

Autoreferat

I. Imię i nazwisko

Ryszard Matysiak

II. Posiadane dyplomy, stopnie naukowe – z podaniem nazwy, miejsca i roku ich uzyskania oraz tytułu rozprawy doktorskiej

- magister fizyki, Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu, Wydział Fizyki (rok 1994). Tytuł pracy: "Niejednorodny łańcuch spinów $S = 1/2$ i $S = 5/2$ z oddziaływaniem wymiennym"

Promotor: prof. dr hab. Grzegorz Kamieniarz

- doktor nauk fizycznych w zakresie fizyki, Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu, Wydział Fizyki (rok 1999). Tytuł pracy: "Symulacje własności termodynamicznych antyferromagnetyków liniowych".

Promotor: prof. dr hab. Grzegorz Kamieniarz

Recenzenci: prof. dr hab. Krzysztof Kułakowski, prof. dr hab. Zbigniew Jacyna-Onyszkiewicz

III. Informacje o dotychczasowym zatrudnieniu w jednostkach naukowych

- 01.10.1999-31.12.1999 Wyższa Szkoła Pedagogiczna im. Tadeusza Kotarbińskiego w Zielonej Górze, Wydział Matematyki, Fizyki, Techniki, asystent w Instytucie Techniki.
- 01.01.2000-30.09.2001 Wyższa Szkoła Pedagogiczna im. Tadeusza Kotarbińskiego w Zielonej Górze, Wydział Matematyki, Fizyki, Techniki, adiunkt w Instytucie Techniki.
- 01.10.2001-30.09.2002 Uniwersytet Zielonogórski w Zielonej Górze, Wydział Mechaniczny, adiunkt w Instytucie Podstaw Techniki
- 01.10.2001-30.09.2002 Uniwersytet Zielonogórski w Zielonej Górze, Wydział Mechaniczny, z-ca dyrektora Instytutu Podstaw Techniki.
- 2006-2010 Wyższa Szkoła Humanistyczno-Ekonomiczna w Łodzi, Oddział Zamiejscowy w Głogowie, wykładowca
- 2000-2010 kierownik studiów podyplomowych "Informatyka dla nauczycieli" prowadzonych na Uniwersytecie Zielonogórskim w Zielonej Górze.
- 01.10.2002-2013 Uniwersytet Zielonogórski w Zielonej Górze, Wydział Mechaniczny, adiunkt w Instytucie Edukacji Techniczno-Informatycznej.
- 01.10.2002-2013 Uniwersytet Zielonogórski w Zielonej Górze, Wydział Mechaniczny, z-ca dyrektora Instytutu Edukacji Techniczno-Informatycznej.

- od 1.10.2008 Państwowa Wyższa Szkoła Zawodowa w Głogowie, Instytut Politechniczny, wykładowca
- od 01.10.2013 Uniwersytet Zielonogórski w Zielonej Górze, Wydział Mechaniczny, starszy wykładowca w Instytucie Inżynierii Bezpieczeństwa i Nauk o Pracy.
- od 01.10.2013 Uniwersytet Zielonogórski w Zielonej Górze, Wydział Mechaniczny, z-ca dyrektora Instytutu Inżynierii Bezpieczeństwa i Nauk o Pracy.

IV. Wskazanie osiągnięcia wynikającego z art. 16 ust. 2 ustawy z dnia 14 marca 2003 r. o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki (Dz. U. 2016 r. poz. 882 ze zm. w Dz. U. z 2016 r. poz. 1311.)

1 Tytuł osiągnięcia naukowego

Efekty kwantowe występujące w związku Yb_4As_3 oraz w domieszkowanym $(\text{Yb}_{(1-x)}\text{Lu}_x)_4\text{As}_3$.

2 Wykaz publikacji stanowiących osiągnięcie naukowe, o którym mowa w art. 16 ust. 2 ustawy

- [H1] **R. Matysiak**, G. Kamieniarz, P. Gegenwart, F. Steglich, *Antiferromagnetic interactions in the semimetallic Yb_4As_3 : field-dependent specific heat and magnetization data*, Journal of Magnetism and Magnetic Materials **272-276**, 282 (2004).
- [H2] **R. Matysiak**, G. Kamieniarz, P. Gegenwart, H. Aoki, A. Ochiai, *Field-dependent specific-heat of the pure and diluted 4f electron system Yb_4As_3* , Inorganica Chimica Acta **360**, 3955 (2007).
- [H3] **R. Matysiak**, G. Kamieniarz, P. Gegenwart, A. Ochiai, *Field-dependent specific heat of Yb_4As_3 : agreement between a spin-1/2 model and experiment*, Physical Review B **79**, 224413 (2009).
- [H4] **R. Matysiak**, *Field-dependent specific heat and energy gap in the Yb_4As_3 compound*, Acta Physica Polonica A **118**, 969 (2010).
- [H5] **R. Matysiak**, P. Gegenwart, A. Ochiai, M. Antkowiak, G. Kamieniarz, F. Steglich, *Specific heat of segmented Heisenberg quantum spin chains in $(\text{Yb}_{(1-x)}\text{Lu}_x)_4\text{As}_3$* , Physical Review B **88** 224414 (2013).
- [H6] G. Kamieniarz, **R. Matysiak**, P. Gegenwart, A. Ochiai, F. Steglich, *Bose glass behavior in $(\text{Yb}_{(1-x)}\text{Lu}_x)_4\text{As}_3$ representing randomly diluted quantum spin-1/2 chains*, Physical Review B **94**, 100403(R) (2016).
- [H7] **R. Matysiak**, P. Gegenwart, A. Ochiai, F. Steglich, *Application of numerical quantum transfer-matrix approach in the randomly diluted quantum spin chains*, Lecture Notes in Computer Science: Parallel Processing and Applied Mathematics **10778**, 359 (2018).

3 Omówienie celu naukowego ww. prac i osiągniętych wyników wraz z omówieniem ich ewentualnego wykorzystania

3.1 Wprowadzenie

Antyferromagnetyczne układy liniowe wzbudzają szerokie zainteresowanie zarówno w zakresie badań teoretycznych jak i eksperymentalnych z powodu występujących efektów kwantowych. Z jednej strony, ich analiza teoretyczna jest znacznie mniej skomplikowana niż układów dwuwymiarowych i trójwymiarowych, jednak (posługując się metodami ekstrapolacji) może być bardzo przydatna w przypadku opisu struktur magnetycznych o wyższym wymiarze. Możliwość bardziej efektywnego opisu rzeczywistych układów niskowymiarowych powoduje, że teoretyczne modele magnetyków liniowych znajdują fizyczną realizację w postaci konkretnych związków fizycznych. Jednym z najważniejszych czynników (a może nawet najważniejszym) decydujących o przydatności zastosowanego modelu i przyjętej metody symulacji jest zgodność uzyskanych wyników numerycznych z eksperymentem. Ze względu na mniejszą złożoność obliczeniową i większą liczbę prac teoretycznych, w pierwszej kolejności realizacji fizycznej doczekały się modele opisujące układy o małej wartości spinu [1, 2, 3]. Wartość spinu decyduje także o odmiennych efektach kwantowych. Antyferromagnetyczne jednorodnie łańcuchy Heisenberga o spinie połówkowym charakteryzują się brakiem przerwy energetycznej [4], natomiast spin całkowity powoduje powstanie przerwy energetycznej pomiędzy stanem podstawowym a najniższym leżącym stanem wzbudzonym [5].

Przykładem jednowymiarowego antyferromagnetyka ze spinem $S = 1/2$ może być Yb_4As_3 , którego własności mogą być dobrze opisane przy pomocy tego modelu opartego na nieskończonych łańcuchach z dominującym oddziaływaniem pomiędzy sąsiednimi spinami wewnątrz łańcucha, chociaż jest układem 4f elektronowym. Jednak w przypadku tego związku jego zachowanie w obecności pola magnetycznego jest odmienne w porównaniu z typowymi jednorodnymi antyferromagnetykami ze spinem $S = 1/2$. Pomiary niesprężystego rozpraszania neutronów oraz ciepła właściwego ujawniły powstanie przerwy energetycznej w obecności przyłożonego pola magnetycznego. Istnienie przerwy energetycznej w tym przypadku jest konsekwencją indukowania się naprzemiennego pola magnetycznego wzdłuż łańcucha spinów, co zostało dla Yb_4As_3 opisane w ramach modelu sine-Gordona [6, 7]. Podobny efekt zaobserwowano w przypadku związków miedzi [8, 9].

Znaczący wzrost dostępnej mocy obliczeniowej komputerów powoduje, że w badaniach układów jednowymiarowych coraz większe znaczenie mają metody symulacji komputerowych [10, 11, 12]. Metody te również podlegają istotnej ewolucji [13]. Bardzo ważną rolę spełnia metoda kwantowej macierzy transferowej (QTM), której zalety prezentowane były w szeregu publikacji [14, 15, 16, 17]. W cyklu publikacji wchodzących w skład prezentowanego osiągnięcia naukowego zastosowałem tę metodę dla modelu Heisenberga. Skuteczność tej metodologii w zakresie symulacji własności niskotemperaturowych jednowymiarowych magnetyków zarówno jednorodnych jak i niejednorodnych, została wcześniej potwierdzona i zaprezentowana we wcześniejszych pracach dotyczących układów ze spinem $S = 1$ [18, 19] oraz pierścieniowych magnetyków molekularnych o większej wartości spinu [20, 21, 22, 23]. Uzyskane w tym zakresie wyniki wraz z

literaturowym przeglądem badań dotyczących analizowanych przeze mnie układów spinowych z wykorzystaniem metody kwantowej macierzy transferowej przedstawione zostały w publikacji [19].

Publikacje [H1-H7] uszeregowane są w porządku wskazującym na stopniowe i systematyczne rozwiązywanie prezentowanego problemu naukowego. Pierwsza z cytowanych prac [H1] zawiera wyniki będące początkowym podejściem do badanych problemów. Zgodność wyników symulacji z danymi eksperymentalnymi magnetycznego ciepła właściwego dla związku Yb_4As_3 w polu magnetycznym i bez pola była tylko jakościowa, ponieważ wartości teoretyczne systematycznie przekraczały te zmierzone. Wpływ na ten fakt miały przyjęte wartości parametrów mikroskopowych hamiltonianu oraz zależność temperaturowa ciepła sieciowego. Parametry te zostały przyjęte na podstawie wartości proponowanych w literaturze poruszającej te zagadnienia. Wartości te mieściły się w stosunkowo szerokim zakresie wynikającym z niepewności pomiarowych danych doświadczalnych oraz sposobu oszacowania tych parametrów. W następnej pracy [H2] zaprezentowano wyniki obliczeń przy założeniu innej wartości całki wymiany. Analiza uzyskanych wyników symulacji skłoniła mnie do wykonania dalszych i czasochłonnych obliczeń dla różnych wartości parametrów modelu oraz przyjęcie innej zależności ciepła sieciowego. Zastosowałem również zmodyfikowaną metodę ekstrapolacji wyników numerycznych. Dzięki temu uzyskałem bardzo dobrą zgodność z wynikami eksperymentalnymi dla czystego związku Yb_4As_3 zarówno w obecności przyłożonego pola magnetycznego jak i jego braku. Wyniki zaprezentowane zostały w pracy [H3]. W pracy [H4] dodatkowo znalazły się rezultaty dla innej wartości przyłożonego pola magnetycznego, które również potwierdziły skuteczność zastosowanego modelu i właściwego doboru wartości parametrów mikroskopowych. W kolejnych dwóch publikacjach kontynuowałem prowadzone wcześniej badania, jednak teraz analiza dotyczyła układu domieszkowanego $(\text{Yb}_{1-x}\text{Lu}_x)_4\text{As}_3$ umieszczonego w zerowym polu magnetycznym [H5] oraz w obecności pola [H6], gdzie przedstawione zostały także zagadnienia dotyczące skalowania ciepła właściwego wskazującego na istnienie fazy szkła Bosego w układzie domieszkowanym. Cykl prac stanowiących omówienie prezentowanego osiągnięcia naukowego kończy praca [H7], w której przedstawiłem podsumowanie metod numerycznych i symulacji zastosowanych wcześniej, a także prezentuję uzyskane wyniki niepublikowane poprzednio.

3.2 Charakterystyka modelu i opis metody symulacji

3.2.1 Opis modelu

Własności niskotemperaturowe zarówno czystego związku Yb_4As_3 jak i domieszkowanego $(\text{Yb}_{1-x}\text{Lu}_x)_4\text{As}_3$ można opisać przy pomocy anizotropowego modelu Heisenberga z uwzględnieniem antysymetrycznych oddziaływań Dzyaloshinskii–Moriya [24, 25]. Hamiltonian reprezentujący ten model dla jednowymiarowego układu złożonego z L spinów $S = 1/2$, umieszczonego w zewnętrznym jednorodnym polu magnetycznym B przyłożonym prostopadle do kierunku łań-

cucha, może być wyrażony w następującej postaci:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & -J \sum_{i=1}^{L-1} \left[\hat{\mathcal{S}}_i^z \hat{\mathcal{S}}_{i+1}^z + \cos(2\theta) \left(\hat{\mathcal{S}}_i^x \hat{\mathcal{S}}_{i+1}^x + \hat{\mathcal{S}}_i^y \hat{\mathcal{S}}_{i+1}^y \right) \right] - J \sin(2\theta) \sum_{i=1}^{L-1} (-1)^i \left(\hat{\mathcal{S}}_i^x \hat{\mathcal{S}}_{i+1}^y - \hat{\mathcal{S}}_i^y \hat{\mathcal{S}}_{i+1}^x \right) + \\ & - g_{\perp} \mu_B B \sum_{i=1}^{L-1} \hat{\mathcal{S}}_i^x. \end{aligned} \quad (1)$$

Dokonując przekształcenia w postaci obrotu składowych operatora spinu $\hat{\mathcal{S}}_i$ w płaszczyźnie $X-Y$ o kąt θ :

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{S}}_i^x &= \cos(\theta) \mathcal{S}_i^x + (-1)^i \sin(\theta) \mathcal{S}_i^y \\ \hat{\mathcal{S}}_i^y &= -(-1)^i \sin(\theta) \mathcal{S}_i^x + \cos(\theta) \mathcal{S}_i^y \\ \mathcal{S}_i^z &= \mathcal{S}_i^z \end{aligned} \quad (2)$$

otrzymamy następujący hamiltonian [26]:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=1}^{L-1} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1} - g_{\perp} \mu_B B^x \sum_{i=1}^L S_i^x - g_{\perp} \mu_B B_s^y \sum_{i=1}^L (-1)^i S_i^y, \quad (3)$$

który w przypadku braku zewnętrznego pola magnetycznego jest równoważny izotropowemu modelowi Heisenberga. W obecności jednorodnego zewnętrznego pola o wartości B , przyłożonego prostopadle do łańcucha spinów, indukuje się zarówno składowa jednorodna o wartości $B^x = B \cos(\theta)$, jak i składowa naprzemienna o wartości $B_s^y = B \sin(\theta)$. Równania (1) oraz (3) opisują sytuację, gdy pole magnetyczne jest przyłożone prostopadle do łańcucha. W rzeczywistym związku, nawet jeśli badana próbka jest monokrystaliczna, to jej orientacja względem przyłożonego zewnętrznego pola magnetycznego może być różna. W takiej sytuacji, przeprowadzając symulacje, należy uwzględnić w modelu także możliwość równoległej orientacji zewnętrznego pola względem kierunku wyznaczonego przez łańcuch spinowy. Uwzględniając ten fakt, ogólną postać hamiltonianu można zapisać w następującej formie:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=1}^{L-1} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1} - g_{\perp} \mu_B B^x \sum_{i=1}^L S_i^x - g_{\perp} \mu_B B_s^y \sum_{i=1}^L (-1)^i S_i^y - g_{\parallel} \mu_B B^z \sum_{i=1}^L S_i^z \quad (4)$$

W przypadku pola magnetycznego skierowanego wzdłuż łańcucha $B^z = B$ i $B^x = B^y = 0$, natomiast dla pola skierowanego prostopadle mamy $B^x = B \cos(\theta)$, $B_s^y = B \sin(\theta)$, $B^z = 0$. Hamiltonian (4) może być teraz punktem wyjścia zarówno do opisu układu czystego Yb_4As_3 jak i domieszkowanego $(\text{Yb}_{1-x}\text{Lu}_x)_4\text{As}_3$.

3.2.2 Metoda kwantowej macierzy transferowej

Wielkości termodynamiczne takie jak ciepło właściwe, namagnesowanie czy podatność magnetyczna, wymagają obliczenia dla określonej temperatury T , energii swobodnej \mathcal{F} , która z kolei zależy od sumy stanów \mathcal{Z} :

$$\mathcal{F} = -\frac{1}{\beta} \ln \mathcal{Z}, \quad (5)$$

gdzie $\beta = 1/(k_B T)$, a k_B jest stałą Boltzmana. Dokonując diagonalizacji rozpatrywanego hamiltonianu \mathcal{H} , dokładną wartość sumy stanów uzyskamy jeśli znamy wszystkie wartości własne operatora \mathcal{H} działającego w przestrzeni utworzonej ze składowych z -owych operatorów spinowych $|S_1^z S_1^z \dots S_L^z \rangle$. Wówczas wymiar przestrzeni wynosi $(2S + 1)^L$ (S jest wartością spinu), co dla długich łańcuchów powoduje, że ścisła diagonalizacja staje się niemożliwa. Istotnym elementem metody kwantowej macierzy transferowej jest znalezienie jak najlepszego przybliżenia sumy stanów. Przyjęty przeze mnie model (4) uwzględnia oddziaływanie pomiędzy najbliższymi sąsiadami, wobec tego naturalne wydaje się dokonanie podziału hamiltonianu na operatory dwuspinowe:

$$\mathcal{H} = (\mathcal{H}_{1,2} + \dots + \mathcal{H}_{L-1,L}) + (\mathcal{H}_{2,3} + \dots + \mathcal{H}_{L,1}) = \mathcal{H}_n + \mathcal{H}_p. \quad (6)$$

Wewnątrz części nieparzystej \mathcal{H}_n wszystkie operatory $\mathcal{H}_{2i-1,2i}$ komutują ze sobą, podobnie jak w przypadku części parzystej \mathcal{H}_p . Nie komutują ze sobą jedynie \mathcal{H}_n oraz \mathcal{H}_p . Dzięki takiemu pogrupowaniu możemy do sumy stanów zastosować twierdzenie Suzuki-Trottera dla operatorów niekomutujących [12]:

$$\mathcal{Z} = \lim_{m \rightarrow \infty} \mathcal{Z}_m = \lim_{m \rightarrow \infty} \mathbf{Tr} \left[e^{-\beta \mathcal{H}_n/m} e^{-\beta \mathcal{H}_p/m} \right]^m, \quad (7)$$

gdzie m jest liczbą naturalną określaną jako indeks Trottera. Dokładność symulacji jest wobec tego uzależniona od dwóch parametrów ekstrapolacyjnych m oraz L . Istotą metody macierzy transferowej jest operacja polegająca na przejściu z przestrzeni Hilberta o wymiarze zależnym od L do przestrzeni o wymiarze zależnym od m . Zgodnie z twierdzeniem Suzuki-Trottera zbieżność ekstrapolacji w przypadku takiego transferu znacznie się poprawia, gdyż dokładność wyznaczonej sumy stanów zależy od $1/m^2$ a nie od $1/L$ [15].

Rozpatrując przypadek zerowego pola magnetycznego oraz nieskończonego łańcucha ($L \rightarrow \infty$), co odpowiada czystemu układowi Yb_4As_3 , model (4) redukuje się do postaci izotropowego modelu Heisenberga:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=1}^{L-1} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1}. \quad (8)$$

Model ten został opisany przy pomocy ansatzu Bethego [27] i jest szeroko cytowany w literaturze [13, 28]. Jedynym parametrem określającym ten układ jest oddziaływanie wymiany J pomiędzy najbliższymi sąsiadującymi spinami. Przeprowadzając symulacje dla różnych wartości tego parametru i porównując otrzymane wyniki z danymi eksperymentalnymi dla Yb_4As_3 , wyznaczyłem wartość całki wymiany $J/k_B = -28$ K [H3].

W celu określenia ciepła właściwego, zarówno w przypadku nieskończonych jak i skończonych łańcuchów, kluczowym elementem symulacji jest znalezienie sumy stanów \mathcal{Z}_m . W przypadku łańcuchów nieskończonych, sumę stanów definiujemy przy pomocy globalnej macierzy transferowej \mathcal{W} , której wymiar zależy od indeksu Trottera m :

$$\mathcal{Z}_m = \text{Tr} (\mathcal{W})^L, \quad (9)$$

W granicy $L \rightarrow \infty$ suma stanów \mathcal{Z} jest równa największej wartości własnej globalnej macierzy transferowej \mathcal{W} [12]. Skraca to istotnie czas obliczeń, ponieważ wkład do wartości własnej wynikający z kolejnych mnożeń przez macierz \mathcal{W} zmniejsza się wraz ze wzrostem L i największą

wartość własną uzyskujemy po wykonaniu stosunkowo niewielkiej liczby mnożeń, szczególnie w wyższych temperaturach.

W przypadku nieskończonych łańcuchów uwzględniłem również obecność zewnętrznego pola magnetycznego. Sposób obliczenia sumy stanów ulega wówczas pewnej modyfikacji. Spowodowane jest to tym, że układ staje się niejednorodny ze względu na naprzemienne pole B_s^y , które generowane jest przez oddziaływanie Dzyaloshinskii–Moriya. Wówczas poszukiwana suma stanów

$$\mathcal{Z}_m = \text{Tr} (\mathcal{W}_1 \mathcal{W}_2)^{L/2} \quad (10)$$

zawiera iloczyn dwóch globalnych macierzy transferowych $\mathcal{W}_1, \mathcal{W}_2$, które odzwierciedlają tę niejednorodność.

Analiza dotycząca własności układów skończonych nie zmienia znacząco postaci hamiltonianu, tzn. dalej równanie (8) opisuje przypadek w zerowym polu magnetycznym natomiast (4) w jego obecności. Nowym problemem staje się teraz znalezienie sumy stanów. Dla skończonych łańcuchów nie możemy skorzystać z możliwości obliczenia jej jako największej wartości własnej. Należy wówczas wyznaczyć \mathcal{Z}_m dla poszczególnych łańcuchów o parzystej i nieparzystej liczbie węzłów L [12]:

$$\mathcal{Z}_m^n = \langle b | (\mathcal{W}_1 \mathcal{W}_2)^{(L-1)/2} | a \rangle \quad \text{dla nieparzystych } L, \quad (11)$$

$$\mathcal{Z}_m^p = \langle b | (\mathcal{W}_1 \mathcal{W}_2)^{L/2} | a \rangle \quad \text{dla parzystych } L, \quad (12)$$

gdzie wektory $|a\rangle$ i $|b\rangle$ zdefiniowane są w następujący sposób:

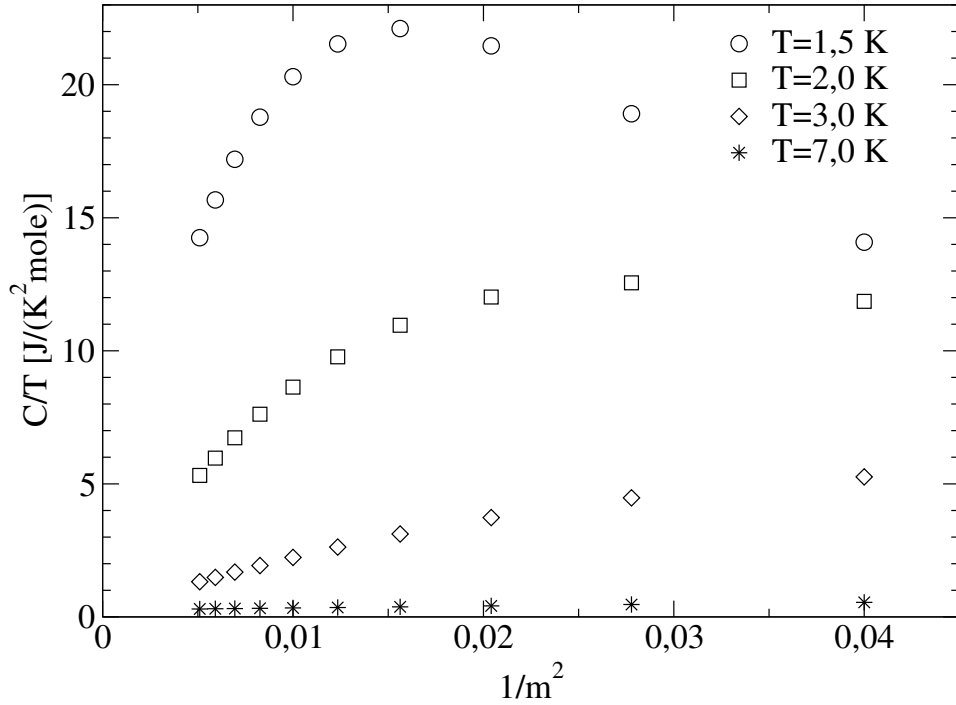
$$|a\rangle = \sum_{\{S^z\}} \prod_{r=1}^{2m} \delta_{S_{2r-1}^z, S_{2r}^z} |S_1^z \dots S_{2m}^z\rangle, \quad (13)$$

$$|b\rangle = \sum_{\{S^z\}} \prod_{r=1}^{2m} \delta_{S_{2r}^z, S_{2r+1}^z} |S_1^z \dots S_{2m}^z\rangle. \quad (14)$$

We wszystkich omawianych wyżej przypadkach (dla łańcuchów skończonych i nieskończonych, w obecności pola i w zerowym polu) obliczamy m -tą aproksymantę \mathcal{Z}_m sumy stanów \mathcal{Z} . Na podstawie tej wartości możemy wyznaczyć aproksymantę C_m ciepła właściwego C (i innych wielkości termodynamicznych) w danej temperaturze. W następnym kroku, stosując twierdzenie Suzuki–Trottera [12] należy dokonać ekstrapolacji C_m w granicy $m \rightarrow \infty$. Na Rys. 1 przedstawiono wyniki obliczonych wartości C_m w funkcji $1/m^2$ dla czterech różnych temperatur. Dla wysokich temperatur zbieżność jest bardzo dobra i do obliczenia ciepła właściwego można przyjąć, że dla dużych m wartość C_m zależy liniowo od $1/m^2$. Jednak dla niskich temperatur zastosowałem modyfikację dotychczas stosowanej aproksymacji liniowej. W tym celu przez wszystkie punkty opisane zależnością $C_m = f(1/m^2)$ przeprowadzamy wielomiany aproksymacyjne stopnia k :

$$w_k = \sum_{j=0}^k a_j \cdot \left(\frac{1}{m^2}\right)^j. \quad (15)$$

Wówczas współczynniki $a_0^{(k)}$ w każdym z wielomianów stanowią wartość ekstrapolowaną ciepła właściwego. Wielomiany przeprowadzamy przez n punktów odpowiadających wartościom $m = 2, \dots, m_{max}$. Na Rys. 2 zaprezentowano przykładowe wyniki dla dwóch różnych temperatur



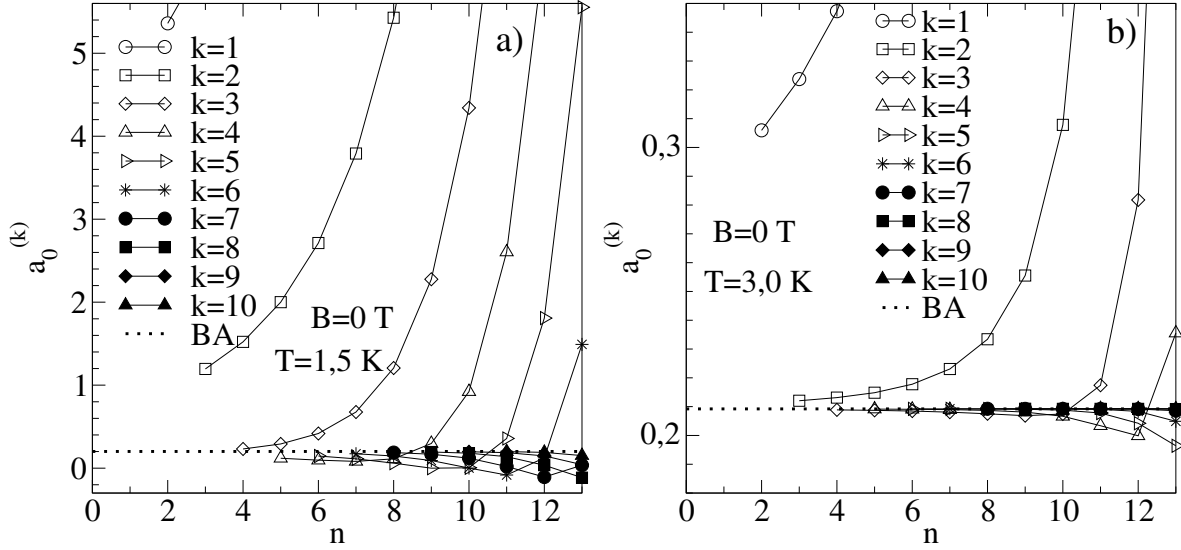
Rysunek 1: Zależność ciepła właściwego od indeksu Trottera m dla różnych wartości temperatury.

dla zerowego pola magnetycznego. W celu sprawdzenia dokładności ekstrapolacji skorzystałem z wyników ansatzu Bethego (linia przerywana), które stanowią wartości referencyjne. Widać wyraźnie, że większe wartości stopnia k wielomianu prowadzą do lepszej zbieżności wyników. Podobna analiza przeprowadzona została również w obecności pola magnetycznego [H3], gdzie wartością referencyjną były wyniki uzyskane przy użyciu metody DMRG. Poprawa zbieżności jest szczególnie ważna w niskich temperaturach, co prowadzi do uzyskania znacznie dokładniejszych wyników symulacji.

3.2.3 Własności fizyczne związku Yb_4As_3

Yb_4As_3 jest związkiem należącym do grupy R_4X_3 , gdzie R reprezentuje jony ziem rzadkich, a X może być jednym z jonów As, Bi, P oraz Sb [29]. W wysokich temperaturach ($T > 295$ K) związek ma strukturę Th_3P_4 , gdzie jony Yb zajmują miejsce fosforu, a jony As miejsce toru. Atomy iterbu usytuowane są wzdłuż czterech równoważnych kierunków równoległych do przekątnych sześciangu. Układ jest regularny ze stałą sieci równą $8,788 \text{ \AA}$ [29, 30].

W temperaturze $T \approx 295$ K występuje strukturalne przejście fazowe pierwszego rzędu widoczne w temperaturowej zależności oporu elektrycznego i współczynnika Halla [31]. Poniżej tej temperatury jeden z kierunków $\langle 111 \rangle$ wzdłuż jednej z przekątnych sześciangu staje się wyróżniony. W węzłach tego łańcucha umieszczone są trójwartościowe magnetyczne jony Yb^{3+} . Pozostałe $3/4$ to niemagnetyczne dwuwartościowe jony Yb^{2+} zajmujące miejsce wzdłuż pozostałych przekątnych [32]. Odległości pomiędzy jonami Yb^{3+} stają się krótsze co prowadzi do tego, że układ staje się trygonalny, w którym kąt wynosi $90,8^\circ$ [29]. Ponadto w niskich temperaturach Yb_4As_3



Rysunek 2: Wyniki ekstrapolacji przeprowadzonych za pomocą wielomianów stopnia k dla dwóch różnych wartości temperatur $T = 1,5$ K (a) oraz $T = 3,0$ K (b).

występuje bardzo niska koncentracja nośników ładunku rzędu 10^{-3} na jeden jon Yb^{3+} [33, 34]. Jony Yb^{3+} mają jedną dziurę w zamkniętej powłoce $4f$ i tworzą jednowymiarowy łańcuch ze spinem $S = 1/2$ wzdłuż kierunku $\langle 111 \rangle$. Pole krystaliczne rozszczepia stan podstawowy $J = 7/2$ na cztery dublety. Pomiary rozpraszania neutronów na kryształach Yb_4As_3 oraz temperaturowa zależność podatności magnetycznej [35] potwierdzają, że układ może być dobrze opisany za pomocą modelu Heisenberga z powodu silnych oddziaływań antyferromagnetycznych wewnątrz łańcucha pomiędzy jonami Yb^{3+} oraz relatywnie niewielkich oddziaływań ferromagnetycznych pomiędzy łańcuchami [31].

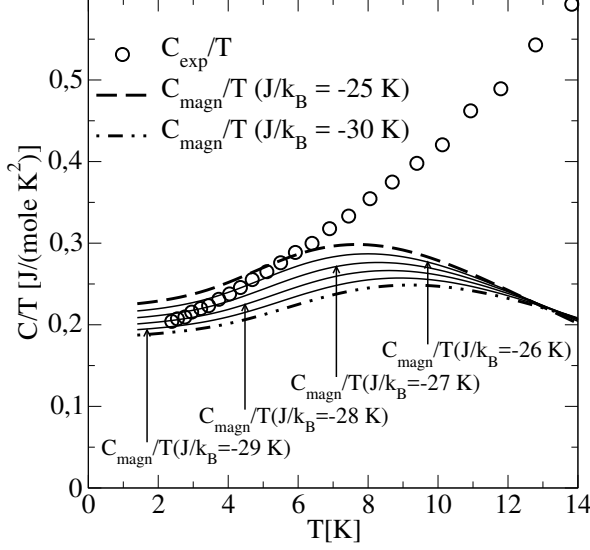
3.3 Wyniki symulacji i porównanie ich z danymi doświadczalnymi

3.3.1 Wyniki symulacji układu czystego Yb_4As_3 w zerowym polu magnetycznym

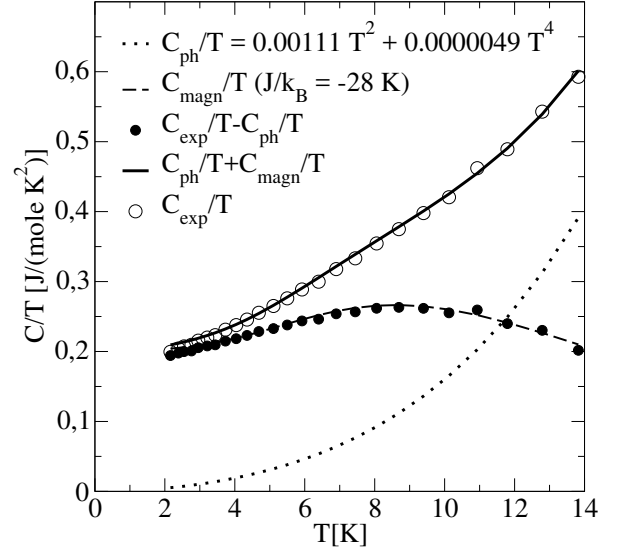
W przypadku braku zewnętrznego pola, w symulacjach własności Yb_4As_3 dla przyjętego modelu izotropowego Heisenberga (8), cała wymiana J jest jedynym parametrem charakteryzującym ten związek. Do jej określenia wykorzystane zostały wyniki eksperymentalne ciepła właściwego. Należy jednak pamiętać, że zmierzone ciepło właściwe C_{exp} w danej temperaturze zawiera wkład magnetyczny C_{magn} oraz sieciowe ciepło właściwe C_{ph} . W związku z tym dokonując symulacji dla określonej wartości oddziaływania wymiany J wyznaczymy wkład magnetyczny odejmując od zmierzonego ciepła właściwego wkład fononowy

$$C_{magn} = C_{exp} - C_{ph}. \quad (16)$$

W pierwszej kolejności wyznaczyłem temperaturową zależność magnetycznego wkładu do ciepła właściwego dla różnych wartości J [H3]. Otrzymane wyniki numeryczne okazały się w pełni zgodne z tymi uzyskanymi w pracy [13] opartymi na metodzie ansatzu Bethego [27]. Wyniki



Rysunek 3: Temperaturowa zależność zmierzonego ciepła właściwego C_{exp}/T w zerowym polu magnetycznym (otwarte symbole) w porównaniu z wynikami symulacji C_{magn} dla różnych wartości całki wymiany J .



Rysunek 4: Temperaturowa zależność ciepła właściwego w zerowym polu magnetycznym. C_{exp} - dane eksperymentalne dla Yb_4As_3 , C_{ph} - ciepło sieciowe, C_{magn} - wkład magnetyczny.

oparte na metodzie ansatzu Bethego posłużyły jako wartości referencyjne dla sprawdzenia dokładności symulacji wykonanych z zastosowaniem izotropowego modelu Heisenberga. Na Rys. 3 zaprezentowano, obok zmierzonego ciepła właściwego (C_{exp}) związku Yb_4As_3 , także wyniki symulacji magnetycznego wkładu do ciepła właściwego dla poszczególnych wartości J . Widać, że dla $J/k_B \leq -27$ K C_{magn} przekracza w niskich temperaturach C_{exp} , co powodowałoby, że sieciowy wkład do ciepła właściwego musiałby być ujemny. Jednocześnie dokonałem analizy numerycznej wkładu sieciowego, która doprowadziła do przyjęcia innej zależności temperaturowej $C_{ph}(T)$ od tej, która zastosowana była poprzednio w pracach [H1,H2]. Ostatecznie, uwzględniając wyniki dopasowania parametrów α oraz β uzyskałem następującą temperaturową zależność fononowego ciepła właściwego:

$$C_{ph} = \alpha T^3 + \beta T^5, \quad \alpha = 1,11 \cdot 10^{-3} [\text{J}/(\text{mol} \cdot \text{K}^4)], \quad \beta = 4,9 \cdot 10^{-6} [\text{J}/(\text{mol} \cdot \text{K}^6)]. \quad (17)$$

Różnica pomiędzy przyjętym w pracach [H1,H2] sieciowym ciepłem właściwym, a tym określonym w równaniach (17) była powodem tego, że zgodność pomiędzy rezultatami numerycznymi i doświadczalnymi była tylko jakościowa. Rys. 4 przedstawia uzyskane wyniki symulacji zarówno sieciowego (linia kropkowana), jak i magnetycznego (linia przerywana) wkładu do ciepła właściwego oraz całkowitego ciepła właściwego (linia ciągła). Ponadto w postaci symboli prezentowane są dane ekperymentalne zmierzonego ciepła oraz po odjęciu oszacowanego wkładu sieciowego.

Bardzo dobra zgodność wyników numerycznych i doświadczalnych stała się podstawą do przypuszczenia, że przyjęty model będzie mógł również być zastosowany w przypadku próbki umieszczonej w zewnętrznym polu magnetycznym, a także dla próbek domieszkowanych niemagnetycznymi jonami lutetu ($\text{Yb}_{(1-x)}\text{Lu}_x$) $_4\text{As}_3$. Z punktu widzenia efektów kwantowych występujących w rozpatrywanym układzie należy podkreślić, że dla układów jednowymiarowych ze spinem $S = 1/2$ w zerowym polu magnetycznym nie ma przerwy energetycznej. Oczekujemy jednak,

że po przyłożeniu zewnętrznego pola magnetycznego ta przerwa się pojawi, co będzie można zweryfikować mając dla przyjętego modelu efektywnie działającą metodę symulacji.

3.3.2 Wyniki symulacji układu czystego Yb_4As_3 w polu magnetycznym

Symulacje układu umieszczonego w zewnętrznym polu magnetycznym wymagały określenia, oprócz oszacowanego już parametru oddziaływania wymiany J , także następnych parametrów występujących w rozpatrywanym modelu (4). Pierwszy z nich (kąąt θ) pojawia się przy przekształceniu hamiltonianu (1) i reprezentuje obrót operatorów spinowych w płaszczyźnie $X - Y$. W wyniku tej operacji uzyskujemy hamiltonian (3), który z punktu widzenia złożoności przeprowadzanych symulacji jest najbardziej efektywny. Przykładając zewnętrzne pole magnetyczne prostopadle do kierunku łańcucha, indukuje się naprzemienne pole magnetyczne, co jest efektem oddziaływań Dzyaloshinskii–Moriya. W hamiltonianie (1) oddziaływanie to jest reprezentowane przez wyrażenie $J \sin(2\theta)$. Dokonując przekształcenia do hamiltonianu (3), kąąt θ określa relację pomiędzy oddziaływaniem Dzyaloshinskii–Moriya a oddziaływaniem wymiany. Na podstawie analizy numerycznej oraz wyników pomiarów namagnesowania dla związku Yb_4As_3 ustalono, że $\text{tg}(\theta) = 0,19$ [26] i tę wartość zastosowałem w symulacjach dla związku Yb_4As_3 .

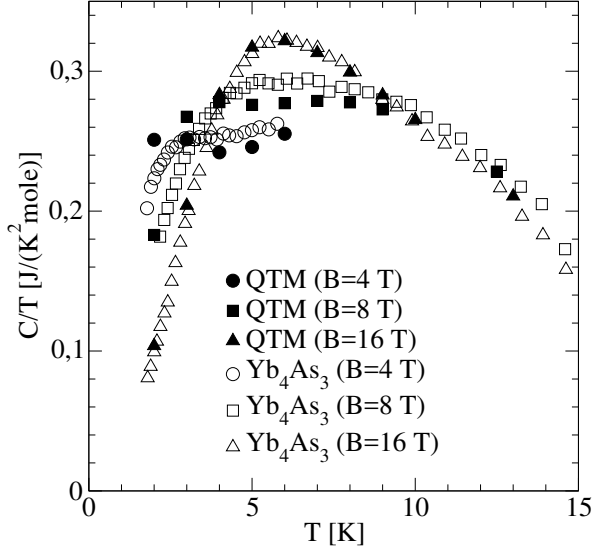
Następny parametr niezbędny do wykonania symulacji to czynnik Landego g . W zależności od kierunku przyłożonego pola magnetycznego względem kierunku łańcucha spinów wyróżnimy g_{\perp} oraz g_{\parallel} . Pierwszy z nich dotyczy przypadku, gdy zewnętrzne jednorodne pole magnetyczne przyłożone jest prostopadle do łańcucha, a drugi równoległe. Obie wartości zostały określone na podstawie analizy pomiarów dyfrakcji neutronów w polu magnetycznym [36, 37] i te wartości przyjąłem bez jakiegokolwiek modyfikacji w symulacjach ($g_{\perp} = 1,3$ oraz $g_{\parallel} = 3,0$).

Mając ustalone wszystkie parametry występujące w modelu (4) przeprowadziłem symulacje temperaturowej zależności ciepła właściwego dla pięciu różnych wartości przyłożonego jednorodnego pola magnetycznego $B = 4, 8, 12, 16$ oraz $19,5$ T. Rezultaty symulacji porównałem z wynikami pomiarów dla kryształu, którego sposób przygotowania został dokładnie opisany w pracy [29]. W pomiarach użyto próbki polidomenowej, a więc w symulacjach należało uwzględnić fakt, że kierunek przyłożonego zewnętrznego pola magnetycznego może być różny względem kierunku łańcucha spinów. W związku z tym możemy przyjąć, że dla próbki monokrystalicznej i dla jednorodnego pola magnetycznego B przyłożonego w kierunku $\langle 111 \rangle$ 25% domen w próbce jest usytuowanych tak, że przyłożone pole jest równoległe do wyróżnionego kierunku łańcucha spinów. Dla pozostałych 75% domen kierunek ten jest prostopadły, a efektywne pole magnetyczne oddziałujące na łańcuch w tym przypadku wynosi $B_{eff} = B \sin(70^\circ)$. To efektywne pole generuje jednorodną składową $B^x = B_{eff} \cos(\theta)$ oraz naprzemienne pole $B_s^y = B_{eff} \sin(\theta)$.

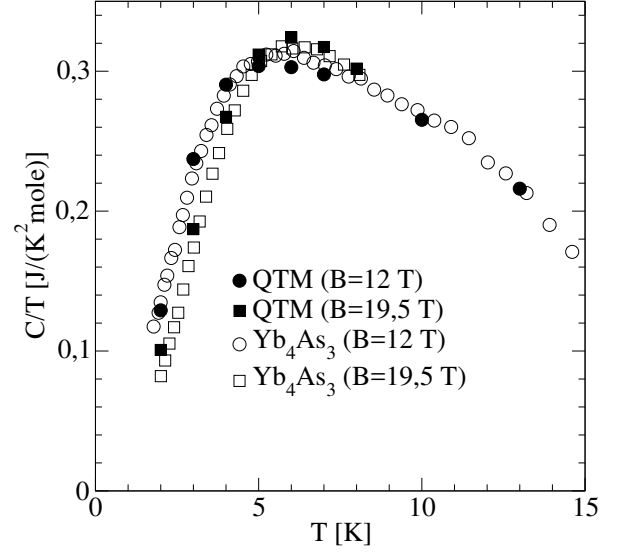
Ostatecznie, należy uwzględnić wkład od 25% domen, dla których przyłożone zewnętrzne pole wynosi B i jest równoległe do łańcucha oraz wkład od 75% domen, dla których zewnętrzne pole jest równe B_{eff} i jest prostopadłe do łańcucha:

$$C/T(B) = 0,75 \cdot C_{\perp}/T(B_{eff}) + 0,25 \cdot C_{\parallel}/T(B) \quad (18)$$

Wyniki przedstawione zostały na Rys. 5 i 6, gdzie porównano rezultaty numeryczne (pełne symbole) z danymi doświadczalnymi Yb_4As_3 (otwarte symbole) [H3,H4]. Dobra zgodność wyników symulacji z danymi doświadczalnymi występuje w całym zakresie rozpatrywanych temperatur



Rysunek 5: Zależność temperaturowa ciepła właściwego dla różnych wartości przyłożonego pola magnetycznego $B = 4, 8, 16$ T. Otwarte symbole odpowiadają danym eksperymentalnym, natomiast pełne symbole - wyniki numeryczne.



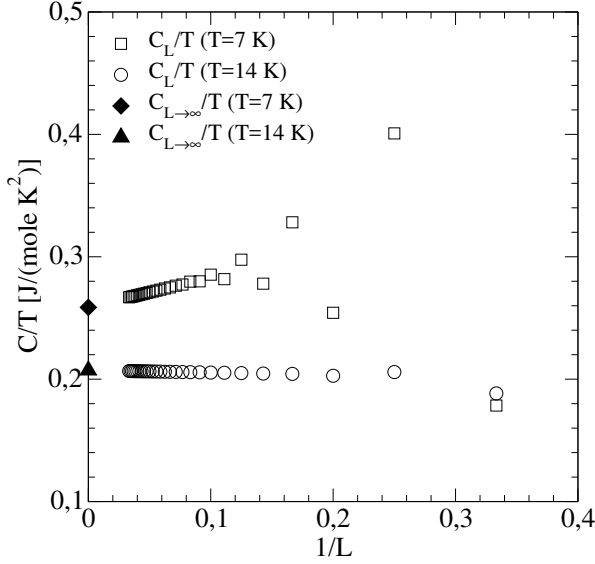
Rysunek 6: Zależność temperaturowa ciepła właściwego dla różnych wartości przyłożonego pola magnetycznego $B = 12$ oraz $19,5$ T. Otwarte symbole odpowiadają danym eksperymentalnym, natomiast pełne symbole - wyniki numeryczne.

i dla wszystkich wartości pól magnetycznych. Potwierdza to skuteczność przyjętego modelu, efektywność metody symulacji, a także właściwe oszacowanie parametrów hamiltonianu (4).

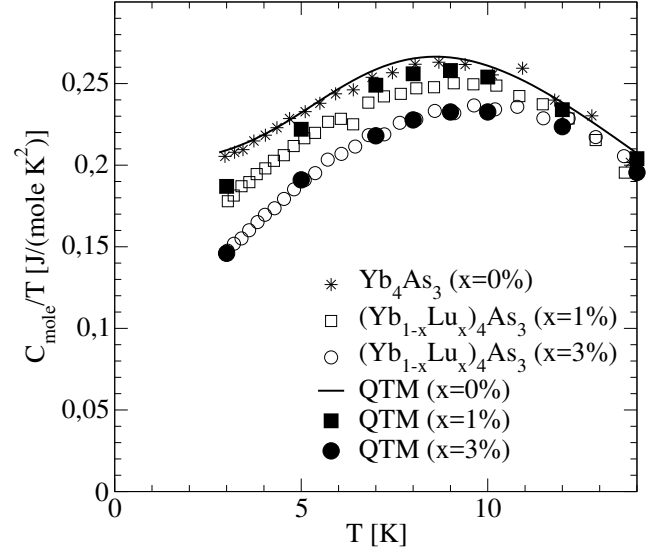
Umieszczenie związku Yb_4As_3 w zewnętrznym polu magnetycznym powoduje otwarcie przerwy energetycznej pomiędzy stanem podstawowym a najniżej leżącym stanem wzbudzonym. Wielkość przerwy dla danego pola można określić na podstawie wartości T_{max} , która oznacza temperaturę odpowiadającą maksimum temperaturowej zależności ciepła właściwego $C(B)/T$. Nie możemy jednak odczytać położenia tych maksimów bezpośrednio z wykresów przedstawionych na Rys. 5 i 6, ponieważ przerwa energetyczna jest określona przez naprzemienne pole magnetyczne B_s^y , które z kolei generowane jest tylko przez część prostopadłą do łańcucha. Wyznaczone eksperymentalnie ciepło właściwe dla określonego pola magnetycznego zawiera także składnik C_{\parallel} . Pierwszym krokiem jest więc określenie wkładu prostopadłego C_{\perp} dla odpowiadającego mu pola B_{eff} . Następnie wyznaczamy położenie T_{max} i wreszcie obliczamy przerwę energetyczną Δ generowaną przez pole naprzemienne B_s^y . Dokładny opis obliczenia przerwy Δ został przedstawiony w pracy [H3]. Wyniki uzyskane numerycznie, a także na podstawie analizy pomiarów niesprężystego rozpraszania neutronów [36] zaprezentowano w pracy [H3] (Rys. 6) oraz [H4] (Rys. 2). W obu przypadkach przerwa energetyczna jest proporcjonalna do $B^{2/3}$, co zgadza się z wynikami dla modelu sine-Gordona [6].

3.3.3 Wyniki symulacji układu domieszkowanego $(\text{Yb}_{(1-x)}\text{Lu}_x)_4\text{As}_3$ w zerowym polu magnetycznym

W przypadku czystego układu Yb_4As_3 przyjęty model jednowymiarowego antyferromagnetyka Heisenberga oraz zastosowana technika symulacji opierały się na założeniu, że własności związku możemy opisać traktując cały układ jako zbiór nieskończenie długich łańcuchów złożonych z



Rysunek 7: Ciepło właściwe C_L/T w zerowym polu magnetycznym obliczone dla różnych długości L łańcucha. Symbole pełne odpowiadają wartościom dla nieskończonych łańcuchów.



Rysunek 8: Zależność temperaturowa ciepła właściwego $(Yb_{1-x}Lu_x)_4As_3$ dla różnej koncentracji domieszek x . QTM oznacza wyniki numeryczne, pozostałe to dane eksperymentalne.

jonów magnetycznych. Po wprowadzeniu do układu domieszek jonów niemagnetycznych Lu, nie można już traktować łańcuchów jako obiekty o nieskończonej długości. W związku z tym należało wprowadzić pewne modyfikacje do samej techniki kwantowej macierzy transferowej i w inny sposób obliczać sumę stanów. Równanie (10) należało zastąpić dwoma równaniami (11) i (12) dla łańcuchów o nieparzystej i parzystej liczbie węzłów.

Następnym krokiem jest określenie wkładów jakie wnoszą do ciepła właściwego łańcuchy o różnej i skończonej długości. Zakładając jednorodny rozkład domieszek wzdłuż łańcucha, każdy węzeł obsadzony jest jonem magnetycznym z prawdopodobieństwem p , a jonem niemagnetycznym z prawdopodobieństwem $x = 1 - p$. Wówczas prawdopodobieństwo p_L wystąpienia łańcucha o długości L wynosi $p^L(1 - p)^2$. Liczba wszystkich łańcuchów o długości L jest równa $n_L = Np^L(1 - p)^2$, gdzie N jest długością całego łańcucha, wzdłuż którego leżą rozpatrywane skończone łańcuchy. Natomiast liczba wszystkich łańcuchów o dowolnych długościach ($L = 1, \dots, \infty$) wyraża się poprzez następującą sumę:

$$n = \sum_{L=1}^{\infty} n_L = N \sum_{L=1}^{\infty} p^L(1 - p)^2 = N(1 - p)^2 \sum_{L=1}^{\infty} p^L = N(1 - p)p. \quad (19)$$

Uwzględniając powyższe założenia, rozkład prawdopodobieństwa wystąpienia łańcuchów o długościach L wynosi:

$$\omega_L = \frac{n_L}{n} = \frac{Np^L(1 - p)^2}{N(1 - p)p} = p^{L-1}(1 - p), \quad (20)$$

a ciepło właściwe przypadające na jeden spin dla układu domieszkowanego możemy obliczyć na podstawie równania [38, 39]:

$$C = \frac{n}{N} \sum_{L=1}^{\infty} \omega_L C_L = \frac{N(1 - p)p}{N} \sum_{L=1}^{\infty} p^{L-1}(1 - p) C_L. \quad (21)$$

Uwzględniając fakt, że koncentracja domieszek $x = 1 - p$ ciepło właściwe przypadające na jeden mol dla rozpatrywanego układu domieszkowanego $(\text{Yb}_{1-x}\text{Lu}_x)_4\text{As}_3$ możemy wyznaczyć za pomocą następującego wyrażenia [H5]:

$$C = x^2 \sum_{L=1}^{\infty} (1-x)^L C_L. \quad (22)$$

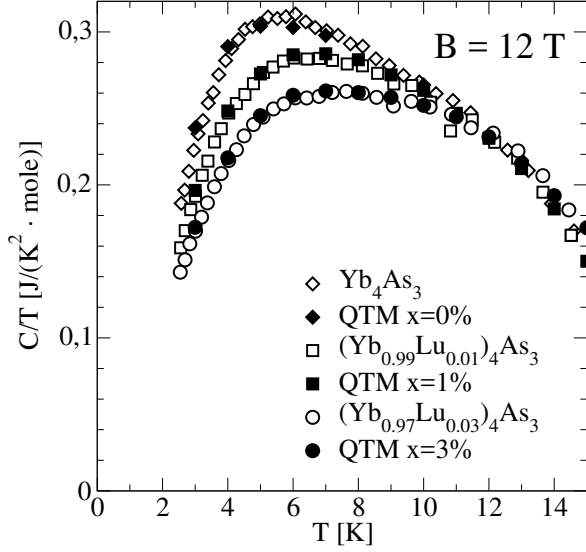
Ze względu na złożoność obliczeń, nie jest możliwe wyznaczenie C_L dla dowolnie dużych wartości L , jednak wkład do całkowitego ciepła właściwego pochodzący od łańcuchów o dużej długości zmniejsza się wraz ze wzrostem L [H5]. Ponadto dla dostatecznie dużej wartości L ($L > L_0$) okazuje się, że C_L zależy liniowo względem $1/L$, co pozwala w tym przypadku wyznaczyć w sposób analityczny wkłady do całkowitego ciepła właściwego. Na Rys. 7 przedstawiono wyniki symulacji ciepła właściwego C_L dla różnych długości łańcuchów w zależności od $1/L$. Dane dotyczą dwóch różnych temperatur: $T = 7$ K oraz $T = 14$ K. Widać wyraźnie, że dla wyższej temperatury zależność $C_L(1/L)$ jest liniowa praktycznie dla dowolnego L , a rozbieżności od liniowości są niewielkie i to tylko dla małych L . W niższych temperaturach obserwujemy większą rozbieżność od liniowej zależności, ale w dalszym ciągu jest to obecne tylko dla stosunkowo małych długości łańcuchów. Ostatecznie, dla każdej z rozpatrywanych przez nas temperatur można określić wystarczająco dużą wartość L , powyżej której C_L jest proporcjonalne do $1/L$. Możemy wówczas wyznaczyć analitycznie formułę, która określi nam wartość ciepła dla dowolnie dużych wartości L bez potrzeby wykonywania czasochłonnych obliczeń numerycznych. Symulacje przeprowadziłem w całym zakresie badanych temperatur dla wartości $L \leq 30$. Na Rys. 7 przedstawiono także wyniki dla łańcuchów nieskończonych (w postaci pełnych symboli), wynikające z obliczeń za pomocą ansatzu Bethego, które z bardzo dużą dokładnością pokrywają się z rezultatami uzyskanymi metodą ekstrapolacji danych numerycznych C_L przy $L \rightarrow \infty$.

Ostatecznie formuła pozwalająca znaleźć ciepło właściwe w przypadku układów domieszkowanych, w których koncentracja domieszek wynosi x ma postać:

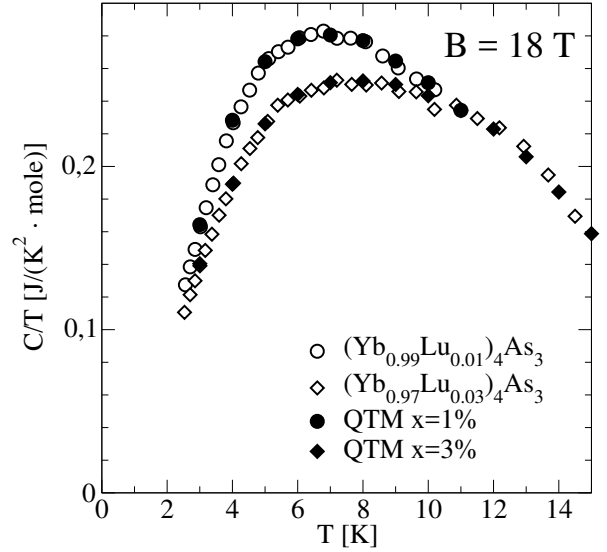
$$C = x^2 \cdot \sum_{L=1}^{L_0} (1-x)^L \cdot C_{sp}(L)L + C(L > L_0), \quad (23)$$

gdzie $C_{sp}(L)$ oznacza ciepło właściwe przypadające na jeden spin obliczone numerycznie dla łańcuchów o długościach $L \leq L_0$, natomiast $C(L > L_0)$ reprezentuje sumaryczny wkład pochodzący od wszystkich łańcuchów o długościach $L > L_0$ (wyliczony analitycznie przy założeniu, że C_L jest liniowe względem $1/L$) [H5]. Na Rys. 8 przedstawiono porównanie wyników eksperymentalnych ciepła właściwego związku $(\text{Yb}_{1-x}\text{Lu}_x)_4\text{As}_3$ w zerowym polu magnetycznym z wynikami symulacji dla koncentracji domieszek $x = 1\%$ oraz $x = 3\%$, a także dla $x = 0\%$. Można zauważyć silną redukcję ciepła właściwego wraz z niewielkim wzrostem koncentracji domieszek. Dobra zgodność w całym zakresie temperatur potwierdza skuteczność przyjętego modelu teoretycznego i techniki symulacyjnej nie tylko w przypadku układu czystego, ale również domieszkowanego.

Podobne obliczenia, jak w przypadku ciepła właściwego, możemy przeprowadzić w celu obliczenia średniej przerwy energetycznej dla określonej koncentracji domieszek. Analogicznie do C_L występującego w równaniu (22), możemy zdefiniować Δ_L jako przerwę energetyczną odpowiadającą układowi o długości L . Wówczas średnią przerwę energetyczną obliczymy w następujący



Rysunek 9: Porównanie wyników numerycznych z eksperymentalnymi dla próbki umieszczonej w polu magnetycznym $B = 12$ T w przypadku układu czystego ($x = 0\%$) oraz domieszkowanego ($x = 1\%$ i $x = 3\%$).



Rysunek 10: Porównanie wyników numerycznych z eksperymentalnymi dla próbki umieszczonej w polu magnetycznym $B = 18$ T w przypadku koncentracji domieszek $x = 1\%$ i $x = 3\%$.

sposób:

$$\Delta/J = x^2 \cdot \sum_{L=1}^{\infty} (1-x)^L \Delta_L/J. \quad (24)$$

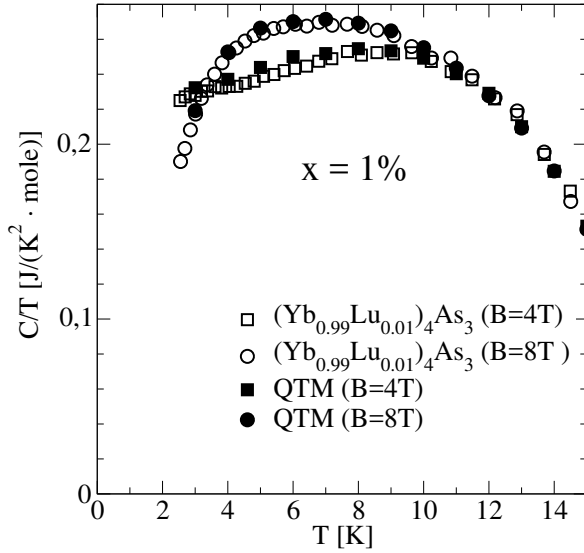
Obliczenia numeryczne wykonane zostały dla $L \leq 20$ metodą ścisłej diagonalizacji, natomiast dla $L > 20$ zależność przerwy energetycznej od długości łańcucha wyznaczyłem analitycznie [H5] na podstawie przyjętych założeń konforemnej teorii pola (CFT) [40, 41, 42]:

$$\Delta_L/J = \frac{a}{L} + \frac{b}{L \ln(L)}. \quad (25)$$

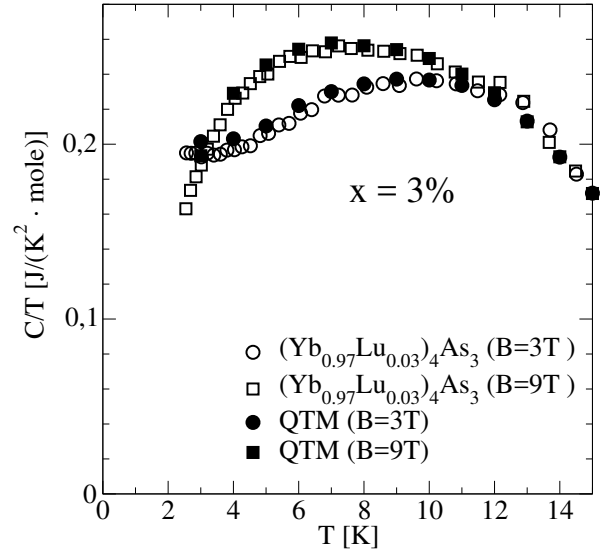
Istotna różnica w obliczeniach przerwy energetycznej w stosunku do ciepła właściwego wynika z faktu, że dla łańcuchów o parzystej liczbie spinów stan podstawowy jest niemagnetycznym singletem, a dla nieparzystej magnetycznym dubletem [40]. Wobec tego średnia przerwa energetyczna obliczona została osobno dla łańcuchów składających się z parzystej i nieparzystej liczby spinów. W obu przypadkach jednak Δ_L oznacza przerwę pomiędzy pierwszym stanem wzbudzonym a stanem podstawowym. Ponadto obliczenia wykonałem nie tylko dla $x = 0,01$ oraz $x = 0,03$. Uzyskane wyniki przedstawiono w pracy [H5]. Warto zauważyć, że średnia przerwa energetyczna dla $x = 0,01$ oraz $x = 0,03$ ma stosunkowo małą wartość jednak jej wpływ na redukcję ciepła właściwego jest wyraźnie istotny.

3.3.4 Wyniki symulacji układu domieszkowanego $(\text{Yb}_{1-x}\text{Lu}_x)_4\text{As}_3$ w zewnętrznym polu magnetycznym

Przeprowadzenie symulacji dla układu domieszkowanego $(\text{Yb}_{1-x}\text{Lu}_x)_4\text{As}_3$ umieszczonego w zewnętrznym polu magnetycznym wymagało zastosowania wszystkich opisanych wcześniej technik



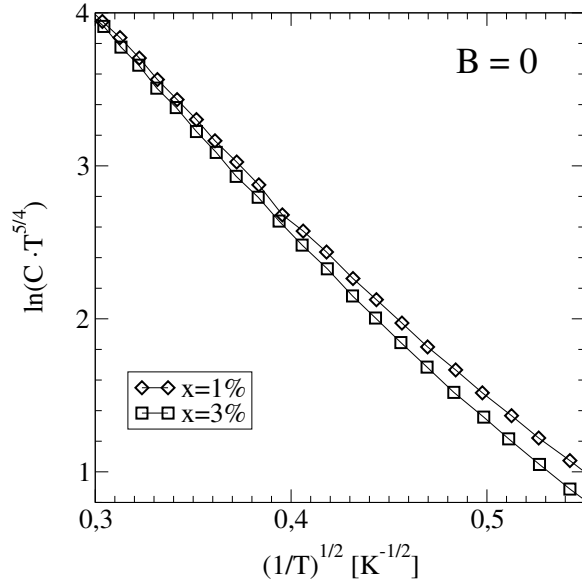
Rysunek 11: Porównanie wyników numerycznych z eksperymentalnymi próbki umieszczonej w polu magnetycznym $B = 4 \text{ T}$, $B = 8 \text{ T}$ i koncentracji domieszek $x = 1\%$.



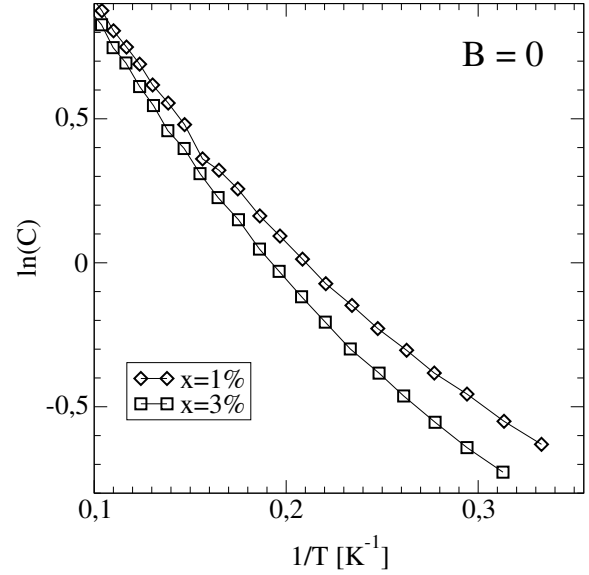
Rysunek 12: Porównanie wyników numerycznych z eksperymentalnymi próbki umieszczonej w polu magnetycznym $B = 3 \text{ T}$, $B = 9 \text{ T}$ i koncentracji domieszek $x = 3\%$.

numerycznych oraz przyjętych założeń do rozpatrywanego modelu (4). Z punktu widzenia złożoności problemu jest to przypadek najbardziej skomplikowany i wymagający czasochłonnych obliczeń zarówno ze względu na czas obliczeń komputerowych, ale także z powodu analizy numerycznej i statystycznej uzyskanych wyników symulacji. Po pierwsze, w związku z tym, że układ jest domieszkowany należy przeprowadzić obliczenia dla dużej liczby skończonych łańcuchów. Niezbędne jest także znalezienie sumy stanów, osobno dla nieparzystej (11) i parzystej (12), liczby węzłów L w łańcuchu. Po drugie, zastosować należało rozkład statystyczny domieszek i uwzględnić różne wartości koncentracji x . Ponadto uwzględniając fakt, że próbka jest polidomenowa i umieszczona jest w zewnętrznym polu magnetycznym, należy w obliczeniach przyjąć pełną postać hamiltonianu (4). W związku z tym dla każdej wartości L oraz dla każdej temperatury T i przyłożonego pola B , musimy uwzględnić zarówno równoległą jak i prostopadłą orientację przyłożonego pola w stosunku do kierunku łańcucha. Dokładny opis tej procedury przedstawiono w Rozdziale 3.3.2. Podsumowując, symulacje wymagają obliczenia wkładu prostopadłego i równoległego dla różnych długości łańcucha L , temperatury T , wartości zewnętrznego pola magnetycznego B oraz koncentracji x .

Wyniki symulacji temperaturowej zależności ciepła właściwego w porównaniu z danymi eksperymentalnymi dla związku $(\text{Yb}_{1-x}\text{Lu}_x)_4\text{As}_3$ w przypadku różnych wartości pola $B = 3, 4, 8, 9, 12$ oraz 18 T i różnych koncentracji $x = 1\%$ oraz 3% przedstawiono na Rys. 9 – 12. Bardzo dobra zgodność wyników numerycznych z danymi eksperymentalnymi potwierdza, że ten najbardziej skomplikowany z punktu widzenia metodologicznego, ale także numerycznego przypadek efektywnie realizuje się w sytuacji rozpatrywanego związku.



Rysunek 13: Zależność (26) ciepła właściwego w zerowym polu magnetycznym dla czystego związku Yb_4As_3 oraz domieszkowanego.



Rysunek 14: Zależność (27) ciepła właściwego w zerowym polu magnetycznym dla czystego związku Yb_4As_3 oraz domieszkowanego.

3.3.5 Fizyczna realizacja fazy szkła Bosego w przypadku związku Yb_4As_3 oraz $(\text{Yb}_{1-x}\text{Lu}_x)_4\text{As}_3$

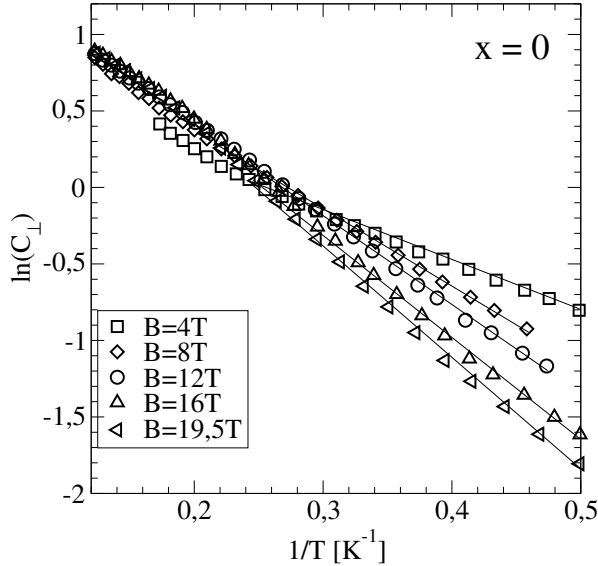
Wyniki ciepła właściwego, a także analiza dotycząca przerwy energetycznej mogą być również przydatne w dyskusji na temat zachowania się rozpatrywanego związku w sposób charakterystyczny dla fazy szkła Bosego, która przewidziana została w układach spinowych [43], a eksperymentalnie potwierdzona w przypadku quasi-jednowymiarowego związku TlCuCl_3 [44, 45]. Jest to rzadko występujący stan materii, w którym jednym z charakterystycznych zachowań jest brak przerwy energetycznej. W przypadku jednowymiarowych antyferromagnetyków istnienie przerwy energetycznej lub jej brak uzależnione jest m. in. od rodzaju spinów. W układach o całkowitym spinie przerwa występuje dla jednorodnych łańcuchów [5], natomiast w układach ze spinem połówkowym pojawia w przypadku alternacji oddziaływań pomiędzy spinami [6]. Ponadto, na zachowanie się przerwy energetycznej istotny wpływ ma występowanie niemagnetycznych domieszek [40]. Eksperymentalna weryfikacja pojawienia się fazy szkła Bosego w przypadku związku umieszczonego w zewnętrznym polu magnetycznym jest możliwa na podstawie występowania eksponencjalnej zależności namagnesowania [46]. Charakterystyczna jest wówczas niskotemperaturowa zależność ciepła właściwego, która odbiega od zależności eksponencjalnej i wyraża się następującym równaniem [47]:

$$C(T) = A \cdot (k_B T / J)^{-5/4} \exp(-\gamma (k_B T / J)^{-1/2}), \quad (26)$$

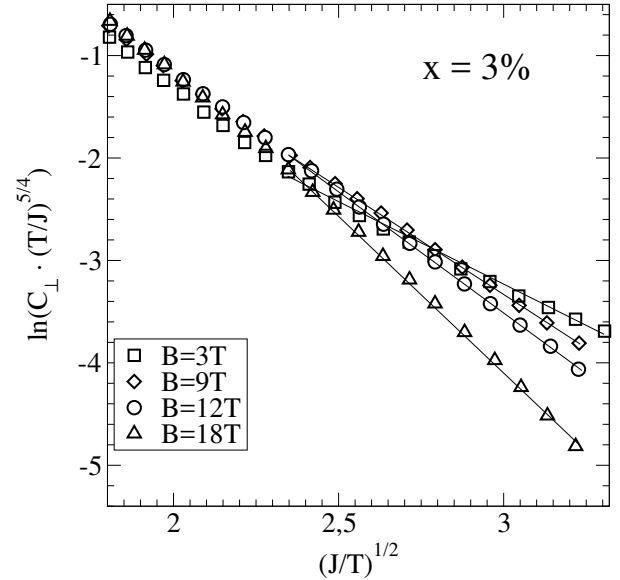
gdzie A oraz γ zależą od koncentracji domieszek oraz przyłożonego pola magnetycznego. Natomiast obecność przerwy energetycznej można potwierdzić na podstawie zależności:

$$C(T) = C_0 \exp(-\Delta / (k_B T)), \quad (27)$$

gdzie C_0 jest stałą.



Rysunek 15: Zależność (27) ciepła właściwego w przyłożonym polu magnetycznym dla czystego związku Yb_4As_3 .



Rysunek 16: Zależność (26) ciepła właściwego w przyłożonym polu magnetycznym domieszkowanego $(\text{Yb}_{1-x}\text{Lu}_x)_4\text{As}_3$ dla koncentracji domieszek $x = 3\%$.

Uzyskane wyniki ciepła właściwego dla układu domieszkowanego w przypadku zerowego pola magnetycznego zostały przeskalowane zgodnie z zależnościami (26) oraz (27) i przedstawione na Rys. 13 oraz 14. Widać wyraźnie różnicę w skalowaniu się ciepła właściwego w obu przypadkach co świadczy o tym, że wprowadzenie niemagnetycznych jonów Lu przeprowadza układ do fazy szkła Bosego.

Podobną analizę możemy wykonać w przypadku czystego układu Yb_4As_3 , jak i domieszkowanego $(\text{Yb}_{1-x}\text{Lu}_x)_4\text{As}_3$ umieszczonych w zewnętrznym polu magnetycznym. Przyłożenie pola magnetycznego powoduje jednak, że nie możemy brać pod uwagę wkładu do ciepła właściwego pochodzącego od pola przyłożonego równoległe do kierunku łańcucha, ponieważ naprzemienne pole magnetyczne B_y^g indukowane jest tylko w przypadku prostopadle przyłożonego zewnętrznego pola. Sposób uzyskania części prostopadłej ciepła właściwego został krótko już opisany w Rozdziale 3.3.2, a dokładnie przedstawiono w pracach [H3, H6]. Na Rysunku 15 pokazano wyniki dla układu czystego i różnych wartości przyłożonego pola magnetycznego w zakresie $B = 4-19,5$ T. Eksponencjalna zależność ciepła właściwego w niskich temperaturach dla wszystkich wartości B , zgodna z prawem skalowania (27), potwierdza istnienie przerwy energetycznej. Z kolei na Rys. 16 przedstawiono wyniki dotyczące układu domieszkowanego dla koncentracji domieszek $x = 3\%$, gdzie ciepło właściwe skaluje się zgodnie z (26), co świadczy o wygaszeniu przerwy energetycznej i przejściu układu do fazy szkła Bosego. W pracy [H6] pokazano również analogiczne wyniki dla koncentracji $x = 1\%$.

3.4 Podsumowanie

Publikacje [H1-H7] będące podstawą zaprezentowanego osiągnięcia naukowego stanowią jednotematyczny cykl przedstawiający wyniki symulacji własności niskotemperaturowych jednowymia-

rowego modelu Heisenberga w odniesieniu do czystego związku Yb_4As_3 oraz domieszkowanego $(\text{Yb}_{1-x}\text{Lu}_x)_4\text{As}_3$, zarówno w przypadku obecności przyłożonego zewnętrznego pola magnetycznego jak i jego braku. Analiza uzyskanych wyników numerycznych i ich porównanie z danymi eksperymentalnymi, pozwoliły na dyskusję dotyczącą występujących w rozpatrywanym związku efektów kwantowych. Wszystkie wymienione publikacje są efektem pracy dwóch zespołów: zajmujących się zagadnieniami teoretycznymi oraz doświadczalnymi, jednak mój wkład w zakresie teoretycznym jest decydujący. W odniesieniu do metodologii obejmuje następujące elementy:

- Samodzielne opracowanie algorytmów niezbędnych do wykonania symulacji własności niskotemperaturowych jednorodnego modelu Heisenberga ze spinem $S = 1/2$, przy zastosowaniu metody kwantowej macierzy transferowej, dla nieskończonych jak i skończonych łańcuchów spinowych.
- Samodzielne wykonanie implementacji opracowanych algorytmów i uruchomienie programów komputerowych mających na celu obliczenie sumy stanów i funkcji termodynamicznych oraz przystosowanie kodów do wykonania efektywnych obliczeń równoległych.
- Opracowanie ulepszonej procedury ekstrapolacyjnej, co spowodowało uzyskanie dokładniejszych wyników ciepła właściwego dla danej temperatury, a także możliwość wykonania symulacji w obszarze niższych wartości temperatur istotnych z punktu widzenia występowania efektów kwantowych.

W odniesieniu do aspektów fizycznych prezentowanego osiągnięcia naukowego, mój wkład polega na:

- Zaproponowaniu modelu dla badanego związku, a także określeniu zależności temperaturowej sieciowego ciepła właściwego, która ustalona dla układu czystego bez pola magnetycznego, była wykorzystana do wyznaczenia eksperymentalnego magnetycznego ciepła właściwego.
- Uzyskaniu bardzo dobrej zgodności wyników numerycznych ze zmierzonym magnetycznym ciepłem właściwym w przypadku układu czystego w zerowym polu i w obecności przyłożonego pola magnetycznego, umożliwiające demonstrację istnienia przerwy energetycznej i potwierdzenie prawa skalowania $B^{2/3}$ znanego wcześniej dla modelu sine-Gordona.
- Wykazaniu, że przy założeniu jednorodnego rozkładu domieszek, związek $(\text{Yb}_{1-x}\text{Lu}_x)_4\text{As}_3$ jest bardzo dobrą realizacją fizyczną modelu Heisenberga z jednorodnym rozkładem skończonych łańcuchów ze spinem $S = 1/2$.
- Wykazaniu istnienia fazy szkła Bosego w przypadku rozpatrywanego związku, będącej efektem naprzemiennego pola magnetycznego wzdłuż kierunku łańcucha.

Literatura

- [1] M. Hase, I. Terasaki, K. Uchinokura, Phys. Rev. Lett. **70**, 3651 (1993) .
- [2] J.P.Renard, M.Verdaguer, L.P.Renault, W.A.C.Erkelens, J.Rossat-Mignod, W.G.Stirilig, Eurphys. Lett. **3**, 945 (1987).

- [3] P. Renard, M. Verdagner, L. P. Regnault, W. A. C. Erkelens, J. Rossat-Mignat, J. Ribas, W. G. Stirling, C. Vettier, *J. Appl. Phys.* **63**, 3538 (1988).
- [4] J. Des Cloizeaux, J. J. Pearson, *Phys. Rev.* **128**, 2131 (1962).
- [5] F. D. M. Haldane, *Phys. Rev. Lett.* **50**, 1153 (1983).
- [6] M. Oshikawa, I. Affleck, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 2883 (1997).
- [7] M. Oshikawa, I. Affleck, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 5136 (1999).
- [8] D.C. Dender, P.R. Hammar, D.H. Reich, C. Broholm, and G. Aeppli, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 1750 (1997).
- [9] R. Feyerherm, S. Abens, D. Günther, T. Ishida, M. Meißner, M. Meschke, T. Nogami, J. *Phys.: Condens. Matter.* **12**, 8495 (2000).
- [10] J. C. Bonner, M. E. Fisher, *Phys. Rev. A* **135**, 640 (1964).
- [11] M. Barma, B.S. Shastry, *Phys. Rev. B* **18**, 3351 (1978).
- [12] T. Delica, H. Leschke, *Physica A* **168**, 736 (1990).
- [13] D. C. Johnston, R. K. Kremer, M. Troyer, X. Wang, A. Klümper, S. L. Budko, A. F. Panchula, P. C. Canfield, *Phys. Rev. B* **61**, 9558 (2000).
- [14] H. Betsuyaku, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 629 (1984).
- [15] M. Suzuki, *Phys. Rev. B* **31** 2957 (1985).
- [16] G. Kamieniarz, M. Bieliński, J.-P. Renard, *Phys. Rev. B* **60** 14521 (1999).
- [17] M. Antkowiak, P. Kozłowski, G. Kamieniarz, G.A. Timco, F. Tuna, P.E.P. Winpenny, *Phys. Rev. B*, **87**, 184430 (2013).
- [18] G. Kamieniarz, R. Matysiak, A. Caramico D’Auria, F. Esposito, U. Esposito, *Phys. Rev. B* **56**, 645 (1997).
- [19] G. Kamieniarz, R. Matysiak, *Computational Materials Science* **28**, 353 (2003).
- [20] G. Kamieniarz, R. Matysiak, A. Caramico D’Auria, U. Esposito, U. Esposito, *J. Magn. Magn. Mater.* **196-197**, 915 (1999).
- [21] Grzegorz Kamieniarz, Ryszard Matysiak, A. Caramico D’Auria, Filippo Esposito, C. Benelli, *European Physical Journal B* **23**, 183 (2001).
- [22] A. Caramico D’Auria, U. Esposito, F. Esposito, G. Kamieniarz, R. Matysiak, *Journal of Physics: Condensed Matter* **13**, 2017 (2001).
- [23] G. Kamieniarz, R. Matysiak, A. Caramico D’Auria, F. Esposito, C. Benelli, *Computer Physics Communications* **147**, 194 (2002).
- [24] M. Oshikawa, K. Ueda, H. Aoki, A. Ochiai, M. Kohgi, *J. Phys. Soc. Jpn.* **68**, 3181 (1999).
- [25] H. Shiba, K. Ueda, O. Sakai, *Journal of the Physical Society of Japan* **69**, 1493 (2000).
- [26] N. Shibata, K. Ueda, *Journal of the Physical Society of Japan* **70** 3690 (2001).
- [27] H. A. Bethe, *Z. Phys.* **71**, 205 (1971).
- [28] A. Klümper, *Z. Phys. B* **91**, 507 (1993).

- [29] A. Ochiai, T. Suzuki, T. Kasuya, J. Phys. Soc. Jpn. **59** 4129 (1990).
- [30] M. Köppen, M. Lang, R. Helfrich, F. Steglich, P. Thalmeier, B. Schmidt, B. Wand, D. Pankert, H. Benner, H. Aoki and A. Ochiai, Phys. Rev. Lett. **82**, 4548 (1999).
- [31] B. Schmidt, H. Aoki, T. Cichorek, J. Custers, P. Gegenwart, M. Kohgi, M. Lang, C. Langhammer, A. Ochiai, S. Paschen, F. Steglich, T. Suzuki, P. Thalmeier, B. Wand, and A. Yaresko, Physica B **300**, 121 (2001).
- [32] M. Kohgi, K. Iwasa, A. Ochiai, T. Suzuki, J.-M. Mignot, B. Gillon, A. Gukasov, J. Schweizer, K. Kakurai, M. Nishi, A. Döni, T. Osakabe, Physica B **230-232**, 638 (1997).
- [33] P. Fulde, B. Schmidt, P. Thalmeier, Europhys. Lett. **31**, 323 (1995).
- [34] V.N. Antonov, A.N. Yaresko, A.Ya. Perlov, P. Thalmeier, P. Fulde, P.M. Openeer, H. Eschrig, Phys. Rev. B **58**, 9752 (1998).
- [35] M. Kohgi, K. Iwasa, J.-M. Mignot, A. Ochiai, T. Suzuki, Phys. Rev. B **56**, R11388 (1997).
- [36] M. Kohgi, K. Iwasa, J.-M. Mignot, B. Fak, P. Gegenwart, M. Lang, A. Ochiai, H. Aoki, T. Suzuki, Phys. Rev. Lett. **86**, 2439 (2001).
- [37] K. Iwasa, M. Kohgi, A. Gukasov, J.-M. Mignot, N. Shibata, A. Ochiai, H. Aoki, T. Suzuki, Phys. Rev. B **65** 052408 (2002).
- [38] H. Asakawa, M. Matsuda, K. Minami, H. Yamazaki, K. Katsumata, Phys. Rev. B **57**, 8285 (1998).
- [39] H. Yamazaki, K. Katsumata, Phys. Rev. B **54**, R6831 (1996).
- [40] S. Wessel and S. Haas, Phys. Rev. B **61**, 15262 (2000).
- [41] I. Affleck, S. Qin, J. Phys. A.: Math. Gen. **32**, 7815 (1999).
- [42] S. Haas, Phys. Rev. Lett. **80**, 4052 (1998).
- [43] M.P.A. Fisher, P.B. Weichman, G. Grinstein, D.S. Fisher, Phys. Rev. B **40**, 546 (1989).
- [44] T. Nikuni, M. Oshikawa, A. Oosawa, H. Tanaka, Phys. Rev. Lett. **84**, 5868 (2000).
- [45] Ch. Rüegg, N. Cavadini, A. Furrer, H.-U. Güdel, K. Krämer, H. Mutka, A. Wildes, K. Habicht, P. Vorderwisch, Nature **423**, 62 (2003).
- [46] T. Roscilde, Phys. Rev. B **74**, 144418 (2006).
- [47] R. Yu, L. Yin, N.S. Sullivan, J. S. Xia, Ch. Huan, A. Paduan-Filho, N.F. Oliveira Jr, S. Haas, A. Steppke, C.F. Miclea, F. Weickert, R. Movshovich, E-D. Mun, B.L. Scott, V.S. Zapf, T. Roscilde, Nature **489**, 379 (2012).

V. Omówienie pozostałych osiągnięć naukowo - badawczych

Główne zainteresowania naukowo-badawcze są blisko związane z zagadnieniami przedstawionymi w prezentowanym powyżej osiągnięciu naukowym i dotyczą symulacji własności niskowymiarowych układów spinowych. Zakres działalności obejmujący tematykę nie ujętą w ramach głównego osiągnięcia naukowo-badawczego i uzyskane przeze mnie wyniki można rozpatrywać z punktu widzenia dwóch obszarów naukowych.

Pierwszy obszar o charakterze czysto fizycznym obejmuje modelowanie, symulacje własności oraz interpretację uzyskanych wyników dla układów o różnych wartościach spinów. W szczególności we wcześniejszym okresie pracy naukowej przedmiotem badań były układy z przerwą energetyczną Haldane'a ze spinem $S = 1$, gdzie symulacje przeprowadzone były w oparciu o model Heisenberga dla nieskończonych łańcuchów spinowych. Następną klasą układów były magnetyki molekularne, których własności można opisać za pomocą zamkniętych jednorodnych jak i niejednorodnych (z punktu widzenia wartości spinu) pierścieni spinowych. Niejednorodność może być także rozumiana w odniesieniu do różnych wartości oddziaływań wzajemnych między spinami oraz pomiędzy spinami a zewnętrznym polem magnetycznym. We wszystkich rozpatrywanych przypadkach uzyskane wyniki teoretyczne były porównywane z dostępnymi wynikami pomiarów eksperymentalnych. Z punktu widzenia własności fizycznych badane były takie wielkości jak ciepło właściwe, namagnesowanie i podatność magnetyczna w funkcji temperatury lub przyłożonego zewnętrznego pola magnetycznego.

Drugi obszar badań koncentruje się na zagadnieniach numerycznych, które co prawda stanowią tylko narzędzie do uzyskania wyników w obszarze fizycznym, jednak w związku ze wzrostem mocy obliczeniowych systemów komputerowych, to narzędzie staje się bardzo efektywnym sposobem weryfikacji założonych modeli teoretycznych. Znaczną część swojej pracy naukowej poświęciłem na opracowanie algorytmów i ich implementację w zastosowanych symulacjach. Innym istotnym problemem było przygotowanie programów do obliczeń równoległych i wykorzystanie wektoryzacji obliczeń, co pozwalało na znaczne skrócenie czasu potrzebnego na wykonanie symulacji. Wiązało się to także z badaniem efektywności zrównoleglania programów. Ważnym elementem w przypadku symulacji numerycznych jest także dostosowanie opracowanych algorytmów do konkretnych platform superkomputerowych.

Lista prac zawierających pozostałe wyniki uzyskane w pracy naukowej, które nie zostały przedstawione w głównym osiągnięciu naukowym (pozycje [H1] - [H7]) są oznaczone w spisie literatury poniżej jako [A1] - [A23].

- [A1] G. Kamieniarz, **R. Matysiak**, A. Caramico D'Auria, F. Esposito, U. Esposito, Phys. Rev. B **56**, 645 (1997).
- [A2] A. Caramico D'Auria, F. Esposito, U. Esposito, G. Kamieniarz, **R. Matysiak**, Acta Magnetica **11**, 3 (1997).
- [A3] G. Kamieniarz, **R. Matysiak**, Acta Physica Polonica A, **92**, 387 (1997).
- [A4] **R. Matysiak**, G. Kamieniarz, A. Caramico D'Auria, F. Esposito, U. Esposito, Phase Transitions and Critical Phenomena : Proceedings of 11th seminar. Polanica Zdrój, Polska, 1998 .- Wrocław: Polish Academy of Science, 114 (1998).
- [A5] G. Kamieniarz, **R. Matysiak**, A. Caramico D'Auria, U. Esposito, U. Esposito, J. Magn. Magn. Mater, **196-197**, 915 (1999).
- [A6] G. Kamieniarz, **R. Matysiak**, W. Florek, S. Wałczak, Journal of Magnetism and Magnetic Materials **203**, 271 (1999).
- [A7] G. Kamieniarz, **R. Matysiak**, A. Caramico D'Auria, F. Esposito, C. Benelli, Acta Physica Polonica A **98**, 721 (2000).

- [A8] **R. Matysiak**, A. Caramico D’Auria, F. Esposito, U. Esposito, Acta Physica Polonica A **97**, 959 (2000).
- [A9] G. Kamieniarz, **R. Matysiak**, A. Caramico D’Auria, F. Esposito, C. Benelli, European Physical Journal B **23**, 183 (2001).
- [A10] A. Caramico D’Auria, U. Esposito, F. Esposito, G. Kamieniarz, **R. Matysiak**, Journal of Physics: Condensed Matter **13**, 2017 (2001).
- [A11] G. Kamieniarz, **R. Matysiak**, A. Caramico D’Auria, F. Esposito, C. Benelli, Lecture Notes in Computer Science: Parallel processing and applied mathematics **2328** 502 (2002).
- [A12] G. Kamieniarz, **R. Matysiak**, A. Caramico D’Auria, F. Esposito, C. Benelli, Computer Physics Communications **147**, 194 (2002).
- [A13] **R. Matysiak**, G. Kamieniarz, P. Gegenwart, H. Aoki, A. Ochiai, F. Steglich, Physica Status Solidi (b) **237**, No. 2, 549–552 (2003).
- [A14] G. Kamieniarz, **R. Matysiak**, Computational Materials Science **28**, 353 (2003).
- [A15] **R. Matysiak**, M. Haglauer, G. Kamieniarz, A. Caramico D’Auria, F. Esposito, Lecture Notes in Computer Science: Parallel processing and applied mathematics **3019**, 475 (2004).
- [A16] G. Kamieniarz, **R. Matysiak**, Lecture Notes in Computer Science: Parallel processing and applied mathematics **3019**, 1091 (2004).
- [A17] G. Kamieniarz, **R. Matysiak**, P. Gegenwart, H. Aoki, A. Ochiai, Journal of Magnetism and Magnetic Materials **290-291**, 353 (2005).
- [A18] G. Kamieniarz, **R. Matysiak**, Journal of Computational and Applied Mathematics **189**, 471 (2006).
- [A19] **R. Matysiak**, G. Kamieniarz, Computational Methods in Science and Technology **12**, 139 (2006).
- [A20] **R. Matysiak**, G. Kamieniarz, P. Gegenwart, H. Aoki, A. Ochiai, Inorganica Chimica Acta **360**, 3955 (2007).
- [A21] P. Sobczak, A. Barasiński, **R. Matysiak**, A. Drzewiński, G. Kamieniarz, A. Bieńko, J. Mroziński, Acta Physica Polonica A **118**, 975 (2010).
- [A22] A. Barasiński, B. Brzostowski, **R. Matysiak**, P. Sobczak, D. Woźniak, Parallel processing and applied mathematics: 10th international conference, PPAM 2013 (Lecture Notes in Computer Science **8385** 448 (2014).
- [A23] M. Antkowiak, Ł. Kucharski, **R. Matysiak**, G. Kamieniarz, Computational Methods in Science and Technology **22(2)**, 87 (2016).

Ryszard Matysiak