

## ВІДГУК

офіційного опонента на дисертаційну роботу

**Гутака Тараса Ігоровича**

на тему «*Термодинаміка фрустрованих квантових спінових систем*»,

представлену на здобуття наукового ступеня доктора філософії

з галузі знань 10 – «Природничі науки»

за спеціальністю 104 — «Фізика та астрономія».

### **Актуальність теми дисертаційної роботи.**

Дисертаційна робота Гутака Тараса Ігоровича присвячена дослідженню термодинаміки квантових фрустрованих спінових систем. Фрустровані квантові спінові системи є серед найцікавіших об'єктів у фізиці магнетизму. Конкуренція обмінних взаємодій між локалізованими магнітними моментами може бути спричинена геометричною чи фізичною фрустрацією. Це приводить до різноманіття нових екзотичних фаз (наприклад, до стану квантової спінової рідини, спінового льоду, нематичного та інших багатопольярних станів в магнітному полі тощо). Проблема обчислення магнітних властивостей чи навіть класифікації магнітних станів таких систем ще далека від остаточного вирішення. Тематика роботи є безумовно актуальною.

**Обґрунтованість і достовірність наукових результатів, наукових положень і висновків**, представлених в дисертації, забезпечується задовільним співпадінням розрахунків автора як з експериментальними даними так і з теоретичними результатами, отриманими іншими методами, а також використанням в теоретичних розрахунках відомих підходів та теорій: методу матриці переносу, методу двочасових функцій Гріна і методу ентропії.

Також достовірність та обґрунтованість наукових результатів та висновків підтверджується їх апробацією на міжнародних науково-технічних конференціях та публікаціях у фахових українських та високорейтингових іноземних журналах, які індексуються базами даних Scopus та Web of Science.

**Серед найвагоміших вперше отриманих наукових результатів слід відмітити наступні:**

- для низки декорованих одновимірних моделей пояснена аномальна поведінка термодинамічних величин, яку в літературі називають псевдопереходами: гострий пік у температурній залежності кореляційної довжини, теплоємності і магнітної сприйнятливості, а також стрибкоподібна поведінка ентропії і внутрішньої енергії.
- Методом двочасових функцій Гріна обчислено термодинамічні і динамічні функції квантової  $S=1/2$  феромагнітної моделі Гайзенберга на ґратці пірохлору. Знайдено значення температури Кюрі, розрахована температурна залежність намагніченості і теплоємності в феромагнітній фазі та сприйнятливості в парамагнітній фазі. Обчислений динамічний структурний фактор узгоджується із результатами експериментів з непружного розсіяння нейтронів для сполуки  $Lu_2V_2O_7$ .
- Термодинаміку квантової  $S=1/2$  антиферомагнітної моделі Гайзенберга на ґратці пірохлору досліджено методом ентропії. Приблизно обчислено енергію основного стану, температурні залежності магнітної сприйнятливості та теплоємності.

### **Теоретичне та практичне значення одержаних результатів.**

Отримані результати можуть бути основою для подальших теоретичних студій фрустрованих квантових магнетиків, а також використані для аналізу експериментальних даних для пірохлорів, та квазідвовимірних систем. Окремі результати дослідження та їх виведення можна використати у спецкурсах для аспірантів.

### **Повнота викладу основних результатів дисертації в опублікованих працях.**

Результати роботи в повній мірі опубліковані в десяти працях:

- Чотири статті опубліковано в журналах, що включені до баз Scopus та Web of Science. В рейтингу Scimago вони входять: одна (Phys. Rev. B) до першого квартиля (Q1), дві (Physics Letters A, Physica A)

до другого квартиля (Q2) і одна (Condensed Matter Physics) до третього квартиля (Q3).

- Шість тез доповідей на міжнародних та вітчизняних наукових конференціях, які походились на території України.

### **Структура, оцінка мови, стилю та оформлення дисертації.**

Дисертація складається із вступу, розділу з оглядом літератури та двох розділів основної частини, у яких викладені результати досліджень дисертанта, а також загальних висновків, списку використаної літератури, 4 додатків, 46 рисунків та 3 таблиць. Робота викладена на 93 сторінках (повний обсяг разом з літературою та додатками — 124 сторінки), бібліографічний список містить 172 найменування публікацій у вітчизняних та закордонних виданнях.

Виклад основного тексту дисертації характеризується єдністю та змістовністю, науковий літературний стиль його написання забезпечує легкість сприйняття. Анотація та текст дисертації оформлено згідно вимог «Порядку проведення експерименту з присудження ступеня доктора філософії», затвердженого постановою Кабінету Міністрів України від 6 березня 2019 р. № 167.

У дисертації не виявлено ознак академічного плагіату, самоплагіату, фабрикації чи фальсифікації та інших порушень, які могли б ставити під сумнів самостійний характер виконання дисертаційного дослідження. Використані ідеї, результати і тексти інших авторів мають посилання на відповідне джерело.

Аналіз змісту **анотації** засвідчує її відповідність основним положенням, які висвітлені в дисертації. Анотація не містить інформації, яка відсутня в тексті дисертації.

У **Вступі** обґрунтовано актуальність дослідження, сформульовано мету роботи, визначено наукову новизну і практичну цінність отриманих результатів та наведено стисло характеристику дисертації.

У **першому розділі** проведено огляд літератури за темою дисертаційної роботи. Обговорено вплив геометричної фрустрації на поведінку спінових ґраткових систем в основному стані і при скінченних температурах. Обговорені моделі, які мають експериментальну реалізацію, і відкриті питання в теорії і

фізиці квантового магнетизму. Також обговорено наявні методи і сучасний стан комп'ютерних симуляцій. В кінці розділу сформульовано задачі, які розглядатимуться в дисертаційній роботі.

**Другий розділ** присвячений дослідженню низькотемпературних особливостей одновимірних декорованих драбинок і ланцюжків Ізинга. Вводяться поняття декорованої моделі Ізинга і приклади експериментальних сполук, які реалізують такі системи. Наведений короткий огляд проблеми низькотемпературних особливостей у одновимірних моделях Ізинга. Далі розглядаються двонога драбинка Ізинга із декорованими щаблями і ланцюжки Ізинга із квантовими декораціями. Встановлено зв'язок досліджених моделей із слідами критичної поведінки простого ланцюжка Ізинга при нульовій температурі та нульовому полі. Як наслідок, виявлено причину виникнення низькотемпературних особливостей і псевдокритичної поведінки. Розділ завершується висновками.

**Третій розділ** присвячений дослідженню впливу геометричної фрустрації на термодинаміку моделі Гайзенберга на гратці пірохлору. Розділ починається із вступної частини, де особливу увагу звернено на експеримент. В наступних підрозділах розглядаються властивості феромагнітної і антиферомагнітної моделі Гайзенберга на гратці пірохлору. Термодинаміка феромагнетика розглядається методом двочасових функцій Гріна в наближенні Тяблікова. Отримані результати для критичної температури, намагніченості, теплоємності і магнітної сприйнятливості порівнюються із симуляціями методом квантового Монте Карло і результатами інших методів. Обчислений динамічний структурний фактор порівнюється із даними непружного розсіяння нейтронів для сполуки  $Lu_2V_2O_7$ . Термодинаміка  $S=1/2$  антиферомагнетика Гайзенберга на гратці пірохлору досліджується методом ентропії. Інтерполяція між високотемпературними розвиненнями і низькотемпературною поведінкою для теплоємності та магнітної сприйнятливості проводиться в припущенні різних типів спектру низькоенергетичних збуджень системи. Отримана оцінка енергії основного стану порівнюється із нещодавніми симуляціями для скінченних систем: методом ренормалізаційної групи для матриці густини (

$N=128$  ) і методом багатозмінного варіаційного Монте Карло (  $N=256$  ). Розділ завершується висновками.

Дисертаційна робота завершується **Основними положеннями дисертації, Списком використаних джерел та Додатками.**

### **Дискусійні положення та зауваження щодо змісту дисертації.**

Загалом позитивно оцінюючи дисертаційну роботу Гутака Тараса Ігоровича, варто відзначити наступні недоліки у викладенні результатів роботи.

- Як співробітник Інституту Проблем Матеріалознавства я звернув увагу на друкарські помилки в хімічних формулах сполук, які реалізують модель Гайзенберга на ґратці пірохлору: у вступі при описі змісту третього розділу замість феромагнітної сполуки  $Lu_2V_2O_7$  приведена антиферомагнітна сполука  $Lu_2Mo_2O_5N_2$  . У підпису до Рис. 3.2 вказано  $Lu_4V_2O_7$  замість  $Lu_2V_2O_7$  , а в переліку основних положень дисертації та ж сполука зветься  $Li_4V_2O_7$  .
- Під час читання тексту другого розділу здається, що для кожної моделі є одна температура псевдопереходу  $T_p$ , поблизу якої спостерігається квазікритична поведінка теплоємності та сприйнятливості (рівняння (2.13) і (2.14)). Однак у підписі до Рис. 2.10 виникають позначення  $T^*$ ,  $T_c$  та  $T_\xi$  і виявляється, що температури, при яких теплоємність та сприйнятливість мають піки, відрізняються. Цей факт не розкрито як слід в тексті розділу.

### **Загальний висновок та оцінка дисертації.**

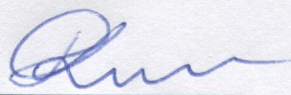
Дисертаційна робота Гутака Тараса Ігоровича на тему «Термодинаміка фрустрованих квантових спінових систем» є оригінальним, самостійним та завершеним науково-прикладним дослідженням, виконаним на високому науковому рівні та належним чином оформлена. Автор розв'язав декілька актуальних задач в галузі природничих наук, причому основні результати

роботи повною мірою опубліковані у високорейтингових міжнародних та українських профільних журналах.

Таким чином, я вважаю, що дисертаційна робота Гутака Т.І. на тему «Термодинаміка фрустрованих квантових спінових систем» відповідає галузі знань 10 – «Природничі науки», спеціальності 104 — «Фізика та астрономія» та всім вимогам Наказу Міністерства освіти і науки України №40 від 12 січня 2017 року «Про затвердження вимог до оформлення дисертації», та вимогами п.10 Тимчасового порядку присудження ступеня доктора філософії, затвердженого постановою Кабінету Міністрів України від 6 березня 2019 р. № 167, а її автор – Гутак Тарас Ігорович, заслуговує присудження наукового ступеня доктора філософії за спеціальністю 104 — «Фізика та астрономія».

Офіційний опонент –

доктор фізико-математичних наук,  
старший науковий співробітник,  
провідний науковий співробітник  
відділу функціональних оксидних матеріалів  
Інституту проблем матеріалознавства  
ім. І.М. Францевича НАН України



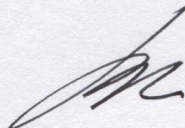
Роман КУЗЯН

Підпис доктора фіз.-мат. наук,

п.н.с. Р.О. Кузяна засвідчую

Учений секретар ІПМ НАНУ

к.ф.-м.н.



В.В. Картузов