

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Кашина Ильи Владимировича  
“Исследование электронных и магнитных свойств поверхностных наносистем и оксидов переходных металлов с сильными электронными корреляциями”,  
представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности  
01.04.07 – Физика конденсированного состояния

Диссертация Кашина И.В. посвящена развитию и совершенствованию численных методов современной теоретической физики, предназначенных для изучения квантовых систем с сильными электрон-электронными корреляциями. В работе представлены эффективные алгоритмы для нахождения собственных значений матрицы Гамильтониана примесной модели Андерсона, в рамках которой динамические локальные корреляции электронов могут быть учтены максимально строго. Автору удалось значительно уменьшить требуемый объем оперативной памяти компьютера для проведения расчета электронных свойств реальных материалов. Этого удалось добиться за счет эффективной замены задачи о хранении матрицы в ходе её итеративной численной диагонализации задачей об оптимизированной генерации её необходимых элементов «на лету». Примечательно, что применение данной расчетной схемы не влечет за собой существенных потерь в скорости вычисления. Это позволяет рассматривать более ёмкие физические модели без необходимости увеличивать вычислительные мощности.

В качестве объектов исследования были выбраны наносистемы медно-азотной поверхности с адсорбентами в виде отдельных атомов переходных металлов (Fe, Co, Mn) и димера атомов Mn, а также диоксиды хрома ( $\text{CrO}_2$ ) и ванадия ( $\text{VO}_2$ ). Изучение свойств подобных материалов представляет большой интерес как для фундаментальной науки, так и для современных технологии в области спинтроники, что обеспечивает актуальность научных проблем, рассмотренных в рамках данной работы.

В процессе прочтения работы, к диссертанту возникли следующие вопросы:

- 1) В рамках примесной модели Андерсона внешнее магнитное поле прикладывалось только на эффективных орбиталях примеси, или также на энергетических уровнях эффективной среды?
- 2) При построении модели  $t_{2g}$  зоны атомов Cr(V) в соединениях  $\text{CrO}_2(\text{VO}_2)$  учитывалась ли поправка на двойной учет (в англоязычных работах – *double counting problem*)? Если учитывалась, то каким образом?

Результаты исследований были представлены на девяти научных конференциях и опубликованы в ведущих научных журналах в виде трех статей.

Диссертационная работа удовлетворяет требованиям Положения о присуждении ученых степеней (пункт 9), а также полностью соответствует специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния, отрасли науки “физико-математические науки”. Её автор, Кашин Илья Владимирович, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Ph.D.,

Исследователь в группе теории материалов, кафедры физики и астрономии,  
Университет Уппсалы (Швеция),

адрес: Ångströmlaboratoriet, Lägerhyddsvägen 1, Uppsala, Sweden

почтовый адрес: Uppsala University, Box 516 751 20 Uppsala, Sweden

тел.: +46 (0) 18 471 58 72

факс.: +46 (0) 18 471 35 24

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

Ярослав Олегович Квашнин

Дата: 15 декабря 2016



Department of Physics and Astronomy  
iALA