

**ВІДГУК ОФІЦІЙНОГО ОПОНЕНТА**  
на дисертацію **Ракова Михайла Володимировича**  
“**ЧИСЕЛЬНЕ МОДЕЛЮВАННЯ КВАНТОВИХ БАГАТОЧАСТИНКОВИХ СИСТЕМ**  
**З ВИКОРИСТАННЯМ ТЕНЗОРНИХ МЕРЕЖ**”,  
яку подано на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук  
за спеціальністю 01.04.02 – теоретична фізика

Аналіз суттєво квантових явищ в багаточастинкових системах є одним з найважливіших напрямів теоретичної фізики. Розвиток сучасних технологій дозволяє отримувати нові квантові стани речовини (бозе-ейнштейнівські конденсати) і досліджувати квантові ефекти в низьковимірних матеріалах і наноструктурах. В цій області фізики можуть проявлятися і найбільш нетривіальні властивості квантової механіки, такі як квантова заплутаність (*entanglement*) складних систем. Більше того, експериментальна реалізація і дослідження заплутаності в системах багатьох тіл відкриває шлях до створення квантового комп'ютера. У зв'язку з цим дослідження квантових явищ в багаточастинкових системах є не тільки принципово важливим для розвитку фізики, а й актуальним для практики.

Дисертаційна робота М. В. Ракова виконана саме в цих актуальних і важливих напрямках і присвячена аналізу властивостей одновимірних квантових систем за допомогою вдосконалених в роботі сучасних чисельних методів. Досліджуються дві одновимірні магнітні системи частинок, поведінка яких може бути описана відповідно XXZ моделлю частинок зі спіном  $\frac{1}{2}$  та білінійно-біквратною Гайзенберговою (ББГ) моделлю частинок зі спіном 1 за наявності стандартної однойонної анізотропії. Зазначу, що для цих моделей можна реалізувати досить нетривіальні фази систем і реалізувати квантові фазові переходи, для яких може проявлятися квантова заплутаність.

В дисертації М. В. Ракова чітко сформульована мета, постановка та розв'язки важливих задач теоретичної фізики.

Чисельно отримано область значень контрольних параметрів ББГ моделі зі спіном 1, при яких система перебуває в димерній щільній фазі, за умови відсутності або анізотропії, або білінійного члена взаємодії. Передбачено існування димерної нещільної області в цій моделі, що можливо перевірити експериментально.

Показано, що одно- і двочастинкові міри заплутаності, розраховані для власних станів XXZ моделі, не є ефективними величинами для опису властивостей системи в феромагнітній фазі. Натомість структуру заплутаності відображає багатокубітова заплутаність, яка відповідає досить нетривіальним спін-спіновим кореляціям в системі.

Варіаційний метод РГМГ було сформульовано на базі тензорної мережі матрично-добутоквих станів з періодичними крайовими умовами з введеними в неї неперервними симетріями  $U(1)$  та  $SU(2)$ . Продемонстровано, що відповідний варіаційний метод є стабільним і забезпечує високу точність розрахунків.

Дисертація складається з вступу та трьох розділів, список літератури містить 157 найменувань. У вступі висвітлено сучасний стан напрямку дослідження та наукову літературу з тематики дисертації, а також грамотно обгрунтовано вибір квантових систем для дослідження та методу розрахунку їхніх характеристик.

Перший розділ, присвячений огляду базового формалізму використовуваного чисельного методу для систем з періодичними крайовими умовами, написано прозоро і на високому професійному рівні. Попри громіздкість необхідних викладок, матеріал є лаконічним і водночас самодостатнім. Зокрема, читача знайомлять з методом ренормгрупи матриці густини, де хвильова функція шляхом канонічного перетворення представляється у вигляді матрично-добутоквого стану (МДС), а оператори – у вигляді

матрично-добуткових операторів (МДО). Також вводиться поняття трансфер-матриць, які, окрім формального застосування, мають фізичну суть (частково висвітлену в додатку).

У другому розділі на базі стандартного чисельного методу МДС-МДО розроблено кілька вдосконалень, покликаних зменшити необхідні для розрахунків ресурси та одночасно підвищити точність розрахунків. По-перше, розроблено алгоритм, який при швидкому спаданні сингулярних чисел добутків великої кількості трансфер-матриць заміняє ці добутки на їхній скорочений розклад за сингулярними числами (при цьому оптимізація варіаційних параметрів МДС проводиться весь час в одному напрямку). По-друге, алгоритм оптимізації параметрів модифіковано на випадок наявності у гамільтоніана системи відповідно  $U(1)$  та  $SU(2)$  симетрії, тобто у випадку комутації гамільтоніана з оператором проекції повного спіну на виділений напрямок та оператором повного спіну, відповідно. Наведено необхідні вирази, що дозволяють безпосереднє застосування всіх алгоритмів. Алгоритм з  $SU(2)$  симетрією запропоновано в такому вигляді, який повністю виключає структурні коефіцієнти та формулюється в термінах лише зведених тензорів. Розробка цього алгоритму вимагала громіздких викладок, з чим дисертант успішно впорався.

У третьому розділі розраховано конкретні фізичні характеристики двох вказаних вище квантових моделей, XXZ зі спіном  $\frac{1}{2}$  та ББГ зі спіном 1. Для XXZ моделі досліджуються властивості запутаності станів з різною проекцією спіну в різних фазах. Доводиться, що прості міри запутаності, що відображають одно- та двочастинкову запутаність, досить добре описують поведінку системи в XY фазі та фазі Нееля, що виражається в сильній залежності значень цих мір від параметра анізотропії. Для ББГ моделі визначається характер домінуючих збуджень в критичній фазі, а також область існування димерної фази в моделі. Межі димерної фази визначаються для двох випадків: відсутності однойонної анізотропії та відсутності білінійного члена взаємодії. В роботі зроблено висновок, що за відсутності однойонної анізотропії нижньою межею димерної фази є  $SU(3)$  - симетрична точка  $\theta = -3\pi/4$ . Чисельно визначено межі димерної фази за відсутності білінійного члена (в  $SU(3)$ - симетричній точці  $\theta = -\pi/2$ ) і показано, що в певному діапазоні значень параметра анізотропії існує димерна нещільна фаза. Цікаво, що існування такої фази в даній моделі раніше не припускалося теоретиками, тому бажаними є чисельні розрахунки інших авторів та експериментальна перевірка.

В третьому розділі також було досліджено збіжність вдосконалених алгоритмів. Зокрема, описано спосіб автоматичного вибору необхідних ступенів вільності в матричних розмірностях МДС та уникнення «локальних мінімумів». Також було виявлено, що швидке спадання сингулярних чисел великої кількості трансфер-матриць має місце тільки в системах з малою кореляційною довжиною та за наявності неперервної симетрії у гамільтоніана. Дані результати вказують, що підхід ренормгрупи матриці густини потребує переосмислення у випадку періодичних крайових умов.

В якості зауважень до тексту дисертації М.В. Ракова можна віднести наступне:

1) Автор пише, що для XXZ моделі застосування методу анзацу Бете неможливе при  $\Delta < -1$ , однак просте канонічне перетворення  $s_i^{(x,y)} \rightarrow (-1)^i \bar{s}_i^{(x,y)}$ ,  $s_i^{(z)} \rightarrow \bar{s}_i^{(z)}$  в термінах нових операторів  $\bar{s}_i$  дає XXZ модель з «ферромагнітною» взаємодією, причому ізотропною при  $\Delta = -1$ , в цьому випадку  $H = -\sum_i \bar{s}_i \bar{s}_{i+1}$ . Саме аналізу цього випадку й була присвячена класична робота Г. Бете (1931).

2) Бажаною є фізична інтерпретація димерної нематичної безщільної фази, існування якої передбачено в роботі для ББГ моделі зі спіном 1. Можливо, корисним буде порівняння з результатом, отриманим в рамках теорії середнього поля, де отримується ортогональна нематична фаза.

3) На с. 100 говориться «збереження повного кутового моменту, тобто  $(\vec{S})^2 \dots$  » На мою думку, правильно казати про збереження трьох компонент векторного оператора  $\vec{S}$ .

4) На мою думку, не є коректним називати однойонну анізотропію зеєманівською.

Наведені вище зауваження не знижують високої оцінки отриманих дисертантом результатів. Два перші зауваження скоріше варто розглядати як побажання до майбутніх досліджень у цій цікавій області.

В підсумку відмічу, що дисертаційна робота М. В. Ракова є цілісною і завершеною науковою працею, що містить оригінальні і важливі результати з актуального напрямку в сучасній теоретичній фізиці – фізики низьковимірних магнетиків та ультрахолодних газів. Результати дисертації є новими та належним чином обґрунтованими. Отримані наукові результати щодо області димеризації в ББГ моделі зі спіном 1 та заплутаності й кореляцій в ХХZ моделі зі спіном  $\frac{1}{2}$ , безумовно, є корисними і цікавими. Текст дисертації написано в достатній мірі ясно і з належною теоретико-фізичною та математичною строгістю.

Результати дисертації своєчасно і в повному об'ємі опубліковано у 5 статтях у провідних фахових наукових журналах, обговорювалися на авторитетних наукових конференціях та семінарах. Наукові розробки дисертації М. В. Ракова доволі широко відомі іншим науковцям. Автореферат дисертації повно передає зміст та основні результати дисертації. Результати дисертації становлять практичну цінність і можуть ефективно враховуватись при проведенні подальших досліджень в теоретичній та експериментальній фізиці. Розроблені в роботі чисельні методи можуть бути використані для моделювання поведінки широкого класу багаточастинкових систем не тільки в фізиці твердого тіла, але й в інших розділах квантової фізики сильно корельованих систем. Розроблений метод та отримані результати також можуть бути використані у підготовці спецкурсів для студентів-фізиків з теоретичних спеціальностей.

Враховуючи актуальність обраної теми досліджень, наукову новизну підходів, значний об'єм виконаних досліджень та обґрунтованість отриманих наукових результатів, вважаю, що дисертація "Чисельне моделювання квантових багаточастинкових систем з використанням тензорних мереж" цілком відповідає всім вимогам МОН України щодо кандидатських дисертацій, а її автор **Раков Михайло Володимирович**, без сумніву, заслуговує на присудження йому наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.02 – теоретична фізика.

Офіційний опонент

доктор фізико-математичних наук, професор,  
член-кореспондент НАН України,  
завідувач лабораторії магнітних матеріалів  
Інституту магнетизму НАН України та МОН України



Б. О. Іванов

Підпис Іванова Бориса Олексійовича засвідчую:

Вчений секретар Інституту магнетизму НАН України та МОН України,  
кандидат фізико-математичних наук



А. О. Хребтов