**Исследование энергии основного состояния** $t-J\_{z}$ **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 $t-J\_{z}$ модели. Модель является предельным случаем модели Хаббарда при сильном отталкивание частиц на одном узле.

$$H=-t\sum\_{<i,j>,σ}^{}\left(c\_{iσ}^{+}c\_{jσ}+h.c.\right)+J\_{z}\sum\_{<i,j>}^{}S\_{i}^{z}S\_{j}^{z}$$

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:

$$E\_{h}=E\_{0}-E\_{Neel}$$

Где $E\_{0}$ энергия всего кристалла в основном состоянии, а $E\_{Neel}$ энергия системы в основном состояния при отсутствии дырок. В рамках данной работы ставится цель исследования поведения спектра дырки на гексагональной решетке при различном соотношении $^{t}/\_{J\_{z}}$.

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 $t=1$ и поместили одну дырку в решетку. Результаты моделирования предоставлены на рис. 2.



**Рис.2.** График зависимости энергии дырки в основном состоянии от $J\_{z}$

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

$$\left\{\begin{array}{c}E\_{h}=(-3.0009\pm 0.0002)t+(4.794\pm 0.004)J\_{z}^{0.941\pm 0.004}, ^{J\_{z}}/\_{t}<0.1\\E\_{h}=(-2.977\pm 0.003)t+(2.092\pm 0.004)J\_{z}^{0.6695\pm 0.0008}, 0.1<^{J\_{z}}/\_{t}<5\\E\_{h}=\left(-0.055\pm 0.003\right)+(0.75078\pm 0.00008)J\_{z}^{0.99985\pm 0.00002}, ^{J\_{z}}/\_{t}>30\end{array}\right.$$

Здесь приведены погрешности аппроксимации по полученным точкам. Стоит заметить, что чем меньше значение $^{J\_{z}}/\_{t}$ тем больше нужно итераций для схождения алгоритма. Поэтому при малых значениях $^{J\_{z}}/\_{t}$ большую погрешность вносит сам метод.

Объясним каждый из режимов. Для начала заметим, что при $J\_{z}=0$ основное состояние сильно вырождено. При сколь угодно малом $J\_{z}$ это вырождение снимается, в следствии чего в первом порядке получаем поправку пропорциональную $J\_{z}$.

В диапазоне $0.1<^{J\_{z}}/\_{t}<5$ реализуется промежуточный режим, когда энергия связи и кинетическая энергия дырки сравнимы. В этом случае можно ввести струнный базис [3] и переписать гамильтониан в виде:

$$\hat{H}=-2\sqrt{2}-\sqrt{2}\frac{d^{2}}{dx^{2}}+J\_{z}\frac{x}{2}$$

Энергия основного состояния данного гамильтониана $E\_{h}=-2\sqrt{2}+aJ\_{z}^{^{2}/\_{3}}$, где коэффициент $a$ может быть найден численно.

При $^{J\_{z}}/\_{t}>30$, энергия связи много больше чем кинетическая энергия, таким образом дырку можно считать локализованной. Тогда из теории возмущений лидирующим вкладом будет $E\_{h}=J\_{z}(\frac{3}{4}+O\left((^{t}/\_{J\_{z}})^{2}\right))$.

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

при различных значениях параметра $J\_{z}$. Результаты моделирования совпадаю с теоретическими. В режиме слабого взаимодействия, при $^{J\_{z}}/\_{t}\ll 1$ 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).