

Электронная структура InCo_2As_2 и $\text{KInCo}_4\text{As}_4$: LDA + DMFT

Н. С. Павлов¹*, И. Р. Шейн[×], К. С. Перваков^{*}, И. А. Некрасов¹*

¹Институт электрофизики Уральского отделения РАН, 620016 Екатеринбург, Россия

^{*}Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, 119991 Москва, Россия

[×]Институт химии твердого тела Уральского отделения РАН, 620108 Екатеринбург, Россия

Поступила в редакцию 14 ноября 2022 г.

После переработки 22 ноября 2022 г.

Принята к публикации 23 ноября 2022 г.

Проведен сравнительный анализ электронной структуры, полученной в рамках DFT/LDA и LDA + DMFT подходов, возможных изоструктурных аналогов железных сверхпроводников InCo_2As_2 и $\text{KInCo}_4\text{As}_4$ с электронной структурой родительской высокотемпературной сверхпроводящей системы BaFe_2As_2 . Установлено, что несмотря на достаточно большую величину электрон-электронных корреляций (локальное кулоновское взаимодействие на $\text{Co-}3d$ оболочке $U = 4.0$ эВ, хундовское обменное взаимодействие $J = 0.85$ эВ), в рассмотренных системах наблюдается относительно небольшая величина перенормировки квазичастичной массы 1.2–1.35 на уровне Ферми. При этом корреляционные эффекты приводят к заметному смещению и сжатию спектра ниже -0.8 эВ. Зонная структура InCo_2As_2 вблизи уровня Ферми качественно схожа с ранее детально изученным BaCo_2As_2 , и существенно отличается от зонной структуры BaFe_2As_2 . В системе $\text{KInCo}_4\text{As}_4$ зоны вблизи уровня Ферми напоминают зонную структуру BaFe_2As_2 , а поверхности Ферми имеют схожую топологию. Это косвенно указывает на возможность реализации сверхпроводимости в $\text{KInCo}_4\text{As}_4$. Также по результатам LDA + DMFT расчетов видно, что при небольшом дырочном или электронном допировании в системе $\text{KInCo}_4\text{As}_4$ будут происходить топологические переходы Лифшица. Считаем, что синтез рассмотренных в данной работе соединений InCo_2As_2 и $\text{KInCo}_4\text{As}_4$ является важным для изучения сверхпроводимости в данном классе материалов.

DOI: 10.31857/S1234567823010093, EDN: nvsgbig

1. Введение. Открытие семейства высокотемпературных сверхпроводников на основе пниктидов и халькогенидов железа (см. обзоры [1–4] и недавние работы [5–8]) породило интенсивный поиск новых химических и/или структурных аналогов систем данного класса (см., например, [9, 10]). Среди аналогов железных сверхпроводников есть сверхпроводящие системы, но с достаточно малой критической температурой сверхпроводящего перехода T_C . Необходимо отметить, что многие из вновь полученных систем аналогов не являются сверхпроводниками. В частности, при полном замещении Fe на Co в соединении BaCo_2As_2 не наблюдается сверхпроводимость [11], даже под давлением до 8 ГПа [12]. Возможной причиной отсутствия сверхпроводимости может являться совершенно другая электронная структура, в которой не может реализоваться спин-флуктуационный механизм сверхпроводимости [11].

Относительно недавно в рамках DFT (Density Functional Theory) были теоретически рассмотрены

возможные соединения InCo_2As_2 и $\text{KInCo}_4\text{As}_4$ [13]. В сравнении с родительским соединением BaFe_2As_2 (так называемый, класс 122 железосодержащих сверхпроводников) данные системы имеют большее число электронов. При этом, в InCo_2As_2 на один валентный электрон больше, чем в BaCo_2As_2 . В $\text{KInCo}_4\text{As}_4$ имеется эффективно такое же число валентных электронов, как и в BaCo_2As_2 . Однако, электронные зоны $\text{KInCo}_4\text{As}_4$ сильно отличаются от BaCo_2As_2 . Отметим, что система $\text{KInCo}_4\text{As}_4$ относится к так называемому классу 1144 железосодержащих сверхпроводников, которые впервые синтезированы сравнительно недавно – в 2016 году [14, 15]. В работе [13] рассмотрены зонная структура, плотности стояний InCo_2As_2 и $\text{KInCo}_4\text{As}_4$, полученные в рамках DFT. Однако, отсутствует изучение поверхности Ферми для $\text{KInCo}_4\text{As}_4$. Также, ранее было показано, что в системе BaCo_2As_2 электронные корреляции на $\text{Co-}3d$ оболочке существенны при описании электронной структуры [16].

Ввиду выше сказанного, в данной работе в

¹e-mail: pavlovns@lebedev.ru

рамках DFT/LDA и LDA + DMFT [17, 18] подходов проведено систематическое детальное исследование электронной структуры изоструктурных аналогов железных сверхпроводников InCo_2As_2 и $\text{KInCo}_4\text{As}_4$. Получены соответствующие электронные зоны, плотности состояний и поверхности Ферми, а также спектральные функции. Проведено сравнение DFT/LDA и LDA + DMFT результатов между собой и с аналогичными результатами для родительской системы BaFe_2As_2 . Показана существенная роль электрон-электронных корреляций в $\text{KInCo}_4\text{As}_4$.

2. Структура и методы. Зонная структура исследуемых систем получена в рамках теории функционала плотности в приближении локальной электронной плотности DFT/LDA, реализованного в программном пакете *wien2k* [19] (полнопотенциальный метод линейаризованных присоединенных плоских волн (FP-LAPW)). Кристаллическая структура рассматриваемых Co-содержащих соединений была получена в ходе оптимизации параметров решетки и позиций атомов в DFT расчетах. В итоге для InCo_2As_2 была найдена пространственная группа симметрии $I4/mmm$ со следующими значениями параметров решетки и позициями атомов: $a = 3.719 \text{ \AA}$, $c = 13.554 \text{ \AA}$, $z_{As} = 0.351657$. Для соединения $\text{KInCo}_4\text{As}_4$ – пространственная группа симметрии $P4/mmm$, параметры решетки и позиции атомов: $a = 3.756 \text{ \AA}$, $c = 13.600 \text{ \AA}$, $z_{As1} = 0.14784$, $z_{As2} = 0.33960$, In (0, 0, 0), K (0.5, 0.5, 0.5). Для расчетов в рамках DFT/LDA было выбрано оптимальное разбиение неприводимой зоны Бриллюэна в k -пространстве: $16 \times 16 \times 16$. Для InCo_2As_2 и $\text{KInCo}_4\text{As}_4$ выполнен DFT анализ возможных магнитных состояний, который показал, что все рассмотренные магнитные конфигурации (FM, AFM-A, AFM-C и AFM-G) сходятся к парамагнитному решению. Для задания кинетической части гамильтониана в DMFT был использован LDA гамильтониан, спроектированный на базис функций Ваннье, состоящий из Co(Fe)- $3d$, As- $4p$, In- $5s$ состояний, с помощью пакета *Wannier90* [20]. Проверено, что зоны, построенные на функциях Ваннье, совпадают с исходными LDA зонами, что говорит о достаточно хорошем качестве выполненного проектирования.

Для решения примесной задачи в DMFT использован метод квантового Монте-Карло в непрерывном времени (CT-QMC) [21], реализованный в программном пакете *AMULET* [22]. DMFT(CT-QMC) вычисления выполнены при обратной температуре $\beta = 100$ (116 K). Количество усредненных Монте-Карло шагов было выбрано 10^6 .

В данной работе для рассматриваемых систем ве-

личина прямого кулоновского взаимодействия в модели Хаббарда выбрана $U = 4.0 \text{ эВ}$, а величина обменного взаимодействия Хунда – $J = 0.85 \text{ эВ}$. Величина U взята немного больше, чем типичные значения для арсенидов железа ($U = 3.5 \text{ эВ}$) [23, 24], так как в статье [25] показано, что величина U в ряде $3d$ металлов с ростом порядкового номера растет. Обменное взаимодействие взято такое же по величине как и для Fe- $3d$ состояний в арсенидах железа.

В данной работе выполнено самосогласованное вычисление поправки на двойной учет (E_{dc}) в приближении FLL (*fully-localized limit*) [26, 27], получены следующие значения E_{dc} для заполнения Co- $3d$ состояний n_d : InCo_2As_2 $n_d = 8.32$, $E_{dc} = 28.18 \text{ эВ}$; $\text{KInCo}_4\text{As}_4$ $n_d = 8.22$, $E_{dc} = 27.84 \text{ эВ}$.

Собственно энергетическая часть на реальных частотах $\Sigma(\omega)$ получена с помощью метода Паде аппроксимантов [28]. Также для проверки корректности выполненного аналитического продолжения собственно энергетической части были сопоставлены функции Грина, полученные интегрированием уравнения Дайсона с $\Sigma(\omega)$, с функциями Грина, вычисленными в рамках метода максимальной энтропии [29].

3. Результаты. На рисунке 1 представлены плотности состояний (полная, Co- $3d$ и As- $4p$) для InCo_2As_2 (панель (a)) и $\text{KInCo}_4\text{As}_4$ (панель (b)) систем, рассчитанные в LDA (черные пунктирные линии) и LDA + DMFT (красные сплошные линии) методах в сравнении с BaFe_2As_2 LDA результатами (синие точка-пунктир линии). В отличие от железосодержащих сверхпроводников, в системах на основе Co из-за дополнительного электрона уровень Ферми расположен ближе к верхнему краю Co- $3d$ зоны (сдвиг относительно BaFe_2As_2 около 0.7 эВ).

Общая структура плотностей состояний в системах с Co и в BaFe_2As_2 достаточно схожа (см. синюю линию на рис. 1). Однако, как будет показано дальше, зонные структуры трех данных систем достаточно заметно различаются. В рассматриваемых системах уровень Ферми расположен немного ниже пика, который формируется плоскими участками зон в направлении $\Gamma-X(M)$ (см. рис. 2), в отличие от BaCo_2As_2 , где уровень Ферми попадает точно на пик [30]. Отметим, что для систем с Co вблизи уровня Ферми вклад As- $4p$ состояний в плотность состояний существенно больше, чем в BaFe_2As_2 .

За счет электрон-электронных корреляционных эффектов в плотности состояний происходит смещение пика в области -1 эВ на 0.25 эВ выше по энергии (см. красную линию рис. 1). Однако, форма плотности состояний на уровне Ферми и выше прак-

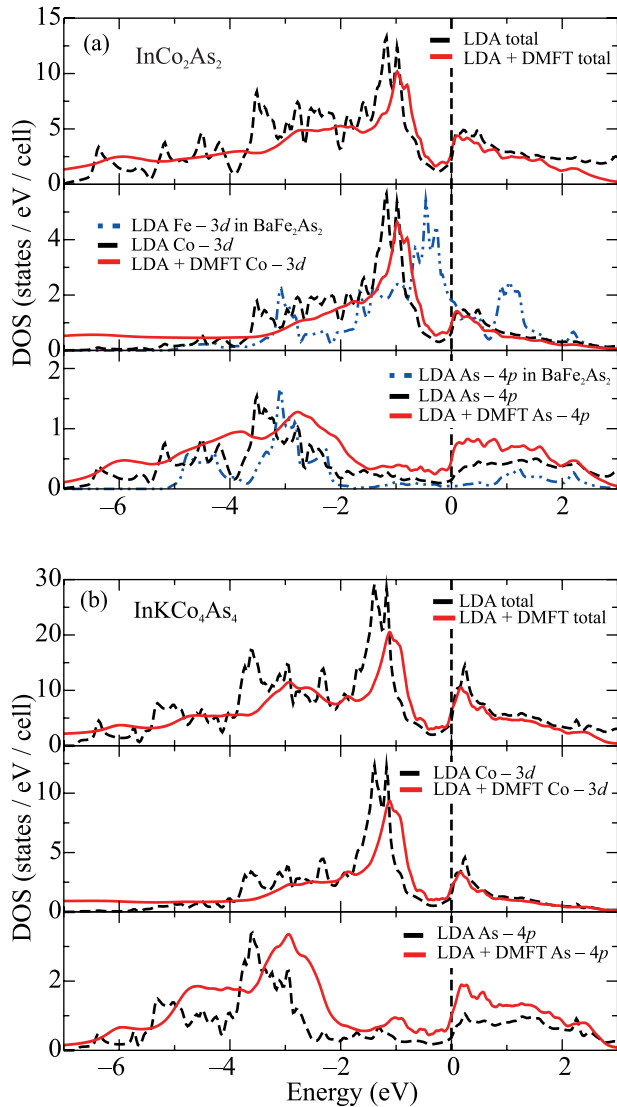


Рис. 1. (Цветной онлайн) Плотности состояний (полная, $\text{Co-}3d$ и $\text{As-}4p$): (a) – InCo_2As_2 и (b) – $\text{KInCo}_4\text{As}_4$ соединений, рассчитанная в LDA (черные пунктирные линии) и LDA+DMFT (красные сплошные линии) в сравнении с BaFe_2As_2 LDA (синие точка-пунктир линии). Ноль энергии соответствует уровню Ферми

тически не изменяется в присутствии электронных корреляций.

На рисунке 2а представлена зонная структура InCo_2As_2 , полученная в LDA (черные линии) и LDA + DMFT (красные линии). Зонная структура InCo_2As_2 напоминает зонную структуру BaCo_2As_2 [30], только со сдвигом уровня Ферми ниже по энергии примерно на 0.3–0.5 эВ. Таким образом плоские участки зон в направлении Γ – X

сдвигаются с уровня Ферми в BaCo_2As_2 выше на 0.5 эВ по энергии.

Как известно, зоны, пересекающие уровень Ферми в BaFe_2As_2 , в основном сформированы $\text{Fe-}3d$ (xy, xz, yz) [31] орбиталями. За счет дополнительного электрона в рассматриваемых системах с Co соответствующие $3d$ (xy, xz, yz) орбитали кобальта располагаются теперь ниже уровня Ферми, а основной вклад на уровне Ферми теперь дает $\text{Co-}3d_{x^2-y^2}$ орбиталь. Также видно, что чуть выше уровня Ферми в направлении Γ – M $\text{Co-}3d_{x^2-y^2}$ орбиталь формирует плоскую зону.

Классическая зонная структура для железосодержащих сверхпроводников, таких как BaFe_2As_2 – это 3 дырочных кармана в Γ -точке и два электронных в M -точке (см. рис. 2b) [31]. В случае InCo_2As_2 в Γ -точке имеется только один достаточно маленький электронный карман и два электронных в X -точке (см. рис. 2a). Для $\text{KInCo}_4\text{As}_4$ (рис. 2c) структура зон пересекающих уровень Ферми также отличается от классического вида BaFe_2As_2 .

Учет электронных корреляций (LDA + DMFT) не меняют зоны на уровне Ферми в области точки X , однако смещают плоскую зону в направлении Γ – X ниже по энергии в обеих системах с Co. Рассчитанная величина корреляционной перенормировки квазичастичной массы на уровне Ферми для всех орбитальных $\text{Co-}3d$ состояний практически одинаковая и составляет – 1.25 для InCo_2As_2 . Таким образом в InCo_2As_2 практически отсутствует сжатие зон на уровне Ферми в отличие от BaFe_2As_2 , где перенормировка в два-три раза больше. Однако, при отходе от уровня Ферми сжатие и сдвиг зон становятся заметными ниже –0.8 эВ.

Рассмотрим зонную структуру системы 1144 $\text{KInCo}_4\text{As}_4$ (рис. 2c). Около Γ -точки одна электронная зона пересекает уровень Ферми, а вторая электронная зона формирует дырочный карман в центре Γ – M (Z – A) направления. Вокруг M -точки наблюдается три электронных зоны. При этом в LDA + DMFT случае в M -точке дополнительно появляется зона, касающаяся уровня Ферми. Такое расположение зон может способствовать возникновению нестинга (см. рис. 3). Среди рассмотренных Co содержащих соединений зонная структура $\text{KInCo}_4\text{As}_4$ наиболее схожа с зонной структурой BaFe_2As_2 .

Рассчитанная в LDA + DMFT величина корреляционной перенормировки квазичастичной массы на уровне Ферми для $\text{KInCo}_4\text{As}_4$ – 1.22. Так же как и в InCo_2As_2 в $\text{KInCo}_4\text{As}_4$ отсутствует сжатие зон на уровне Ферми, которое становится заметно при

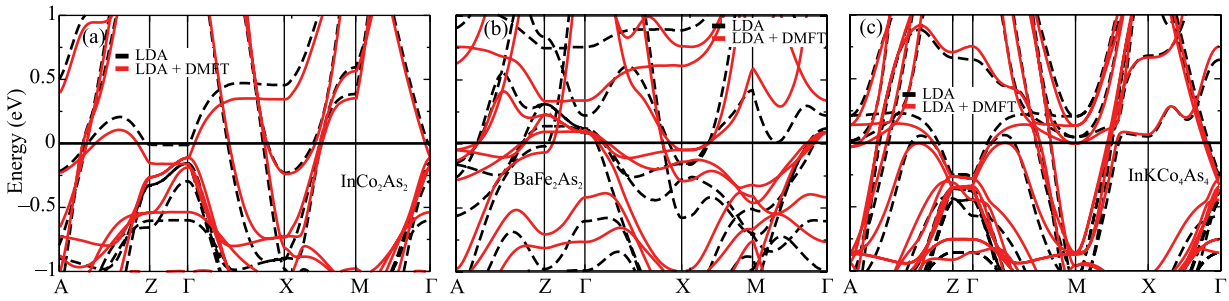


Рис. 2. (Цветной онлайн) Зонная структура: (a) – $\text{KInCo}_4\text{As}_4$; (b) – BaFe_2As_2 ; (c) – InCo_2As_2 соединений, полученная в LDA (черные пунктирные линии) и LDA + DMFT (красные сплошные линии). Уровень Ферми – ноль энергии

энергиях ниже -0.5 эВ. Небольшим, но существенным, на наш взгляд, изменением зонной структуры за счет учета электрон-электронных корреляционных эффектов является смещение зон вблизи уровня Ферми в середине $\Gamma - M$ направления и в точке M . Вследствие этого смещения верхняя и нижняя часть зон попадает прямо на уровень Ферми. За счет этого при небольшом дырочном или электронном допировании будет меняться топология поверхности Ферми (переходы Лифшица).

На рисунке 3 представлены поверхности Ферми для InCo_2As_2 (панель (a)) и $\text{KInCo}_4\text{As}_4$ (панель (b)), полученные в LDA. Практически все крупные листы Ферми поверхности в InCo_2As_2 на уровне Ферми сосредоточены в области угла зоны Бриллюэна. Практически все листы поверхности Ферми для InCo_2As_2 имеют явно выраженную k_z зависимость. В системе $\text{KInCo}_4\text{As}_4$, где в кристаллической структуре чередуются слои K и In, поверхность Ферми становится практически квазидвумерной (рис. 3b). Это так же можно увидеть в зонной структуре в том, что направления $\Gamma - M$ и $Z - A$ вблизи уровня Ферми практически идентичны (рис. 2c), в отличие от InCo_2As_2 (рис. 2a). Так же видно, что поверхность Ферми для $\text{KInCo}_4\text{As}_4$ имеет вид, схожий с поверхностью Ферми железосодержащих сверхпроводников, однако форма листов поверхности Ферми около Γ -точки ближе к прямоугольной призме, чем к цилиндру. Такая форма листов поверхности Ферми может способствовать возникновению нестинга. В то же время все листы поверхности Ферми около Γ -точки являются электронными, в отличие от BaFe_2As_2 , где возле Γ точки сосредоточены дырочные листы поверхности Ферми. Таким образом, можно сделать вывод, что экспериментальный синтез образцов $\text{KInCo}_4\text{As}_4$ является интересным для проверки реализации сверхпроводимости.

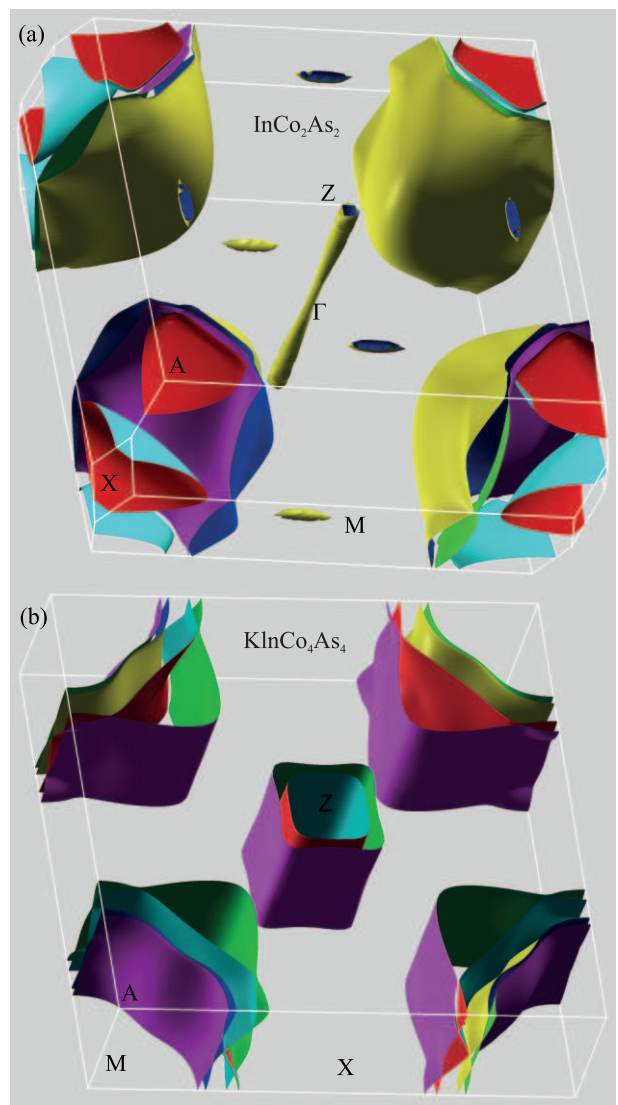


Рис. 3. (Цветной онлайн) Поверхности Ферми, вычисленные в LDA: (a) – InCo_2As_2 ; (b) – $\text{KInCo}_4\text{As}_4$

Электронные корреляции в LDA + DMFT практически не изменяют вид поверхности Ферми

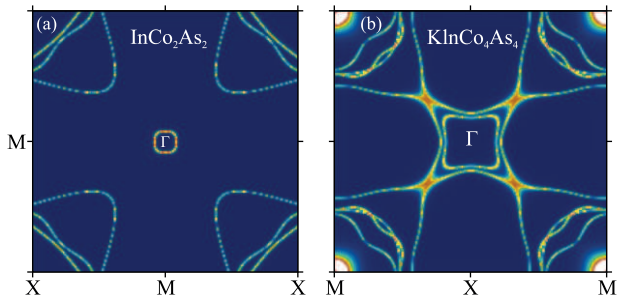


Рис. 4. (Цветной онлайн) Карта поверхности Ферми в плоскости $k_z = 0$ для InCo_2As_2 (a) и $\text{KInCo}_4\text{As}_4$ (b), вычисленная в LDA + DMFT

в InCo_2As_2 (рис. 4a). В случае $\text{KInCo}_4\text{As}_4$ в LDA + DMFT расчете происходит изменение двух листов поверхности Ферми с наибольшим объемом, за счет смещения зон в середине направления Γ – M . В результате данные листы поверхности Ферми касаются друг друга (рис. 4b). При этом остальные листы остаются практически неизменными.

Проявление электронных корреляций хорошо видно в спектральной функции, полученной в LDA + DMFT расчете (рис. 5). Начиная от -0.8 эВ и ниже по энергии, время жизни квазичастичных состояний для InCo_2As_2 и $\text{KInCo}_4\text{As}_4$ уменьшается. В то же время вблизи уровня Ферми находятся хорошо определенные квазичастичные зоны. Аналогичное проявление корреляций наблюдали для BaCo_2As_2 ниже -0.8 эВ [16]. Тогда как для железосодержащих сверхпроводников (в том числе и для BaFe_2As_2) проявление электронных корреляций приводит к уширению всех ветвей Fe-3d спектральной функции, в том числе и на уровне Ферми [24].

На рисунке 6 представлена спектральная функция с явно выделенными орбитальными вкладами для InCo_2As_2 и $\text{KInCo}_4\text{As}_4$: (a) – Co- $3d_{x^2-y^2}$; (b) – Co- $3d_{z^2}$; (c) – Co- $3d_{xy}$; (d) – Co- $3d_{yz}$, вычисленная в LDA + DMFT. Вблизи уровня Ферми ярко выражены Co- $3d_{x^2-y^2}$ состояния с относительно плоскими зонами в направлении Γ – M . Остальные орбитальные состояния сосредоточены вблизи -1 эВ, формируя пик в плотности Co-3d состояний (рис. 1).

3. Заключение. В данной работе проведен сравнительный анализ электронной структуры потенциальных изоструктурных аналогов железных сверхпроводников InCo_2As_2 и $\text{KInCo}_4\text{As}_4$, полученных в рамках DFT/LDA и LDA + DMFT подходов, и с аналогичными результатами родительской высокотемпературной сверхпроводящей системы BaFe_2As_2 . Зонная структура InCo_2As_2 вблизи уровня Ферми существенно отличается от зонной структуры

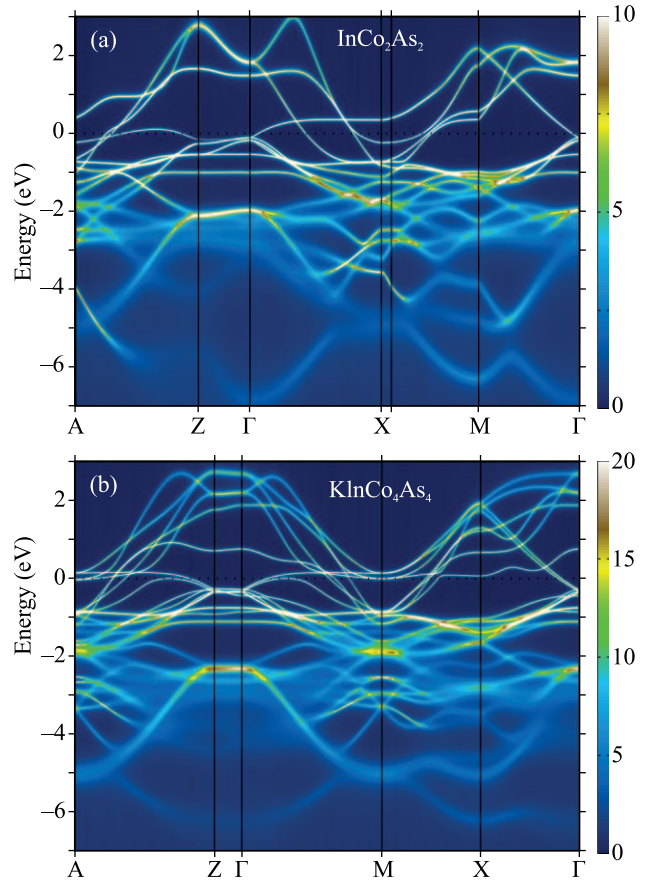


Рис. 5. (Цветной онлайн) Спектральная функция для InCo_2As_2 (a) и $\text{KInCo}_4\text{As}_4$ (b), полученная в LDA + DMFT. Ноль энергии соответствует уровню Ферми

BaFe_2As_2 , при этом качественно схожа с ранее детально изученным BaCo_2As_2 . Для $\text{KInCo}_4\text{As}_4$ зоны вблизи уровня Ферми и поверхность Ферми напоминают BaFe_2As_2 , что косвенно указывает на возможную реализацию сверхпроводимости в $\text{KInCo}_4\text{As}_4$.

Показано, что влияние электронных корреляционных эффектов (с достаточно большими величинами параметров взаимодействия) на уровне Ферми минимально, и проявляется при отходе от уровня Ферми. При этом корреляционные эффекты приводят к заметному смещению и сжатию спектра ниже -0.8 эВ. За счет электронных корреляций происходит перестройка поверхности Ферми в $\text{KInCo}_4\text{As}_4$ в Γ – M направлении зоны Бриллюэна. Также обнаружено, что в системе $\text{KInCo}_4\text{As}_4$ при относительно небольшом дырочном или электронном допировании возможны переходы Лифшица. Синтез рассмотренных в данной работе соединений InCo_2As_2 и $\text{KInCo}_4\text{As}_4$ послужит важным шагом в изучении сверхпроводимости в данном классе материалов.

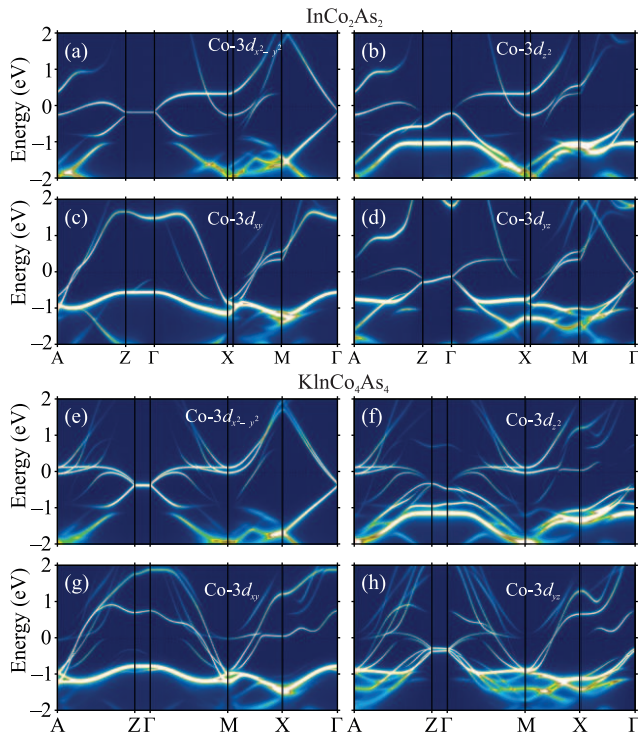


Рис. 6. (Цветной онлайн) Орбитальные вклады в спектральную функцию для InCo_2As_2 (верхняя панель) и $\text{KInCo}_4\text{As}_4$ (нижняя панель): (a) – $\text{Co-}3d_{x^2-y^2}$; (b) – $\text{Co-}3d_{z^2}$; (c) – $\text{Co-}3d_{xy}$; (d) – $\text{Co-}3d_{yz}$, полученные на основе LDA + DMFT

Работа Н. С. Павлова, К. С. Первакова, И. А. Некрасова выполнялась при частичной поддержке гранта Российского научного фонда (грант # 21-12-00394). Работа И. Р. Шейна выполнялась при частичной поддержке Госзадания # АААА-А19-119031890025-9.

1. М. В. Садовский, *Успехи физических наук* **178**, 1243 (2008).
2. G. R. Stewart, *Успехи физических наук* **83**, 1589 (2011).
3. М. В. Садовский, *Успехи физических наук* **186**, 1035 (2016).
4. Т. Е. Кузьмичева, С. А. Кузьмичев, *Письма в ЖЭТФ* **114**, 685 (2021).
5. К. В. Фролов, И. С. Любутин, Д. А. Чареев, М. Абдель-Хафиз, *Письма в ЖЭТФ* **110**, 557 (2019).
6. Т. Е. Кузьмичева, С. А. Кузьмичев, И. В. Морозов, С. Вурмель, Б. Бюхнер, *Письма в ЖЭТФ* **111**, 388 (2020).
7. Е. И. Мальцев, В. А. Власенко, О. А. Соболевский, А. В. Садаков, Б. И. Массалимов, К. С. Перваков, *Письма в ЖЭТФ* **111**, 475 (2020).

8. Т. Е. Кузьмичева, С. А. Кузьмичев, К. С. Перваков, В. А. Власенко, *Письма в ЖЭТФ* **112**, 822 (2020).
9. M. Neupane, Ch. Liu, S.-Y. Xu, Y.-J. Wang, N. Ni, J. M. Allred, L. A. Wray, N. Alidoust, H. Lin, R. S. Markiewicz, A. Bansil, R. J. Cava, and M. Z. Hasan, *Phys. Rev. B* **85**, 094510 (2012).
10. И. А. Некрасов, М. В. Садовский, *Письма в ЖЭТФ* **10**, 687 (2014).
11. A. S. Sefat, D. J. Singh, R. Jin, M. A. McGuire, B. C. Sales, and D. Mandrus, *Phys. Rev. B* **79**, 024512 (2009).
12. Ch. Ganguli, K. Matsubayashi, K. Ohgushi, Y. Uwatoko, M. Kanagaraj, and S. Arumugam, *Materials Research Bulletin* **48**, 4329 (2013).
13. B. Q. Song, M. C. Nguyen, C. Z. Wang, P. C. Canfield, and K. M. Ho, *Physical Review Materials* **2**, 104802 (2018).
14. A. Iyo, K. Kawashima, T. Kinjo, T. Nishio, Sh. Ishida, H. Fujihisa, Y. Gotoh, K. Kihou, H. Eisaki, and Y. Yoshida, *J. Am. Chem. Soc.* **138**, 3410 (2016).
15. D. Mou, T. Kong, W. R. Meier, F. Lochner, L.-L. Wang, Q. Lin, Y. Wu, S. L. Bud'ko, I. Eremin, D. D. Johnson, P. C. Canfield, and A. Kaminski, *Phys. Rev. Lett.* **117**, 277001 (2016).
16. A. van Roekeghem, Th. Ayral, J. M. Tomczak, M. Casula, N. Xu, H. Ding, M. Ferrero, O. Parcollet, H. Jiang, and S. Biermann, *Phys. Rev. Lett.* **113**, 266403 (2014).
17. K. Held, I. A. Nekrasov, N. Blümer, V. I. Anisimov, and D. Vollhardt, *Int. J. Mod. Phys.* **15**, 2611 (2001).
18. G. Kotliar, S. Y. Savrasov, K. Haule, V. S. Oudovenko, O. Parcollet, and C. A. Marianetti, *Rev. Mod. Phys.* **78**, 865 (2006).
19. P. Blaha, K. Schwarz, F. Tran, R. Laskowski, G. K. H. Madsen, and L. D. Marks, *J. Chem. Phys.* **152**, 074101 (2020).
20. G. Pizzi, V. Vitale, R. Arita et al. (Collaboration), *J. Phys. Condens. Matter* **32**, 165902 (2020).
21. E. Gull, A. J. Millis, A. I. Lichtenstein, A. N. Rubtsov, M. Troyer, and Ph. Werner, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 349 (2011).
22. <http://www.amulet-code.org><http://www.amulet-code.org>
23. S. L. Skornyakov, V. I. Anisimov, and D. Vollhardt, *Phys. Rev. B* **86**, 125124 (2012).
24. Ph. Werner, M. Casula, T. Miyake, F. Aryasetiawan, A. J. Millis, and S. Biermann, *Nature Phys.* **8**, 331 (2012).
25. I. V. Solovyev, P. H. Dederichs, and V. I. Anisimov, *Phys. Rev. B* **50**, 16861 (1994).
26. M. T. Czyżyk and G. A. Sawatzky, *Phys. Rev. B* **49**, 14211 (1994).
27. V. I. Anisimov, I. V. Solovyev, M. A. Korotin, and M. T. Czyżyk, and G. A. Sawatzky, *Phys. Rev. B* **48**, 16929 (1993).

28. H. J. Vidberg and J. W. Serene, *J. Low Temp. Phys.* **29**, 179 (1977).
29. M. Jarrell and J. E. Gubernatis, *Phys. Rep.* **269**, 133 (1996).
30. N. Xu, P. Richard, A. van Roekeghem, P. Zhang, H. Miao, W.-L. Zhang, T. Qian, M. Ferrero, A. S. Sefat, S. Biermann, and H. Ding, *Phys. Rev. X* **3**, 011006 (2013).
31. I. A. Nekrasov, Z. V. Pchelkina, and M. V. Sadovskii, *Pis'ma v ZhETF* **88**, 155 (2008).