Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0821U102826

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 16-12-2021

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Гутак Тарас Ігорович
2. Hutak Taras I.

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор філософії

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 104

Назва наукової спеціальності: Фізика та астрономія

Галузь / галузі знань:

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 14-12-2021

Спеціальність за освітою: Фізика

Місце роботи здобувача: Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05540014

Місцезнаходження: вул. Свєнціцького, буд. 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): ДФ 35.156.002

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05540014

Місцезнаходження: вул. Свєнціцького, буд. 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 Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05540014

Місцезнаходження: вул. Свєнціцького, буд. 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: 27.35.49, 29.19.37, 29.19.03

Тема дисертації:

1. Термодинаміка фрустрованих квантових спінових систем

2. Thermodynamics of frustrated quantum spin systems

Реферат/анотація:

1. Дисертаційна робота присвячена дослідженню термодинаміки квантових фрустрованих спінових систем. У дисертаційній роботі пояснено природу псевдопереходів. Для того, щоб виявити причину цих низькотемпературних особливостей розглянуто декілька декорованих систем: двонога драбинка Ізинга із тримерними щаблями у нульовому магнітному полі, спін–1/2 Ізинг–XYZ ромбічний ланцюжок, спін–електронний ланцюжок подвійних тетраедрів і спін–1/2 ланцюжок подвійних тетраедрів Ізинга–Гайзенберга. Застосувавши декораційно–ітераційне перетворення для двоногої драбинки Ізинга із тримерними щаблями, побудовано ефективний гамільтоніан на звичайній двоногій драбинці Ізинга із залежною від температури взаємодією на щаблях. При певному значенні температури (яке відповідає псевдокритичній температурі) обмінна взаємодія на щаблях дорівнює нулеві, що приводить до ефективного розщеплення драбинки на два невзаємодіючі ланцюжки Ізинга. Якщо псевдокритична температура є

достатньо малою (у одиницях обмінної взаємодії вздовж ланцюжків), тоді спостерігатимуться сліди критичної поведінки простого ланцюжка Ізинга при нульовій температурі та нульовому полі. Показано, що в околі псевдокритичної температури (але не у псевдокритичній точці) модель виявляє квазікритичну поведінку. Декораційно–ітераційне перетворення для кількох декорованих класично-квантових ланцюжків приводить до ефективного гамільтоніану ланцюжка Ізинга із залежною від температури обмінною взаємодією і магнітним полем. У псевдокритичній точці ефективне магнітне поле дорівнює нулеві і модель відповідає простому ланцюжку Ізинга у нульовому полі. І у цьому випадку низькотемпературні особливості пов'язані із критичною поведінкою простого ланцюжка Ізинга при нульовій температурі та нульовому полі. Квазікритичні показники декорованих класично–квантових ланцюжків співпадають із отриманими для двоногої драбинки Ізинга. Таким чином, встановлено причину виникнення псевдокритичної поведінки для низки одновимірних декорованих (фрустрованих) моделей Ізинга. Дослідження впливу геометричної фрустрації на термодинамічну поведінку квантових тривимірних спінових систем проводилося на прикладі гратки пірохлору, яка є найбільш фрустрованою граткою у трьох вимірах. Термодинамічні та динамічні властивості квантового S=1/2 феромагнетика Гайзенберга розглядалися методом двочасових функцій Гріна в наближенні Тяблікова (наближення хаотичних фаз). З аналізу самоузгодженого рівняння для намагніченості знайдено значення критичної температури і температурну залежність намагніченості у феромагнітній фазі і однорідної магнітної сприйнятливості у парамагнітній фазі. Обчислені результати для намагніченості та теплоємності (для температур нижче критичної) і однорідної магнітної сприйнятливості (для температур вище критичної) порівнювалися із результатами симуляцій методом квантового Монте Карло. Обчислений динамічний структурний фактор порівнювався з експериментом із непружнім розсіянням нейтронів для сполуки Lu2V2O7. Отриманий в наближенні Тяблікова динамічний структурний фактор якісно правильно описує експериментальні дані. Термодинаміка квантового S=1/2 антиферомагнетика Гайзенберга на гратці пірохлору розглядалась в рамках методу ентропії. На основі високотемпературних розвинень до тринадцятого порядку за оберненою температурою для теплоємності та магнітної сприйнятливості проводилась інтерполяція за припущення про різні сценарії низькотемпературної поведінки. Низькотемпературна поведінка теплоємності залежить від спектру низькоенергетичних збуджень системи. У випадку безщілинного спектру теплоємність має степеневу асимптотику, а у випадку спектру із щілиною — термічно активовану асимптотику. У роботі досліджувалась інтерполяція методом ентропії для обидвох випадків. При доступному тринадцятому порядку високотемпературних розвинень самоузгоджена процедура в методі ентропії, побудована на аналізі найбільшої кількості близьких Паде апроксимант, дає підстави вважати, що сценарій безщілинного спектру більш достовірний. Температурний профіль теплоємності не містить низькотемпературних особливостей типу додаткового максимуму чи плеча. Однак, максимум теплоємності значно зсунутий в область низьких температур. Така поведінка спостерігається безвідносно до припущень про спектр низькоенергетичних збуджень. Магнітна сприйнятливість має широкий максимум.

2. The thesis is devoted to the study of the thermodynamics of the frustrated quantum spin systems. To reveal the reason for the emergence of pseudo-transitions, we consider a number of decorated one-dimensional systems. Namely, the two-leg ladder Ising model with trimer rungs, the spin–1/2 Ising–XYZ diamond chain, the double–tetrahedral chain of localized Ising spins and mobile electrons, and the spin–1/2 Ising–Heisenberg double-tetrahedral chain. After a decoration-iteration transformation, the effective Hamiltonian for the two-leg ladder Ising model with trimer rungs becomes the simple two-leg rail-road Ising ladder Hamiltonian with the temperature-dependent interactions for the interleg coupling. At some finite temperature (pseudocritical temperature) vanishes. Effectively, this corresponds to a splitting of the two-leg ladder into two independent Ising chains. For sufficiently small values of the pseudocritical temperature (in the units of exchange coupling of the chain), the traces of the simple Ising chain criticality at zero temperature and zero field are clearly seen. Around the pseudocritical temperature (but not in the immediate vicinity of the pseudocritical temperature) the model shows pseudo-critical behavior. The decoration-iteration transformation for a number of considered decorated classical–quantum chains leads to the simple Ising chain Hamiltonian with the temperature-dependent exchange

interaction and magnetic field. The effective magnetic field vanishes at the pseudocritical temperature and, consequently, the model corresponds to the simple Ising chain at zero magnetic field. Therefore, the low-temperature peculiarities of the decorated Ising chains show up from the simple Ising chain criticality at the zero temperature and field. Quasicritical exponents of the decorated classical–quantum chains coincide with the ones obtained for the two-leg Ising ladder. As a result, the reason for the peculiar low-temperature behavior of some spin–1/2 decorated (frustrated) one-dimensional Ising models has been revealed. To study the influence of geometrical frustration on thermodynamics of a three-dimensional quantum spin systems we consider a pyrochlore lattice. The pyrochlore lattice is the most frustrated lattice in three dimensions. Thermodynamic and dynamic properties of quantum S=1/2 ferromagnetic Heisenberg model were studied by the double-time temperature-dependent Green functions method within the random phase approximation. The value of the critical temperature and the temperature dependence of the magnetization in the ferromagnetic phase and the magnetic susceptibility in the paramagnetic phase were found from the analysis of the self-consistent equation for magnetization. We compare the magnetization and the specific heat (for the temperatures below the critical one) and the magnetic susceptibility (for the temperatures above the critical one) with the results of quantum Monte Carlo simulations. The dynamic structure factor was compared with inelastic neutron scattering data for Lu2V2O7 material and a satisfactory agreement has been found. To study the thermodynamics of the quantum S=1/2 antiferromagnetic Heisenberg model we used the entropy method. The interpolation between high temperatures (based on the 13-th order high-temperature expansion for the specific heat and the magnetic susceptibility) and low temperatures according to different scenarios for the low-energy excitation spectrum has been made. The low-temperature dependence of the specific heat is determined by the nature of low-energy excitation spectrum of the system. In the case of gapless spectrum, the specific heat follows a power-law behavior, whereas for the gapped spectrum, the specific heat is thermally activated. The interpolation within the framework of the entropy method was made for both cases. We apply a self-consistent procedure within the entropy method based on the largest number of coinciding Pade approximants to analyze the thermodynamic observables. For the available order of the high-temperature expansion, the assumption of the gapless spectrum is more robust. The specific heat does not have any extra low-temperature features like a peak or shoulder. However, the location of the main maximum is significantly shifted to lower temperatures. This behavior is independent of the assumed type of low-energy excitations. The magnetic susceptibility has a broad maximum.

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 Oleh Volodymyrovych

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. Кузян Роман Оганесович

2. Kuzian Roman O.

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

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Кузьмак Андрій Романович

2. Kuzmak Andrij R.

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

Рецензенти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Дудка Максим Леонідович

2. Dudka Maxym Leonidovych

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. Шпот Микола Адріанович

2. Shpot Mykola A.

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

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.