

ВИСНОВОК

про наукову новизну, теоретичне та практичне значення

дисертації Унуковича Владислава Ігоровича

«Дослідження термодинамічних властивостей та фазових станів ультрахолодних фермі-газів з високими спіновими симетріями в оптичних ґратках», яка подається на здобуття наукового ступеня доктора філософії з галузі знань 10 Природничі науки

за спеціальністю 105 Прикладна фізика та наноматеріали

1. Оцінка роботи здобувача у процесі підготовки дисертації і виконання індивідуального плану навчальної та наукової роботи.

У процесі роботи над дисертаційним дослідженням аспірант Унукович В.І. дотримувався індивідуального плану наукової роботи та успішно виконав індивідуальний навчальний план. За час навчання в аспірантурі Унукович В.І. оволодів такими компетентностями: використовувати середньопольові підходи з відповідним усвідомленням меж застосовності до конкретних фізичних систем та спостережуваних величин; використовувати сучасні комп'ютерні ресурси, зокрема, обчислювальних кластерів, для виконання великої кількості паралельних розрахунків; застосовувати перетворення Шріффера-Вольфа з метою отримання ефективних спінових моделей; готувати наукові тексти про проміжні та кінцеві результати досліджень, готувати та здійснювати публічну апробацію результатів досліджень.

2. Обґрунтування вибору теми дослідження.

Формулювання квантової механіки призвело до істотного розвитку теоретичних і практичних підходів дослідження систем за критичних умов. У нашому випадку – утримання атомарних газів у спеціальних просторових

конфігураціях електромагнітних полів (оптичних ґратках). Можливість безпосередньо регулювати параметри наведеної системи робить з неї оптимальний за характеристиками квантовий симулятор.

На його основі стає можливим вивчення поведінки матеріалів за ультранизьких температур: дослідження різних можливих упорядкувань атомів, що призводять до різних магнітних станів; дослідження термодинамічних властивостей за змінних температур та параметрів взаємодії; можливість існування нових ефектів, якто було за відкриття надпровідності та надплинності. Крім цього з'являється можливість не тільки безпосередньо вивчати цілий рад теоретичних моделей, але й оцінити точність передбачень теорій.

На теперішній час тематика ультрахолодних газів має в основі грандіозне теоретичне та експериментальне підґрунтя. У першому випадку розроблено чимало теоретичних моделей, у рамках яких досліджується запропоновані системи (модель Ізінга, модель Гайзенберга, модель Андерсона тощо), а також і методів числових розрахунків характерних для даних систем фізичних величин (метод Динамічної теорії середнього поля, квантовий метод Монте-Карло, алгоритми точної діагоналізації багаточастинкових гамільтоніанів, метод добутків матричних станів тощо). Частка теоретичних робіт присвячена розгляду різноманітних фізичних властивостей, порушенню симетрії у випадку високосиметричних газів для спрощеної моделі Гайзенберга.

З точки зору експериментального розвитку, зроблено і проводиться багато досліджень з методів охолодження систем (доплерівське, сізіфове, випаровувальне, симпатичне охолодження), та безпосередня перевірка оцінок, запропонованих у різних теоретичних моделях.

Мета і завдання дослідження. Метою дисертаційного дослідження є дослідити термодинамічні властивості ультрахолодних чотирикомпонентних фермі-газів з високими спіновими симетріями в ґратках, створених періодичними потенціалами, для однорідних нескінченних систем, а також

дослідити термодинамічні властивості газів зі скінченною кількістю частинок у зовнішньому гармонічному потенціалі оптичної пастки; крім того, вивчити ефекти впливу просторовою анізотропії в амплітудах тунелювання в оптичній ґратці на термодинамічні властивості, а також наслідки явного порушення високої спінової симетрії на ефективні моделі опису, енергетичні спектри та просторових розподіли густин атомів газу в оптичних пастках.

Реалізація мети зумовила необхідність вирішення наступних дослідницьких завдань:

- провести теоретичний числовий аналіз залежностей ентропії чотирикомпонентного $SU(4)$ -симетричного фермі-газу від амплітуди локальної взаємодії за різних значень температури;
- побудувати просторові розподіли густини частинок та густини ентропії в чотирикомпонентному $SU(4)$ -симетричному фермі-газі для випадку зовнішнього гармонічного потенціалу оптичної пастки для нейтральних атомів;
- провести теоретичний числовий аналіз для отримання фазової діаграми $SU(4)$ -симетричного фермі-газу на кубічній ґратці за допомогою динамічної теорії середнього поля;
- отримати залежності критичних температур переходів до магнітно-впорядкованих станів від амплітуди тунелювання ферміонів між площинами в анізотропній кубічній ґратці;
- проаналізувати зони стабільності різних магнітно-впорядкованих станів фермі-газів у випадку додаткового зовнішнього потенціалу пастки;
- узагальнити та застосувати перетворення Шріффера–Вольфа для отримання ефективних спінових моделей у випадках явного порушення спінових симетрій у моделі Фермі–Габбарда з чотирма псевдоспіновими компонентами;
- провести числовий аналіз з порівняння енергетичних спектрів моделей Габбарда та Гейзенберга для різних випадків порушення високих спінових симетрій;

– побудувати просторові розподіли густини частинок у гармонічному потенціалі оптичної пастки для чотирикомпонентного фермі-газу нейтральних атомів з різними амплітудами взаємодії та тунелювання.

Об'єктом дослідження є чотирикомпонентний взаємодійний фермі-газ атомів, що знаходиться в періодичному потенціалі оптичної ґратки, утвореної зовнішніми лазерами за наявності або відсутності додаткового гармонічного потенціалу оптичної пастки

Предметом дослідження є вплив ефектів локальної взаємодії, термальних флуктуацій, просторової анізотропії ґратки, явного порушення високої спінової симетрії за рахунок різних амплітуд взаємодії або різних амплітуд тунелювання псевдоспінових компонентів чотирикомпонентних фермі-газів на низькотемпературні рівноважні багаточастинкові властивості, фазові стани та спостережувані фізичні величини.

Методи дослідження. Для вирішення поставлених завдань в дисертації використовуються такі методи дослідження:

- метод вторинного квантування для побудови гамільтоніанів і операторів фізичних величин у термінах операторів народження і знищення частинок;
- квантовомеханічна теорія збурень з точністю до поправок другого порядку за збудженням до гамільтоніана системи;
- перетворення Шріффера–Вольфа для побудови ефективних спінових моделей з гамільтоніана Габбарда;
- динамічна теорія середнього поля;
- числовий метод точної діагоналізації гамільтоніанів у скінченно-вимірному гільбертовому просторі;
- узагальнення динамічної теорії середнього поля для координатного простору;
- метод арифметично-геометрично середніх при обрахуванні еліптичних інтегралів для густини станів у анізотропній ґратці;

- метод моделювання Монте-Карло при обрахуванні еліптичних інтегралів для густини станів у анізотропній ґратці;
- метод наближення локальної густини для знаходження просторових розподілів фізичних величин у гармонічних потенціалах пасток.

3. Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами.

Дисертаційну роботу виконано в Навчально-науковому інституті «Фізико-технічний факультет» Харківському національному університеті імені В.Н. Каразіна відповідно до тематичних планів фундаментальних науково-дослідних робіт. Результати досліджень дисертаційної роботи були отримані в межах виконання науково-дослідної роботи з таких держбюджетних тем:

- «Вплив внутрішніх ступенів вільності частинок на фізичні характеристики квантових систем поблизу фазових переходів», № ДР 0120U102252 (2020–2022 рр.);
- «Магнітні властивості мезоскопічних систем із внутрішніми ступенями вільності», № ДР 0122U001575 (2022–2024 рр.).

Дослідження, що увійшли до дисертаційної роботи, виконувались в рамках відомчого замовлення Національної академії наук України на проведення наукових досліджень з атомної науки і техніки Національного наукового центру «Харківський фізико-технічний інститут» за темою «Розвиток методів статистичної фізики та квантової теорії поля для дослідження проблем фізики квантових систем багатьох частинок та індукованої гравітації й калібрувальних полів у теорії (супер)струн і бран» (№ ДР 0121U108722, 2021–2025 рр.).

Дослідження також проводились в рамках науково-дослідних проєктів, що фінансувалися за рахунок грантової підтримки Національного фонду досліджень України, за темами:

- «Просторові кореляції та впорядковані фази, обумовлені ефектами

взаємодії в ультрахолодних квантових газах» (№ ДР 0120U104963, 2020–2023 pp.);

– «Новітні теоретичні підходи для всебічного опису корельованих квантових систем багатьох тіл » (№ ДР 0124U004372, 2024–2026 pp.).

Частина дисертаційної роботи була виконана за грантової підтримки закордонних дослідницьких організацій за договорами з Українським науково-технологічним центром (УНТЦ):

– проєктна угода з УНТЦ № 9918 “Magnetism for Ukraine 2022”, грантонадавач– IEEE Magnetic Society (2022–2023 pp.);

– проєктна угода з УНТЦ № P800 “US–Ukraine Quantum Forum 2023”, грантонадавач – US Office of Naval Research Global (2023 p.);

– проєктна угода з УНТЦ № 9918 “Magnetism for Ukraine 2023”, грантонадавач – IEEE Magnetic Society (2023–2024 pp.).

4. Особистий внесок дисертанта в отриманні наукових результатів та їх новизна.

Під час дисертаційного дослідження дисертант: провів теоретичний числовий аналіз залежностей ентропії фермі-газу від амплітуди локальної взаємодії за різних значень температури та побудував відповідні просторові розподіли густини частинок та густини ентропії для випадку зовнішнього гармонічного потенціалу оптичної пастки для нейтральних атомів; провів теоретичний числовий аналіз для отримання фазової діаграми $SU(4)$ -симетричного фермі-газу на кубічній ґратці за допомогою динамічної теорії середнього поля; побудував залежності критичних температур переходів до магнітно-впорядкованих станів від амплітуди тунелювання ферміонів між площинами; проаналізував зони стабільності різних упорядкованих станів у випадку додаткового зовнішнього потенціалу пастки; узагальнив і застосував перетворення Шріффера-Вольфа для отримання ефективних спінових моделей

у випадках явного порушення спінових симетрій; провів числовий аналіз з порівняння енергетичних спектрів моделей Габбарда та Гейзенберга для різних випадків порушення симетрій; побудував просторові розподіли густини частинок у гармонічному потенціалі оптичної пастки для нейтральних атомів з різними амплітудами взаємодії та тунелювання. Результати дисертаційної роботи були самостійно отримані здобувачем.

Наукова новизна одержаних результатів розкривається у таких положеннях:

вперше:

1. отримано залежності ентропії чотирикомпонентного $SU(4)$ -симетричного фермі-газу від амплітуди локальної взаємодії за різних значень температури в рамках підходу динамічної теорії середнього поля.
2. побудовано просторові розподіли густини частинок та густини ентропії в чотирикомпонентному $SU(4)$ -симетричному фермі-газі для випадку зовнішнього гармонічного потенціалу оптичної пастки для нейтральних атомів.
3. отримано фазову діаграму з магнітно-впорядкованими станами для $SU(4)$ -симетричного фермі-газу на кубічній ґратці за допомогою динамічної теорії середнього поля.
4. побудовано залежності критичних температур переходів до магнітно-впорядкованих станів від амплітуди тунелювання ферміонів між площинами в анізотропній кубічній ґратці.
5. отримано числові оцінки зон стабільності різних магнітно-впорядкованих станів фермі-газів у випадку додаткового зовнішнього потенціалу пастки.
6. застосовано перетворення Шріффера–Вольфа для отримання ефективних спінових моделей у випадках явного порушення спінових симетрій у моделі Фермі–Габбарда з чотирма псевдоспіновими компонентами.

7. проведено числовий аналіз з порівняння енергетичних спектрів моделей Габбарда та Гейзенберга для різних випадків порушення високих спінових симетрій у чотирикомпонентному взаємодійному фермі-газі.

8. побудовано просторові розподіли густини частинок у гармонічному потенціалі оптичної пастки для чотирикомпонентного фермі-газу нейтральних атомів з різними амплітудами взаємодії та тунелювання.

5. Обґрунтованість і достовірність наукових положень, висновків і рекомендацій, які захищаються.

Обґрунтованість та достовірність наукових положень, результатів і висновків дисертації Унуковича В.І. забезпечена коректним застосуванням сучасних методів аналізу та чисельного розрахунку термодинамічних характеристик систем ультрахолодних газів з високими спіновими симетріями. Основні результати дисертаційного дослідження опубліковані у наукових журналах індексованих наукометричною базою Scopus та доповідалися на міжнародних наукових конференціях. Висновки дисертаційної роботи є обґрунтованими.

6. Наукове, теоретичне та практичне значення результатів дисертації.

Проведені в дисертаційній роботі результати дослідження, що відносяться до фазових станів газів ультрахолодних атомів у зовнішніх полях можуть бути використані при розробці та побудові нових високоточних квантових сенсорів і розробці нових типів універсальних квантових симуляторів. Квантові атомарні гази можуть бути застосовані для точного вивчення більш складних твердотільних систем з метою посилення таких ефектів, як високотемпературна надпровідність, колосальний магнетоопір, орбітальне та магнітне впорядкування тощо.

7. Повнота викладення матеріалів дисертації в роботах, опублікованих автором.

Результати дисертації опубліковані у 3 наукових працях, усі у закордонних періодичних наукових виданнях, що входять до міжнародної бази Scopus та 7 тез доповідей на міжнародних наукових конференціях.

Наукові праці, в яких опубліковані основні наукові результати дисертації:

1. Unukovych V., Sotnikov A. SU(4)-symmetric Hubbard model at quarter filling: Insights from the dynamical mean-field approach. *Physical Review B*. 2021. Vol. 104, no. 24. Art. no. 245106 (Scopus,Q1)

DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.104.245106>

Key words: Cold gases in optical lattices, Magnetic order, Metal-insulator transition, Fermi gases, Ultracold gases, Dynamical mean field theory, Hubbard model, SU(N) symmetries.

URL: <https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.104.245106>

ISSN: 2469-9969

2. Unukovych V., Sotnikov A. Anisotropy-driven magnetic phase transitions in SU(4)-symmetric Fermi gas in three-dimensional optical lattices. *Journal of Physics B Atomic, Molecular and Optical Physics*. 2024. Vol.57, no. 18. Art. no. 185301 (Scopus, Q2)

DOI: <https://doi.org/10.1088/1361-6455/ad6b63>

Key words: cold atoms, SU(4) spin symmetry, optical lattices, magnetic ordering, dynamical mean-field theory.

URL: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1361-6455/ad6b63>

ISSN: 1361-6455

3. Unukovych V., Litvinova S., Sotnikov A. Explicit symmetry breaking and effective spin models for four-component interacting Fermi gases in lattice

potentials. *Low Temperature Physics*. 2025. Vol. 51, no. 1. P.10–20 (Scopus, Q4)

DOI: <https://doi.org/10.1063/10.0034554>

Key words: Fermi gases, Heisenberg model, Many electron systems, Spin model, Hubbard parameter, Optical trapping, Gaussian beam, Optical lattices, Degenerate energy levels, Dyson-Schwinger equation.

URL: <https://pubs.aip.org/aip/ltp/article-abstract/51/1/10/3329440/Explicit-symmetry-breaking-and-effective-spin>

ISSN: 1063-777X

8. Дотримання академічної доброчесності.

На підставі вивчення тексту дисертації здобувача, наукових праць здобувача та Протоколу контролю оригінальності (перевірку наявності текстових запозичень виконано в антиплагіатний інтернет системі Strikeplagiarism.com) встановлено, що дисертаційна робота виконана самостійно, текст дисертації не містить плагіату, а дисертація відповідає вимогам академічної доброчесності.

9. Апробація матеріалів дисертації.

Результати дисертаційної роботи були представлені у доповідях на таких вітчизняних та міжнародних наукових конференціях:

1. Unukovych V.I., Sotnikov A.G. Low-temperature phases of SU(4) symmetric fermionic mixtures in optical lattices. *II International Advanced Study Conference “Condensed Matter and Low Temperature Physics” (June 6 – 12, Kharkiv, Ukraine, 2021)*: Abstract Kharkiv, 2021. P. 213.

2. Unukovych V.I., Sotnikov A.G. Low-temperature phases of SU(4) symmetric fermionic mixtures in optical lattices, *The European Conference Physics*

of Magnetism 2021 (June 28 – July 2, Poznan, Poland, 2021): Abstract Poznan, 2021. P. 70.

3. Unukovych V.I., Sotnikov A.G. Evolution of magnetic ordering of SU(4)-symmetric fermionic mixture within the transition from 3D to 2D-layered optical lattice. *III International Conference “Condensed Matter and Low Temperature Physics” (June 5 – 11, Kharkiv, Ukraine, 2023): Abstract Kharkiv, 2023. P. 199.*

4. Unukovych V. Quantum correlations and magnetic properties of ultracold Fermi gases with SU(4) spin symmetry in anisotropic cubic optical lattices. *US-Ukraine Quantum Forum 2023 (August 28 – 31, Kharkiv, Ukraine, 2023): Abstracts Kharkiv, 2023. P. 28*

5. Unukovych V.I., Sotnikov A.G. Effects of symmetry breaking in four component interacting Fermi gas in periodic potential. *IV International Conference “Condensed Matter and Low Temperature Physics” (June 3 – 7, Kharkiv, Ukraine, 2024): Abstract Kharkiv, 2024. P. 220.*

6. Унукович В.І., Сотніков А.Г. Ультрахолодні чотирикомпонентні фермі-гази в оптичних ґратках. Вплив порушення просторової та спінової симетрій на фізичні властивості. *24-та Всеукраїнська школа-семінар молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини (24 – 25 жовтня 2024 р., м. Львів): Збірка тез Львів, 2024. С. 18.*

7. Bulakhov M.S., Peletminskii A.S., Slyusarenko Yu.V., Unukovych V.I., Sotnikov A.G. Long-range correlations and magnetism of spinor ultracold atomic gases. *IEEE Magnetism “Magnetism for Ukraine Initiative” Workshop (14 November, 2024, Kyiv, Ukraine): Abstract Kyiv, 2024. P. 53.*

10. Оцінка структури, мови та стилю дисертації.

Матеріал дисертації викладено в логічній послідовності та доступний для сприйняття. Дисертація написана науковим стилем мовлення, структура дисертації відповідає алгоритму здійснення автором дослідження. Зміст,

структура, оформлення дисертації та кількість публікацій відповідають вимогам відповідно постанови Кабінету Міністрів України “Про затвердження Порядку присудження ступеня доктора філософії та скасування рішення спеціалізованої вченої ради закладу вищої освіти, наукової установи про присудження ступеня доктора філософії” (Постанова Кабінету Міністрів України від 12 січня 2022 року № 44, зі змінами, внесеними згідно з постановою Кабінету Міністрів України від 12.01.2017 р. №40 “Про затвердження вимог до оформлення дисертації” (із змінами, внесеними згідно з Наказом Міністерства освіти і науки України від 31.05.2019 року № 759).

11. Відповідність змісту дисертації спеціальності, за якою вона подається до захисту.

За своїм фаховим спрямуванням, науковою новизною і практичною значимістю дисертаційна робота В.І. Унуковича відповідає спеціальності 105 Прикладна фізика та наноматеріали. Здобувачем повністю виконана освітня та наукова складові освітньо-наукового рівня вищої освіти.

12. Результати обговорення та проведення презентації. Рекомендація дисертації до захисту.

Здобувачем було представлено основні результати дисертаційної роботи на засіданні кафедри фізики ядра та високих енергій імені О.І. Ахієзера науково-навчального інституту «Фізико-технічний факультет» Харківського національного університету імені В.Н. Каразіна щодо попередньої експертизи дисертації у формі презентації і наукової дискусії після її завершення. За підсумком обговорення, дисертаційне дослідження було оцінено позитивно. Дисертаційна робота Унуковича Владислава Ігоровича виконана на високому науковому рівні та є цілісним науковим дослідженням, яке відповідає

встановленим вимогам чинного законодавства України.

Враховуючи високий рівень дослідження, актуальність, новизну, практичну цінність отриманих результатів та відповідність роботи спеціальності 105 «Прикладна фізика та наноматеріали» дисертація Унуковича В.І. «Дослідження термодинамічних властивостей та фазових станів ультрахолодних фермі-газів з високими спіновими симетріями в оптичних ґратках» рекомендується до захисту в спеціалізованій вченій раді для здобуття ступеня доктора філософії за спеціальністю 105 Прикладна фізика та наноматеріали з галузі знань 10 Природничі науки .

Головуючий, кандидат фізико-математичних наук,

Заступник завідувача кафедри фізики ядра

та високих енергій імені О.І. Ахієзера

ННІ «Фізико-технічний факультет»

Харківського національного університету

імені В.Н. Каразіна

Андрій ГАХ