Письма в ЖЭТФ, том 121, вып. 1, с. 72 – 77

Сильно коррелированное электронное состояние в ферримагнитном четверном перовските $CuCu_3Fe_2Re_2O_{12}$

А. И. Потеряев[+], З. В. Пчелкина[+*], С. В. Стрельцов[+*], Ю. Лонг[× 1)], В. Ю. Ирхин[+ 2)]*

[+]*Институт физики металлов, 620108 Екатеринбург, Россия*

[*]*Кафедра теоретической физики и прикладной математики, Уральский федеральный университет, 620002 Екатеринбург, Россия*

[×]*Beijing National Laboratory for Condensed Matter Physics, Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, 100190 Beijing, China*

Поступила в редакцию 5 ноября 2024 г.
После переработки 18 ноября 2024 г.
Принята к публикации 18 ноября 2024 г.

Недавно синтезированный четверной перовскит $CuCu_3Fe_2Re_2O_{12}$ обладает сильным ферромагнетизмом и необычными электронными свойствами, включая повышенную электронную теплоемкость. Применение расчетов электронной структуры из первых принципов однозначно указывает важность многочастичных эффектов в этом соединении. В то время как в методе DFT + U $CuCu_3Fe_2Re_2O_{12}$ является полуметаллическим ферримагнетиком, в теории функционала плотности (DFT) в сочетании с теорией динамического среднего поля (DMFT) он оказывается металлом. Сильные электронные корреляции приводят к перенормировке электронного спектра и образованию некогерентных состояний вблизи уровня Ферми. Электронная теплоемкость и магнитные свойства, полученные в подходе DFT + DMFT, лучше согласуются с имеющимися экспериментальными данными, чем полученные другими методами расчета зонной структуры.

DOI: 10.31857/S0370274X25010116, EDN: MIJAZZ

Введение. Ряд четверных перовскитов $ACu_3B_2B'_2O_{12}$ обладают очень интересными электронными и магнитными свойствами. Некоторые из них, например, $CaCu_3Fe_2Re_2O_{12}$ [1], $NaCu_3Fe_2Re_2O_{12}$ [2] и $LaCu_3Fe_2Re_2O_{12}$ [3] большими магнитными моментами в упорядоченной фазе и высокими температурами Кюри и, как предполагается, являются полуметаллическими ферромагнетиками (ПМФ) или, корректнее, ферримагнетиками.

С другой стороны, среди них имеется ряд парамагнитных соединений с высокими значениями коэффициента линейной электронной теплоемкости γ. Для $CaCu_3Cu_2Ir_2O_{12}$, $\gamma = 211$ мДж/моль K^2 [4]; для $CaCu_3Ir_4O_{12}$ экспериментальное $\gamma = 173$ мДж/моль K^2, но расчеты в приближении локальной электронной плотности (LDA) дают гораздо меньшее значение 17 мДж/моль K^2, показывая, что электронная теплоемкость сильно увеличивается за счет электронных корреляций, возможно, кондовского происхождения [5]. Интересно, что γ в $Ca_{1-x}Y_xCu_3Co_4O_{12}$ уменьшается с 157 мДж/моль K^2 для $x = 0$ до 47 мДж/моль K^2 для $x = 1$ [6]. Для системы $CaCu_3Ru_{4-x}Fe_xO_{12}$ коэффициент линейной электронной теплоемкости увеличивается с легированием Fe от 90 мДж/моль K^2 для $x = 0$ до 271 мДж/моль K^2 для $x = 0.2$, причем признаки магнитного порядка наблюдаются для всех образцов, легированных Fe [7].

Сильно ферромагнитные четверные перовскиты также могут иметь повышенные значения γ (например, 95 мДж/моль K^2 для $LaCu_3Co_2Re_2O_{12}$ [8] и около 35 мДж/моль K^2 для $CaCu_3Fe_2Re_2O_{12}$ [9]). В $CuCu_3Fe_2Re_2O_{12}$ $\gamma = 62$ мДж/моль K^2 [9]. Кроме того, $CuCu_3Fe_2Re_2O_{12}$ демонстрирует сильно ангармоническую решеточную теплоемкость, которая описывается в терминах реттлинга (*rattling*) иона Cu, недавно теоретически обнаруженного в [10] (особенность, отсутствующая для $CaCu_3Fe_2Re_2O_{12}$). В то же время, магнитный момент насыщения ($\sim 5\,\mu_B$) и температура Кюри $T_C = 190$ K значительно ниже, чем у $CaCu_3Fe_2Re_2O_{12}$ с большой намагниченностью насыщения 8.7 μ_B и $T_C = 560$ K [1].

Эти свойства $CuCu_3Fe_2Re_2O_{12}$ слабо совместимы с полуметаллическим ферромагнетизмом. Действительно, ПМФ, будучи типичными сильными коллективизированными ферромагнетиками, обладают в одном из спиновых каналов энергетической ще-

1) Y. Long.
2) e-mail: Valentin.Irkhin@imp.uran.ru

лью, которая может иметь различную природу, так что их магнитный момент стремится к максимально возможному значению. Щель может возникать либо из-за гибридизации, либо из-за расщепления Хаббарда, как в сильно коррелированных системах [11]. В состоянии ПМФ обычные спин-флуктуационные механизмы усиления эффективной массы не работают, поскольку процессы переворота спина запрещены (хотя некоторые механизмы, связанные с некогерентными состояниями, могут давать вклад в теплоемкость [12]). Таким образом, повышенные значения γ в ферромагнитных четверных перовскитах представляют собой проблему и возникает задача описания их основного состояния.

В настоящей работе проведены первопринципные исследования электронной структуры и магнитного состояния в четверном перовските $CuCu_3Fe_2Re_2O_{12}$. С этой целью для понимания основных свойств используется традиционная теория функционала плотности (DFT – Density Functional Theory); метод DFT + U [13] позволяет учитывать статические электрон-электронные корреляции; современный подход DFT + DMFT [14, 15], который представляет собой комбинацию теории функционала плотности и теории динамического среднего поля [16], рассматривает корреляционные эффекты динамическим способом и применяется для более детального изучения корреляционных эффектов. Полученные результаты позволяют говорить о значительных электронных корреляциях в $CuCu_3Fe_2Re_2O_{12}$.

Результаты. Кристаллическая структура для $CuCu_3Fe_2Re_2O_{12}$ с пространственной группой Pn-3 показана на рис. 1. Атомы Cu занимают две кристаллографически неэквивалентные позиции. Ионы Cu первого типа ($Cu_1 = A$) расположены в углах кубической примитивной ячейки и окружены кислородными икосаэдрами, показанными серым цветом (левая панель рис. 1). Ионы Cu второго типа ($Cu_2 = A'$) имеют кислородное окружение в виде квадрата, в котором вырождение $3d$ оболочки Cu полностью снимается. Ионы переходных металлов Fe и Re занимают позиции B и B' соответственно и образуют сетку октаэдров с общими углами, окрашенных в зеленый и оранжевый цвета на правой панели рис. 1. d-зоны этих ионов переходных металлов сначала расщепляются полем лиганда на t_{2g} и e_g^σ состояния. Оба типа октаэдров (как FeO_6, так и ReO_6) описываются точечной группой C_{3i}. Это приводит к дополнительному расщеплению t_{2g}-орбиталей на состояния a_{1g} и e_g^π.

Рисунок 2 показывает полную и парциальные плотности состояний (DOS – Density of States), полученные методами DFT + U и DFT (вставка на рисунке). Для расчетов использовался пакет VASP [17] в сочетании с обменно-корреляционным функционалом PBE [18]. Во всех случаях использовался параметр обрезания 500 эВ и **k**-сетка $8 \times 8 \times 8$ в обратном пространстве. Для ионов переходных металлов приняты следующие параметры экранированного кулоновского взаимодействия и хундовского обмена: $U_{\mathrm{Fe}} = 4$ эВ, $J_{\mathrm{Fe}} = 0.9$ эВ, $U_{\mathrm{Re}} = 2$ эВ, $J_{\mathrm{Re}} = 0.5$ эВ, $U_{\mathrm{Cu}} = 7$ эВ, $J_{\mathrm{Cu}} = 0.9$ эВ. Эти значения взаимодействий используются для стандартной параметризации орбитально-зависимой матрицы кулоновского взаимодействия [13] и хорошо согласуются с опубликованными данными для соединений переходных металлов [19–21]. Были опробованы оба типа схемы

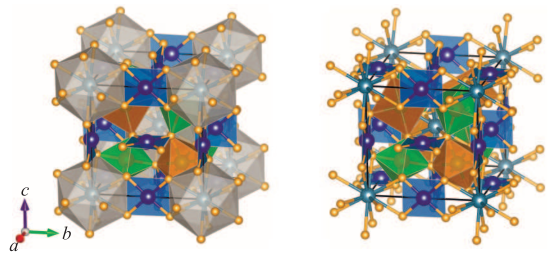

Рис. 1. (Цветной онлайн) Левая панель иллюстрирует кристаллическую структуру $CuCu_3Fe_2Re_2O_{12}$ с различным типом полиэдров кислорода (золотого цвета), окружающих атомы переходных металлов. Правая панель показывает ту же структуру с удаленным икосаэдром вокруг иона Cu_1 (голубой цвет) и квадратной плакеткой вокруг иона Cu_2 (синий). Сеть наклонных зеленых и оранжевых октаэдров видна вокруг ионов Fe и Re соответственно

Таблица 1. Заполнения парциальных d-орбитальных состояний, магнитные моменты и мгновенные квадраты магнитных моментов для ионов переходных металлов, полученные с использованием различных подходов. Верхние индексы означают различные приближения расчета электронной структуры: DFT – немагнитные расчеты, sp-DFT – спин-поляризованная версия, DFT + U обозначает комбинацию DFT и упрощенной статической поправки Хаббарда к зонной структуре, а DMFT – комбинацию теории функционала плотности и теории динамического среднего поля. Поскольку состояния Cu_1 $3d$ полностью заняты и считаются некоррелированными в методе DFT + DMFT, соответствующие значения отсутствуют

	Cu_1	Cu_2	Fe	Re
n^{DFT}	9.44	9.179	6.183	4.582
n^{sp-DFT}	9.433	9.187	5.962	4.558
m^{sp-DFT}	0.024	0.068	3.659	−0.111
n^{DFT+U}	9.616	9.275	5.875	4.516
m^{DFT+U}	0.004	0.524	4.062	−0.859
n^{DMFT}	–	8.893	5.381	3.907
m^{DMFT}	–	−0.011	4.276	−0.527
$\sqrt{\langle m_z^2\rangle}$	–	0.982	4.434	1.343

DFT + U [22, 23], доступные в VASP. Далее в работе будут представлены результаты для варианта реализации DFT + U, предложенного в статье [23].

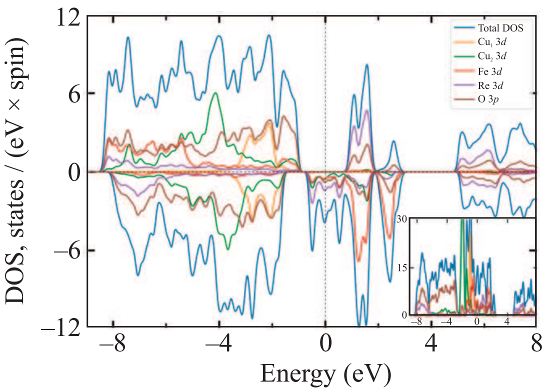

Рис. 2. (Цветной онлайн) Полная и парциальные плотности состояний, полученные в DFT + U расчете для $CuCu_3Fe_2Re_2O_{12}$. Cu_1 находится в лигандном икосаэдре, тогда как Cu_2 – в окружении квадратной плакетки. На вставке с использованием той же цветовой кодировки показаны плотности состояния (DOS), полученные в немагнитном DFT расчете. Поскольку DOS со спином вверх на уровне Ферми отсутствует, но магнитные моменты Fe и Re имеют противоположное направление, система является полуметаллическим ферримагнетиком

Видно, что в DFT + U расчете $CuCu_3Fe_2Re_2O_{12}$ является полуметаллическим ферримагнетиком с запрещенной щелью в одном спиновом канале, $\Delta_g^{\uparrow} = 1.88$ эВ, и плотностью состояний на уровне Ферми в другом спиновом канале, $N_{\downarrow}(E_F) = 6.21$ сост./(эВ ф.е.). Последняя определяется в основном d состояниями ионов Re, Fe и Cu_2 с примешиванием сильно гибридизованных O $2p$ состояний. $3d$ состояния иона Cu_1, который находится внутри икосаэдра (оранжевый цвет на рис. 2), полностью заняты, они расположены около -2.5 эВ и не вносят вклад в плотность состояний на уровне Ферми. $3d$ состояния Cu_2 (зеленый цвет) лежат ниже по энергии, чем соответствующие орбитали для Cu_1. Подзона со спином вверх полностью заполнена, но состояния со спином вниз пересекают уровень Ферми, что приводит к небольшому магнитному моменту, $m_{\mathrm{Cu}_2} = 0.52\,\mu_B$. $3d^{\uparrow}$ зона Fe (красный цвет) сильно гибридизуется с O $2p$ зоной (коричневый) и расположена в районе от -8 до -1 эВ. Плотность $3d^{\downarrow}$ состояний Fe практически полностью находится выше уровня Ферми, что в итоге дает магнитный момент $m_{\mathrm{Fe}} = 4.06\,\mu_B$. Зонная структура Re $3d$ состояний (пурпурный цвет на рис. 2) более интересна: состояния со спином вверх почти полностью пусты с t_{2g} и e_g^{σ} состояниями, расположенными от 1 до 2 эВ и от 5 до 6.5 эВ соответственно. Состояния со спином вниз частично заполнены и пересекают уровень Ферми. Это приводит к магнитному моменту $m_{\mathrm{Re}} = -0.86\,\mu_B$, противоположному по направлению магнитным моментам Fe и Cu (наиболее вероятно, из-за антиферромагнитного сверхобменного взаимодействия). Таким образом, полная ферримагнитная конфигурация $Cu^{\uparrow}Fe^{\uparrow}Re^{\downarrow}$ напоминает магнитную конфигурацию в $CaCu_3Fe_2Re_2O_{12}$ [1]. Полный магнитный момент, включая не только вклады внутри атомных сфер, дает величину, близкую к 10 μ_B/ф.е. Почти целочисленная величина магнитного момента, определяемая согласно правилу Слэтера–Полинга полной валентностью, является типичной ситуацией для полуметаллического магнетизма (в рассматриваемом случае ферримагнетизма).

Низкоэнергетический DFT гамильтониан для расчетов DMFT был построен обычным для соединений переходных металлов способом. А именно, в проектируемый гамильтониан включаются все зоны, пересекающие уровень Ферми, а также кислородные зоны, сильно гибридизованные с ними. В случае $CuCu_3Fe_2Re_2O_{12}$ это состояния Cu $3d$, Fe $3d$, Re $5t_{2g}$ и O $2p$. Поскольку пустые зоны Re e_g^{σ} расположены на 5 эВ выше уровня Ферми и отделены щелью от низколежащих состояний, мы исключили их из рассмотрения, чтобы сократить вычислительные затраты. Немагнитная зонная структура, которая является отправной точкой для DFT + DMFT расчетов, представлена на вставке рис. 2. Чтобы получить гамильтониан малой размерности для DMFT расчетов, был использован метод проекционных операторов Ванье [24]. В DFT + DMFT расчетах полностью занятые O $2p$ и Cu_1 $3d$ состояния рассматриваются как некоррелированные. Также отметим, что в DFT + DMFT использовался тот же набор параметров взаимодействия, что и ранее в DFT + U расчетах. Для учета сильных электронных корреляций в рамках DFT + DMFT применялся пакет AMULET [25]. Эффективная примесная проблема, возникающая в DMFT, была решена с помощью квантового метода Монте-Карло с непрерывным временем [26, 27] при температуре $T = 200$ K.

Полученные в DFT + DMFT расчетах разрешенные по спинам и орбиталям спектральные функции для коррелированных состояний Cu, Fe и Re представлены на рис. 3 (сверху вниз). Вставки на этом рисунке показывают соответствующие мнимые значения собственно-энергетической части $\Sigma(i\omega_n)$ (ω_n – мацубаровская частота). Отрицательная (положи-

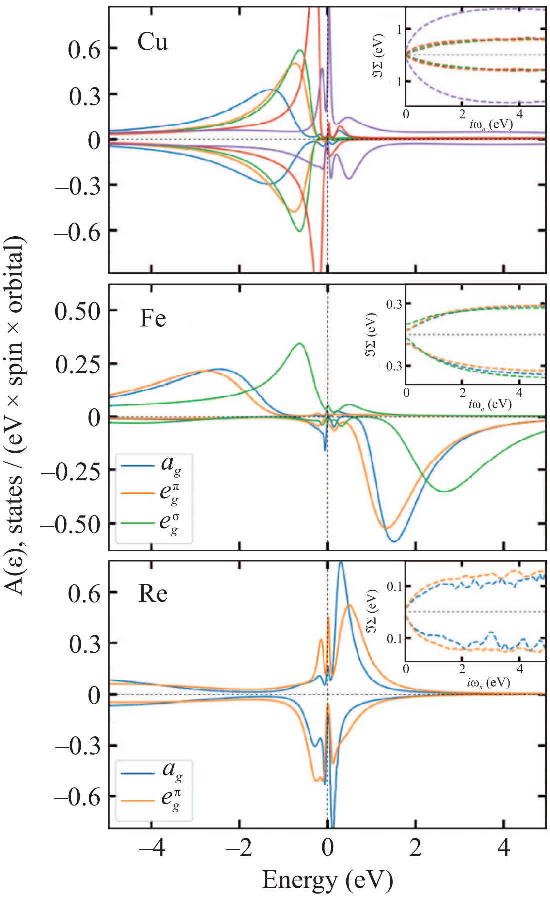

Рис. 3. (Цветной онлайн) Спектральные функции DFT + DMFT для $CuCu_3Fe_2Re_2O_{12}$. Различные панели показывают разрешенные по спинам и орбиталям спектральные функции для Cu_2 (вверху), Fe (в середине) и Re (внизу). Cu_2 имеет квадратное плакетное окружение. Вставки на соответствующей панели показывают мнимые значения собственно-энергетических частей с использованием той же цветовой кодировки

тельная) мнимая часть $\Sigma(i\omega_n)$ соответствует спину вверх (majority) и вниз (minority). Ясно видно, что состояния для обеих проекций спина являются металлическими. Следовательно, в DFT + DMFT подходе $CuCu_3Fe_2Re_2O_{12}$ не является полуметаллическим ферримагнетиком. Все состояния Cu_2 $3d$, кроме одного, заняты. Частично занятая орбиталь имеет псевдощелевое поведение вблизи уровня Ферми с ферми-жидкостным типом мнимой части $\Sigma(i\omega_n)$ (фиолетовый цвет). Квазичастичный вычет $Z^{-1} = 1 - \partial\Im\Sigma/\partial\omega_n$ для этой орбитали составляет около 0.3, тогда как для остальных орбиталей это значение близко к 0.7. Это указывает на корреляционное усиление электронной теплоемкости.

Упорядоченный магнитный момент для Cu_2 сильно уменьшается в DFT + DMFT подходе до $-0.01\,\mu_B$ при $T = 200$ K с направлением момента, противоположным DFT + U. В то же время мгновенный квадрат магнитного момента $\langle m_z^2\rangle_{Cu_2} = 0.97\,\mu_B^2$ указывает на то, что ион Cu_2 находится в конфигурации d^9 с локализованным магнитным моментом, а упорядоченный магнитный момент исчезает из-за тепловых флуктуаций, которые отсутствуют в методе DFT + U. $3d$ состояния Fe со спином вверх почти полностью заняты, как и в подходе DFT + U, но щель в этом спиновом канале закрыта, и, более того, на уровне Ферми возникает узкий пик квазичастичного типа. Состояния со спином вниз почти пусты и имеют псевдощель. Упорядоченный магнитный момент Fe $3d$ равен $4.28\,\mu_B$, что немного больше, чем в методе DFT + U. Среднее от квадрата магнитного момента железа, $\langle m_z^2\rangle_{Fe} = 19.66\,\mu_B^2$, почти идеально совпадает с квадратом упорядоченного магнитного момента, что говорит об отсутствии продольных флуктуаций.

Мнимые части собственных энергий для обоих направлений спина являются некогерентными с расходимостью при малых ω_n (см. вставку на рис. 3). В то же время эта расходимость недостаточно сильна, чтобы создать изоляторное состояние. t_{2g} состояния Re имеют узкий пик чуть выше уровня Ферми для направления спина вверх и псевдощель в другом спиновом канале. Мнимые части $\Sigma(i\omega_n)$ стремятся к нулю при малых ω_n, а среднее значение для Z_{Re} составляет около 0.83, что предполагает умеренные электронные корреляции для этого иона. Упорядоченный магнитный момент на Re уменьшен относительно DFT + U и равен $-0.53\,\mu_B$. Полный магнитный момент для $CuCu_3Fe_2Re_2O_{12}$, полученный в подходе DFT + DMFT, составляет $7.63\,\mu_B$ на ф.е., что сильно меньше, чем в DFT + U.

Значение коэффициента линейной электронной теплоемкости γ, вычисленное в немагнитном DFT расчете, определяется значением плотности состояний на уровне Ферми. Из вставки на рис. 2 видно, что на уровне Ферми имеется существенный пик, который приводит к $\gamma_{DFT} = 56$ мДж/(моль K^2), что на $\sim 10\,\%$ меньше экспериментального значения $\gamma_{\text{exp}} = 62$ мДж/(моль K^2). Тем не менее, это небольшое расхождение нельзя считать удовлетворительным, поскольку $CuCu_3Fe_2Re_2O_{12}$ является магнитным соединением: большой пик на уровне Ферми в немагнитном состоянии приводит к магнитной нестабильности. Соответствующее спин-поляризованное (sp) решение является металлическим с гораздо меньшей плотностью состояний на уровне Ферми, что приводит к $\gamma_{sp-DFT} = 37$ мДж/(моль K^2), – меньше, чем у его немагнитного аналога в DFT расчете. Эти несоответствия указывают на важность сильных электронных корреляций в нашей системе.

К сожалению, попытка учесть сильное электрон-электронное взаимодействие в рамках DFT + U ухудшает ситуацию. В указанном выше подходе (см. рис. 2) полученное решение представляет собой полуметаллический ферримагнетик с щелью в одном спиновом канале. Это резко снижает коэффициент линейной теплоемкости до значения $\gamma_{DFT+U} = 15$ мДж/(моль К^2), что плохо согласуется с экспериментом. Упомянутые расхождения разрешаются с помощью подхода DFT + DMFT, где сильные электронные корреляции учитываются более точно по сравнению с методом DFT + U. Полученное в DFT + DMFT решение является металлическим с сильно перенормированной электронной структурой вблизи энергии Ферми. Следует отметить, что в то время как для $3d$ состояний Fe с полностью пустыми и полностью занятыми спиновыми каналами наблюдается сильное расщепление, подобное стонеровскому, $5d$ состояния Re являются состояниями типа Хаббарда с компонентами ниже и выше уровня Ферми (зоны Хаббарда) и узким квазичастичным пиком вблизи уровня Ферми. Этот пик означает возбуждения, которые могут увеличить эффективную массу, обратно пропорциональную квазичастичному вычету. Таким образом, умеренное увеличение массы электронных состояний приводит к перенормировке линейной электронной теплоемкости, $\gamma_{DFT+DMFT} = 74$ мДж/(моль К^2), что находится в разумном согласии с экспериментальными данными и совместимо с магнитными свойствами соединения $CuCu_3Fe_2Re_2O_{12}$.

Выводы. В настоящей работе было изучено влияние сильных динамических корреляций на электронные и магнитные свойства четверного перовскита $CuCu_3Fe_2Re_2O_{12}$. С одной стороны, DFT + DMFT расчеты (учитывающие эти эффекты в явном виде) частично согласуются со статическим расчетом в приближении DFT + U касательно зарядовых состояний ионов переходных металлов и магнитных моментов. С другой стороны, динамические эффекты сильно влияют на электронную структуру рассматриваемого материала и нарушают полуметаллическое состояние, закрывая щель в неосновном спиновом канале, также обеспечивая значительное усиление электронной теплоемкости и перенормировку магнитного момента. Более того, корреляционные эффекты приводят к образованию нескольких интенсивных пиков вблизи уровня Ферми, которые отсутствуют в DFT + U расчетах. Такие особенности могут быть связаны с хаббардовскими зонами, которые описываются в терминах некогерентных состояний, наблюдаемых в оптических переходах [28, 29]. Наши результаты показывают, что правильный учет электронных корреляций необходим для четверных перовскитов и мотивирует дальнейшие экспериментальные спектроскопические исследования.

Авторы благодарны Жехонгу Лю (Zhehong Liu) за обсуждение экспериментальных результатов по четверным перовскитам.

Финансирование работы. Расчеты DMFT были поддержаны Российским научным фондом через проект RSF 23-42-00069, а эксперименты – Национальным естественнонаучным фондом Китая (грант # 12261131499). Расчеты DFT были выполнены в рамках государственного задания (Министерство науки и высшего образования Российской Федерации, тема “Квант” # 122021000038-7).

Конфликт интересов. Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

1. W.-T. Chen, M. Mizumaki, H. Seki, M. S. Senn, T. Saito, D. Kan, J. P. Attfield, and Yu. Shimakawa, Nat. Commun. **5**, 3909 (2014).
2. X. Wang, M. Liu, X. D. Shen, Z. H. Liu, Z. W. Hu, K. Chen, P. Ohresser, L. Nataf, F. Baudel, H. J. Lin, C. T. Chen, Y. L. Soo, Y. F. Yang, C. Q. Jin, and Y. W. Long, Inorg. Chem. **58**, 320 (2019).
3. Z. Liu, S. Zhang, X. Ye, S. Qin, X. Shen, D. Lu, J. Dai, Y. Cao, Y.-f. Yang, and Y. Long, Adv. Mater. **34**, 2200626 (2022).
4. Q. Zhao, Y.-Yu Yin, J.-H. Dai, X. Shen, Zh.-W. Hu, J.-Y. Yang, Q.-T. Wang, R.-C. Yu, X.-D. Li, and Y. Long, Chin. Phys. B **25**, 020701 (2016).
5. J.-G. Cheng, J.-S. Zhou, Y.-F. Yang, H. D. Zhou, K. Matsubayashi, Y. Uwatoko, A. MacDonald, and J. B. Goodenough, Phys. Rev. Lett. **111**, 176403 (2013).
6. I. Yamada, Sh. Ishiwata, I. Terasak, M. Azuma, Yu. Himakawa, and M. Takano, Chem. Mater. **22**, 5328 (2010).
7. R. Wang, Y. Zhu, L. Wang, Y. Liu, J. Shi, and R. Xiong, Solid State Commun. **222**, 49 (2015).
8. Zh. Liu, Q. Sun, X. Ye et al. (Collaboration), Appl. Phys. Lett. **117**, 152402 (2020).
9. V. Yu. Irkhin, Zh. Liu, D. A. Myakotnikov, E. V. Komleva, Y. Long, and S. V. Streltsov, unpublished.
10. Z. V. Pchelkina, E. V. Komleva, V. Yu. Irkhin, Y. Long, and S. V. Streltsov, JETP Lett. **118**, 738, (2023).
11. M. I. Katsnelson, V. Yu. Irkhin, L. Chioncel, A. I. Lichtenstein, and R. A. de Groot, Rev. Mod. Phys. **80**, 315 (2008).
12. V. Yu. Irkhin and M. I. Katsnelson, J. Phys.: Condens. Matter **2**, 7151 (1990).

13. V. I. Anisimov, F. Aryasetiawan, and A. I. Lichtenstein, J. Phys.: Condens. Matter **9**, 767 (1997).
14. V. I. Anisimov, A. I. Poteryaev, M. A. Korotin, A. O. Anokhin, and G. Kotliar, J. Phys.: Condens. Matter **9**, 7359 (1997).
15. A. I. Lichtenstein and M. I. Katsnelson, Phys. Rev. B **57**, 6884 (1998).
16. A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, and M. J. Rozenberg, Rev. Mod. Phys. **68**, 13 (1996).
17. G. Kresse and J. Hafner, Phys. Rev. B **47**, 558 (1993).
18. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. **77**, 3865 (1996).
19. Z. V. Pchelkina and S. V. Streltsov, Phys. Rev. B **88**, 054424 (2013).
20. A. O. Shorikov, M. A. Korotin, S. V. Streltsov, S. L. Skornyakov, Dm. M. Korotin, and V. I. Anisimov, JETP **108**, 121 (2009).
21. K. V. Zakharov, E. A. Zvereva, P. S. Berdonosov, E. S. Kuznetsova, V. A. Dolgikh, L. Clark, C. Black, P. Lightfoot, W. Kockelmann, Z. V. Pchelkina, S. V. Streltsov, O. S. Volkova, and A. N. Vasiliev, Phys. Rev. B **90**, 214417 (2014).
22. A. I. Liechtenstein, V. I. Anisimov, and J. Zaanen, Phys. Rev. B **52**, 5467 (1995).
23. S. L. Dudarev, S. Y. Savrasov, C. J. Humphreys, and A. P. Sutton, Phys. Rev. B **57**, 1505 (1998).
24. D. M. Korotin, A. V. Kozhevnikov, S. L. Skornyakov, I. Leonov, N. Binggeli, V. I. Anisimov, and G. Trimarchi, European Physical Journal B **65**, 91 (2008).
25. A. Poteryaev, A. Belozerov, A. Dyachenko, D. Korotin, M. Korotin, A. Shorikov, N. Skorikov, S. Skornyakov, and S. Streltsov, AMULET Code. Available online: www.amulet-code.org.
26. A. N. Rubtsov and A. I. Lichtenstein, JETP Lett. **80**, 61 (2004).
27. E. Gull, A. J. Millis, A. I. Lichtenstein, M. Troyer, and P. Werner, Rev. Mod. Phys. **83**, 349 (2011).
28. R. Raimondi and C. Castellani, Phys. Rev. B **48**, 11453(R) (1993).
29. V. Yu. Irkhin, JETP Lett. **117**, 48 (2023).