



**УТВЕРЖДАЮ**

Проректор по научной работе

Дьяконов А.А.

2019 г.

## **ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ**

**на диссертацию Медведевой Дарьи Сергеевны**

**«Исследование влияния нелокальных взаимодействий на свойства систем с сильными электронными корреляциями», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 - «Физика конденсированного состояния».**

Диссертационная работа Медведевой Д.С. посвящена теоретическому исследованию роли нелокальных электронных взаимодействий в формировании зонной структуры и свойств материалов с сильными электронными корреляциями.

### **Актуальность темы.**

Развитие современных технологий привело к тому, что на сегодняшний день одними из важнейших проблем при разработке новых устройств является их размер и устойчивость к температурному разрушению при неснижаемом быстродействии. На сегодняшний день уже практически исчерпаны ресурсы использования кремниевой электроники, поскольку дальнейшее увеличение плотности будет приводить к проблемам, связанным с теплоотведением, а также неизбежно приведет к проявлению ряда нежелательных квантовых эффектов. Один из путей решения проблемы заключается в поиске новых материалов для построения не планарной, а так называемой «объемной» наноструктурной электроники на основе сеточных структур как альтернатива кремнию. Кроме того в современной электронике разрабатываются новые системы хранения и обработки информации (квантовый компьютеринг). В последние десятилетия активно развивается идея создать устройство памяти атомного масштаба. Для данных целей экспериментально создаются квантовые симуляторы, которые позволяют моделировать и изучать квантовые эффекты. В работе Медведевой Д.С. рассмотрены модельные системы, описывающие поведение ультрахолодных атомов в экспериментах с оптическими решетками, которые и являются такими

симуляторами. Проведен анализ электронной структуры поверхностных наносистем, состоящих из s- или p- атомов, осажденных на поверхности графена, в которых были обнаружены интересные эффекты из-за наличия электронных корреляций. Во всех указанных случаях возникает проблема теоретического прогнозирования поведения квантовой системы с узкими зонами и сильными электронными корреляциями, которые часто оказываются нелокальными. Таким образом, важной характеристикой работы является её направленность на решение перспективных задач современной наноэлектроники. В связи с этим актуальность исследования очевидна и не вызывает сомнений.

**Цель диссертационной работы** состояла в разработке нового алгоритма для пакета EDLib численного решения расширенной модели Хаббарда с использованием метода точной диагонализации в рамках теории динамического среднего поля (DMFT), а также его опробование на примере изучения реально синтезированных модифицированных графеновых пленок. Алгоритм реализует метод моделирования нелокальных взаимодействий в узкозонных системах путем включения в примесную модель DMFT дополнительного дискретного бозонного резервуара, описывающего волны зарядовой и спиновой плотности решеточной системы.

**Научная новизна** диссертации заключается в разработке метода моделирования нелокальных взаимодействий в системах с сильными корреляциями и использовании его для анализа электронной структуры и свойств модифицированных графеновых пленок  $C_2F$  и  $C_2H$ .

В данной диссертационной работе представлен ряд оригинальных результатов:

- Впервые было показано, что учет корреляционных эффектов является важным при рассмотрении поверхностных s,p-систем. Так, основное состояние соединений  $C_2F$  и  $C_2H$ , определяемое при использовании приближением локальной электронной плотности (LDA) как металлическое, при учете корреляций становится изоляторным.
- Впервые была построена фазовая диаграмма, характеризующая изменение границы фазового перехода металл–изолятор при учете зарядовых межузельных взаимодействий для поверхностных систем, описываемых расширенной моделью Хаббарда на треугольной решетке.

**Научная и практическая значимость** диссертационной работы Медведевой Д.С. состоит в разработке численной схемы учета нелокальности кулоновских и

обменных взаимодействий системах с сильными электронными корреляциями. На основе разработанной схемы реализован новый алгоритм для программного пакета EDLib, позволяющая расширить инструментарий, доступный для исследователей, использующих современные методы первопринципного моделирования сильно коррелированных материалов. Схема была применена для исследования электронных свойств реальных сильно коррелированных материалов: поверхностных наносистем  $C_2F$  и  $C_2H$ . Полученные в данной работе результаты могут служить как основа для создания новых методик моделирования, так и научной базой для разработки и проектирования новых материалов для создания транзисторов, переключателей, модулей памяти и прочих низкоуровневых устройств современной электроники и компьютерной техники.

### **Общая характеристика работы.**

Диссертационная работа, объемом 118 страниц машинописного текста, состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы из 232 наименований.

В **первой главе**, являющейся обзорной, рассматриваются основные теоретические подходы, используемые при моделировании сильно коррелированных систем. Описываются базовые модели: решеточная модель Хаббарда и эффективная примесная модель Андерсона, и их расширенные версии, - и теория динамического среднего поля, в контексте которой согласуются эти две модели. Также рассматриваются распространенные на сегодняшний день численные методы: точной диагонализации и квантовый метод Монте-Карло, и проводится их сравнительный анализ.

Во **второй главе** детально представлена разработанная численная схема решения уравнений расширенной теории динамического среднего поля. Для моделирования использован метод точной диагонализации примесного гамильтониана. Дано описание дискретного представления бозонного резервуара в эффективной примесной модели, моделирующего флуктуации зарядовой и спиновой плотностей. Для двух типов взаимодействий (обменного и нелокального кулоновского) были определены параметры минимальной и достаточной модели: наименьшее необходимое количество используемых энергетических уровней в бозонном и фермионном резервуарах, а также заселенность бозонных уровней. Для качественной проверки результатов проводилось сравнение с данными, получаемыми методом квантового Монте-Карло. Показано



хорошее согласие результатов, полученных этими методами в широком диапазоне значений параметров задачи.

**Третья глава** посвящена изучению влияния межузельных взаимодействий на электронные свойства модельной системы в расширенной модели Хаббарда на квадратной решетке. Была построена фазовая диаграмма, на которой рассматривается влияние на свойства системы локального и нелокального кулоновских взаимодействий. В ряде соединений учет нелокального зарядового взаимодействия является особенно важным, поскольку влияет на формирование фазы зарядового упорядочения. Также показано, что при определенных значениях параметров возможно сосуществование нескольких фаз: металлической фазы, диэлектрика Мотта и зарядового упорядочения. Кроме того производилась оценка кулоновских взаимодействий для разных классов реальных систем и было показано, что химическая модификация поверхности может кардинально изменять электронную систему материала. Вследствие этого необходимо использовать расширенные модели, учитывающие нелокальные эффекты в соединениях. Также рассматривалось экранирование локального кулоновского отталкивания при учете межузельного зарядового взаимодействия. В результате было показано, что характер экранирования, предсказываемый теорией динамического среднего поля, не согласуется с вариационной оценкой и имеет нелинейный характер, а также недооценивает экранирование в диэлектрической фазе. Данные результаты были получены для случая, когда учитывалась исключительно первая координационная сфера, то есть ближайшие соседи, учет большего количества координационных сфер приводит к дополнительному экранированию локального параметра. Также было продемонстрировано, что при учете межузельного обменного взаимодействия в расширенной теории динамического среднего поля система имеет тенденцию к более изоляторному поведению по сравнению с DMFT расчетом.

**В четвертой главе** представлены результаты решения уравнений расширенной теории динамического среднего поля в применении к поверхностным s,p-системам. Было выявлено, что модели, игнорирующие многоэлектронные эффекты, описывают такие соединения некорректно. Было показано, что при рассмотрении поверхностных структур на основе графена ( $C_2F$  и  $C_2H$ ) при помощи теории динамического среднего поля данные соединения определяются как изоляторные, в то время как LDA расчет предсказывает их металлическое поведение. Кроме того, учет нелокальных зарядовых взаимодействий в s,p-системах важен, поскольку приводит к сужению запрещенной зоны.

При ознакомлении с текстом диссертации возникли следующие **замечания**:

1. В тексте диссертации автор многократно говорит о фазовых переходах в системе, однако вопрос о возможном изменении параметра решетки и типа магнитного взаимодействия при этом не обсуждается.
2. Не рассматривается вопрос о том, не приведет ли учет межузельного обменного взаимодействия к изменению величины локального кулоновского отталкивания за счет экранирования.
3. Оценка точности предложенного метода дискретизации производится лишь один раз при рассмотрении фазовой диаграммы на рис. 3 автореферата, где результаты сопоставляются с данными вычислений методом квантового Монте-Карло. Желательно все же провести сравнение модели с данными прямого эксперимента.
4. Не описывается, каким именно образом производится выбор стартовых параметров гибридизационных функций.

Указанные замечания не повлияли на общую положительную оценку диссертационной работы, которая является законченным научно-исследовательским трудом, выполненным автором самостоятельно, с применением современных численных методов и теоретических подходов. Автореферат диссертации отражает ее основное содержание, актуальность, новизну и другие ключевые моменты.

Результаты диссертации могут быть использованы при разработке новых методов моделирования электронных и магнитных свойств сильно коррелированных систем, а также применяться при проектировании материалов и устройств, применяемых в современной нанoeлектронике.

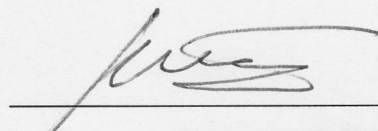
### **Заключение.**

Диссертационная работа Медведевой Д.С. «Исследование влияния нелокальных взаимодействий на свойства систем с сильными электронными корреляциями» является законченным научным исследованием и соответствует критериям п. II п.п. 9-14 «Положения о порядке присуждения ученых степеней» ВАК РФ, а ее автор, Медведева Дарья Сергеевна, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния».

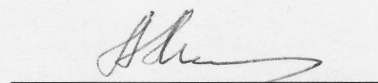
Отзыв подготовил д.ф.-м.н., с.н.с., профессор кафедры физики наноразмерных систем Мирзоев А.А.

Диссертация и отзыв обсуждены на совместном научном семинаре сотрудников кафедры физики наноразмерных систем Южно-Уральского государственного университета (НИУ) «19» сентября 2019 года (протокол № 1). На заседании присутствовало 12 человек. Результаты голосования по проекту отзыва: «за» – 12, «против» – нет, «воздержалось» – нет.

Бескачко Валерий Петрович  
Заведующий кафедрой физики  
наноразмерных систем ЮУрГУ  
д.ф.-м.н., доцент,  
тел +7 (351) 267-92-28  
e-mail: beskachkovp@susu.ru

  
/Бескачко В.П./

Александр Аминулаевич Мирзоев  
профессор кафедры физики  
наноразмерных систем ЮУрГУ  
д.ф.-м.н., с.н.с.  
тел +7 (351) 265-47-13  
e-mail: mirzoevaa@susu.ru

  
/Мирзоев А.А./

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)»  
адрес: 454080, Россия, г. Челябинск, пр. Ленина, 76.  
телефон: +7 (351) 267-99-00  
e-mail: info@susu.ru, сайт: www.susu.ru