

# Теория остаточного электросопротивления бинарных сплавов на основе актинидов

© Ю.Ю. Циовкин, В.В. Дремов\*, Е.С. Конева\*\*, А.А. Повзнер\*\*,  
А.Н. Филанович\*\*, А.Н. Петрова\*\*

Институт физики металлов УрО РАН,  
Екатеринбург, Россия

\* Российский федеральный ядерный центр — Всероссийский научно-исследовательский институт  
технической физики им. акад. Е.И. Забабахина,  
Снежинск, Челябинская обл., Россия

\*\* Уральский государственный технический университет—УПИ  
им. первого Президента России Б.Н. Ельцина,  
Екатеринбург, Россия

E-mail: povz@kf.ustu.ru

(Поступила в Редакцию 27 апреля 2009 г.)

Предложена система самосогласованных уравнений приближения когерентного потенциала для многополосной модели проводимости в случае рассеяния электронов проводимости на хаотически распределенных электрических полях ионов компонент бинарных разупорядоченных сплавов при нулевой температуре. Качественно показано, что причиной отклонения концентрационной зависимости остаточного электросопротивления от предсказываемой правилом Нордгейма в сплавах актинидов с многополосным характером проводимости является явная зависимость электросопротивления от величины и знака вещественной части функции Грина на уровне Ферми сплава. С использованием полученной системы уравнений многополосного приближения когерентного потенциала выполнены расчеты концентрационной зависимости плотности состояний и остаточного электросопротивления сплавов нептуния и плутония. Результаты расчетов сопоставлены с имеющимися экспериментальными данными.

## 1. Введение

Исследования резистивных свойств актинидов и сплавов с их участием выявили ряд существенных особенностей и аномалий как в температурной, так и в концентрационной зависимости удельного электросопротивления [1–3]. Лишь недавно в рамках интерференционной модели проводимости удалось получить непротиворечивое объяснение аномальной температурной зависимости электросопротивления дельта-плутония в широкой области температур [4,5]. В то же время современные теоретические исследования особенностей концентрационной зависимости остаточного электросопротивления сплавов на основе актинидов отсутствуют, и для объяснения экспериментальных данных в основном воспроизводят качественные оценки, полученные с использованием теории возмущения и позволяющие лишь грубо описать наблюдаемые зависимости. Поэтому представляется актуальным и интересным сформулировать подход к вычислению остаточного электросопротивления сплавов на основе актинидов в многополосной модели проводимости без использования основных упрощающих предположений теории возмущений, который бы учитывал модификацию электронной структуры сплавов при изменении концентрации его компонент. Такой метод расчета электросопротивления сплавов с участием актинидов может быть реализован в рамках приближения когерентного потенциала (ПКП) для многополосной модели проводимости.

Современные *ab initio* расчеты основного состояния актинидов позволяют воспроизвести основные особенности поведения электронов  $5f$ -оболочки актинидов и качественно правильно описать переход от квазиметаллического типа поведения зонных электронов в Th, U и Np к локализованному в случае Am, Cm и Bk. Достигнут существенный прогресс в понимании особенностей основного состояния в Pu и дано объяснение немагнитного состояния этого металла [6–9]. Достаточно надежное воспроизведение основных экспериментальных результатов (энергия основного состояния, объем, плотность состояний и т.д.), получаемое в различных *ab initio* расчетных схемах и подходах для актинидов, открывает возможность учета реальных плотностей электронных состояний компонент сплавов при вычислениях их резистивных свойств.

Для объяснения наблюдаемой концентрационной зависимости остаточного электросопротивления бинарных сплавов актинидов логично, следуя Мотту [10], предположить, что рассеянные  $s$ -электроны проводимости, как и в случае обычных переходных металлов, переходят в незаполненные  $d$ - и  $f$ -зоны с вероятностями, пропорциональными соответствующим значениям плотностей состояний на уровне Ферми принимающей полосы. Такие переходы приводят к исключению части подвижных электронов проводимости из процесса переноса заряда и, следовательно, к значительному росту удельного электросопротивления в металлах и сплавах. Это предположение позволяет качественно объяснить характерные значения остаточного сопротивления рассматриваемых

сплавов. Однако выполненные *ab initio* расчеты основного состояния актинидов показывают, что плотности состояний на уровне Ферми для электронов незаполненных *d*- и *f*-полос оказываются сопоставимыми по величине и значительно превышают значения плотности состояний *s*-электронов проводимости. В то же время двухполосная *s*-*d*-модель проводимости Мотта, обычно используемая в расчетах электросопротивления переходных металлов, предполагает наличие только одной незаполненной оболочки. В актинидах и их сплавах в силу наличия двух незаполненных полос с большими и сопоставимыми значениями плотностей состояний возможна и вероятно реализация как *s* → *d*-, так и *s* → *f*-переходов электронов проводимости. Поэтому, для последовательного расчета электросопротивления сплавов, во-первых, необходимо выполнить обобщение двухполосной модели проводимости, отказавшись от использования упрощающих предположений теории возмущений относительно малости взаимодействия электронов с рассеивателями. Во-вторых, в расчетах необходимо учесть перенормировку плотностей состояний *s*-, *d*- и *f*-полос сплава, возникающую как за счет изменения концентрации компонент, так и в результате рассеяния. Причем очевидно, что плотности состояний *s*-, *d*- и *f*-полос в сплавах оказываются сложными, взаимозависящими функциями интенсивности рассеяния. Как показано далее в рамках качественного анализа и детальных расчетов, выполненных в сформулированном методе ПКП для многополосной модели проводимости, эта особенность рассеяния приводит к неаддитивности вкладов в удельное электросопротивление от *s* → *d*- и *s* → *f*-переходов, смещению максимума остаточного электросопротивления из точки эквиполосного состава и существенным отклонениям концентрационной зависимости остаточного электросопротивления от предсказываемой правилом Нордгейма.

## 2. Модель и вывод уравнений многополосного ПКП

Рассмотрим систему *s*-(*p*-), *d*- и *f*-электронов, совершающих внутри- и межполосные переходы (без переворота спина) в результате их рассеяния на хаотически распределенных по узлам кристаллической решетки электрических полях ионов компонент сплава. Гамильтониан такой системы может быть представлен в виде

$$\hat{H} = \sum_l E_l a_l^\dagger a_l + \frac{1}{N} \sum_{n,l,l'} e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}', \mathbf{R}_n)} B_{l,l'} a_l^\dagger a_{l'}, \quad (1)$$

где  $E_l$  — периодическая часть полной энергии электронов с квантовым числом  $l$ , включающим зонный индекс  $j$  ( $j = s(p), d, f$ ) и волновой вектор  $\mathbf{k}$ ;  $\mathbf{R}_n$  — радиус-вектор  $n$ -го узла кристаллической решетки,

$$B_{l,l'}(n) = v(n) [\lambda_{\mathbf{k}j,\mathbf{k}'j'} \delta_{j,j'} + \lambda_{\mathbf{k}j,\mathbf{k}'j} (1 - \delta_{j,j'})]. \quad (2)$$

Множитель  $v(n) = \alpha_A(n)c_B - \alpha_B(n)c_A$  хаотически распределяет ионы компонент сплава по узлам кристаллической решетки, причем  $\alpha_{A(B)}(n) = 1$ , если узел с номером  $n$  занят ионом сорта  $A(B)$ , и  $\alpha_{A(B)}(n) = 0$  в противоположном случае. Параметры  $\lambda_{ll'}$  характеризуют интенсивности внутри- и межполосных переходов рассеянных электронов соответственно.

Известно, что эффекты гибридизации приводят к значительным перенормировкам исходных *s*-(*p*-), *d*- и *f*-плотностей состояний полос проводимости. Однако эти поправки существенны лишь при определении основного состояния металлов и не влияют на рассеивающие потенциалы [11]. Так как в дальнейшем нами будут использоваться исходные плотности состояний, полученные с учетом эффектов гибридизации полос проводимости, будем считать соответствующие поправки учтенными в  $\hat{H}_0$ , но для удобства за *s*-(*p*-), *d*- и *f*-подобными полосами проводимости сохраним их первоначальные названия. Отметим, что использование полученных *ab initio* плотностей состояний позволяет частично учесть в  $\hat{H}_0$  сплавах эффекты, обусловленные сильным межэлектронным взаимодействием в *5f*-металлах [12].

Квантово-механическое требование строгой диагональности оператора сдвига и уширения одноэлектронных уровней в представлении гамильтониана основного состояния  $\hat{H}_0$  позволяет получить систему самосогласованных уравнений многополосного ПКП в достаточно простой схеме. Для этого определим строго диагональный в представлении  $\hat{H}_0$  оператор сдвига и уширения одноэлектронного уровня

$$\hat{\Delta} = \frac{1}{N} \sum_{n,l,l'} \exp(-i(\mathbf{k} - \mathbf{k}', \mathbf{R}_n)) \Delta_j \delta_{jj'} a_l^\dagger a_{l'}. \quad (3)$$

Введем полную резольвенту оператора  $\hat{H}$ :  $\hat{R} = (z - \hat{H})^{-1}$  и выделим ее строго диагональную в представлении  $\hat{H}_0$  часть:  $\hat{G} = (z - \hat{H}_0 - \hat{\Delta})^{-1}$ . Используя уравнение Дайсона и определение *T*-матрицы рассеяния:  $\hat{T} = \hat{G}^{-1}(\hat{R} - \hat{G})\hat{G}^{-1}$ , в результате ряда преобразований, и исключая компенсирующиеся блоки [13] для оператора сдвига, получаем

$$\hat{\Delta} = [\hat{V}\hat{G}\hat{V} + \hat{V}\hat{G}\hat{V}\hat{G}\hat{V} + \dots]_D = \frac{\hat{V}\hat{G}\hat{V}}{(1 - \hat{G}\hat{V})}. \quad (4)$$

Индекс  $D$  обозначает, что в сумме  $[\dots]_D$  удерживаются только неприводимые, строго диагональные в представлении  $\hat{H}_0$  слагаемые, не содержащие компенсирующиеся блоки.

В одноэлектронном и одноузельном приближениях суммирование ряда (4) может быть выполнено точно, если дополнительно предположить слабую зависимость матричных элементов от волновых векторов. Такое суммирование удобно провести в матричной форме, определив диагональные (по индексу полосы) матрицы  $F$  и  $\Delta$  для функции Грина  $F_j = 1/N \sum_{\mathbf{k}} (z - E_{\mathbf{k},j})^{-1}$

и операторов  $\Delta_j$  соответственно и матрицу взаимодействия. В результате суммирования бесконечного матричного ряда получится система трех уравнений для самосогласованного определения когерентных потенциалов  $s$ -,  $d$ - и  $f$ -электронов. Однако полученная прямым суммированием рядов система уравнений оказывается чрезвычайно громоздкой, что значительно усложняет ее анализ. Поэтому представляется целесообразным дать анализ более простой системы уравнений, получаемой с использованием упрощающих предположений без ущерба физической сути модели. Действительно, учитывая, что плотности состояний  $d$ - и  $f$ -электронов значительно больше, чем в  $s$ -полосе, можно предположить, что выполняются следующие условия:  $|\lambda_j F_s| \ll 1$  и  $|\lambda F_s| \ll 1$ . В этом случае полная система уравнений резко упрощается, так что после усреднения по конфигурации получаем

$$\Delta_s = \sum_{j \neq j'} c_A \frac{(c_B \lambda_{sj})^2 F_j [1 - c_B \lambda_{j'} F_{j'}] + (c_B \lambda)^3 F_j F_{j'}}{[1 - c_B \lambda_d F_d][1 - c_B \lambda_f F_f] - (c_B \lambda)^2 F_d F_f} + c_B \frac{(c_A \lambda_{sj})^2 F_j [1 + c_A \lambda_{j'} F_{j'}] - (c_A \lambda)^3 F_j F_{j'}}{[1 + c_A \lambda_d F_d][1 + c_A \lambda_f F_f] - (c_A \lambda)^2 F_d F_f}, \quad (5)$$

$$\Delta_d = c_A \frac{(c_B \lambda_d)^2 F_d [1 - c_B \lambda_f F_f] + (c_B \lambda_{df})^2 F_f [1 + c_B \lambda_d F_d]}{[1 - c_B \lambda_d F_d][1 - c_B \lambda_f F_f] - (c_B \lambda_{df})^2 F_d F_f} + c_B \frac{(c_A \lambda_d)^2 F_d [1 + c_A \lambda_f F_f] - (c_A \lambda_{df})^2 F_f [1 - c_A \lambda_d F_d]}{[1 + c_A \lambda_d F_d][1 + c_A \lambda_f F_f] - (c_A \lambda_{df})^2 F_d F_f}. \quad (6)$$

При записи этой системы введены обозначения  $\lambda_{jj} = \lambda_j$  и  $\lambda = \lambda_{sd} \lambda_{sf} \lambda_{df}$ . Уравнения для когерентного потенциала  $f$ -электронов получаются из (6) заменой индексов  $d \leftrightarrow f$ .

Очевидно, что в отсутствие межполосных переходов  $\lambda_{jj'} = 0$  система уравнений распадается на три независимых уравнения для определения когерентных потенциалов полос

$$\Delta_j = c_A \frac{(c_B \lambda_j)^2 F_j}{1 - c_B \lambda_j F_j} + c_B \frac{(c_A \lambda_j)^2 F_j}{1 + c_A \lambda_j F_j}, \quad (7)$$

совпадающих с полученными ранее для однополосной модели проводимости [11].

Полученные уравнения ПКП содержат ряд параметров интенсивности рассеяния, подлежащих определению. Обычно в ПКП эти параметры принимают равными разности средних энергий соответствующих полос компонент сплавов. Учитывая, что в расчеты вводятся полученные из первых принципов плотности состояний металлов, достаточно определить один параметр, например, для  $f$ -полосы. Тогда параметры  $\lambda_s$  и  $\lambda_d$  определяются автоматически. Дополнительное предположение  $\lambda_{jj'} \approx 1/2(\lambda_j + \lambda_{j'})$  фактически сводит задачу к однопараметрической. В дальнейшем величина варьируемого параметра  $\lambda_f$  находилась нами из условия наилучшего описания экспериментальных данных.

### 3. Результаты и обсуждение

3.1. Качественное рассмотрение. Предваряя описание результатов численного решения уравнений ПКП и вычислений остаточного электросопротивления, целесообразно проанализировать некоторые результаты, получаемые в рамках теории возмущений. Так как удельное электросопротивление  $\rho \sim \text{Im} \Delta_s$ , то в слабом пределе в результате разложения (5) в ряд по малому параметру находим, что во втором порядке теории возмущений

$$\Delta_s^{(2)} = \sum_j \lambda^2 F_j.$$

В третьем порядке аналогично получаем

$$\Delta_s^{(3)} = \sum_{j, (j \neq j')} (\lambda_{sj} F_j \lambda_{jj} + \lambda_{sj'} F_{j'} \lambda_{j'j}) F_j \lambda_{js}. \quad (8)$$

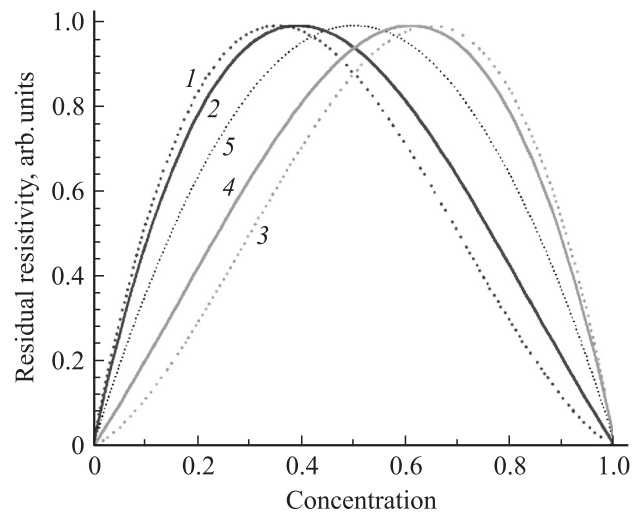
Следовательно, с учетом слагаемых второго и третьего порядка по взаимодействию для сопротивления имеем

$$\rho^{(2+3)} \sim c_A c_B \sum_j [\lambda_j^2 \text{Im} F_j + (c_B^2 - c_A^2) \beta_j], \quad (9)$$

где

$$\beta_{j(j \neq j')} = \left[ 2\lambda_{sj}^2 \lambda_{jj} \text{Im} F_j \text{Re} F_j + \lambda_{sj} \lambda_{jj'} \lambda_{j's} (\text{Re} F_j \text{Im} F_{j'} + \text{Re} F_{j'} \text{Im} F_j) \right]_{E=E_F}.$$

Первое слагаемое в (8) приводит к классической параболической зависимости электросопротивления от концентрации. Второе же слагаемое может привести к существенным модификациям кривой концентрационной зависимости и отклонениям от правила Нордгейма. Это



**Рис. 1.** Сравнение модельных вычислений остаточного сопротивления при  $\alpha/\beta = 1.25$  (1),  $-2$  (2),  $-1.25$  (3) и  $1.25$  (4) ( $\alpha = \sum_j \lambda_j^2 \text{Im} F_j$ ) и кривой Нордгейма (5).

связано не только с наличием зависящего от концентрации знакопеременного множителя, но с его зависимостью от вещественной части функции Грина. Рис. 1, на котором представлены результаты модельных вычислений для фиксированных значений  $\text{Im}F_{j'}(E_F)$ ,  $\text{Re}F_{j'}(E_F)$  и  $|\lambda_{jj'}| = |\lambda_{j'j}|$ , дает представление о возможных отклонениях от параболической зависимости сопротивления для рассматриваемых систем. Расчетные кривые имеют выраженное смещение максимума от точки эквипотенциального состава и значительные участки практически линейной зависимости сопротивления от концентрации. При этом предсказать, в какую сторону будет смещен этот максимум в том или ином сплаве, практически невозможно, так как вещественная часть функции Грина является быстроизменяющейся знакопеременной функцией энергии и сложным образом зависит от концентрации компонент. Поскольку учет третьего слагаемого теории возмущений приводит к существенным отклонениям от правила Нордгейма, становится ясным, почему при анализе сопротивления конкретных сплавов необходимо использовать результаты самосогласованного решения уравнений ПКП, полученных без ограничений на величину интенсивности взаимодействия.

**3.2. Численные результаты.** Вычисления остаточного электросопротивления сплавов  $\text{Np-Pu}$  были выполнены с использованием *ab initio* плотностей состояний  $\text{Pu}$ ,  $\text{Np}$  и формулы Кубо для диагональной части тензора проводимости, модифицированной для вычислений в рамках ПКП [5]. При этом матричный элемент квадрата скорости электронов с целью упрощения вычислений был приближенно выражен через среднюю кинетическую энергию электронов  $v_x^2 \approx 2\bar{E}/m$ . Данная оценка является весьма грубой, но, как показали вычисления, выполненные с использованием самых различных аппроксимаций для матричного элемента квадрата скорости, используемое приближение не оказывает никакого существенного влияния на конечный результат.

Учесть же в расчетах индивидуальные особенности компонент сплавов возможно при использовании реалистических, определенных из первых принципов плотностей состояний металлов. При построении исходной плотности состояний сплавов в рамках ПКП обычно используется модель средневзвешенной плотности состояний [14]

$$g(E) = \sum_{\alpha} c_{\alpha} g_{\alpha}(E).$$

Однако в настоящей работе исходная плотность состояний сплавов определялась из условия сохранения числа  $d$ - и  $f$ -электронов [5]. Действительно, для занятых ( $n_j$ ) и незанятых ( $\bar{n}_j$ ) электронных состояний в  $j$ -полосе сплава в силу нормированности полос проводимости можно считать, что

$$n_j = \sum_{\alpha=A,B} c_{\alpha} n_{\alpha,j} \quad \text{и} \quad \bar{n}_j = \sum_{\alpha=A,B} c_{\alpha} \bar{n}_{\alpha,j}. \quad (10)$$

Тогда, используя определение числа электронов (дырок) через соответствующие функции плотности состояний, находим

$$\int_{E_{0j}}^{E_F} g_j(E) dE = \sum_{\alpha=A,B} c_{\alpha} \int_{E_{\alpha,0j}}^{E_{F,\alpha j}} g_{\alpha,j}(E) dE,$$

$$\int_{E_F}^{E_{c,j}} g_i(E) dE = \sum_{\alpha=A,B} c_{\alpha} \int_{E_{F,\alpha}}^{E_{\alpha,cj}} g_{\alpha,j}(E) dE, \quad (11)$$

где  $E_F$  и  $E_{F,\alpha}$  — энергии Ферми сплавов и его компонент соответственно,  $E_{0j}(E_{c,j})$  и  $E_{\alpha,0j}(E_{\alpha,cj})$  — начальные (конечные) точки на энергетической шкале для сплава и его компонент, ниже (выше) которых плотности состояний равны нулю. Решение уравнений (11) приводит к определению плотности состояний сплава через известные плотности состояний его компонент, так что

$$g_j(E) = \sum_{\alpha} c_{\alpha} \frac{E_{F,\alpha j} - E_{\alpha,0j}}{E_F - E_{0j}}$$

$$\times g_{\alpha j} \left( \frac{E_{F,\alpha} - E_{\alpha,0j}}{E_F - E_{0j}} (E - E_{0j}) + E_{\alpha,0j} \right) \quad \text{при} \quad E \leq E_F,$$

$$g_j(E) = \sum_{\alpha} c_{\alpha} \frac{E_{\alpha,cj} - E_F}{E_{c,j} - E_{F,\alpha}}$$

$$\times g_{\alpha j} \left( \frac{E_{\alpha,cj} - E_{F,\alpha}}{E_{c,j} - E_{F,\alpha}} (E - E_F) + E_{F,\alpha} \right) \quad \text{при} \quad E \geq E_F. \quad (12)$$

Из условия непрерывности плотности состояний в точке  $E_F$

$$\sum_{\alpha} c_{\alpha} \frac{E_{F,\alpha} - E_{\alpha,0}}{E_F - E_{0\alpha}} g_{\alpha}(E_{F,\alpha}) = \sum_{\alpha} c_{\alpha} \frac{E_{\alpha,c} - E_F}{E_{c\alpha} - E_{F,\alpha}} g_{\alpha}(E_{F,\alpha}) \quad (13)$$

несложно определить уровень Ферми сплава

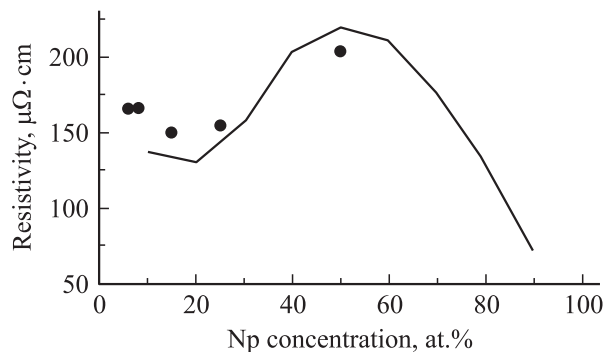
$$\frac{E_F - E_0}{E_c - E_F} = \frac{\sum_{\alpha} c_{\alpha} (E_{F,\alpha} - E_{\alpha,0}) g_{\alpha}(E_{F,\alpha})}{\sum_{\alpha} c_{\alpha} (E_{\alpha,c} - E_{F,\alpha}) g_{\alpha}(E_{F,\alpha})}. \quad (14)$$

Наконец, исходная функция Грина, используемая в начальном цикле итерационного процесса при численном решении уравнений (5), (6) многополосного ПКП, легко определяется с помощью представления Лемана

$$F(z) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{g(E) f E}{z - E}. \quad (15)$$

Единственный варьируемый параметр теории для сплава  $\text{Np-Pu}$  —  $\lambda_{ff} = 2.65$  eV был определен нами из условия наилучшего описания экспериментальных данных.

Локальный минимум остаточного электросопротивления  $\alpha$ -модификации сплавов  $\text{Np-Pu}$  был обнаружен в интервале 10–20 at%  $\text{Np}$  [1]. Объяснение наблюдаемого



**Рис. 2.** Остаточное сопротивление сплава Np–Pu. Точки — экспериментальные данные из работы [1].

минимума основывалось на предположении о влиянии структурной модификации сплава на его электросопротивление и возможной некорректности учета поправки на радиационные эффекты. Результаты наших вычислений в рамках предложенного многополосного ПКП показывают, что этот минимум может быть следствием сильного изменения значений плотности состояний сплавов на уровне Ферми в этом интервале концентраций. Действительно, для сплава вычисления показывают значительное уменьшение плотности состояний на уровне Ферми и соответственно значительное уменьшение остаточного сопротивления (рис. 2). Эти результаты качественно согласуются с экспериментальными данными и в принципе воспроизводят наблюдаемый провал на кривой остаточного сопротивления. С увеличением концентрации Pu значение плотности состояния на уровне Ферми демонстрирует небольшое изменение, и конфигурационный фактор ( $c_{ACB}$ ) определяет квазипараболический тип концентрационной зависимости остаточного сопротивления в интервале 30–90% Np (рис. 2).

#### 4. Заключение

В результате расчетов, выполненных в сформулированной многополосной модели проводимости, показано, что характер концентрационной зависимости остаточного электросопротивления сплавов с участием актинидов значительно отличается от предсказанного правилом Нордгейма и имеет существенные особенности — смещенный из точки эквиатомного состава максимум и квазилинейный участок даже при одинаковых значениях плотности состояний на уровне Ферми компонент сплава. Отклонения от правила Нордгейма определяются не только динамикой изменения плотности состояний на уровне Ферми сплава, но и сложным образом зависят от изменений вещественной части функции Грина при изменении концентрации компонент сплавов. Выполненные расчеты позволили качественно правильно воспроизвести наблюдаемый локальный минимум на кривой остаточного электросопротивления сплавов Np–Pu.

#### Список литературы

- [1] C.E. Olsen, R.O. Elliott. Phys. Rev. **139**, A 437 (1965).
- [2] N. Baclet, M. Dorneval, L. Havela, J.M. Fournier, C. Valot, F. Wastin, T. Gouder, E. Colineau, C.T. Walker, S. Bremier, C. Apostolidis, G.H. Lander. Phys. Rev. B **75**, 035 101 (2007).
- [3] A. Shick, J. Kolorenč, L. Havela, V. Drchal, T. Gouder. Europhys. Lett. **77**, 17 003 (2008).
- [4] Yu.Yu. Tsiovkin, L.Yu. Tsiovkina. J. Phys.: Cond. Matter **19**, 056 207 (2007).
- [5] Yu.Yu. Tsiovkin, M.A. Korotin, A.O. Shorikov, V.I. Anisimov, A.N. Voloshinskii, A.V. Lukoyanov, E.S. Koneva, A.A. Povzner, M.A. Surin. Phys. Rev. B **76**, 075 119 (2007).
- [6] A.O. Shorikov, A.V. Lukoyanov, M.A. Korotin, V.I. Anisimov. Phys. Rev. B **72**, 024 458 (2005).
- [7] A.B. Shick, V. Drchal, L. Havela. Europhys. Lett. **69**, 588 (2005).
- [8] J.H. Shim, K. Haule, G. Kotliar. Nature (London) **446**, 513 (2007).
- [9] V.I. Anisimov, A.O. Shorikov, J. Kuneš. J. Alloys Comp. **444–445**, 42 (2007).
- [10] N.F. Mott. Adv. Phys. **13**, 325 (1964).
- [11] Yu.Yu. Tsiovkin, A.N. Voloshinskii, V.V. Gapontsev, V.V. Ustinov, A.G. Obykhov, A.L. Nikolaev, I.A. Nekrasov, A.V. Lukoyanov. Phys. Rev. B **72**, 224 204 (2005).
- [12] Ю.А. Изюмов, В.И. Анисимов. Электронная структура соединений с сильными корреляциями. М.-Ижевск (2008). 376 с.
- [13] A.N. Voloshinskii, A.G. Obukhov. Phys. Met. Metallogr. **91**, 238 (2001).
- [14] B. Velicky. Phys. Rev. **184**, 614 (1969).