

СПИН-ОРБИТАЛЬНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ В СИСТЕМАХ КВАЗИОДНОМЕРНЫХ ЦЕПОЧЕК $Ba_3Cu_3Sc_4O_{12}$ И $Ba_3Cu_3In_4O_{12}$

Бадртдинов Д.И.^{*}, Мазуренко В.В.

Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н.Ельцина,
г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: reason2205@yandex.ru

SPIN-ORBIT COUPLING IN THE SYSTEMS OF QUASI ONE DIMENSIONAL CHAINS $Ba_3Cu_3Sc_4O_{12}$ AND $Ba_3Cu_3In_4O_{12}$

Badrtdinov D.I.^{*}, Mazurenko V.V.

Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

Spin-orbit coupling plays significant role in formation of non-trivial magnetic structure in modern materials. In this work the anisotropic characteristics of low-dimensional magnets $Ba_3Cu_3Sc_4O_{12}$ and $Ba_3Cu_3In_4O_{12}$ were studied by using Wannier functions techniques, quantum Monte Carlo simulations and modeling the spectra of neutron diffraction. As a result, the ground states were found, which are in consistent with experimental features.

Спин-орбитальное взаимодействие является причиной возникновения многих интересных особенностей в конденсированных средах. Особенно можно отметить его фундаментальную роль в низкоразмерных системах, в которых сочетание эффектов фрустрации и анизотропии приводят к нетривиальным магнитным упорядочениям.

Соединения $Ba_3Cu_3Sc_4O_{12}$ и $Ba_3Cu_3In_4O_{12}$ представляют собой системы квазиодномерных цепочек купратов, состоящих из плакеток CuO_4 . Экспериментально было выяснено, что в системах существует дальний антиферромагнитный порядок [1], а качестве основного состояния может выступать неколлинеарная магнитная структура, возникающая из-за спин-орбитального взаимодействия [2]. Подтверждение или опровержение этих данных возможно последующим построением и решением микроскопической магнитной модели первопринципными методами.

На первом этапе данной работы были рассчитаны электронные структуры в рамках функционала электронной плотности, получены параметры изотропных обменных взаимодействий между атомами меди в формализме функций Ванье. Анизотропные характеристики были оценены по теории возмущения. Затем построенные спиновые модели были решены в классическом пределе, а также квантовым методом Монте-Карло (QMC). Полученные термодинамические характеристики, такие как магнитная восприимчивость, значения температур фазовых переходов находятся в хорошем согласии с экспериментом. Анализ анизотропии моделей, в свою очередь, позволяет предположить, что системы представляют собой совокупность ферромагнитных цепочек с дальним антиферро-

магнитным порядком, а спины у атомов меди в пределах цепочки направлены по оси z (Рис.1, слева). Эти данные подтверждаются картинками намагниченности и спектрами нейтронного рассеяния (Рис.1, справа).

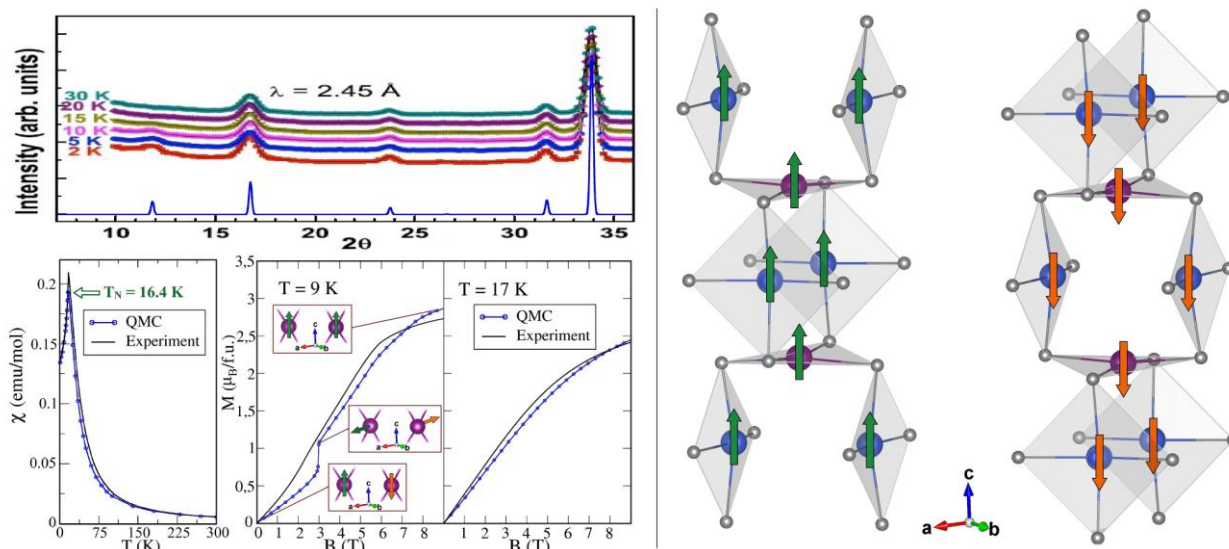


Рис.1 Слева - спектры нейтронного рассеяния, магнитной восприимчивости и картины намагниченности в сравнении с экспериментами. Справа - вид основного состояния квазиодномерных систем.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ: №14-12-00306

1. B. Koteswararao et al., J.Phys.:Condens.Matter **24**, 236001(2012).
2. O.S. Volkova et al., Phys. Rev. B **85**, 104420 (2012).

ВНУТРЕННИЕ ПОТЕРИ ЭНЕРГИИ БЫСТРЫХ ЛЁГКИХ ИОНОВ ПРИ ПРОХОЖДЕНИИ ЧЕРЕЗ ВЕЩЕСТВО

Гусаревич Е.С.*

Северный (Арктический) федеральный университет имени М.В. Ломоносова,
г. Архангельск, Россия

*E-mail: gusarevich@gmail.com

INTERNAL ENERGY LOSSES OF FAST LIGHT IONS WHEN PASSING THROUGH THE MATTER

Gusarevich E.S.*

Northern (Arctic) Federal University named after M.V. Lomonosov, Arkhangelsk, Russia

On the basis of the eikonal approximation the energy losses of fast light ions at collisions with atoms are considered. It is shown that the charge of the ion's nucleus has a noticeable effect on the value of internal stopping power due to the excitation of the electron shells of the ion at low impact velocity.