

## ВІДГУК

офіційного опонента на дисертаційну роботу Верхоляка Тараса Михайловича

"КВАНТОВІ ФЛУКТУАЦІЇ ТА ФРУСТРАЦІЇ У НИЗЬКОВИМІРНИХ

СПІНОВИХ МОДЕЛЯХ:

ТОЧНІ РЕЗУЛЬТАТИ І ПЕРТУРБАТИВНИЙ АНАЛІЗ",

що представлена до захисту за спеціальністю 01.04.02 — теоретична фізика

(104 — фізика та астрономія), 10 — природничі науки

Квантові флуктуації — це насамперед нульові коливання поблизу положення рівноваги. У звичайних магнітних системах це коливання напрямку магнітного моменту поблизу рівноважного напрямку, який задається далеким магнітним порядком класичних (нескінченно великих) спінів. Найбільші флуктуації існують у системах зі спіном  $1/2$  оскільки "відхилення" спіна  $1/2$  від наданого напрямку означає зміну напрямку на протилежний. Далекий магнітний порядок можливий в двовимірних системах тільки при нульовій температурі, а в одновимірних він зовсім не існує. Фрустрації, тобто наявність конкуруючих взаємодій, призводять до того, що рівноважний напрямок може не існувати навіть для класичних спінів, або існує декілька еквівалентних напрямків, або повертаюча до рівноважного напрямку сила є малою. Усе це призводить до посилення ролі квантових флуктуацій, а також до виникнення нових фізичних явищ і фаз, як, наприклад, спонтанне порушення просторової симетрії, або плато дробової намагніченості у магнітному полі. Розгляд низьковимірних спінових моделей з фрустрацією потребує особливих підходів та методів обчислення та аналізу. Таким чином, дисертація Т.М. Верхоляка, у якій сформульовано й вирішено низка проблем теорії фрустрованих низьковимірних спінових моделей, а також приведені результати застосування цієї теорії до деяких сполук перехідних металів є вельми **актуальною** як з наукової, так і з практичної точки зору. Додатковою характеристикою актуальності робіт Т.М. Верхоляка може слугувати список робіт дисертанта, основна частина яких опублікована у високо рейтингових, провідних міжнародних наукових журналах світу.

Треба відзначити, що тема дисертації Верхоляка Т.М. узгоджена з планами наукових досліджень Інституту фізики конденсованих систем НАН України. Дослідження проводились дисертантом, як у рамках держбюджетних тем НАН України, так і за програмами (темами, завданнями) міжнародного наукового співробітництва. Назви тем обох згаданих типів наведені дисертантом у вступних частинах дисертації і автореферату.

Загальна характеристика роботи. Представлена дисертація містить вступ, сім розділів основної частини, висновки, список використаних джерел (389 найменувань), та два додатки. Робота містить 96 рисунків. Загальний обсяг дисертації складає 352 сторінок.

**Вступ** містить обґрунтування постановки задачі та її актуальність, вказані методи дослідження, які використані в роботі, підкреслюється наукова новизна та практична цінність отриманих результатів.

У **першому розділі** здійснено огляд літератури, що повно відображає науковий контекст проведених досліджень.

У **другому розділі** отримано точні результати для динаміки спінів-1/2 ХУ ланцюжків та вивчено вплив симетричної та антисиметричної анізотропії на динамічний структурний фактор моделі. Результати для динамічних структурних факторів дозволили розглянути вплив взаємодія Дзялошинського-Морія на поглинання енергії в експериментах по електронному спіновому резонансу та інших експериментальних досліджень динамічних властивостей (непружне розсіяння нейтронів, ядерний магнітний резонанс). Строгі результати, отримані в другому розділі, дозволяють зрозуміти як взаємодія Дзялошинського-Морія проявляється у величинах, доступних для експериментального дослідження.

У **третьому розділі** досліджено періодичні та випадкові ланцюжки, де неоднорідність задається знаком обмінної взаємодії. Продемонстровано, що розглянуті просторово неоднорідні моделі вирізняються можливістю усунення неоднорідності зі спінового гамільтоніана за допомогою унітарного перетворення. Складну поведінку розглянутих моделей можна пояснити

відповідними властивостями базової однорідної моделі. Знайдено точні аналітичні результати для динамічних структурних факторів деяких періодичних та випадкових квантових спінових ланцюжків. Розглянуті спеціальні моделі можуть бути корисні для тестування наближених методів застосованих до ширшого класу систем.

Моделі, що розглянуті в перших трьох розділах описують спінові взаємодії з величезною анізотропією, які досить рідко зустрічаються у реальних сполуках. Але їх розгляд має академічний та методологічний інтерес і служить основою для наступних досліджень. Так у **четвертому розділі** дисертант розглядає більш реалістичні моделі для фрустрованих квантових драбинок, таких як зигзаг драбинка та ромбічний ланцюжок, для яких знайдено представлення безспінових ферміонів на основі перетворення Йордана-Вігнера та застосовано наближення типу Гартрі-Фока. Доведено, що наближення Гартрі-Фока відтворює точний результат для мономер-димерної фази в основному стані симетричного ромбічного ланцюжка. Доведено також, що розв'язок наближення Гартрі-Фока для симетричного ромбічного ланцюжка є інваріантним відносно калібрувальних перетворень. Отримані результати показують добрий збіг з даними точної діагоналізації відтворення магнітних властивостей при високих полях або малих фрустраціях. Розроблений підхід для ромбічного XXZ ланцюжка відтворює плато на кривій намагніченості на  $1/3$  намагнічення насичення та додатковий пік на кривій теплоємності.

У **п'ятому розділі** розглядається модель спін- $1/2$  двонової драбинки зі взаємодіями Гайзенберга та Ізинга, що має точних розв'язок. Досліджено фазову діаграму основного стану та квантові фази, які виникають внаслідок фрустрації взаємодій та зовнішнього поля. Знайдено, що гібридна модель Ізинга-Гайзенберга відтворює  $1/2$  дробове плато для складнішої відповідної квантової моделі Гайзенберга. Отримано важливий точний результат для основного стану спін- $1/2$  драбинки Гайзенберга-Ізинга у зовнішньому

електричному та магнітному полях. Контроль магнітного стану драбинки через зовнішнє електричне поле може мати великий технологічний потенціал.

**Шостий розділ** присвячений дослідженню спінів-1/2 ортогонально-димерних моделей. Точно розв'язана модель спінів-1/2 ортогонально-димерного ланцюжка Ізинга-Гайзенберга з Гайзенберговою взаємодією всередині димера та Ізинговою між спінами на сусідніх димерах в магнітному полі. Знайдено, що крива намагніченості виявляє два дробових плато при  $1/4$  і  $1/2$  від значення насичення, а в області критичних полів, модель демонструє посилений магнетокалоричний ефект. Модифікація цієї моделі описує полімер  $[\text{Dy}_2\text{Cu}_2]_n$ . Для нього знайдено багате різноманіття класичних і квантових основних станів, які, окрім повністю насиченої парамагнітної фази, що виникає при досить високих магнітних полях, включають ще шість основних станів. Ці основні стани відповідають за наявність плато намагніченості на нульових і низькотемпературних кривих намагніченості, які проявляються при  $0$ ,  $1/11$ ,  $5/11$ ,  $9/11$  і/або  $10/11$  намагніченості насичення.

Далі було розглянуто модель Ізинга-Гайзенберга на ґратці Шастри-Сазерленда. В дисертації знайдено фазову діаграму основного стану, і виявлено два дробові плато на  $1/3$  і  $1/2$  намагніченості насичення в магнітному полі. Важливо, що критичні поля, при яких відбуваються стрибки намагніченості у моделі Ізинга-Гайзенберга, є дуже близькі до критичних значень поля для моделі Гайзенберга на ґратці Шастри-Сазерленда. Це означає, що поведінка моделі Гайзенберга якісно описується значно простішою моделлю Ізинга-Гайзенберга. На базі цього спостереження далі дисертант робить наступний крок у розвитку теорії. А саме, пропонує теорію збурень за квантовою ХУ частиною міждимерної взаємодії для ряду одновимірних та двовимірних моделей з сильними димерними взаємодіями. Продемонстровано, що така схема дає добру збіжність вже у другому порядку теорії збурень. Теорія дозволяє описати магнітні властивості деяких купратних сполук. Було детально з'ясовано природу основних станів, що мають відношення до дробових плато намагніченості в цих сполуках. Ця

оптимізована теорія збурень, що розроблена на основі точно розв'язних спінових систем Ізинга-Гайзенберга, відкриває нові можливості для більш точного дослідження інших квантових спінових моделей.

У **сьомому розділі** досліджено ряд одно- та двовимірних квантових спінових моделей та спін-електронну модель, що мають складну поведінку в основному стані та при ненульових температурах. Дисертант використовує різноманітні аналітичні та числові методи для побудови фазової діаграми основного стану, опису процесу намагнічування та низькотемпературної термодинаміки моделей. Варіаційний принцип та підхід локалізованих магнів використані в області сильно фрустрованого режиму параметрів для спін-1/2 октаедричного ланцюжка Гайзенберга. Частина фазової діаграми основного стану, що залишилася, була досліджена за допомогою числових даних методу DMRG для ефективних ланцюжків Гайзенберга зі змішаним спіном. Доведено, що в цьому просторі параметрів модель демонструє різноманітні основні стани, що призводить до появи у кривих намагніченості додаткових проміжних плато на  $1/5$ ,  $2/5$ ,  $3/5$  намагніченості насичення. Розроблена модифікована теорія локалізованих магнів описує низькотемпературну термодинаміку спін-1/2 ромбічного і октаедричного ланцюжків Гайзенберга. Ретельно досліджені моделі змішаного спін-(1,1/2) октаедричного ланцюжка Гайзенберга, спін-1/2 антиферомагнетика Гайзенберга в магнітному полі на квадратній ґратці, декорованій ромбами. За допомогою узагальненого декораційно-ітераційного перетворення було досліджено вплив локального Кулонового відштовхування та тунелювання делокалізованих електронів на властивості основного стану та критичну поведінку взаємодіючої спін-електронної системи на подвійно декорованій квадратній ґратці.

В усіх розділах автором дисертації використовувалися адекватні методи теоретичної фізики, строгий математичний апарат та загально відомі модельні наближення. Можна із впевненістю стверджувати, що **отримані рівняння,**

**сформульовані положення та зроблені висновки дисертації є науково-обґрунтованими та достовірними.**

Слід також підкреслити **цінність та значення** отриманих Верхоляком Т.М. та представлених в дисертації **результатів**: Всі головні положення дисертаційної роботи, винесені на захист, **були опубліковані** у 31 статтях в реферованих міжнародних журналах і пройшли апробацію на 21 конференціях. Деякі з представлених результатів та запропонованих підходів вже знайшли своє використання в дослідженнях інших вчених й широко цитуються в літературі: кількість цитувань опублікованих робіт — понад 820 згідно Google Scholar.

Однак, проведений детальний аналіз дисертаційної роботи дозволив виявити певні недоліки:

1. В підрозділі 2.3 та в авторефераті написано, що в ESR експерименті 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 ХХХ 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 феромагнітного обміну.

Зроблені зауваження спрямовані, скоріше, на перспективи й поліпшення якості подальших досліджень дисертанта, вони не применшують значимість представлених в дисертаційній роботі результатів та загальну позитивну оцінку самої роботи у цілому.

Детальне вивчення автореферату дисертації показав, що сам **автореферат та наведені у ньому публікації адекватно й у достатній мірі повно передають зміст дисертації.**

Загалом дисертаційна робота "**Квантові флуктуації та фрустрації у низьковимірних спінових моделях: точні результати і пертурбативний аналіз**" за своїм теоретичним рівнем, достовірністю результатів, науковою новизною та практичною цінністю відповідає вимогам «Порядку присудження наукових ступенів» затвердженого Постановою Кабінету Міністрів України від 24 липня 2013 р. № 567 (зі змінами) щодо докторських дисертацій, а її автор, Верхоляк Тарас Михайлович, заслуговує присудження йому наукового ступеня доктора фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.02 — теоретична фізика.

Офіційний опонент, провідний науковий співробітник відділу  
функціональних оксидних матеріалів

Інституту Проблем Матеріалознавства ім. І.М.Францевича НАН України  
доктор фіз.-мат. наук, ст. н. с.  Р.О. Кузян

Підпис доктора фіз.-мат. наук, п.н.с. Р.О. Кузяна засвідчую

Учений секретар ІІМ ім. І.М.Францевича НАНУ

к.ф.-м.н.



Денис Миронюк