固体理论, Homework 04

王石嵘 20110220098

April 6, 2021

1 二阶微扰论：

考虑一个由两个格点 i 和 j 构成的系统，每个格点上有一个自旋 1/2 的电子模式。两个格点之间跃迁 (hopping) 的矩阵元为 $-t$，每个格点上如果占据了两个电子时的库伦排斥相互作用为 U。忽略两个格点之间的相互作用。

1. 写下系统 $t \ll U$ 的二次量子化的哈密顿量。
2. 考虑系统总电子数 $n = 2$ 的情形。在 $t = 0$ 时，列出体系的所有简并的基态及基态能量。
3. 当 $t \ll U$ 时，利用简并态微扰论，求出基态子空间上的有效哈密顿量，并求出基态子空间的能量本征态和本征值。以上计算需准确到包含非平庸结果的最低阶展开，并讨论在更高阶展开下简并会不会进一步解除？
4. 写出上述有效哈密顿量的二次量子化形式。

Solution:

1.

$$H = t_0 \sum_\sigma \left(c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \right) - t \sum_\sigma c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \frac{U}{2} \sum_\sigma \left(n_{i,\sigma}^\dagger n_{i,-\sigma} + n_{j,\sigma}^\dagger n_{j,-\sigma} \right) \tag{1.1}$$

2.

$$H = t_0 \sum_\sigma (n_{i\sigma} + n_{j\sigma}) + \frac{U}{2} \sum_\sigma \left(n_{i,\sigma}^\dagger n_{i,-\sigma} + n_{j,\sigma}^\dagger n_{j,-\sigma} \right) \tag{1.2}$$

degenerate ground states: $|\uparrow,\downarrow\rangle, |\downarrow,\uparrow\rangle$
ground energy: t_0

3.4. Let $H = H_0 + V$, where

$$H_0 = t_0 \sum_\sigma (n_{i\sigma} + n_{j\sigma}) + \frac{U}{2} \sum_\sigma \left(n_{i,\sigma}^\dagger n_{i,-\sigma} + n_{j,\sigma}^\dagger n_{j,-\sigma} \right) \quad V = -t \sum_\sigma c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \tag{1.3}$$

the eigenstates and eigenvalues of H_0 are:
ground states: $|\psi_{0a}\rangle = |\uparrow,\downarrow\rangle, |\psi_{0b}\rangle = |\downarrow,\uparrow\rangle$, $\varepsilon_0 = t_0$
excited states: $|\psi_1\rangle = |\uparrow,\uparrow\rangle$, $\varepsilon_1 = t_0 + U$
Using degenerate perturbation,

$$E^{(1)} = \frac{1}{2}\left(V_{0a,0a} + V_{0b,0b} \pm \sqrt{(V_{0a,0a} - V_{0b,0b})^2 + 4|V_{0a,0b}|^2} \right) \tag{1.4}$$

where $V_{mn} = \langle m \,|\, V \,|\, n \rangle$,

$$E^{(1)} = \frac{1}{2}(0 \pm \sqrt{0 + 4(-t)^2}) = \pm t \tag{1.5}$$