Письма в ЖЭТФ, том 123, вып. 8, с. 574 – 586

Модель Китаева–Изинга-J_1-J_2: исследование методом ренормгруппы матрицы плотности

А. В. Капранов[+1)], *Р. Ш. Акзянов*[*]

[+]*Московский физико-технический институт, 141701 Долгопрудный, Россия*

[*]*Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН, 125412 Москва, Россия*

Поступила в редакцию 26 января 2026 г.
После переработки 20 марта 2026 г.
Принята к публикации 20 марта 2026 г.

Мы численно исследуем модель Китаева с дополнительным изинговским XX-взаимодействием между ближайшими и следующими по близости соседями (модель Китаева–Изинга-J_1-J_2), используя метод ренормгруппы плотности матрицы (*Density Matrix Renormalization Group* – DMRG). Такое дополнительное взаимодействие соответствует ближайшим и диагональным взаимодействиям на квадратной решетке. Фазовая диаграмма гексагональной модели Китаева состоит из низкозапутанных соизмеримых магнитных фаз и запутанной квантовой спиновой жидкости Китаева. Анизотропное изинговское взаимодействие приводит к запутанным квантовым парамагнитным фазам в фазовой диаграмме, которые в отсутствие магнитного поля ранее предсказывались для более сложных типов взаимодействия. Мы изучаем поведение энтропии запутанности и размерности связи (*bond dimension*) матричного произведения состояний (*matrix product state*) в зависимости от размера системы. Кроме того, мы предлагаем алгоритм оптимизации, чтобы предотвратить застревание DMRG в фазах с низкой запутанностью.

DOI: 10.7868/S3034576626040228

I. Введение. Квантовые спиновые жидкости (*quantum spin liquid* – QSL) – это сильно коррелированные состояния вещества, характеризующиеся отсутствием магнитного порядка на больших расстояниях из-за сильных квантовых флуктуаций. В результате спины электронов не образуют упорядоченной структуры, а их поведение остается жидкоподобным даже при нулевой температуре [1–5]. QSL достаточно широко изучены благодаря их богатой физике и необычным свойствам, включая нетривиальные топологические характеристики [6, 7] и наличие дробных возбуждений [8, 9]. QSL играют важную роль в понимании сильно коррелированных материалов [10–12] и имеют потенциал для использования в качестве платформ для топологически защищенных квантовых вычислений в будущем [13].

Гексагональная модель Китаева [13] является точно решаемой моделью, фазовая диаграмма которой содержит как QSL со щелью, так и бесщелевую $\mathbb{Z}_2$ QSL. Точное решение показывает, что в китаевской квантовой спиновой жидкости (*Kitaev spin liquid* – KSL) возникающие в этой модели квазичастицы – фермионы Майораны. Одним из ключевых преимуществ модели Китаева является ее простота, что делает ее многообещающим кандидатом для экспериментальной реализации. Однако поиск KSL остается сложной задачей из-за отсутствия параметра порядка в обычном для нас понимании [4, 14]. В последнее время различные соединения иридатов и рутенатов были предложены в качестве потенциальных платформ для реализации KSL [15–21].

Чтобы объяснить это поведение в реальных материалах, было предложено и тщательно изучено множество расширенных моделей Китаева. Исторически первым дополнением модели Китаева было включение изотропного взаимодействия Гейзенберга J между ближайшими соседями, которое возникает из-за прямого перекрытия d-орбиталей (модель Китаева–Гейзенберга) [15, 22–25]. Позже в работе [26] было показано, что между ближайшими соседями существует дополнительное анизотропное спин-спиновое взаимодействие, которое обычно называют Γ-взаимодействием (модель Китаева–Гейзенберга–Гамма). Γ-взаимодействие является высокофрустрированным и вторым по величине взаимодействием в китаевских материалах, что приводит к сложному взаимодействию с китаевскими членами [26–33]. Более реалистичная модель должна также учитывать эффекты тригонального расщепления орбиталей t_{2g}, вызывающих дополнительное анизотропное взаимодействие Γ', которое не допускается симметрией в отсутствие такого тригонального ис-

1)e-mail: kapranov.av@phystech.edu

кажения [26]. Были также исследованы другие вклады, присутствующие в реальных материалах, включая китаевское взаимодействие между вторыми соседями K_2 [34] и взаимодействия Гейзенберга между вторыми и третьими соседями J_2, J_3 [35, 36].

Другим подходом к реализации таких экзотических фаз является квантовая симуляция, где квантово-механические устройства используются для имитации и исследования различных квантово-механических систем [37, 38]. Квантовая симуляция является серьезным инструментом для изучения сильно запутанных состояний вещества, таких как QSL, где классические численные методы перестают работать. Поведение QSL симулировалось при помощи ридберговских атомов [39] (QSL типа торического кода), сверхпроводниковых квантовых процессоров [40] (QSL типа китаевского торического кода), оптических резонаторов [41] и программируемых квантовых устройств, таких как D-Wave DW-2000Q [42]. Недавно модель Китаева на квадратно-восьмиугольной решетке была промоделирована вариационным квантовым алгоритмом на сверхпроводниковом процессоре [43]. Другой подход к изучению KSL был продемонстрирован в недавней работе [44], где было выполнено квантовое расширение подпространства (*quantum subspace expansion*), отображающее спиновый гамильтониан на квантовый симулятор с той же топологией связи, что фактически создало квантовый цифровой двойник (*quantum digital twin*).

Несмотря на значительный прогресс в области квантовых вычислений и симуляций, относительно высокая частота ошибок в двухкубитных операциях представляется серьезной проблемой [45]. Одним из основных источников ошибок являются паразитные взаимодействия между ближайшими и следующими кубитами. Такая связь между кубитами описывается как XX- (или YY-) взаимодействие изинговского типа [46, 47]. В данной работе мы изучаем модель Китаева на квадратной решетке сверхпроводниковых кубитов. Однако из-за паразитных взаимодействий между сверхпроводниковыми кубитами полученная система отличается от чистой модели Китаева, что приводит к новой расширенной модели Китаева, которую мы анализируем.

Ренорм группа матрицы плотности (*Density Matrix Renormalization Group* – DMRG) – это мощный численный метод для вычисления свойств одномерных (1D) квантовых систем, который считается наиболее эффективной техникой для 1D систем [48, 49]. Алгоритм DMRG оптимизирует матричное произведение состояний (*matrix product state* – MPS) [50–52] – анзац, представленный в виде одномерной тензорной сети. Вычислительная сложность DMRG для системы с N узлами оценивается как $O(ND^3)$, где D – размер связи (*bond dimension*), который определяет характерный размер MPS и его восприимчивость к квантовой запутанности. Ключевой причиной успеха DMRG является то, что основные состояния локальных гамильтонианов подчиняются закону площади [53–56]. Это означает, что основные состояния локальных гамильтонианов могут быть точно представлены в виде MPS с фиксированным размером связи D, который растет экспоненциально с энтропией запутанности S, где S масштабируется с размером системы N. Следовательно, вычислительные затраты ограничены законом площади энтропии запутанности. Таким образом, DMRG является высокоэффективным для одномерных систем, где $D \sim \mathrm{poly}(N)$, но для двух- и трехмерных систем вычислительные затраты растут экспоненциально как $\exp(\sqrt{N})$ и $\exp(N^{2/3})$ соответственно.

Анизотропные взаимодействия в спиновых моделях могут приводить к возникновению несоизмеримых фаз, в которых периодичность магнитных моментов не совпадает с периодичностью кристаллической решетки. Это означает, что отношение волнового вектора магнитного порядка и обратных векторов решетки является иррациональным числом, что приводит к нулевому суммарному магнитному моменту. В расширенных моделях Китаева при нулевой температуре могут возникать два типа несоизмеримых фаз: спиральный (*spiral*) порядок и квантовый парамагнитный (QPM) порядок. Несоизмеримый спиральный порядок (часто называемый просто “несоизмеримым”) представляет собой фазу с дальним порядком, характеризующуюся ненулевым локальным магнитным моментом в каждой точке решетки, в то время как общая намагниченность остается нулевой. Это возникает из-за непрерывно модулируемых распределений спинов, таких как спиральные, циклоидальные или синусоидальные спиновые волны. Было показано, что модель Китаева с симметричным недиагональным анизотропным Г-взаимодействием ближайших соседей и симметричным диагональным изотропным J-взаимодействием ближайших соседей обладает богатой фазовой диаграммой, включая различные несоизмеримые порядки, согласующиеся с наблюдаемыми основными состояниями известных китаевских материалов [57, 58].

Еще одной несоизмеримой по отношению к кристаллической решетке фазой является QPM-фаза, которая обладает ближним порядком и нулевым суммарным магнитным моментом в каждой точке решетки. QPM был обнаружен в различных моделях, основанных на модели Китаева, включая модель Китаева-Г в отсутствие магнитного поля [59], ферромагнитную модель Китаева [60], модель Китаева-Г-Г′ [61] и модель Китаева-Г-J_1-J_3 в магнитном поле [62]. Наше исследование показывает, что анизотропные изинговские взаимодействия могут приводить к QPM в модели Китаева даже в отсутствие магнитного поля.

В данной работе мы используем DMRG для изучения модели Китаева–Изинга-J_1-J_2, которая отображает модель Китаева на квадратную решетку сверхпроводниковых кубитов. Это приводит к дополнительным XX взаимодействиям между ближайшими и следующими соседями из-за паразитного взаимодействия между кубитами. Мы получили основное состояние системы при помощи метода DMRG для решетки 10×10 с периодическими граничными условиями вдоль оси x и открытыми граничными условиями вдоль оси y. Фазовая диаграмма состоит из двух фаз QPM, в дополнение к фазам KSL и магнитным соразмерным фазам, таким как ферромагнитный (FM), неелевский (Neel), x- и y-страйповый (*stripy*) порядки. Мы анализируем скейлтинговый закон энтропии запутанности и максимального размера связи MPS во всех фазах. Кроме того, мы предлагаем новый алгоритм оптимизации для DMRG, чтобы улучшить сходимость метода в фазах с низкой запутанностью.

Данная статья организована следующим образом. В разделе II мы объясняем рассматриваемую модель и даем краткий обзор DMRG. В разделе III мы демонстрируем численные результаты для модели Китаева–Изинга-J_1–J_2. В частности, мы обсуждаем полученную фазовую диаграмму и спиновый структурный фактор (раздел III A), исследуем энтропию запутанности и максимальный размер связи в разных фазах (раздел III B) и представляем алгоритм оптимизации (раздел III C). И, наконец, мы обобщаем наши выводы в разделе IV.

II. Модель и метод. В этом разделе мы вводим расширенную модель Китаева с XX-взаимодействием ближайших и следующих соседей и даем краткий обзор метода DMRG.

A. Модель. Гексагональная модель Китаева [13] описывается гамильтонианом

$$H_{\text{Kitaev}} = J_x \sum_{\langle ij \rangle_x} S_i^x S_j^x + J_y \sum_{\langle ij \rangle_y} S_i^y S_j^y + J_z \sum_{\langle ij \rangle_z} S_i^z S_j^z, \quad (1)$$

где i, j являются узлами на гексагональной решетке, а $\langle ij \rangle_{x,y,z}$ обозначает NN-связь по линиям типа x-, y- и z- соответственно. Модель не имеет непрерывной глобальной спиновой симметрии, но обладает яркой локальной симметрией. Особое произведение спиновых операторов, принадлежащих одному шестиугольнику $W_p = 2^6 S_1^x S_2^y S_3^z S_4^x S_5^y S_6^z$, коммутирует с гамильтонианом (1) и часто называется оператором потока (*flux operator*, его также часто называют плакетным оператором – *plaquette operator*) (см. рис. 1). Эта модель является точно решаемой, и

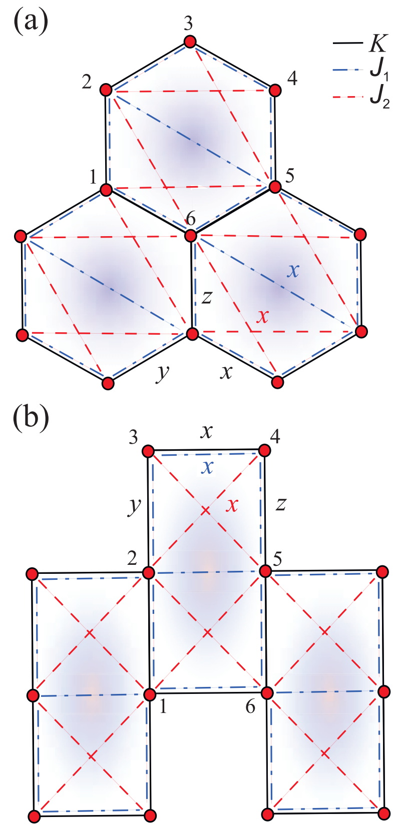

Рис. 1. (Цветной онлайн) Модель Китаева–Изинга-J_1-J_2 на гексагональной (a) и квадратной (b) решетках. Черные линии представляют чистое взаимодействие модели Китаева K, синие пунктирные линии с точками обозначают XX-взаимодействие ближайших соседей J_1, а красные пунктирные линии обозначают XX-взаимодействие следующих соседей J_2. Заштрихованные секторы обозначают спины, участвующие в расчете параметров магнитного порядка (6), (7)

основное состояние соответствует режиму без потоков (*flux-free*) с $W_p = +1$ для всех шестиугольников. Считая $J_x = J_y = J_z = K$, гамильтониан (1) принимает вид

$$H_{\text{Kitaev}} = K \sum_{\langle ij \rangle_a} S_i^\gamma S_j^\gamma, \quad (2)$$

где $\gamma = \{x, y, z\}$ и $a = \{x, y, z\}$. В этом режиме параметров основным состоянием модели Китаева является бесщелевая KSL.

В данной работе мы отображаем модель Китаева на квадратную решетку сверхпроводящих кубитов с той же топологией связи, что и в гамильтониане (2) (см. рис. 1), и из-за паразитных взаимодействий между кубитами мы включаем изинговские взаимодействия между ближайшими и следующими кубитами, что приводит к гамильтониану

$$H_{\text{extra}} = J_1 \sum_{\langle ij \rangle} S_i^x S_j^x + J_2 \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle} S_i^x S_j^x, \tag{3}$$

где $\langle ij \rangle$ и $\langle\langle ij \rangle\rangle$ обозначают ближайших и следующих соседей соответственно, J_1 и J_2 – их константы связи. Это и определяет модель Китаева–Изинга-J_1-J_2, которая расширяет модель Китаева, включая XX-взаимодействия ближайших и следующих соседей. Тогда полный гамильтониан имеет вид

$$H = H_{\text{Kitaev}} + H_{\text{extra}} = \\ = K \sum_{\langle ij \rangle_a} S_i^\gamma S_j^\gamma + J_1 \sum_{\langle ij \rangle} S_i^x S_j^x + J_2 \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle} S_i^x S_j^x, \tag{4}$$

где константы связи параметризуются как

$$K = \cos\varphi, \;\; J_1 = \sin\varphi\cos\alpha, \;\; J_2 = \sin\varphi\sin\alpha, \tag{5}$$

где φ изменяется от 0 до 2π, а α изменяется от 0 до π. Обратите внимание, что мы не рассматриваем α от 0 до 2π, потому что в промежутке от π до 2π нет ничего нового, только повторение той же картины, что и для α от 0 до π.

Мы вводим следующие параметры порядка для определения магнитных фаз

$$\sigma_{\text{I}} = \frac{1}{4}\left(\langle S_2^x S_3^x \rangle + \langle S_3^x S_5^x \rangle + \langle S_5^x S_6^x \rangle + \langle S_6^x S_2^x \rangle\right), \tag{6}$$

$$\sigma_{\text{II}} = \frac{1}{4}\left(-\langle S_2^x S_3^x \rangle + \langle S_3^x S_5^x \rangle - \langle S_5^x S_6^x \rangle + \langle S_6^x S_2^x \rangle\right), \tag{7}$$

где индексы 1,...,6 соответствуют точкам на шестиугольнике в решетке (рис. 1). В режиме KSL магнитный порядок отсутсвует и $\sigma_{\text{I}} = \sigma_{\text{II}} = 0$. Вместо магнитного, в KSL присутствует топологический порядок, а оператор потока $W_p = 2^6 S_1^x S_2^y S_3^z S_4^x S_5^y S_6^z = 1$ будет являться топологическим параметром порядка (см. раздел III A).

B. Ренормгруппа матрицы плотности. В данном разделе кратко обобщим ключевые аспекты DMRG и MPS анзаца. Более подробное обсуждение см. работы [63–66].

Рассмотрим решетку, в узлах которой расположены спины 1/2, и каждый узел описывается базисом состояний $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$. Многочастичная волновая функция такой системы имеет вид

$$|\psi\rangle = \sum_{i_1 i_2 \ldots i_N} \psi^{i_1 i_2 \ldots i_N} |i_1 i_2 \ldots i_N\rangle, \tag{8}$$

где $\psi^{i_1 i_2 \ldots i_N}$ представляет 2^N комплексных амплитуд, а $|i_1 i_2 \ldots i_N\rangle$ обозначает тензорное произведение $|i_1\rangle \otimes |i_2\rangle \otimes \cdots \otimes |i_N\rangle$ для 2^N-мерного векторного пространства N узлов. Аналогично, локальный многочастичный гамильтониан в этом базисе представляется как

$$\mathcal{H} = \sum_{\{i\},\{j\}} \mathcal{H}^{i_1 j_1 i_2 j_2 \ldots i_N j_N} |i_1 i_2 \ldots i_N\rangle \langle j_1 j_2 \ldots j_N| . \tag{9}$$

Наша цель – получить достаточно точное приближение основного состояния $|\psi_{\text{GS}}\rangle$ гамильтониана $\mathcal{H}$. Можно использовать метод точной диагонализации, но он ограничен небольшими системами, поскольку размерность гильбертова пространства (8) растет экспоненциально с размером системы N. Это ограничение известно как проблема роста размерности (*epxonential wall problem*) [67]. Чтобы преодолеть эту проблему, нам требуется вычислительный метод, который позволяет избежать необходимости явного хранения полных амплитуд волновых функций (8).

Одним из численных методов, позволяющих обойти проблему роста размерности, является DMRG [48, 49]. Этот алгоритм берет свое начало из численной ренормгруппы Уилсона [68, 69], ключевая идея которой заключается в разделении большой квантовой системы на более мелкие блоки, которые можно решить с помощью точной диагонализации. Такой подход оказался не очень эффективным для сильно коррелированных систем [49].

В DMRG процедура усечения (*truncation procedure*) является более точной, чем в предыдущих подходах, поскольку базис поворачивается таким образом, что для представления основного состояния требуется лишь небольшое количество состояний, а остальные состояния могут быть отброшены. Для повышения эффективности повороты базиса выполняются итеративно для нескольких узлов одновременно, а остальные узлы рассматриваются как окружение. Этот итеративный процесс позволяет оптимизировать базис по всем узлам решетки без необходимости полного преобразования гильбертова пространства за один шаг. В результате этот вариационный алгоритм позволяет получить волновые функции, выраженные в компактной форме, известной как MPS [70]. Современная формулировка DMRG основана на тензорных сетях, где алгоритм сразу начинается с MPS в качестве вариационного анзаца, а затем оптимизируются все его коэффициенты [51, 63, 71].

Вычислительная сложность оптимизации MPS от спина n до спина $n+1$ составляет $O(D^3)$, что приводит к общей сложности оптимизации, которая масштабируется как $O(ND^3)$, где D – размер связи, а N – размер системы. Для общего (нелокального) гамильтониана (9) размер связи D растет экспоненциально с энтропией запутанности, следуя $D \sim \exp(S)$ [54, 72]. Одновременно энтропия запутанности подчиняется скейлинговому закону, известному как закон объема, где $S \sim N$ и энтропия запутанности растет пропорционально объему системы. Следовательно, в общем случае размер связей растет экспоненциально с размером системы как $D \sim \exp(N)$.

Ключевым фактором успеха DMRG является закон площади: основное состояние многих физических систем часто можно точно представить с помощью MPS с фиксированным размером связи D [53, 54, 56, 73, 74]. Это означает, что энтропия запутанности S, вместо того чтобы быть экстенсивной величиной, пропорциональна, в лучшем случае, границе подсистемы при разложении. Для основного состояния локального гамильтониана (9), описывающего d-мерную систему линейного размера L, состоящую из $N = L^d$ узлов, энтропия запутанности масштабируется как

$$S \sim L^{d-1} = N^{(d-1)/d}, \tag{10}$$

$$D \sim \exp\left(L^{d-1}\right) = \exp\left(N^{(d-1)/d}\right). \tag{11}$$

В одном измерении ($d = 1$) энтропия запутанности остается постоянной $S \sim \mathrm{const}$ для систем с щелью в энергетическом спектре, это означает, что размер связи D также постоянен и не зависит от размеров системы N. Следовательно, вычислительная сложность для $1D$ масштабируется как $O(N)$. Для одномерных моделей без щели в спектре (критических) энтропия запутанности подчиняется логарифмическому закону роста пропорционально размерам системы $S \sim \ln(N)$, что приводит к полиномиальному росту размера связи $D \sim \mathrm{poly}(N)$. Это поведение известно как логарифмическая поправка к закону площади [54].

В более высоких измерениях ($d = 2, 3$) вычислительная сложность значительно возрастает. Хотя система по-прежнему подчиняется закону площади, размер связи растет экспоненциально с размером системы как $\exp(\sqrt{N})$ и $\exp(N^{2/3})$ для $d = 2, 3$. Тем не менее, DMRG остается более выгодным, поскольку его вычислительная стоимость растет как дробная степень N, в отличие от скейлинга $\exp(N)$ для методов вычисления перебором (*brute-force*), которые страдают от проклятия размерности [67].

В заключение отметим, что DMRG является высокоэффективным вычислительным методом, который стал доминирующим в исследованиях сильно коррелированных одномерных систем. Несмотря на рост вычислительной сложности в более высоких измерениях, DMRG по-прежнему широко используется для двумерных систем, особенно когда одно из измерений относительно мало, как в цилиндрических геометриях [75–78] (обзор по 2D DMRG см. [64]). Кроме того, DMRG успешно применяется к небольшим 3D молекулярным системам [79–83].

III. Численные результаты. В этом разделе приводятся численные результаты для модели Китаева–Изинга-J_1-J_2 (4), полученные с помощью DMRG. В частности, мы получаем фазовую диаграмму основного состояния системы на квадратной решетке 10×10 с $N = 100$ узлами и с периодическими граничными условиями вдоль оси x и открытыми граничными условиями вдоль оси y (раздел III A). Исследуется энтропия запутанности и максимальный размер связи как функции размера системы (раздел III B). Кроме того, вводится аналог адиабатической квантовой оптимизации для DMRG, чтобы предотвратить застревание в локальных минимумах и достичь глобального минимума энергии (раздел III C). Моделирование DMRG проводилось с погрешностью усечения (*truncation error*) менее 10^{-9}, размер подпространства Крылова равен 5, а количество проходов (*sweep*) равняется 35. Все вычисления проводились с использованием предложенного нами алгоритма оптимизации (см. раздел III C).

A. Фазовая диаграмма. Мы вычисляем параметры порядка σ_{I} (6), σ_{II} (7) и топологический параметр порядка $W_p = 2^6 S_1^x S_2^y S_3^z S_4^x S_5^y S_6^z$, как представлено в разделе II A и обобщено в табл. 1. Параметры порядка σ_{I} и σ_{II} указывают на наличие магнитного порядка, тогда как W_p характеризует топологический порядок. Как показано на рис. 2, в основном состоянии существует семь различных фаз: четыре с соразмерным порядком (FM, Neel, x- и y-stripy), две с квантовым парамагнитным порядком (обозначенные как QPM1 и QPM2) и фаза KSL. Мы вычисляем статический спиновый структурный фактор

$$S(\mathbf{k}) = \frac{1}{N}\sum_{ij}\left(\left\langle S_i^x S_j^x\right\rangle + \left\langle S_i^y S_j^y\right\rangle + \left\langle S_i^z S_j^z\right\rangle\right) e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)}, \tag{12}$$

где N – это количество узлов, а $\mathbf{r}_i$ обозначает радиус-вектор узла i.

Спиновый структурный фактор характеризует спин-спиновые корреляции в системе. На рисунке 3 брэгговские пики, соответствующие корреляциям $\langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j \rangle$, отображены в расширенной зоне Бриллюэна. Для соизмеримых магнитных фаз положе-

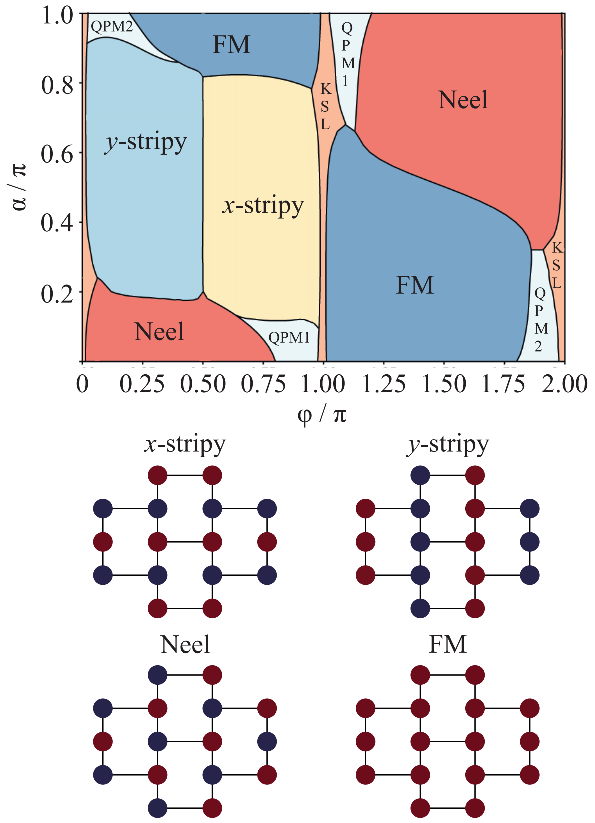

Рис. 2. (Цветной онлайн) Фазовая диаграмма модели Китаева–Изинга-J_1-J_2 вместе со схематическими конфигурациями спина для соизмеримых магнитных фаз. Красные (синие) точки представляют состояния со спином вверх (спином вниз) с $\langle S^x \rangle = +1/2$ ($\langle S^x \rangle = -1/2$)

ния пиков отражают симметрию решетки. Напротив, в несоизмеримых фазах QPM пики смещены и не соответствуют симметрии решетки. Таким образом, магнитную структуру можно определить по расположению брэгговских пиков в обратном пространстве. Кроме того, отметим, что спиновый структурный фактор может дать представление о свойствах запутанности системы [84], которые мы обсудим в разделе IV.

Мы вычисляем спин-спиновый коррелятор $\langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j \rangle$ между узлами i и j. Это значение определяет затухание спиновых корреляций с расстоянием $|i-j|$ и показано на рис. 4. В соизмеримых магнитных фазах функция спин-спиновой корреляции остается практически постоянной с расстоянием, что указывает на дальний порядок. Напротив, фазы KSL и QPM демонстрируют ближний порядок. В частности, фаза QPM характеризуется экспоненциальным затуханием корреляций, тогда как в фазе KSL спин-корреляции исчезают за пределами расстояния до второго соседа [85].

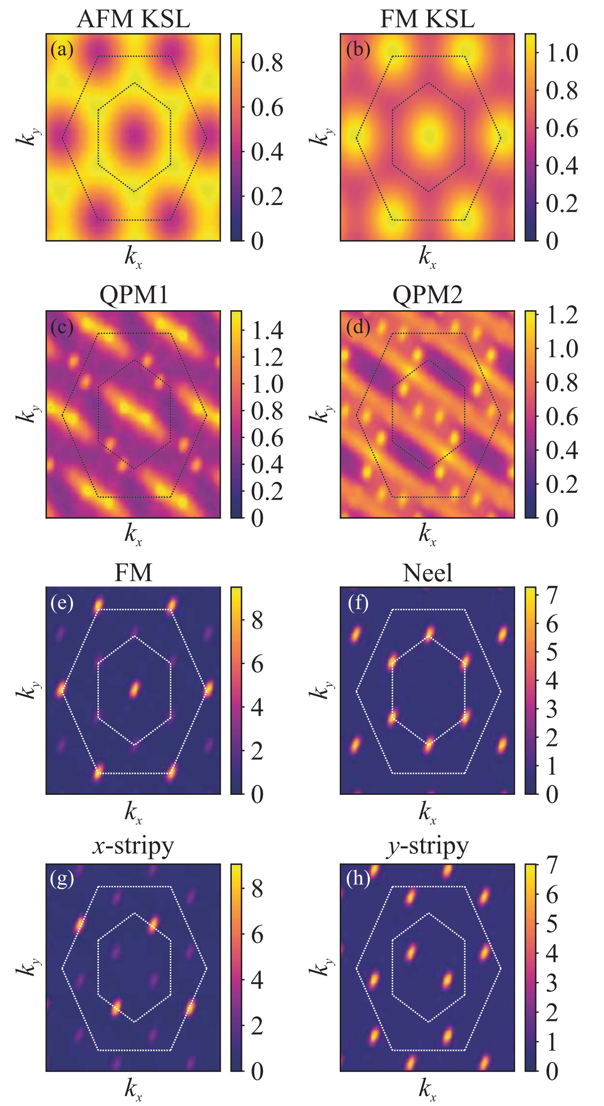

Рис. 3. (Цветной онлайн) Спиновый структурный фактор $S(\mathbf{k})$ модели Китаева–Изинга-J_1-J_2 в разных фазах. Большой черно-белый шестиугольник с пунктирной линией обозначает расширенную зону Бриллюэна, а внутренний шестиугольник представляет первую зону Бриллюэна. (a) – Фаза AFM KSL, построенная при $\alpha = 0$, $\varphi = 0$. (b) – Фаза FM KSL при $\alpha = 0$, $\varphi = \pi$. (c) – Фаза QPM1 при $\alpha = 0$, $\varphi = 0.85\pi$. (d) – Фаза QPM2 при $\alpha = 0$, $\varphi = 1.85\pi$. (e) – Фаза FM при $\alpha = 0$, $\varphi = 1.5\pi$. (f) – Фаза Нила при $\alpha = 0$, $\varphi = 0.5\pi$. (g) – Фаза x-stripy при $\alpha = 0.5\pi$, $\varphi = 0.75\pi$. (h) – Фаза y-stripy при $\alpha = 0.5\pi$, $\varphi = 0.25\pi$

Важно пояснить, как определяются границы фаз на рис. 2. В общем случае существует три возможных типа фазовых переходов.

Первый тип – это переход между топологической фазой KSL и топологически тривиальной фазой (любой другой фазой). В этом случае топологический

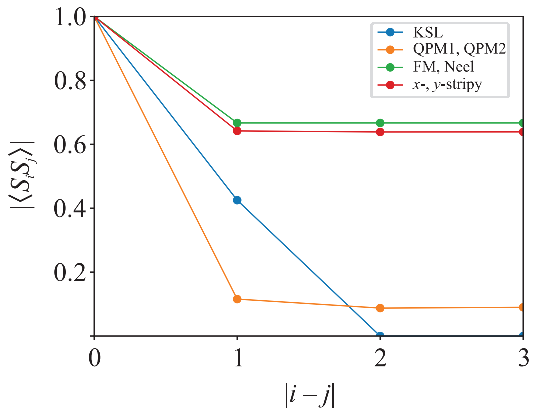

Рис. 4. (Цветной онлайн) Значения спин-спинового коррелятора в зависимости от расстояния между спинами $|i-j|$. Расчеты для разных фаз были выполнены при тех же значениях α и φ, что и на рис. 3

параметр порядка W_p резко падает до нуля в точке перехода. Поэтому мы определяем фазовый переход в той области параметров, где $W_p = 0.5$. Аналогичный сценарий применяется к переходам между различными соизмеримыми магнитными фазами, где параметр магнитного порядка $\sigma_{\mathrm{I,II}}$ принимает дискретные значения (0 или ± 0.5) в точке перехода в зависимости от фазы (см. табл. 1). Таким образом, в обоих случаях мы предполагаем, что фазовый переход происходит, когда значение параметра порядка уменьшается вдвое.

Другое поведение наблюдается при переходах из фазы QPM в соизмеримую магнитную фазу. В отличие от предыдущих случаев, здесь нет резкого разрыва в параметре порядка, что делает этот переход скорее кроссовером, нежели фазовым переходом. Анализируя пространственное распределение среднего магнитного момента в каждой точке решетки, мы определяем, что переход происходит, когда $|\sigma_{\mathrm{I,\ II}}| < 0.4$. Обратите внимание, что переход QPM–KSL соответствует первому случаю, описанному выше.

1. Китаевская квантовая спиновая жидкость. Как упоминалось в разделе II A, наша модель включает китаевское взаимодействие (1), которое приводит к появлению состояния KSL либо со щелью в энергетическом спектре, либо без. Для простоты мы предполагаем, что $J_x = J_y = J_z = K$ во вкладе от чистой модели Китаева (1), что соответствует KSL без щели. В этой фазе параметры магнитного порядка (6) и (7) исчезают (см. табл. 1), но остается нетривиальным топологический параметр порядка $W_p = 2^6 S_1^x S_2^y S_3^z S_4^x S_5^y S_6^z$ (см. рис. 1). В чистой модели Китаева этот параметр принимает значение $W_p = 1$. Однако в расширенных моделях Китаева $W_p = 1$ не может сохраняться на протяжении всей фазы KSL и демонстрирует флуктуации [86].

Состояние KSL существует в узком диапазоне параметров вблизи так называемых точек Китаева $\varphi = \{0, \pi, 2\pi\}$. Этот результат является ожидаемым, поскольку подобная фазовая структура типична для спиновых моделей с взаимодействиями Китаева, таких как модель Китаева–Гейзенберга [87, 88], модель K_1-K_2 [34] и модель Китаева–Гейзенберга–Гамма (или J-K-Г) [23, 26].

Как показано на рис. 3, вблизи точек Китаева возникают две различные фазы спиновой жидкости, в зависимости от знака константы взаимодействия Китаева $K = \cos\varphi$. При $K > 0$ система переходит в фазу ферромагнитной китаевской квантовой спиновой жидкости (FM KSL) (см. рис. 3a), характеризующуюся мягким пиком в точке Г. И наоборот, для $K < 0$ система реализует антиферромагнитную фазу китаевской квантовой спиновой жидкости (AFM KSL) (см. рис. 3b), где спиновый структурный фактор обладает широкими максимумами вокруг K-точек первой зоны Бриллюэна, аналогично фазе FM KSL. В обоих режимах KSL характеризуется делокализованными пиками Брэгга в спин-спиновых корреляциях (см. рис. 3a, b), что может указывать на сильную квантовую запутанность (см. раздел IV). Мы обозначаем обе фазы как KSL, поскольку они имеют одинаковые фундаментальные свойства. Примечательно, что как фаза KSL демонстрирует только короткодействующий порядок. Как показано на рис. 4, функция спин-спиновой корреляции остается ненулевой только для ближайших соседей [85].

2. Соизмеримые магнитные фазы. Хорошо известными фазами в моделях фрустрированного магнетизма являются соизмеримые магнитные фазы, такие как FM, Neel, x-stripy и y-stripy (см. рис. 2 и 3). В данной работе мы называем фазы x-stripy и y-stripy в контексте модели гексагональной структуры, отображенной на квадратную решетку, поскольку эта нотация более естественно согласуется с конфигурацией спинов, показанной в реальном пространстве на рис. 2. Однако для гексагональной решетки фаза y-stripy чаще называется зигзагообразной (*zigzag*) фазой.

Как показано в табл. 1, топологический параметр порядка исчезает во всех магнитных фазах, в то время как каждая магнитная фаза демонстрирует отдельное значение параметра порядка (6) или (7). Спин-спиновый коррелятор $\langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j \rangle$ остается неизменным для ближайших соседей даже на больших расстояниях, что указывает на дальний порядок (см.

рис. 4). Брэгговские пики спин-спиновых корреляций локализованы и сохраняют симметрию гексагональной решетки в обратном пространстве (см. рис. 3e–h). Эта локализация также может указывать на низкую степень запутанности в этих фазах (см. раздел IV).

3. Квантовый парамагнетизм. В целом, сильная фрустрация в расширенных моделях Китаева приводит к фазам, несоизмеримым с симметрией решетки. Эти фазы могут проявляться либо в виде несоизмеримого спирального магнитного порядка, либо в виде QPM фазы. В отличие от спирального порядка, QPM демонстрирует только короткодействующий порядок и имеет нулевой средний магнитный момент в каждой точке решетки. В предыдущих исследованиях QPM предсказан в моделях Китаева с симметричными недиагональными анизотропными взаимодействиями Γ и Γ' [59] в отсутствие магнитного поля. В отличие от этого, наша модель включает только диагональные анизотропные взаимодействия (китаевское и изинговские J_1, J_2) и не содержит никаких взаимодействий типа Γ. Это приводит к появлению фазы QPM без сопутствующего несоизмеримого спирального порядка в фазовой диаграмме.

QPM не имеет топологического порядка ($W_p = 0$) и имеет пространственно модулированные параметры порядка (см. табл. 1). Эти фазы стабилизируются вблизи точек Китаева и демонстрируют нулевой средний магнитный момент в каждой точке решетки. Первая фаза QPM (QPM1, см. рис. 2 и 3c) несоизмерима по направлению $\mathbf{b_1} = \frac{2\pi}{3}(\sqrt{3}, 1)$. Вторая фаза QPM (QPM2, см. рис. 2 и 3d) является несоизмеримой по обоим векторам решетки $\mathbf{b_1}$ и $\mathbf{b_2} = \frac{4\pi}{3}(1, 0)$. Обе фазы QPM являются сильно вырожденными и фрустрированными, что приводит к значениям энтропии запутанности, сравнимым с KSL состоянием (см. рис. 5) [89]. Брэгговские пики спин-спиновых корреляций частично делокализованы и сдвинуты (см. рис. 3c–d), что указывает на несоизмеримый магнитный порядок. Вместе с ближним порядком, характеризующимся экспоненциальным затуханием спин-спинового коррелятора с расстоянием (см. рис. 4), и нулевым средним магнитным моментом в каждой точке решетки, эти особенности являются отличительными чертами QPM. Отметим, что эта частичная делокализация может служить признаком высокозапутанного состояния (см. раздел IV).

B. Энтропия запутанности и размер связи. В этом подразделе мы анализируем энтропию запутанности и максимальное значение размера связи в разных фазах. Эти величины представлены на рис. 5 в зависимости от размеров системы.

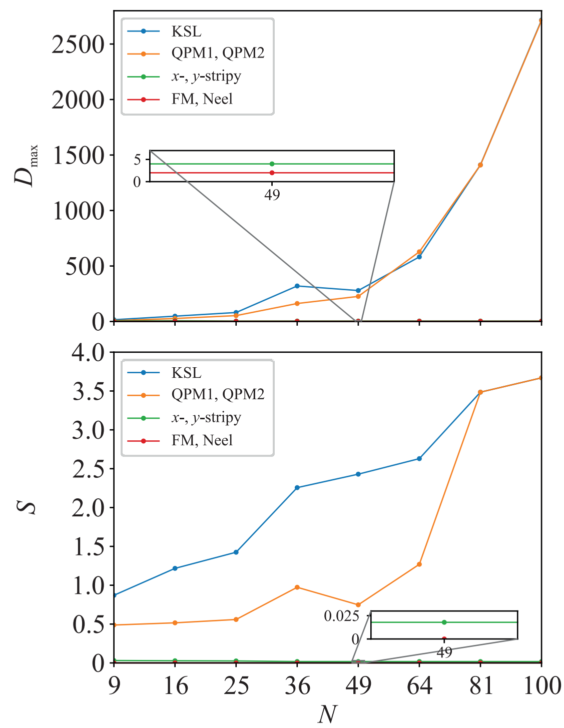

Рис. 5. (Цветной онлайн) Скейлинг энтропии запутанности (вверху) и максимального измерения связи (внизу) с размером системы. Расчеты для разных фаз были выполнены при тех же значениях α и φ, что и на рис. 3. Размер решетки N варьируется от 3×3 до 10×10

Таблица 1. Параметры порядка и энтропия запутанности для всех возможных фаз в модели Китаева–Изинга-J_1-J_2

Phase	W_p	$\sigma_{\rm I}$	$\sigma_{\rm II}$	S
KSL	1	0	0	$\sim\sqrt{N}$
QPM1	0	$-0.1\div-0.4$	$0.1\div0.4$	$\sim\sqrt{N}$
QPM2	0	$0.1\div0.4$	$-0.1\div-0.4$	$\sim\sqrt{N}$
FM	0	1	0	$\sim$ const
x-stripy	0	-1	0	$\sim$ const
Neel	0	0	1	$\sim$ const
y-stripy	0	0	-1	$\sim$ const

Наиболее запутанными фазами являются фазы KSL, QPM1 и QPM2 (см. табл. 1 и рис. 5). В этих фазах энтропия запутанности S растет как $\sqrt{N}$, что приводит к экспоненциальному росту размера связи $D \sim e^{\sqrt{N}}$, в соответствии с законом площади. Интересно, что несоизмеримые фазы демонстрируют такой же экспоненциальный скейлинг, который обычно ассоциируется с KSL [90, 91]. Поскольку MPS-анзац растет экспоненциально с размером системы, более продвинутые анзацы волновых функций, такие как PEPS (Projected Entangled Pair States) [92, 93] и MERA (Multiscale Entanglement Renormalization Ansatz) [94, 95], необходимы для эффективного моделирования в 2D (о PEPS и MERA см. в обзорах [64, 96]). Примечательно, что, несмотря на экспоненциальный скейлинг, этот подход остается значительно более эффективным, чем грубые методы перебора, которые масштабируются как e^N.

Соизмеримые магнитные фазы имеют значение энтропии запутанности, близкое к нулю (см. рис. 5), что приводит к постоянному размеру связи D. На практике это означает, что эти магнитные фазы с низкой запутанностью хорошо описываются теорией среднего поля, требующей лишь небольшого размера связи для точного отображения волновой функции в MPS-анзац. После первого же прогона MPS уже хорошо сходится. Однако этот сценарий представляет собой проблему: в нашей системе алгоритм DMRG имеет тенденцию застревать в локальных минимумах.

C. Алгоритм оптимизации энергии основного состояния. В фазах с низкой запутанностью алгоритм DMRG сталкивается с проблемой – энергия основного состояния не сходится (см. синюю линию на рис. 6). Возможные решения, такие как введение шума, увеличение размерности подпространства Крылова или увеличение числа перестроек подпространства Крылова, либо оказываются неэффективными, либо еще больше усугубляют проблему.

Здесь мы предлагаем алгоритм для эффективного определения энергии основного состояния. Вводим следующий модифицированный гамильтониан

$$H(\lambda) = (1-\lambda)\, H_0 + \lambda H', \tag{13}$$

где λ – весовой параметр, H_0 – исходный гамильтониан (4), а $\lambda H'$ – возмущение. Мы рассматриваем следующее возмужение

$$H' = \sum_i \mathbf{B}\cdot\mathbf{S}_i, \tag{14}$$

где $\mathbf{B}$ – это величина приложенного магнитного поля. В нашем алгоритме мы устанавливаем $\mathbf{B} = (0, 0, B_z)$. Примечательно, что процедура оптимизации остается эффективной для любого выбора направления магнитного поля в возмущении (14).

Теперь мы готовы выполнить алгоритм оптимизации, который имеет следующую структуру. На первом этапе мы устанавливаем $\lambda = 1$ в гамильтониане (13) и выполняем алгоритм DMRG, чтобы получить оптимизированную волновую функцию $|\psi_{\lambda=1}\rangle$. Мы используем $|\psi_{\lambda=1}\rangle$ в качестве начального значения на следующем этапе, где мы постепенно (адиабатически) “выключаем” слагаемое возмущения, уменьшая весовой параметр λ на небольшую величину ε, и после процедуры DMRG получаем новую оптимизированную волновую функцию $|\psi_{\lambda=1-\varepsilon}\rangle$. Затем мы повторяем этот процесс до тех пор, пока $\lambda = 0$. На последнем шаге мы выполняем DMRG для исходного гамильтониана (4), используя $|\psi_{\lambda=0}\rangle$ в качестве начальной волновой функции, чтобы получить оптимизированное основное состояние.

На рисунке 6 показан результат выполнения алгоритма оптимизации, где энергия основного состоя-

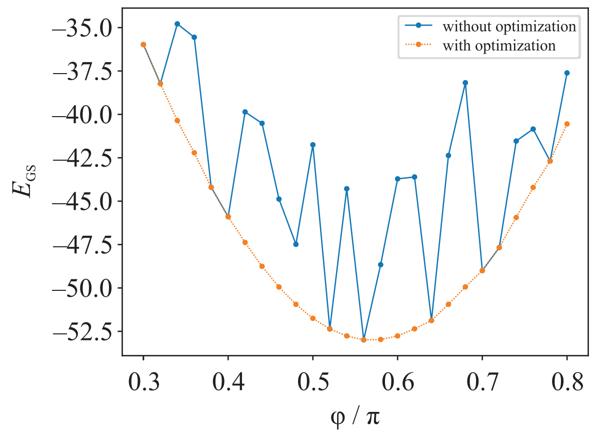

Рис. 6. (Цветной онлайн) Результаты алгоритма оптимизации для $\varphi/\pi \in [0.3, 0.8]$ и $\alpha = 0.24$. Процедура оптимизации эффективна во всем диапазоне параметров φ и α. Синяя линия соответствует алгоритму без оптимизации, а пунктирная оранжевая линия показывает энергию основного состояния, полученную с помощью алгоритма оптимизации

ния изображена в зависимости от параметра φ. Как было написано ранее, в фазе низкой запутанности MPS застревает. Это происходит потому, что соизмеримые магнитные фазы (состояния низкой запутанности) хорошо описываются среднеполевым приближением, что приводит к фиксированному размеру связи для каждого прогона DMRG. Следовательно, размер связи не может постепенно увеличиваться, поскольку MPS застревает в низкоэнергетическом состоянии, не достигая истинного основного состояния. Наш алгоритм оптимизации решает эту проблему путем контролируемой подготовки MPS, обеспечивая его сходимость непосредственно к основному состоянию.

IV. Обсуждение. В этой работе мы исследовали гексагональную модель Китаева с дополнительным XX-взаимодействием между ближайшими и следующими соседями (модель Китаева–Изинга-J_1-J_2). Используя DMRG, мы определяем основное состояние системы, в которой присутствуют низкозапутанные соизмеримые магнитные фазы и запутанные KSL и QPM фазы. Мы показали, что анизотропные изинговские взаимодействия могут стабилизировать QPM, которые ранее считались достижимыми при более сложных взаимодействиях в отсутствие магнитного поля. Мы анализируем зависимость энтропии запутанности и размера связи MPS от размера системы и предлагаем алгоритм оптимизации для улучшения сходимости DMRG в фазах с низкой запутанностью.

Отметим, что основной мотивацией для рассматриваемой модели является симуляция гексагональной модели Китаева на сверхпроводящем квантовом процессоре. Цель таких симуляций – пронаблюдать KSL фазу. Мы показываем, что даже слабое паразитное взаимодействие приводит к нестабильности KSL, что необходимо учитывать в реальных экспериментах и симуляциях.

Как упоминалось в разделе III A, фазы с высокой запутанностью (такие как KSL, QPM1 и QPM2) имеют делокализованный спиновый структурный фактор. Это указывает не только на то, что спин-спиновые корреляции в системе несоизмеримы с решеткой, но также является мерой запутанности системы. В работе [84] рассматривается величина $E(\mathbf{q}) = \max\{0, 1 - \frac{1}{2}S(\mathbf{q})\}$, которая дает нижнюю границу многочастичной запутанности (определяемой с помощью наилучшей сепарабельной аппроксимации (*the best separable approximation*)) в системе, а $\min\{E(\mathbf{q})\}$ показывает минимально возможную запутанность в системе. Мы обнаружили, что $\min\{E(\mathbf{q})\} = 0$ в фазах с низкой запутанностью (FM, Neel, x- и y-полосатые) и $\min\{E(\mathbf{q})\} \neq 0$ в фазах с высокой запутанностью (KSL, QPM1 и QPM2). Это согласуется с нашими результатами и позволяет предположить, что делокализация спинового структурного фактора приводит к появлению запутанности в системе.

Расчеты были выполнены с ипользованием библиотеки ITensor [97].

Финансирование работы. А. В. Капранов выражает благодарность за поддержку фонду развития теоретической и математической физики "БАЗИС" и Российскому научному фонду, грант # 22-72-10074.

Конфликт интересов. Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

1. L. Balents, "Spin liquids in frustrated magnets", Nature **464**, 199 (2010).
2. L. Savary and L. Balents, "Quantum spin liquids: a review", Rep. Prog. Phys. **80**, 016502 (2016).
3. Y. Zhou, K. Kanoda, and T.-K. Ng, "Quantum spin liquid states", Rev. Mod. Phys. **89**, 025003 (2017).
4. J. Wen, S.-L. Yu, S. Li, W. Yu, and J.-X. Li, "Experimental identification of quantum spin liquids", npj Quantum Materials **4**, 12 (2019).
5. C. Broholm, R. J. Cava, S. A. Kivelson, D. G. Nocera, M. R. Norman, and T. Senthil, "Quantum spin liquids", Science **367**, eaay0668 (2020).
6. X. G. Wen, "Mean-field theory of spin-liquid states with finite energy gap and topological orders", Phys. Rev. B **44**, 2664 (1991).
7. X.-G.Wen, "Topological order: From long-range entangled quantum matter to a unified origin of light and electrons", ISRN Condensed Matter Physics **2013**, 198710 (2013).
8. T. Senthil and M. P. A. Fisher, "Z_2 gauge theory of electron fractionalization in strongly correlated systems", Phys. Rev. B **62**, 7850 (2000).
9. T. Senthil and M. P. A. Fisher, "Fractionalization in the cuprates: Detecting the topological order", Phys. Rev. Lett. **86**, 292 (2001).
10. N. Read and S. Sachdev, "Large-N expansion for frustrated quantum antiferromagnets", Phys. Rev. Lett. **66**, 1773 (1991).
11. S. Sachdev, "Kagomé- and triangular-lattice heisenberg antiferromagnets: Ordering from quantum fluctuations and quantum-disordered ground states with unconfined bosonic spinons", Phys. Rev. B **45**, 12377 (1992).
12. P. A. Lee, N. Nagaosa, and X.-G. Wen, "Doping a Mott insulator: Physics of high-temperature superconductivity", Rev. Mod. Phys. **78**, 17 (2006).
13. A. Kitaev, "Anyons in an exactly solved model and beyond", Annals of Physics **321**, 2 (2006).
14. Y. Zhou, K. Kanoda, and T.-K. Ng, "Quantum spin liquid states", Rev. Mod. Phys. **89**, 025003 (2017).
15. G. Jackeli and G. Khaliullin, "Mott insulators in the strong spin-orbit coupling limit: From Heisenberg to a quantum compass and Kitaev models", Phys. Rev. Lett. **102**, 017205 (2009).
16. K. W. Plumb, J. P. Clancy, L. J. Sandilands, V. V. Shankar, Y. F. Hu, K. S. Burch, H.-Y. Kee, and Y.-J. Kim, "α–$RuCl_3$: A spin-orbit assisted Mott insulator on a honeycomb lattice", Phys. Rev. B **90**, 041112 (2014).
17. T. Yokoi, S. Ma, Y. Kasahara, S. Kasahara, T. Shibauchi, N. Kurita, H. Tanaka, J. Nasu, Y. Motome, C. Hickey, S. Trebst, and Y. Matsuda, "Half-integer quantized anomalous thermal hall effect in the Kitaev material candidate α-$RuCl_3$", Science **373**, 568 (2021); https://www.science.org/doi/pdf/10.1126/science.aay5551.
18. S. Banerjee, U. Kumar, and S.-Z. Lin, "Inverse Faraday effect in Mott insulators", Phys. Rev. B **105**, L180414 (2022).
19. J. A. N. Bruin, R. R. Claus, Y. Matsumoto, N. Kurita, H. Tanaka, and H. Takagi, "Robustness of the thermal

hall effect close to half-quantization in α-RucL$_3$", Nature Phys. **18**, 401 (2022).
20. S. Trebst and C. Hickey, "Kitaev materials", Phys. Rep. **950**, 1 (2022).
21. E. M. Nica, M. Akram, A. Vijayvargia, R. Moessner, and O. Erten, "Kitaev spin-orbital bilayers and their moiré superlattices", npj Quantum Materials **8**, 9 (2023).
22. J. c. v. Chaloupka, G. Jackeli, and G. Khaliullin, "Kitaev–Heisenberg model on a honeycomb lattice: Possible exotic phases in iridium oxides A_2IrO$_3$", Phys. Rev. Lett. **105**, 027204 (2010).
23. J. c. v. Chaloupka, G. Jackeli, and G. Khaliullin, "Zigzag magnetic order in the iridium oxide Na$_2$IrO$_3$", Phys. Rev. Lett. **110**, 097204 (2013).
24. Y. Yamaji, T. Suzuki, T. Yamada, S.-i. Suga, N. Kawashima, and M. Imada, "Clues and criteria for designing a Kitaev spin liquid revealed by thermal and spin excitations of the honeycomb iridate Na$_2$IrO$_3$", Phys. Rev. B **93**, 174425 (2016).
25. D. Gotfryd, J. Rusnačko, K. Wohlfeld, G. Jackeli, J. c. v. Chaloupka, and A. M. Oleś, "Phase diagram and spin correlations of the Kitaev–Heisenberg model: Importance of quantum effects", Phys. Rev. B **95**, 024426 (2017).
26. J. G. Rau, E. K.-H. Lee, and H.-Y. Kee, "Generic spin model for the honeycomb iridates beyond the Kitaev limit", Phys. Rev. Lett. **112**, 077204 (2014).
27. J. c. v. Chaloupka and G. Khaliullin, "Hidden symmetries of the extended Kitaev–Heisenberg model: Implications for the honeycomb-lattice iridates A_2IrO$_3$", Phys. Rev. B **92**, 024413 (2015).
28. E. K.-H. Lee and Y. B. Kim, "Theory of magnetic phase diagrams in hyperhoneycomb and harmonic-honeycomb iridates", Phys. Rev. B **91**, 064407 (2015).
29. R. Yadav, N. A. Bogdanov, V. M. Katukuri, S. Nishimoto, J. van den Brink, and L. Hozoi, "Kitaev exchange and field-induced quantum spin-liquid states in honeycomb α-RuCl$_3$", Sci, Rep. **6**, 37925 (2016).
30. S. Nishimoto, V. M. Katukuri, V. Yushankhai, H. Stoll, U. K. Rößler, L. Hozoi, I. Rousochatzakis, and J. van den Brink, "Strongly frustrated triangular spin lattice emerging from triplet dimer formation in honeycomb Li$_2$IrO$_3$", Nat. Commun. **7**, 10273 (2016).
31. R. Yadav, S. Nishimoto, M. Richter, J. van den Brink, and R. Ray, "Large off-diagonal exchange couplings and spin liquid states in C_3-symmetric iridates", Phys. Rev. B **100**, 144422 (2019).
32. S.-S. Zhang, G. B. Halász, W. Zhu, and C. D. Batista, "Variational study of the Kitaev–Heisenberg-gamma model", Phys. Rev. B **104**, 014411 (2021).
33. F. L. Buessen and Y. B. Kim, "Functional renormalization group study of the Kitaev-Γ model on the honeycomb lattice and emergent incommensurate magnetic correlations", Phys. Rev. B **103**, 184407 (2021).
34. I. Rousochatzakis, J. Reuther, R. Thomale, S. Rachel, and N. B. Perkins, "Phase diagram and quantum order by disorder in the Kitaev K_1-K_2 honeycomb magnet", Phys. Rev. X **5**, 041035 (2015).
35. I. Kimchi and Y.-Z. You, "Kitaev–Heisenberg-J_2-J_3 model for the iridates A_2IrO$_3$", Phys. Rev. B **84**, 180407 (2011).
36. Y. Sizyuk, C. Price, P. Wölfle, and N. B. Perkins, "Importance of anisotropic exchange interactions in honeycomb iridates: Minimal model for zigzag antiferromagnetic order in Na$_2$IrO$_3$", Phys. Rev. B **90**, 155126 (2014).
37. I. Buluta and F. Nori, "Quantum simulators", Science **326**, 108 (2009).
38. E. Altman, K. R. Brown, G. Carleo et al. (Collaboration), PRX Quantum **2**, 017003 (2021).
39. G. Semeghini, H. Levine, A. Keesling et al. (Collaboration), "Probing topological spin liquids on a programmable quantum simulator", Science **374**, 1242 (2021); https://www.science.org/doi/pdf/10.1126/science.abi8794.
40. K. J. Satzinger, Y.-J. Liu, A. Smith et al. (Collaboration), "Realizing topologically ordered states on a quantum processor", Science **374**, 1237 (2021).
41. A. Chiocchetta, D. Kiese, C. P. Zelle, F. Piazza, and S. Diehl, "Cavity-induced quantum spin liquids", Nature Commun. **12**, 5901 (2021).
42. S. Zhou, D. Green, E. D. Dahl, and C. Chamon, "Experimental realization of classical Z_2 spin liquids in a programmable quantum device", Phys. Rev. B **104**, L081107 (2021).
43. A. C. Y. Li, M. S. Alam, T. Iadecola, A. Jahin, J. Job, D. M. Kurkcuoglu, R. Li, P. P. Orth, A. B. Özgüler, G. N. Perdue, and N. M. Tubman, "Benchmarking variational quantum eigensolvers for the square-octagon-lattice Kitaev model", Phys. Rev. Res. **5**, 033071 (2023).
44. C. Umeano, F. Jamet, L. P. Lindoy, I. Rungger, and O. Kyriienko, "Quantum subspace expansion approach for simulating dynamical response functions of Kitaev spin liquids", Phys. Rev. Mater. **9**, 034401 (2025).
45. P. Krantz, M. Kjaergaard, F. Yan, T. P. Orlando, S. Gustavsson, and W. D. Oliver, "A quantum engineer's guide to superconducting qubits", Appl. Phys. Rev. **6**, 021318 (2019); https://pubs.aip.org/aip/apr/articlepdf/doi/10.1063/1.5089550/16667201/021318_1_online.pdf.
46. F. Yan, P. Krantz, Y. Sung, M. Kjaergaard, D. L. Campbell, T. P. Orlando, S. Gustavsson, and W. D. Oliver, "Tunable coupling scheme for implementing high-fidelity two-qubit gates", Phys. Rev. Appl. **10**, 054062 (2018).

47. Y. Sung, L. Ding, J. Braumüller, A. Vepsäläinen, B. Kannan, M. Kjaergaard, A. Greene, G. O. Samach, C. McNally, D. Kim, A. Melville, B. M. Niedzielski, M. E. Schwartz, J. L. Yoder, T. P. Orlando, S. Gustavsson, and W. D. Oliver, "Realization of high-fidelity CZ and ZZ-free iswap gates with a tunable coupler", Phys. Rev. X **11**, 021058 (2021).
48. S. R. White, "Density matrix formulation for quantum renormalization groups", Phys. Rev. Lett. **69**, 2863 (1992).
49. S. R. White, "Density-matrix algorithms for quantum renormalization groups", Phys. Rev. B **48**, 10345 (1993).
50. I. Affleck, T. Kennedy, E. H. Lieb, and H. Tasaki, "Rigorous results on valence-bond ground states in antiferromagnets", Phys. Rev. Lett. **59**, 799 (1987).
51. S. Östlund and S. Rommer, "Thermodynamic limit of density matrix renormalization", Phys. Rev. Lett. **75**, 3537 (1995).
52. S. Rommer and S. Östlund, "Class of ansatz wave functions for one-dimensional spin systems and their relation to the density matrix renormalization group", Phys. Rev. B **55**, 2164 (1997).
53. M. Srednicki, "Entropy and area", Phys. Rev. Lett. **71**, 666 (1993).
54. G. Vidal, J. I. Latorre, E. Rico, and A. Kitaev, "Entanglement in quantum critical phenomena", Phys. Rev. Lett. **90**, 227902 (2003).
55. D. Gioev and I. Klich, "Entanglement entropy of fermions in any dimension and the widom conjecture", Phys. Rev. Lett. **96**, 100503 (2006).
56. L. Amico, R. Fazio, A. Osterloh, and V. Vedral, "Entanglement in many-body systems", Rev. Mod. Phys. **80**, 517 (2008).
57. S. M. Winter, A. A. Tsirlin, M. Daghofer, J. van den Brink, Y. Singh, P. Gegenwart, and R. Valentí, "Models and materials for generalized kitaev magnetism", J. Phys. Condens. Matter **29**, 493002 (2017).
58. I. Rousochatzakis, N. B. Perkins, Q. Luo, and H.-Y. Kee, "Beyond Kitaev physics in strong spin-orbit coupled magnets", Rep. Prog. Phys. **87**, 026502 (2024).
59. M. Gohlke, G. Wachtel, Y. Yamaji, F. Pollmann, and Y. B. Kim, "Quantum spin liquid signatures in Kitaev-like frustrated magnets", Phys. Rev. B **97**, 075126 (2018).
60. D. A. S. Kaib, S. M. Winter, and R. Valentí, "Kitaev honeycomb models in magnetic fields: Dynamical response and dual models", Phys. Rev. B **100**, 144445 (2019).
61. M. Gohlke, L. E. Chern, H.-Y. Kee, and Y. B. Kim, "Emergence of nematic paramagnet via quantum order-by-disorder and pseudo-goldstone modes in Kitaev magnets", Phys. Rev. Res. **2**, 043023 (2020).
62. S. M. Winter, K. Riedl, D. Kaib, R. Coldea, and R. Valentí, "Probing α–$RuCl_3$ beyond magnetic order: Effects of temperature and magnetic field", Phys. Rev. Lett. **120**, 077203 (2018).
63. U. Schollwöck, "The density-matrix renormalization group in the age of matrix product states", Annals of Physics **326**, 96 (2011).
64. E. Stoudenmire and S. R. White, "Studying two-dimensional systems with the density matrix renormalization group", Annu. Rev. Condens. Matter Phys. **3**, 111 (2012).
65. G. Catarina and B. Murta, "Density-matrix renormalization group: a pedagogical introduction", Eur. Phys. J. B **96**, 111 (2023).
66. M. Ganahl, J. Beall, M. Hauru, A. G. Lewis, T. Wojno, J. H. Yoo, Y. Zou, and G. Vidal, "Density matrix renormalization group with tensor processing units", PRX Quantum **4**, 010317 (2023).
67. W. Kohn, "Nobel lecture: Electronic structure of matter–wave functions and density functionals", Rev. Mod. Phys. **71**, 1253 (1999).
68. K. G. Wilson, "The renormalization group: Critical phenomena and the Kondo problem", Rev. Mod. Phys. **47**, 773 (1975).
69. R. Bulla, T. A. Costi, and T. Pruschke, "Numerical renormalization group method for quantum impurity systems", Rev. Mod. Phys. **80**, 395 (2008).
70. M. Fannes, B. Nachtergaele, and R. F. Werner, "Finitely correlated states on quantum spin chains", Commun. Math. Phys. **144**, 443 (1992).
71. J. Dukelsky, M. A. Martín-Delgado, T. Nishino, and G. Sierra, "Equivalence of the variational matrix product method and the density matrix renormalization group applied to spin chains", Europhysics Letters **43**, 457 (1998).
72. I. Peschel, "Calculation of reduced density matrices from correlation functions", Journal of Physics A: Mathematical and General **36**, L205 (2003).
73. M. B. Hastings, "An area law for one-dimensional quantum systems", J. Stat. Mech.: Theory Exp. **2007**, P08024 (2007).
74. J. Eisert, M. Cramer, and M. B. Plenio, "Colloquium: Area laws for the entanglement entropy", Rev. Mod. Phys. **82**, 277 (2010).
75. S. R. White and D. J. Scalapino, "Phase separation and stripe formation in the two-dimensional $t-j$ model: A comparison of numerical results", Phys. Rev. B **61**, 6320 (2000).
76. M. Q. Weng, D. N. Sheng, Z. Y. Weng, and R. J. Bursill, "Spin-liquid phase in an anisotropic triangular-lattice Heisenberg model: Exact diagonalization and density-matrix renormalization group calculations", Phys. Rev. B **74**, 012407 (2006).
77. L. Cincio and G. Vidal, "Characterizing topological order by studying the ground states on an infinite cylinder", Phys. Rev. Lett. **110**, 067208 (2013).
78. H.-C. Jiang and T. P. Devereaux, "Superconductivity in the doped Hubbard model and its interplay with next-nearest hopping t'", Science **365**, 1424 (2019); https://www.science.org/doi/pdf/10.1126/science.aal5304.

79. G. K.-L. Chan and M. Head-Gordon, “Highly correlated calculations with a polynomial cost algorithm: A study of the density matrix renormalization group”, J. Chem. Phys. **116**, 4462 (2002); https://pubs.aip.org/aip/jcp/articlepdf/116/11/4462/19222618/4462_1_online.pdf.
80. O. Legeza, J. Röder, and B. A. Hess, “Controlling the accuracy of the density-matrix renormalization-group method: The dynamical block state selection approach”, Phys. Rev. B **67**, 125114 (2003).
81. G. K.-L. Chan, M. Kállay, and J. Gauss, “State of-the-art density matrix renormalization group and coupled cluster theory studies of the nitrogen binding curve”, J. Chem. Phys. **121**, 6110 (2004); https://pubs.aip.org/aip/jcp/articlepdf/121/13/6110/19201294/6110_1_online.pdf.
82. G. Moritz, B. A. Hess, and M. Reiher, “Convergence behavior of the density-matrix renormalization group algorithm for optimized orbital orderings”, J. Chem. Phys. **122**, 024107 (2004); https://pubs.aip.org/aip/jcp/articlepdf/doi/10.1063/1.1824891/10872404/024107_1_online.pdf.
83. J. J. Goings, A. White, J. Lee, C. S. Tautermann, M. Degroote, C. Gidney, T. Shiozaki, R. Babbush, and N. C. Rubin, “Reliably assessing the electronic structure of cytochrome p450 on today’s classical computers and tomorrow’s quantum computers”, Proceedings of the National Academy of Sciences **119**, e2203533119 (2022); https://www.pnas.org/doi/pdf/10.1073/pnas.2203533119.
84. M. Cramer, M. B. Plenio, and H. Wunderlich, “Measuring entanglement in condensed matter systems”, Phys. Rev. Lett. **106**, 020401 (2011)
85. G. Baskaran, S. Mandal, and R. Shankar, “Exact results for spin dynamics and fractionalization in the Kitaev model”, Phys. Rev. Lett. **98**, 247201 (2007).
86. H. Liu, J. Chaloupka, and G. Khaliullin, “Kitaev spin liquid in 3d transition metal compounds”, Phys. Rev. Lett. **125**, 047201 (2020).
87. J. Reuther, R. Thomale, and S. Trebst, “Finitetemperature phase diagram of the Heisenberg–Kitaev model”, Phys. Rev. B **84**, 100406 (2011).
88. R. Schaffer, S. Bhattacharjee, and Y. B. Kim, “Quantum phase transition in Heisenberg–Kitaev model”, Phys. Rev. B **86**, 224417 (2012).
89. E. S. Sørensen, A. Catuneanu, J. S. Gordon, and H.-Y. Kee, “Heart of entanglement: Chiral, nematic, and incommensurate phases in the Kitaev-gamma ladder in a field”, Phys. Rev. X **11**, 011013 (2021).
90. Y. Zhang, T. Grover, and A. Vishwanath, “Entanglement entropy of critical spin liquids”, Phys. Rev. Lett. **107**, 067202 (2011).
91. K. Meichanetzidis, M. Cirio, J. K. Pachos, and V. Lahtinen, “Anatomy of fermionic entanglement and criticality in Kitaev spin liquids”, Phys. Rev. B **94**, 115158 (2016).
92. F. Verstraete and J. I. Cirac, “Renormalization algorithms for quantum-many body systems in two and higher dimensions”, arXiv:cond-mat/0407066 [condmat.str-el] (2004).
93. F. Verstraete, M. M. Wolf, D. Perez-Garcia, and J. I. Cirac, “Criticality, the area law, and the computational power of projected entangled pair states”, Phys. Rev. Lett. **96**, 220601 (2006).
94. G. Vidal, “Entanglement renormalization”, Phys. Rev. Lett. **99**, 220405 (2007).
95. L. Cincio, J. Dziarmaga, and M. M. Rams, “Multiscale entanglement renormalization ansatz in two dimensions: Quantum ising model”, Phys. Rev. Lett. **100**, 240603 (2008).
96. J. I. Cirac, D. Péerez-García, N. Schuch, and F. Verstraete, “Matrix product states and projected entangled pair states: Concepts, symmetries, theorems”, Rev. Mod. Phys. **93**, 045003 (2021).
97. M. Fishman, S. R. White, and E. M. Stoudenmire, “The ITensor Software Library for Tensor Network Calculations”, SciPost Phys. Codebases 4 (2022).