

**ОТЗЫВ официального оппонента**  
**на диссертацию на соискание ученой степени**  
**кандидата физико-математических наук Мостового Сергея**  
**Дмитриевича**  
**на тему: «Исследование фазовых явлений в решеточных**  
**моделях физики конденсированного состояния**  
**вещества и теории поля»**  
**по специальности 1.3.3. – «теоретическая физика»**

Диссертация посвящена изучению свойств различных фаз двух решеточных моделей в режиме сильной связи. В качестве объектов исследования выбраны решеточная компактная электродинамика и расширенная модель Хаббарда. Интерес к компактной  $U(1)$  калибровочной модели вызван возможностью возникновения в ней топологических дефектов, взаимодействие которых характеризуется линейным потенциалом. Это открывает путь к изучению КХД, потому что компактная  $U(1)$  модель может быть получена при помощи абелевой проекции  $SU(3)$ , что является частным случаем фиксации калибровки. В этой связи важно, что все нетривиальные топологические дефекты содержатся уже в абелевой проекции, тогда как неабелева часть возможно не привносит новые их типы. Поэтому рассмотрение компактной  $U(1)$  калибровочной модели имеет важное практическое значение, поскольку содержит такие принципиальные свойства более сложных моделей, как ВКТ-фазовый переход (конфайнмент-деконфайнмент).

Что касается расширенной модели Хаббарда, она является стандартным способом описания электронной подсистемы двумерных материалов с гексагональной атомной решеткой. Благодаря общему интересу к приложениям графена и активному развитию методов моделирования фермионных систем, в настоящее время публикуется огромное количество работ по компьютерному вычислению спиновых корреляторов,

коэффициентов теплопроводности и электропроводности в рамках исследованной диссертантом модели.

В представленной диссертации подробно исследованы корреляционные свойства топологических дефектов в широком диапазоне параметров  $U(1)$  модели и выделены отличающиеся друг от друга состояния модели внутри фазы конфайнмента. Для этой цели использован коррелятор токов, порождаемых топологическими дефектами. На ряде примеров показано, что эта величина предоставляет богатую информацию о дальнем порядке монополей. Кроме того, в одной из опубликованных автором работ предлагается нестандартный способ визуализации этих токов, открывающий возможность установить однозначное соответствие между совокупностью свойств «токовых объектов» (авторское название) и фазами модели. На этом основании делается вывод относительно существования нескольких новых фаз (называемых диссертантом «подфазами») внутри фазы конфайнмента. При исследовании расширенной модели Хаббарда вычисляются средние компоненты энергии и теплоемкость в определенном диапазоне температур, что также делается в рамках данной модели впервые. Кроме того, диссертантом реализовано инновационное расширение решеточной аппроксимации данной модели в рамках метода Монте-Карло, а также доказан ряд конкретных преимуществ при вычислении новым способом. В качестве примеров физических величин, вычисление которых улучшается, приводятся средняя энергия и теплоемкость.

Диссертация состоит из введения, двенадцати глав основного текста, заключения, приложения и списка литературы с 73 наименованиями.

Глава 1.1 содержит определение исследуемой модели – компактной  $U(1)$  калибровочной решеточной теории поля. Даются как общеизвестные понятия, так и соглашения, использованные автором. Также кратко указывается метод компьютерных вычислений.

В главе 1.2 детально рассматриваются фазовые переходы в модели и параметры порядка, использованные для их описания. Сначала обсуждается положение уже известного фазового перехода конфайнмент-деконфайнмент. Также демонстрируется смещение точки фазового перехода при изменении интенсивности монопольного слагаемого. Затем вводится определение коррелятора магнитных токов и указывается интерпретация его колебательного поведения в зависимости от расстояния между токами. Наконец, приводится фазовая диаграмма, выполненная в терминах коррелятора на расстоянии 1, для некоторого диапазона изменения двух параметров модели. Диссертант обосновывает, почему различные области значений используемого параметра порядка соответствуют разным состояниям дальнего порядка топологических дефектов в модели. Здесь же приводятся доказательства существования нескольких «подфаз» внутри фазы конфайнмента.

Глава 1.3 содержит описание и результаты, получаемые при помощи нового подхода описания магнитных токов. Диссертант приводит конкретное описание алгоритма компьютерной программы, создающей «токовые объекты» – нити и деревья. Вводится ряд свойств, которые сопоставляются каждому построенному объекту с целью подсчета частоты встречаемости каждого значения рассматриваемых величин. Приводятся подробные гистограммы упомянутых свойств. Дается два примера их анализа.

Вторая часть диссертации касается технической стороны вопроса моделирования методами Монте-Карло и разделена на 3 главы. Глава 2.1 содержит перечисление областей применения метода и указывает на первую документально зафиксированную научную работу в этой области.

Глава 2.2 описывает суть метода Монте-Карло и достаточно подробно рассказывает об его математических основаниях. В частности, перечисляются требования к процессу Маркова смены состояний модели, необходимые для реализации целевого распределения. Приводится

формулировка методов Метрополиса и гиббсовского отбора для реализации шага процесса Маркова. Далее идет описание разновидностей методов Монте-Карло с кратким комментарием относительно идеи метода. Ближе к концу главы подробно приводятся формулы гибридного метода Монте-Карло, который был использован диссертантом в качестве основного при исследовании расширенной модели Хаббарда. Приводится аргументация эффективности данного метода для моделей с большим количеством степеней свободы. Глава завершается рассказом о моделировании квантовых спиновых моделей.

Глава 2.3 раскрывает алгоритмы технического анализа статистики результатов вычислений, полученных автором для каждой величины в процессе работы. Приводятся необходимые сведения из автокорреляционного анализа, показывается необходимость учета автокорреляций при определении дисперсии значений физических величин. Выведены конкретные формулы, пригодные для практического использования. Описываются пути снижения автокорреляционного времени, проверенные диссертантом для использованных величин. Следует отметить, что изложение ведется в терминах ландшафта конфигурационного пространства модели, что достаточно наглядно. Во второй половине этой же главы диссертант описывает личный вклад: реализованные компьютерные программы, использованные для анализа рядов вычислений моделирования Монте-Карло. Пример работы программы приводится в виде изображения выводимой программой информации. Текст диссертации содержит подробное описание известных алгоритмов и один график примера работы.

Глава 3.1 содержит квантово-механический аргумент в пользу tight-binding-модели графена и вводит основные величины, используемые при работе с расширенной моделью Хаббарда.

В главе 3.2 подробно (со всеми промежуточными вычислениями) аналитически выводятся рабочие формулы метода Монте-Карло на решетке с

дискретизацией в евклидовом времени. Вводятся все обозначения величин, использованных диссертантом в рамках работы. Демонстрируется введение узловых и линковых полей Хаббарда на решетке. Последние предлагаются Мостовым С.Д. впервые и входят в число положений, выдвигаемых на защиту. Завершается глава выводом финальных соотношений, подлежащих занесению в компьютерную программу.

Глава 3.3 посвящена реализации алгоритма молекулярной динамики для расширенной модели Хаббарда и также содержит аналитические выводы формул для шага процесса Маркова. При этом диссертант отдельно рассматривает два способа моделирования: метод псевдофермионных полей и точных фермионных сил. В каждом случае выведены конкретные формулы для реализации в компьютерной программе.

Глава 3.4 содержит результаты для энергий и параметров порядка, полученные лично диссертантом при использовании одних только узловых полей. Существенное внимание уделено проверке корректности работы компьютерной программы, что характеризует ответственный подход к исследованию. Описывается поведение параметров порядка в двух разных фазах. Во второй половине главы подробно рассказано о результатах вычисления теплоемкости как функции температуры. Производится сравнение двух способов определения этой величины. Рассказано о деталях, игнорирование которых мешает получению верного результата. Дается указание на корректность полученного результата в области температур от 0,5 эВ до 1 эВ: оценка для энергии Ферми, которая может быть сравнена с работой выхода электрона из графена с подложкой.

В главе 3.5 перечисляются конкретные практические улучшения, достигаемые при использовании как узловых, так и линковых полей. Это выдвигается диссертантом как новый результат. В числе аргументов в пользу метода пяти полей в текст диссертации включены графики распределения ряда наблюдаемых, которые проанализированы при помощи некоторого

количественного показателя. Некоторый количественный показатель свидетельствует в пользу улучшения поведения хвостов распределений. Демонстрируется результат вычисления теплоемкости.

Глава 3.6 содержит постановку задачи и описание результатов, полученные новым методом для случая нарушения подрешеточной симметрии.

В заключении перечислены основные результаты, полученные диссертантом в работе. Приложение содержит аналитический вид среднего квадрата гамильтониана, который требуется при вычислении теплоемкости при одном из двух способов.

Положения, выносимые на защиту, сформулированы во Введении.

Диссертация составлена из двух разных, но связанных методикой работы исследований. Каждая из частей логически завершена и изложена последовательно. Понятны как постановка задачи в каждом разделе, так и основные полученные результаты. Новые методы (токовые объекты и линковые поля), предлагаемые диссертантом, описаны полностью, и приведена аргументация преимуществ от их применения.

К содержанию диссертации есть незначительные замечания. Хотелось бы отметить некоторую невнимательность автора к наименованию используемых обозначений. Например, в тексте никак не названы параметры  $U(1)$  модели, везде при упоминании используются греческие буквы. Также в определении магнитного тока диссертант не использовал множитель  $1/2$ , в результате соответствующие величины приобретают значения 0, 2 и 4, что выглядит несколько неестественно. В главе 1.3 широко освещены результаты, полученные при помощи двух типов токовых объектов – нитей и деревьев, но не рассматриваются какие-либо другие возможные построения или не упоминается об ограничениях при их конструировании. Описание метода Монте-Карло, приведенное в главе 2.2, логически уместно

переместить в конец предшествующей главы. В тексте главы 2.3 лишь мельком упоминается критерий выбора величины бина при практическом анализе данных, но хотелось бы знать, как именно диссертант реализовал эту процедуру в своих компьютерных программах. Материал главы 3.1 написан весьма кратко, впрочем, это не мешает общему пониманию, и расширение описания не требуется в контексте проведенного численными методами исследования. Там же сказано, что в гамильтониане взаимодействия учитываются только первые два по расстоянию между электронами вклада, но не сказано, как сильно влияет на результаты вычислений отбрасывание слагаемых, относящихся к большим расстояниям.

Вместе с тем, указанные замечания не умаляют значимости диссертационного исследования. Диссертация отвечает требованиям, установленным Московским государственным университетом имени М.В. Ломоносова к работам подобного рода. Содержание диссертации соответствует паспорту специальности 1.3.3. – «теоретическая физика» (по физико-математическим наукам), а также критериям, определенным пп. 2.1-2.5 Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова, а также оформлена, согласно приложениям № 5, 6 Положения о диссертационном совете Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова.

Таким образом, соискатель Мостовой Сергей Дмитриевич заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.3. – «теоретическая физика».

Официальный оппонент:

Доктор физико-математических наук, доцент,  
начальник сектора физики адронной материи  
лаборатории теоретической физики  
ММО «Объединённый институт ядерных исследований»

Брагута Виктор Валерьевич

Контактные данные:

тел.: 7(909)684-95-08, e-mail: [victor.v.braguta@gmail.com](mailto:victor.v.braguta@gmail.com)

Специальность, по которой официальным оппонентом  
защищена диссертация:

01.04.02 – Теоретическая физика

Адрес места работы:

141980, Россия, Московская обл., г. Дубна, ул. Жолио-Кюри, д. 6  
ОИЯИ, ЛТФ  
Тел.: 7(909)684-95-08; e-mail: [victor.v.braguta@gmail.com](mailto:victor.v.braguta@gmail.com)

Подпись сотрудника ЛТФ ОИЯИ

В.В. Брагута удостоверяю:  
ученый секретарь ЛТФ ОИЯИ,  
к.ф.м.н.

А.В. Андреев