

ВІДГУК

офіційного опонента на дисертаційну роботу *Краснова Володимира Олександровича «Термодинаміка та енергетичні спектри ґраткових бозе-фермі систем із сильними кореляціями»*, подану на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.02 – теоретична фізика

Синтез і вивчення фізичних особливостей багатокомпонентних систем є одним з основних напрямків експериментальних досліджень у сучасній фізиці твердого тіла. Інтерпретація експериментальних даних вимагає розробки нових методів і теоретичних розрахунків для складних багаточастинкових систем, що можливе лише у рамках багатопараметричних моделей, наближених до реальних об'єктів. Темою дисертаційної роботи В.О.Краснова є дослідження варіацій термодинамічних характеристик і структури електронних спектрів у складних системах внаслідок взаємного впливу бозе- і фермі-підсистем та кристалічної ґратки у різних режимах, які визначаються морфологією таких систем і умовами експерименту. Це важливе завдання, чим визначається актуальність роботи, її наукова та практична цінність.

Структура дисертації традиційна - вона складається зі вступу і 7-ми розділів, висновків, списку використаних джерел та додатків.

У вступі обґрунтовано актуальність теми дисертаційної роботи, сформульовано мету і основні завдання роботи, обґрунтовано вибір методів досліджень, вказано наукову новизну та практичну цінність.

Перший розділ є оглядом експериментальних та теоретичних робіт, предметом яких є термодинамічні характеристики та енергетичні спектри двокомпонентних бозе- та фермі-систем на ґратках. Описано основні моделі: 2-параметричну Бозе-Хаббарда та 4-параметричну Бозе-Фермі-Хаббарда, методи їх дослідження та області застосування.

Моделі, які використовуються в роботах дисертанта, є багатопараметричними узагальненнями стандартної псевдоспін-електронної моделі. Другий розділ дисертації присвячено вивченню особливостей електронного спектру традиційної псевдоспін-електронної моделі, що описує тунельне розщеплення, псевдоспін-електронну взаємодію та поле асиметрії локального ангармонічного потенціалу, а також електронні переходи між вузлами ґратки, на яких знаходяться ангармонічні потенціальні ями. Розглянуто як випадок скінченного відштовхування електронів на вузлі, так і асимптотично великого. За допомогою діагоналізації одновузлової частини гамільтоніана в термінах операторів Хаббарда, використанням рівнянь руху для функцій Гріна та ефективного гамільтоніана досліджено енергетичний спектр у наближенні двох близько розташованих підзон. Досліджено енергетичні електронні рівні та енергії електронних переходів як функції величини поля асиметрії при фіксованих значеннях інших параметрів моделі. Виявлено критичне значення параметра взаємодії електронів на одному вузлі, при якому у густо-

ні станів виникає щілина. Досліджено залежність критичного значення кулонівського відштовхування на вузлі від величини поля асиметрії та параметра тунелювання, а також критичного значення параметра тунелювання від поля асиметрії.

Встановлено залежність меж енергетичних зон від поля асиметрії, від сталої псевдоспін-електронного зв'язку та сталої тунелювання. Показана можливість суттєвої перебудови електронного спектру, а саме появи додаткових енергетичних зон.

Важливим висновком другого розділу є твердження, що в системах з локальним ангармонізмом коливань ґратки перехід метал – діелектрик може виникнути під впливом ангармонічної підсистеми, чого можна досягти, наприклад, в експериментах зміною зовнішнього тиску.

Наявність псевдоспін-електронної взаємодії у традиційній псевдоспін-електронній моделі дозволяє модифікувати її і застосувати до опису процесу інтеркаляції в кристалах. У третьому розділі дисертаційної роботи досліджено термодинаміку інтеркаляції іонів у кристалі в рамках моделі, яка враховує електрон-іонну взаємодію і переходи іонів та електронів між вузлами ґратки. У наближенні середнього поля одержується гамільтоніан двох взаємодіючих підґраток. Він легко діагоналізується, в результаті чого одержується система рівнянь, що визначає концентрації електронів та іонів, а також термодинамічний потенціал моделі, мінімізація якого дає термодинамічно стійкі стани моделі. Розв'язки одержаної системи рівнянь знайдено чисельним методом за допомогою модельної густини станів електронної підсистеми. У режимі заданого значення хімічного потенціалу електронів досліджено залежність концентрації іонів від їхнього хімічного потенціалу (параметра h) при заданих значеннях інших параметрів моделі (сталого електрон-іонного зв'язку, параметра тунелювання іонів, півширини електронної зони), а також температури. Детально досліджені фазові переходи для двох типів інтеркалянта – акцепторного та донорного типу. Побудовано фазові діаграми у площинах (h, Ω) , (h, μ) та (T, h) . На основі аналізу фазових діаграм дисертантом встановлена важлива роль тунелювання іонів, електрон-іонної взаємодії та величини заповнення електронних станів. Ці чинники є головними у формуванні фазових станів моделі. Встановлено, що крім просторово-однорідної фази, може існувати модульована фаза з періодичним просторовим розподілом іонів, а фазові переходи між ними можуть бути як першого, так і другого роду. Дисертантом досліджено області існування цих двох фаз та лінії фазових переходів. Крім того, встановлена можливість існування фази, у якій $\langle S^z \rangle \neq 0$, що спричиняється великими значеннями параметра тунелювання. Висновки про існування різних фазових станів мають важливе прикладне значення і стосуються створення ефективних джерел електричного струму.

У четвертому розділі досліджено рівноважні стани та фазові переходи у моделі Бозе-Фермі-Хаббарда, яка, на мою думку, відповідає системі бозонів з домішкою ферміонів. Вивчається саме вплив домішкової підсистеми на формування характеристик суміші. У наближенні нерухомих ферміонів розрахована бозонна функція Гріна у наближенні хаотичних фаз, проаналізовано фазові стани і вплив ферміонів на перехід

до надплинної фази при заданих значеннях параметрів тунелювання бозонів, констант зв'язку бозон - бозон, бозон - ферміон та температур. Зокрема досліджено зміну фазових діаграм на площині „півширина бозонної енергетичної зони – хімічний потенціал бозонів“ при різних концентраціях та хімічних потенціалах ферміонів. На основі фазових діаграм (T, μ) проаналізовано вплив ферміонів на стабільність напівпровідникової фази і переходу до надплинної фази. Показано, що концентрація ферміонів виступає регулятором цього переходу (зміни критичної температури). Цього слід було очікувати, такий феномен має не тільки наукову цінність.

У п'ятому та шостому розділах розглядаються фазові переходи в моделі Бозе-Фермі-Хаббарда у наближенні безспінових нерухомих ферміонів та жорстких бозонів з обмеженням на число заповнення ($n_i^b \leq 1$) та при відштовхувальній бозон-ферміонній взаємодії на вузлі. Складова, що описує тунелювання бозонів, враховується у наближенні середнього поля при умові, що $\langle b_i \rangle = \langle b_i^T \rangle = \varphi$ є параметром порядку для бозе-конденсату. У такому наближенні виконується діагоналізація гамільтоніана Хаббарда за допомогою унітарного перетворення, розраховується статистична сума у великому канонічному ансамблі, з умови мінімуму термодинамічного потенціалу одержується рівняння для параметра порядку φ . У п'ятому розділі досліджено залежність параметра порядку та термодинамічного потенціалу від хімічних потенціалів бозе- та фермі-підсистеми у границі абсолютного нуля температури, а в шостому розділі – при відмінних від нуля температурах. Показано, що структура фазових діаграм визначається хімічними потенціалами підсистем, сталою бозон-ферміонного зв'язку та параметром тунелювання бозе-підсистеми t_0 . Детально проаналізовано фазові (μ, μ') -діаграми та $(|t_0|, \mu)$ -діаграми. Найцікавішими результатами п'ятого розділу є встановлення того факту, що перехід до надплинної фази в деяких областях зміни хімпотенціалів може бути переходом 1-го роду (замість традиційного 2-го роду), а також існування двох типів бозе-конденсату з переходом 1-го роду між ними. Встановлено асиметрію фазових діаграм $(\mu, |t_0|)$, що є проявом впливу фермі-підсистеми, а також існування деякого критичного значення параметра тунелювання $|t_0|$, нижче від якого надплинна фаза не реалізується.

У шостому розділі у рамках цієї ж моделі вивчено фазові переходи при відмінних від нуля температурах. На відміну від досліджень інших авторів, тут розглядається режим заданих хімічних потенціалів обох підсистем. Крім фазових діаграм, досліджених у п'ятому розділі, тут проаналізовано також (T, μ) -діаграми. Все це дало змогу виявити особливості фазових станів та переходи між ними в умовах, що відповідають реальним експериментам. Оскільки особливості фазових переходів БФХ-моделі при $T \neq 0$ ще недостатньо вивчені, то результати цього розділу мають піонерський характер.

У попередніх розділах дисертаційної роботи змішана система бозонів і ферміонів розглядалась як система бозонів у полі нерухомих ферміонів. Розгляд бозон-ферміонної моделі був би неповним без рівноправного опису обох підсистем. Тому у сьомому розділі дисертації досліджується симетрична модель, де і бозонам, і ферміонам дозволено

тунелювання. Метою є вивчення ферміонного спектру, а точніше його змін під впливом бозонів при $T = 0K$, коли саме існування бозе-конденсату можна виявити експериментально за зміною спектру фермі-підсистеми, зокрема за особливостями густини ферміонних станів. Дисертантом розраховано густину ферміонних енергетичних рівнів при $T = 0K$ за наявності бозе-конденсату при заданих значеннях хімічних потенціалів обох підсистем та параметра тунелювання у бозе-підсистемі. Встановлено, що зсув ферміонного спектру (зумовлений взаємодією з бозонами) та поява нових підзон (зумовлених бозе-конденсатом) є характерними особливостями ферміонного спектру у змішаних системах при $T = 0K$.

Завдання, заплановані дисертанту, у повній мірі виконані ним, а мета роботи досягнута. Це вимагало доброї методичної підготовки та виконання дуже великого об'єму аналітичних та числових розрахунків. Результати роботи добре представлені, про що свідчить цілий альбом ілюстрацій. Результати, одержані дисертантом, узгоджуються з результатами інших авторів, отриманими за допомогою інших методів і наближень, у т.ч. з результатами наукового керівника зі співавторами, а також відповідають результатам експериментальних робіт. Найважливіші результати, вперше одержані дисертантом, стосуються актуальних аспектів теорії змішаних бозе-фермі-систем, зокрема впливу ангармонічних мод ґратки на електронний спектр і фазовий перехід метал – діелектрик; розподілу інтеркалянта і появи фаз з високою рухливістю іонів під впливом електронної підсистеми і тунелювання частинок; існування двох типів конденсату в моделі БФХ; особливостей фазових станів і переходів між ними в моделі жорстких бозонів і нерухомих ферміонів як при $T = 0K$, так і при відмінних від нуля температурах; впливу бозе-конденсату на зміну ферміонного спектру та інше.

Дисертаційна робота Краснова В.О. має очевидні перспективи застосування, дальшого розвитку та узагальнення. Практичне значення роботи також безсумнівне, бо одержані результати та висновки можуть використовуватись для інтерпретації результатів експериментальних досліджень, синтезу нових матеріалів та планування нових експериментів.

Результати, одержані дисертантом, опубліковані у 8 статтях провідних наукових журналів, апробовані на Міжнародних наукових конференціях (8 тез доповідей). Автореферат відображає основний зміст дисертаційної роботи. Список використаних джерел включає 145 найменувань праць за даним напрямком досліджень.

Для об'єктивної оцінки дисертаційної роботи Краснова В.О. хочу зробити такі зауваження:

1. Відсутня, так би мовити, критична самооцінка роботи, яка ґрунтується на використанні напівфеноменологічних моделей типу Хаббарда та застосуванні деяких наближень (наприклад, наближення середнього поля). Хоча ці моделі відбивають основні елементи структури та взаємодій реальних фізичних об'єктів.

2. Представлення гамільтоніанів моделей у безрозмірній формі (з усіма безрозмірними матричними елементами) безсумнівно зручне і тепер широко використовується.

Однак добре було б подати хоч би масштаб енергій, який застосовується для переходу до безрозмірної форми.

3. У дисертації є багато посилань на теоретичні та експериментальні роботи інших дослідників. Проте це виконано в дуже загальній формі, без аналізу конкретних відмінностей результатів дисертанта від результатів інших авторів, не висвітлено переваг методів та результатів автора над іншими дослідженнями.

Зроблені зауваження не знижують загальний високий рівень дисертаційної роботи Краснова В.О. і не можуть впливати на загальну оцінку роботи, яка є завершеним науковим дослідженням з актуальної тематики.

Вважаю, що за актуальністю, широтою охоплення основних задач, об'ємом виконаних досліджень, науковою новизною та практичною цінністю дисертаційна робота Краснова Володимира Олександровича „Термодинаміка та енергетичні спектри ґраткових бозе-фермі систем із сильними кореляціями“ безсумнівно відповідає вимогам до кандидатських дисертацій (або й перевищує їх) за спеціальністю 01.04.02 – теоретична фізика, а її автор заслуговує присудження наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук.

Доктор фізико-математичних наук,
професор кафедри астрофізики
Львівського національного
університету імені Івана Франка


Ваврух М.В.

Підпис проф. Вавруха М.В. з а с в і д ч у ю:

Вчений секретар Львівського
національного університету
імені Івана Франка, доцент



Грабовецька О.С.

5 грудня 2017 р.