

**ВПЛИВ ФОРМИ ГУСТИНИ СТАНІВ НА ОРБІТАЛЬНЕ
ВПОРЯДКУВАННЯ В МОДЕЛІ ДВОКРАТНО ВИРОДЖЕНОЇ
ЕНЕРГЕТИЧНОЇ ЗОНИ**

Механізми орбітального впорядкування та їх взаємозв'язок із конкуруючими ефектами стабілізації феромагнетизму чи надпровідного стану [1] в сполуках із сильними електронними кореляціями досі залишаються нез'ясованими. Нещодавно в підході динамічного середнього поля було досліджено орбітально-селективний перехід Мотта-Габбарда [2]. Раніше на основі підходу функціонала густини було обгрунтовано [3] роль орбітального впорядкування в дірковій підсистемі у стабілізації феромагнітного стану в системі Cs_2AgF_4 . У обидвох випадках йдеться про системи з специфічними густинами електронних станів. Разом з тим, відомим є ефект орбітального впорядкування в магнетиті під дією тиску [4], для коректного опису якого врахування форми густини станів є принципово важливим. В цій роботі досліджено роль форми густини електронних станів у стабілізації орбітального впорядкування в частково заповненій енергетичній зоні з сильними міжелектронними кулонівською та обмінною гундівською взаємодіями. Ефективний гамільтоніан отримано з використанням методу канонічного перетворення, раніше розвинутого для систем такого типу [5]. З використанням процедури проектування [6] у рівняннях руху для функцій Гріна було розраховано квазічастинковий енергетичний спектр та отримано систему рівнянь для параметра орбітального впорядкування та хімічного потенціалу моделі, яку розв'язано числовими методами. Застосований підхід дозволяє досліджувати вплив параметрів, які визначають форму незбуреної густини електронних станів, концентрації електронів, параметра ефективної обмінної взаємодії на температуру фазового переходу та зробити висновок про принципову важливість врахування форми густини станів для коректного опису орбітального впорядкування в мотт-габбардівських системах.

Література:

1. Zegrodnik M., Spalek J., Bunemann J. *New Journal of Physics*. – 2013. – Vol. 15. – 073050.
2. Kita T., Ohashi T., Kawakami N. *Journal of Physics: Conference Series*. – 2012. – Vol. 391. – 012157.
3. Hua Wu and Khomskii D.I. *Phys. Rev. B*. – 2007. – Vol. 76. – 155115.
4. Аплеснин С.С., Баринов Г.И. *Физика твердого тела*. – 2007. – Т. 49. – 1858-1861.
5. Kramar O., Didukh L., Skorenkyu Yu. *Journal of Physics: Conference Series*. – 2012. – Vol. 391. – 012158.
6. Didukh L. *Acta Physica Polonica B*. – 2000. – Vol.31. – 3097-3133.