

Отзыв

на автореферат диссертационной работы Медведевой Дарьи Сергеевны
*«Исследование влияния нелокальных взаимодействий на свойства систем с сильными
электронными корреляциями»*,

представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук
по специальности

01.04.07 – «Физика конденсированного состояния».

Диссертация Медведевой Д.С. может быть отнесена к классу работ, посвященных развитию методов теоретического описания реальных материалов. В данном исследовании рассматривается влияние учета кулоновских и магнитных взаимодействий между узлами кристаллической решетки в моделях, описывающих сильно коррелированные системы. Данные исследования необходимы для более полного понимания физики сильно-коррелированных систем, в которых пространственные неоднородности, связанные, например, с зарядовым упорядочением, достаточно велики. Таким образом, актуальность данной диссертационной работы не вызывает сомнений.

Для проведения модельных расчетов автором диссертации была разработана численная схема решения уравнений расширенной модели Хаббарда в рамках расширенной теории динамического среднего поля. В качестве основного численного метода был выбран метод точной диагонализации, а для его использования предложен способ дискретного описания бозонного резервуара при решении эффективной примесной задачи.

В результате исследования представлена минимальная модель, достаточная для описания различных сильно коррелированных систем при использовании разработанной схемы; построена фазовая диаграмма перехода металл – изолятор в расширенной модели Хаббарда для треугольной решетки при учете зарядовых взаимодействий; рассмотрено экранирование локальных параметров решеточной модели в случае расширенной теории динамического среднего поля; рассмотрены графеновые системы с адсорбированными атомами на поверхности и установлено, что модели, учитывающие корреляции между электронами, характеризуют данные соединения как изоляторы, что согласуется с экспериментальными данными.

Основные результаты диссертационной работы в автореферате изложены чётко и ёмко. Теоретически и практически значимыми признаются все представленные исследования. Достоверность их результатов обеспечивается широкой известностью применяемых методов и хорошим согласием с соответствующими экспериментальными данными.

Ниже приведены вопросы и замечания, возникшие после прочтения автореферата:

1. Из формул (3) и (4) автореферата следует, что и для фермионного, и для бозонного термостатов использовалась параметризация с так называемой геометрией “звезды”. Известно, что в случае фермионных систем такая геометрия может приводить к переоценке устойчивости изоляторного состояния. В связи с этим возникает вопрос: как изменятся результаты и выводы диссертационной работы, если использовать “цепочечную” геометрию для параметризации термостата?

2. Для определения минимального количества орбиталей в бозонном термостате и минимального значения заселенностей использовалось сравнение с квантовым методом Монте-Карло. Хотелось бы узнать, как время выполнения программы зависит от числа орбиталей в термостате (как бозонном, так и фермионном)? Также хотелось бы сравнить численную эффективность метода точной диагонализации с квантовым методом Монте-Карло?
3. Замечание, связанное со стилем написания. К сожалению, автор работы не всегда делает описание обозначений, используемых в формулах (например, уравнения (1) и (2) в автореферате). Для не специалистов в данной области чтение может оказаться затруднительным.

В целом, судя по представленному автореферату, работа является самостоятельным и оригинальным исследованием, содержащим элементы научной новизны. Несмотря на замечания, о работе складывается положительное впечатление, как о законченном и полноценном научном труде. Результаты проведенных исследований были представлены на нескольких всероссийских и международных конференциях и опубликованы в виде статей в рецензируемых научных журналах, определенных ВАК. Диссертационная работа отвечает критериям Положения о присуждении ученых степеней, предъявляемым к кандидатским диссертациям. Она также соответствует специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния» и отрасли науки «физико-математические науки». Диссертантка Медведева Дарья Сергеевна заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния».

Кандидат физико-математических наук,
старший научный сотрудник лаборатории
оптики металлов отдела электронных свойств
Федерального государственного бюджетного
учреждения науки Института физики металлов
имени М.Н. Михеева Уральского отделения
Российской академии наук



Потеряев Александр Иванович

620137, г. Екатеринбург, ул. Софьи Ковалевской, д. 18,
ИФМ УрО РАН
тел.: +7 (343) 378 38 14
факс.: +7 (343) 374 52 44
e-mail: poteryaev@imp.uran.ru

