**Исследование энергии основного состояния модели на гексагональной решетке**

**Хашаев Раиль Муслимович1,2, Баховидинов Мурод Султонович2**

*1Московский физико-технический институт, физтех-школа ЛФИ,*

*141701, Московская область, Долгопрудный, Институтский переулок, д. 9*

*2Российский квантовый центр, группа “Теория многих тел”,*

*143026, г. Москова, Инновационный центр Сколково, Большой бул., д. 30, стр. 1*

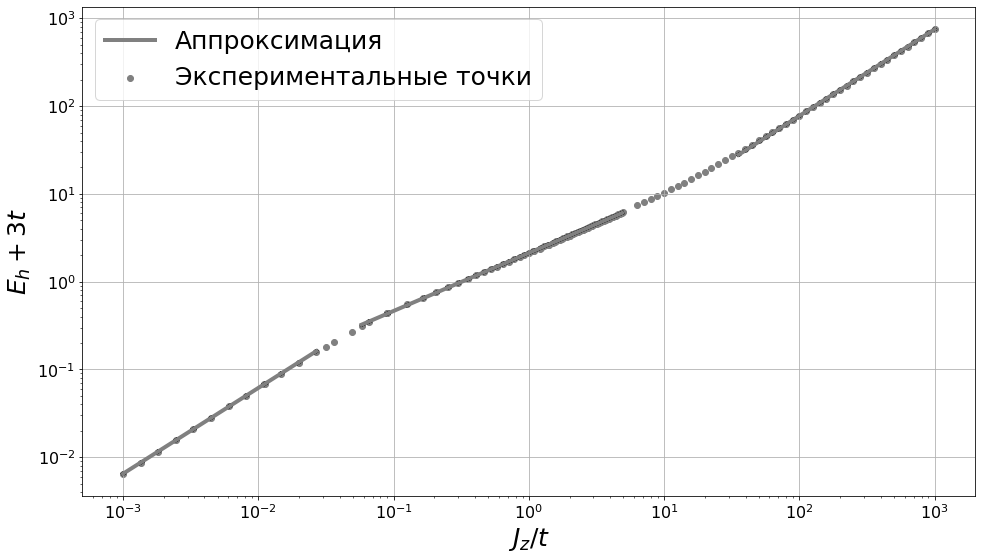
*khashaev.rm@phystech.edu*

Один из способов описания высокотемпературной сверхпроводимости это моделирование дырок в двумерной решетке в рамках модели. Модель является предельным случаем модели Хаббарда при сильном отталкивание частиц на одном узле.

В рамках данной модели на каждом узле может быть не более одной частицы. Суммирование идет по всем ближайшим соседям. В данной модели нам интересно поведение и энергия основного состояния дырки. Для этого мы будем ее рассматривать на фоне электронов, находящихся в фазе Нила (антиферромагнитном). Тогда энергия дырки:

Где энергия всего кристалла в основном состоянии, а энергия системы в основном состояния при отсутствии дырок. В рамках данной работы ставится цель исследования поведения спектра дырки на гексагональной решетке при различном соотношении .

Для описания квантовых систем, состоящих из большого количества частиц, эффективен численный итерационный метод Density Matrix Renormalization Group (DMRG). В данной работе использовалась вариация метода на основе тензорных сетей MPS DMRG. При моделировании мы положили и поместили одну дырку в решетку. Результаты моделирования предоставлены на рис. 2.



**Рис.2.** График зависимости энергии дырки в основном состоянии от

Из приведённого графика можно увидеть три диапазона с различным поведением энергии:

Здесь приведены погрешности аппроксимации по полученным точкам. Стоит заметить, что чем меньше значение тем больше нужно итераций для схождения алгоритма. Поэтому при малых значениях большую погрешность вносит сам метод.

Объясним каждый из режимов. Для начала заметим, что при основное состояние сильно вырождено. При сколь угодно малом это вырождение снимается, в следствии чего в первом порядке получаем поправку пропорциональную .

В диапазоне реализуется промежуточный режим, когда энергия связи и кинетическая энергия дырки сравнимы. В этом случае можно ввести струнный базис [3] и переписать гамильтониан в виде:

Энергия основного состояния данного гамильтониана , где коэффициент может быть найден численно.

При , энергия связи много больше чем кинетическая энергия, таким образом дырку можно считать локализованной. Тогда из теории возмущений лидирующим вкладом будет .

Таким образом, в гексагональной решетки, было определенно поведение спектра дырки

при различных значениях параметра . Результаты моделирования совпадаю с теоретическими. В режиме слабого взаимодействия, при не было замечено проявление поляронного режима c коренной зависимостью спектра [4]. Это может быть связано с тем, что было взято недостаточно много узлов решетки.

Список использованных источников

1. Barnes, T., Dagotto, E., Moreo, A., & Swanson, E. S. (1989). Spin-hole polaron of the t-Jz model // Physical Review. B, Condensed Matter, 40(16), 10977–10981.
2. Kadosawa, M., Nakamura, M., Ohta, Y., & Nishimoto, S. (2023). One-dimensional projection of two-dimensional systems using spiral boundary conditions // Physical Review. B./Physical Review. B, 107(8).
3. Shraiman, B. I., & Siggia, E. D. (1988). Two-particle excitations in antiferromagnetic insulators // Physical Review Letters, 60(8), 740–743.
4. White, S. R., & Affleck, I. (2001). Density matrix renormalization group analysis of the Nagaoka polaron in the two-dimensional t−J model // Physical Review. B, Condensed Matter, 64(2).