

Відгук

офіційного опонента на дисертаційну роботу Баліги Василя Ярославовича «Ефекти фрустрацій у квантових антиферомагнетиках Гайзенберга на двошарових ґратках», подану на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук зі спеціальності 01.04.02 — теоретична фізика

Дисертаційну роботу Баліги Василя присвячено актуальним проблемам фізики магнетизму, а саме, дослідженню властивостей квантових антиферомагнетиків Гайзенберга на двовимірних ґратках у сильних магнітних полях в області низьких температур.

Обсяг дисертації становить 147 сторінок, із яких основний текст — 132 сторінок. Дисертація складається зі вступу, п'яти розділів, висновків та списку використаних джерел на 120 позицій.

У *вступі* обґрунтовано актуальність тематики досліджень, сформульовані мета дисертаційної роботи та задачі, які досліджувались; вказано на новизну та практичне значення результатів; чітко виділено особистий внесок здобувача.

Перший розділ присвячено детальному огляду літератури, що стосується фрустрованого магнетизму. На прикладі моделі Габарда на пилкоподібному ланцюжку (так звана модель Тасакі-Габарда), продемонстровано появу бездисперсійної одноелектронної зони з найнижчою енергією та її вплив на термодинаміку системи. Досліджено зміну властивостей системи при прикладанні невеликих полів. Встановлено зв'язок розглянутих у роботі моделей з експериментом, зокрема, наведено приклади реальних сполук з двошаровою структурою. Проаналізовано результати теоретичних робіт присвячених вивченню властивостей квантових і класичних двошарових магнетиків.

У *другому* розділі досліджено структуру основних станів антиферомагнітної моделі Гайзенберга в нульовому полі на квадратній та шестикутній двошарових ґратках. Цікаво, що побудовані за допомогою варіаційного підходу з використанням однопараметричних пробних хвильових функцій фазові діаграми, не лише якісно збігаються, але й дають достатньо добре кількісне узгодження з чисельними результатами інших авторів.

Третій розділ присвячено дослідженню термодинамічних властивостей магнітної сполуки синтезованої в 2014 році, яка описується анізотропною спін-1/2 XXZ антиферомагнітною моделлю на квадратній двошаровій ґратці. Для двох взаємоперпендикулярних напрямів прикладання магнітного поля побудовано ефективний опис, який ґрунтується на концепції локалізованих магніонів і використовує операторну теорію збурень. Показано, що спрощенні моделі, які описуються ефективними гамільтоніанами не є фрустрованими, а отже, дозволяють чисельний аналіз методом Монте Карло. Детальне порівняння результатів точної діагоналізації початкової моделі та результатів, отриманих у симуляціях ефективної моделі, дозволив передбачити фазовий перехід з впорядкуванням локалізованих магніонів.

У *четвертому* розділі представлено результати дослідження антиферомагнетика

Гайзенберга у сильному магнітному полі на двошаровій ґратці складеній з шестикутників. Знайдено умови, за яких виникає плоска зона в спектрі одномагнетонних збуджень; встановлено відповідність термодинамік системи невзаємодіючих локалізованих магнетонів та моделі класичного ґраткового газу жорстких шестикутників. Чисельний розрахунок термодинамічних функцій дозволив виявити ряд цікавих особливостей моделі: фазовий перехід лад-безлад, що належить до класу універсальності двовимірної моделі Ізінга, стрибкоподібну зміну намагніченості у випадку відхилень від «ідеальної фрустрації».

Останній розділ дисертації присвячено вивченню, з використанням вище описаної програми досліджень, термодинамічних властивостей моделі Гайзенберга на трикутній двошаровій ґратці. Завдяки властивим для трикутної ґратки фрустрації та конкуренції спін-спінових взаємодій, фазова діаграма системи виявилась багатшою, ніж у випадку моделі на шестикутній ґратці. Зокрема, показано, що знак міждиммерних взаємодій принципово впливає на поведінку фрустрованого квантового антиферромагнетика Гайзенберга. Ферромагнітна взаємодія проявляє себе при низьких температурах фазовим переходом першого роду, а при підвищенні температури фазовим переходом ізінгівського типу, в той час, як антиферромагнітна — характеризується цілим зоопарком переходів першого роду в основному стані та другого роду при низьких температурах.

Основні результати роботи викладені у загальних *висновках*.

Результати досліджень антиферромагнетизму на двошарових ґратках у дисертації Баліги Василя Ярославовича викладено послідовно та логічно. Їх обґрунтованість забезпечується використанням апробованих аналітичних та чисельних методик. Зокрема, в роботі ми знаходимо, як точні аналітичні вирази для статистичної суми систем кількох частинок, так і використання операторної теорії збурень для аналізу макроскопічних систем, приклади варіаційного розрахунку термодинамічних функцій, що в поєднанні з числовими методами точної діагоналізації та Монте Карло симуляцій дають повну картину властивостей досліджуваних систем.

Результати роботи опубліковано в п'яти журнальних статтях, одному препринті та у чотирьох тезах доповідей міжнародних конференцій і семінарів. Особливу увагу привертає високий рівень видань, де опубліковано результати: «Physical Review B», «Physica B», «Acta Physica Polonica A» — це журнали, котрі входять до наукометричних баз Web of Science та Scopus.

Незважаючи на високий рівень дисертаційної роботи Баліги Василя та вагомість отриманих у ній результатів, деякі питання та зауваження потребують уточнення.

1. У першому розділі дисертації не наводиться значення параметра перескоку t_1 , при якого побудовано графіки 1.2-1.6. Мабуть, це значення вибрано рівним одиниці, але про це варто було б вказати в тексті роботи, або підписах до рисунків.
2. Не зрозуміла необхідність переходу до великого канонічного ансамблю на сторінці 23, за умови, що вираз для вільної енергії вже попередньо розраховано. Мова не йде про розділи 4 та 5, де ефективним моделям зіставляються системи

- «жорстких» об'єктів чи класичного ґраткового газу, і там це є необхідністю.
3. На сторінці 74 дисертації, вперше вживається термін: «кристал локалізованих магنونів», який використовується в цьому і наступному розділах і ніде не пояснено його значення. На мою думку, вартувало б його пояснити.
 4. Серед найважливіших результатів роботи відзначається низка фазових переходів знайдених автором: впорядкування локалізованих магنونів для антиферромагнетика Гайзенберга на квадратній ґратці, перехід лад-безлад для шестикутної та чотири фазові переходи для трикутної ґраток, класи універсальності яких визначаються відповідними гамільтоніанами ефективних моделей. Зважаючи на те, що симетрійні властивості початкових моделей є переважно іншими, наскільки обґрунтована така класифікація?
 5. У тексті подекуди трапляються дрібні огріхи: позначення осі ординат на рисунку 1.5, на сторінці 103 вийшла плутанина з пробілами — «вищео бговорені», на сторінці 122 вжито «...вільну енергію...» замість «... великий термодинамічний потенціал...» та ін.

Автореферат дисертації повністю відображає зміст її основних положень та ідей.

Проте, висловлені до дисертації зауваження, принципово не впливають на загальну високу оцінку роботи, яка є оригінальним дослідженням і повністю відповідає вимогам «Порядку присудження наукових ступенів», а сам дисертант, Баліґа Василь Ярославович, безумовно заслуговує на присудження йому наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук зі спеціальності 01.04.02 — теоретична фізика.

Доцент кафедри теоретичної фізики
Львівського національного університету
імені Івана Франка,
кандидат фізико-математичних наук



В. С. Пастухов

Підпис В.С. Пастухова засвідчую
Вчений секретар
Львівського національного університету
імені Івана Франка,
кандидат філологічних наук, доцент



Грабовацька