

## ВІДГУК

офіційного опонента — кандидата фізико-математичних наук  
доцента кафедри теоретичної фізики  
імені професора Івана Вакарчука  
Львівського національного університету імені Івана Франка  
Кузьмака Андрія Романовича  
на дисертаційну роботу Гутака Тараса Ігоровича  
на тему: **“Термодинаміка фрустрованих квантових спінових систем”**  
подану на здобуття наукового ступеня доктора філософії в галузі знань  
10 Природничі науки за спеціальністю 104 Фізика та астрономія

### **Актуальність результатів дисертації**

За допомогою декораційно-ітераційного перетворення вдається обчислити статистичну суму і знайти термодинамічні величини, такі як, ентропія, внутрішня енергія, теплоємність, а також, намагніченість і сприйнятливість, для Ізінгових моделей з різними декораціями. Для таких моделей здобувач пояснив незвичну низькотемпературну поведінку термодинамічних величин поблизу певної температури, які нагадують поведінку при фазових переходах першого і другого роду. Дані моделі можна успішно застосувати для опису поведінки термодинамічних величин реальних фізичних систем, наприклад, полімерних ланцюжків.

Цікавою з точки зору магнетизму і малодослідженою системою є модель Гайзенберга на ґратці пірохлору. Така система є тривимірною і сильно геометрично фрустрованою. Хоча вона досліджується близько 30-и років, але енергію основного стану не вдається достатньо точно визначити. Більше того, мало досліджено її термодинамічні властивості. Використаний здобувачем метод ентропії для дослідження даної моделі дав поштовх в появі нових цікавих результатів в описі поведінки її антиферомагнітної фази.

### **Обґрунтованість і достовірність одержаних результатів**

Результати отримані за допомогою сучасних теоретичних методів і підходів. В роботі проводиться порівняння із раніше отриманими в літературі результатами за допомогою інших методів. Важливо відзначити, що здобувач наводить порівняння із експериментальними результатами. Також, достовірність одержаних в дисертації результатів забезпечується публікаціями в високо-рейтингових реферованих

виданнях і апробацією на низці міжнародних і всеукраїнських наукових конференціях.

### **Новизна отриманих в дисертації результатів**

Всі результати, отримані автором в дисертації, є новими і оригінальними. Їх можна поділити на такі пункти:

1. З використанням декораційно-ітераційного перетворення пояснено низькотемпературну термодинамічну поведінку драбинки Ізінґа з тримерними щаблями, яку раніше спостерігав В. Їн.
2. За допомогою декораційно-ітераційного перетворення описано термодинамічну поведінку ланцюжка Ізінґа в магнітному полі з різними квантовими декораціями. Отримано аналітичні вирази для термодинамічних величин таких систем і описано їх поведінку при температурі, коли ефективно магнітне поле змінює знак.
3. В рамках методу двочасових функцій Гріна в наближенні Тяблікова, досліджено термодинамічну поведінку ґратки пірохлору із феромагнітною взаємодією Гайзенберґа між спінами. Отримано значення температури Кюрі.
4. Методом ентропії досліджено термодинаміку антиферомагнітної моделі Гайзенберґа на ґратці пірохлору. Оцінено енергію основного стану такої системи.

### **Практична цінність одержаних результатів**

Результати, які отримані декораційно-ітераційним перетворенням, пояснюють низькотемпературну поведінку термодинамічних величин, які раніше спостерігали на фізичних системах, що описуються моделлю Ізінґа із тримерними щаблями, ромбічним ланцюжком Ізінґа із поперечними вставками, взаємодія між якими описується анізотропною моделлю Гайзенберґа, а також спін-електронного ланцюжка подвійних тетраедрів і Ізінґ-Гайзенберґівського ланцюжка подвійних тетраедрів. Варто зауважити, що результати отримані декораційно-ітераційним перетворенням для драбинки Ізінґа із тримерними щаблями, також можуть мати навчальну цінність і бути використані у курсах чи спецкурсах, що читаються для студентів, які вивчають фізику у закладах вищої освіти. Дослідження феромагнітної моделі Гайзенберґа на ґратці пірохлору в рамках методу двочасових функцій Гріна в наближенні Тяблікова дозволило оцінити температуру Кюрі, знайти поведінку намагніченості, сприйнятливості і теплоємності. Також було отримано залежність структурного фактора як функцію приведенного імпульсу. Дана залежність якісно описує експериментальні результати отримані при непружному

розсіянні нейтронів на ґратці пірохлору, яка формується йонами ванадію у сполуці  $\text{Lu}_4\text{V}_2\text{O}_7$ . Методом ентропії описано термодинаміку антиферромагнітної моделі Гайзенберга на ґратці пірохлору. Варто зауважити, що автори застосували новий підхід, метод ентропії, до вивчення магнітних властивостей ґратки пірохлору, що привернуло нову увагу до такої системи.

### **Публікації та апробація результатів дисертації**

Результати роботи опубліковані в 4-х статтях високо-рейтингових фахових витань, що мають високі імпаکت фактори і входять до науково-метричних баз даних Scopus та Web of Science. Апробація результатів відбулася на 5-и конференціях, що засвідчується 6-а тезами доповідей, серед яких дві доповіді представлені на міжнародній конференції Statistical Physics: Modern Trends and Applications.

### **Структура та оформлення дисертації**

Дисертаційна робота Тараса Гутака складається з анотації, вступу, огляду результатів, отриманих раніше іншими авторами, двох розділів із результатами дисертаційної роботи, загальних підсумків, списку використаних джерел і додатків. Повний обсяг дисертації 124 сторінки, з яких основний обсяг займає 93 сторінки, а додатки розміщені на 14 сторінках. Також, робота базується на 172 пунктах використаних джерел та містить 46 рисунків і 3 таблиці.

Дисертація написана грамотно, із послідовним і логічним викладом матеріалу. Робота відповідає чинним вимогам щодо оформлення дисертаційних робіт для отримання ступеня доктора філософії.

### **Аналіз змісту роботи**

В *Анотації* до роботи здобувач висвітлив основні проблеми, яким присвячена дисертація, а також подав короткий виклад ідей і результатів, народжених в процесі наукового пошуку. Анотація завершується списком публікацій і конференцій, де здобувач опублікував і представив матеріал, що увійшов в дисертацію.

Актуальність тематики, яка спонукала Тараса Гутака до дослідження, подана у *Вступі*. В даному розділі дослідник детально описав фізичні системи, де виникає фрустрація, розповів про проблеми, які виникають під час дослідження таких систем, і методи їх дослідження. Здобувач чітко виділив нові результати, які йому вдалося отримати в даній області і описав методи, якими він послуговувався під час дослідження. Наукова новизна і практична цінність результатів дисертації

чітко обґрунтовані на основі порівняння з раніше запропонованими і вирішеними в даній області проблемами.

У Розділі 1 представлено огляд робіт присвячених дослідженню фрустрованих ґраткових спінових систем. Огляд охоплює роботи, пов'язані із вивченням поведінки фрустрованих спінових систем, які розміщені на ґратках різної геометрії. Представлено проблеми, які виникали під час дослідження таких об'єктів, їх зв'язок із реальними фізичними системами, способи вирішення цих проблем, а також задачі, які залишилися нерозв'язані, і внесок даної роботи у їх вирішення.

Розділ 2 містить результати, що описують поведінку спінових систем, розташованих на різних ґратках. За допомогою декораційно-ітераційного перетворення здобувач знайшов температуру, при якій перші похідні від вільної енергії по температурі драбинки Ізінґа із тримерними щаблями поводять себе подібно, як при фазовому переході першого роду. Таке перетворення зводить дану систему до драбинки Ізінґа із ефективною взаємодією на щаблях, що залежить від температури. Було аналітично знайдено вирази для внутрішньої енергії, ентропії та теплоємності, а також проаналізовано їх поведінку в околі температури зміни знаку ефективної взаємодії. Таким чином, в роботі вдалося пояснити низькотемпературну поведінку термодинамічних величин, яку раніше на драбинці Ізінґа з тримерними щаблями спостерігав В. Їн.

Іншою моделлю, термодинаміка якої досліджена в дисертації, є ромбічний ланцюжок Ізінґа в магнітному полі із декораціями, що складаються із двох поперечно розміщених спінів, які описуються анізотропною моделлю Гайзенберґа. Гамільтоніан такої системи можна розбити на суму гамільтоніанів окремих ромбів, які між собою комутують. За рахунок природи такої взаємодії до даної системи було застосовано підхід декораційно-ітераційного перетворення, що дозволило звести гамільтоніан до ефективного гамільтоніана ланцюжка Ізінґа із взаємодією найближчих сусідів. Причому параметри, що задають ефективну взаємодію між спінами і ефективне магнітне поле, залежать від температури. У результаті здобувач отримав намагніченість і магнітну сприйнятливість Ізінґових спінів як похідні по ефективному полю. Отримано температуру, при якій ефективне магнітне поле міняє знак. Показано, що намагніченість Ізінґових спінів при цій температурі міняється від майже  $-1$  до майже  $+1$ , що впливає на поведінку ентропії і внутрішньої енергії, які також змінюються стрибкоподібно. Поведінки магнітної сприйнятливості і теплоємності подібні між собою. Обидві мають різкий скінченний пік при цій температурі. Така подібність пояснюється тим, що доданок

у теплоємності, який містить магнітну сприйнятливості дає найбільший вклад, бо він є пропорційний до квадрату останньої. Також зауважено, що для подвійного тетраедричного ланцюжка Ізінга з локалізованими спінами і мобільними електронами існує дві температури, при яких ефективно магнітне поле занулюється. Проте, високотемпературний розв'язок не впливає на поведінку спостережуваних величин.

У Розділ 3 представлені результати дослідження спінів  $1/2$  моделі Гайзенберга на ґратці пірохлору із феромагнітною і антиферомагнітною взаємодією. Термодинаміка і магнітні властивості феромагнітної фази досліджується у підході двочасових функцій Гріна в наближенні Тяблікова. Даним підходом знайдено значення критичної температури, при якій намагніченість стає рівною нулю. У порівнянні із результатами отриманими іншими методами (методом квантового Монте Карло, методом високотемпературних розвинень, методом двочасових функцій Гріна в наближенні Кондо-Ямаджі, та іншими) показано, що метод двочасових функцій Гріна в наближенні Тяблікова дає найвище значення для критичної температури (не враховуючи результатів теорії середнього поля). Проте, на відміну від методу середнього поля, цей метод відчуває геометрію ґратки. У результаті в дисертації представлено температурну залежність намагніченості, магнітної сприйнятливості і теплоємності феромагнітної моделі Гайзенберга на ґратці пірохлору в наближенні Тяблікова. Дані залежності порівнюються із залежностями, отриманими за допомогою вищезгаданих методів. Також, отримано структурний фактор як функцію приведенного імпульсу.

Антиферомагнітна модель Гайзенберга на ґратці пірохлору досліджувалася за допомогою методу ентропії, який дозволяє провести інтерполяцію між значеннями ентропії як функції від внутрішньої енергії, при низькому і високому значеннях температури. У результаті було отримане значення енергії основного стану, яке відрізняється на кілька відсотків від значень отриманих іншими методами. Також для випадків зі щільною у спектрі і безщільного спектра знайдено температурну залежність ентропії, теплоємності і магнітної сприйнятливості. Варто зауважити, що у випадку безщільного спектра проведено порівняння температурної залежності ентропії антиферомагнітної моделі Гайзенберга на ґратці пірохлору із ентропією цієї моделі на простій кубічній ґратці. За рахунок сильного впливу геометричної фрустрації ґратки пірохлору на термодинамічну поведінку системи ентропія вивільняється значно швидше із ростом температури, ніж у випадку простої кубічної ґратки.

Розділ 4 містить короткий перелік основних наукових результатів роботи.

Дисертаційна робота завершується Списком використаних джерел і Додатками.

### **Зауваження до дисертаційної роботи**

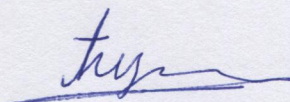
- В пункті 2.3, де розглядається ромбічний ланцюжок Ізінґа із поперечними спінами Гайзенберґа, вивчається псевдоперехід, при якому ефективне магнітне поле змінює знак, бо воно залежне від температури. Проте, ефективна взаємодія також залежить від температури, але здобувач пише, що вона феромагнітна. Незрозуміло чи вона завжди буде феромагнітною, при будь-якому полі. У роботі нічого не сказано, чи існують дійсні розв'язки для температури, при якій ефективна взаємодія змінює знак.
- В пункті 2.3, подвійний тетраедричний ланцюжок з локальними спінами і мобільними електронами згадується в контексті двох розв'язків відносно температури, коли ефективне магнітне поле стає рівне нулю. Високотемпературний розв'язок не проявляє себе у спостережуваних величинах моделі. Проте, не приведено виразів для цього розв'язку. Для прикладу, для цієї моделі, при низькій температурі, намагніченість змінюється від майже -1 до 1. Що буде з намагніченістю при високій температурі? Чи поле міняє знак при переході через цю температуру?
- В розділі 3 порівнюється поведінка динамічного структурного фактора феромагнітної моделі Гайзенберґа на ґратці пірохлору, отриманого методом двочасових функцій Гріна у наближенні Тяблікова (рис. 3.6), із експериментальними результатами, отриманими на основі дослідження непружного розсіяння нейтронів на ґратці пірохлору, яка формується йонами ванадію у сполуці  $\text{Lu}_4\text{V}_2\text{O}_7$  (ліва панель на рис. 3.2). На рисунку 3.6 по осі ординат відкладено величину  $\omega$  в безрозмірних одиницях, а на рисунку 3.2 енергію розсіяних нейтронів в меВ. Чи можна ці два рисунки привести до однакових одиниць вимірювання?
- Робота містить незначні описки, які ніяким чином не вплинули на результати. Для прикладу: 1) у правій частині рівняння (2.2) параметр  $J_2$  має входити в параметр  $J_1$ ; 2) також у цій формулі під косинусом гіперболічним не має бути множника 2; 3) в рівнянні (2.5) третє і четверте власне значення матриці переносу має бути записане через синус гіперболічний, а не через косинус гіперболічний; 4) в рівнянні (2.17) у другому доданку під косинусом гіперболічним не повинно бути  $1/2$ ; 5) в рівнянні (3.22) мав би входити параметр  $h$ , який задає магнітне поле.

## Висновки

Вищезгадані зауваження не є недоліками роботи, а радше пропозиціями для подальших наукових досліджень. Таким чином, дисертаційна робота Т. І. Гутака “Термодинаміка фрустрованих квантових спінових систем” є закінченою науковою працею, яка за актуальністю теми, обґрунтованістю отриманих результатів, їх новизною і повнотою викладу в публікаціях, відповідає вимогам Наказу міністерства освіти і науки України №40 від 12 січня 2017 року “Про затвердження Вимог до оформлення дисертації”, та вимогам передбаченим пунктом 10 “Тимчасового порядку присудження ступеня доктора філософії”, затвердженого постановою Кабінету Міністрів №167 від 6 березня 2019 року, а її автор Тарас Ігорович ГУТАК, безперечно заслуговує присудження йому ступеня доктора філософії з галузі знань 10 Природничі науки за спеціальністю 104 Фізика та астрономія.

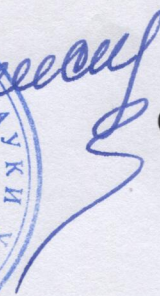
Офіційний опонент:

кандидат фізико-математичних наук,  
доцент кафедри теоретичної фізики  
імені професора Івана Вакарчука  
Львівського національного університету  
імені Івана Франка



А. Р. Кузьмак

Підпис А. Р. Кузьмака завіряю:  
Вчений секретар Львівського  
національного університету  
імені Івана Франка, доцент



О. С. Грабовецька