

Описание перехода изолятор—металл под давлением в BaCoS_2 в рамках LDA + DMFT-подхода

© В.М. Зайнуллина^{1,2}, Н.А. Скориков², М.А. Коротин²

¹ Институт химии твердого тела УрО РАН,
Екатеринбург, Россия

² Институт физики металлов УрО РАН,
Екатеринбург, Россия

E-mail: veronika@ihim.uran.ru, michael.korotin@imp.uran.ru

(Поступила в Редакцию 27 декабря 2011 г.)

Впервые с помощью комбинации приближения локальной электронной плотности и теории динамического среднего поля (LDA + DMFT) описан переход изолятор—металл под давлением при температуре 370 К в парамагнитном сульфиде BaCoS_2 . На основе анализа спектральных функций 3d-орбиталей Co, локальных магнитных моментов Co и частотной зависимости мнимой части собственно энергетической части установлено существование перехода изолятор—металл для объема 97% от объема ячейки BaCoS_2 при нормальном давлении. Одновременно происходит магнитный переход ионов Co^{2+} из высокоспинового в низкоспиновое состояние.

Работа выполнена в рамках проекта РФФИ № 09-02-00203.

1. Введение

В последние годы исследования сложных сульфидов переходных металлов со слоистой структурой вызывают повышенный интерес в связи с уникальными свойствами этих соединений, подобными свойствам высокотемпературных сверхпроводников — купратов типа $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$. Так, установлено существование перехода антиферромагнитный изолятор—парамагнитный металл в твердых растворах $\text{BaCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{S}_2$ вблизи $x \sim 0.25$ [1]. В ряду рассматриваемых твердых растворов крайние его члены (BaNiS_2 и BaCoS_2) обладают различными физическими и кристаллографическими свойствами. BaNiS_2 — металл и парамагнетик Паули с тетрагональной кристаллической структурой [2]. BaCoS_2 — изолятор с запрещенной щелью около 1 eV [3] и антиферромагнетик с температурой Нееля $T_N = 300\text{--}310\text{ K}$ [4,5], кристаллизующийся в высокотемпературную орторомбическую структуру [6].

Наряду с сильной зависимостью магнитных и транспортных свойств $\text{BaCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{S}_2$ от концентрации переходного металла установлено влияние нестехиометрии в сульфидной подрешетке и давления на эти свойства [7,8]. В частности, в тетрагональном сульфиде состава $\text{BaCo}_{0.9}\text{Ni}_{0.1}\text{S}_2$ наблюдался переход изолятор — металл при появлении вакансий в подрешетке серы [7]. При воздействии гидростатического давления на нестехиометрический моноклинный сульфид $\text{BaCo}_{0.9}\text{Ni}_{0.1}\text{S}_{1.87}$ экспериментально зафиксировано два перехода. Первый переход металл—изолятор при давлении $p > 1.5\text{ kbar}$ в температурном интервале 100–150 К соответствует переходу из моноклинной низкотемпературной фазы с низкоспиновой (НС) конфигурацией ионов кобальта (II) в тетрагональную высокотемпературную (НТТ) фазу с ионами кобальта (II) в высокоспиновом (ВС) состо-

янии [7–9]. Необычность данного перехода состоит в том, что при повышенных давлениях предпочтительной становится изоляторная фаза, а не металлическая, как для большинства соединений. Так, для составов $\text{BaCo}_{0.9}\text{Ni}_{0.1}\text{S}_{1.96}$, $\text{BaCo}_{0.9}\text{Ni}_{0.1}\text{S}_{1.93}$ установлены отрицательные значения производной dT_M/dp (T_M — температура перехода металл—изолятор), равные -22 и -27 K/kbar , и критические величины давления $p_c = 1.9$ и 2.9 kbar , при которых исчезает переход металл—изолятор [8,9]. Второй переход изолятор—металл при давлениях более 10 kbar и температурах ниже 290 К соответствует переходу НТТ-фазы с ВС-конфигурацией Co^{2+} в фазу НТТ с НС-конфигурацией ионов кобальта [7].

В работах [10,11] обнаружен переход изолятор—металл в парамагнитном орторомбическом BaCoS_2 при давлении $\sim 11.7\text{ kbar}$ и температурах выше T_N , приводящий к стабилизации металлического BaCoS_2 . Для антиферромагнитного (АФМ) сульфида BaCoS_2 значение критического давления составило $\sim 13.7\text{ kbar}$.

Для объяснения наблюдаемых под давлением переходов в сложных сульфидах необходимы сведения об их электронной структуре. Имеющиеся в литературе расчетные данные недостаточны для объяснения этих переходов. Так, методы теории функционала электронной плотности, которые использовались в расчетах электронной структуры BaNiS_2 и BaCoS_2 , в случае сульфида никеля воспроизводят металлический характер проводимости [12,13], но не способны воспроизвести энергетическую щель в электронном спектре BaCoS_2 [13,14]. Недооценка значения запрещенной щели или ее отсутствие, если ее значение мало, как в случае BaCoS_2 , — типичная ошибка методов теории функционала электронной плотности для соединений переходных металлов, связанная с тем, что они не учитывают в явном виде кулонов-

ские взаимодействия на узлах переходных d-металлов. В рамках LDA + U-подхода [15], учитывающего в явном виде корреляционные эффекты, в работе [16] была воспроизведена запрещенная щель величиной 0.47 eV в энергетическом спектре BaCoS_2 .

Имеющиеся в литературе экспериментальные данные о величине магнитного момента на ионах кобальта достаточно противоречивы. Из высокотемпературных измерений магнитной восприимчивости BaCoS_2 следует наличие как HS- [17], так и BC-конфигурации [5,18] ионов Co^{2+} . Низкотемпературные данные дифракции нейтронов [5] указывают на BC-состояние ионов кобальта с величиной магнитного момента 2.63 [5] и 2.9 μ_B [18], существенно отличающейся от величины эффективного момента, получаемого из измерений магнитной восприимчивости (от 1.5 до 5.26 μ_B) [5,17]. Наблюдается также сильная анизотропия магнитных свойств BaCoS_2 в случае, когда основной вклад в магнитные взаимодействия вносят взаимодействия в *ab*-плоскостях орторомбической структуры сульфида [5]. Из результатов LDA+U-расчетов [16] основного состояния АФМ BaCoS_2 значение спинового магнитного момента 3d-оболочки ионов Co^{2+} равно 2.32 μ_B и соответствует BC-конфигурации ионов кобальта.

Поскольку приближения LSDA и LDA + U предполагают существование дальнего магнитного порядка в твердофазных соединениях, их использование не позволяет проводить расчеты электронной структуры и физико-химических свойств парамагнитных фаз. Кроме того, область применения этих методов ограничивается нахождением основного состояния системы при 0 К. Современный метод LDA + DMFT [19], являющийся комбинацией приближения локальной электронной плотности (LDA) [20] и динамической теории среднего поля (DMFT) [21], позволяет описывать фазовые переходы в парамагнитных фазах при различных температурах.

В настоящей работе выполнено исследование перехода изолятор–металл при уменьшении объема ячейки орторомбического сульфида BaCoS_2 в рамках LDA + DMFT-подхода, учитывающего динамику кулоновских взаимодействий. Был вычислен объем, при котором наблюдается переход изолятор–металл в парамагнитном BaCoS_2 . Определены зависимости электронного спектра и значения магнитного момента на ионах Co от давления.

2. Методика расчета

Описание перехода изолятор–металл в парамагнитном BaCoS_2 под давлением проведено в рамках LDA + DMFT-подхода [22]. На основе LDA-расчета зонной структуры сульфида BaCoS_2 конструировался гамильтониан в базисе функций Ванье. Полученный гамильтониан использовался для решения примесной модели Андерсона в рамках расчетной схемы DMFT.

LDA-расчеты зонной структуры BaCoS_2 выполнены с использованием линейаризованного метода маффин-тин-орбиталей в приближении сильной связи (ТВ-LMTO) [23] для трех значений объема ячейки $V/V_0 = 100, 97$ и 94% (V_0 — экспериментальный объем при нормальном давлении). Параметры орторомбической ячейки BaCoS_2 , соответствующие объему V_0 , были взяты из работы [6]. Собственные значения и собственные векторы гамильтониана $H^0(\mathbf{k})$ из LDA-расчетов для 22 зон, соответствующих десяти 3d-орбиталям кобальта и двенадцати 3p-орбиталям серы в расчете на две формульные единицы BaCoS_2 , использовались для вычисления функций Ванье посредством процедуры проектирования [22]. Гамильтониан $H^0(\mathbf{k})$ малой размерности 22×22 записывался в базисе функций Ванье.

Следует отметить, что время расчета в рамках метода LDA + DMFT определяется температурой и числом базисных орбиталей, используемых при проектировании гамильтониана. Для уменьшения числа базисных орбиталей вводился базис из функций Ванье, определенных как Фурье-преобразование функций Блоха, представленных в нашем случае в виде разложения ограниченного числа линейаризованных маффин-тин-орбиталей. Первоначально функции Ванье для сульфида BaCoS_2 строились путем проектирования на энергетический интервал, включающий только десять зон 3d-состояния Co в расчете на две формульные единицы BaCoS_2 , поскольку прифермиевская область его электронного спектра (рис. 1) включала отдельную подполосу частично занятых электронами 3d-состояний Co. Однако функций Ванье, построенных в выбранном интервале энергий, оказалось недостаточно для корректного описания дисперсии валентной Co3d-подполосы сульфида. Поэтому при последующем проектировании гамильтониана в базисе функций Ванье набор базисных функций был расширен до 22, т.е. учитывались как сильно коррелированные 3d-орбитали кобальта, так и 3p-орбитали двух неэквивалентных атомов серы.

В основе схемы DMFT-расчетов лежит базовое положение Метцнера и Фолхарда [21] о том, что для бесконечно большого координационного числа рассматриваемой решетки собственно энергетическая часть Σ -электрона не зависит от импульса \mathbf{k} , а зависит от мнимых дискретных частот $i\omega$ и является локальной в прямом пространстве

$$\Sigma(\mathbf{k}, i\omega) = \Sigma(i\omega). \quad (1)$$

Приближение Метцнера и Фолхарда позволило существенно упростить решение многоузельной модели Хаббарда [24] до решения однопримесной модели Андерсона [25], реализованного в расчетных схемах DMFT-метода [26]. В результате самосогласования в DMFT-расчете функция Грина (ФГ) системы $G(\mathbf{k}, i\omega)$ в модели Хаббарда совпадает с ФГ однопримесной модели $G(\mathbf{k}, i\omega) = G_{\text{imp}}(i\omega_n)$ и определяется набором нечетных мацубаровских частот $\omega_n = (2n + 1)\pi/\beta$, где

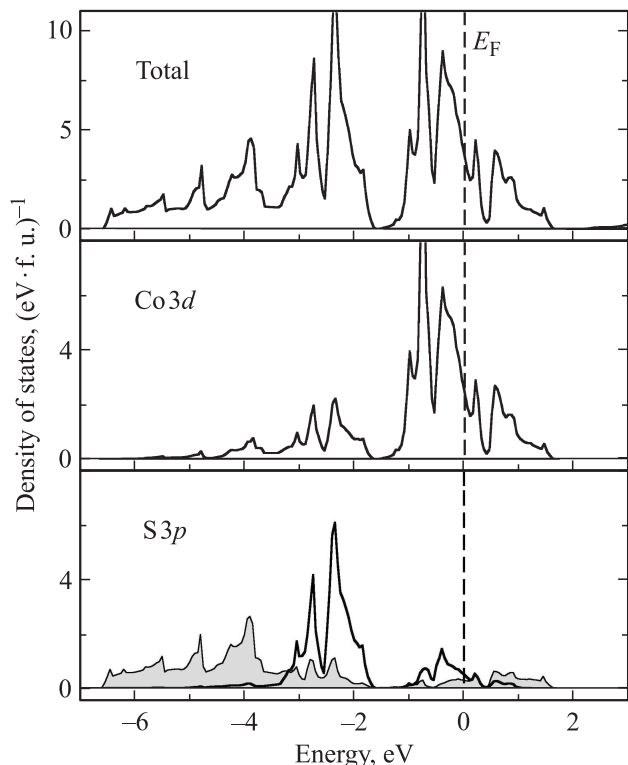


Рис. 1. Результаты LDA-расчета: полная и парциальные плотности состояний BaCoS_2 . Внизу сплошной линией и серым цветом показаны парциальные плотности $3p$ -состояний двух неэквивалентных атомов серы. Нуль на шкале энергии совмещен с уровнем Ферми.

β — обратная температура, $n = \pm 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, μ — химический потенциал,

$$G_{\text{imp}}(i\omega_n) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{i\omega_n + \mu - H^0(\mathbf{k}) - \Sigma_{\text{imp}}(i\omega_n)}. \quad (2)$$

Найденная ФГ примеси $G_{\text{imp}}(i\omega_n)$ для пробного значения собственно энергетической части электрона $\Sigma_{\text{imp}}(i\omega_n)$ использовалась для нахождения вспомогательной ФГ эффективной среды — G_0 (зоны проводимости в модели Андерсона) — с помощью уравнения Дайсона

$$G_0^{-1}(i\omega_n) = G_{\text{imp}}^{-1}(i\omega_n) + \Sigma_{\text{imp}}(i\omega_n). \quad (3)$$

Затем решалась однопримесная модель Андерсона с полученной ФГ эффективной среды $G_0(i\omega_n)$ в расчетной схеме квантового метода Монте-Карло с непрерывным временем (CT-QMC) [27] и вычислялось новое приближение для ФГ примеси $G_{\text{imp}}(i\omega_n)$. Найденные ФГ примеси и эффективной среды использовались для вычисления новой собственно энергетической части электрона $\Sigma_{\text{imp}}(i\omega_n)$, которую подставляли в уравнение (2), и процедура нахождения $\Sigma_{\text{imp}}(i\omega_n)$ проводилась до самосогласования.

В расчетной схеме LDA + DMFT использовались параметры одноузельного кулоновского (U) и обменного (J) взаимодействий для d -электронов Co: параметр

$U = 5 \text{ eV}$ взят из [28], параметр $J = 0.86 \text{ eV}$, следует из результата LSDA-расчета. Расчеты проводились для величин обратной температуры $\beta = 10, 20, 30 \text{ eV}^{-1}$, максимальная мацубаровская частота была ограничена значением $E_{\text{cut}} = 500 \text{ eV}$. В процессе самосогласования на каждой итерации проводилось 500 000 измерений. Спектральные функции $3d$ -состояний Co получены методом максимизации энтропии [29].

3. Результаты расчетов

Ранее нами были выполнены расчеты электронной структуры орторомбического сульфида BaCoS_2 в приближении LDA [16]. На рис. 1 приводятся полная и парциальные плотности состояний для BaCoS_2 , полученные в LDA-расчете. В электронном спектре сульфида BaCoS_2 можно выделить две валентные подполосы: полностью заполненную подполосу гибридных $S3p$ – $Co3d$ -состояний в диапазоне энергий от -6.5 до -1.6 eV и подполосу $Co3d$ -состояний, частично заселенную электронами в интервале энергий от -1.5 до $+1.6 \text{ eV}$ относительно уровня Ферми. Из результатов LDA-расчетов следует металлический характер электронного спектра BaCoS_2 с плотностью состояний на уровне Ферми $N(E_F) = 3.7 \text{ states/eV}$ на формульную единицу. Электронный спектр BaCoS_2 (рис. 1) аналогичен (по форме и ширине валентной полосы) электронному спектру, вычисленному в рамках расчетной схемы полнопотенциального метода линейаризованных присоединенных плоских волн (FLAPW) [13]. Металлический характер электронных спектров BaCoS_2 [13, 14, 16] позволил заключить, что орторомбическое искажение кристаллической решетки BaCoS_2 , которое учитывалось в наших расчетах [16] и не учитывалось в работах [13,14], не является причиной появления запрещенной щели (около 1 eV) в электронном спектре сульфида. Очевидно, что кулоновские взаимодействия на узлах $3d$ -Co в сульфиде BaCoS_2 , не учитывающиеся в явном виде в приведенных выше расчетах, существенно влияют на его электронный спектр. Подтверждением данного эффекта являются результаты наших предыдущих LDA + U-расчетов электронной структуры BaCoS_2 [16], учитывающих в явном виде корреляционные эффекты, где впервые получен полупроводниковый характер электронного спектра для рассматриваемого сульфида при нормальном давлении.

Использование метода теории статического среднего поля — метода LDA + U — недостаточно для изучения перехода изолятор–металл в парамагнитном BaCoS_2 под давлением. Поэтому нами было использовано приближение теории динамического среднего поля — метод LDA + DMFT [26].

Результаты расчетов в рамках LDA + DMFT-подхода спектральной функции $A(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G(\omega)$, мнимой части собственно энергетической части $\text{Im}\Sigma(i\omega_n)$, среднего значения локального магнитного момента

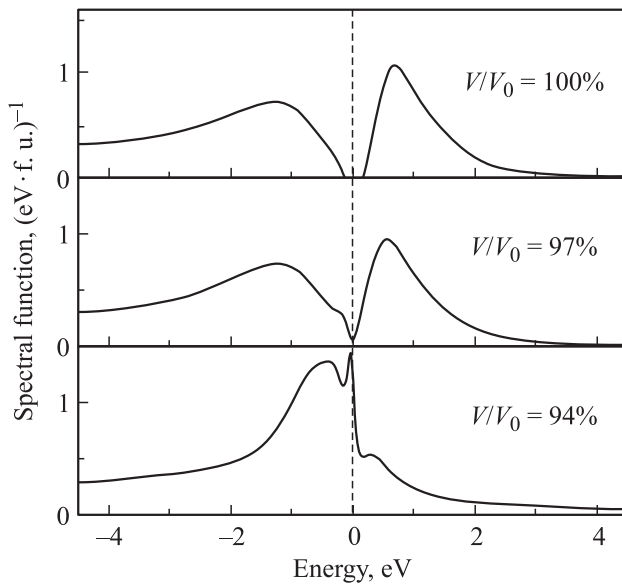


Рис. 2. Спектральные функции для $3d$ -состояний Co в зависимости от объема ячейки, полученные в LDA + DMFT-расчетах для BaCoS₂. Уровень Ферми соответствует 0 eV.

на ионах Co, $M = \sqrt{\langle \mu_z^2 \rangle}$ и суммарной заселенности $3d$ -орбиталей Co в зависимости от объема ячейки BaCoS₂ при температуре 370 K ($\beta = 30 \text{ eV}^{-1}$) — выше T_N — представлены на рис. 2–4. Из рис. 2 видно, что спектральная функция (аналог плотности состояний) для пяти $3d$ -состояний Co при исходном объеме ($V/V_0 = 100\%$) ячейки BaCoS₂ имеет запрещенную щель $\sim 0.3 \text{ eV}$. Эта величина близка к результату нашего LDA + U-расчета [16] (0.47 eV) и имеет меньшее значение за счет температурного размытия спектра. При уменьшении объема ячейки до 97% от экспериментального объема запрещенная щель „схлопывается“, наблюдается небольшой провал электронной плотности $3d$ -состояний Co. Такое изменение спектральной функции свидетельствует о начале перехода изолятор–металл. Наконец, для состава с объемом $V/V_0 = 94\%$ вид спектральной функции для d -орбиталей Co соответствует электронному спектру металла с существенным вкладом $3d$ -состояний Co на уровне Ферми.

Наряду со спектральными функциями d -орбиталей Co критерием оценки критического объема, при котором наблюдается переход изолятор–металл, является вид зависимости мнимой части собственно энергетической части от мацубаровских частот $\text{Im}\Sigma(i\omega_n)$ для $3d$ -орбиталей Co. В расчете на формульную единицу BaCoS₂ пять „ветвей“ функции $\text{Im}\Sigma(i\omega_n)$ соответствуют пять $3d$ -орбиталей Co. Как известно из модельных расчетов (см., например, рис. 6 в [30]), имеется соответствие между характером энергетического спектра и видом зависимости $\text{Im}\Sigma(i\omega_n)$. При $\left. \frac{\partial \text{Im}\Sigma(i\omega_n)}{\partial (i\omega_n)} \right|_{i\omega_n \rightarrow 0} < 0$ и наличии минимума $\text{Im}\Sigma(i\omega_n)$ при некотором значении $i\omega_n$, не

близком к нулю, соответствующая спектральная функция имеет металлический характер (ненулевое значение на уровне Ферми). При $\text{Im}\Sigma(i\omega_n)$, возрастающей на всем интервале $i\omega_n$, спектральная функция соответствует изолятору. Из рис. 3 видно, что при объеме ячейки $V/V_0 = 100\%$ поведение мнимой части собственно энергетической части $\text{Im}\Sigma(i\omega_n)$ по крайней мере для четырех d -орбиталей Co соответствует характерному для изолятора электронному спектру. Следует отметить, что подобные функциональные зависимости $\text{Im}\Sigma(i\omega_n)$ получены в результате расчетов и для более высоких температур (550 и 1100 K). Различия функций $\text{Im}\Sigma(i\omega_n)$ для объемов ячейки $V/V_0 = 97$ и 100% невелики и наблюдаются в окрестности $i\omega_n \sim 0.3$, $\text{Im}\Sigma(i\omega_n) \sim -2$. Вид зависимости мнимой части собственно энергетической части от мацубаровских частот при уменьшении объема элементарной ячейки до $V/V_0 = 94\%$ для всех d -орбиталей Co соответствует металлическому типу проводимости.

Среднее значение локального магнитного момента на ионах Co $M = \sqrt{\langle \mu_z^2 \rangle}$ и суммарная заселенность $3d$ -орбиталей Co (рис. 4) меняются незначительно при уменьшении объема ячейки BaCoS₂ до $V/V_0 = 97\%$ и резко при уменьшении объема ячейки до $V/V_0 = 94\%$. Так, из анализа результатов расчета усредненного локального парамагнитного момента на $3d$ -орбиталях ионов Co (рис. 4) следует вывод о переходе ионов кобальта из ВС-конфигурации с магнитным моментом M , равным $2.66 \mu_B$ для состава с $V/V_0 = 100\%$, в HS-состояние с $M = 1.57 \mu_B$ для состава с $V/V_0 = 94\%$.

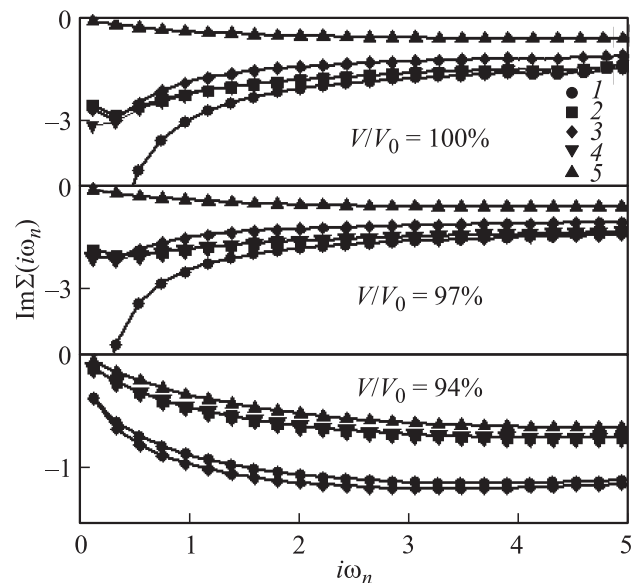


Рис. 3. Мнимая часть собственно энергетической части $\text{Im}\Sigma(i\omega_n)$ для d -орбиталей Co в зависимости от объема ячейки BaCoS₂, полученная в LDA + DMFT-расчетах. Кривые 1, 2, 4 и 3, 5 соответствуют аналогам кубических t_{2g} - и e_g -состояний Co.

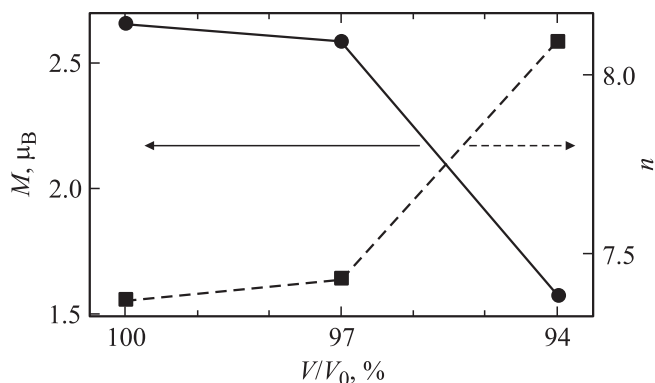


Рис. 4. Зависимости среднего значения локального магнитного момента M и суммарной заселенности n d -орбиталей Co от объема BaCoS_2 , полученные на основе LDA + DMFT-расчетов.

Полученные расчетные данные позволяют заключить, что начало перехода изолятор–металл в парамагнитном BaCoS_2 наблюдается при небольшом уменьшении объема ячейки до $V/V_0 = 97\%$. Рассчитанный в сложном сульфиде кобальта переход при температуре 370 К хорошо коррелирует с экспериментальной T – p -диаграммой [10], где переход изолятор–металл обнаружен при давлении $p \sim 12$ kbar. Кроме того, происходит изменение спинового состояния ионов Co^{2+} . Данный факт подтверждается экспериментальной работой [11], авторами которой было зафиксировано уменьшение магнитного момента в АФМ BaCoS_2 с увеличением давления: $\mu = 2.9 \mu_B$ при $p = 0$, $\mu = 2.7 \mu_B$ при $p = 14$ kbar и $\mu = 1.4 \mu_B$ при $p = 15$ kbar. Можно предположить, что тенденция изменения магнитного момента при воздействии гидростатического давления в парамагнитном сульфиде сохраняется. Другим экспериментальным фактом, косвенно подтверждающим, что переход изолятор–металл сопровождается переходом ионов Co^{2+} из ВС- в НС-состояние в BaCoS_2 , является наличие подобного перехода в системе $\text{BaCo}_{0.9}\text{Ni}_{0.1}\text{S}_{1.87}$ при давлении ~ 10 kbar [7].

4. Заключение

На основе современного LDA + DMFT-подхода, учитывающего динамику кулоновских взаимодействий, изучен переход изолятор–металл под давлением в парамагнитном сульфиде BaCoS_2 при температуре 370 К. Данный переход происходит при небольшом уменьшении объема ячейки BaCoS_2 ($V/V_0 = 97\%$) и сопровождается магнитным переходом иона Co из высокоспинового в низкоспиновое состояние, что хорошо коррелирует с экспериментальными данными.

Список литературы

[1] L.S. Martinson, J.W. Schweitzer, N.C. Baenziger. Phys. Rev. B **54**, 11 265 (1996).

- [2] I.E. Grey, H. Steinfink. J. Am. Chem. Soc. **92**, 5093 (1970).
 [3] K. Takenaka, S. Kashima, A. Osuka, S. Sugai, Y. Yasui, S. Shamoto, M. Sato. Phys. Rev. B **63**, 115 113 (2001).
 [4] B. Fisher, J. Genossar, L. Patlagan, G.M. Reisner, A. Knizhnik. Phys. Rev. B **59**, 8745 (1999).
 [5] D. Mandrus, J.L. Sarro, B.C. Chakoumakos, J.A. Fernandez-Baca, S.E. Nagle, B.C. Sales. J. Appl. Phys. **81**, 4620 (1997).
 [6] G.J. Snyder, M.C. Gelabert, F.J. DiSalvo. J. Solid State Chem. **113**, 355 (1994).
 [7] J.-S. Zhou, W.J. Zhu, J.B. Goodenough, J. Phys.: Cond. Matter **14**, 10 699 (2002).
 [8] H. Kang, I.V. Medvedeva, K. Bärner, U. Sondermann. Physica B **245**, 20 (1998).
 [9] C. Looney, J.S. Schilling, L.S. Martinson, J.W. Schweitzer. Phys. Rev. Lett. **76**, 4789 (1996).
 [10] Y. Yasui, H. Sasaki, S. Shamoto, M. Sato. J. Phys. Soc. Jpn. **66**, 3194 (1997).
 [11] H. Sasaki, H. Harashina, K. Kodama, S. Shamoto, M. Sato, K. Kakurai, M. Nishi. J. Phys. Soc. Jpn. **66**, 3975 (1997).
 [12] L.F. Mattheiss. Solid State Commun. **93**, 879 (1995).
 [13] I. Hase, N. Shirakawa, Y. Nishihara. J. Phys. Soc. Jpn. **64**, 2533 (1995).
 [14] S.R. Krishnakumar, T. Saha-Dasgupta, N. Shanthi, P. Mahadevan, D.D. Sarma. Phys. Rev. B **63**, 045 111 (2001).
 [15] V.I. Anisimov, F. Aryasetiawan, A.I. Lichtenstein. J. Phys.: Cond. Matter **9**, 767 (1997).
 [16] В.М. Зайнуллина, М.А. Коротин. ФТТ **53**, 978 (2011).
 [17] J.W. Schweitzer. Phys. Rev. B **73**, 104 426 (2006).
 [18] K. Kodama, S. Shamoto, H. Harashina, J. Takeda, M. Sato, K. Kakurai, M. Nishi. J. Phys. Soc. Jpn. **65**, 1782 (1996).
 [19] V.I. Anisimov, A.I. Poteryaev, M.A. Korotin, A.O. Anokhin, G. Kotliar. J. Phys.: Cond. Matter **9**, 7359 (1997).
 [20] W. Kohn, L.J. Sham. Phys. Rev. **140**, A1133 (1965).
 [21] W. Metzner, D. Vollhardt. Phys. Rev. Lett. **62**, 324 (1989).
 [22] V.A. 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, D. Vollhardt. Phys. Rev. B **71**, 125 119 (2005).
 [23] O.K. Andersen, Z. Pawłowska, O. Jepsen. Phys. Rev. B **34**, 5253 (1986).
 [24] J. Hubbard. Proc. R. Soc. (London) A **276**, 235 (1963).
 [25] P.W. Anderson. Phys. Rev. **115**, 2 (1959).
 [26] Ю.А. Изюмов, В.И. Анисимов. Электронная структура с сильными корреляциями. НИЦ „Регулярная и хаотическая динамика“, М.–Ижевск (2009). 376 с.
 [27] P. Werner, A. Comanac, L. de’ Medici, M. Troyer, A.J. Millis. Phys. Rev. Lett. **97**, 076 405 (2006).
 [28] W.E. Pickett, S.C. Erwin, E.C. Ethridge. Phys. Rev. B **58**, 1201 (1998).
 [29] M. Jarrell, J.E. Gubernatis. Phys. Rep. **269**, 133 (1996).
 [30] R. Nulla, T.A. Costi, D. Vollhardt. Phys. Rev. B **64**, 045 103 (2001).