

Отзыв официального оппонента

д.ф.-м.н., проф. Прудникова Павла Владимировича на диссертационную работу Ясинской Дарьи Николаевны «Фазовые состояния и критические свойства разбавленного изинговского магнетика», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.3 – теоретическая физика

Диссертационная работа Ясинской Дарьи Николаевны посвящена вопросам изучения исследованию фазовых превращений в неупорядоченных анизотропных низкоразмерных спиновых и псевдоспиновых системах, описывающих конкуренцию зарядового и магнитного упорядочений методами компьютерного моделирования. В диссертации рассматривается одновременная конкуренция таких эффектов как фрустрация, анизотропия, взаимодействие зарядовых и магнитных степеней свободы, дополнительное взаимодействие флуктуаций, обусловленное полем дефектов. Сочетание этих факторов создает с одной стороны сложности в интерпретация полученных результатов, но с другой стороны позволяет воспроизводить поведение многофазных структур и предсказывать возникновение новых фаз.

Выполненные диссертационные исследования и полученные результаты несомненно обладают научной новизной. Особенно хотелось выделить следующие наиболее важные результаты, полученные автором:

1. Проведенное моделирование методом Монте-Карло привело к выявлению фазовых переходов типа порядок-порядок и возвратных фазовых переходов, а также к наблюдению вырождения основного состояния, которое проявляется не только в точке фрустрации, но и в её окрестности. Эти эффекты обусловлены комплексным влиянием конкуренции двух упорядочений и наличия немагнитных примесей.
2. Показано, что в 2D и 3D системах вблизи области фрустрации присутствуют сильно выраженные фазовые переходы первого рода, которые соотносятся с областями псевдопереходов в 1D цепочке. Выявлен класс универсальности модели Изинга, который нарушается при увеличении плотности заряда в системе, что приводит к кроссоверу к неуниверсальному критическому поведению.
3. В разбавленной цепочке выявлен новый тип псевдопереходов «второго рода», с перегибами в температурных зависимостях энтропии и намагниченности, и резкими скачками в температурных зависимостях теплоёмкости и восприимчивости. Природа

новых псевдопереходов связана с фазовым расслоением на магнитоупорядоченную фазу и зарядовую каплю.

Научная новизна проведенных исследований и полученных результатов в диссертации сомнений не вызывают.

Диссертационная работа состоит из введения, оригинальных глав, заключения, списка цитируемой литературы, списка публикаций автора по теме диссертации и приложения, содержащего фазы основного состояния. Она содержит 146 страниц машинописного текста, 52 рисунка, и 8 таблиц. Список литературы состоит из 166 наименований. Основное содержание работы четко структурировано в рамках трех оригинальных глав, каждая из которых посвящена решению конкретной научной задачи исследования в рамках общей тематики диссертационной работы.

Во введении кратко сформулированы основные фундаментальные и практические проблемы, на решение которых направлено диссертационное исследование, заявлены актуальность темы исследования, объект и предмет исследования, цель и задачи исследования, а также представлены положения и результаты, выносимые на защиту.

В первой главе представлен исчерпывающий обзор, позволяющий проследить этапы развития представлений о моделировании низкоразмерных магнетиков с учетом эффектов фрустрации и разбавления. Обсуждается общая модель описания указанных эффектов с аналитическими и численными вариантами решения.

Во второй главе обсуждается многообразие фаз неупорядоченного низкоразмерного изинговского магнетика.

Третья глава решение цепочки спинов в рамках расширенного подхода трансфер-матрицы и отображения системы на марковскую цепь. Особое внимание уделяется анализу псевдопереходов. Предложено описание псевдопереходов, связанное с фазовым расслоением.

Четвертая глава подробно раскрывает основные результаты численных исследования двумерных и трехмерных систем модифицированным алгоритмом Кавасаки-Метрополиса. Выявлено влияние фрустрации и дефектов на фазовые состояния магнетиков.

В заключении представлены обобщающие выводы по работе.

В качестве основных научных результатов, полученных автором и имеющих существенное значение, следует отметить следующие:

1. В работе обнаружено значительное разнообразие фаз основного состояния, большинство из которых являются фрустрированными с ненулевой остаточной энтропией. Фазовые диаграммы основного состояния имеют сложный вид, который качественно определяется степенью разбавления примесями и величиной внешнего магнитного поля.

2. Был предложен быстрый и высокоэффективный метод точного расчёта термодинамических свойств разбавленных спиновых цепочек в рамках большого канонического ансамбля, основанный на свойствах трансфер-матрицы системы. Рассмотрено универсальное применение отображения спиновых цепочек на марковские цепи, которое позволяет получать аналитические выражения для остаточной энтропии различных фрустрированных фаз и на границах раздела фаз.

3. В «однородной» цепочке наблюдаются псевдопереходы «первого рода» – особенности термодинамического поведения, напоминающие фазовые переходы между зарядовой и магнитной квазифазами. Энтропия и намагниченность демонстрируют скачки, напоминающие ФП первого рода, тогда как теплоёмкость и восприимчивость имеют острые пики и универсальные псевдокритические показатели.

В процессе знакомства с результатами диссертационной работы возникли следующие вопросы и замечания:

1. Во второй главе влияние плотности заряда немагнитных примесей n приводит к разделению фаз на случай слабо и сильно разбавленной системы. Можно ли сделать обобщающий вывод, что граница раздела фаз определяется порогом перколяции?

2. В четвертой главе был разработан метод Метрополиса-Кавасаки, учитывающий два типа динамики. Было бы полезно привести графики и характеристики динамического поведения этих процессов.

3. В разделе 4.6.2 декларируется наблюдение метастабильных состояний. Возникает вопрос наблюдались ли эффекты гистерезиса, характерные для метастабильных состояний и ФП первого рода в этих областях?

4. Диссертация практически лишена недостатков оформления, за исключением наличия непропечатанных символов на многих рисунках. Использование термина “биннинг” данных представляется неудачным.

Указанные замечания не носят принципиальный характер, и не оказывают существенного влияния на общую положительную оценку диссертационной работы.

Диссертация соответствует пунктам 5 и 8 паспорта специальности 1.3.3 «Теоретическая физика».

Вышеизложенное позволяет заключить, что диссертационная работа «Фазовые состояния и критические свойства разбавленного изинговского магнетика» по актуальности, научной новизне, масштабу проведенных исследований и значимости полученных результатов полностью соответствует профилю диссертационного совета, паспорту заявленной специальности и удовлетворяет требованиям п. 9 Положения о присуждении ученых степеней в УрФУ, а ее автор, Ясинская Дарья Николаевна, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.3 – теоретическая физика.

Официальный оппонент

доктор физико-математических наук,

специальность 01.04.07 - физика конденсированного состояния, профессор,

главный научный сотрудник отдела материаловедения и

физико-химических методов исследования,

Центр новых химических технологий ИК СО РАН

Прудников Павел Владимирович

Дата: 15 мая 2025 г.

Адрес служебный: 644040, Российская Федерация, г. Омск, ул. Нефтезаводская, 54, Центр новых химических технологий Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Федеральный исследовательский центр «Институт катализа им. Г.К. Борескова Сибирского отделения Российской академии наук» (Омский филиал), тел. +7(381-2) 67-33-32, факс: +7(381-2) 64-61-56, e-mail: prudnikp@ihcp.ru

Подпись д.ф.-м.н., гл. науч. сотр. Центра новых химических технологий ИК СО РАН Прудникова Павла Владимировича удостоверяю.

Ученый секретарь Центра новых
химических технологий ИК СО РАН,
кандидат химических наук



Сырьева Анна Викторовна