УДК 538.945

ВЛИЯНИЕ ЛОКАЛЬНЫХ КОРРЕЛЯЦИЙ НА ФАЗОВЫЕ СОСТОЯНИЯ В МОДЕЛИ «ПОЛУЖЕСТКИХ» БОЗОНОВ НА КВАДРАТНОЙ РЕШЕТКЕ

© 2024 г. В. А. Улитко^{1, *}, В. В. Конев¹, А. А. Чиков¹, Ю. Д. Панов¹

 1 Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Уральский федеральный университет имени Первого Президента России Б.Н. Ельцина», Екатеринбург, Россия

**E-mail: vasiliy.ulitko@urfu.ru* Поступила в редакцию 02.05.2024

После доработки 13.05.2024 Принята к публикации 31.05.2024

Рассмотрена модель заряженных «полужестких» бозонов на квадратной решетке с возможным числом заполнения на узле $n_i = 0, 1, 2$. С помощью квантового метода Монте—Карло получены температурные фазовые диаграммы модели и исследовано влияние локальных корреляций заряда. Показано, что локальные корреляции заряда приводят к возрастанию роли квантовых флуктуаций при формировании фазовых состояний.

Ключевые слова: модель жестких бозонов, псевдоспиновый формализм, квантовый Монте-Карло, фазовое разделение

DOI: 10.31857/S0367676524090154, EDN: OCZHJX

ВВЕДЕНИЕ

Низкоразмерные модели решеточных бозонов с конкурирующими взаимодействиями демонстрируют богатый набор квантовых фазовых состояний и активно изучаются последние несколько десятилетий [1-8]. Интерес к таким системам связан с экспериментальным обнаружением конкуренции зарядового упорядочения и сверхпроводимости в высокотемпературных сверхпроводниках [9] и таких бозонных фаз, как фаза Моттовского изолятора и сверхтекучая фаза для сверхолодных атомов в оптических решетках [10–13]. Следует отметить, что в работе [14] смогли наблюдать долгоживущее связанное состояние двух бозонов в оптической решетке, что делает актуальным рассмотрение моделей с парным переносом бозонов, так как они перестали быть объектом чисто теоретических построений. Кроме того, интерес к моделям решеточных бозонов в настоящее время наблюдается в области квантовых вычислений. Модель «жестких» (hard-core) бозонов применяется для описания систем сверхпроводящих кубитов с двумя состояниями [15-16].

В настоящей работе мы рассматриваем модель «полужестких» заряженных бозонов на квадратной решетке [19]. По сравнению с различными вариантами модели Бозе—Хаббарда [8, 12], отправной точкой для теоретического анализа здесь является

редукция гильбертова пространства на узле до трех низших по энергии состояний с числами заполнения $n_i = 0$, 1, 2. В этом случае все операторы на узле могут быть выражены через операторы псевдоспина S = 1 [20—23], в частности в работе [24] обсуждается полнота псевдоспиновой S = 1 алгебры для этой модели. Эта идея восходит к классической работе по жестким (hard core) бозонам [25], в которой было построено отображение бозонных операторов на операторы псевдоспина S = 1/2, и получила многочисленные обобщения [21]. Для нашей модели гамильтониан может быть записан с использованием оператора псевдоспина S = 1 в следующем виде [19]:

$$\widehat{H} = \sum_{i} \Delta \widehat{S}_{iz}^{2} + \sum_{\langle ij \rangle} V \widehat{S}_{iz} \widehat{S}_{jz} - \left[-\sum_{\langle ij \rangle} t \left(\widehat{S}_{i+}^{2} \widehat{S}_{j-}^{2} + \widehat{S}_{i-}^{2} \widehat{S}_{j+}^{2} \right), \right]$$

$$(1)$$

где z-компонента оператора псевдоспина S_{iz} связана с числом бозонов на узле соотношением $\hat{n_i} = \hat{S}_{iz} + 1$. При этом его собственные числа $S_{iz} = \pm 1$, 0 соответствуют заряду бозонов на узле, отсчитываемому от уровня половинного заполнения, когда на всех узлах решетки $n_i = 1$. Первое и второе слагаемые описывают заряд-зарядовые

взаимодействия на узле и между узлами соответственно. Третье слагаемое отвечает за переносы пар бозонов между соседними узлами. Суммирование во втором и третьем слагаемом проводится по ближайшим соседям квадратной решетки. Используя x=n-1 — отклонение концентрации бозонов от половинного заполнения, это условие можно записать следующим образом:

$$x = \frac{1}{N} \sum_{i} S_{iz}.$$
 (2)

где N — общее число узлов решетки.

Ранее [19] нами были изучены фазовые диаграммы основного состояния данной модели в координатах $\Delta - x$ при различных соотношениях V/t. Было продемонстрировано качественное различие этих диаграмм по разные стороны от Гейзенберговской точки, определяемой условием 2V = t. В этой работе мы ограничимся случаем «слабого» переноса: 2V > t. Тогда в зависимости от соотношения между параметрами гамильтониана и величины х могут реализоваться следующие фазовые состояния [19]: зарядовое упорядочение (charge ordering, СО) – аналог антиферромагнитного упорядочения вдоль оси z, сверхтекучая (superfluid, SF) фаза, которая характеризуется ненулевой плотностью сверхтекучей компоненты, определяемой через числа поворота (winding numbers) [26, 27]. Также могут образовываться однородная смесь этих фаз фаза сверхтекучего твердого тела (supersolid, SS) и неоднородная – фазовое расслоение (phase separation, PS). В работе [28] исследовалась эволюция температурных фазовых диаграмм этой модели в атомном пределе (t=0). Было показано, что увеличение параметра локальных корреляций Δ также приводит к перестройке фазовой T - x диаграммы системы, в частности, к смещению максимума критической температуры $T_{CO}(x)$ для CO-фазы. В свою очередь это послужило мотивацией для нас, чтобы рассмотреть влияние локальных корреляций на температурные фазовые диаграммы в общем случае. В работе [29] была рассмотрена модель полужестких бозонов в приближении метода среднего поля (MFA). Нами были получены температурные фазовые диаграммы и исследована их эволюция в зависимости от параметра Δ. В интересующем нас случае 2V > t можно выделить две области значений, для которых фазовые диаграммы имеют качественные различия. В пределе $\Delta \leq 0$ модель аналогична случаю «жестких» (hard-core) бозонов [30]. Увеличение Δ делает невыгодными состояния с $S_z = \pm 1$, обмен между которыми порождает двухбозонный перенос, и происходит уменьшение области SF фазы. Это сопровождается уменьшением критических температур $T_{\rm CO}(x)$ и $T_{\rm SF}(x)$, а также смещением трикритической точки CO–SF–PS. Однако при $\Delta > \Delta^* = 0.75t$ ситуация меняется. Область SF фазы продолжает уменьшаться в то время, как СО фаза

расширяется, а зависимость $T_{\rm CO}(x)$ становится немонотонной и при достаточно больших Δ описывается параболой с максимумом в точке x=0.5. В обеих областях система демонстрирует широкий набор сценариев образования фазовых состояний, таких как переходы порядок-порядок, смена типа фазового перехода, появление новых критических точек.

Таким образом, представляет интерес дальнейшее изучение влияния локальных корреляций на фазовые состояния данной модели. В частности, стоит вопрос о влиянии на эволюцию фазовых T-xдиаграмм квантовых флуктуаций. В работе [29] было показано, что при $\Delta \le 0$ результаты MFA хорошо согласуются с результатами, полученными квантовым методом Монте-Карло (QMC) [27]. ОМС позволяет более точно учесть недиагональные корреляции оператора псевдоспина, связанные с переносом бозонов. В этой работе основной нашей задачей было уточнение предыдущих результатов с помощью численного моделирования методом QMC в ситуации $\Delta > 0$. В разделе 2 мы приводим описание используемого нами квантового алгоритма. Раздел 3 посвящен полученным результатам и их обсуждению. Основное внимание уделено сравнению фазовых диаграмм, полученных методами SGF и MFA.

КВАНТОВЫЙ МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО В КАНОНИЧЕСКОМ АНСАМБЛЕ

В этой работе мы используем алгоритм Stohastic Green Functions (SGF), описанный в работе [31, 32]. Данный алгоритм подходит для моделирования практически любого решеточного гамильтониана вида $\widehat{H} = \widehat{\mathcal{V}} - \widehat{\mathcal{T}}$, где $\widehat{\mathcal{V}}$ — диагональная часть гамильтониана в выбранном базисе, а \widehat{T} – недиагональная часть с положительными матричными элементами. В нашем случае $\widehat{\mathcal{T}}$ включает в себя слагаемое, отвечающее за двухчастичный перенос, а также слагаемое, связывающее состояния с $S_z=\pm 1$ и $S_z=0$, имеющее вид: $t'\Big(\hat{S}_{i+}\,\hat{S}_{j-}+\hat{S}_{i-}\,\hat{S}_{j+}\Big)$. Параметр $t'\ll t$ подбирался таким образом, чтобы его последовательное уменьшение переставало влиять на получаемые результаты. Это приводит к существенному увеличению времени вычислений, но является необходимым условием для корректного обновления состояния при используемой схеме расчетов. Оптимальное подобранное значение t' = 0.01 t. Выбор данного алгоритма связан в первую очередь с возможностью исследования моделей в каноническом ансамбле в то время, как большинство квантовых алгоритмов Монте-Карло работают в большом каноническом ансамбле. Алгоритм SGF позволяет нам точно учитывать условие (1) и является одним из самых точных в

своем классе. Ниже приводится описание работы алгоритма.

Статистическая сумма в формализме матрицы эволюции $\sigma(\beta)$ может быть записана следующим образом:

$$Z(\beta) = Tr e^{-\beta \widehat{H}} = Tr e^{-\beta \widehat{V}} \widehat{\sigma}(\beta),$$

$$\widehat{\sigma}(\beta) = T_{\tau} \exp\left(\int_{0}^{\beta} \widehat{T}(\tau) d\tau\right).$$
(3)

где T_{τ} — оператор упорядочения по мнимому времени, $\beta=1/T$. В данном методе статистическая сумма $Z(\beta)$ моделируется стохастическим образом через действие недиагональных операторов на состояние системы согласно принципу детального баланса. Разложение матрицы эволюции по мнимому времени позволяет записать статистическую сумму в представлении линий эволюции, другими словами, ее можно представить как упорядоченный во времени экспоненциальный ряд операторов \widehat{T} из недиагональной части гамильтониана $\widehat{\mathcal{T}}$:

$$\begin{split} Z\left(\beta\right) &= Tr \, e^{-\beta \widehat{V}} \sum\nolimits_{n \geq 0} \int\nolimits_{0 < \tau_1 < \tau_2 < \ldots < \tau_m < \beta} \\ & \widehat{T}\left(\tau_n\right) \widehat{T}\left(\tau_{n-1}\right) \ldots \end{split} \tag{4} \\ & \ldots \widehat{T}\left(\tau_2\right) \widehat{T}\left(\tau_1\right) d\tau_n \ldots d\tau_2 \ d\tau_1, \end{split}$$

где все операторы записаны в представлении взаимодействия $\widehat{A}(\tau) = e^{\tau \widehat{\mathcal{V}}} \widehat{A} e^{-\tau \widehat{\mathcal{V}}}$. Вставляя между каждым оператором \widehat{T} полный набор состояний $|\Psi k\rangle$ в базисе собственных значений диагонального слагаемого $\widehat{\mathcal{V}}$, можно записать выражение для Z в виде: $Z(\beta) = e^{-\beta \widehat{\mathcal{V}}}$

$$\begin{split} &\sum_{n\geq 0} \sum_{\Psi_1 \dots \Psi_n} \int_{0<\tau_1<\tau_2<\dots<\tau_n<\beta} \!\! \left\langle \Psi_0 \left| \widehat{T} \left(\tau_n \right) \right| \left. \Psi_{n-1} \right\rangle \right. \\ &\left. \dots \!\! \left\langle \Psi_2 \left| \widehat{T} \left(\tau_2 \right) \right| \!\! \left| \Psi_1 \right\rangle \!\! \left\langle \Psi_1 \left| \widehat{T} \left(\tau_1 \right) \right| \!\! \left| \Psi_0 \right\rangle d\tau_n \dots d\tau_2 d\tau_1, \end{split}$$

где суммирование проводится по собственным состояниям $\widehat{\mathcal{V}}$. Для генерации переходов между состояниями в данном методе вводится обобщенная статистическая сумма $Z(\beta, \tau)$. Для этого в экспоненциальной части $Z(\beta)$ делается «разрыв» в момент времени τ , в который добавляется оператор Грина $\widehat{G}: Z(\beta, \tau) = Tre^{-(\beta-\tau)\widehat{H}}\widehat{G}e^{-\tau\widehat{H}}$. После разложения матрицы эволюции:

$$Z(^{2},\tau) = e^{-\beta \mathcal{V}}$$

$$\sum_{n\geq 0} \sum_{\Psi_{1}...\Psi_{n}} \int_{0<\tau_{1}<\tau_{2}<...<\tau_{n}<\beta} \langle \Psi_{0} | \widehat{T}(\tau_{n}) | \Psi_{n-1} \rangle...$$

$$\langle \Psi_{L} | \widehat{G}(\tau) | \Psi_{R} \rangle...$$
(6)

$$\langle \Psi_{\!2} \Big| \widehat{T} \Big(\mathbf{t}_2 \Big) \! \Big| \Psi_{\!1} \! \big\rangle \! \big\langle \Psi_{\!1} \Big| \widehat{T} \Big(\mathbf{t}_1 \Big) \! \Big| \Psi_{\!0} \! \big\rangle d\mathbf{t}_{\mathbf{n}} \dots d\mathbf{t}_2 d\mathbf{t}_1,$$

где оператор \widehat{G} определяется следующим образом:

$$\widehat{G} = \sum_{p=0}^{\infty} \sum_{q=0}^{\infty} g\left(p,q\right) \sum_{\left[i_{p},j_{q}\right]} \prod_{k=1}^{p} \widehat{S}_{i_{k}}^{+} \prod_{l=1}^{q} \widehat{S}_{j_{l}}^{-}$$
 (7) здесь $\sum_{\left[i_{p},j_{q}\right]} \operatorname{обозначает}$ суммирование по всем соседним узлам i_{p} и j_{q} решетки, а $g(p,q) = g(\left|p-q\right|)$ — произвольная убывающая функция с ограничением $g\left(0,0\right) = 1$. Функция $g\left(p,q\right)$ определяет возможные «расстояния» между состояниями конфигурационного пространства в ходе работы алгоритма и подбирается исходя из особенностей модели и требуемой точности. В ходе моделирования мы использовали следующий вид функции [32]: $g\left(p,q\right) = \frac{1}{N^{\left|p-q\right|}}$.

Обобщенная статистическая сумма в общем случае включает как конфигурации обычной (оператор \widehat{G} диагонален), так и конфигурации недиагональной (оператор \widehat{G} недиагонален) статистических сумм, поэтому ее можно представить как сумму:

$$Z(\beta,\tau) = Z(\beta) +$$

$$+ \sum_{L \neq R} Tr e^{-\beta \widehat{V}} \widehat{\sigma}(\beta,\tau) |L\rangle \langle L| \widehat{G}(\tau) |R\rangle \langle R| \widehat{\sigma}(\tau,0).$$
(8)

Схема элементарного шага алгоритма SGF показана на рис. 1. В ходе моделирования мы стартуем со случайной «диагональной» конфигурации в момент мнимого времени τ , когда состояния левее или правее оператора G совпадают. Для изменения конфигурации выбирается левое или правое направление действия оператора Грина по шкале мнимого времени с вероятностями $P_{LR}(\leftarrow)$

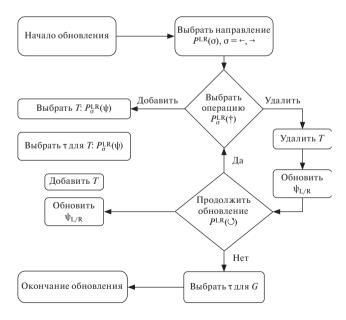


Рис. 1. Схема элементарного шага квантового Монте-Карло.

и $P_{\rm LR}\left(
ightarrow
ight)$ соответственно. Действие оператора \widehat{G} сводится к добавлению (удалению) нового оператора \mathcal{T} , входящего в кинетическую часть гамильтониана, с вероятностью $P_{LR}(\dagger)$ [1 – $P_{LR}(\dagger)$]. После этого происходит обновление состояния и «перенос» оператора \widehat{G} в другой момент мнимого времени с вероятностью $1-P_{\leftarrow}^{L'R'}(\circlearrowleft)$. Процедура заканчивается, когда оператор \widehat{G} на новом состоянии становится диагональным, что означает $Z(\beta,\tau)=Z(\beta)$. В этом случае происходит сбор статистики для вычисления термодинамических средних и переход к следующему шагу алгоритма.

Вероятности описанных выше процессов определяются из уравнения детального баланса для случайного блуждания по конфигурационному пространству. Ниже приведены выражения для этих вероятностный из работы [29]. Здесь и далее $\Delta \mathcal{V} =$ $= \mathcal{V}_{\mathrm{L}} - \mathcal{V}_{\mathrm{R}}$ — разница потенциальной энергии на левом и правом относительно оператора G состояни-AX, $\Delta \tau = \tau_L - \tau_R$.

Выбор направления действия G:

$$P^{LR}(\leftarrow) = \frac{Q^{LR}(\leftarrow)}{Q^{LR}(\leftarrow) + Q^{LR}(\rightarrow)},\tag{9}$$

где Q^{LR} (\leftarrow) вычисляется по формуле

$$Q^{LR}\left(\leftarrow\right) = f_{\leftarrow}^{LR} \left[1 - \alpha \cdot \min\left(1 \frac{f_{\rightarrow}^{LR}}{f_{\leftarrow}^{LR}}\right)\right], \tag{10}$$
 здесь f_{\leftarrow}^{LR} и f_{\rightarrow}^{LR} определяются выражениями:

$$f_{\leftarrow}^{LR} = \frac{L|\widehat{G}\widehat{T}|R}{L|\widehat{G}|R} + \frac{\Delta V}{1 - e^{-\Delta \tau \Delta V}},$$
 (11)

$$f_{\rightarrow}^{LR} = \frac{L|\widehat{T}\widehat{G}|R}{L|\widehat{G}|R} - \frac{\Delta V}{1 - e^{\Delta \tau \Delta V}}.$$
 (12)

Выбор нового момента

$$P^{LR}(\tau) = \frac{\Delta V e^{\tau \Delta V}}{\sigma^{\tau_L \Delta V} - e^{\tau_R \Delta V}}.$$
 (13)

Выбор нового оператора:

$$P_{\leftarrow}^{LR}(\Psi) = \frac{\langle L|\widehat{G}|\Psi\rangle\langle\Psi|\widehat{T}|R\rangle}{\langle L|\widehat{G}\widehat{T}|R\rangle}.$$
 (14)

Добавить оператор справа:

$$P_{\leftarrow}^{LR}(\dagger) = \frac{\langle L | \widehat{G} \widehat{T} | R \rangle}{\langle L | \widehat{G} | R \rangle} \frac{1}{f_{\leftarrow}^{LR}}.$$
 (15)

Добавить оператор слев

$$P_{\rightarrow}^{LR}(\dagger) = \frac{\langle L | \widehat{T}\widehat{G} | R \rangle}{\langle L | \widehat{G} | R \rangle} \frac{1}{f_{\rightarrow}^{LR}}.$$
 (16)

Продолжить процедуру обновления:

$$P_{\leftarrow}^{LR}(\circlearrowleft) = \alpha \min \left(1, \frac{f_{\leftarrow}^{LR}}{f_{\rightarrow}^{LR}}\right). \tag{17}$$

где $\alpha \in (0,1)$ — параметр оптимизации алгоритма (с увеличением а возрастает точность алгоритма, но его производительность снижается).

Обозначим $Q^{LR} = Q^{LR} (\leftarrow) + Q^{LR} (\rightarrow)$, тогда конфигурации принимаются согласно соотношению с большмановским весом:

$$q = \frac{Q^{LR}}{Q^{L'R'}} \tag{18}$$

или с псевдобольцмановским весом:

$$\frac{P_{\rm f}Q_{\rm f}S_{\rm f\to i}}{P_{\rm i}Q_{\rm i}S_{\rm i\to f}} = 1. \tag{19}$$

При расчете средних значений в данном методе необходимо учесть нормировку за счет псевдобольцмановского усреднения:

$$\langle \widehat{A} \rangle = \frac{\sum_{\Psi} \langle \Psi | \widehat{A}_{Q_{LR}} | \Psi \rangle}{\sum_{\Psi} \langle \Psi | \mathcal{Q}_{LR} | \Psi \rangle}, \tag{20}$$

где $Q^{LR} = Q^{LR} (\leftarrow) + Q^{LR} (\rightarrow)$, а суммирование проводится по всем диагональным состояниям Ψ, полученным в ходе работы алгоритма.

ВЛИЯНИЕ ЛОКАЛЬНЫХ КОРРЕЛЯЦИЙ НА ФАЗОВЫЕ СОСТОЯНИЯ

Из-за симметрии фазовых диаграмм системы относительно точки x = 0 расчеты производились для положительных значений х. Во всех симуляциях МК мы брали V/t = 0.75, что соответствует значениям параметров из работы [27]. Все температуры приводятся в единицах интеграла переноса t.

Моделирование производилось на квадратной решетке размера $L \times L$ с периодическими граничными условиями. В качестве параметра порядка СО фазы мы использовали структурный фактор среднего значения оператора \hat{S}_{7} в точке $\hat{k} = (\pi, \pi)$:

$$S_{\text{CO}}(\vec{k}) = \frac{1}{N^2} \sum_{i,j}^{N} S_{iz} S_{jz} e^{-i\vec{k}(\vec{r}_i - \vec{r}_j)}.$$
 (21)

Параметр порядка SF-фазы (stiffness) рассчитывался по формуле:

$$\rho_{\rm s} = \left(\left\langle W_{\rm x}^2 \right\rangle + \left\langle W_{\rm y}^2 \right\rangle \right) / 2 \tag{22}$$

где $\beta = 1/T$, а W_x и W_y — числа поворота (winding numbers) вдоль направлений x и y на решетке. Фаза PS в нашем случае соответствует области, где оба параметра порядка отличны от нуля. Все критические температуры были определены по минимуму производной соответствующего параметра порядка. Алгоритм SGF крайне требователен к вычислительным ресурсам, поэтому было решено ограничиться линейным размером системы L=24 (N=576). Количество шагов Монте-Карло под-

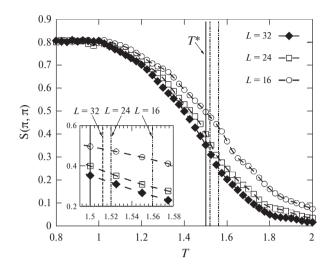


Рис. 2. Температурные зависимости структурного фактора $S_{\rm CO}$ (π , π) для различных размеров решетки L, полученные методом SGF в пределе «жестких» бозонов. Параметры модели при $V/t=0.75, \, \frac{\Delta}{t}=-2$, x=0. Пунктирные вертикальные линии соответствуют полученным критическим температурам, а значение T^* взято из работы [27].

биралось таким образом, чтобы погрешности параметров порядка и энергии не превышали 5 %. В качестве апробации получаемых результатов мы провели серию моделирования для различных L в пределе «жестких» бозонов (Рис.2).

На рис. 3 приведены фазовые диаграммы в переменных T-x для различных значений параметра локальных корреляций Δ , полученные методами SGF и MFA. Сравнение методов позволяет понять роль квантовых флуктуаций в формировании фазовых состояний модели. Общей особенностью всех фазовых диаграмм является заниженная доля фазы SF относительно фазы CO в методе MFA. Мы связываем это с тем, что метод SGF в отличии от MFA позволяет корректно учитывать вклад от недиагональных операторов гамильтониана, входящих в \widehat{T} .

Влияние локальных корреляций на фазовые диаграммы при расчете методом SGF проявляется аналогично расчетам MFA. При $\Delta \leqslant 0$ фазовая диаграмма качественно напоминает фазовую диаграмму модели жестких бозонов [27]. С ростом Δ объем CO фазы увеличивается, наблюдается смещение вправо трикритической точки CO-SF-PS. Однако при расчете методом SGF эти эффекты проявляются с задержкой, то

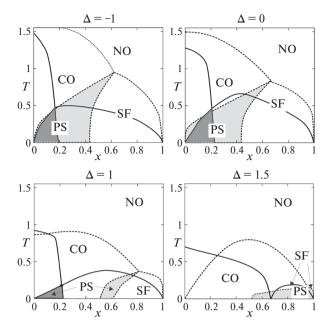


Рис. 3. Температурные фазовые диаграммы для значения V/t=0.75. Темная (светлая) закрашенная область соответствует PS-фазе, полученной методом SGF(MFA). Сплошной и пунктирной линиями обозначены критические температуры, полученные методами SGF и MFA соответственно.

есть происходит перенормировка параметра Δ . Также смещается положение особой точки Δ^* , при которой качественно меняется характер зависимости $T_{\rm CO}(x)$, в частности, граница существования зарядового порядка смещается в сторону больших значений x. Для MFA это значение $\Delta^*_{\rm MFA}=0.75t$, а для SGF, на основе оценок для малых решеток, $\Delta^*_{\rm SGF}\approx 1.1t$. Мы полагаем, что эти особенности также связаны с более точным вычислением кинетической части энергии системы при использовании квантового алгоритма.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

С помощью метода SGF были получены фазовые T-x диаграммы модели и исследована их эволюция с увеличением параметра локальных корреляций Δ . Общей тенденцией является подавление фаз CO и SF при увеличении Δ . Сравнение этих результатов с данными MFA показало, что переход к квантовому алгоритму проявляется в перенормировке параметра Δ . В методе SGF качественно наблюдаются те же эффекты, что и в MFA, но при больших значениях Δ . Также в методе SGF доля SF фазы на диаграмме оказывается выше, чем в MFA. При этом положение трикритической точки в SGF всегда находится при меньших значениях x. Мы объясняем это тем, что учет квантовых флуктуаций понижает кинетическую энергию системы, что делает фазу SF более выгодной.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего

образования Российской Федерации в рамках Про- 15. Yanav Y., Braumuller J., Gustavsson S. et.al. // Npi граммы развития Уральского федерального университета имени первого Президента России Б.Н. Ельцина в соответствии с программой стратегического академического лидерства «Приоритет-2030».

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. Heng A.J.R., Guo W., Sandvik A.W., Sengupta P. // Phys. Rev. B. 2019. V. 100. Art. No. 104433.
- 2. Hebert F., Batrouni G.G., Scalettar R.T. et al. // Phys. Rev. B. 2001. V. 65. Art. No. 014513.
- Sengupta P., Pryadko L.P., Alet F. et al. // Phys. Rev. Lett. 2005. V. 94. Art. No. 207202.
- 4. Jiang H.Ch., Fu L., Pair C. Xu // Phys. Rev. B. 2012. V. 86. Art. No. 045129.
- 5. Schmidt K.P., Dorier J., Lauchli A., Mila F. // Phys. Rev. B. 2006. V. 74. Art. No. 174508.
- Capogrosso-Sansone B., Soyler S.G., Prokof 'ev N., Svistunov B. // Phys. Rev. A. 2008. V. 77. Art. No. 015602.
- Chen Y.Ch., Melko R.G., Wessel S., Kao Y.J. // Phys. Rev. B. 2008. V. 77. Art. No. 014524.
- 8. Dutta O., Gajda M., Hauke P. et al. // Rep. Progr. Phys. 2015. V. 78. Art. No. 066001.
- 9. Demler E., Hanke W., Zhang S.C. // Rev. Mod. Phys. 2004. V. 76. No. 3. P. 909.
- 10. Greiner M., Mandel O., Esslinger T. et al. // Nature. 2002. V. 415. P. 39.
- 11. Morsch O., Oberthaler M. // Rev. Mod. Phys. 2006. V. 78. P. 179215.
- 12. *Zhou X.-F.*, *Zhang Y.-S.*, *Guo G.-C.* // Phys. Rev. A. 2009. V. 80. Art. No. 013605.
- 13. Islam R., Ma R., Preiss P.M. et al. // Nature. 2017. V. 528. P. 77.
- 14. Winkler K., Thalhammer G., Lang F. et al. // Nature. 2006. V. 441. P. 853.

- Quantum Inf. 2020. V. 6. Art. No. 58.
- 16. Karamlou A.H., Braumuller J., Yanay et al. // Npj Ouantum Inf. 2022. V. 8. P. 35.
- 17. Gupta R.S., Sundaresan N., Alexander T. et. al. // Nature, 2024, V. 625, P. 259.
- 18. *Гуслянникова М.О., Башкиров Е.К.* // Изв. РАН. Сер. физ. 2020. T. 84. № 3. C. 367: Guslvannikova M.O.. Bashkirov E.K. // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2020. V. 84. No. 3. P. 281.
- 19. Panov Y.D., Moskvin A.S., Vasinovich E.V., Konev V.V. // Phys. B. Cond. Matter. 2018. V. 536. P. 464.
- 20. Altman E., Auerbach A. // Phys. Rev. Lett. 2002. V. 89. No. 25. Art. No. 250404.
- 21. Batista C.D., Ortiz G. // Adv. Phys. 2004. V. 53. P. 1.
- 22. Berg E., Dalla Torre E.G., Giamarchi T., Altman E. // Phys. Rev. B. 2008. V. 77. No. 24. Art. No. 245119.
- 23. Белоненко М.Б., Конобеева Н.Н. // Изв. РАН. Сер. физ. 2022. Т. 86. № 12. С. 1694; Belonenko M. B., Konobeeva N.N. // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2022. V. 86. No. 12. P. 1441.
- 24. Москвин А.С. // ЖЭТФ. 2015. Т. 148. № 3. С. 549; Moskvin A.S. // JETP. 2015. V. 121. P. 477.
- 25. Matsubara T., Matsuda H. // Progr. Theor. Phys. 1956. V. 16. No. 6. P. 569.
- 26. Pollock E.L., Ceperley D.M. // Phys. Rev. B. 1987. V. 36. P. 8343.
- 27. Schmid G., Todo S., Troyer M., Dorneich A. // Phys. Rev. Lett. 2002. V. 88. Art. No. 167208.
- 28. Micnas R. // Phys. Rev. B. 1984. V. 29. P. 2784.
- 29. Konev V.V., Panov Yu.D. // Phys. Solid State. 2021. V. 63. P. 1426.
- 30. Robaszkiewicz S., Micnas R., Chao K.A. // Phys. Rev. B. 1981. V. 23. P. 1447.
- 31. Rousseau V.G. // Phys. Rev. E. 2008. V. 78. Art. No. 056707.
- 32. Rousseau V.G., Galanakis D. // arXiv: 1209.0946. 2012.

The influence of local correlations on the phase states in the model of «semi-hard-core» bosons on a square lattice

V. A. Ulitko^{1, *}, V. V. Konev¹, A. A. Chikov¹, Y. D. Panov¹

¹Ural Federal University, Ekaterinburg, 620002, Russia *e-mail: vasiliv.ulitko@urfu.ru

We considered a model of charged «semi-hard-core» bosons on a square lattice with a possible occupation number $n_i = 0$, 1, 2 at each node. Using the quantum Monte-Carlo method, temperature phase diagrams of the model were obtained and the influence of local charge correlations was studied. It is shown that local charge correlations lead to an increase in the role of quantum fluctuations in the formation of phase states.

Keywords: hard-core bosons model, pseudospin formalism, quantum Monte-Carlo, phase separation