

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования «Уральский федеральный университет  
имени первого Президента России Б. Н. Ельцина»



На правах рукописи

**Чиков Александр Алексеевич**

**КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СПИНОВОГО И  
ЗАРЯДОВОГО ПОРЯДКА В КВАЗИДВУМЕРНЫХ КУПРАТАХ**

1.3.8. Физика конденсированного состояния

Автореферат  
диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Екатеринбург – 2025

Работа выполнена в отделе математического моделирования Научно-исследовательского института физики и прикладной математики Института естественных наук и математики и на кафедре физики Института фундаментального образования ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»

**Научный руководитель:**

кандидат физико-математических наук, доцент  
**Панов Юрий Демьянович**

**Официальные оппоненты:**

**Ляпилин Игорь Иванович**, доктор физико-математических наук, ФГБУН Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург, главный научный сотрудник лаборатории квантовой наноспинтроники отдела наноспинтроники;

**Некрасов Игорь Александрович**, доктор физико-математических наук, член-корреспондент РАН, ФГБУН Институт электрофизики Уральского отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург, главный научный сотрудник лаборатории теоретической физики;

**Прудников Павел Владимирович**, доктор физико-математических наук, профессор, Центр новых химических технологий ФГБУН Федеральный исследовательский центр «Институт катализа им. Г.К. Борескова Сибирского отделения Российской академии наук» (Омский филиал), главный научный сотрудник отдела материаловедения и физико-химических методов исследования;

Защита состоится 19 декабря 2025 в 15:00 на заседании диссертационного совета УрФУ 1.3.02.06 по адресу: 620062, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19, ауд. И-420 (зал Ученого совета)

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»: <https://dissovet2.urfu.ru/mod/data/view.php?d=12&rid=7803>

Автореферат разослан «\_\_\_\_» ноября 2025 г.

Ученый секретарь  
диссертационного совета:

Ищенко Алексей Владимирович

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

### Актуальность темы исследования

Открытие в 1986 г. Беднорцем и Мюллером высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП) в квазидвумерных купратах  $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$  [1] дало мощный толчок экспериментальным и теоретическим исследованиями не только купратов, но и в целом сильнокоррелированных систем на основе переходных металлов. Несмотря на почти четыре десятилетия, прошедшие с момента открытия ВТСП, на сегодняшний день нет единого мнения относительно теоретической модели, которая позволяет в рамках единого сценария описать собственно механизм ВТСП, фазовые диаграммы, включая специфическую псевдощелевую фазу, странную металлическую фазу, зарядовое упорядочение, эффекты фазового расслоения и другие необычные физические свойства квазидвумерных купратов. Существует большое количество экспериментальных данных, свидетельствующих о неприменимости к купратам традиционного подхода теории Бардина-Купера-Шриффера (БКШ). В отличие от описываемых теорией БКШ классических «низкотемпературных» сверхпроводников, которые в нормальном состоянии являются обычными немагнитными металлами, «родительские» купраты типа  $\text{La}_2\text{CuO}_4$ ,  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_6$  являются антиферромагнитными моттовскими изоляторами, которые переходят в сверхпроводящее состояние при допировании носителей заряда. Нетрадиционное поведение при зарядовом допировании, в частности, экспериментально наблюдаемые эффекты конкуренции антиферромагнитного, сверхпроводящего и зарядового упорядочений, сильные, но специфические эффекты электрон-решёточного взаимодействия, принципиально отличают купраты от обычных металлов и бросают вызов теории конденсированного состояния. Разработка теоретических моделей и компьютерное моделирование фазовых диаграмм квазидвумерных купратов является одной из наиболее актуальных задач физики конденсированного состояния.

### Степень разработанности темы исследования

За прошедшие десятилетия были предложены десятки различных теорий для описания механизма ВТСП и необычных свойств квазидвумерных купратов, в том числе теорий, выходящих как за рамки традиционного квазичастичного БКШ подхода, так и за рамки ставшей традиционной для теории конденсированного состояния зонной модели, основанной на теории функционала плотности. Одной из таких «нетрадиционных» моделей квазидвумерных купратов является предложенная в работе [2] модель «зарядовых триплетов», предполагающая описание  $\text{CuO}_2$ -плоскостей ВТСП-купратов как системы  $\text{CuO}_4$ -центров, находящихся в трех возможных зарядовых состояниях  $[\text{CuO}_4]^{7-,6-,5-}$  (номинально  $\text{Cu}^{1+,2+3+}$ ), объединяемых в зарядовый триплет, описываемый в рамках  $S=1$

псевдоспинового формализма. С учетом бесспинового характера «электронного» и «дырочного» центров ( $[\text{CuO}_4]^{7-}$  и  $[\text{CuO}_4]^{5-}$ ) и реального спина  $s=1/2$  для «родительского» центра  $[\text{CuO}_4]^{6-}$  (номинально  $\text{Cu}^{2+}$ ) локальное гильбертово пространство  $\text{CuO}_4$ -центров расширяется до квартета. Псевдоспиновый формализм позволяет широкое использование как спиновой алгебры, так и других теоретических методов, включая компьютерное моделирование, известных для типичных спин-магнитных систем. В рамках псевдоспинового формализма построен обобщенный спинпсевдоспиновый гамильтониан модельного купрата [2], который учитывает локальные и нелокальные заряд-зарядовые корреляции, «одно»- и «двух»- частичный перенос заряда, а также спин-спиновый обмен. Псевдоспиновый формализм позволяет выйти за рамки традиционного квазичастичного описания купратов и является примером так называемого «нечастичного» («unparticle») подхода, который уже показал реальные возможности описания фазовых диаграмм купратов, включая эффекты фазового расслоения, предсказания новых топологических дефектов и структур. В частных случаях спин-псевдоспиновый гамильтониан сводится к известным в теории конденсированного состояния моделям типа локальных (hard-core) бозонов, моделей Изинга, Поттса и Блюма-Эмери-Гриффитса. Как «нечастичный» подход, спин-псевдоспиновая модель зарядовых триплетов предполагает использование координатного представления вместо импульсного. Координатное представление, в отличие от импульсного, требует численного исследования систем больших размеров. Первым этапом данного исследования является рассмотрение атомного (квазистатического) предела спин-псевдоспиновой модели, что позволяет исследовать зарядовое и магнитное упорядочение в нормальной фазе квазидвумерных купратов. Таким образом, компьютерное моделирование зарядового и магнитного упорядочений для получения фазовых диаграмм квазидвумерных купратов в рамках атомного предела спин-псевдоспиновой модели является одной из актуальных задач физики конденсированного состояния. В данной диссертационной работе компьютерное моделирование выполнено на основе разработанного автором модифицированного варианта классического метода Монте-Карло и проведено сравнение результатов с результатами теории среднего поля.

### **Цель исследования**

Целью данной работы является исследование зарядового и магнитного упорядочения для атомного («статического») предела спин-псевдоспиновой модели ВТСП купрата, а также разработка алгоритмов, позволяющих реализовать метод Монте-Карло для этих систем.

### **Задачи исследования:**

1. Разработать и реализовать алгоритм метода Монте-Карло для спин-псевдоспиновой модели ВТСП купратов в атомном пределе.
2. Исследовать методом Монте-Карло фазовую диаграмму нормального состояния модельного купрата, описать фазы и фазовые переходы при всех возможных значениях параметров системы. Особое внимание уделить влиянию соотношения параметров нелокальных корреляций и обменного взаимодействия, а также исследовать роль локальных корреляций для различных концентраций допированного заряда.
3. Выявить условия реализации в системе расслоения зарядово-упорядоченных и магнитно-упорядоченных фаз. Сравнить данные численного моделирования с аналитическими результатами метода среднего поля.

### **Научная новизна**

1. Методом компьютерного моделирования Монте-Карло впервые изучены зарядовое и магнитное упорядочение для атомного предела спин-псевдоспиновой модели квазидвумерных купратов, которая фактически является обобщением модели разбавленного двумерного изинговского антиферромагнетика с заряженными примесями;
2. С использованием параллельного алгоритма для графических ускорителей Nvidia разработана и реализована оригинальная методика Монте-Карло для атомного предела спин-псевдоспиновой модели квазидвумерных купратов, обеспечивающая кинематическое сохранение концентрации допированного заряда;
3. Полученные методом компьютерного моделирования Монте-Карло фазовые диаграммы, отражающие зарядовое и магнитное упорядочение в модельных квазидвумерных купратах, соответствуют результатам среднего поля и не противоречат имеющимся теоретическими и экспериментальными данным.

### **Теоретическая и практическая значимость**

Теоретическая значимость работы заключается в разработке и иллюстрации широких возможностей модифицированного метода Монте-Карло для выявления закономерностей зарядового и магнитного упорядочения в рамках спин-псевдоспиновой модели квазидвумерного купрата, построения и исследования фазовых диаграмм, расчёта температурных зависимостей теплоёмкости и магнитной восприимчивости, эффектов фазового расслоения.

На практике полученные результаты могут быть использованы для объяснения особенностей зарядового и магнитного порядка в реальных ВТСП купратах, интерпретации экспериментальных данных, а также для формирования нового подхода к описанию электронных свойств интерфейсов.

Непосредственная практическая значимость работы заключается в разработке и реализации адаптированного к исполнению на связке GPU-CPU программного кода, реализующего метод Монте-Карло для сложных спин-псевдоспиновых систем с макроскопическим ограничением на намагниченность псевдоспиновой подсистемы, который, в сравнении с однопоточным кодом на CPU, дает выгоду во времени исполнения программы в 1500 раз (с использованием видеокарты Nvidia GTX760), что в пересчёте на масштаб вычислительного кластера «Уран» (Уральское отделение Российской Академии наук, 1940 вычислительных ядер CPU до модернизации 2021 года) составляет более 77%. Такая производительность достигнута за счёт глубокой оптимизации работы с памятью графического адаптера, оптимизации вычислительных операций и 4 переноса не подходящих для него вычислений на центральный процессор.

#### **Методология и методы исследования**

Теоретическая модель квазидвумерного купрата, рассматриваемая в диссертационной работе, предполагает ограничение атомным («статическим») пределом, описание зарядовых состояний в рамках псевдоспинового формализма и модель Изинга для описания магнитных взаимодействий. Компьютерное моделирование проводилось в рамках оптимизированного массивно параллельного варианта классического метода Монте-Карло, реализованного для аппаратной линейки графических ускорителей компании Nvidia. Авторский программный код для метода Монте-Карло позволил за время порядка нескольких часов проводить расчёт термодинамических характеристик больших 2D систем ( $256 \times 256$  узлов), усредняя результат по большому количеству параллельно рассчитываемых независимых экземпляров системы (в расчётах использовалось до 100 экземпляров). Производительность была достигнута за счёт глубокой оптимизации работы с памятью графического адаптера, оптимизации вычислительных операций и переноса не подходящих для него вычислений на центральный процессор.

#### **Положения, выносимые на защиту:**

1. В атомном пределе спин-псевдоспиновой модели зарядовых триплетов в основном состоянии в двухподрешеточном приближении реализуются три зарядово упорядоченные, антиферромагнитная и ферромагнитная фазы.

2. Репличный безобменный алгоритм Монте-Карло позволяет рассчитывать термодинамические средние, обнаруживать фазовые переходы и фазовое расслоение в атомном пределе спин-псевдоспиновой модели.
3. Явление фазового расслоения обнаруживается методом Монте-Карло и подтверждается методом среднего поля в рамках построения Максвелла.
4. Полученные в результате численного моделирования значения термодинамических величин и построенные фазовые диаграммы уточняют результаты метода среднего поля за счет более полного учета флуктуаций и качественно согласуются с экспериментальными данными.

### **Степень достоверности и апробация результатов**

Достоверность результатов работы обеспечивается систематическим характером исследований, использованием известных методов численного моделирования, согласием с литературными данными в частных вариантах модели. Основные результаты получены методом Монте-Карло с помощью разработанной автором оригинальной компьютерной программы, корректность которой проверялась на задачах с известными решениями. Результаты, полученные методом Монте-Карло, согласуются как с результатами исследования модельного купрата методом среднего поля [3], так и с экспериментальными данными о зарядовом и спиновом порядке в квазидвумерных купратах [4]. Результаты работы получили положительную оценку на различных российских и международных конференциях, они опубликованы в научных журналах, рекомендованных ВАК, индексируемых в базах Scopus и Web of Science.

Основные результаты работы докладывались на следующих конференциях:

1. «37 совещание по физике низких температур» (НТ-37, Казань, 2015)
2. Международная зимняя школа физиков-теоретиков «Коуровка - XXXVI» (Екатеринбург, 2016)
3. EASTMAG 2016 (Красноярск)
4. Physics of Magnetism 2017 (Познань, Польша)
5. MISM 2017 (Москва)
6. Параллельные вычислительные технологии 2018 (Ростов-на-Дону)
7. Международный Феофиловский симпозиум 2018 (Екатеринбург)

На международной конференции в Польше Physics of Magnetism 2017 доклад, посвящённый топологическому расслоению фаз при ненулевых температурах, получил первый приз в номинации «best poster prize».

### **Личный вклад автора**

На всех этапах работы автор принимал активное участие в постановке задач исследования, выборе и реализации расчётных и аналитических подходов, подготовке материалов докладов и публикаций. Автором самостоятельно реализован адаптированный к исполнению на связке GPU-CPU программный код, реализующий метод Монте-Карло для атомного предела спин-псевдоспиновой модели зарядовых триплетов с макроскопическим ограничением на намагниченность псевдоспиновой подсистемы. Автором самостоятельно были проведены расчёты температурных зависимостей теплоёмкости и магнитной восприимчивости с использованием разработанного программного кода для всех обсуждаемых в диссертации случаев, также самостоятельно велась подготовка патентной документации для разработанных программных продуктов. Совместно с научным руководителем и другими соавторами проводилась аналитическая работа в приближении среднего поля и подготовка графических материалов для публикаций.

Работа выполнена в рамках государственных заданий Министерства образования и науки РФ по темам № 1437 «Разработка модельных теорий сложных сильнокоррелированных систем», № 2277 «Разработка микроскопических механизмов формирования и модельное описание структуры и свойств нано- и низкоразмерных сильнокоррелированных систем», вузовско-академического гранта № 14-921-2-7 «Топологические и спиральные структуры в низкоразмерных и сильнокоррелированных соединениях переходных металлов», проекта РФФИ мол-а № 18-32-00837 «Исследование методом Монте-Карло псевдоспиновых моделей сильнокоррелированных систем», а также стипендии президента РФ №СП2278.2019.1.

### **Публикации**

По теме диссертации опубликовано 18 печатных работ, из них 12 статей в рецензируемых научных изданиях, определённых ВАК РФ и Аттестационным советом УрФУ, включая 9 в изданиях, индексируемых в зарубежных научных базах Web of Science и Scopus; получено 2 свидетельства о регистрации программы для ЭВМ.

### **Объем и структура работы**

Диссертация состоит из введения, трёх глав, заключения и списка цитируемой литературы. Полный объем диссертации составляет 137 страниц, включая 44 рисунка. Список цитируемой литературы содержит 197 наименований.

## **ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ**

**Во введении** обоснована актуальность диссертационной работы, приводится степень разработанности проблемы, сформулированы цели и задачи исследования,



демонстрируются научная новизна, теоретическая и практическая значимость полученных результатов, представлены основные положения, выносимые на защиту.

**В первой главе** представлен краткий обзор основных экспериментальных данных и ретроспектива развития теоретических моделей зарядового и магнитного упорядочения в ВТСП-купратах, ассоциированная с фазовой диаграммой (Рисунок 1).

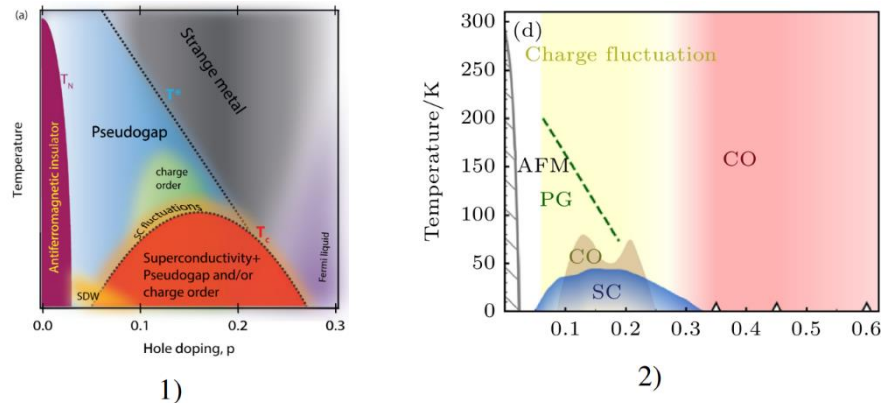


Рисунок 1: 1) Фазовая диаграмма дырочно-допированного купрата из работы [5]. 2) Расширенная фазовая диаграмма дырочно-допированного купрата из работы [6], содержит области антиферромагнитного упорядочения (AFM), сверхпроводимости, псевдощели а также зарядового упорядочения (CO) и зарядовых флуктуаций.

Экспериментальные исследования зарядового и магнитного упорядочения в ВТСП купратах носят фрагментарный характер, т.к. они трудоемки и требуют специализированного оборудования, что говорит об актуальности разработки теоретических моделей, описывающих зарядовое и магнитное упорядочение, проведения их аналитических исследований и компьютерного моделирования.

В отношении теоретических моделей основной интерес исследователи проявляли к возможным механизмам формирования сверхпроводящего состояния, оставляя за скобками описание родительской антиферромагнитной фазы купратов. Первыми результатами, связанными с зарядовым упорядочением и фазовым расслоением, можно считать серию исследований, посвященную зарядово-упорядоченным диэлектрикам, под которыми авторы подразумевали в том числе и ВТСП купраты: в рамках расширенной модели Хаббарда, учитывающей локальные и нелокальные заряд-зарядовые корреляции для ближайших и вторых ближайших соседей, а также парный перенос заряда. Введён термин атомный предел (atomic limit) в смысле пренебрежения кинетическими эффектами, на фазовой диаграмме обнаружено два случая фазового расслоения (состояния, при котором в системе существуют две области с разной концентрацией электронов): сосуществование зарядово упорядоченной и неупорядоченной фаз и сосуществование двух зарядово упорядоченных фаз с разными концентрациями (и параметрами зарядового порядка). Показано, что в ВТСП купратах могут существовать три однородные фазы: сверхпроводящая (SS), зарядово-упорядоченная (CO) и неупорядоченная (NO), а также

фазово-разделённое состояние SS-CO [7; 8] В то же время необходимо отметить, что в аналогичной модели без учёта нелокальных заряд-зарядовых корреляций не наблюдается ни разделения фаз, ни статического зарядового порядка, хотя его флуктуации присутствуют [9].

Одной из перспективных «нетрадиционных» моделей квазидвумерных купратов является спин-псевдоспиновая модель зарядовых триплетов [2]. Как «нечастичный» подход спин-псевдоспиновая модель зарядовых триплетов предполагает использование координатного представления в противовес импульсному. Координатное представление позволяет заложить в модельный подход возможность реализации пространственной неоднородности (за счет использования решеточных моделей), что требует численного исследования систем больших размеров. Первым этапом такого исследования является рассмотрение атомного (квазистатического) предела спин-псевдоспиновой модели для выяснения закономерностей зарядового и магнитного упорядочения в квазидвумерных купратах. Исследование закономерностей спинового и зарядового упорядочения в медьсодержащих высокотемпературных сверхпроводниках в рамках атомного предела спин-псевдоспиновой модели (1) актуально и не имеет аналогов среди опубликованных работ.

**Во второй главе** был дан обзор основных этапов развития спин-псевдоспиновой модели зарядовых триплетов, рассмотрен переход к атомному пределу и проанализировано основное состояние в двухподрешеточном приближении. Применяемый подход предполагает выделение центра  $M$  ( $CuO_4$ ), который может находиться в нескольких валентных состояниях:  $M^0$ ,  $M^-$ ,  $M^+$ , образующих зарядовый (изоспиновый) триплет. В качестве инструмента моделирования в работе используется псевдоспиновый формализм, а именно введение формального псевдоспина  $S$  по правилу: количество возможных состояний системы равно  $2S+1$ . Три валентных состояния центра  $M$  ( $CuO_4$ ) формально связываем с триплетом  $M_S = 0, \pm 1$  состояний псевдоспина  $S=1$ . Кроме того учитывается наличие спина  $s=1/2$  у кластера в состоянии  $M^0$  ( $Cu^{2+}$ ,  $[CuO_4]^{6-}$ ). Итого все пространство состояний кластера  $CuO_4$  редуцируется к модельному спектру (Рисунок 2).

Атомный предел спин-псевдоспиновой модели сводится к рассмотрению корреляционных эффектов плотность-плотность на узлах ( $2\Delta = U$ ) и межузельных обменных взаимодействий с пренебрежением эффектами переноса [2], в результате чего гамильтониан модели  $E - H$  димеров сводится к следующему выражению:

$$\hat{H} = \Delta \sum_i \hat{S}_{iz}^2 - V \sum_{\langle ij \rangle} \hat{S}_{iz} \hat{S}_{jz} + \tilde{J} \sum_{\langle ij \rangle} \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_z - \mu \sum_i \hat{S}_{iz}, \quad (1)$$

где  $\hat{S}_{iz}$  – z-компонента псевдоспина  $S = 1$  на узле,  $\hat{\sigma}_{zi} = \hat{P}_{0i}\hat{S}_{zi}/s$  – нормированная z-компонента спина  $s=1/2$ , умноженная на оператор проектирования  $\hat{P}_{0i} = 1 - \hat{S}_{zi}^2$ . Суммирование подразумевается по узлам двумерной квадратной решётки,  $\langle ij \rangle$  означает сумму по ближайшим соседям. Параметры  $\Delta = U/2$  и  $V > 0$  определяют зарядовые корреляции на узле и между узлами решётки соответственно,  $J = \hat{J}/s^2 > 0$  – обменное взаимодействие Изинга между ионами  $\text{Cu}^{2+}$ ,  $\mu$  – химический потенциал, необходимый для учета условия постоянства допированного заряда:

$$\sum_i \hat{S}_{zi} = \text{const.} \quad (2)$$

При анализе основного состояния в двухподрешеточном приближении было выявлено два характерных случая: «сильного» ( $\hat{J} > V$ ) и «слабого» ( $\hat{J} < V$ ) обмена. В случае сильного обмена реализуются фазы COI и AFM. В случае слабого обмена реализуются фазы COI, COII, COIII и FIM. Границы существования фаз показаны на Рисунок 3.

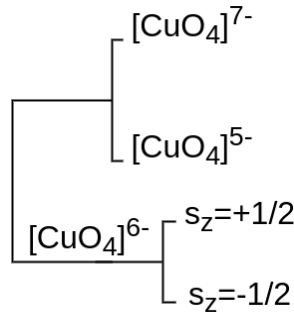


Рисунок 2: Модельный спектр кластера  $\text{CuO}_4$ , положенный в основу спин-псевдоспиновой модели, диспропорционированное ( $\text{CuO}_4^{6-} \rightarrow \text{CuO}_4^{5-} + \text{CuO}_4^{7-}$ ) состояние считается возбужденным.

Относительно набора реализуемых фаз показано, что поведение модельной системы качественно различается в случаях «сильного» ( $\hat{J} > V$ ) и «слабого» ( $\hat{J} < V$ ) обмена. В случае «сильного» обмена в системе реализуются только фазы COI (зарядово-упорядоченная) и AFM (магнитно-упорядоченная), в которых допируемые заряды равномерно распределяются по обоим подрешеткам. В случае «слабого» обмена реализуется более богатый набор фаз: COI, COII, COIII и FIM. В зарядово-упорядоченной фазе COI нет спиновых центров ( $\text{Cu}^{2+}$ ), в фазах COII и COIII одна из подрешеток всегда занята зарядовыми центрами знака, совпадающего со знаком допируемого заряда. Вторая подрешетка, при половинном заполнении заселённая зарядовыми центрами (фаза COI), с возрастанием допирования сначала заполняется спиновыми центрами (фаза COIII), затем спиновые центры замещаются зарядами противоположного знака (фаза COII).

Ферримагнитная (FIM) фаза отличается от AFM тем, что допируемые заряды, испытывающие сильное кулоновское отталкивание, распределяются строго в одной подрешетке.

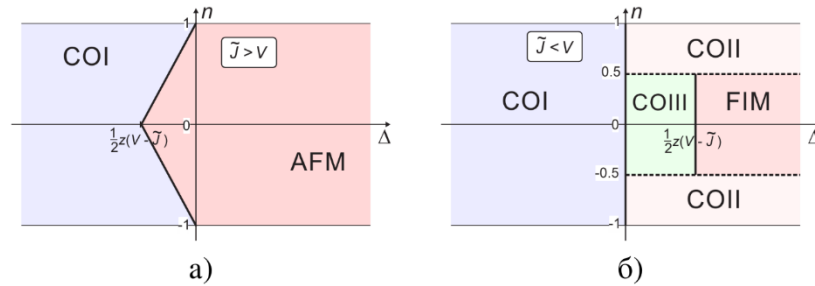


Рисунок 3: Диаграммы основного состояния в приближении среднего поля для случаев «сильного» (а) и «слабого» обмена (б).

В третьей главе анализировались вопросы применения метода Монте-Карло для моделирования системы с гамильтонианом (1). «Кинематический» способ соблюдения условия (2) в настоящей работе реализован аналогично алгоритму Кавасаки [10] путём генерации нового состояния для пары узлов.

В области фазового перехода остро встаёт проблема сходимости алгоритма. В профильной литературе данный эффект известен как критическое замедление [11]. Его причина – возникновение метастабильных состояний в фазовом пространстве системы по мере приближения к точке фазового перехода. В рамках метода Монте-Карло снизить влияние эффекта критического замедления можно путем прямого связывания различных эргодических классов (метастабильных состояний) в единую марковскую цепь. В литературе эта идея была развита в рамках кластерных [12] и репличных [13] алгоритмов. Оба подхода базировались на идее нелокальных (ориг. «non-local») изменений конфигурации системы при построении марковской цепи, т.е. рассматривали переворот не выделенного спина, а сразу группы.

В рамках данной работы было принято решение о реализации высокопроизводительного безобменного варианта репличного алгоритма, ускоренного за счёт переноса части вычислений на GPU Nvidia, ориентированного на параллельную работу с большими решётками (до  $256 \times 256$ ) и с большим количеством реплик (в реальных расчетах количество реплик доходило до 96). Отсутствие процедуры глобального обновления в трактовке [13] обосновано необходимостью исключения сценария, при котором состояние  $\Omega$ , соответствующее локальному минимуму, распространялось по всем репликам. При этом решение о «качестве» результата принималось на основе анализа межрепличной дисперсии (целевое значение – не более 0.01 в обезразмеренных энергетических величинах). Основными величинами, которые анализировались в работе, были теплоёмкость и магнитная восприимчивость, в ряде случаев анализировалась

величина, аналогичная магнитной восприимчивости, построенная для вектора антиферромагнетизма ( $V_{AFM} = M_A - M_B$ , где  $M_A$  и  $M_B$  намагниченности подрешеток А и В соответственно).

**В четвёртой главе** представлены результаты исследования методом Монте-Карло спинового и зарядового порядка в плоскостях  $CuO_2$  модельного ВТСП купрата в рамках атомного (статического) предела спин-псевдоспиновой модели (1). Полученные результаты сравнивались данными метода среднего поля.

В основном состоянии в двухподрешеточном приближении (методом среднего поля) были выявлены два характерных случая «сильного» ( $\hat{J} > V$ ) и «слабого» ( $\hat{J} < V$ ) межузельного обмена (Рисунок 3). Минимальной энергией, в зависимости от значений параметров гамильтониана (1) и концентрации допированных зарядов, обладает одна из трёх зарядово-упорядоченных (COI, COII, COIII) фаз, антиферромагнитная (AFM) либо ферромагнитная (FIM) фаза. Фазы COI и COIII при половинном заполнении неотличимы друг от друга: обе подрешетки заполнены зарядовыми центрами противоположного знака, спиновые центры отсутствуют. При отклонении от половинного заполнения одна из подрешеток остается без изменений, во второй в фазе COI зарядовые центры замещаются на зарядовые центры противоположного знака, а в фазе COIII – на спиновые центры. Фаза COIII переходит в фазу COII при  $n > 0.5$ , когда для выполнения условия (2) спиновые центры замещаются зарядовыми. Фазы AFM и FIM образованы в основном магнитными центрами, в FIM фазе за счет сильного отталкивания допируемые зарядовые центры занимают одну из подрешеток, что приводит к эффективному ферромагнетизму.

Рассматривались зависимости термодинамических величин для случая «сильного» ( $\hat{J} > V$ ) межузельного обмена. При этом вид зависимостей от температуры удельной теплоёмкости и магнитной восприимчивости кардинально различался в случаях  $\Delta < 0$  и  $\Delta > 0$ . На Рисунок 4 представлены температурные зависимости удельной теплоёмкости от температуры  $C(T)$  и мгновенные снимки реального состояния системы в двух характерных точках для  $\Delta = -1.5$  и  $n = 0.1$ . Зависимость  $C(T)$  имеет резкий максимум при  $T_{CO} \approx 0.22\hat{J}$ . Плато при температуре  $T \approx 0.5\hat{J}$  связано с вымерзанием спиновой подсистемы. Прямая визуализация фазового состояния системы показывает, что спиновые флуктуации практически полностью исчезают при  $T \approx 0.5\hat{J}$  до возникновения в системе зарядового упорядочения. Высокотемпературное поведение спин-псевдоспиновой системы может быть описано, пренебрегая межузельным взаимодействием ( $V = 0, J = 0, n \in [0,1)$ ), что приводит к следующим выражениям для теплоёмкости и магнитной восприимчивости:

$$C = \frac{\Delta^2 e^{\Delta/T} (1 - n^2)^2}{T^2 f (e^{\Delta/T} + f)^2}, \quad (3)$$

$$\chi = \frac{1 - n^2}{4T(1 + e^{-\Delta/T} f)}, \quad (4)$$

где  $f = \sqrt{1 - n^2 + n^2 e^{2\Delta/T}}$ . Температурные зависимости  $C(T)$  и  $\chi(T)$ , полученные в ходе моделирования методом Монте-Карло для случая  $n = 0.1$ ,  $\Delta = -1.5$ ,  $V = 0.1$ ,  $\tilde{J} = 1$ , сопоставлены с приведёнными высокотемпературными зависимостями (3,4) и температурной зависимостью  $C(T)$  для точного решения модели Изинга на Рисунок 4. Наглядно видно, что предположение относительно высокотемпературного и низкотемпературного предельных случаев выполняются.

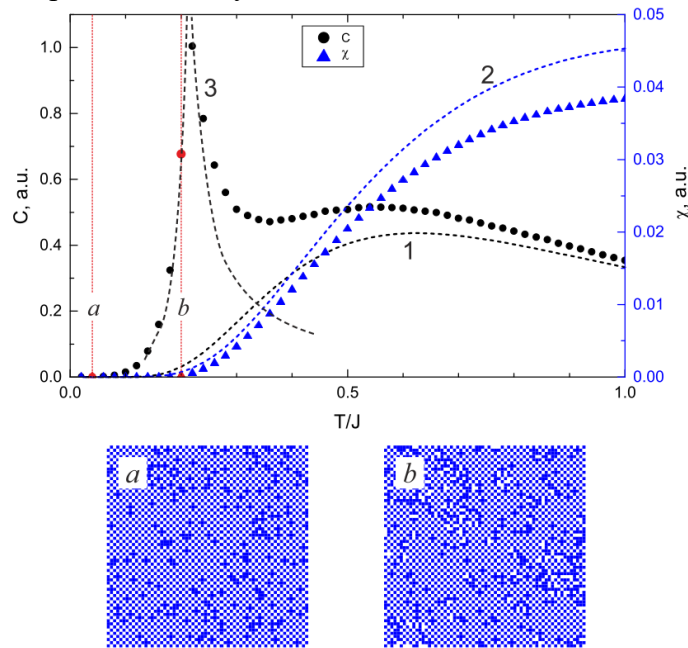


Рисунок 4: Температурные зависимости теплоемкости и магнитной восприимчивости при  $n = 0.1$ ,  $\Delta = -1.5$ ,  $V = 0.1$ ,  $J = 1$ . Пунктирные линии 1 и 2 соответствуют приближениям (3) и (4) соответственно. Пунктирная линия 3 соответствует точному решению для 2d модели Изинга для значения обмена 0.1. Вертикальные пунктирные линии (a) и (b) соответствуют точкам, для которых сделаны снимки мгновенных состояний решетки. Для лучшей визуализации структуры «шахматной доски» снимки были приведены для фрагмента размером  $64 \times 64$ .

Качественно иное поведение системы наблюдается при  $\Delta > 0$ , температурные зависимости теплоёмкости и магнитной восприимчивости для  $n=0.1$  приведены на Рисунок 5. Резкий максимум при  $T_{AFM} = 0.450\tilde{J}$  соответствует AFM-упорядочению спиновой подсистемы. Температура этого фазового перехода второго рода немного ниже, чем у разбавленной 2D системы Изинга  $s = 1/2$  ( $T^* \approx 0.465J$ ) при  $n = 0.1$ . Однако при понижении температуры удельная теплоёмкость неожиданно демонстрирует второй пик при  $T_{PS} \approx 0.08\tilde{J}$ . Сопоставление снимков мгновенных состояний при  $T < T_{PS}$  и  $T > T_{PS}$  показывает,

что эта особенность связана с формированием доменов фазы центров  $[\text{CuO}_4]^{5-}$ , концентрация которых ассоциируется с допированным зарядом, которые при  $T_{PS} < T < T_{AFM}$  случайно распределены по системе. Другими словами реализуется переход в состояние с фазовым расслоением, в котором сосуществуют гомогенные фазы с  $n = 0$  и  $n = 1$  соответственно, при этом данное расслоение сохраняется во всем диапазоне допированного заряда за исключением предельных случаев ( $n = 0$  и  $n = 1$ ). Для доменов фазы центров  $[\text{CuO}_4]^{5-}$  в оригинальных работах был использован термин «зарядовые капли» («charge drops»). Характерно, что пик на кривой удельной теплоёмкости при  $n = 0.1$ , связанный с упорядочением спиновой подсистемы, быстро размывается при увеличении концентрации носителей заряда. В то же время, как показывают исследования концентрационных зависимостей, низкотемпературный пик практически не меняет своего положения и величины в широком диапазоне концентраций допированного заряда (Рисунок 7).

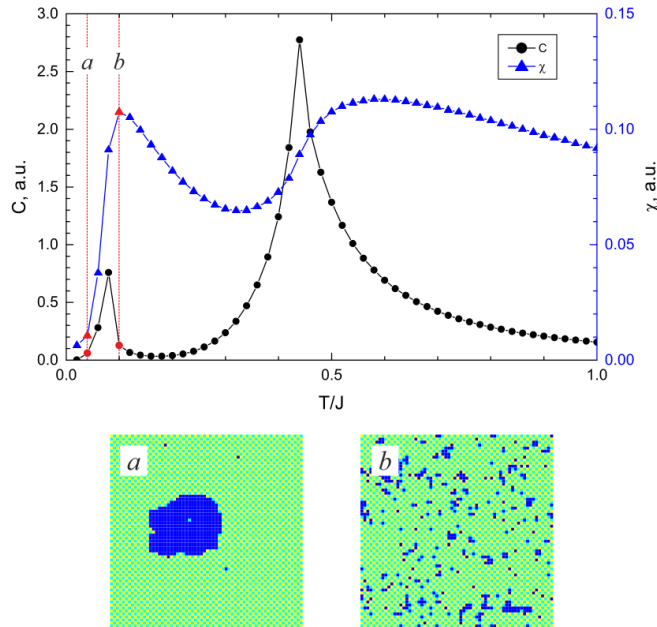


Рисунок 5: Температурные зависимости теплоёмкости и магнитной восприимчивости для AFM фазы при  $n=0.1$ ,  $\Delta = 0.5$ ,  $V=0.1$ ,  $J=1$ . Высокотемпературный пик соответствует антиферромагнитному упорядочению изинговского типа в спиновой подсистеме при температуре  $\approx 0.45$  J. Низкотемпературный пик соответствует формированию доменов фазы зарядовых центров ( $[\text{CuO}_4]^{5-}$ ). На снимках мгновенных состояний представлено состояние системы ниже(а) и выше(б) точки фазового расслоения. Снимки, в целях лучшей визуализации шахматной структуры приведены для фрагментов  $64 \times 64$ . Синим обозначен заряд (узлы с  $\langle S_z \rangle = 1$ ), желтым и зеленым значения спина на узле ( $\langle S_z \rangle = \pm 1/2$ ).

В дальнейшем представленные результаты были обобщены в виде фазовых диаграмм в переменных  $T - \Delta$  (Рисунок 6) и  $T - n$  (Рисунок 7). Рассматривались два случая  $J = 1$ ,  $V = 1$ ,  $-1 \leq \Delta \leq 2.5$  для исследования фазовой диаграммы в переменных  $(\Delta, T)$  в пределе «слабого» обмена, и  $J = 1$ ,  $V = 0.1$ ,  $-2 \leq \Delta \leq 2.5$  в пределе «сильного» обмена. В пределе

«слабого» обмена положение пика на температурной зависимости теплоёмкости примерно (из-за конечных размеров системы) соответствует температуре перехода из неупорядоченного (NO) в некоторое упорядоченное состояние. Сравнивая зависимости теплоёмкости и спиновой восприимчивости (рис. 5), получаем, что при  $\Delta < 1.5J$  зарядовое упорядочение имеет место при низких температурах, а при  $\Delta > 1.5J$  спиновое упорядочение AFM существует при  $T < 0.48J$ . Непосредственное исследование состояния решётки подтверждает этот вывод.

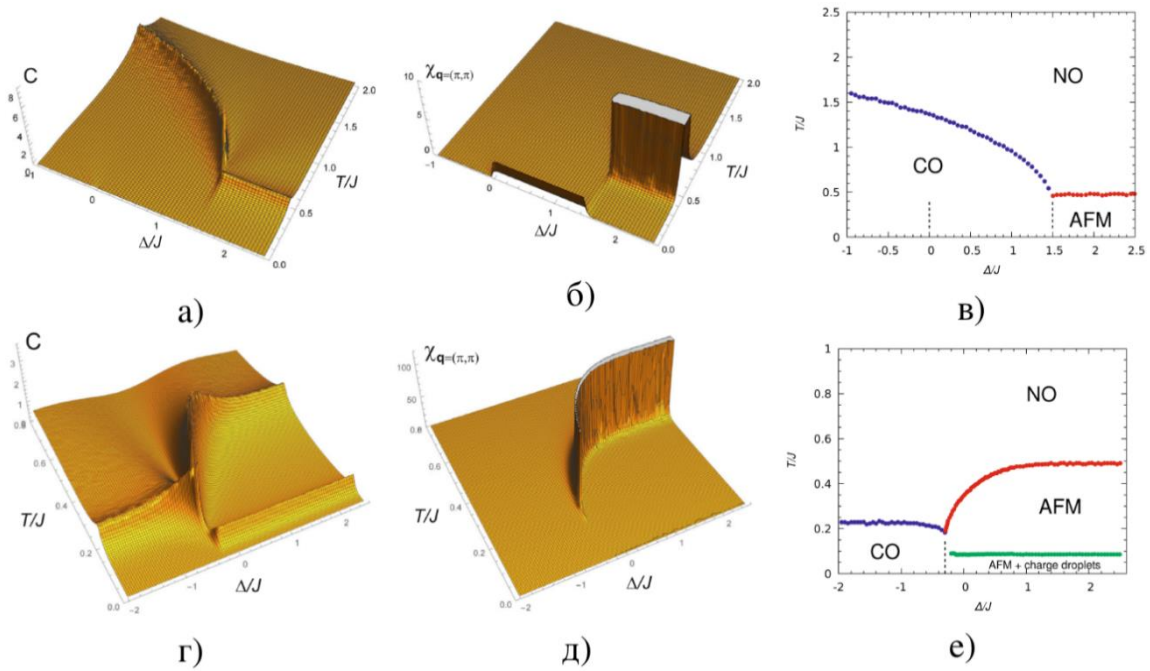


Рисунок 6: Температурные зависимости (а) теплоёмкости, (б) магнитной восприимчивости и (в) фазовая диаграмма, построенная по результатам Монте-Карло при  $n = 0.1$ ,  $J = 1$ ,  $V = 1$  в пределе «слабого» обмена. Температурные зависимости (г) теплоёмкости и (д) магнитной восприимчивости, а также (е) фазовые диаграммы при  $\Delta = 1$ ,  $J = 1$ ,  $V = 0.1$  отражающие наличие области фазового расслоения магнитной и зарядовой систем в пределе «сильного» обмена.

В пределе «сильного» обмена температурные зависимости теплоёмкости при  $\Delta > -0.25J$  демонстрируют два последовательных фазовых перехода, а температурная зависимость восприимчивости не имеет пика при низких температурах. Видно, что фазовое расслоение на фазы зарядовых центров и антиферромагнитного спинового порядка существует для всего диапазона  $n$ . Примечательно, что пик теплоёмкости, соответствующий фазовому расслоению, слабо зависит от  $n$ . Зависимости восприимчивости показывают, что зарядовое допирование подавляет дальний спиновый порядок. Если при  $|n| < 1/2$  в матрице AFM образуются капли заряда, то при  $|n| > 1/2$  из случайно распределенных спиновых центров образуются домены AFM фазы при понижении температуры.



Непосредственное исследование состояния системы показывает, что после AFM-упорядочения в спиновой подсистеме, разбавленной случайно распределенными заряженными примесями, происходит конденсация примесей в капельках заряда. В этот момент матрица AFM выталкивает заряды, чтобы минимизировать поверхностную энергию, связанную с примесями. Заметим, что в пределе «слабого» обмена заряженные примеси остаются хаотично распределенными по матрице AFM вплоть до  $T = 0$ , а также заряженные примеси остаются хаотично распределенными в фазе CO, так как для ближнего взаимодействия энергии всех возможных распределения дополнительных зарядов по матрице CO одинаковы.

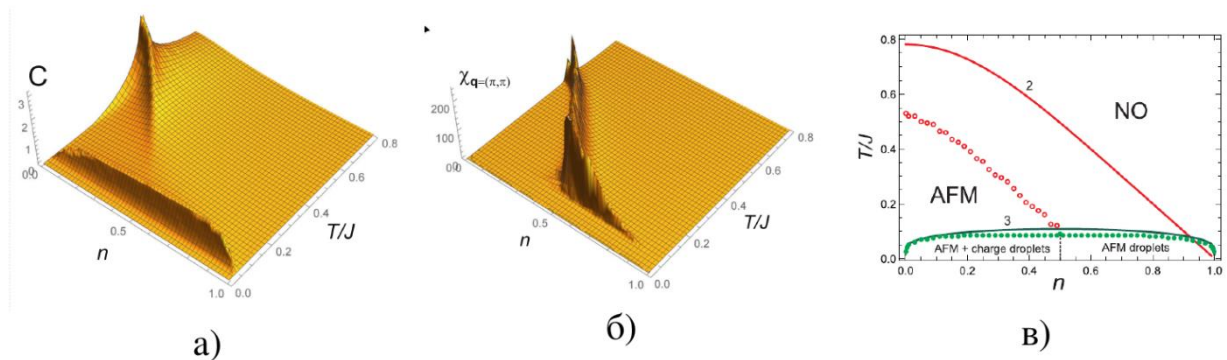


Рисунок 7: Температурные зависимости (а) теплоёмкости, (б) магнитной восприимчивости и (в) фазовая диаграмма в переменных  $T$ – $n$ . Полые кружки показывают результаты Монте-Карло для максимумов восприимчивости при AFM переходе, а заполненные кружки показывают максимумы удельной теплоёмкости при образовании зарядовой «капли». Сплошные линии 2 и 3 показывают значение критической температуры в приближении среднего поля.

Детальное сопоставление значений теплоёмкости и магнитной восприимчивости, получаемых в рамках методов среднего поля и Монте-Карло, показало, что наблюдается качественное, и в некоторых случаях даже количественное совпадение результатов (для области высоких температур). Главным образом расхождения вызваны систематическими неточностями приближения среднего поля для описания критических флуктуаций и парамагнитного отклика при низких температурах. На рис.6 представлены результаты приближения Бете для метода среднего поля, где вместо уединённого узла решётки рассматривается кластер из нескольких узлов в самосогласованном поле. С ростом размера кластера растет и размер попадающих в рассмотрение флуктуаций, и разница в результатах между методами среднего поля и Монте-Карло сокращается (Рисунок 8), что подтверждает предыдущий тезис.

Концентрационные зависимости теплоёмкости и восприимчивости представлены на Рисунок 8. Они показывают, что фазовое расслоение допированных зарядов и ближнего спинового порядка существует во всем диапазоне концентраций. Примечательно, что пик

теплоёмкости, соответствующий фазовому расслоению, слабо зависит от концентрации. Приближение среднего поля ожидаемо дает завышенную оценку критической температуры антиферромагнитного перехода. Данный эффект можно объяснить тем, что в методе Монте-Карло учитываются вклад температурных флуктуаций в рамках приближения ближайших соседей. Оценка температуры фазового расслоения, исходя из свободной энергии неоднородного состояния, совпадает с результатами Монте-Карло, что объясняется тем, что в рассматриваемой модели (1) расслоившиеся фазы не взаимодействуют между собой напрямую (т.е. через какие-либо обменные взаимодействия). Зависимости восприимчивости показывают, что допирование заряда действительно подавляет дальний спиновый порядок. С понижением температуры при  $|n| < 1/2$ , капли заряда образуются в матрице антиферромагнетика, при  $|n| > 1/2$  хаотически распределенные спиновые центры образуют капли антиферромагнетика в массиве заряда.

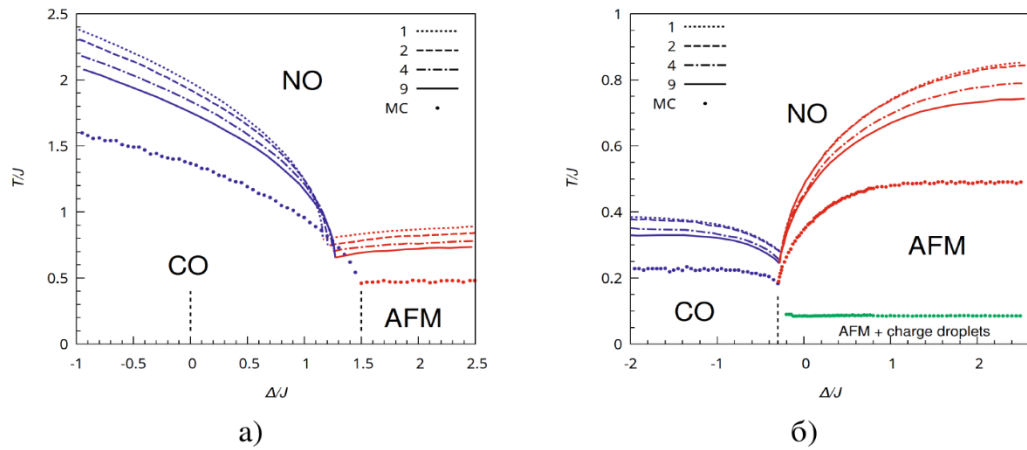


Рисунок 8: Фазовые диаграммы в рамках приближения Бете для метода среднего поля а)  $V/\tilde{J} = 1$  («слабый» обмен), б)  $V/\tilde{J} = 0.1$  («сильный» обмен). Маркерами отмечены данные Монте-Карло, линиями – среднего поля для различных вариантов размера кластера Бете: 1 – обычное СП, 2 – 2 узла в кластере Бете, 4 – 4 узла в кластере Бете, 9 – 9 узлов в кластере Бете.

Относительно набора реализуемых фаз показано, что поведение модельной системы качественно различается в случаях «сильного» ( $\tilde{J} > V$ ) и «слабого» ( $\tilde{J} < V$ ) обмена.

В случае «слабого» ( $\tilde{J} < V$ ) обмена все фазы основного состояния (COI, COII, COIII) соответствуют зарядовому упорядочению (CO) типа шахматной доски. При этом в фазе COI нет спиновых центров ( $\text{Cu}^{2+}$ ), в фазах COII и COIII одна из подрешеток занята зарядовыми центрами знака, совпадающего со знаком допируемого заряда. Вторая подрешетка, при половинном заполнении заселённая зарядовыми центрами, с возрастанием допирования сначала заполняется спиновыми центрами (фаза COIII), затем спиновые центры замещаются зарядами противоположного знака (фаза COII). Ферромагнитная FIM фаза при малых концентрациях допированного заряда в рамках метода Монте-Карло слабо отличима от фазы AFM. Ферромагнитное поведение проявляется, когда по мере роста концентрации

допируемые зарядовые центры, испытывающие сильное кулоновское отталкивание, заселяют одну из подрешеток.

Фазовая диаграмма ВТСП купрата, в случае «сильного» ( $\tilde{J} > V$ ) обмена ( $\Delta=0.8$ ,  $V=0.625$ ,  $\tilde{J} = 1$ ), при учете транспортных эффектов представлена на Рисунок 9. Данная фазовая диаграмма согласуется с ранее полученной авторами [6] путём обобщения экспериментальных данных. Таким образом, можно считать фазовую диаграмму ВТСП купрата, представленную на Рисунок 9 подтверждённой экспериментом. Необходимо отметить, что в случае «сильного» ( $\tilde{J} > V$ ) обмена на фазовой диаграмме реализуются только две фазы: COI и AFM. При этом в фазе COI зарядовые центры равномерно распределены в обеих подрешетках, а спиновые центры отсутствуют; фаза AFM при понижении температуры демонстрирует фазовое расслоение на чистую антиферромагнитную фазу и фазу плотно сжатых зарядовых центров («зарядовую каплю», примесную нуклеацию). Можно предположить, согласно [14], что при учете транспортных эффектов в случае сильного обмена эффект фазового расслоения сохраняется, а фаза плотно сжатых зарядовых центров эволюционирует в область сосуществования зарядового и сверхпроводящего порядка.

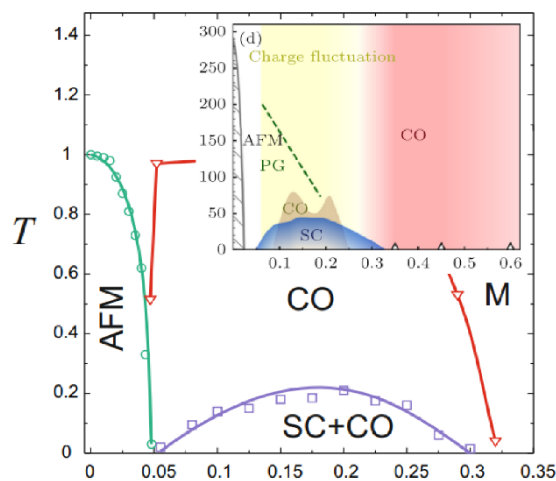


Рисунок 9: Фазовая диаграмма модельного купрата, с учетом транспортных эффектов ( $\Delta=0.8$ ,  $V=0.625$ ,  $\tilde{J} = 1$ ), на вставке экспериментальная фазовая диаграмма [6].

Вид диаграмм состояния модельного купрата (Рис.5,7) при  $\Delta > 0$  согласуется с результатами модели Блюма-Капеля [15; 16], модели BEG [17] и модели Изинга с подвижными заряженными примесями [18]. Наличие области фазового расслоения на фазовой диаграмме согласуется с результатами расширенной модели Хаббарда [7; 8; 19-22]. Установленные закономерности зарядового и магнитного порядка, представленные в виде фазовых диаграмм в переменных  $T-\Delta$ ,  $T-n$ , а также фазовой диаграммы основного состояния в переменных  $n-\Delta$  (Рис.7,5), не противоречат экспериментальной фазовой диаграмме  $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$ , включающей области: объёмной сверхпроводимости, зарядового

порядка, спинового порядка, полученных, из данных XRD [23], типичной фазовой диаграмме купрата [4] и модельной  $T-n$  фазовой диаграмме купрата, полученной в приближении среднего поля [3].

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

### Основные результаты и выводы диссертации

1. В рамках метода Монте-Карло рассмотрен атомный (квазистатистический) предел спин-псевдоспиновой модели квазидвумерного ВТСП купрата, который сводится к рассмотрению локальных и нелокальных заряд-зарядовых корреляционных эффектов и межузельных обменных взаимодействий между  $[\text{CuO}_4]^{6-}$  с пренебрежением эффектами переноса заряда в плоскости  $\text{CuO}_2$ .
2. Разработан и реализован оригинальный репличный безобменный вариант алгоритма Кавасаки для атомного предела спин-псевдоспиновой модели ВТСП купрата, обеспечивающий кинематическое сохранение концентрации допированного заряда и адаптированный к исполнению на связке GPU-CPU, что позволяет рассчитать теплоемкость и магнитную восприимчивость моделируемого объекта.
3. Проведено сопоставление полученных значений теплоёмкости и магнитной восприимчивости с результатами метода среднего поля. Качественное, в некоторых случаях, даже количественное совпадение результатов позволяет рекомендовать представленный в работе оригинальный вариант метода Монте-Карло для исследования зарядового и магнитного упорядочения в других сильнокоррелированных системах.
4. Из анализа данных моделирования построены фазовые диаграммы, отражающие зарядовое и магнитное упорядочение в ВТСП купратов в переменных  $T - \Delta$ ,  $T - n$ , где  $\Delta = U/2$  – параметр локальных зарядовых корреляций, а  $n$  – концентрация допированного заряда. Обнаружено, что поведение системы сильно зависит от знака и величины параметра локальных зарядовых корреляций  $\Delta$ , стабилизирующего либо зарядово упорядоченную фазу (CO) при  $\Delta < 0$ , либо фазу с антиферромагнитным порядком (AFM) при  $\Delta > 0$ .
5. Выявлены закономерности зарядового и магнитного упорядочения в ВТСП купратах в случаях «слабого» ( $V/\tilde{J} = 1$ ) и «сильного» ( $V/\tilde{J} = 0.1$ ) обмена, где  $V$  – параметр нелокальных заряд-зарядовых корреляций (экранированное кулоновское отталкивание),  $\tilde{J}$  – нормированный параметр обменного взаимодействия между  $[\text{CuO}_4]^{6-}$ . В случае «слабого» обмена, за счет сильного

кулоновского отталкивания между зарядовыми центрами, формируются ряд экзотических, но однородных фаз, а в случае «сильного» обмена возникает фазовое расслоение. В случае «сильного» обмена в AFM фазе наблюдается два последовательных фазовых перехода: сначала возникновение антиферромагнитного упорядочения при  $T=T_{AFM}$  в подсистеме спиновых центров  $[CuO_4]^{6-}$ , разбавленного случайно распределенными центрами  $[CuO_4]^{5-}$ , концентрация которых ассоциируется с допированным зарядом, затем формирование «зарядовых капель» (примесной нуклеации центров  $[CuO_4]^{5-}$ ) при  $T=T_{PS}$ .

В целом, полученные результаты работы подтвердили, что даже такой простой подход к моделированию закономерностей зарядового и магнитного упорядочения в ВТСП купратах позволяет получить качественное согласие с данными эксперимента и результатами аналитического анализа методом среднего поля. Полученные методом Монте-Карло фазовые диаграммы согласуются с результатами среднего поля и не противоречат имеющимся теоретическими и экспериментальными данным. Температуры перехода в приближении среднего поля, как правило, превышают таковые в методе Монте-Карло, что объясняется учетом вклада температурных флуктуаций в методе Монте-Карло. При этом аналитическая оценка температуры фазового расслоения очень близка к результатам метода Монте-Карло, что говорит о том, что природа фазово-расслоённого состояния достаточно хорошо описывается в рамках простого феноменологического построения Максвелла.

### **Перспективы дальнейшей разработки темы**

В дальнейшем планируется включение в модель транспортных эффектов, увеличение размера системы до субмикронных размеров (текущий размер  $(100 \times 100) \div (256 \times 256)$  узлов или  $(20 \times 20) \div (50 \times 50)$  нм) и учёт локального искажения параметров гамильтониана допированными примесями.

### **СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ И ЛИТЕРАТУРЫ**

1. Bednorz J., Mueller K. Possible High  $T_C$  Superconductivity in the  $Ba-La-Cu-O$  System // Zeitschrift für Physik B. — 1986. — Т. 64. — С. 189—193.
2. Moskvina A. S. Pseudospin  $S=1$  description of the cuprate complexity: the charge triplets model // Journal of Physics: Conference Series. — 2015. — Март. — Т. 592. — С. 012076. — ISSN 1742-6596. — DOI: 10.1088/1742-6596/592/1/012076.
3. Москвин А.С., Панов Ю.Д. Природа псевдощелевой фазы ВТСП купратов // ФТТ. — 2020. — Т. 62, № 9. — С. 1390. — ISSN 0367-3294. — DOI: 10.21883/FTT.2020.09.49759.06H.
4. Atomic-Scale Electronic Structure of the Cuprate d-Symmetry Form Factor Density Wave State / M. H. Hamidian, S. D. Edkins, C. K. Kim, J. C. Davis, A. P. Mackenzie, H. Eisaki, S. Uchida,

- M. J. Lawler, E.-A. Kim, S. Sachdev, K. Fujita // *Nature Physics*. — 2016. — Feb. — Vol. 12, issue 2, no. 2. — P. 150–156. — ISSN 1745-2481. — DOI: 10.1038/nphys3519.
5. Vishik I. M. Photoemission Perspective on Pseudogap, Superconducting Fluctuations, and Charge Order in Cuprates: A Review of Recent Progress // *Reports on Progress in Physics*. — 2018. — Apr. — Vol. 81, no. 6. — P. 062501. — ISSN 0034-4885. — DOI: 10.1088/1361-6633/aaba96. 19
6. Li Q.-Z., Zhang S.-L., Peng Y.-Y. Resonant inelastic X-ray scattering study of charge density waves and elementary excitations in cuprate superconductors // *Acta Physica Sinica*. — 2024. — T. 73, № 19. — C. 197401. — ISSN 1000-3290. — DOI: 10.7498/aps.73.20240983.
7. Kapcia K., Kłobus W., Robaszkiewicz S. Charge Orderings and Phase Separations in the Atomic Limit of the Extended Hubbard Model with Intersite Density-Density Interactions // *ACTA PHYSICA POLONICA A*. — 2010. — Aug. — ISSN 0587-4246.
8. Kapcia K. Interplay and Competition Between Superconductivity and Charge Orderings in the Zero-Bandwidth Limit of the Extended Hubbard Model with Pair Hopping and on-Site Attraction // *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*. — 2013. — Aug. 1. — Vol. 26, no. 8. — P. 2647–2650. — ISSN 1557-1947. — DOI: 10.1007/s10948-013-2152-1.
9. Jin Z., Ismail-Beigi S. First-Principles Prediction of Structural Distortions in the Cuprates and Their Impact on the Electronic Structure // *Physical Review X*. — 2024. — Дек. — Т. 14, № 4. — ISSN 2160-3308. — DOI: 10.1103/physrevx.14.041053.
10. Kawasaki K. Diffusion Constants near the Critical Point for Time-Dependent Ising Models. I // *Phys. Rev.* — 1966. — Май. — Т. 145, вып. 1. — С. 224—230. — DOI: 10.1103/PhysRev.145.224.
11. Биндер К., Хеерман Д. В. Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике / под ред. П. с англ. В.Н. Задкова. — Москва : Наука, 1995.
12. Wolff U. Collective Monte Carlo Updating for Spin Systems // *Physical Review Letters*. — 1989. — Jan. — Vol. 62, no. 4. — P. 361–364. — ISSN 0031-9007. — DOI: 10.1103/PhysRevLett.62.361.
13. Earl D. J., Deem M. W. Parallel Tempering: Theory, Applications, and New Perspectives // *Physical Chemistry Chemical Physics*. — 2005. — Vol. 7, no. 23. — P. 3910. — ISSN 1463-9076, 1463-9084. — DOI: 10.1039/b509983h.
14. Moskvina A., Panov Y. Effective-Field Theory for Model High- $T_c$  Cuprates // *Condensed Matter*. — 2021. — Sept. — Vol. 6, issue 3, no. 3. — P. 24. — ISSN 2410-3896. — DOI: 10.3390/condmat6030024.
15. Blume M. Theory of the First-Order Magnetic Phase Change in  $\text{UO}_2$  // *Phys. Rev.* — 1966. — Янв. — Т. 141, № 2. — С. 517—524. — DOI: 10.1103/PhysRev.141.517.
16. Capel H. W. On the Possibility of First-Order Phase Transitions in Ising Systems of Triplet Ions with Zero-Field Splitting // *Physica*. — 1966. — Май. — Т. 32, № 5. — С. 966—988. — DOI: 10.1016/0031-8914(66)90027-9. 20
17. Blume M., Emery V. J., Griffiths R. B. Ising Model for the  $\lambda$  Transition and Phase Separation in  $\text{He}_3\text{-He}_4$  Mixtures // *Physical Review A*. — 1971. — 1 сент. — Т. 4, № 3. — С. 1071—1077. — DOI: 10.1103/PhysRevA.4.1071.
18. Семкин С. В., Смагин В. П. Приближение Бете в модели Изинга с подвижными примесями // *Физика твердого тела*. — 2015. — Т. 57, № 5. — С. 926—931.
19. Kapcia K., Robaszkiewicz S., Micnas R. Phase Separation in a Lattice Model of a Superconductor with Pair Hopping // *Journal of Physics: Condensed Matter*. — 2012. — May 30. — Vol. 24, no. 21. — P. 215601. — ISSN 0953-8984, 1361-648X. — DOI: 10.1088/0953-8984/24/21/215601.
20. Kapcia K. Metastability and Phase Separation in a Simple Model of a Superconductor with Extremely Short Coherence Length // *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*. — 2014. — Apr. — Vol. 27, no. 4. — P. 913–917. — ISSN 1557-1939, 1557-1947. — DOI: 10.1007/s10948-013-2409-8.

21. Kapcia K. Electron Phase Separations Involving Superconductivity in the Extended Hubbard Models with Pair Hopping Interaction // Acta Physica Polonica A. — 2015. — Feb. — Vol. 127, no. 2. — P. 204–206. — ISSN 0587-4246, 1898-794X. — DOI: 10.12693/APhysPolA.127.204.
22. Magnetic Orderings and Phase Separations in a Simple Model of Insulating Systems / K. J. Kapcia, S. Murawski, W. Kłobus, S. Robaszkiewicz // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. — 2015. — Nov. — Vol. 437. — P. 218–234. — ISSN 03784371. — DOI: 10.1016/j.physa.2015. 05.074.
23. Stripe Order in Superconducting  $La_{2-x}Ba_xCuO_4$  / M. Hucker, M. v. Zimmermann, G. D. Gu, Z. J. Xu, J. S. Wen, G. Xu, H. J. Kang, A. Zheludev, J. M. Tranquada // Physical Review B. — 2011. — 17 марта. — Т. 83, № 10. — С. 104506. — DOI: 10.1103/PhysRevB.83.104506.

## ПУБЛИКАЦИИ АВТОРА ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

*Статьи в рецензируемых научных журналах, определенных ВАК РФ и Аттестационным советом УрФУ:*

1. Panov Y.D. Competition of spin and charge orders in a model cuprate / Y.D. Panov, A.S. Moskvina, **A.A. Chikov**, I.L. Avvakumov // Journal of Superconductivity and Novel Magnetism. 2016. Vol. 29. № 4. pp. 1077-1083; 0.4 п.л./0.1 п.л. (Scopus, WoS).
2. Panov Y.D. Competition of spin and charge orders in a model cuprate / Panov Y.D., Moskvina A.S., **Chikov A.A.**, Avvakumov I.L. // Journal of Low Temperature Physics. 2016. Vol. 185. № 6. pp. 409-416; 0.4 п.л./0.1 п.л. (Scopus, WoS).
3. Panov Y.D. The ground-state phase diagram of 2D spin-pseudospin system/ Panov Y.D., Moskvina A.S., **Chikov A.A.**, Budrin K.S. // Journal of Low Temperature Physics. 2017. Vol. 187. № 5-6. PP. 646-653; 0.4 п.л./0.1 п.л. (Scopus, WoS).
4. Panov Yu.D. Unconventional spin-charge phase separation in a model 2D cuprate/ Panov Yu.D., Budrin K.S., **Chikov A.A.**, Moskvina A.S. // JETP Letters. 2017. Vol.106. №7. pp. 440-445; 0.3 п.л./0.4 п.л. (Scopus, WoS).
5. **Chikov A.** Phase separation in the ground state of the model 2D spin-pseudospin system / **Chikov A.**, Panov Yu., Moskvina A., Budrin K. // Acta Physica Polonica A. 2018. Vol. 133. № 3. pp. 432-434; 0.2 п.л./0.1 п.л. (Scopus, WoS).
6. Panov Y.D. Phase diagrams of a 2D dilute antiferromagnetic Ising model with charged impurities/ Panov Y.D., Budrin K.S., Ulitko V.A., **Chikov A.A.**, Moskvina A.S. // Journal of Superconductivity and Novel Magnetism. 2019. Vol. 32. № 6. pp. 1831-1835; 0.3 п.л./ 0.1 п.л. (Scopus, WoS).
7. Панов Ю.Д. Приближение Бете для двумерной спин-псевдоспиновой системы / Панов Ю.Д., Москвина А.С., Улитко В.А., **Чиков А.А.** // Физика твердого тела. 2019. Т. 61. № 9. С. 1676-1681; 0.3 п.л./ 0.1 п.л.
8. Панов Ю.Д. Особенности конкуренции спиновой и псевдоспиновой подсистем в модельном купрате / Панов Ю.Д., Улитко В.А., Будрин К.С., Ясинская Д.Н., **Чиков А.А.** // Физика твердого тела. 2019. Т. 61. № 5. С. 822-827; 0.3 п.л./ 0.1 п.л.
9. Panov Y.D. Phase diagrams of a 2D Ising spin-pseudospin model/ Panov Y.D., Ulitko V.A., Budrin K.S., **Chikov A.A.**, Moskvina A.S. // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. 2019. Vol. 477. pp. 162-166; 0.2 п.л./ 0.1 п.л. (Scopus, WoS).
10. Yasinskaya D.N. Critical behavior of a 2D spin-pseudospin model in a strong exchange limit / Yasinskaya D.N., Ulitko V.A., **Chikov A.A.**, Panov Yu.D. // Acta Physica Polonica A. 2020. Vol. 137. № 5. pp. 979-981; 0.2 п.л./ 0.1 п.л. (Scopus, WoS).
11. Panov Yu. D. Monte Carlo simulation of a model cuprate / Panov Yu. D., Moskvina A.S., **Chikov A.A.**, Ulitko V.A. // Journal of Physics: Conference Series, 2021. Vol. 2043, № 1, 012007; 0.5 п.л./ 0.1 п.л. (Scopus).
12. Улитко В.А. Влияние локальных корреляций на фазовые состояния в модели «полу жестких» бозонов на квадратной решетке / Улитко В.А., Конев В.В., **Чиков А.А.**,

Панов Ю.Д. // Известия Российской академии наук. Серия физическая. 2024. Т. 88. № 9. С. 1438-1444; 0.4 п.л./ 0.1 п.л. (Белый список, уровень 3)

*Патенты и авторские свидетельства:*

13. **Чиков А.А.** Модуль реализующий разбиение плоской квадратной решетки на пары узлов для параллельного обновления конфигурации в процессе компьютерного моделирования решеточных моделей в приближении 26 ближайших соседей. Свидетельство о регистрации программы для ЭВМ RU 2022611533, от 26.01.2022. Заявка № 2022610702 от 24.01.2022.

14. **Чиков А.А.** Средство навигации по набору графических материалов. Свидетельство о регистрации программы для ЭВМ RU 2023613813, от 20.02.2023. Заявка № 2023612673 от 10.02.2023.

*Статьи в сборниках конференций:*

15. **Чиков А.А.** Моделирование систем со смешанной валентностью методом Монте-Карло / **Чиков А.А.**, Москвин А.С., Авакумов И.Л. // В сборнике: Информационная школа молодого ученого. II Всероссийская междисциплинарная молодежная научная конференция, сборник научных трудов, доклады. 2012. С. 227-237; 0.5 п.л./ 0.2 п.л.

16. Panov Y.D. Competition of spin and charge orders in a model cuprate/ Panov Y.D., Moskvin A.S., **Chikov A.A.**, Avvakumov I.L. // В сборнике: 20th International Conference on Magnetism, ICM 2015. Сер. "Physics Procedia" 2015. № 75. С. 332-339; 0.5 п.л./ 0.2 п.л.

17. Budrin K.S. The parallel Monte Carlo algorithm implementation on GPU for the systems with an Ising Hamiltonian under the condition of a constant charge density / Budrin K.S., Ulitko V.A., **Chikov A.A.**, Panov Yu.D. // В сборнике: Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ'2018). Короткие статьи и описания плакатов. 2018. С. 23-33; 0.5 п.л./ 0.2 п.л.

18. Budrin K.S. Unconventional phase separation in the model 2D spin-pseudospin system / Budrin K.S., Panov Y.D., Moskvin A.S., **Chikov A.A.** // В сборнике: EPJ Web of Conferences. Moscow International Symposium on Magnetism, MISM 2017. 2018. С. 11006; 0.5 п.л./ 0.2 п.л.

19. Улитко В.А. Температурные фазовые диаграммы модельных ВТСП-купратов / Улитко В.А., **Чиков А.А.**, Конев В.В., Ясинская Д.Н. // В сборнике: Сборник тезисов, материалы Двадцать пятой Всероссийской научной конференции студентов-физиков (ВНКСФ-25, Крым). Материалы конференции, тезисы докладов. 2019. С. 197; 0.06 п.л./0.02 п.л.

20. **Чиков А.А.** Фазовая диаграмма модельного ВТСП купрата / **Чиков А.А.**, Улитко В.А., Панов Ю. Д. Москвин А.С. // В сборнике: ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ XXI ВСЕРОССИЙСКОЙ ШКОЛЫ-СЕМИНАРА ПО ПРОБЛЕМАМ ФИЗИКИ КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ ВЕЩЕСТВА (СПФКС-21). 2021. С 271; 0.06 п.л./0.03 п.л.