

Учет эффектов самосогласования электронной плотности в рамках метода LDA+U+SO, реализованного в формализме температурных функций Грина в базисе функций Ванье

М. А. Коротин¹⁾, Н. А. Скориков, С. Л. Скорняков, А. О. Шориков, В. И. Анисимов

Институт физики металлов им. Мухомова УрО РАН, 620990 Екатеринбург, Россия

Поступила в редакцию 26 сентября 2014 г.

После переработки 5 ноября 2014 г.

Сформулирован и реализован в программных кодах метод LDA+U+SO (приближение локальной электронной плотности + учет кулоновских корреляций в статическом пределе среднего поля + учет спин-орбитального взаимодействия) в формализме температурных функций Грина в базисе функций Ванье. Предложена формула для приближенного учета влияния самосогласования электронной плотности на параметры гамильтониана. Показано, что результаты для NiO, GdNi₂, Pu и US, полученные предложенным методом, хорошо согласуются с результатами, получаемыми методами с полным самосогласованием электронной плотности.

DOI: 10.7868/S0370274X14240138

В настоящее время для расчета электронной структуры соединений, содержащих $3d$ -, $4d$ -, $4f$ -, $5f$ -ионы, широко используются методы LDA+U [1] и LDA+U+SO [2], базирующиеся на приближении локальной электронной плотности (LDA) [3] и учитывающие как кулоновское взаимодействие в статическом приближении среднего поля (U), так и спин-орбитальное взаимодействие (SO). Поскольку эти методы являются объединением подходов, в каждом из которых кулоновское взаимодействие локализованных электронов рассматривается в различных приближениях, необходимо корректно вычислять это взаимодействие. Энергия E^{DC} кулоновского взаимодействия локализованных электронов, учитываемая в LDA, получила название энергии двойного учета (*double counting energy*). В комбинированных методах она вычитается из полной энергии. Производная от E^{DC} по заселенности коррелированной оболочки (т.е. суммарной заселенности орбиталей этой оболочки) n есть поправка к потенциалу V^{DC} . Широко используемой для V^{DC} является формула, соответствующая полностью локализованному (или атомному) пределу (*fully localized limit*) [4]: $V_{\text{FL}}^{\text{DC}} = 0.5U(2n - 1) - 0.5J(n - 1)$, где U и J – экранированный кулоновский и обменный хундовский параметры. В комбинированном методе LDA+U+SO из соответствующих локализованным электронам диагональных элементов гамильтониана, сконструированного в LDA, вычитается поправка V^{DC} и при-

бавляется матричное выражение $V_{mm'}^{\text{U+SO}}$, вычисляемое согласно приводимым ниже формулам. И если в LDA-подходе (а также в приближении локальной спиновой электронной плотности LSDA, приближении обобщенного градиента GGA и других приближениях теории функционала электронной плотности DFT) полная энергия системы является функцией только электронной плотности, то в LDA+U+SO-методе она становится зависимой как от электронной плотности, так и от заселенности коррелированной оболочки.

Рассматриваемый комбинированный метод расчета электронной структуры запрограммирован во многих современных кодах, использующих различные наборы базисных функций (маффин-тин орбиталей, присоединенных плоских волн и т.п.). Важно подчеркнуть, что эти наборы состоят из многих десятков, сотен и тысяч делокализованных функций. В то же время для расчета свойств твердых тел, как правило, достаточно знать электронную структуру лишь в небольшой (менее 10 эВ) окрестности уровня Ферми. Существуют методы проектирования большого набора различных делокализованных базисных функций на локализованный базис функций Ванье, ограниченный по количеству функций особенностями электронной структуры вблизи уровня Ферми (см., например, [5–7]). Подобное проектирование существенно упрощает расчет электронных свойств сильно коррелированных соединений. Оно наиболее широко используется для вычисления гамильтониана комбинированного метода

¹⁾e-mail: michael.korotin@imp.uran.ru

LDA+DMFT [8] (DMFT – теория динамического среднего поля). Однако при использовании неизменного гамильтониана, найденного в базисе функций Ванье, в методе LDA+DMFT существует лишь самосогласование заселенностей коррелированных орбиталей и отсутствует самосогласование электронной плотности функций Ванье. В настоящей работе нами предложен способ приближенного учета эффектов самосогласования электронной плотности в методе LDA+U+SO. Он реализован в формализме температурных функций Грина в базисе функций Ванье. Данный формализм является базовым для метода LDA+DMFT.

Использованная в настоящей работе процедура самосогласованного вычисления гамильтониана в приближении LDA и его проектирование на базис функций Ванье описаны в [6]. Как правило, для сильно коррелированных соединений базис функций Ванье включает как коррелированные состояния (d или f), так и гибридизованные с ними s - и p -состояния. Имея гамильтониан $\hat{H}_0[k]$, вычисленный в базисе функций Ванье, можно определить соответствующую одноэлектронную функцию Грина как

$$\hat{G}[i\omega_n] = \sum_k \{(\mu + i\omega_n)\hat{I} - \hat{H}_0[k] - \hat{\Sigma}\}^{-1}, \quad (1)$$

где $\omega_n = (2n + 1)\pi\beta$ ($n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$) – нечетные мацубаровские частоты, $\beta = 1/T$ – обратная температура (постоянная Больцмана положена равной единице), μ – химический потенциал, \hat{I} – единичная матрица, суммирование ведется по векторам k обратной решетки, $\hat{\Sigma}$ – поправка к LDA-потенциалу за счет кулоновского и спин-орбитального взаимодействий. Размерность $\hat{\Sigma}$ составляет $2(2l + 1)$, где $l = 2$ для d -состояний и $l = 3$ для f -состояний. Дополнительный множитель 2 появляется вследствие явного учета спин-орбитального взаимодействия, приводящего к ненулевым недиагональным матричным элементам в спиновом подпространстве (см. формулу (8)).

В функции Грина $\hat{G}[i\omega_n]$ можно выделить блок, соответствующий сильно коррелированным состояниям. Обозначим его как \hat{G}_{sc} . Уравнение Дайсона для блока \hat{G}_{sc} имеет вид

$$\hat{G}_0 = (\hat{G}_{sc}^{-1} + \hat{\Sigma})^{-1}. \quad (2)$$

Из функции Грина \hat{G}_0 определяются орбитальные заселенности коррелированных состояний: $n_{jm} = \frac{1}{\beta} \sum_n \hat{G}_{0jm}[i\omega_n] e^{i\omega_n 0^+}$. Вычислив согласно уравнениям (5)–(9) кулоновские поправки ΔV^{U+SO} , можно получить новые \hat{G}_{sc} и $\hat{\Sigma}$:

$$\hat{G}_{sc}^{\text{new}} = \hat{G}_0(\hat{I} - \Delta V^{U+SO}\hat{G}_0)^{-1}, \quad (3)$$

$$\hat{\Sigma}^{\text{new}} = -(\hat{G}_{sc}^{\text{new}})^{-1} + (\hat{G}_0)^{-1}. \quad (4)$$

Далее $\hat{\Sigma}^{\text{new}}$ подставляется в уравнение (1). Итеративная процедура нахождения $\hat{\Sigma}$ проводится в цикле решением уравнений (1)–(4) до самосогласования по заселенностям коррелированных орбиталей.

Величина ΔV^U вычисляется по формулам

$$\begin{aligned} \Delta V^U &\equiv V_{mm'}^{\sigma\sigma'} = \\ &= \delta_{\sigma,\sigma'} \sum_{m''m'''} \{ \langle mm''|V_{ee}|m'm'''\rangle n_{m''m'''}^{-\sigma-\sigma'} + \\ &\quad + \langle mm''|V_{ee}|m'm'''\rangle - \\ &\quad - \langle mm''|V_{ee}|m''m'''\rangle n_{m''m'''}^{\sigma\sigma'} \} - V^{\text{DC}}, \end{aligned} \quad (5)$$

$$\langle mm''|V_{ee}|m'm'''\rangle = \sum_k a_k (mm'm''m''') F^k, \quad (6)$$

$$\begin{aligned} a_k (mm'm''m''') &= \\ &= \frac{4\pi}{2k+1} \sum_{q=-k}^k \langle lm|Y_{kq}|lm'\rangle \langle lm''|Y_{kq}^*|lm'''\rangle, \end{aligned} \quad (7)$$

где δ – символ Кронекера, Y_{kq} – комплексные сферические гармоники, F^k – интегралы Слэтера. Для d -элементов $k = 0, 2, 4$, экранированный кулоновский параметр $U = F^0$, стонеровский обменный параметр $J = (F^2 + F^4)/14$ при выполнении соотношения $F^4/F^2 = 0.625$. Для f -элементов $k = 0, 2, 4, 6$, $J = (286F^2 + 195F^4 + 250F^6)/6435$ [9].

За счет спин-орбитального взаимодействия возникают дополнительные, в том числе недиагональные по спиновому индексу σ , поправки к гамильтониану [2]:

$$\begin{aligned} \Delta V^{\text{SO}} &\equiv V_{mm'}^{\sigma\sigma'} = \\ &= (\delta_{\sigma,\sigma'} - 1) \sum_{m''m'''} \langle mm''|V_{ee}|m''m'''\rangle n_{m''m'''}^{\sigma',\sigma} + \\ &\quad + \delta_{m,m'} \delta_{\sigma,\sigma'} \lambda m \sigma + \\ &\quad + \frac{1}{2} (\delta_{m,m'-1} \delta_{\sigma,-\sigma'} + \delta_{m-1,m'} \delta_{-\sigma,\sigma'}) \times \\ &\quad \times \lambda \sqrt{(l+m)(l-m+1)}, \end{aligned} \quad (8)$$

где λ – константа спин-орбитального взаимодействия, l и m – орбитальное и магнитное квантовые числа. Окончательно имеем

$$\Delta V^{U+SO} = \Delta V^U + \Delta V^{\text{SO}}. \quad (9)$$

Параметры U , J и λ могут быть как вычислены, так и взяты из таблиц.

Сформулированный в формализме температурных функций Грина в базисе функций Ванье метод LDA+U+SO (уравнения (1)–(9)) реализован в программных кодах. Данный метод является основой одного из вариантов метода когерентного потенциала [10] и статическим пределом метода LDA+DMFT [8].

В формуле (5) V^{DC} – поправка к потенциалу для вычитания кулоновского взаимодействия, уже учтенного в LDA. Она является функцией заселенности коррелированной оболочки:

$$V^{DC}[n] = \frac{1}{2}U(2n - 1) - \frac{1}{2}J(n - 1). \quad (10)$$

Формула (10) является общепризнанной для полноорбитального расчета, в котором на каждой итерации самосогласуется не только заселенность коррелированной оболочки, но и электронная плотность остальных орбиталей, т.е. гамильтониан задачи полностью перевычисляется на каждой итерации самосогласования. В предложенном методе гамильтониан задачи, записанный в базисе функций Ванье в приближении LDA, неизменен. В процессе самосогласования меняется лишь заселенность оболочки n . В отсутствие самосогласования электронной плотности применение формулы (10) приводит к неверным результатам.

На рис. 1а и 2а приведены полные плотности состояний NiO и GdNi₂, вычисленные в полноорбитальном LDA+U (LSDA+U) расчете методом линейаризованных маффин-тин орбиталей (LMTO) [11].

Базис LMTO для NiO представляет собой следующий набор: Ni 4*s*-, 4*p*-, 3*d*-орбитали, O 2*s*-, 2*p*-, 3*d*-орбитали, дополнительные пустые сферы 1*s*-, 2*p*-, 3*d*-орбитали. Рассмотрено антиферромагнитное состояние АФII-типа. Параметры для *d*-состояний Ni $U = 8$ эВ, $J = 1$ эВ [1]. Результаты полноорбитального LDA+U-расчета: энергетическая щель $\Delta = 3.64$ эВ, спиновый магнитный момент *d*-оболочки иона Ni $\mu_d = 1.72 \mu_B$. Эти величины находятся в разумном согласии с экспериментальными данными: $\Delta_{\text{exp}1} = 4.3$ эВ [12], $\Delta_{\text{exp}2} = 3.8$ эВ [13], $\mu_{\text{exp}1} = 1.64 \mu_B$ [14], $\mu_{\text{exp}2} = 1.77 \mu_B$ [15], $\mu_{\text{exp}3} = 1.9 \mu_B$ [16].

Базис LMTO-орбиталей для GdNi₂ представляет собой следующий набор: Gd 6*s*-, 6*p*-, 5*d*-, 4*f*-орбитали, Ni 4*s*-, 4*p*-, 3*d*-орбитали. Расчет проводился для ферромагнитного упорядочения спиновых магнитных моментов. Параметры $U = 6.6$ эВ, $J = 0.71$ эВ для *f*-состояний Gd были вычислены по алгоритму, предложенному в [6]. Кулоновская поправка U для *d*-состояний Ni не учитывалась, поскольку в данном соединении эти состояния обеспечивают металлическую проводимость. Полученный магнитный момент *f*-оболочки иона Gd составил $\mu_f = 6.93 \mu_B$.

На рис. 1б и 2б приведены те же зависимости, вычисленные предложенным в настоящей работе методом с использованием формул (10) для NiO и (13) для GdNi₂.

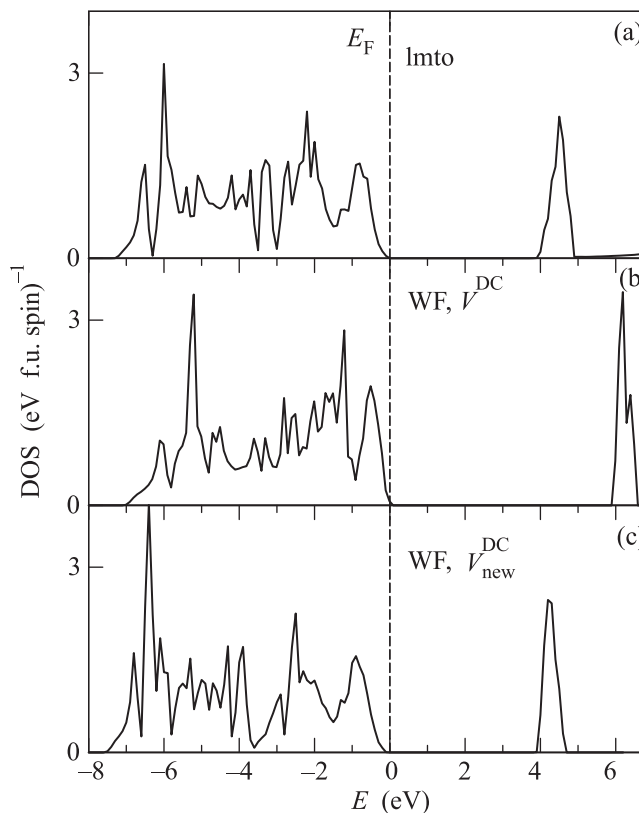


Рис. 1. Полные плотности состояний антиферромагнитного NiO, вычисленные в полноорбитальном LDA+U-расчете (а), а также предложенным методом с поправкой к потенциалу для вычитания кулоновского взаимодействия по формуле (10) (б) и по формуле (12) (с)

Базис функций Ванье для NiO представляет собой следующий набор: Ni 3*d*- и O 2*p*-орбитали. Параметр $\beta = 10$ эВ⁻¹. Результаты расчетов: $\Delta = 5.9$ эВ, $\mu_d = 1.87 \mu_B$. Базис функций Ванье для GdNi₂: Gd 6*s*-, 5*d*-, 4*f*- и Ni 4*s*-, 3*d*-орбитали. Параметр $\beta = 10$ эВ⁻¹. Получена величина $\mu_f = 6.96 \mu_B$. Из-за отсутствия самосогласования электронной плотности представленные результаты существенно отличаются от результатов полноорбитальных расчетов.

Данную проблему можно преодолеть различными способами. Очевидным путем является именно самосогласование электронной плотности. Однако оно оказывается очень ресурсоемкой задачей. Ее решению посвящено всего несколько работ. Одна из последних – работа [17]. Более простым выходом является использование других форм записи V^{DC} [18, 19]. Также применяются “around mean filed” форма [20] или же интерполяционное значение между пределами “fully localized limit” и “around mean filed” [21]. Наконец, используется приближение $V^{DC} = \text{const}$ [22].

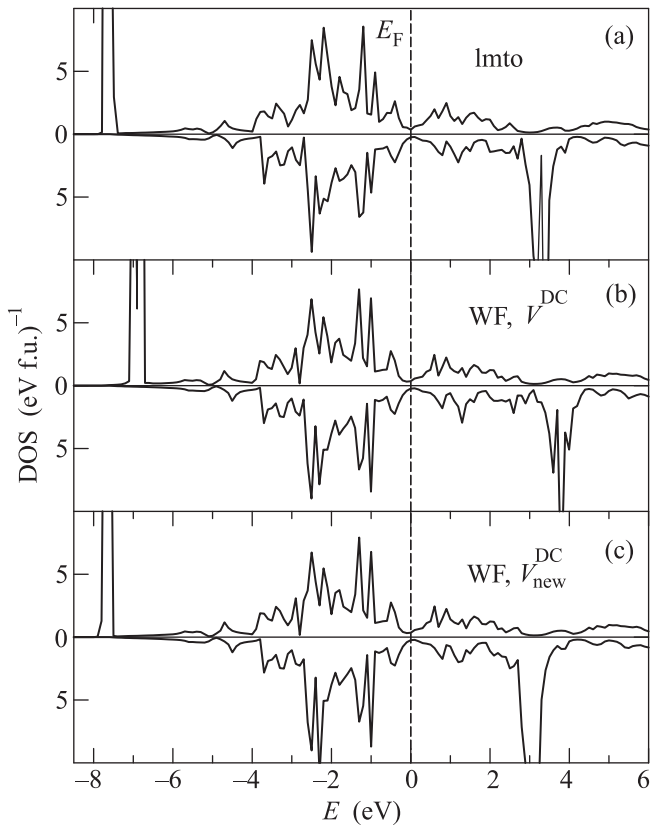


Рис. 2. Полные плотности состояний ферромагнитного GdNi_2 , вычисленные в полноорбитальном LSDA+U-расчете (а), а также предложенным методом с поправкой к потенциалу для вычитания кулоновского взаимодействия по формуле (13) (b) и по формуле (14) (c)

Мы предлагаем для учета эффектов самосогласования электронной плотности изменить поправку V^{DC} , записанную в уравнении (10), вычтя из нее выражение

$$\Delta V[n - n_0] = U_{\text{eff}}(n - n_0) = \left(U - \frac{1}{2}J \right) (n - n_0), \quad (11)$$

где n_0 – заселенность коррелированной оболочки, вычисленная из LDA-гамильтониана $\hat{H}_0[k]$. По определению, эффективное значение U есть первая производная от одноэлектронной энергии (потенциала) по заселенности оболочки. Именно отсюда следует форма записи (11). При $n > n_0$ данное выражение положительно. Поэтому при вычитании из V^{DC} оно будет стремиться уменьшить величину n на следующей итерации самосогласования. И наоборот. Текущая заселенность коррелированной орбитали будет стремиться к результату полноорбитального подхода LDA+U с корректным взаимным положением коррелированных и некоррелированных зон. Энергетическое расстояние между центрами этих зон задает

степень гибридизации между соответствующими состояниями, что, в свою очередь, определяет соотношение степени ионности–ковалентности химической связи в изучаемых соединениях.

Таким образом, новая поправка к потенциалу для вычитания кулоновского взаимодействия, уже учтенного в LDA, становится зависящей только от заселенности коррелированной оболочки, вычисленной в LDA-подходе:

$$\begin{aligned} V_{\text{new}}^{\text{DC}}[n_0] &= V^{\text{DC}}[n] - \Delta V[n - n_0] = \\ &= \frac{1}{2}U(2n_0 - 1) - \frac{1}{2}J(n_0 - 1). \end{aligned} \quad (12)$$

В используемом нами методе при неизменном LDA-гамильтониане поправка $V_{\text{new}}^{\text{DC}}$, а также соответствующая ей усредненная энергия кулоновского и обменного взаимодействий локализованных электронов $E_{\text{new}}^{\text{DC}} = 0.5Un_0(n_0 - 1) - 0.25Jn_0(n_0 - 2)$ остаются постоянными. Перейдя на язык функционала, $E^{\text{LDA}+U+\text{SO}}[\rho, n] = E^{\text{LDA}}[\rho] + E^{\text{U}+\text{SO}}[\rho, n, E^{\text{DC}}[\rho, n]]$, где ρ – электронная плотность, первое слагаемое в правой части формулы можно опустить, поскольку LDA-гамильтониан неизменен. Зависимость $E^{\text{DC}}[\rho, n]$ во втором слагаемом пропадает, поскольку за счет выражения (11) E^{DC} становится константой. И наконец, то же выражение (11) контролирует зависимость $E^{\text{U}+\text{SO}}[\rho, n]$, учитывая самосогласование ρ .

В случае приближения локальной спиновой плотности (LSDA) стандартная форма поправки к потенциалу V^{DC} имеет вид (ср. с (10))

$$V^{\text{DC},\sigma}[n, \mu] = \frac{1}{2}U(2n - 1) - \frac{1}{2}J(n - 1) \mp \frac{1}{2}J\mu, \quad (13)$$

где μ – спиновый магнитный момент коррелированной оболочки, $\sigma = \uparrow\downarrow$. Для учета эффектов самосогласования электронной плотности мы предлагаем поправку $\Delta V^\sigma = (U - 0.5J)(n - n_0) \mp 0.5J(\mu - \mu_0)$, где n_0 и μ_0 – заселенность и спиновый магнитный момент коррелированной оболочки, вычисленные в LSDA-подходе. Эта поправка приводит к выражениям

$$V_{\text{new}}^{\text{DC},\sigma}[n_0, \mu_0] = \frac{1}{2}U(2n_0 - 1) - \frac{1}{2}J(n_0 - 1) \mp \frac{1}{2}J\mu_0, \quad (14)$$

$$E_{\text{new}}^{\text{DC}} = \frac{1}{2}Un_0(n_0 - 1) - \frac{1}{4}Jn_0(n_0 - 2) - \frac{1}{4}J\mu_0^2.$$

Учитываемое формулами (12), (14) самосогласование электронной плотности в дополнение к самосогласованию заселенностей коррелированных орбиталей, достигаемому итеративным решением уравнений (1)–(4), позволяет корректно воспроизвести

энергетическую зависимость плотности состояний (рис. 1с и 2с), величин спинового магнитного момента и запрещенной щели. Конечные результаты расчетов: для NiO $\Delta = 3.8$ эВ, $\mu_d = 1.76 \mu_B$, для GdNi₂ $\mu_f = 6.95 \mu_B$.

Использование формул (12), (14) позволяет корректно описывать и более тонкие эффекты, связанные с полной энергией сильно коррелированных соединений со спин-орбитальным взаимодействием. В предложенном методе полную энергию системы по аналогии с [23] определяем как

$$E_{\text{tot}}[\beta] = \frac{1}{\beta} \sum_{n,k} \text{Tr} \left\{ \left(\hat{H}_0[k] + \frac{1}{2} \hat{\Sigma} \right) \hat{G}^k[i\omega_n] - \hat{H}_0[k] \hat{G}_0^k[i\omega_n] \right\} e^{i\omega_n 0^+}, \quad (15)$$

где $\hat{G}^k[i\omega_n]$ дается выражением

$$\hat{G}^k[i\omega_n] = \{(\mu + i\omega_n)\hat{I} - \hat{H}_0[k] - \hat{\Sigma}\}^{-1}, \quad (16)$$

а $\hat{G}_0^k[i\omega_n]$ – той же формулой (16) при $\hat{\Sigma} = 0$.

В работе [2] полноорбитальным методом LDA+U+SO описано немагнитное металлическое состояние дельта-фазы плутония (ГЦК-Pu). Выяснено, что критическим параметром для описания немагнитного состояния является параметр хундовского обмена J . Вычисленное основное состояние ГЦК-Pu при $J \leq 0.48$ эВ оказывается немагнитным, а при превышении данного критического значения J – магнитным.

В настоящей работе подобный расчет электронной структуры ГЦК-Pu проведен с использованием предложенного метода. Базис ЛМТО полноорбитального самосогласованного расчета в приближении LDA для ГЦК-Pu представляет собой следующий набор: Pu $7s$ -, $6p$ -, $6d$ -, $5f$ -орбитали. Базис функций Ванье состоит из $7s$ -, $6d$ -, $5f$ -орбиталей. Параметры $U = 4$ эВ, $\lambda = 0.31$ эВ [2], $\beta = 20$ эВ⁻¹. При $J = 0.45$ эВ было получено только немагнитное решение. К нему приводил старт с любого магнитного состояния. При $J = 0.49$ эВ, кроме немагнитного решения, появились и магнитные с направлением спинового момента вдоль как кристаллографических осей, так и пространственной диагонали куба. Однако полная энергия немагнитного решения оставалась ниже полной энергии любого из магнитных: $\Delta E_{\text{tot}}[\beta = 10] = 4$ мэВ, $\Delta E_{\text{tot}}[\beta = 20] = 10$ мэВ.

В работе [24] полноорбитальным методом LDA+U+SO было рассчитано направление легкой оси намагничивания для сульфида урана US. В настоящей работе предложенным методом также получено корректное направление этой оси вдоль

[111]. Базис ЛМТО полноорбитального самосогласованного расчета в приближении LDA для US представляет собой следующий набор: U $7s$ -, $6p$ -, $6d$ -, $5f$ -орбитали, S $3s$ -, $3p$ -, $3d$ -орбитали, дополнительные пустые сферы $1s$ -, $2p$ -, $3d$ -орбитали. Базис функций Ванье состоит из U $7s$ -, $6d$ -, $5f$ - и S $3p$ -орбиталей. Параметры $U = 0.82$ эВ, $J = 0.48$ эВ, $\lambda = 0.26$ эВ [24], $\beta = 10$ эВ⁻¹. Вычисленные величины спинового, орбитального и полного моментов составили для направления спинового момента вдоль [111] $S = 1.07$, $L = 4.17$, $J = 3.10 \mu_B$, вдоль [101] $S = 1.08$, $L = 4.01$ и $J = 2.93 \mu_B$, вдоль [001] $S = 1.09$, $L = 4.16$ и $J = 3.07 \mu_B$. Разность полной энергии магнитных решений с направлением спинового магнитного момента вдоль осей [111] и [101] составила $\Delta E_{\text{tot}} = 38$ мэВ, а вдоль осей [111] и [001] – $\Delta E_{\text{tot}} = 51$ мэВ.

Итак, в настоящей работе предложен и реализован в программных кодах метод расчета электронной структуры сильно коррелированных соединений со спин-орбитальным взаимодействием LDA+U+SO в формализме температурных функций Грина, использующий гамильтониан, вычисленный в базисе функций Ванье. Переход в базис функций Ванье позволяет существенно сократить размерность задачи, тем самым открывая возможность расчетов соединений с большим количеством атомов в элементарной ячейке. Использование шкалы мацубаровских частот перспективно для последующего исследования электронной структуры коррелированных неупорядоченных сплавов. Предложен способ учета эффектов самосогласования электронной плотности. Продемонстрировано, что этот способ применим для изучения электронной структуры как изоляторов, так и металлов. Для исследованных соединений корректно воспроизведены энергетические зависимости плотности состояний, фазовый переход из немагнитного в магнитное состояние, а также величины спинового и орбитального моментов и их направления для последнего. Полученные описания свойств реальных соединений свидетельствуют о широкой области применения нового метода.

Работа выполнена в рамках проекта РНФ # 14-12-00473.

1. V.I. Anisimov, J. Zaanen, and O.K. Andersen, Phys. Rev. B **44**, 943 (1991).
2. A.O. Shorikov, A.V. Lukoyanov, M.A. Korotin, and V.I. Anisimov, Phys. Rev. B **72**, 024458 (2005).
3. В. Кон, УФН **172**, 336 (2002).

4. V.I. Anisimov, I.V. Solovyev, M.A. Korotin, M.T. Czyzyk, and G.A. Sawatzky, *Phys. Rev. B* **48**, 16929 (1993).
5. N. Marzari and D. Vanderbilt, *Phys. Rev. B* **56**, 12847 (1997).
6. V.I. Anisimov, D.E. Kondakov, A.V. Kozhevnikov, I.A. Nekrasov, Z.V. Pchelkina, J.W. Allen, S.-K. Mo, H.-D. Kim, P. Metcalf, S. Suga, A. Sekiyama, G. Keller, I. Leonov, X. Ren, and D. Vollhardt, *Phys. Rev. B* **71**, 125119 (2005).
7. I.V. Solovyev, Z.V. Pchelkina, and V.I. Anisimov, *Phys. Rev. B* **75**, 045110 (2007).
8. V.I. Anisimov, A.I. Poteryaev, M.A. Korotin, A.O. Anokhin, and G. Kotliar, *J. Phys.: Cond. Mat.* **9**, 7359 (1997).
9. T. Fujiwara and M. Korotin, *Phys. Rev. B* **59**, 9903 (1999).
10. M.A. Korotin, Z.V. Pchelkina, N.A. Skorikov, E.Z. Kurmaev, and V.I. Anisimov, *J. Phys.: Cond. Mat.* **26**, 115501 (2014).
11. O.K. Andersen and O. Jepsen, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 2571 (1984).
12. G.A. Sawatzky and J.W. Allen, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 2339 (1984).
13. R.J. Powell and W.E. Spicer, *Phys. Rev. B* **2**, 2182 (1970).
14. H.A. Alperin, *J. Phys. Soc. Japan Suppl. B* **17**, 12 (1962).
15. B.E.F. Fender, A.J. Jacobson, and F.A. Wedgwood, *J. Chem. Phys.* **48**, 990 (1968).
16. A.K. Cheetham and D.A.O. Hope, *Phys. Rev. B* **27**, 6964 (1983).
17. H. Park, A. J. Millis, and C.A. Marianetti, arXiv:1409.4135.
18. J. Kuneš, V.I. Anisimov, A.V. Lukoyanov, and D. Vollhardt, *Phys. Rev. B* **75**, 165115 (2007).
19. M. Korotin, A.V. Kozhevnikov, S.L. Skornyakov, I. Leonov, N. Binggeli, V.I. Anisimov, and G. Trimarchi, *Eur. Phys. J. B* **65**, 91 (2008).
20. M. T. Czyzyk and G. A. Sawatzky, *Phys. Rev. B* **49**, 14211 (1994).
21. A.G. Petukhov, I.I. Mazin, L. Chioncel, and A.I. Lichtenstein, *Phys. Rev. B* **67**, 153106 (2003).
22. M. Karolak, G. Ulma, T. Wehling, V. Mazurenko, A. Poteryaev, and A. Lichtenstein, *J. Electron Spectr. Relat. Phenom.* **181**, 11 (2010).
23. A.K. McMahan, K. Held, and R.T. Scalettar, *Phys. Rev. B* **67**, 075108 (2003).
24. A.O. Shorikov, J.E. Medvedeva, A.I. Poteryaev, V.V. Mazurenko, and V.I. Anisimov, *Письма в ЖЭТФ* **91**, 532 (2010).