине цепочки [11, 12]. При необходимости можно учесть эти краевые эффекты, при этом формулы (19) и (31) усложнятся, однако предложенный выше метод вычисления времени перемагничивания останется справедливым.

1. N. D. Mermin and H. Wagner, Phys. Rev. Lett. **17**, 1133 (1966).
2. P. Gambardella, A. Dallmeyer, K. Maiti, M. C. Malagoli, W. Eberhardt, K. Kern, and C. Carbone, Nature **416**, 301 (2002).
3. Y. Li and B.-G. Liu, Phys. Rev. B **73**, 174418 (2006).
4. R. J. Glauber, J. Math. Phys. **4**, 294 (1963).
5. L. He, D. Kong, and C. Chen, J. Phys.: Cond. Mat. **19**, 446207 (2007).
6. A. S. Smirnov, N. N. Negulyaev, W. Hergert, A. M. Saletsky, and V. S. Stepanyuk, New J. Phys. **11**, 063004 (2009).
7. K.-C. Zhang and B.-G. Liu, Phys. Lett. A **374**, 2058 (2010).
8. K. M. Tsygar, S. V. Kolesnikov, and A. M. Saletsky, Chin. Phys. B **24**, 097302 (2015).
9. С. В. Колесников, К. М. Цысарь, А. М. Салецкий, ФТТ **57**, 1492 (2015).
10. B. Puchala, M. L. Falk, and K. Garikipati, J. Chem. Phys. **132**, 134104 (2010).
11. B. Lazarovits, L. Szunyogh, P. Weinberger, and B. Újfalussy, Phys. Rev. B **68**, 024433 (2003).
12. S. Pick, P. Ignatiev, A. Klavsyuk, W. Hergert, V. Stepanyuk, and P. Bruno, J. Phys.: Cond. Mat. **19**, 446001 (2007).