

## ВІДГУК

офіційного опонента на дисертаційну роботу

Величка Олега Володимировича

«Застосування квантових граткових моделей для опису систем з алсорбованими чи інтеркальованими частинками та оптичних граток».

подану на здобуття наукового ступеня доктора фізико-математичних наук  
зі спеціальності 01.04.07 – фізики твердого тіла

Приємно відзначити, що дана робота намагається заповнити щілину між фізичним експериментом і теорією, розташувавши близче до теоретичного боку. В роботі розвинуті нові актуальні підходи у застосуванні граткових моделей зі сильними кореляціями для мікроскопічного опису фазових діаграм інтеркальованих кристалів, енергетичних спектрів та можливої структурної модулляції двовимірних граток зі структурою типу графену, впливу зовнішніх полів на сегнетоелектрики. Зокрема, в роботі змодельовано вплив гідростатичного тиску на діелектричні властивості кристалів сімейства  $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$ , які відзначаються цікавими залежностями поляризації від тиску й заміщення атомів в катіонній ( $\text{Sn}$  на  $\text{Pb}$ ) чи аніонній ( $\text{S}$  на  $\text{Se}$ ) підгратках. Для даної системи вперше запропоновано деформований варіант моделі Блюма–Емері–Гріффітса з врахуванням впливу механічного напруження, що реалізується через деформацію гратки, яка призводить до реструктуризації локальних атомних конфігурацій. На основі цієї моделі розраховано залежності від тиску для деформації об'єму. Для такої залежності виявлено аномалії в області сегнетоелектричних фазових переходів і трикритичної точки та вивчено поведінку об'ємної стисливості. Отримані результати узгоджуються з експериментом.

Врахування симетрійних особливостей гратки та просторової орієнтації ефективних диполів, пов'язаних з асиметричними структурними групами у сегнетовій солі дозволили здобувачу вперше запропонувати чотиринідграткову модифікацію моделі Міцуї, яка здатна описати появу спонтанної поляризації й вплив електричного поля не лише вздовж сегнетоелектричної осі, а і у довільних напрямках. У такому підході вивчено вплив поперечного електричного поля на поляризацію, зсув температури фазових переходів та аномалії діелектричної сприйнятливості. Вперше теоретично продемонстровано здатність поперечного поля пригнічувати спонтанну поляризацію, що має експериментальне підтвердження.

Використання симетрійного аналізу об'єктів дослідження є сильною стороною роботи, оскільки дозволяє виявити всі можливі типи впорядкувань в рамках застосованого підходу. Так, крім вищезгаданої сегнетової солі, симетрійним аналізом вперше встановлено можливість деформації гратки поєднаної з впорядкуванням антисегнетоелектричного типу у інтеркальованому літієм анатазі (поліморф діоксиду титану). Також теоретично пояснено можливість фазового розширування на біду та багату на літій фазу.

В рамках подальшого модельного опису інтеркальованих систем вперше запропоновано модель типу лад-безлад, що враховує впорядкування локальних квазидиполів, викликане перерозподілом атомів інтеркалянта між неполярними октаедричними та полярними тетраедричними позиціями, здатну описати електретний ефект у інтеркальованих нікелем селенідах індію та галію, що має місце в області малих концентрацій інтеркалянта. Відтворено пікоподібну структуру температурних залежностей діелектричної проникливості. Встановлено, що виникнення стадійного впорядкування в шаруватих кристалах веде до радикальної перебудови спектру електронних збуджень. Зокрема, виникають додаткові гілки спектру, сумарне число яких рівне числу шарів у пакеті. Отриманий аналітичний опис інтеркальованої

шаруватої системи з пакетним впорядкуванням дозволив дослідити зміни її електронних властивостей під дією інтеркаляції. Основна перебудова електронного енергетичного спектру та відповідної густини станів зводиться до появи домішкової зони біля дна основної.

Здобувачем вперше отримано ряд цікавих результатів для моделі Бозе–Хаббарда з двома локальними станами при переносі бозонів лише у збуджений зоні при описі оптичних граток. Продемонстровано появу нестійкості у системі квантових частинок, які описуються даною моделлю, відносно появи бозе-конденсату та/або модуляції зміщень. Показано, що у системі залежно від співвідношення між енергією збудженого стану та параметром взаємодії зміщень виникає стан з модульованим (з подвоєнням періоду гратки) або однорідним зміщеннем частинок. Проаналізовано умови виникнення фази з бозе-конденсатом. Досліджено поведінку параметрів порядку й побудовано фазові діаграми системи як аналітично (для основного стану), так і числовими методами (при ненульовій температурі). Встановлено, що фаза «суперсолід» є одним з можливих метастабільних станів, але вона не є термодинамічно стійкою. Досліджено зонний спектр бозе-атомів у двовимірних гексагональних оптичних гратках із структурою типу графену. Для гратки з енергетично еквівалентними вузлами отримано температурно залежний беззгідний спектр з точками Дірака на краю зони Бріллюена.

Запропонована дисертація має звичну структуру й розпочинається вступом, де обґрунтовано її актуальність, сформульовано мету й завдання, зазначено наукову новизну отриманих результатів і їх практичне значення, вказано особистий внесок здобувача та інформацію про апробацію роботи. Далі наведено короткий огляд сучасного стану досліджень у заторкнутих сферах, зокрема їх практичне застосування та фізичні особливості. Згадано найважливіші теоретичні спроби їх опису й перераховано пов'язані з цим труднощі та невирішенні проблеми.

Подальший вміст дисертації можна умовно розділити на три блоки. Перший з них (другий, третій і четвертий розділи) присвячено теоретичному опису інтеркальованих систем. Зокрема, розроблено чотиристанову мікроскопічну модель для пояснення електретного ефекту в селенідах індію та галію внаслідок впорядкування локальних квазідиполів, викликаного перерозподілом інтеркальованих атомів нікелю між неполярною та полярними позиціями. Відтворено пікіподібну залежність величини електретного ефекту від концентрації та температуру поведінку діелектричної проникливості. Проаналізовано особливості інтеркальованого анатазу (розшарування на порожню й напівзаповнену фази та дві можливі локалізації іонів літію в кисневих октаедрах) й створено модель типу Блюма–Емері–Гріффітса, що враховує загадані особливості, а також пов'язані з інтеркаляцією деформаційні ефекти, досягши адекватного опису даної інтеркальованої системи. За допомогою модифікації періодичної моделі Андерсона отримано аналітичний опис інтеркальованої шаруватої системи з пакетним впорядкуванням і досліджено зміни її електронних властивостей під дією інтеркаляції. Електронні кореляції, що формують структуру домішкового енергетичного спектру, враховано шляхом постулювання форми локальної функції Гріна. Використано два наближення: однорівневу модель та модель з розширеним рівнем, яка враховує ефекти загасання. Основна перебудова енергетичного спектру та відповідної густини станів зводиться до появи домішкової зони біля дна основної.

Другий блок (п'ятий і шостий розділи) присвячено дослідженю бозе-конденсації у двостановій моделі Бозе–Хаббарда в границі жорстких бозонів. Показано, що міжвузлова взаємодія, яка виникає при зміщеннях частинок з їх рівноважних положень, може приводити до спонтанного порушення симетрії і появи фази з однорідним або просторово модульованим зміщеннем. Матричні елементи зміщень

пов'язані з переходами бозонів між основним і збудженим коливним станом, тобто є аналогом дипольних впорядкувань у сегнетоелектрических кристалах. У областях значень хімічного потенціалу бозонів, де їх концентрація не є цілочисельною і змінюється, міжузлове перенесення частинок приводить до нестійкості щодо появи бозе-конденсату. Числовий аналіз умов термодинамічної стійкості станів встановив нестійкість у даній системі екзотичної фази типу суперсолід (з ненульовими значеннями обох параметрів порядку). Також розраховано енергетичний спектр бозонних збуджень та одночастинкові спектральні густини для плоскої гексагональної гратки типу графену. Розглянуто особливості форми зонного спектру та спектральної густини у нормальній фазі в залежності від розташування рівня хімічного потенціалу, різниці між локальними енергіями частинок у підгратках та температурі.

Сьомий розділ дисертації містить завершальний блок, присвячений застосуванню граткових моделей до мікрокопічного опису впливу ефективних полів на сегнетоелектрики зі складною структурою. Як показано в літературі, у локально ангармонічних кристалах прикладання як зовнішнього, так і внутрішнього (спричиненого заміщенням атомів) тисків перебудовує локальні потенціали (наприклад, у кристалах сімейства  $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$ ), роблячи вклад у механізм переходу в сегнетоелектричний стан. Тому в роботі враховано деформацію кристалічної гратки як безпосередню причину зміни локальних потенціалів (а, отже, й енергетичної щілини між найнижчими рівнями) у рамках запропонованої деформованої моделі Блюма–Емері–Гріффітса й вивчено дипольне впорядкування, що веде до появи спонтанної поляризації, та деформаційні ефекти. Як продовження дослідження впливу ефективних полів на сегнетоелектрики представлено перетворення моделі Міцуї в «тривимірну» з урахуванням усіх чотирьох трансляційно нееквівалентних груп атомів у елементарній комірці сегнетової солі (їх позиції взаємно пов'язані елементами точкової групи симетрії кристалу в парафазі). Запропонована модель здатна описати діелектричні властивості і поляризацію кристалів сегнетової солі у довільному напрямку, а також врахувати ефекти, породжені зовнішнім поперечним електричним полем.

Дисертаційну роботу завершено загальними висновками, списком використаних джерел і додатками.

На фоні загального високого рівня роботи виникло ряд зауважень.

1. Застосування операторів Хаббарда при формулюванні псевдоспінових моделей типу Блюма – Емері – Гріффітса бажано співвідносити з усталеним псевдоспінним представленням. Адже отримані теоретичні результати мають, зокрема, й методичне значення. Добре, що хоч у сьомому розділі наведено відповідне псевдоспінове представлення, але у інших розділах цього не зроблено.
2. При аналізі деформаційних ефектів в моделі Блюма – Емері – Гріффітса автор без належної аргументації описує фазову діаграму з трикритичною точкою нехтуючи біквадратичними взаємодіями. Врахування лише дипольних парних взаємодій відповідає спрощеній моделі Блюма – Капеля, що не може описати виникнення на фазовій діаграмі додаткових, окрім трикритичної точки, особливостей, зокрема антиквадрупольних фаз, тетракритичної або бікритичної точок. Саме такі топологічні ускладнення фазової діаграми актуально дослідити з метою пояснення наявних експериментальних даних.
3. Цитування використаних джерел у дисертаційній роботі виконано на належному рівні (якщо не врахувати, що назви велими відомих журналів подано скорочено, а решти – повністю, порушуючи, таким чином, однозначність), але автор, схоже, запозичує поклики з інших джерел. Бо, якщо цитування оригінальних робіт Валашека [162, 163] можна порозуміти як бажання воздати хвалу пionеру

сегнетоелектрики, то цитування робіт 30–50-х років (для прикладу – [66, 165–167, 198–201]) ймовірно можна пояснити лише перецитуванням, що є цілком здивим, бо в роботі достатньо покликів на сучасні актуальні дослідження.

Однак, зроблені зауваження не слід розглядати як недоліки, вони жодним чином не знижують наукової цінності роботи.

Результати дисертації висвітлено у відповідних розділах двох монографій і п'ятнадцяти наукових публікаціях у міжнародних журналах за її профілем. Вони пройшли апробацію на всеукраїнських і міжнародних конференціях. Автореферат дисертації у повній мірі відображає зміст роботи та викладає її основні положення. Слід звернути увагу, що згідно Наказу МОН України № 1220 від 23 вересня 2019 р. «Про опублікування результатів дисертацій на здобуття наукових ступенів доктора і кандидата наук» вищезгадані публікації прирівняно до еквіваленту двадцяти п'яти наукових публікацій (десять статей у журналах третього квартиля за даними SCImago з кратністю два).

Вважаю, що за своїм високим науковим рівнем, актуальністю тематики та цінністю і новизною отриманих результатів дисертаційна робота Величка Олега Володимировича «Застосування квантових граткових моделей для опису систем з адсорбованими чи інтеркалеваними частинками та оптичних граток» відповідає вимогам постанови Кабінету Міністрів України «Порядок присудження наукових ступенів» щодо докторських дисертацій, а її автор заслуговує присудження наукового ступеня доктора фізико-математичних наук зі спеціальності 01.04.07 – фізики твердого тіла.

Член – кореспондент НАН України,  
доктор фізико – математичних наук,  
професор

Підпись Височанського Ю.М. завіряє:  
вчений секретар Ужгородського  
національного університету

Височанський Ю.М.

доц. Мельник О.О.

