

что оба результат никак не зависит от теплофизических свойств жидкости.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 16-31-00255 мол_а.

1. Присняков В.Ф., Кипение, Наук.думка (1988).
2. Plesset M.S., J. Appl. Phys., 25, 96 (1954).
3. Martyushev L. M. and Birzina A. I., J. Phys. Condens. Matter 20, 465102 (2008).

INFLUENCE OF A SPIN-ORBIT EXCITON ON THE MAGNETIC ORDERING IN Sr_2IrO_4

Dikushina E.A. *, Avvakumov I.L.

Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

*E-mail: dikushina-lena@rambler.ru

Sr_2IrO_4 is a 5d transition-metal oxide. Unlike other compounds with similar electronic structure Sr_2IrO_4 has the Mott gap – it insulates instead of being metallic. The Mott gap in Sr_2IrO_4 is explained as splitting of t_{2g} -band into a full quartet and a half-filled doublet under strong spin-orbital coupling of 5d-electrons [1]. This compound can be described by effective total angular momentum (or isospin) S -states, which take into consideration spin-orbit coupling and a large crystal field. Sr_2IrO_4 behaves like a quasi-2D Heisenberg antiferromagnet with isospin $S = 1/2$.

Here we use computer simulation to explore excitonic states in Sr_2IrO_4 . Though the spin-orbit exciton has no charge, its hoppings misalign isospins and change the magnetic ordering [1,2]. The goal of this study is to model a single charge-neutral exciton motion through antiferromagnetically ordered Sr_2IrO_4 and qualitatively evaluate changes in system's characteristics.

In this simulation Sr_2IrO_4 is represented as a finite square lattice with Ir ions on sites. $S = 3/2$ is for an excited ion and $S = 1/2$ isospins correspond to ions with ground states [1,3]. This modelling includes magnetic interactions and exciton hopping.

Two models are compared – Ising and Heisenberg models – for describing a single spin-orbit exciton moving in the antiferromagnetic background.

The Hamiltonian with exciton hopping and anisotropic exchange coupling can be written as

$$\hat{H} = J_{\parallel} \sum_{\langle ij \rangle} S_i^z S_j^z + J_{\perp} \sum_{\langle ij \rangle} S_i^+ S_j^- - W \sum_{\langle ij \rangle} X_i^{\dagger} X_j, \quad (1)$$

where J_{\parallel}, J_{\perp} are exchange coupling constants, S_i^z an isospin projection operator, S_i^+, S_j^- are raising and lowering operators for isospin projections, X_i^{\dagger}, X_j denote exciton creation and annihilation operators. The hopping parameter $W = 2t^2/U$ is defined by the intraorbital Coulomb repulsion U and hopping integral t . $J_{\perp} = 0$ corresponds to Ising model, while for Heisenberg model $J_{\perp} = J_{\parallel}$.

To model such a system we use Stochastic Series Expansion (SSE) [4] – one of quantum Monte-Carlo methods – in which the configuration space consists of the space of spin vectors and space of operator sequences. The algorithm we obtained calculates spin structure factors, which show what arrangements of spins are like for various parameters, and dynamic characteristics of Sr_2IrO_4 for both models.

Comparison of qualitative results of these simulations shows which model suits best for describing propagation of an orbital excitation in Sr_2IrO_4

1. Kim B.J., Jin H., Moon S. J. et al., Phys.Rev.Lett. 101 076402 (2008).
2. Kim J., Daghofer M., Said A.H. et al., Nature Communications 5 4453 (2014).
3. Kim J., Casa D., Upton M.H., Gog T. et al., Phys.Rev.Lett. 108 177003 (2012).
4. Sandvik A.W., Kurkijärvi J., Phys.Rev.B. 43 5950 (1991).

ПОЛЯРИЗАЦИОННАЯ ПОПРАВКА В КЛАССИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ ПОТЕРЬ ЭНЕРГИИ БЫСТРЫМИ ЗАРЯЖЕННЫМИ ЧАСТИЦАМИ

Макарова К.А.*

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

*E-mail: ksenya931408@yandex.ru

THE POLARIZATION CORRECTION TO THE CLASSICAL THEORY OF ENERGY LOSSES OF FAST CHARGED PARTICLES

Makarova K.A.*

Northern (Arctic) Federal University, Arkhangelsk, Russia

Using the apparatus of classical physics, the polarization of the received amendment by the collision of fast charged particles with atoms of matter

При прохождении заряженных частиц через вещество, в том числе и твёрдое, происходят потери энергии этой частицы на возбуждение и ионизацию атомов вещества. В настоящее время общепринятой теорией по потерям энергии является теория Бете-Блоха [1]. В этой теории существует несколько поправок к формуле Бете-Блоха, одна из которых – поправка Баркаса [2] (поляризационная поправка). В настоящее время единой теории по расчёту поправки Баркаса нет и существует множество приближённых выражений. В представленной работе найдена поляризационная поправка в рамках классической физики. Классическая теория потерь энергии – теория Бора [3], но в ней не присутствует поляризационная поправка, что говорит о грубых приближениях в теории Бора. Известно, что подход, предложенный Н. Бором по расчёту ионизационных потерь энергии [3], основан на выделении двух областей параметра удара. Первая об-