# Облікова картка дисертації

## I. Загальні відомості

**Державний обліковий номер:** 0419U002439

**Особливі позначки:** відкрита

**Дата реєстрації:** 20-05-2019

**Статус:** Захищена

**Реквізити наказу МОН / наказу закладу:**

## II. Відомості про здобувача

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Баліга Василь Ярославович
2. Baliha Vasyl Ya.

**Кваліфікація:**

**Ідентифікатор ORCID ID:** Не застосовується

**Вид дисертації:** кандидат наук

**Аспірантура/Докторантура:** так

**Шифр наукової спеціальності:** 01.04.02

**Назва наукової спеціальності:** Теоретична фізика

**Галузь / галузі знань:** Не застосовується

**Освітньо-наукова програма зі спеціальності:** Не застосовується

**Дата захисту:** 15-05-2019

**Спеціальність за освітою:** Фізика

**Місце роботи здобувача:** Інститут фізики конденсованих систем НАН України

**Код за ЄДРПОУ:** 05540014

**Місцезнаходження:** вул. Свєнціцького, 1, м. Львів, Львівська обл., 79011, Україна

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Національна академія наук України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

## III. Відомості про організацію, де відбувся захист

**Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради):** Д 35.156.01

**Повне найменування юридичної особи:** Інститут фізики конденсованих систем НАН України

**Код за ЄДРПОУ:** 05540014

**Місцезнаходження:** вул. Свєнціцького, 1, м. Львів, Львівська обл., 79011, Україна

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Національна академія наук України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

## IV. Відомості про підприємство, установу, організацію, в якій було виконано дисертацію

**Повне найменування юридичної особи:** Інститут фізики конденсованих систем НАН України

**Код за ЄДРПОУ:** 05540014

**Місцезнаходження:** вул. Свєнціцького, 1, м. Львів, Львівська обл., 79011, Україна

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Національна академія наук України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

## V. Відомості про дисертацію

**Мова дисертації:**

**Коди тематичних рубрик:** 29.19.37, 29.19.43

**Тема дисертації:**

1. Ефекти фрустрацій у квантових антиферомагнетиках Гайзенберга на двошарових ґратках

2. Effects of frustration in quantum Heisenberg antiferromagnets on bilayer lattices

**Реферат/анотація:**

1. Дисертаційна робота присвячена дослідженню властивостей фрустрованих квантових антиферомагнетиків Гайзенберга, які за певних умов мають бездисперсійну (плоску) зону в одночастинковому енергетичному спектрі. Модель досліджена в сильних магнітних полях та при низьких температурах. Розглянуто s=1/2 антиферомагнітну модель Гайзенберга на кількох двошарових ґратках (квадратна, шестикутна і трикутна) з магнонними станами з плоскої зони з найменшою енергією за наявності сильного магнітного поля. Для цих систем, через локалізований характер магнонних станів, здійснено відображення на класичні гази жорстких об'єктів. Таке відображення зводить вивчення квантових моделей до добре відомих класичних, які дозволяють зробити висновки про властивості вихідних моделей. Використано операторну теорію збурень у наближенні сильного зв'язку для побудови ефективних гамільтоніанів. Отримані ефективні моделі дозволили дослідити фазові переходи, пов'язані з впорядкуванням локалізованих магнонів. Ці фазові переходи належать до різних класів універсальності. Коли розглядалася повністю антиферомагнітна модель (квадратна та шестикутна геометрії) в режимі повної фрустрації, то виявлено фазові переходи, які належать

до класу універсальності двовимірної моделі Ізинга. У випадку трикутної геометрії для повністю антиферомагнітної моделі виявлено фазовий перехід, що належить до класу універсальності двовимірної тристанової моделі Потса, а в випадку, коли деякі взаємодії на ґратці є феромагнітними — фазовий перехід першого роду, який у певній критичній точці переходить у фазовий перехід другого роду з класу універсальності двовимірної моделі Ізинга. Для повністю антиферомагнітної моделі заданої на шестикутній двошаровій ґратці при малих відхиленнях від режиму повної фрустрації виявлено спін-флоп перехід, який притаманний XXZ моделі з легкою віссю намагнічення. На основі ефективної моделі розроблено теорію для магнітної сполуки $Ba_2CoSi_2O_6Cl_2$ у зовнішньому магнітному полі для опису її низькотемпературних властивостей. Сполука описується квадратною спіновою моделлю на квадратному двошарі. Відтворено результати експериментів для цієї сполуки та зроблено нові передбачення, які потребують експериментальних досліджень для їх підтвердження. Також обговорено застосовність розробленої теорії на основі квантової моделі Гайзенберга на шестикутній двошаровій ґратці до магнітної сполуки $Bi_3Mn_4O_{12}(NO_3)$. Для повноти картини, в роботі досліджено основний стан квантового антиферомагнетика Гайзенберга на двошарах різної геометрії (квадратна, шестикутна) за відсутності магнітного поля при $T=0$. Для цього застосовано варіаційний підхід. Запропоновано пробні варіаційні хвильові функції, які добре описують стан системи при певних співвідношеннях між параметрами обмінних взаємодій. Із порівняння варіаційних енергій побудовано фазові діаграми. Отримані результати співставлено з недавно одержаними за допомогою складніших методів. Спостерігається якісна узгодженість та добра кількісна згода для деяких критичних точок. Як простий приклад, розглянуто модель Тасакі-Габарда задану на пилкоподібному ланцюжку, де можна спостерігати ефекти присутності сильних кореляцій та найнижчої бездисперсійної (плоскої) зони в енергетичному спектрі. Вивчено властивості такого парамагнетика в нехтовно малому зовнішньому магнітному полі та здійснено порівняння зі звичайним парамагнетиком Кюрі. Виявлено, що на відміну від звичайного парамагнетика, в парамагнетику Тасакі-Габарда є залишкова ентропія. Також такий парамагнетик легше намагнічується. У дисертації вивчено як впливають на властивості системи відхилення від режиму повної фрустрації та знак деяких обмінних взаємодій. Для однієї з моделей досліджено систему в магнітному полі з довільним напрямком. Застосовано операторну теорію збурень у випадку некомутуючого з повним гамільтоніаном доданку Зеємана.

2. The thesis is devoted to investigation of the properties of frustrated quantum Heisenberg antiferromagnets, which under special conditions have a dispersionless (flat) band in the one-particle energy spectrum. The model is investigated in strong magnetic fields and at low temperatures. An $s=1/2$ antiferromagnetic Heisenberg model on several bilayer lattices (square, honeycomb and triangular) with magnon states from the flat band with lowest energy in the presence of a strong magnetic field is considered. Due to the localized nature of the flat-band magnon states, these systems are mapped on the classical lattice gases of hard-core objects. This mapping simplified the study of quantum models, reducing them to well-known classical ones, which allows us to draw the conclusions about the properties of the initial models. Also, the standard strong-coupling perturbation theory is applied for constructing effective Hamiltonians. These effective models allowed to investigate the phase transitions related to the ordering of localized magnons. These phase transitions belong to the different classes of universality. When completely antiferromagnetic model (square and honeycomb geometry) was considered in full frustration regime, the phase transitions that belong to the universality class of the two-dimensional Ising model were found. In the case of triangular geometry, for a completely antiferromagnetic model, the phase transition belonging to the universality class of the two-dimensional three-state Potts model, and in the case, when some interactions on the lattice are ferromagnetic — the discontinuous phase transition, which at a certain critical point reached the continuous phase transition from the universality class of the two-dimensional Ising model were found. For a completely antiferromagnetic model on a honeycomb bilayer lattice for a small deviations from the full frustration regime, a spin-flop transition, which occurs in a XXZ model with an easy axis of magnetization, was found. On the basis of an effective model, a theory for a magnetic compound $Ba_2CoSi_2O_6Cl_2$ in an external magnetic field for the description of its low-temperature properties is developed. The compound can be described as a quantum spin model on a square bilayer lattice. The results of experiments for this compound have been

reproduced and new predictions have been made, which require new experimental studies to confirm them. The applicability of the developed theory based on the Heisenberg quantum model on a honeycomb bilayer lattice to the magnetic compound Bi3Mn4O12(NO3) is also discussed. For completeness, the ground state of the quantum Heisenberg antiferromagnet on the bilayers with different geometries (square, honeycomb) in the absence of magnetic field is investigated. A variational approach has been applied for that. The trial variational wave functions, which describe the state of the system for the certain relations between exchange interaction parameters, are proposed. By comparing the variational energies, the ground-state phase diagrams are constructed. The obtained results are compared with obtained recently by more sophisticated methods. Qualitative consistency and good quantitative agreement for some critical points are observed. As a simple example, the Tasaki-Hubbard model on a sawtooth chain, where one can observe the effects of the presence of strong correlations and the lowest dispersionless (flat) band in the energy spectrum is considered. The properties of such a paramagnet in an infinitesimally small external magnetic field are studied and a comparison with the usual Curie paramagnet is made. It is found that in contrast to the usual paramagnet, the Tasaki-Hubbard paramagnet has a residual entropy. Also, such a paramagnet is more easily to magnetize. In the thesis, the influence of the deviation from the full frustration regime and the sign of some exchange interactions on the system properties is studied. For one of the spin models, the system is investigated in a magnetic field with an arbitrary direction. The perturbation theory is extended to the case, when full Hamiltonian does not commute with the Zeeman term.

**Державний реєстраційний номер ДіР:**

**Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки:**

**Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності:**

**Підсумки дослідження:**

**Публікації:**

**Наукова (науково-технічна) продукція:**

**Соціально-економічна спрямованість:**

**Охоронні документи на ОПІВ:**

**Впровадження результатів дисертації:**

**Зв'язок з науковими темами:**

## VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Держко Олег Володимирович

2. Derzhko Oleg V.

**Кваліфікація:** д. ф.-м. н., 01.04.02

**Ідентифікатор ORCID ID:** Не застосовується

**Додаткова інформація:**

**Повне найменування юридичної особи:**

**Код за ЄДРПОУ:**

**Місцезнаходження:**

**Форма власності:**

**Сфера управління:**

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

## VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

**Офіційні опоненти**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Пастухов Володимир Степанович

2. Pastukhov Volodymyr S.

**Кваліфікація:** к. ф.-м. н., 01.04.02

**Ідентифікатор ORCID ID:** Не застосовується

**Додаткова інформація:**

**Повне найменування юридичної особи:**

**Код за ЄДРПОУ:**

**Місцезнаходження:**

**Форма власності:**

**Сфера управління:**

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Карнаухов Ігор Миколайович

2. Karnaukhov Igor M.

**Кваліфікація:** д. ф.-м. н., 01.04.07

**Ідентифікатор ORCID ID:** Не застосовується

**Додаткова інформація:**

**Повне найменування юридичної особи:**

**Код за ЄДРПОУ:**

**Місцезнаходження:**

**Форма власності:**

**Сфера управління:**

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

**Рецензенти**

## VIII. Заключні відомості

| | |
|---|---|
| **Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради** | Мриглод Ігор Миронович |
| **Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні** | Мриглод Ігор Миронович |
| **Відповідальний за підготовку облікових документів** | |
| **Реєстратор** | |
| **Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності** | Юрченко Т.А. |