

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ЭКСПЕРТНОЙ КОМИССИИ

по защите диссертации **Медведевой Дарьи Сергеевны** на тему «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» и состоявшейся в НИТУ «МИСиС» 21 октября 2019 года.

Диссертация принята к защите Диссертационным советом НИТУ «МИСиС» 27.05.2019, протокол №09.

Диссертация выполнена на кафедре теоретической физики и прикладной математики Физико-технологического института федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина» (УрФУ).

Научный руководитель – д.ф.-м н., профессор кафедры теоретической физики и прикладной математики Физико-технологического института УрФУ Мазуренко Владимир Владимирович.

Экспертная комиссия утверждена Диссертационным советом НИТУ «МИСиС» (протокол № 09 от 27.05.2019) в составе:

1. Мухин Сергей Иванович, д.ф.-м.н., заведующий кафедрой теоретической физики и квантовых технологий НИТУ «МИСиС», профессор - председатель комиссии;
2. Штремель Мстислав Андреевич, д.ф.-м.н., ведущий эксперт НИЛ «Гибридные наноструктурные материалы» НИТУ «МИСиС»;
3. Григорьев Павел Дмитриевич, д.ф.-м.н., с.н.с. федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН;
4. Леонов Иван Васильевич, д.ф.-м.н., научный сотрудник лаборатории оптики металлов федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН;
5. Рубцов Алексей Николаевич, д.ф.-м.н., профессор Физического факультета федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова».

В качестве ведущей организации утверждено федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)» ФГАОУ ВО «ЮУрГУ (НИУ)».

Экспертная комиссия отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

– разработан численный метод решения уравнений расширенной теории динамического среднего поля, что впервые позволило исследовать реальные материалы с s- и р-электронами, которые характеризуются значительными нелокальными кулоновскими взаимодействиями;

– путем анализа спектральных функций показано, что для описания зарядовых межузельных взаимодействий в двумерных физических системах необходимо не менее двух-, а в случае обменных взаимодействий достаточно трех эффективных уровней в бозонном резервуаре эффективной примесной модели расширенной теории динамического среднего поля;

– обнаружено, что при учете нелокального зарядового взаимодействия в двумерных физических системах экранирование локального кулоновского отталкивания нелинейно, и в режиме изолятора мало относительно величины самого параметра;

– на основе найденного решения реалистичных моделей описывающих материалы C_2F и C_2H показано, что при учете электронных корреляций в рамках теории динамического среднего поля данные соединения являются изоляторами при низких температурах.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

1. в рамках разработанного численного метода решения уравнений расширенной теории динамического среднего поля (EDMFT) впервые применен метод дискретного описания бозонного резервуара при решении эффективной примесной модели, что позволило создать расчетную схему, обладающую рядом преимуществ по сравнению с существующими. Во-первых, обеспечена возможность проводить расчеты в режиме сильных корреляций вдали от границы фазового перехода металл-изолятор. Во-вторых, с помощью данного подхода стало возможным получать спектральные функции на вещественных частотах, что позволяет проводить сравнение расчетных данных с экспериментальными без использования аналитического продолжения;

2. определен минимально допустимый уровень дискретизации фермионного и бозонного резервуаров, позволяющий производить теоретические исследования методом точной диагонализации, при которых с хорошей точностью воспроизводятся результаты, полученные квантовым методом Монте-Карло;

3. в результате проделанной работы предложен характер экранирования кулоновского отталкивания на узле в режиме изолятора, что не было возможным ранее из-за особенностей численных методов, основанных на расчете непрерывных энергетических спектров;

4. впервые показано, что учет корреляционных эффектов является важным и не пренебрежимо малым при рассмотрении поверхностных s,p - систем. Установлено, что основное состояние соединений C_2F и C_2H , определяемое при помощи приближения локальной электронной плотности как металлическое, при учете локальных корреляций при низких температурах является диэлектрическим;

5. впервые построена фазовая диаграмма, характеризующая изменение границы фазового перехода металл - изолятор при учете зарядовых межузельных взаимодействий для систем, которые описываются расширенной моделью Хаббарда на треугольной решетке.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:

- результаты, представленные в данной диссертации, могут быть использованы при моделировании экспериментально синтезируемых систем: оксидов переходных металлов и поверхностных наносистем, характеризующихся сильными электронными корреляциями;

- численная схема, описанная в данной работе, реализована в виде библиотеки, доступной для использования;

- расширенная теория динамического среднего поля станет отправной точкой для дальнейшего построения теорий, которые включают в себя пространственные корреляции, например, таких как метод дуальных бозонов.

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

Публикации по диссертации сделаны в международном научном журнале Physical Review B, доложены на 10-ти международных и национальных профильных научных

конференциях (из них 4 за рубежом и 6 в РФ). Полученные методические и расчетные результаты характеризуются внутренним согласием, непротиворечивостью современным представлениям физики и соответствием результатам предыдущих работ, а также опубликованным ранее экспериментальным данным.

Личный вклад соискателя состоит в:

реализации цикла самосогласования, выполнении всех модельных расчетов, планировании теоретических исследований.

Анализ и обсуждение большинства результатов и подготовка к публикации выполнены соискателем при участии научного руководителя Мазуренко В.В., а также Исакова С.Н. и Лихтенштейна А.И.

Соискатель представил 9 опубликованных работ по теме диссертации, из них 2 - в рецензируемых научных изданиях из перечня, утвержденного Минобрнауки России, и индексируемых в наукометрических базах данных Web of Science/Scopus.

Пункт 2.6 Положения о порядке присуждения степени кандидата наук в НИТУ «МИСиС» соискателем учёной степени не нарушен.

Диссертация Медведевой Дарьи Сергеевны соответствует критериям п. 2 Положения о порядке присуждения ученых степеней в НИТУ «МИСиС», так как в ней на основании выполненных автором исследований разработан численный метод решения уравнений расширенной теории динамического среднего поля (EDMFT), впервые применен метод дискретного описания бозонного резервуара при решении эффективной примесной модели, что позволило создать расчетную схему, обладающую рядом преимуществ по сравнению с существующими.

Экспертная комиссия приняла решение о возможности присуждения Медведевой Дарье Сергеевне ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 - «Физика конденсированного состояния».

При проведении тайного голосования экспертная комиссия в количестве 4 человек, участвовавших в заседании, из 5 человек, входящих в состав комиссии, проголосовала: за 4, против нет, недействительных бюллетеней нет.

Председатель Экспертной комиссии

 С.И. Мухин