

## 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 современной теоретической физики, предназначенных для изучения квантовых систем, характеризующихся сильными электрон-электронными корреляциями. В работе представлен алгоритм для решения уравнения расширенной теории динамического поля, основанный на методе точной диагонализации. Показано, что данный алгоритм с хорошей точностью воспроизводит результаты, полученные на основе квантового метода Монте-Карло. При этом он обладает рядом преимуществ, таких как существенно меньшие затраты вычислительных ресурсов и возможность получения спектральных функции на действительной оси (что значительно упрощает сравнение с экспериментом).

В начале работы разработанный метод применен к модельным системам. В частности, получена фазовая диаграмма для модели Хаббарда на квадратной решетке с учетом как одноузельных, так и межузельных кулоновских взаимодействий. Основные границы фаз определены с хорошей точностью и согласуются с результатами более ранних работ. Автор приходит к выводу, что ошибки, связанные с дискретизацией (при оптимальном выборе числа уровней резервуаров) малы, по сравнению с ошибкой, вызванной использованием приближения динамического среднего поля, на котором основывается большинство современных методов. Далее автор рассматривает несколько важных вопросов, связанных с влиянием межузельных взаимодействий на электронные свойства квантовых систем. В частности, детально рассмотрено, как данные взаимодействия влияют на экранировку локального кулоновского отталкивания и на собственно-энергетическую часть. Было показано, что учет большего числа координационных сфер подавляет локальные электронные корреляции. Эффект межузельных спиновых взаимодействий на спектральные функции также обсужден в работе.

В дальнейшем, автор применяет разработанную численную схему для изучения свойств реальных материалов. В качестве объектов исследования были выбраны поверхностные наносистемы на графеновой основе, такие как  $C_2F$  и  $C_2H$ . Показано, что учет локальных корреляций кардинально меняет спектр возбуждения системы по сравнению с расчетом, основанным на одноэлектронном подходе. В результате, предсказано появление запрещенной зоны в области низких температур, а дополнительный учет нелокальных взаимодействий приводит к её сужению.

К диссертанту имеются следующие вопросы:

- 1) При обсуждении рассчитанной фазовой диаграммы для квадратной решетки не совсем ясно, как определены границы переходов в состояние с зарядовым упорядочением, которое недостижимо в рамках данной расчетной схемы, которая не допускает понижения пространственной симметрии.

- 2) В работе определены минимально допустимые уровни дискретизации фермионных и бозонных резервуаров. Насколько общий характер имеют данные выводы ? Ожидается ли зависимость полученных значений от числа заполнения уровня примеси ?
- 3) Утверждается, что разработанный алгоритм позволяет описывать квантовые системы в режимах, где использование квантового метода Монте-Карло затруднено. Из работы не совсем ясно, о каких конкретно фазах идет речь.

Данные замечания не сказываются на общей положительной оценке представленного автореферата.

Стоит отметить, что актуальность данной работы сложно переоценить. Как отмечает сам автор, полученные результаты и разработанная библиотека численных решений имеют важность для описания поверхностных магнитных систем и ультрахолодных атомов. По моему мнению, данная работа несет в себе еще больший потенциал. Она может послужить основой для более детального описания квантовых систем с учетом электрон-фононного и электрон-магнонного взаимодействия, которые являются важными факторами для описания эффектов конечных температур в реальных материалах.

Работа выполнена на высоком уровне и основана на ряде публикации, которые удовлетворяют требованиям ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациям. Считаю, что автор работы, Медведева Дарья Сергеевна, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 — физика конденсированного состояния.

PhD,

Исследователь кафедры физики и астрономии; теории материалов,  
университет Уппсалы (Швеция),

адрес: Ångströmlaboratoriet, Lägerhyddsvägen 1, Uppsala, Sweden

почтовый адрес: Uppsala University, Box 256 751 05 Uppsala, Sweden

тел.: +46 (0) 18 471 58 56

факс.: +46 (0) 18 471 35 24

e-mail: Yaroslav.Kvashnin@physics.uu.se



Ярослав Олегович Квашнин

Дата: 06 сентября 2013



UPPSALA  
UNIVERSITET

Institutionen för fysik och astronomi  
Box 516, 751 20 UPPSALA  
Tel. 018-471 00 00  
Fax 018-471 59 99