

АНОМАЛИИ КОНА ИМПУЛЬСНОЙ ЗАВИСИМОСТИ ВОСПРИИМЧИВОСТИ НЕКОТОРЫХ ТРЕХМЕРНЫХ СИСТЕМ

А. А. Степаненко^а, Д. О. Волкова^а, П. А. Игошев^{б,а}, А. А. Катанин^{б,а*}

^а Уральский федеральный университет
620002, Екатеринбург, Россия

^б Институт физики металлов им. М. Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук
620990, Екатеринбург, Россия

Поступила в редакцию 26 мая 2017 г.

Рассмотрен вопрос о наличии в электронном спектре трехмерных систем точек Кона, приводящих к неаналитической зависимости магнитной восприимчивости от импульса вблизи ее максимума. Проанализирована однозонная модель на гранецентрированной кубической решетке с перескоком между ближайшими и следующими за ближайшими соседями, моделирующая некоторые черты дисперсии $ZrZn_2$, а также двухзонная модель на объемноцентрированной кубической решетке, моделирующая некоторые черты зонной структуры хрома. Показано, что в первой модели исследуемые точки Кона возникают в определенном (достаточно широком) диапазоне концентрации электронов и определена соответствующая зависимость волновых векторов, на которых достигается локальный максимум восприимчивости, от химического потенциала. Для двухзонной модели показано существование линий точек Кона, приводящих к максимуму восприимчивости, согласующемуся с результатами зонных расчетов и экспериментальными данными для вектора антиферромагнетизма хрома.

DOI: 10.7868/S0044451017110189

1. ВВЕДЕНИЕ

Особенности электронного спектра оказывают сильное влияние на физические свойства сильнокоррелированных веществ. В частности, пики плотности состояний (обусловленные, например, сингулярностями ван Хофа) приводят к ферромагнетизму, а нестинг участков поверхности Ферми — к тенденции образования волн спиновой плотности. В то время как «идеальный» нестинг реализуется достаточно редко (особенно в реальных магнитных веществах), волны спиновой плотности могут быть обусловлены «локальным» нестингом, проявляющимся вблизи определенных точек поверхности Ферми — точек Кона, соединенных волновым вектором антиферромагнетизма \mathbf{Q} и имеющих противоположные скорости Ферми.

Исследование влияния «локального» нестинга берет свое начало с работы В. Кона [1], который показал, что восприимчивость систем со сферической поверхностью Ферми радиуса k_F неаналитически

зависит от импульса вблизи волнового вектора длины $Q = 2k_F$, соединяющего точки на противоположных сторонах поверхности Ферми и имеющих также противоположные скорости (так называемые точки Кона). В общем случае эта неаналитическая особенность является довольно слабой, приводя, однако, к ряду важных явлений, таких как аномалии частот фононов, возможности сверхпроводимости Кона – Латтинжера [2] и т. д.

Наибольшее влияние особенностей Кона восприимчивости на магнитные свойства можно ожидать в случае, когда волновой вектор \mathbf{Q} , соединяющий точки Кона, соответствует глобальному (неаналитическому) максимуму восприимчивости, так что \mathbf{Q} является также вектором волны спиновой или зарядовой плотности. В то время как глобальность того или иного максимума восприимчивости определяется всей электронной структурой и может быть, как правило, установлена лишь численно или экспериментально, наличие локального максимума следует из локальной геометрии поверхности Ферми вблизи точек Кона. В частности, Рот с соавторами [3], а также Райс [4] установили, что в однозонной модели восприимчивость имеет локаль-

* E-mail: katanin@mail.ru

ный максимум на волновом векторе \mathbf{Q} , если поверхность Ферми вблизи каждой из точек Кона, отстоящих на вектор \mathbf{Q} , имеет противоположную кривизну в двух взаимно перпендикулярных направлениях, либо кривизна в одном из направлений равна нулю. Последнее условие, в частности, выполняется для двумерных поверхностей Ферми, что было явно продемонстрировано Штерном [5] для сферической поверхности Ферми; позже Холдер и Мецнер [6, 7] рассмотрели влияние точек Кона для произвольных двумерных ферми-поверхностей, в частности исследовали особенности спиновой или зарядовой восприимчивости, а также собственной энергии электронов.

Хотя при конечных температурах T неаналитическое поведение восприимчивости, обусловленное точками Кона, имеет место лишь на импульсах $|\mathbf{q} - \mathbf{Q}| \gtrsim T/v_F$ (v_F — скорость Ферми в точках Кона), оно оказывается особенно важным в окрестности квантовых фазовых переходов, в которой $T \rightarrow 0$. Недавно Шэфер и др. [8] исследовали влияние особенностей Кона на квантовое критическое поведение и показали, что соответствующие критические индексы могут сильно отличаться от предсказаний теории Герца–Мории–Миллиса из-за наличия особенностей Кона. В указанной работе, однако, была исследована только простая кубическая решетка с перескоком между ближайшими соседями, в которой имеются линии точек Кона.

В зависимости от вида импульсной зависимости восприимчивости можно выделить два различных случая, в которых ожидается существенное влияние точек Кона вблизи квантовых фазовых переходов. В первом случае вектор волны спиновой плотности мал и имеет место конкуренция ферромагнетизма и волны спиновой плотности. Эта ситуация, возможно, реализуется в окрестности квантового фазового перехода в ZrZn_2 [9–12], в которой наблюдается резкая смена критического индекса сопротивления под давлением [13]. В противоположном случае немалого вектора волны спиновой плотности (как, например, в хrome [14]), возможно постепенное подавление температуры возникновения несоизмеримого порядка внешними факторами, например, давлением [15] или допированием [16–18].

Целью данной работы является рассмотрение электронных систем в различных трехмерных решетках, приводящих к особенностям Кона и моделирующих два описанных выше типа импульсной зависимости восприимчивости. В частности, рассмотрение гранецентрированной кубической (ГЦК) решетки с перескоком между ближайшими и следу-

ющими за ближайшими соседями (разд. 2 статьи) позволяет описать как ситуацию с малым волновым вектором (обусловленным вкладом точек Кона), так и ее постепенную эволюцию к вектору волны спиновой плотности, существенно отличному от нуля. Хотя эволюция волнового вектора несоизмеримого порядка с изменением концентрации электронов в ГЦК-решетке исследовалась ранее [19, 20], связь полученных волновых векторов с геометрией поверхности Ферми, а также влияние точек Кона на восприимчивость не рассматривалось. Для моделирования поверхностей Ферми хрома рассмотрена также двухзонная дисперсия на объемноцентрированной кубической (ОЦК) решетке (см. разд. 3 статьи). Для каждого из указанных случаев найдены точки Кона и определен их вклад в статическую магнитную восприимчивость.

2. ОДНОЗОННАЯ МОДЕЛЬ

2.1. Формулировка модели поверхности Ферми и восприимчивость

Рассмотрим гамильтониан модели Хаббарда

$$\hat{H} = - \sum_{i,j,\sigma} t_{i,j} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow}, \quad (1)$$

где $\hat{c}_{i\sigma}^\dagger$ ($\hat{c}_{i\sigma}$) — ферми-операторы рождения (уничтожения) электрона на узле i с проекцией спина $\sigma = \uparrow, \downarrow$, $\hat{n}_{i\sigma} = \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma}$ — оператор числа электронов на узле, $t_{i,j}$ — параметры перескока, U характеризует отталкивание электронов на узле и определяет силу электронных корреляций. Для вычисления магнитной восприимчивости используем обобщенное приближение случайных фаз (ПСФ), см., например, [21]:

$$\chi_{\mathbf{q}} = \frac{\chi_{\mathbf{q}}^0}{1 - U_{eff} \chi_{\mathbf{q}}^0}, \quad (2)$$

где

$$\chi_{\mathbf{q}}^0 = - \sum_{\mathbf{k}} \frac{f_{\mathbf{k}} - f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} \quad (3)$$

— восприимчивость системы невзаимодействующих электронов,

$$E_{\mathbf{k}} = \sum_{\delta} t_{i,i+\delta} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{\delta})$$

— дисперсия, $f_{\mathbf{k}} \equiv f(E_{\mathbf{k}})$ — функция Ферми, \mathbf{q} — волновой вектор, \mathbf{k} — электронный квазиимпульс, U_{eff} — величина эффективного межэлектронного взаимодействия в частично-дырочном спиновом канале. Указанное приближение (с некото-

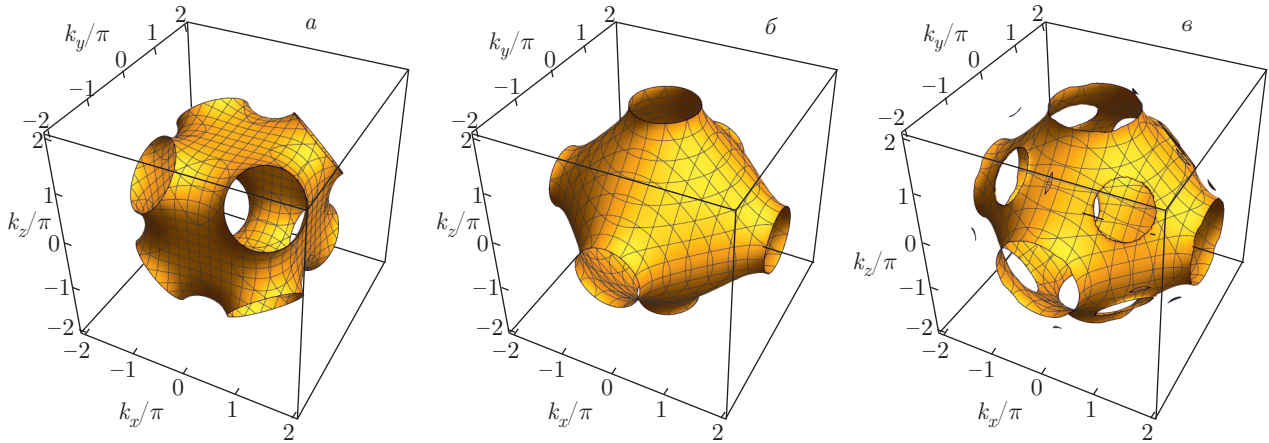


Рис. 1. Поверхности Ферми ГЦК-решетки с учетом перескока между ближайшими и следующими за ближайшими соседями: а — $t' = 0.3t$, $\mu = 1.0t$; б — $t' = -0.45t$, $\mu = 2.4t$; в — $t' = -0.45t$, $\mu = 2.8t$

рым параметром $U_{eff} < U$) качественно применимо для рассматриваемых трехмерных систем в силу достаточно слабой импульсной зависимости собственной энергии и вершин взаимодействия электронов, неприводимых в частично-дырочном канале [21]. Величина U_{eff} , которая может быть определена, например, из правил сумм, не играет существенной роли для дальнейшего рассмотрения; предполагается лишь, что она достаточна для образования (слабо) магнитно-упорядоченного состояния, т. е. $U_{eff}\chi_{\mathbf{Q}}^0 \approx 1$. Применимость качественных результатов ПСФ для исследования особенностей Кона в сильнокоррелированных трехмерных системах была показана, например, в работе [8].

Ниже мы рассмотрим ГЦК-решетку с перескоками между ближайшими соседями t и следующими за ближайшими соседями $-t'$, соответствующими дисперсии

$$E_{\mathbf{k}} = -4t \left(\cos \frac{k_x}{2} \cos \frac{k_y}{2} + \cos \frac{k_x}{2} \cos \frac{k_z}{2} + \cos \frac{k_y}{2} \times \right. \\ \left. \times \cos \frac{k_z}{2} \right) + 2t' (\cos k_x + \cos k_y + \cos k_z) - \mu, \quad (4)$$

где μ — химический потенциал, постоянная решетки положена равной единице. В зависимости от значений t'/t и μ/t поверхность Ферми может быть либо связной (для μ не слишком близких к верхнему краю зоны), либо состоять из нескольких несвязных частей. Мы рассматриваем первый случай как наиболее физически интересный, примеры поверхности Ферми для некоторых значений t'/t , μ/t приведены на рис. 1.

Импульсные зависимости затравочных восприимчивостей $\chi_{\mathbf{Q}}^0$, определенные численно из уравнения (3) для некоторых значений параметров t'/t и μ

при температуре $T = 0$, показаны на рис. 2, 3. Можно видеть, что указанные восприимчивости обладают неаналитическими зависимостями вблизи максимумов и точек перегиба, связь которых с точками Кона обсуждается в следующих подразделах.

2.2. Вклад точек Кона в неоднородную восприимчивость

В общем случае точки Кона \mathbf{K} и $\mathbf{K} + \mathbf{Q}$, приводящие к неаналитической зависимости восприимчивости от импульса, могут быть определены как точки поверхности Ферми ($E_{\mathbf{K}} = E_{\mathbf{K} + \mathbf{Q}} = 0$), имеющие противоположные скорости Ферми. Как показали Рот с соавторами [3] и Райс [4], при некоторых условиях на кривизну поверхности Ферми магнитная восприимчивость может иметь неаналитический максимум на волновом векторе, соединяющем две точки Кона. Для того чтобы сформулировать эти условия, рассмотрим разложение дисперсии вблизи соответствующих точек, представляя $\mathbf{k} = \mathbf{K} + \mathbf{k}_1$. Вводя локальную в импульсном пространстве систему координат $\mathbf{k}_1 = (k'_x, k'_y, k'_z)$, повернутую таким образом, чтобы ось k'_z была направлена вдоль скорости Ферми $\mathbf{v}_{\mathbf{K}} = (\nabla E_{\mathbf{k}})_{\mathbf{k}=\mathbf{K}}$, а оси $k'_{x,y}$ повернуты вокруг новой оси k'_z так, чтобы $\partial^2 E_{\mathbf{k}} / (\partial k'_x \partial k'_y) = 0$, можно привести дисперсию к виду [3, 4]

$$E_{\mathbf{K} + \mathbf{k}_1} \approx vk'_z + \frac{(k'_x)^2}{2m_x} + \frac{(k'_y)^2}{2m_y}, \quad (5) \\ E_{\mathbf{K} + \mathbf{Q} + \mathbf{k}_1} \approx -vk'_z + \frac{(k'_x)^2}{2m_x} + \frac{(k'_y)^2}{2m_y},$$

где $v = |\mathbf{v}_{\mathbf{K}}|$ и мы подразумеваем, что точки Кона связаны некоторыми операциями симметрии кри-

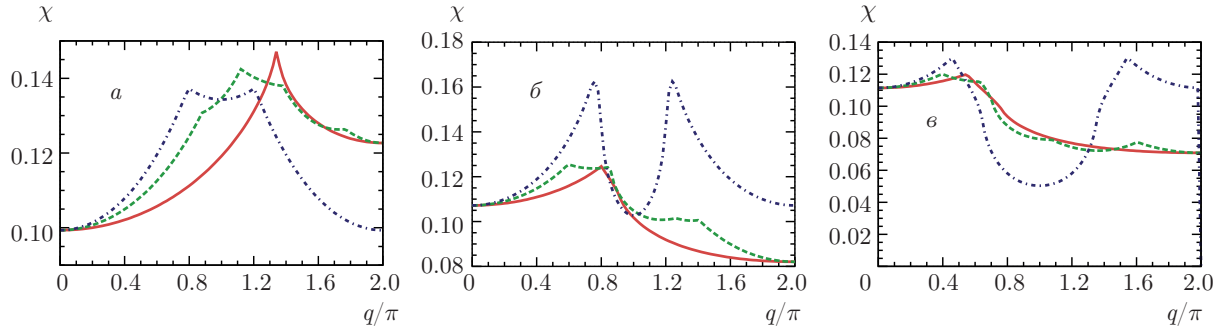


Рис. 2. Импульсные зависимости магнитной восприимчивости $\chi_{\mathbf{q}}^0$ не взаимодействующих электронов при $T = 0$ на ГЦК-решетке ($t' = 0.3t$) вдоль симметричных направлений: штрихпунктир — направление (q, q, q) ; пунктир — направление $(0, q, q)$; сплошные линии — направление $(0, 0, q)$ при различных значениях химических потенциалов: $a - \mu = 0.8t$; $b - \mu = 3.3t$; $v - \mu = 4t$

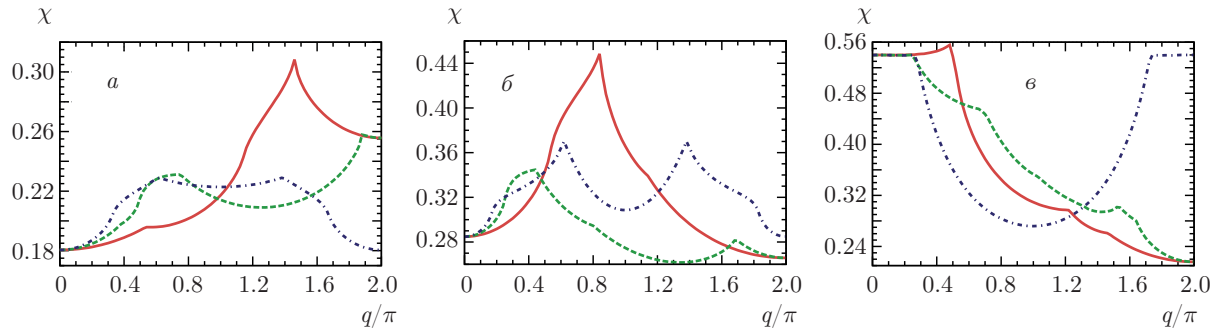


Рис. 3. То же, что и на рис. 2 при $t' = -0.45$ и химических потенциалах $a - \mu = 1.6t$; $b - \mu = 2.4t$; $v - \mu = 2.8t$

таллической решетки, так что массы $m_{x,y}$ одинаковы в первой и второй строке (5). Согласно результатам работ [3, 4], магнитная восприимчивость будет иметь (локальный) максимум на волновом векторе \mathbf{Q} при выполнении одного из следующих условий: $m_x^{-1}m_y^{-1} < 0$ (так называемые гиперболические точки Кона) или $m_x^{-1}m_y^{-1} = 0$ (цилиндрические точки Кона). При этом физически наиболее интересны точки Кона, отстоящие друг от друга на волновом векторе, направленный вдоль одного из симметричных направлений (поскольку лишь указанные направления могут обеспечить глобальный максимум восприимчивости).

В случае гиперболических точек Кона импульсная зависимость магнитной восприимчивости вблизи максимума имеет при $T = 0$ вид [4]

$$\chi_{\mathbf{q}+\mathbf{Q}}^0 = \chi_{\mathbf{Q}}^0 - \frac{\sqrt{|m_x m_y|}}{16\pi} |q_z|, \quad (6)$$

где q_z — проекция вектора \mathbf{q} на ось k'_z .

Рассмотрим, например, разложение дисперсии ГЦК-решетки вблизи точек Кона, расположенных симметрично относительно точки $X = (0, 0, 2\pi)$

и характеризующихся различными направлениями вектора волны спиновой плотности \mathbf{Q} . При этом поверхность Ферми может быть либо полностью «замкнута» вокруг точки $\Gamma = 0$, см. рис. 1a (точка X лежит за пределами поверхности Ферми и $E_X > 0$), либо иметь «окно» вблизи точки X (см. рис. 1б,в, $E_X < 0$). В обоих случаях мы предполагаем, что точки $\{\mathbf{K}, \mathbf{K} + \mathbf{Q}\} = X \pm \mathbf{Q}/2$ принадлежат поверхности Ферми. Для простоты, ниже мы ограничимся случаем $|t'| < t/2$. Ниже рассмотрены различные варианты симметричных векторов \mathbf{Q} , соединяющих точки Кона вблизи точки X .

1) Для направления $\mathbf{Q} = (Q_{1X}, Q_{1X}, Q_{1X})$ условие $E_{\mathbf{K}} = E_{\mathbf{K}+\mathbf{Q}} = 0$ фиксирует величину

$$Q_{1X} = 2 \arccos [(-2t + \mu)/(2(t + 3t'))].$$

Разложение дисперсии вблизи точек Кона дает

$$v = \sqrt{(6t' + \mu)(4t + 6t' - \mu)(t^2 + 2tt' + 3t'^2)/(t + 3t')}, \quad (7)$$

$$m_x^{-1} = -\frac{4t^3 + t^2(10t' - \mu) + 4t'^2\mu + tt'(10t' + \mu)}{4(t^2 + 2tt' + 3t'^2)},$$

$$m_y^{-1} = -\frac{(t + 4t')\mu - 2t(2t + 7t')}{4(t + 3t')}.$$

Из условия существования точек Кона и наличия максимума восприимчивости (обратные массы должны быть разного знака), получим следующее неравенство для значений μ и t' :

$$\mu < \min \left[\frac{t(4t^2 + 10tt' + 10t'^2)}{t^2 - tt' - 4t'^2}, \frac{t(4t + 14t')}{t + 4t'} \right]. \quad (8)$$

Результат (8) вместе с ограничением на значение химического потенциала в пределах зоны $\mu > \min(E_X, E_L)$, где $E_X = 4t + 6t'$, $E_L = -6t' -$ значения дисперсии электронов (при $\mu = 0$) в точках X и L , изображен графически на рис. 4а. В рассмотренной области t' (за исключением $t' \approx -t/3$) существует достаточно широкая область химических потенциалов μ , в которой точки Кона дают доминирующий вклад в импульсную зависимость восприимчивости.

2) Для направления $\mathbf{Q} = (0, Q_{2X}, Q_{2X})$ имеем

$$Q_{2X} = 2 \arccos[(-2t - 2t' + \mu)/(2(t + 2t'))],$$

$$v = \sqrt{\frac{(-4t - 6t' + \mu)(4t^2 + t\mu + 2(t + \mu)t' + 2t'^2)}{2t + 4t'}}, \quad (9)$$

$$m_x^{-1} = -2t',$$

$$m_y^{-1} = \frac{4t^3 + 6t^2t' + 4t'^3 - t^2\mu - \mu^2t'}{4t^2 + t(2t' + \mu) + 2t'(2t' + \mu)}.$$

Из условия существования точек Кона и наличия аномалии — обратные массы должны быть разного знака, получим следующие неравенства для значений μ и t' при $0 < t'/t < 1/2$:

$$-\frac{2(2t^2 + tt' + 2t'^2)}{t + 2t'} < \mu < \frac{-t^2 + \sqrt{t^4 + 16t^3t' + 24t^2t'^2 + 16t'^4}}{2t'}. \quad (10)$$

Однако аномалии Кона могут возникать в случае одинаковых знаков обратных масс при выполнении условия $|m_x| \gg |m_y|$ или $|m_x| \ll |m_y|$. Области значений t' и μ , удовлетворяющие этим условиям, показаны на рис. 4б.

3) Для направления $(0, 0, Q_{3X})$ допустимые значения

$$Q_{3X} = 2 \arccos[(-2t \pm \sqrt{4t^2 + (4t + \mu)t' - 2t'^2})/(2t')].$$

В силу симметрии имеем $m_x = m_y$ и, таким образом, в общем случае указанное направление не приводит к точкам Кона, обеспечивающим максимум восприимчивости. Однако соответствующая масса

$$m_x^{-1} = \frac{2(t^2 + tt' - 2t'^2) \mp t\sqrt{4t^2 + t'(4t - 2t' + \mu)}}{4t'} \quad (11)$$

может исчезать при некоторых значениях μ, t' , обеспечивая таким образом максимум восприимчивости.

4) Для направления $(Q_{4X}, 0, 0)$ имеем $Q_{4X} = 2 \arccos[(-4t - 4t' + \mu)/(2t')]$,

$$v = \sqrt{(4t + 6t' - \mu)(-4t - 2t' + \mu)},$$

$$m_{x,y}^{-1} = -t - 2t' \mp t\sqrt{\frac{-4t - 2t' + \mu}{4t'}}. \quad (12)$$

Соответствующие области существования аномалий Кона восприимчивости показаны на рис. 4в.

Аналогично можно рассмотреть точки Кона, расположенные симметрично относительно точки L : для волновых векторов $(Q_{1L}, Q_{1L}, Q_{1L}), (Q_{2L}, Q_{2L}, 0), (Q_{3L}, 0, 0)$ имеем соответственно

$$Q_{1L} = 2 \arccos\left(\frac{6t + \mu}{6t - 6t'}\right),$$

$$Q_{2L} = 2 \arccos\left(\frac{2t + 2t' + \mu}{2t - 4t'}\right),$$

$$Q_{3L} = 2 \arccos\left(\frac{-4t' - \mu}{2t'}\right),$$

массы $m_{x,y}$ всегда одного знака; для волнового вектора $(Q_{4L}, -Q_{4L}, 0)$ имеем

$$Q_{4L} = 2 \arccos\left(\frac{2t - 2t' - \mu}{2t + 4t'}\right),$$

соответствующие условия противоположности масс изображены графически на рис. 4г.

Для точек Кона, симметричных относительно точки W и соединенных волновым вектором $(Q_{1W}, 0, 0)$, находим

$$Q_{1W} = 2 \arccos\left(\frac{4t + 4t' - \mu}{2t'}\right).$$

В этом случае массы в точке $(\pi - Q_{1W}/2, 0, 2\pi)$ получаются такими же, как определенные выше уравнением (12) для точек, симметричных относительно точки X и характеризующихся вектором $(Q_{4X}, 0, 0)$, и меняются местами в точке $(\pi + Q_{1W}/2, 0, 2\pi)$.

Из полученных результатов следует, что для $t' > 0$ точки Кона дают неаналитический вклад в восприимчивость в широком диапазоне $-2t \lesssim \mu \lesssim 4t$, а при $t' < 0$ в диапазоне $t \lesssim \mu \lesssim 3t$. Конкретные диапазоны химических потенциалов и концентраций при $t' = 0.3t$ и $t' = -0.45t$ приведены в табл. 1.

2.3. Связь точек Кона с импульсными зависимостями восприимчивости и их влияние на квантовые фазовые переходы

Анализ предыдущего подраздела позволяет идентифицировать пики восприимчивости, найденные численно в разд. 2.1 с вкладами различных

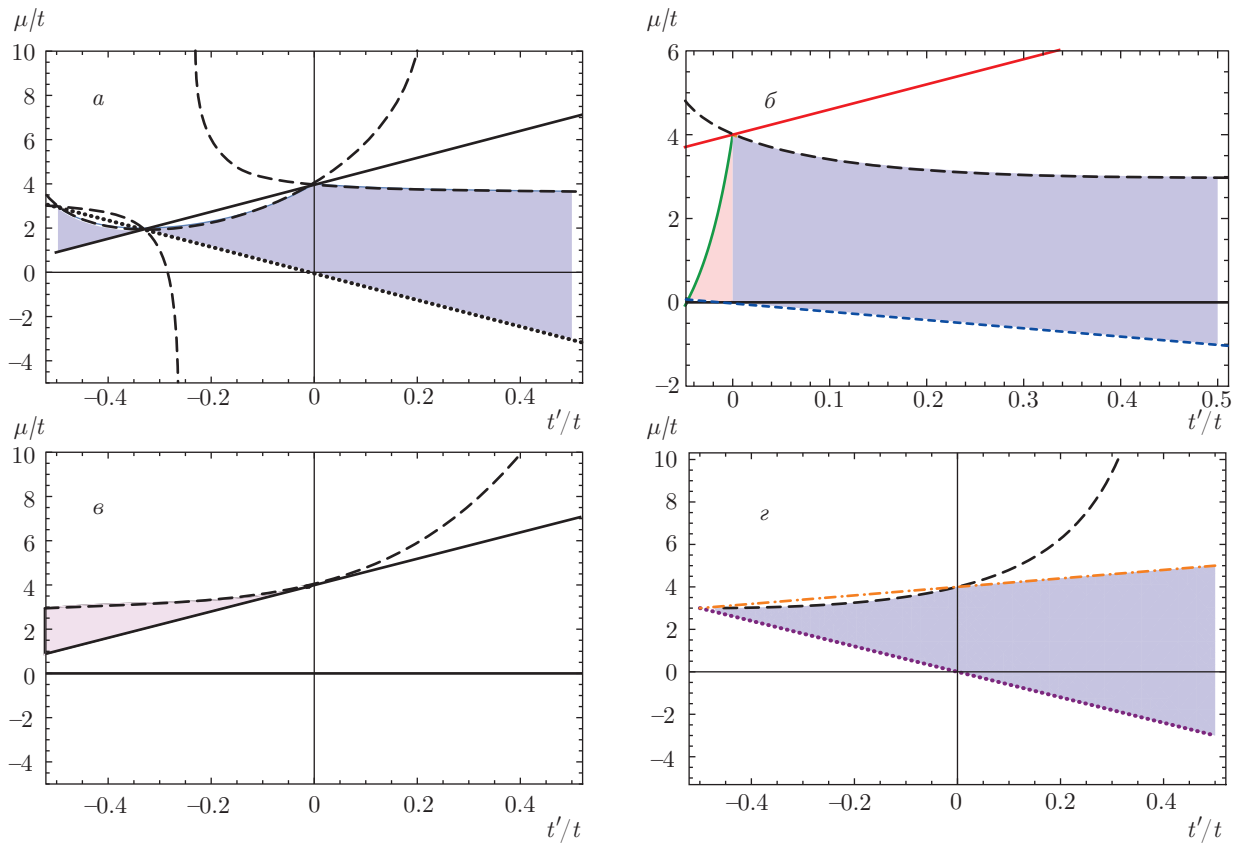


Рис. 4. (В цвете онлайн) Условия, при которых возникают аномалии Кона импульсной зависимости восприимчивости (заштрихованные области) вдоль симметричных направлений (Q_{1X}, Q_{1X}, Q_{1X}) (а), $(0, Q_{2X}, Q_{2X})$ (б), $(Q_{4X}, 0, 0)$ (в), соединяющих точки поверхности Ферми в окрестности точки X , и направления $(Q_{4L}, -Q_{4L}, 0)$ (г) в окрестности точки L для различных t' и μ . Сплошная линия соответствует пересечению поверхностью Ферми точки X ($E_X = 0$), штрихпунктир — точки W ($E_W = 0$), пунктир — L ($E_L = 0$), штриховые линии определены из условий исчезновения одной из обратных масс $m_{x,y}^{-1} = 0$, тонкая сплошная линия на рис. б определена из условия превышения одной массы другой в 10 раз, линия с короткими штрихами $\mu = -2t'$ ограничивает область существования вектора $(0, Q_{2X}, Q_{2X})$

Таблица 1. Диапазоны химических потенциалов и концентраций, при которых ожидаются локальные максимумы восприимчивости в симметричных направлениях, обусловленные точками Кона при $t' = 0.3t$ и $t' = -0.45t$. Значения, отмеченные двумя звездочками, соответствуют близости обеих масс $m_{x,y}$ к нулю

	$t' = 0.3t$		$t' = -0.45t$	
(Q_{1X}, Q_{1X}, Q_{1X})	$-1.8t < \mu < 3.73t$	$0.55 < n < 1.71$	$1.3t < \mu < 2.38t$	$0.93 < n < 1.38$
$(0, Q_{2X}, Q_{2X})$	$-3.1t < \mu < 3.07t$	$0.38 < n < 1.45$	—	—
$(0, 0, Q_{3X})$	$\mu \approx 0^{**}$	$n \approx 0.91^{**}$	—	—
$(Q_{4X}, 0, 0)$	—	—	$1.3t < \mu < 3.08t$	$0.93 < n < 2.00$
$(Q_{3L}, -Q_{3L}, 0)$	$\mu > -1.8t$	$n > 0.55$	$2.7t < \mu < 3t$	$1.60 < n < 1.96$

точек Кона, установив соответствие этих вкладов с различными типами магнитного порядка.

Так, при $t' > 0$ эволюция максимумов неприводимой восприимчивости рис. 2 с уменьшением

химического потенциала соответствует изменению типа магнитного порядка $\Phi M \rightarrow (Q_W, Q_W, Q_W) \rightarrow (Q_{1X}, Q_{1X}, Q_{1X}) \rightarrow (0, 0, Q_{3X})$, с возможным небольшим участком фазы $(0, Q_{2X}, Q_{2X})$ между фа-

зами (Q_{1X}, Q_{1X}, Q_{1X}) и $(0, 0, Q_{3X})$. При этом, не рассматривавшаяся в разд. 2.2 в силу весьма специфического (несвязного) вида поверхности Ферми фаза (Q_W, Q_W, Q_W) возникает при больших значениях химического потенциала вблизи верхнего края зоны. Дальнейшие типы порядка (Q_{1X}, Q_{1X}, Q_{1X}) и $(0, 0, Q_{3X})$, возникающие с уменьшением химического потенциала, обусловлены окрестностью точки X и имеют значения волновых векторов Q_{1X} и Q_{3X} , совпадающие с найденными в разд. 2.2. Хотя общая последовательность фаз, определенная в данной работе, совпадает с полученной ранее [19, 20], имеются некоторые отличия, обусловленные более точным (аналитическим) определением волновых векторов в разд. 2.2. Например, диапазон существования фазы (π, π, π) , являющейся предельным случаем фазы (Q_{1X}, Q_{1X}, Q_{1X}) при $Q_{1X} \rightarrow \pi$ сжимается до точки $\mu = 2t$.

С другой стороны, при $t' < 0$ с уменьшением химического потенциала наблюдается последовательность доминирующих фаз $\Phi M \rightarrow (0, 0, Q_W) \rightarrow (Q_{1X}, Q_{1X}, Q_{1X})$, при этом фаза (Q_{1X}, Q_{1X}, Q_{1X}) достигается лишь для не слишком больших $|t'/t|$. Несмотря на то что открытие «окна» поверхности Ферми вблизи точки L при $\mu = \mu_L = -6t'$ не изменяет симметрии волнового вектора, на котором достигается глобальный максимум восприимчивости (в силу доминирующего вклада окрестности точек X, W), тип импульсной зависимости восприимчивости $\chi_{\mathbf{q}}^0$ вблизи $q = 0$ принципиально изменяется (см. рис. 3б, в). В частности, при $\mu > \mu_L$ восприимчивость почти не зависит от \mathbf{q} при малых q (рис. 3в), аналогично окрестности точки (π, π) в двумерной $t-t'$ -модели Хаббарда с малыми t' и заполнением слегка выше ван-хововского [22, 23], так что в этом случае имеет место конкуренция ферромагнитных и несоизмеримых корреляций. Доминирующий тип магнитного порядка при этом может быть легко изменен корреляциями и/или особенностями поверхности Ферми вдали от точки L . В то же время, при $\mu < \mu_L$ восприимчивость имеет выраженный минимум при $q = 0$ (рис. 3б), свидетельствующий об отсутствии ферромагнитных корреляций и доминировании корреляций несоизмеримого типа. Изменение импульсной зависимости восприимчивости при пересечении поверхностью Ферми точки L в значительной степени обусловлено появлением точек Кона, соединенных волновыми векторами (Q_{1L}, Q_{1L}, Q_{1L}) и $(Q_{2L}, Q_{2L}, 0)$, и исчезновением точек Кона, соединенных вектором $(Q_{4L}, -Q_{4L})$, вблизи точки L при $\mu < \mu_L$.

Во всех перечисленных случаях максимум восприимчивости определяется гиперболическими точками Кона, рассмотренными в разд. 2.1. Рассмотрение конечных температур в этом случае предсказывает критические индексы восприимчивости $\chi_{\mathbf{Q}} \propto T^{-\gamma}$ и корреляционной длины $\xi \propto T^{-\nu}$ в точке квантового фазового перехода равные $\gamma = \nu = 1$, см. [4, 8].

3. АНТИФЕРРОМАГНЕТИЗМ ХРОМА И ДВУХЗОННАЯ МОДЕЛЬ

Для исследования природы антиферромагнетизма хрома рассмотрим вначале результаты расчетов *ab initio* в рамках приближения локальной плотности [24] с использованием базисных орбиталей для потенциала внутриатомных сфер (LDA TB-LMTO-ASA) [25]. Для обменно-корреляционного потенциала выбирался функционал фон Барта – Хедина [26]; нами была выбрана постоянная решетки $a = 2.8845 \text{ \AA}$ и сетка $40 \times 40 \times 40$ в импульсном пространстве. Результаты вычисления зонной структуры хрома и импульсной зависимости восприимчивости, включающей вклад s -, p -, d -состояний, представлены на рис. 5. Восприимчивость имеет максимум на несоизмеримом волновом векторе $(0, 0, Q)$ в направлении $\Gamma - H$ с Q близким к 2π .

Для объяснения полученной импульсной зависимости восприимчивости и установления ее взаимосвязи с особенностями Кона рассмотрим простую двухзонную модель, позволяющую качественно описать поверхности Ферми хрома,

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} E_m(\mathbf{k}) \hat{c}_{\mathbf{k}m\sigma}^+ \hat{c}_{\mathbf{k}m\sigma},$$

где $m = 1, 2$ характеризует номер зоны. Дисперсия, соответствующая данной модели, имеет вид

$$E_{\mathbf{k}}^{(m)} = -8t_{1m} \cos \frac{k_x}{2} \cos \frac{k_y}{2} \cos \frac{k_z}{2} - 2t_{2m} (\cos k_x + \cos k_y + \cos k_z) - 4t_{3m} (\cos k_x \cos k_y + \cos k_x \cos k_z + \cos k_y \cos k_z) + E_{0m}, \quad (13)$$

где t_{1m}, t_{2m}, t_{3m} — интегралы перескока между первыми, вторыми и третьими соседями ОЦК-решетки соответственно для первой и второй зон, E_{0m} — уровни энергии зон. Интегралы перескока и уровни энергии определялись из условия равенства координат точек поверхности Ферми вдоль симметричных направлений, полученных в расчетах *ab initio* и для модели (13). Полученные значения параметров

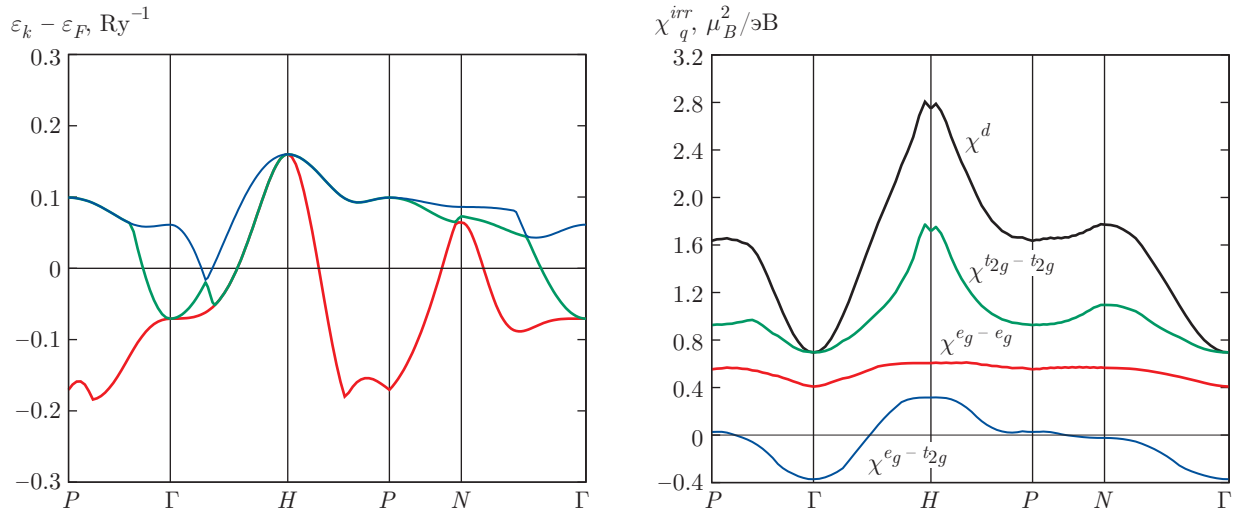


Рис. 5. Зонная структура вблизи уровня Ферми и восприимчивости парамагнитного хрома вдоль симметричных направлений из расчетов *ab initio*

Таблица 2. Значения интегралов перескоков между вторыми, третьими соседями и уровнями энергии зон по отношению к интегралу перескока между первыми соседями

m	t_{2m}/t_{1m}	t_{3m}/t_{1m}	E_{0m}/t_{1m}
1	0.91	-0.59	6.61
2	-1.52	0.80	-7.70

приведены в табл. 2. Соответствующие поверхности Ферми показаны на рис. 6.

Отметим, что рассматриваемая модель не предполагает приближенного нестинга между различными листами поверхности Ферми и в этом отношении является более реалистичной, чем ранее предложенные теории антиферромагнетизма хрома, см., например, [27–30]. В то же время, отсутствие нестинга в этой модели лишь усиливает качественную применимость приближения случайных фаз, найденную ранее для случая идеального нестинга в работах [29, 31].

В рассматриваемой модели наиболее важный вклад в восприимчивость ожидается от точек Кона, находящихся на разных листах поверхности Ферми — электронном, замкнутом вокруг точки Γ , и дырочном, замкнутом вокруг точки $H = (0, 0, 2\pi)$. При этом разложения в окрестности точек Кона на разных листах будут иметь различные по величине как скорости Ферми, так и обратные массы. Для поиска

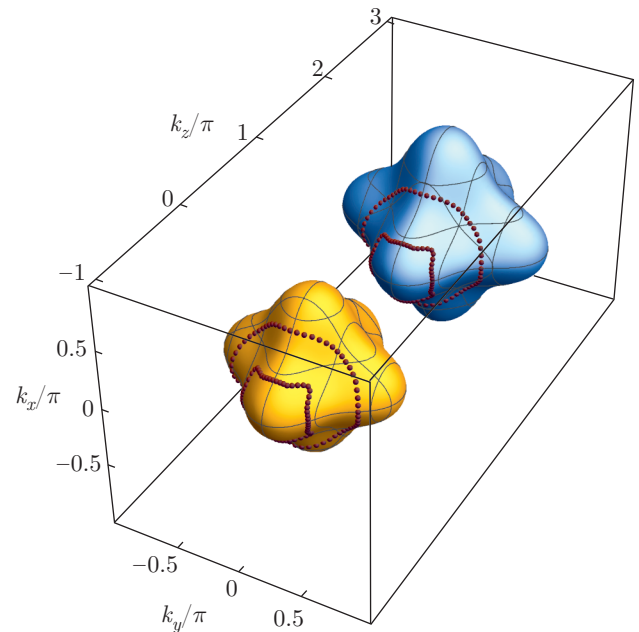


Рис. 6. Поверхности Ферми двухзонной модели при параметрах, указанных в табл. 1. Точками показано положение линий точек Кона

точек Кона наложим условие параллельности вектора $\mathbf{Q} = (0, 0, Q_z)$ одной из координатных осей (что соответствует результату зонных расчетов и экспериментально реализуемому вектору \mathbf{Q}) и потребуем, (а) чтобы точки \mathbf{K} и $\mathbf{K} + \mathbf{Q}$ принадлежали поверхностям Ферми соответственно первой и второй зон и (б) соответствующие скорости Ферми $\mathbf{v}_1(\mathbf{K})$ и $\mathbf{v}_2(\mathbf{K} + \mathbf{Q})$ были антипараллельны. В силу симметрии достаточно рассмотреть лишь часть $k_z < 0$ по-

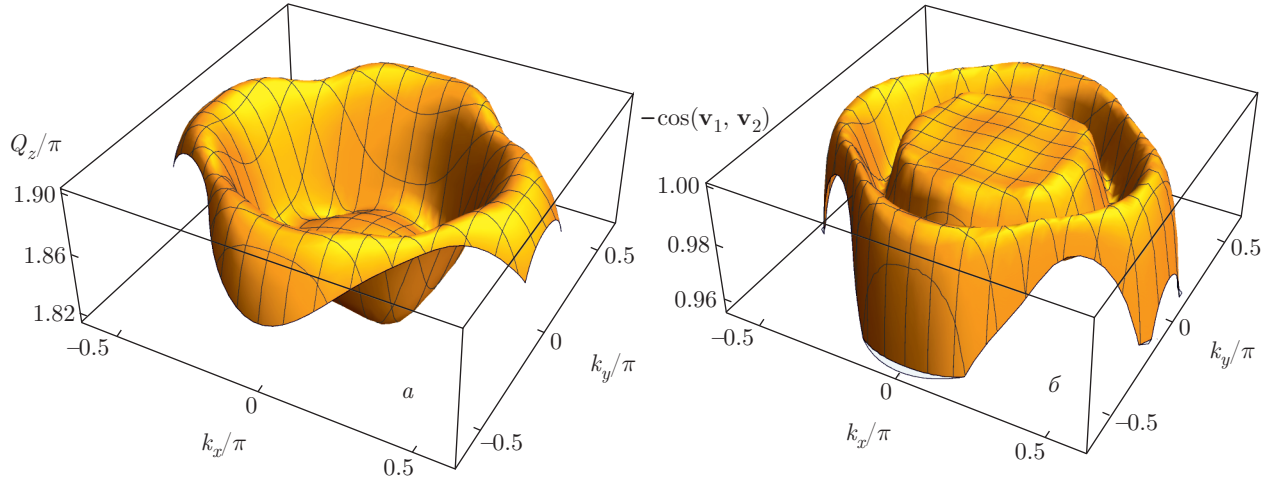


Рис. 7. а) Длина волнового вектора $Q_z(k_x, k_y)$, соединяющего точки поверхностей Ферми (k_x, k_y, k_z) и $(k_x, k_y, k_z + Q_z)$ первой и второй зон; б) значения $-\cos(\mathbf{v}_1(\mathbf{k}), \mathbf{v}_2(\mathbf{k} + \mathbf{Q}))$ для различных точек поверхности Ферми

верхности Ферми первого листа, которая однозначно параметризуется координатами (K_x, K_y) точки \mathbf{K} . Величина $Q_z(K_x, K_y)$, определенная из условия (а), тогда также является однозначной функцией двух указанных координат точки Кона на первом листе, результат вычисления которой показан на рис. 7а. Для проверки выполнения условия (б) на рис. 7б показано значение

$$-\cos(\mathbf{v}_1(\mathbf{K}), \mathbf{v}_2(\mathbf{K} + \mathbf{Q})) = -\frac{\mathbf{v}_1(\mathbf{K}) \cdot \mathbf{v}_2(\mathbf{K} + \mathbf{Q})}{v_1(\mathbf{K})v_2(\mathbf{K} + \mathbf{Q})}.$$

Можно видеть, что точки Кона образуют две линии в импульсном пространстве, характеризующиеся значениями $Q_{1z} \approx 1.83\pi$ и $Q_{2z} \approx 1.90\pi$. При этом внутренняя линия точек Кона с $Q_z = Q_{1z}$ является границей области, в которой скорости Ферми на разных листах почти антипараллельны. Указанная область, однако, характеризуется величиной Q_z , существенно зависящей от $K_{x,y}$, и не дает существенного вклада в восприимчивость, что подтверждается численным расчетом восприимчивости, приведенным ниже. Положение линий точек Кона на поверхностях Ферми показано на рис. 6.

Для вычисления импульсных зависимостей восприимчивости параметризуем положение точки Кона $\mathbf{K}_i(\varphi)$ на каждой из линий точек Кона, нумеруемых $i = 1, 2$, углом φ и введем локальную в импульсном пространстве повернутую систему координат таким образом, чтобы ось k'_{zi} была направлена вдоль разности скоростей Ферми в соответствующих точках Кона $\mathbf{v}_1(\mathbf{K}_i(\varphi)) - \mathbf{v}_2(\mathbf{K}_i(\varphi) + \mathbf{Q}_i)$, а ось k'_{xi} — перпендикулярно к k'_{zi} и касательной к i -й линии точек Кона на первом листе. При этом на линии

точек Кона, где скорости Ферми на первом и втором листах почти противоположны (см. рис. 7б), ось k'_{xi} будет лежать в плоскости, касательной к поверхности Ферми. Соответствующее разложение дисперсий вблизи линий точек Кона тогда принимает вид

$$\begin{aligned} E_{\mathbf{K}_i(\varphi)+\mathbf{k}}^{(1)} &\approx v_{1i}(\varphi)k'_{zi} + \frac{(k'_{xi})^2}{2m_{1i}(\varphi)}, \\ E_{\mathbf{K}_i(\varphi)+\mathbf{Q}_i+\mathbf{k}}^{(2)} &\approx -v_{2i}(\varphi)k'_{zi} + \frac{(k'_{xi})^2}{2m_{2i}(\varphi)}, \end{aligned} \quad (14)$$

где

$$v_{1i}(\varphi) = |\mathbf{v}_1(\mathbf{K}_i(\varphi))|, \quad v_{2i}(\varphi) = |\mathbf{v}_2(\mathbf{K}_i(\varphi) + \mathbf{Q}_i)|,$$

и мы пренебрегаем слабой зависимостью $\mathbf{Q}_i(\varphi)$, т. е. считаем линии точек Кона приблизительно параллельными друг другу. Учитывая симметрию поверхности Ферми, можно ограничиться углами $\varphi \in [0, \pi/4]$. Для приведения дисперсии к стандартному виду (5) сделаем замену переменных:

$$\begin{aligned} k'_{zi} &\rightarrow k'_{zi} - \frac{(k'_{xi})^2}{2(v_{1i}(\varphi) + v_{2i}(\varphi))} \times \\ &\times \left[\frac{1}{m_{1i}(\varphi)} - \frac{1}{m_{2i}(\varphi)} \right]. \end{aligned} \quad (15)$$

В новых переменных дисперсии принимают вид

$$\begin{aligned} E_{\mathbf{K}_i(\varphi)+\mathbf{k}}^{(1)} &\approx v_{1i}(\varphi)k'_{zi} + \frac{(k'_{xi})^2}{2m_{si}(\varphi)}, \\ E_{\mathbf{K}_i(\varphi)+\mathbf{Q}_i+\mathbf{k}}^{(2)} &\approx -v_{2i}(\varphi)k'_{zi} + \frac{(k'_{xi})^2}{2m_{si}(\varphi)}, \end{aligned} \quad (16)$$

где

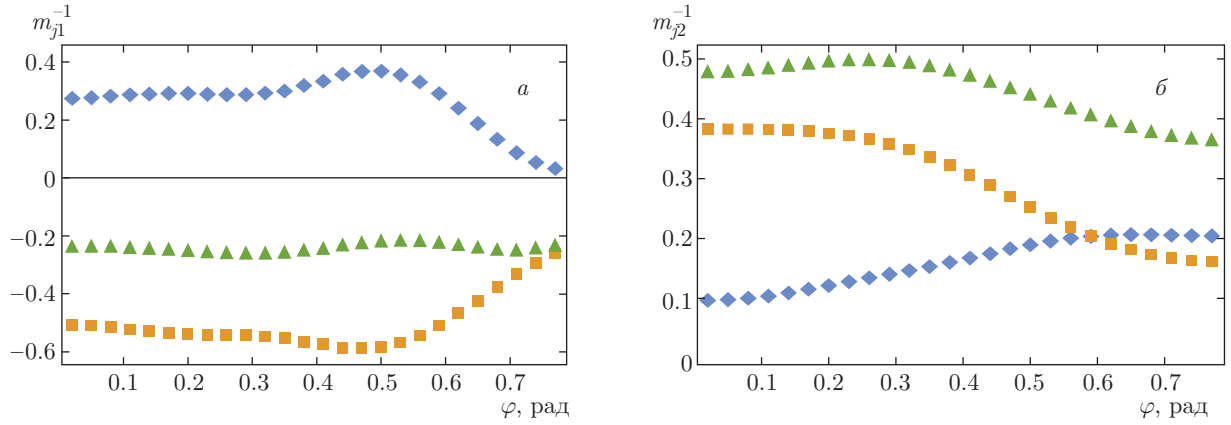


Рис. 8. Зависимости обратных масс $m_{ji}^{-1}(\varphi)$ для внутренней, $i = 1$ (а), и внешней, $i = 2$ (б), линий точек Кона от угла φ , отсчитанного от направления ГХ. Ромбами изображены зависимости m_{1i}^{-1} , квадратами — m_{2i}^{-1} , треугольниками — результирующие m_{si}^{-1} , построенные по правилу (17)

$$\frac{1}{m_{si}(\varphi)} = \frac{1}{v_{1i}(\varphi) + v_{2i}(\varphi)} \times \left[\frac{v_{1i}(\varphi)}{m_{2i}(\varphi)} + \frac{v_{2i}(\varphi)}{m_{1i}(\varphi)} \right]. \quad (17)$$

На рис. 8 построены зависимости обратных масс $m_{ji}(\varphi)$, $m_{si}(\varphi)$, где $i, j = 1, 2$. Знаки результирующих масс $m_{si}(\varphi)$ не меняются в зависимости от φ , но противоположны для первой и второй линий точек Кона. Вклад полученных точек в межзонную часть восприимчивости при $T = 0$ может быть вычислен аналогично [4–8]:

$$\begin{aligned} \chi_{\mathbf{q}+\mathbf{Q}}^{ib,0} &\equiv - \sum_{\mathbf{k}} \frac{f(E_{\mathbf{k}}^{(1)}) - f(E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{Q}}^{(2)})}{E_{\mathbf{k}}^{(1)} - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{Q}}^{(2)}} \approx \\ &\approx \chi_{\mathbf{Q}}^{ib,0} - \frac{4}{\pi^2} \sum_{i=1,2} \int_0^{\pi/4} d\varphi \frac{D_i(\varphi)}{v_{1i}(\varphi) + v_{2i}(\varphi)} \times \\ &\times \begin{cases} \sqrt{|V_{si}(\varphi)q'_{zi}(\varphi)|}, & m_{si}(\varphi)q'_{zi}(\varphi) < 0, \\ V_{si}(\varphi)q'_{zi}(\varphi)/(\pi\Lambda), & m_{si}(\varphi)q'_{zi}(\varphi) > 0, \end{cases} \quad (18) \end{aligned}$$

где

$$V_{si}(\varphi) = \frac{2m_{si}(\varphi)v_{1i}(\varphi)v_{2i}(\varphi)}{v_{1i}(\varphi) + v_{2i}(\varphi)}, \quad (19)$$

$$D_i(\varphi) = \left. \frac{\partial(k_x, k_y, k_z)}{\partial(\varphi, k'_{xi}, k'_{zi})} \right|_{k'_{xi}=k'_{zi}=0}, \quad (20)$$

$q'_{zi}(\varphi)$ — проекция вектора \mathbf{q} на ось k'_{zi} , $\Lambda \sim 1$ — параметр обрезания в импульсном пространстве.

Таким образом, в данном случае ожидается корневая неаналитичность импульсной зависимости восприимчивости при волновых векторах вблизи

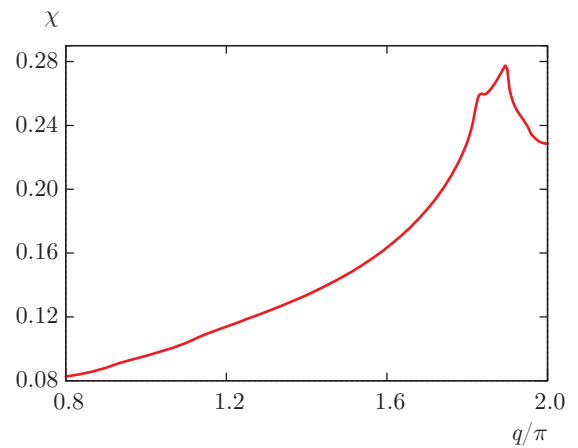


Рис. 9. Межзонный вклад в импульсную зависимость магнитной восприимчивости двухзонной модели при $T = 0$ в направлении $(0, 0, q)$

векторов $\mathbf{Q}_{1,2}$, соединяющих линии точек Кона на разных листах. Указанный вывод подтверждается вычислением межзонного вклада в импульсную зависимость магнитной восприимчивости для данной модели: результат численного вычисления интеграла в первой строке уравнения (18) представлен на рис. 9, показывающем, что именно на волновых векторах $\mathbf{Q}_{1,2}$ наблюдаются локальные неаналитические максимумы магнитной восприимчивости. При этом доминирующим оказывается вклад внешней линии точек Кона с волновым вектором \mathbf{Q}_2 , который также близок к экспериментально измеренному значению вектора волны спиновой плотности в хrome [14, 18]. Анализ восприимчивости при конечных температурах в рассмотренном случае цилинд-

дических точек Кона (в предположении, что зонная структура качественно не изменяется с давлением или допированием) предсказывает критические индексы восприимчивости и корреляционной длины в точке квантового фазового перехода $\gamma = \nu = 1$ со слабыми логарифмическими поправками, см. [6, 8].

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе исследовано влияние точек Кона в электронном спектре на магнитные свойства трехмерных систем на примере однозонной модели с перескоком между первыми и вторыми соседями на ГЦК-решетке и двухзонной модели, содержащей перескоки в пределах первых трех координационных сфер на ОЦК-решетке, моделирующей некоторые особенности электронной дисперсии хрома.

Для ГЦК-решетки найдено влияние гиперболических точек Кона на магнитную восприимчивость в широком диапазоне химических потенциалов (концентраций) и определены интервалы химических потенциалов для ряда симметричных направлений, в которых ожидается влияние точек Кона. Полученные результаты подтверждены численным анализом восприимчивости невзаимодействующих электронов на указанной решетке. Вблизи квантовых фазовых переходов исследованные точки Кона приводят к температурной зависимости восприимчивости и корреляционной длины $\chi_Q \propto \xi \propto 1/T$.

Отдельно исследовано влияние открытия окна поверхности Ферми вблизи точки L , имеющее важное значение для объяснения свойств $ZrZn_2$. Показано, что когда точка L зоны Бриллюэна принадлежит заполненным состояниям ($E_L < 0$, окно поверхности Ферми открыто вблизи L), имеет место конкуренция ферромагнитных и несоизмеримых корреляций. Закрытие указанного окна ($E_L > 0$) приводит к резкому изменению импульсной зависимости магнитной восприимчивости и существенному увеличению вклада несоизмеримых корреляций.

На основе анализа двухзонной модели хрома показано, что в хrome возможно образование двух линий точек Кона, соответствующих близким значениям волнового вектора антиферромагнетизма $(0, 0, Q_z)$ с $Q_{1z} \approx 1.83\pi$ и $Q_{2z} \approx 1.90\pi$ в единицах обратной постоянной решетки. Указанные линии точек Кона приводят к односторонней неаналитической (корневой) зависимости восприимчивости от импульса при $T = 0$, при этом доминирует вклад внешней линии точек Кона с $Q_z = Q_{2z}$, близком к экспериментально измеренному вектору волны спи-

новой плотности в хrome. При конечных температурах вблизи квантового фазового перехода также ожидаются температурные зависимости восприимчивости и корреляционной длины $\chi_Q \propto \xi \propto 1/T$ со слабыми логарифмическими поправками.

Описанные подходы к исследованию вклада точек Кона могут в дальнейшем использовать полную зонную структуру, полученную *ab initio* в рамках метода функционала плотности и динамической теории среднего поля, что позволит исследовать влияние точек Кона в реальных веществах. Применение динамической теории среднего поля [32] и приближения динамической вершины [33, 34] позволит также исследовать влияние межэлектронного взаимодействия (в том числе нелокального) за пределами приближения случайных фаз. Хотя предварительное исследование в рамках однозонной модели [8] показало, что межэлектронное взаимодействие не оказывает качественного влияния на аномалии Кона вблизи квантовых фазовых переходов, этот вопрос нуждается в дальнейшем более детальном исследовании.

Детальный анализ имеющихся экспериментальных данных о магнитных свойствах слабых ферро- и антиферромагнетиков вблизи квантовых фазовых переходов позволит проанализировать возможные отклонения от предсказаний теории Герца – Морри – Миллиса, вызванные влиянием аномалий Кона.

А. А. К. благодарит Т. Schäfer, А. Toschi, К. Held, W. Metzner за ценные обсуждения роли особенностей Кона в сильнокоррелированных системах. Работа выполнена при частичной поддержке гранта № 01201463326 в рамках госзадания «Электрон», РФФИ (грант № 17-02-00942а), а также в рамках проекта УрО РАН (№ 15-8-2-9).

ЛИТЕРАТУРА

1. W. Kohn, Phys. Rev. Lett. **2**, 393 (1959).
2. W. Kohn and J. M. Luttinger, Phys. Rev. Lett. **15**, 524 (1965).
3. L. M. Roth, H. J. Zeiger, and T. A. Kaplan, Phys. Rev. **149**, 519 (1966).
4. T. M. Rice, Phys. Rev. B **2**, 3619 (1970).
5. F. Stern, Phys. Rev. Lett. **18**, 546 (1967).
6. T. Holder and W. Metzner, Phys. Rev. B **85**, 165130 (2012).

7. T. Holder and W. Metzner, Phys. Rev. B **90**, 161106 (2014).
8. T. Schäfer, A. A. Katanin, K. Held, A. Toschi, Phys. Rev. Lett. **119**, 046402 (2017).
9. T. F. Smith, J. A. Mydosh, and E. P. Wohlfarth, Phys. Rev. Lett. **27**, 1732 (1971).
10. C. Pfleiderer, M. Uhlarz, S. M. Hayden, R. Vollmer, H. V. Löhneysen, N. R. Bernhoeft, and G. G. Lonzarich, Nature **412**, 58 (2001).
11. M. Uhlarz, C. Pfleiderer, and S. M. Hayden, Phys. Rev. Lett. **93**, 256404 (2004).
12. E. A. Yelland and S. M. Hayden, Phys. Rev. Lett. **99**, 196405 (2007).
13. R. P. Smith, M. Sutherland, G. G. Lonzarich, S. S. Saxena, N. Kimura, S. Takashima, M. Nohara, and H. Takagi, Nature **455**, 1220 (2008).
14. E. Fawcett, Rev. Mod. Phys. **60**, 209 (1988).
15. R. Jaramillo, Yejun Feng, J. Wang, and T. F. Rosenbaum, PNAS **107**, 13631 (2010).
16. A. Yeh, Yeong-Ah Soh, J. Brooke, G. Aeppli, T. F. Rosenbaum, and S. M. Hayden, Nature **419**, 459 (2002).
17. M. Lee, A. Husmann, T. F. Rosenbaum, and G. Aeppli, Phys. Rev. Lett. **92**, 187201 (2004).
18. D. A. Sokolov, M. C. Aronson, L. Wu, Y. Zhu, C. Nelson, J. F. Mansfield, K. Sun, R. Erwin, J. W. Lynn, M. Lumsden, and S. E. Nagler, Phys. Rev. B **90**, 035139 (2014).
19. P. A. Igoshev, M. A. Timirgazin, V. F. Gilmudinov, A. K. Arzhnikov, and V. Yu. Irkhin, J. Phys.: Condens. Matter **27**, 446002 (2015).
20. M. A. Timirgazin, P. A. Igoshev, A. K. Arzhnikov, and V. Yu. Irkhin, J. Phys.: Condens. Matter **28**, 505601 (2016).
21. Y. M. Vilk and A.-M. S. Tremblay, J. de Phys. I **7**, 1309 (1997).
22. F. Onufrieva, P. Pfeuty, and M. Kiselev, Phys. Rev. Lett. **82**, 2370 (1999); arXiv:cond-mat/9804191; J. Phys. Chem. Sol. **59**, 1853 (1999).
23. А. А. Катанин, В. Ю. Ирхин, П. А. Игошев, *Модельные подходы к магнетизму двумерных зонных систем*, Физматлит (2012).
24. R. O. Jones and O. Gunnarsson, Rev. Mod. Phys. **61**, 689 (1989).
25. O. K. Andersen and O. Jepsen, Phys. Rev. Lett. **53**, 2571 (1984).
26. U. von Barth and L. Hedin, J. Phys. C **5**, 1629 (1972).
27. W. M. Lomer, Proc. Phys. Soc. **80**, 489 (1962).
28. A. Shibatani, K. Motizuki, and T. Nagamiya, Phys. Rev. **177**, 984 (1969).
29. И. Е. Дзялошинский, Е. И. Кац, ЖЭТФ **62**, 1104 (1972).
30. K. Machida and M. Fujita, Phys. Rev. B **30**, 5284 (1984).
31. A. T. Zheleznyak, V. M. Yakovenko, and I. E. Dzyaloshinskii, Phys. Rev. B **55**, 3200 (1997).
32. A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, and M. J. Rozenberg, Rev. Mod. Phys. **68**, 13 (1996); G. Kotliar, S. Y. Savrasov, K. Haule, V. S. Oudovenko, O. Parcollet, and C. A. Marianetti, Rev. Mod. Phys. **78**, 865 (2006).
33. A. Toschi, A. A. Katanin, and K. Held, Phys. Rev. B **75**, 045118 (2007).
34. G. Rohringer, H. Hafermann, A. Toschi, A. A. Katanin, A. E. Antipov, M. I. Katsnelson, A. I. Lichtenstein, A. N. Rubtsov, and K. Held, arXiv:1705.00024.