

**Рішення щодо присудження  
наукового ступеня доктора наук**

Спеціалізована вчена рада Д 35.156.01 Інституту фізики конденсованих систем Національної академії наук України, м. Львів

(шифр ради, повне найменування наукової установи чи вищого навчального закладу III або IV рівня акредитації, підпорядкування (у родовому відмінку), місто) прийняла рішення щодо присудження наукового ступеня доктора фізико-математичних наук (галузь)

Верхоляку Тарасу Михайловичу (прізвище, ім'я, по батькові здобувача у давальному відмінку) на підставі прилюдного захисту дисертації «Квантові флуктуації та фрустрації у низьковимірних спінових моделях: точні результати і пертурбативний аналіз»

(назва дисертації) у вигляді рукопису \*/ з грифом (на правах рукопису, опублікованої монографії) (таємно, для службового користування) за спеціальністю 01.04.02 – теоретична фізика (шифр і назва наукової спеціальності за чинним переліком) «22» січня 2025 року, протокол № 3.

Верхоляк Тарас Михайлович 1972 року народження, (прізвище, ім'я, по батькові здобувача) громадянин України,

(вказується назва держави, громадянином якої є здобувач) освіта вища: закінчив у 1994 році Львівський національний університет імені Івана Франка (найменування навчального закладу)

за спеціальністю фізика . (за дипломом)

кандидат фізико-математичних наук з 1999 року,

Закінчив докторантуру 2013 р. при Інституті фізики конденсованих систем Національної академії наук України.

Працює старшим науковим співробітником відділу комп'ютерного моделювання багаточастинкових систем в Інституті фізики конденсованих систем Національної академії наук України, Львів з 2013 р. до теперішнього часу.

Дисертація виконана в Інституті фізики конденсованих систем Національної академії наук України, м. Львів

(найменування вищого навчального закладу III або IV рівня акредитації, наукової установи, відомче підпорядкування, місто)

Науковий консультант Держко Олег Володимирович, доктор фізико-математичних наук, професор, Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України, завідувач відділу квантової статистики

(прізвище, ім'я, по батькові, науковий ступінь, вчене звання, місце роботи, посада)

Здобувач має 52 опубліковані праці за темою дисертації, з них 0 праць написано без співавторів, 0 монографій, 31 стаття в наукових фахових виданнях, 0 авторських свідоцтв на винаходи, у тому числі:

1. Dynamic properties of quantum spin chains: Simple route to complex behavior / Taras Verkholyak, Oleg Derzhko, Taras Krokhmalkii, Joachim Stolze // *Phys. Rev. B*. — 2007. — Vol. 76. — P. 144418.
2. Verkholyak T., Strečka J. Quantum phase transitions in the exactly solved spin-1/2 Heisenberg–Ising ladder // *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*. — 2012. — Vol. 45, no. 30. — P. 305001.
3. Verkholyak T., Strečka J. Exact solution for a quantum spin-1/2 Ising-Heisenberg orthogonal-dimer chain with Heisenberg intradimer and Ising interdimer interactions // *Phys. Rev. B*. — 2013. — Vol. 88. — P. 134419.
4. Verkholyak T., Strečka J. Fractional magnetization plateaux of a spin-1/2 Heisenberg model on the Shastry-Sutherland lattice: effect of quantum XY interdimer coupling // *SciPost Phys*. — 2022. — Vol. 12. — P. 056.

Офіційні опоненти:

Гомонай Олена Василівна, доктор фізико-математичних наук, професор, старший науковий співробітник Інституту фізики Університету Йоганна Гутенберга (м. Майнц, Німеччина) дала позитивний відгук із зауваженням:

В роботі є певна неузгодженість у назвах гібридних моделей де взаємодія між спінами залежить від типу зв'язків Ізинга чи Гайзенберга. У випадку двонової драбинки модель називається Гайзенберга-Ізинга, а у випадку інших моделей — Ізинга-Гайзенберга.

Кузян Роман Оганесович, доктор фізико-математичних наук, старший науковий співробітник, провідний науковий співробітник відділу функціональних оксидних матеріалів Інституту проблем матеріалознавства ім. І.М.Францевича НАН України дав позитивний відгук із зауваженнями:

1. В підрозділі 2.3 та в авторефераті написано, що в ESR експериментів вимірюється інтенсивність поглинання випромінювання як функція частоти електромагнітної хвилі. Такі експерименти існують. Однак стандартними є установки, в яких фіксована частота електромагнітних хвиль в резонаторі, а поглинання вимірюється як функція прикладеного магнітного поля. Тому для експериментаторів був би зручніший розрахунок такої залежності.
2. Термін "ізотропний XY ланцюжок" може збентежити читача, так як ізотропною прийнято вважати XXX модель Гайзенберга.
3. У п'ятому розділі, в абзаці після рівняння (5.3) визначається алгебра операторів Паулі з прикрою друкарською помилкою. На одному вузлі антикомутатор операторів народження та знищення повинен дорівнювати 1 (тобто вони поведуться як ферміони), а не 0. Слід також зазначити, що в

сучасній літературі ці оператори найчастіше називаються операторами бозонів із твердим серцевиною (hard-core bosons).

4. У підписі до Рис. 6.14 штрихові та пунктирні лінії названі пунктирними, правильні позначення наведено тільки в тексті.
5. Є деякі розбіжності у позначеннях між розділами. У більшості розділів позитивний знак має параметр антиферромагнітного обміну, однак у підрозділі 7.3 Гамільтоніан (7.81) записаний так, що позитивний знак має параметр ферромагнітного обміну.

Сотніков Андрій Геннадійович, доктор фізико-математичних наук, старший дослідник, провідний науковий співробітник відділу статистичної фізики і квантової теорії поля Національного наукового центру «Харківський фізико-технічний інститут» НАН України із зауваженнями:

1. У розділі 1.3, який присвячено методології досліджень низьковимірних спінових моделей, доречно згадано метод ренормгрупи для матриці густини (DMRG), який є доволі ефективним прецизійним варіаційним підходом розробленим для одновимірних систем. Далі автор переходить до опису можливостей методу Монте-Карло для моделей на ґратках більших просторових вимірностей. У цьому контексті хотілося б зазначити, що останнім часом варіаційні підходи, зокрема метод проєктованих станів заплутаних пар (PEP5) або його узагальнення для нескінченних систем IPEP5 (згаданий у розділі 1.1 для ґратки | Шастри-Сазерленда), набули значного розвитку та активно використовуються для досліджень двовимірних (і навіть тривимірних) систем для широкого кола просторових геометрій ґраток. З цієї точки зору, можливо, було б доречним розширити огляд відповідним - обговоренням з додатковими посиланнями.
2. У розділах 3.1 і 3.2 розглянуто спінові ланцюжки з випадковим розподілом амплітуди взаємодії між сусідніми спінами. У контексті близькості досліджених гамільтоніанів до моделей спінового скла (зокрема, моделі Шерінгтона- Кіркпатріка), було б важливо отримати коментарі, чи можна в певних граничних випадках побачити ознаки встановлення режиму багаточастинкової локалізації (MBL) на досліджуваних ланцюжках? Яка при цьому вбачається роль додаткової взаємодії типу Дзялошинського-Морія?
3. У розділі 7.3 наведено гібридну модель взаємодійної спин-електронної системи на подвійно декорованій квадратній ґратці. При цьому перші доданки гамільтоніану відповідають добре відомій моделі Фермі-Габбарда. Було б доречним у цьому розділі явно назвати цю модель і навести декілька посилань з характерними прикладами її виведення. З огляду на те, що спінові моделі на ґратках можуть бути виведені з більш загальних гамільтоніанів Фермі-Габбарда, важливо було б отримати коментарі, наскільки наближення локалізованих спінів застосовні для розглянутих в дисертації прикладів сполук, що наведені в пунктах 5 і 6 висновків дисертації.

На автореферат надійшли відгуки:

Марущак П.О., проректор з наукової роботи Тернопільського національного технічного університету імені Івана Пулюя, доктор техн. наук, професор, а також Бойко І.В. доцент кафедри програмної інженерії Тернопільського національного технічного університету імені Івана Пулюя, кандидат фіз.-мат. наук, доцент надіслали позитивний відгук на автореферат без зауважень.

Ровенчак А.А., професор кафедри теоретичної фізики імені професора Івана Вакарчука Львівського національного університету ім. Івана Франка, доктор фіз.-мат. наук, професор, надіслав позитивний відгук на автореферат без зауважень.

У дискусії взяли участь члени спеціалізованої вченої ради:

Головач Ю.В.	доктор фізико-математичних наук	01.04.02
Костробій П.П.	доктор фізико-математичних наук	01.04.02
Ільницький Я.М.	доктор фізико-математичних наук	01.04.24
Брик Т.М.	доктор фізико-математичних наук	01.04.02
Швайка А.М.	доктор фізико-математичних наук	01.04.07
Щур Я.Й.	доктор фізико-математичних наук	01.04.07
Держко О.В.	доктор фізико-математичних наук	01.04.07
Мриглод І.М.	доктор фізико-математичних наук	01.04.07

(прізвища, ініціали, наукові ступені, місця роботи, посади, зауваження)

При проведенні таємного голосування виявилось, що із 14 членів спеціалізованої вченої ради, які взяли участь у голосуванні (з них 6 докторів наук за профілем дисертації), проголосували:

«За» 14 членів ради,  
«Проти» 0 членів ради,  
недійсних бюлетенів 0.

## **ВИСНОВОК**

спеціалізованої вченої ради Д 35.156.01 щодо докторської дисертації  
Верхоляка Тараса Михайловича  
«Квантові флуктуації та фрустрації у низьковимірних спінових моделях: точні результати і пертурбативний аналіз»

Докторська дисертація Т.М. Верхоляка є завершеною науковою роботою, присвяченою дослідженню впливу ефектів квантових флуктуацій і фрустрацій на низькотемпературні властивості низьковимірних квантових спінових моделей. Робота містить ряд строгих результатів, які стосуються динамічних властивостей однорідних та випадкових спінових ланцюжків з взаємодією Дзялошинського-Морія. Низку точних результатів також отримано для гібридних моделей Ізінга-Гайзенберга на фрустрованих ґратках та проаналізовано послідовності дробових плато намагніченості у цих моделях. Використовуючи отримані точні розв'язки, запропоновано підхід для пертурбативного врахування квантової частини міждимерної взаємодії у квантових спінових моделях з сильними димерними кореляціями, який показує

добрю збіжність у другому порядку теорії збурень. Чимала частина роботи стосується дослідження моделей на декорованих ґратках, серед яких двовимірні варіанти демонструють нетривіальні фізичні властивості при нульових температурах.

### Найсуттєвіші результати

Отримано точні результати для динамічних властивостей квантових спінів-1/2 XY ланцюжків з взаємодією Дзялошинського-Морія як в однорідному, так у неоднорідному випадку. Знайдено динамічні структурні фактори, та виявлено у них сингулярності додаткові ван Гова з показником 2/3. Для випадку неоднорідності у знакозмінній взаємодії модель зведена до однорідної калібрувальним перетворенням, або перетворенням повороту, та проаналізовано вплив неоднорідності на динамічний структурний фактор.

Застосовано наближення Гартрі-Фока для ферміонізованого гамільтоніана двох спінів-1/2 фрустрованих моделей:  $J_1$ - $J_2$  XXZ ланцюжка і XXZ моделі на ромбічному ланцюжку. Досліджено основний стан та їхні магнітні властивості і показано, що таке наближення добре узгоджується з точними числовими результатами біля границі фаз синглетних димерів.

Отримано строгі результати для фрустрованої квантової спінів-1/2 двонової драбинки з взаємодією Гайзенберга на щаблях та взаємодією Ізінґа між спінами на сусідніх щаблях, яку переформульовано як квантовий ланцюжок Ізінґа з композитними спінами в ефективному поперечному та поздовжньому полі. Точно отримано фазову діаграму основного стану та виявлено, що така гібридна модель Ізінґа-Гайзенберга відтворює дробове плато 1/2 відповідної квантової моделі Гайзенберга. На основі цієї моделі розглянуто строго випадок магнетоелектрика з механізмом Кацури-Нагаоси-Балацького.

Спін-1/2 ортогонально-димерні моделі Ізінґа-Гайзенберга в одному та двох вимірах розв'язані строго у зовнішньому магнітному полі. Досліджено основний стан цих моделей та проаналізовано послідовність дробових плато намагніченості, які виникають у магнітному полі. Точний розв'язок для ортогонально-димерного ланцюжка Ізінґа-Гайзенберга використано для теоретичного опису координаційного полімеру  $[\text{Dy}_2\text{Cu}_2]_n$ .

Запропоновано наближений метод для систем з сильною димерною взаємодією, який ґрунтується на пертурбативному врахуванні XY частини взаємодії між спінами на сусідніх димерах. Такий підхід у другому порядку теорії збурень добре узгоджується з результатами наявних числових методів. З його допомогою вдалося відтворити послідовність дробових плато намагніченості моделі Шастри-Сазерленда (двовимірної ортогонально-димерної моделі) та отримати узгоджений теоретичний опис шаруватої сполуки  $\text{SrCu}_2(\text{VO}_3)_2$ .

Спін-1/2 та змішаний спінів-(1,1/2) октаедричні ланцюжки Гайзенберга з регулярним чергуванням мономерних вузлів і квадратних плакеток, які виявляють складну структуру основного стану, ґрунтовно досліджено за допомогою різних аналітичних і числових методів. Зокрема, змішаний спінів-(1,1/2) ланцюжок

додатково характеризується появою кластерних фаз Голдейна, які спричиняють додаткові дробові плато намагніченості.

Досліджено спін-1/2 антиферромагнетик Гайзенберга на фрустрованій квадратній гратці, декорованій ромбами. При помірних полях ідентифіковано лінію квантових фазових переходів першого роду між режимами феримагнітної і мономер-димерної фаз, яка тягнеться до скінченних температур, закінчуючись лінією критичних точок класу універсальності двовимірної моделі Ізінга. Такі ж фазові переходи досліджено строго на прикладі спрощеної спін-1/2 моделі Ізінга-Гайзенберга на квадратній гратці, декорованій ромбами, у магнітному полі, яка розраховується за допомогою декораційно-ітераційного перетворення та класичного моделювання Монте-Карло.

Для спін-електронної моделі на подвійно-декорованій квадратній гратці з Ізінговими спінами на основних вузлах і делокалізованими електронами на парі декорованих вузлів отримано немонотонну залежність від інтегралу переносу та Кулонового відштовхування електронів для температури переходу до антиферромагнітного впорядкування.

### **Достовірність наукових результатів**

Достовірність отриманих у дисертації забезпечується низкою строгих результатів, які висвітлені у більшій частині роботи. Зокрема, точні результати отримано для динамічних характеристик однорідних та неоднорідних ХУ ланцюжків, основного стану і термодинаміки двоногих драбинок Ізінга-Гайзенберга, а також одно- та двовимірної ортогонально-димерної моделі Ізінга-Гайзенберга. Точні результати для критичної поведінки моделі Ізінга-Гайзенберга на квадратній гратці, декорованій ромбами, та спін-електронній моделі на подвійно-декорованій гратці розраховано за допомогою декораційно-ітераційного перетворення без жодних наближень. Достовірність наближених підходів, як методу Гартрі-Фока для ферміонізованих спінових гамільтоніанів, та теорії збурень за квантовою частиною міждимерної взаємодії, підтверджуються їх порівнянням з точними результатами в окремих випадках, а також з результатами числових методів. Наукові положення, висновки та рекомендації, сформульовані у дисертації, повністю обґрунтовано теоретичним аналізом. Усі наукові здобутки опубліковано у фахових журналах, що додатково підтверджує їх достовірність.

### **Новизна наукових результатів**

1. Вперше отримано точні результати для динамічних властивостей ХУ ланцюжків та проаналізовано вплив симетричної та антисиметричної анізотропії взаємодії на динамічний структурний фактор моделі. Виявлено, що  $zz$  динамічний структурний фактор може демонструвати сингулярності ван Гова не лише з показником 1/2, а також з 2/3.
2. Отримано точні результати для динамічних структурних факторів періодичних та випадкових ланцюжків, де неоднорідність задається знаком обмінної взаємодії, та показано, що випадковість змінює загасання кореляцій зі степенової до експоненційної.

3. Для зигзагоподібного та ромбічного ланцюжків показано, що метод середнього поля для ферміонізованої моделі, дає точний результат для випадку, який відповідає синглет-димерному основному стану з короткосяжними кореляціями.
4. Знайдено точний розв'язок для спінів-1/2 фрустрованої двонової драбинки Ізінга-Гайзенберга та досліджено фази основного стану.
5. Отримано точний результат для одно- та двовимірної ортогонально-димерної моделі з взаємодіями Гайзенберга та Ізінга. Запропоновано теорію збурень для врахування квантової  $XU$  частини міждимерної взаємодії. Продемонстровано, що такий підхід дає добре узгодження з точними та числовими симуляціями вже у другому порядку теорії збурень.
6. Досліджено квантовий спінів-1/2 октаедричний ланцюжок, а також його аналог зі змішаними спінами 1 і 1/2; знайдено фазові діаграми моделей та встановлено квантові фази зі складною структурою.
7. Для моделі Гайзенберга на ромбічно-декорованій квадратній гратці ідентифіковано лінії квантових фазових переходів першого роду між феримагнітною фазою Ліба-Матіса і мономер-димерною фазою, які закінчуються лінією критичних точок при скінченних температурах.
8. Запропоновано спрощену модель Ізінга-Гайзенберга на ромбічно-декорованій квадратній гратці, яка дозволяє знайти точний розв'язок для ліній фазових переходів першого роду та строго дослідити лінію критичних точок.
9. Виявлено, що спінів-електронна модель на подвійно-декорованій гратці з Ізінговими спінами на основних вузлах і делокалізованими електронами на парі декорованих вузлів демонструє немонотонну залежність від інтегралу переносу та Кулонового відштовхування електронів для температури переходу до антиферомагнітного впорядкування.

### **Значення отриманих результатів та їх застосування**

Отримані в дисертаційній роботі аналітичні та чисельні результати прояснюють особливості динамічної поведінки та низькотемпературної термодинаміки квантових магнетиків різного типу у випадку анізотропії, регулярної чи випадкової неоднорідності, фрустрації та зовнішнього магнітного поля. З практичної точки зору вони можуть бути використані для пояснення експериментів електронного парамагнітного резонансу та розсіяння нейтронів. Крім того, результати, отримані для полімерної координаційної сполуки  $[Dy_2Cu_2]_n$  та шаруватої сполуки  $SrCu_2(BO_3)_2$  пояснюють їх властивості в межах аналітичного підходу.

Робота має також методологічне значення. Метод розрахунку заснований на пертурбативному врахуванні квантової  $XU$  частини міждимерних взаємодій може бути використаний для досліджень великої кількості сполук з димерною структурою.

Результати дисертаційної роботи можуть бути використані в Інституті фізики конденсованих систем НАН України (м. Львів), Інституті теоретичної фізики імені М.М. Боголюбова НАН України (м. Київ), Інституті фізики НАН України (м. Київ), Інституті теоретичної фізики імені О.І. Ахієзера Національного

наукового центру «Харківський фізико-технічний інститут» НАН України (м. Харків), Львівському національному університеті імені Івана Франка, Національному університеті «Львівська політехніка», Київському національному університеті імені Тараса Шевченка та інших наукових і освітніх установах.

Рада констатує, що дисертаційна робота Верхоляка Тараса Михайловича «Квантові флуктуації та фрустрації у низьковимірних спінових моделях: точні результати і пертурбативний аналіз» є оригінальним і завершеним науковим дослідженням та задовольняє вимоги пункту 10 «Порядку присудження наукових ступенів» затвердженого Постановою Кабінету Міністрів України від 24 липня 2013 р. №567 (із змінами).

На підставі результатів таємного голосування та прийнятого висновку спеціалізована вчена рада \_\_\_\_\_ присуджує

Верхоляку Тарасу Михайловичу

(прізвище, ім'я, по батькові здобувача у давальному відмінку)

науковий ступінь доктора \_\_\_\_\_ фізико-математичних \_\_\_\_\_ наук  
(галузь)

за спеціальністю 01.04.02 – теоретична фізика.  
(шифр і назва спеціальності за переліком)

Головуючий на засіданні  
спеціалізованої вченої ради

Д 35.156.01

(шифр ради)

(підпис)

Мриглод І.М.

(прізвище, ініціали)

Вчений секретар  
спеціалізованої вченої ради

(підпис)

Швайка А.М.  
(прізвище, ініціали)



«22» січня 2025 року

Атестаційна справа зареєстрована у МОН України під № \_\_\_\_\_

Затверджено рішення спеціалізованої вченої ради про присудження наукового ступеня кандидата наук рішенням атестаційної колегії МОН України від « » \_\_\_\_\_ 20 \_\_\_\_ року .

Видано диплом \_\_\_\_\_  
(серія, номер)

Начальник відділу \_\_\_\_\_  
(підпис) \_\_\_\_\_ (прізвище, ініціали)