

Відгук

офіційного опонента на дисертаційну роботу Величка Олега Володимировича «Застосування квантових ґраткових моделей для опису систем з адсорбованими чи інтеркальованими частинками та оптичних ґраток», подану на здобуття наукового ступеня доктора фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.07 — фізика твердого тіла

Дисертаційну роботу Олега Величка присвячено вивченню актуальних об'єктів, що мають безумовну практичну цінність. Насамперед, йдеться про різноманітні інтеркальовані кристали: шаруваті напівпровідники типу InSe і GaSe, інтеркальовані нікелем чи складнішими інтеркалянтами, а також анатаз (поліморф діоксиду титану), інтеркальований літієм. Також розглянуто сегнетоелектрики родини $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$, цікаві з погляду зору впливів гідростатичного тиску й заміщення компонент на сегнетовпорядкування. У фокусі дослідження також оптичні ґратки, які зараз активно застосовують для вивчення ультрахолодних атомів, у квантових симуляціях, у високоточній атомній інтерферометрії тощо.

Роботу вирізняє класичний підхід статистичної фізики, який дозволяє глибше розуміти природу процесів, що відбуваються в аналізованій системі. Застосування квантових ґраткових моделей, хоч і пов'язане зі значними спрощеннями реальної фізичної картини, дозволило авторові отримати адекватний опис досліджуваних систем умілим вибором моделей та параметрів. Така робота особливо цікава на тлі «мейнстрімних» у теорії твердого тіла підходів *ab initio*.

Обсяг дисертації становить 267 сторінки, із яких основний текст — 206 сторінок. Вона складається зі вступу, семи розділів, висновків, списку використаних джерел на 230 позицій та семи додатків.

У *вступі* вказано актуальність теми, мету і завдання дослідження, наукову новизну і практичне значення отриманих результатів, особистий внесок здобувача, відомості про апробацію.

Перший розділ містить короткий огляд літератури щодо досліджуваних систем: вказано їх практичне застосування та фізичні особливості, а також перелічено найважливіші теоретичні підходи до їх опису.

У *другому* розділі представлено чотиристанову мікроскопічну модель для пояснення електретного ефекту в селенідах індію та галію внаслідок впорядкування локальних квазідиполів і відтворено спостережувані на

експерименті пікоподібну залежність величини електретного ефекту від концентрації та температурну поведінку діелектричної проникності.

Третій розділ стосується аналізу двох властивостей інтеркальованого літієм анатазу: співіснування бідної та багатойонної фаз та дві можливі локалізації йонів літію в кисневих октаедрах. Остання з них передбачає можливість (анти)полярного впорядкування, що виходить за межі звичайної моделі ґраткового газу, яка добре описує фазове розшарування. Для врахування внесків типу «частинка–частинка» та «диполь–диполь» використано модель типу Блюма–Емері–Гріффітса.

У **четвертому** розділі встановлено, що при стадійному впорядкуванні в шаруватих кристалах загальна структура спектра електронних збуджень описується законом дисперсії, що поєднує одно- та двовимірні властивості та в загальному характерний для шаруватих систем (закон Фіваза). Однак, наявність стадійного впорядкування змінює період ґратки вздовж осі, перпендикулярної до шарів, перебудовує зону Брілюена, спричиняє розщеплення у спектрі й породжує додаткові гілки спектра й відповідні зони, значно ускладнюючи його вигляд.

П'ятий розділ присвячено бозе-конденсації у двостановій моделі Бозе–Габбарда в границі жорстких бозонів. Розраховано енергетичний спектр бозонних збуджень та одночастинкові спектральні густини для плоскої гексагональної ґратки типу графену. Розглянуто особливості форми зонного спектра та спектральної густини в нормальній фазі залежно від розташування рівня хімічного потенціалу, різниці між локальними енергіями частинок у підґратках та температури.

У **шостому** розділі досліджено термодинаміку ґраткової бозе-системи в рамках двостанової моделі жорстких бозонів, і показано, що міжвузлова взаємодія, спричинена зміщеннями частинок із рівноважних положень, може призводити до спонтанного порушення симетрії і появи фази з однорідним або просторово модульованим зміщенням. Також тут проаналізовано нестійкість появи бозе-конденсату, пов'язану з міжвузловим перенесенням частинок.

Сьомий розділ стосується аналізу термодинаміки квантової ґраткової системи з локальними багатоямними потенціалами. Тут розглянуто дипольне впорядкування та запропоновано варіант моделі Блюма–Емері–Гріффітса, який додатково враховує деформаційні ефекти. Також проаналізовано розширення класичної моделі Міцуї. Відповідні підходи дозволили дослідити вплив ефективних полів на сегнетоелектрики.

Завершується основний текст дисертації загальними **висновками**, у яких

підсумовано основні результати досліджень. *Додатки* містять допоміжні матеріали, проміжні формули, розрахунки й пояснення, а також список публікацій здобувача за темою дисертації й інформацію про апробацію результатів дисертації.

Результати роботи повністю опубліковано в 2 монографіях, 15 статтях та в 22 тезах доповідей. Десять статей вийшли у виданнях третього квартала за SCImago Journal and Country Rank. Отже, відповідно до наказу МОН України № 1220 від 23.09.2019, кількість статей прирівнюється до 25. Результати роботи представлено на багатьох конференціях в Україні, а також у Франції, Литві, Польщі та Японії.

Дисертаційну роботу якісно проілюстровано та цікаво оформлено. Результати наукових досліджень викладено послідовно і логічно. Автореферат дисертації цілком відображає зміст її основних положень та ідей. Достовірність результатів та обґрунтованість висновків роботи забезпечують використання адекватних моделей та добре апробованих аналітичних методів.

Автор вперше отримав низку важливих теоретичних результатів, які переважно мають і практичну цінність. Зокрема, вперше якісно описано виникнення електретного ефекту в інтеркальованих нікелем шаруватих кристалах селенідів індію та галію. На підставі вперше здійсненого симетричного аналізу інтеркальованого літієм анатазу показано зв'язок між упорядкуванням літію та виникненням деформації в системі. В рамках двостанової моделі Бозе–Габбарда вперше досліджено появу збуджень фононного типу й можливість появи модуляції в системі та їх вплив на бозе-конденсацію і динамічні характеристики системи. Вперше запропоновано т. зв. деформовну модель Блюма–Емері–Гріффітса для опису деформаційних ефектів у сегнетоелектрику сімейства $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$. Вперше сформульовано розширену модель Міцуї, яка дозволяє вивчати вплив зовнішнього електричного поля у довільних напрямках.

До дисертації можна висловити одне загальне зауваження і кілька дрібних. Перше є таким:

1. У роботі мало уваги приділено порівнянню теоретичних результатів із експериментальними даними. Цей факт досить дивний, особливо з огляду на те, що серед об'єктів дослідження є цілком реальні (не модельні) фізичні системи, вивчення яких, без сумніву, проводять на експерименті.

До дрібних зауважень належать:

2. У розділі 2 на стор. 70 для оцінки ефективного поля взято значення

- дипольного моменту $5 D$. Воно видається трохи завищеним, зважаючи на типові значення $\sim 1 D$.
3. У формулі (5.13) варто було вказати явно, які величини залежать від параметра ξ — без цього рівняння виглядає тривіальним, яким насправді не є.
 4. Використання терміна «надплинність» щодо ґраткових бозе-систем не дуже виправдане. Тут варто було зупинитися на «бозе-конденсації», яку автор вживає паралельно.
 5. Для повного еліптичного інтеграла першого роду автор вживає громіздке позначення $F(\pi/2, m)$ замість простого $K(m)$. Однак тут не до кінця зрозуміло, як саме означено цю функцію. Різні літературні джерела і пакети програм використовують у ролі аргумента як m , так і k , що входять в означення у виразі під коренем у знаменнику як $(1 - m \sin^2\varphi)$ або $(1 - k^2 \sin^2\varphi)$.
 6. У тексті дисертації не уніфіковано деякі позначення (\sinh / sh , \cosh / ch , \Im / Im) та написання (ґратка / ґратка, ґрунт / ґрунт, Ґрін / Ґрін); трапляються орфографічні та пунктуаційні помилки та описки у формулах (наприклад, (4.102) містять уявну одиницю i в уявній частині) тощо.

Зазначені зауваження до дисертації, однак, не мають принципового характеру. За своїм високим науковим рівнем, актуальністю тематики та новизною отриманих результатів робота відповідає вимогам «Порядку присудження наукових ступенів» (постанова КМУ № 567 від 24 липня 2013 р. зі змінами), а сам здобувач, Олег Володимирович Величко, безумовно заслуговує на присудження йому наукового ступеня доктора фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.07 — фізика твердого тіла.

Професор кафедри теоретичної фізики
Львівського національного університету
імені Івана Франка,
доктор фізико-математичних наук,



А. А. Ровенчак

Підпис проф. А. А. Ровенчака засвідчую:
Вчений секретар Львівського національного
університету імені Івана Франка, доцент



О. С. Грабовецька