**Аннотация**

**ТЗ-99**

**Тема: «Cтатистическая механика многочастичных систем: вычислительные методы и суперкомпьютерное моделирование»**

**Руководитель: Буровский Е.А.**

**Цель работы****:**

а) Анализ перколяционных свойств образцов случайной последовательной адсорбции больших линейных *k*-меров на квадратной решетке.

б) Разработка методов количественной калибровки «квантового эмулятора», формирования антиферромагнитного состояния ультрахолодных газов в оптических решетках.

**Используемые методы:**

Для осаждения *k*-меров на решетку и решения проблемы большой доли неудачных попыток осаждения использовалось составление списков свободных мест при заполнении, превышающем порог перколяции. Для разметки кластеров использовался обобщенный алгоритм Union-Find [Phys. Rev. E 64, 016706, 2001]. Для проверки наличия перколяционного кластера использовался модифицированный нами алгоритм Дж.Мачты [Phys. Rev. E 54, 1332 (1996)]. Нами разработан метод экономии памяти для моделирования случайной последовательной адсорбции, детально изложенный в нашей статье. Нами также разработан метод параллелизации алгоритма при помощи OpenMP, детально изложенный в нашей статье. Для характеристики связности рассматриваемой системы использовалось относительное число межвидовых контактов между частицами. Компьютерное моделирование проводилось на высокопроизводительном вычислительном узле с двумя процессорами Intel Xeon Platinum 8164, 2 GHz и 1536 GB RAM.

Для исследования формирования антиферромагнитного состояния в двумерной модели Хаббарда с половинным заполнением энергетической зоны разработана модификация метода диаграммного детерминантного квантового Монте-Карло [Phys. Rev. B **87**, 205102 (2013)], позволяющая учитывать нетривиальную форму образцов и варьировать граничные условия, соответствующие экспериментально исследуемым образцам ультрахолодных газов в оптических решетках.

**Эмпирическая база исследования:**

а) Наиболее существенные предыдущие исследования модели случайной последовательной адсорбции линейных *k*-меров на квадратной решетке, приведены в ссылках [6-18] в подготовленной по результатам проекта работе arXiv:1810.06800. Обзор полученных в них результатов представлен во введении.

б) Основной эмпирической базой исследования антиферромагнетизма ультрахолодных атомов послужила работа Mazurenko et al, Nature **545**, 462(2017).

**Результаты работы:**

При помощи компьютерного моделирования изучена связь между перколяционным переходом и переходом джамминга в модели изотропной случайной последовательной адсорбции. Рассмотрена случайная последовательная адсорбция длинных k-меров на квадратной решетке с периодическими граничными условиями. Представлен параллельный алгоритм, который очень эффективен с точки зрения его скорости и использования памяти. Мы обобщили теоретические результаты работы [G. Kondrat et al., Phys. Rev. E 022154, 2017] на случай периодических граничных условий и доказали что любой кластер при джамминге является перколяционным, и что в термодинамическом пределе перколяция всегда возникает до джамминга. Вычислены пороговые плотности перколяции и джамминга для длин *k*-меров вплоть до $2^{17}$. Ранее в литературе такие вычисления проводились только для $k\leq 512$. Найден новый режим поведения порога перколяции для больших $k$. В работе также проанализирована структура перколяционного и джаммингового состояний.

Проведен анализ антиферромагнитного поведения мезоскопических образцов различной формы в рамках модели Гейзенберга. Разработан вариант метода диаграммного детерминантного квантового Монте-Карло, позволяющий проводить исследование магнитного поведения модели Хаббарда с половинным заполнением на образцах мезоскопического размера, с учетом формы образца и различными граничными условиями. Вычислены температурные зависимости спиновых корреляционных функций, составляющие базу для количественной термометрии экспериментальных данных в экспериментах с ультрахолодными газами в оптических решетках.

**Степень внедрения, рекомендации по внедрению или итоги внедрения результатов НИР:**

Настоящий проект относится к фундаментальным исследованиям, обусловленным внутренней логикой развития науки, обеспечивающим готовность страны к большим вызовам, еще не проявившимся и не получившим широкого общественного признания, возможность своевременной оценки рисков, обусловленных научно-технологическим развитием.