

Note for Exact Diagonalization of the extended Hubbard model

1. 原理介绍

扩展 Hubbard 模型的 Hamilton 量为：

$$H = -t \sum_{\{i,j\},\sigma} (C_{i,\sigma}^\dagger C_{j,\sigma} + C_{j,\sigma}^\dagger C_{i,\sigma}) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - V \sum_{\{\{i,j\}\}} (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow})(n_{j\uparrow} + n_{j\downarrow}) - \mu \sum_{i,\sigma} n_{i,\sigma}$$

按照顺序，第一项刻画了电子在最近邻格点间的跃迁(**Hopping**)；第二项描述存在反自旋电子对的格点表现出的强关联作用；第三项描述 **最近邻作用**；最后一个**化学势项**体现系统填充情况对能量的影响。

在本题中，我们考虑一个 **6 格点 ladder**——由于 Hilbert 空间有限，我们可直接采用 **精确对角化**的方法。其基本思路是：

1. 构造 Fock 空间基矢，并在该基下构建 给定的 Hamiltonian 矩阵；
2. 利用数值方法对各个子空间分别进行对角化，由此计算能谱与本征态；
3. 最后在基态波函数上计算相应物理量。

2. task1.py 思路介绍

(1) 预置函数

- `generate_basis(n_sites, n_particles)`
用二进制整数表示占据态，组合生成所有可能的配置。每一位表示一个 site 是否有粒子 (0/1)。保证每个 site 每个自旋最多一个电子。
- `count_set_bits(n)`
经典的 popcount 算法，统计一个整数二进制表示中的 1 的个数，用于计算粒子数或双占据数。
- `get_fermionic_sign(state, i, j)`
处理 hopping 过程中的费米子符号。电子从 j 跳到 i 时，若二者之间有 p 个电子，则需要交换 p 次，符号因子为 $(-1)^p$ 。这保证了 Hamiltonian 的反对易性。

(2) main 函数结构

- 子空间划分

遍历 $(N_{\uparrow}, N_{\downarrow})$ ，利用 $U(1)$ 对称性将 Hilbert 空间分解为 49 个子空间。

- 构造 Hamiltonian 矩阵

在每个子空间内分别处理对角项和非对角项。

其中，在**对角项**板块分别计算了 U 项， $-\mu$ 项和 $-V$ 项并相加；

在**非对角项 (hopping)** 板块，先检查能否 hop，再修改二进制态并通过 `map_up / map_down` 定位新态索引，最后加上 $-t \cdot \text{sign}$ 并对各 hop 对求和。

- 对角化与结果计算

使用 `numpy.linalg.eigh` 求解本征值与本征矢：

i. 若在 $(N_{\uparrow} = 2, N_{\downarrow} = 4)$ ，输出最低 6 个本征值。

ii. 收集全体系所有本征值，排序后输出最低 20 个。

iii. 找到基态，存储其本征矢以计算期望值。

- 基态观测测量计算

基于基态波函数，逐 site 计算 $\langle n_{i,\uparrow} \rangle$ 和 $\langle n_{i,\downarrow} \rangle$ 得到电子分布情况。

3. 结果分析

在作业参数 $t = 1.0, U = 8.0, V = 0.4, \mu = 4.0$ 下，运行结果如下图所示：

```
Exact Diagonalization for Extended Hubbard Model
Parameters: t=1.0, U=8.0, V=0.4, mu=4.0
=====
(1) Lowest 6 eigenvalues in (N_up=2, N_down=4) subspace:
    [-27.30624878 -27.00069745 -26.92490668 -26.77252547 -26.66863714
     -26.54837612]

(2) Lowest 20 eigenvalues of the whole system:
    [-27.52865033 -27.30624878 -27.30624878 -27.30624878 -27.00069745
     -27.00069745 -27.00069745 -26.92490668 -26.92490668 -26.92490668
     -26.81123368 -26.77252547 -26.77252547 -26.77252547 -26.77252547
     -26.77252547 -26.67702648 -26.66863714 -26.66863714 -26.66863714]

(3) Expectation value <n_i,sigma> for each site and spin:
    Density_Up_Spin:  [0.49979075 0.50139373 0.49881552 0.50139373 0.49881552 0.49979075]
    Density_Down_Spin: [0.49979075 0.50139373 0.49881552 0.50139373 0.49881552 0.49979075]

Ground state found in (N_up=3, N_down=3) subspace with energy E_0 = -27.528650326055775
```

(1) 子空间最低能量

在 $(N_{\uparrow} = 2, N_{\downarrow} = 4)$ 子空间中，最低 6 个本征值均在 $[-27.30, -26.55]$ 之间。相较于样例的参数与输出结果，该结果表明在强 U 和较大化学势下，体系能量会整体向下平移。

(2) 全局最低能量

全体系最低 20 个本征值进一步显示，基态能量约为 $E_0 \approx -27.53$ ，落在 $(N_\uparrow = 3, N_\downarrow = 3)$ 子空间。说明在这些参数下，体系更倾向于 **半满填充 (6 个 site 上 6 个电子)**。

(3) 基态密度分布

结果显示每个 site 上 \uparrow 与 \downarrow 的占据数几乎均匀分布在 ~ 0.5 ，符合对称性与平均填充的直观认识。体系呈现近似均匀电子液体的特征，没有出现明显的电荷不均匀。

4. 总结

- **程序实现**：通过位运算高效构造 Hamiltonian，结合 NumPy 对角化，完整实现了扩展 Hubbard 模型的 ED。
- **物理特征**：在较强 U 与适中 μ 下，体系基态出现在 $(3, 3)$ 半满填充子空间，电子分布均匀。