

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу Хамеда Ариана Зада «Термическая перепутанность и магнитные свойства металлосодержащих материалов», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01. 04. 02. «Теоретическая физика».

Диссертационная работа Хамеда Ариана Зада посвящена изучению квантовых статистических моделей металлосодержащих комплексов с ферромагнитным и антиферромагнитным обменным взаимодействиями. Такие системы часто демонстрируют множество нетривиальных квантовых явлений, например, квантовую термическую перепутанность и плато намагниченности. Для их описания в диссертации потребовалось применение как и новой вычислительной парадигмы - квантовых алгоритмов вычислений, так и точного аналитического подхода - метода трансфер-матрицы. Важное место в диссертации занимает сравнение полученных результатов с экспериментальными данными термической перепутанности в спиновых соединениях, основанных на измерениях магнитной восприимчивости и теплоемкости в металлосодержащих комплексах.

Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и библиографии.

Во введении автор описывает методы и алгоритмы, которые используются в диссертации. А именно: метод трансфер-матрицы для описания одномерных и двумерных металлосодержащих кластеров спиновых решеток Изинга-Гайзенберга, метод точной диагонализации. квантовый метод Монте-Карло из пакета Алгоритмов и библиотек для физического моделирования (ALPS).

В первой главе исследуются квантовые свойства гетерометаллических координационных соединений Fe-Mn-Cu на локальном димере цепи Изинга-Гайзенберга со спином $\frac{1}{2}$. Затем, в рамках формализма метода трансфер-матрицы, дается точный анализ термической перепутанности пар, как следствие квантовой корреляции в данной смеси. Получено термическое перепутывание для этой цепи в зависимости от напряженности магнитного поля с различными температурами и температуры для нескольких фиксированных значений напряженности магнитного поля с различными параметрами примеси.

Во второй главе в рамках метода трансфер-матрицы точно получены магнитные и термодинамические характеристики магнетокалорического эффекта двойной пины Изинга-Гайзенберга (MCE) и смешанной спиновой $(1/2, 1)$ двуногой лестницы Изинга-Гайзенберга с сильным взаимодействием ступеней. Показана важная роль дополнительного, так называемого, циклического члена четырех спинового взаимодействия Изинга в гамильтониане модели при исследовании физических свойств спиновых лестниц. Свойство анизотропии димеров Гайзенберга исследована также и в направлении оси z . Получен интересный результат: изменение магнитной анизотропии связано с изменением анизотропии, наблюдаемой для квантового перепутывания. Показано, что при низких температурах кривая удельной теплоемкости аномально ведет себя вблизи критических значениях напряженности магнитного поля, при котором происходит скачок намагниченности.

В третьей главе дается точное решение двумерной модели Изинга-Гайзенберга со спинами $1/2$ и 1 на решетке треугольник в треугольнике (TIT) с помощью обобщенного преобразования

звезда-треугольник. Найдено точное отображение на простую модель Изинга со спином-1/2 на треугольной решетке. Построены фазовые диаграммы как при конечных температурах, так и в основном состоянии. В зависимости от магнитного поля обнаружены нестандартные квантовые фазы для модели Изинга-Гайзенбера на решетках ТГТ с различными граничными условиями. Показано, что спонтанная намагниченность является результатом квантовых флуктуаций, которые сильно зависят от анизотропии. Также получено, что удельная теплоемкость модели Изинга-Гайзенбера на решетках ТГТ имеет логарифмическую особенность. На границе неупорядоченной квантовой парамагнитной фазы (QPP) эта особенность заменяется одним пиком Шоттки, а для некоторых параметров обнаруживаются двойные (тройные) пики.

В четвертой главе подробно рассматриваются магнитные и термодинамические свойства восьмивершинного комплекса на основе гетерометаллических соединений фосфоната никеля $NiII_4 LnIII_4$ ($Ln = Tb, Dy, Ho, Er$) с молекулярной структурой маслянистой формы. Исследован также и четырехвершинный квадратный комплекс на основе $CuII_4$. Найдено плато намагниченности, поведение удельной теплоемкости, магнитной восприимчивости, термической перепутанности и пиков Шоттки. Термодинамические свойства этих систем получены методом точной диагонализации и при помощи квантового Монте-Карло моделирования (QMC) из пакета Алгоритмов и библиотек для физического моделирования (ALPS).

Полученные научные результаты четко сформулированы в защищаемой диссертации и опубликованы в ведущих научных изданиях по этой тематике. Необходимо, также отметить, следующее. В молекулярной структуре кластера $[Ni_8 (\mu_3-OH)_4(OH)_2(O_3PC_{10}H_{17}PO_3H)_2(O_2CtBu)_6 -(H O_2CtBu)_8]$, как показали недавние эксперименты углы $Ni - O - Ni$ находятся в диапазоне $93-99^\circ$ и $111-135^\circ$ соответственно, что несколько меняет ферро и антиферромагнитное взаимодействие в таком кластере. Однако, это замечание не отражается на общем качестве диссертации.

Объем и высокий научный уровень выполненной диссертационной работы, актуальность темы, оригинальность, теоретическая и прикладная значимость полученных результатов полностью соответствует требованиям ВАК РА к кандидатским диссертационным работам. Автореферат полностью отражает содержание диссертации, а ее автор Хамид Ариан Зад, несомненно, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02.- "Теоретическая физика".

Старший научный сотрудник ЛТФ ОИЯИ,
кандидат физико-математических наук
12.05.21

Вл. В. Папоян

Подпись с. н. с. ЛТФ ОИЯИ Вл. В. Папояна заверяю
ученый секретарь ЛТФ ОИЯИ
кандидат физико-математических наук



А.В. Андреев