

Отзыв

на автореферат диссертации 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. посвящена разработке численных методов решения модельных гамильтонианов, для систем, характеризующихся сильными нелокальными кулоновскими и магнитными взаимодействиями. Физические реализации таких моделей были недавно обнаружены в новых классах сильнокоррелированных систем на основе элементов с s и p электронами. Кроме того, подобные модельные системы со значительными нелокальными взаимодействиями могут быть искусственно заданы при помощи квантовых симуляторов в экспериментах с холодными атомами на оптических решетках. Все это определяет актуальность выбранной темы исследования.

По структуре диссертационную работу можно разделить на две части - методическую и расчетную. В методической части соискателем предложен новый подход для решения обобщенной модели Хаббарда в рамках расширенной теории динамического среднего поля. Новизна заключается в предлагаемом способе дискретного описания бозонного резервуара для решения эффективной примесной задачи при помощи метода точной диагонализации.

В расчетной части диссертации построена фазовая диаграмма перехода металл – изолятор в расширенной модели Хаббарда для треугольной решетки при учете зарядовых взаимодействий. Автором рассмотрено экранирование локальных параметров решеточной модели в случае расширенной теории динамического среднего поля. В этой части исследования также представлен ряд важных результатов, проведены расчеты для графеновых систем с адсорбированными атомами на поверхности, выполнена классификация современных материалов по силе нелокальных кулоновских взаимодействий.

Диссертация выполнена на высоком научном уровне с использованием современных методов и подходов теории конденсированного состояния. Результаты работы были неоднократно доложены автором на научных конференциях и достаточно полно представлены в публикациях в ведущих международных журналах.

В качестве замечаний необходимо отметить следующее.

1. Автор полностью концентрируется на однозонной модели и не обсуждает решение многозонных гамильтонианов, что необходимо для моделирования реальных кристаллов с элементами переходных металлов.

2. Согласно автореферату, автором разработан эффективный программный комплекс для моделирования электронной и магнитной структуры сильнокоррелированных систем. Однако, отсутствует информация о том, доступен ли программный комплекс сторонним пользователям.

Указанные замечания не снижают общего положительного впечатления от диссертационной работы, выполненной на высоком научном уровне.

Диссертация Д.С. Медведевой по актуальности, объему работы и новизне полученных результатов удовлетворяет всем требованиям ВАК РФ, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор, Медведева Дарья Сергеевна, заслуживает присуждения степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 - «физика конденсированного состояния».

Главный научный сотрудник
лаборатории квантовой химии и
спектроскопии
Института химии твердого тела
ФГБУН Уральского Отделения
Российской академии наук

доктор физ.-мат. наук



Медведева Надежда
Ивановна

Адрес организации: 620990, Екатеринбург, ГСП, ул. Первомайская, 91,
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт
химии твердого тела УрО РАН, www.ihim.uran.ru, E-mail:
medvedeva@ihim.uran.ru, тел. +7 (343) 362-3554.

Подпись Медведевой Н.И. заверяю
Ученый секретарь ФГБУН
Институт химии твердого тела УрО РАН,
Доктор химических наук



Денисова Т.А.

Дата:

23.09.2019