$H = -t \sum_{ijs} c_{is}^\dagger c_{js} + h.c. + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$　ハバード模型

$S_{ix} = \frac{1}{2} (c_{i\uparrow}^\dagger, c_{i\downarrow}^\dagger) \overset{\sigma_x}{\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}} \begin{pmatrix} c_{i\uparrow} \\ c_{i\downarrow} \end{pmatrix}$

3.4.2 SU(2) 対称性

U(1) 位相変換

粒子数の議論にならって，全スピン $\boldsymbol{S} = \sum_i \boldsymbol{S}_i$ の保存則がハバード模型の SU(2) 対称性に起因することを示そう。

ここで

iサイトのspin 1/2 演算子：電子のスピン

$$\begin{pmatrix} S_{ix} \\ S_{iy} \\ S_{iz} \end{pmatrix} = \boldsymbol{S}_i = \frac{1}{2} \boldsymbol{c}_i^\dagger \boldsymbol{\sigma} \boldsymbol{c}_i, \quad \boldsymbol{c}_i = \begin{pmatrix} c_{i\uparrow} \\ c_{i\downarrow} \end{pmatrix},$$

パウリ行列

$\boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \end{pmatrix}$

$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

である。$\boldsymbol{n}$ を任意の単位ベクトルとして

$$\mathcal{G} = \boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{S} = \boldsymbol{n} \cdot \sum_i \boldsymbol{S}_i$$

$\sigma_i^2 = \sigma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$

$\sigma_i \sigma_j = -\sigma_j \sigma_i \quad (i \neq j)$

$= i \varepsilon_{ijk} \sigma_k$

に関して粒子数の保存と同様に考えよう。

$\sigma_x \sigma_y = i \sigma_z$
$\sigma_y \sigma_z = i \sigma_x$
$\sigma_z \sigma_x = i \sigma_y$

$$e^{i\theta c^\dagger c}\, c\, e^{-i\theta c^\dagger c} = e^{-i\theta} c$$

$$e^{i\theta c^\dagger c}\, c^\dagger e^{-i\theta c^\dagger c} = c^\dagger e^{+i\theta}$$

まず，先ほどの議論を一般化しよう。$\boldsymbol{c}^\dagger = (c_1^\dagger, c_2^\dagger, \cdots)$ として[2] エルミート行列 $\boldsymbol{G}$ に対して $\mathcal{G} = \boldsymbol{c}^\dagger \boldsymbol{G} \boldsymbol{c}$ として

$$\boxed{\begin{aligned} e^{i\theta\mathcal{G}} \boldsymbol{c} e^{-i\theta\mathcal{G}} &= e^{-i\theta\boldsymbol{G}} \boldsymbol{c} \\ e^{i\theta\mathcal{G}} \boldsymbol{c}^\dagger e^{-i\theta\mathcal{G}} &= \boldsymbol{c}^\dagger e^{i\theta\boldsymbol{G}} \end{aligned}}$$

$$d^\dagger g d = c^\dagger U g U^\dagger c \qquad d = U^\dagger c \qquad \boxed{c = Ud}$$

$$= \sum_i g_i d_i^\dagger d_i$$

[2]エルミート行列 $\boldsymbol{G}$ に対して $\mathcal{G} = \boldsymbol{c}^\dagger \boldsymbol{G} \boldsymbol{c}$ とすると $\boldsymbol{G}$ をユニタリ行列 $\boldsymbol{U}$ で対角化して $\boxed{\boldsymbol{G} = \boldsymbol{U} \boldsymbol{g} \boldsymbol{U}^\dagger}$, $\boldsymbol{g} = \mathrm{diag}\,(g_1, g_2, \cdots)$, $g_i \in \mathbb{R}$ とすれば，$\mathcal{G} = \sum_i g_i d_i^\dagger d_i$。ここで $\boldsymbol{d} = \boldsymbol{U}^\dagger \boldsymbol{c}, \boldsymbol{c} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{d}$ よって

$$\mathcal{U} = e^{i\theta\mathcal{G}},\ \mathcal{U} d_i \mathcal{U}^\dagger = e^{-i\theta g_i} d_i$$

$$\mathcal{U}\boldsymbol{c}\mathcal{U}^\dagger = \boldsymbol{U}\mathcal{U}\boldsymbol{d}\mathcal{U}^\dagger = \boldsymbol{U} e^{-i\theta\boldsymbol{g}} \boldsymbol{d} = \boldsymbol{U} e^{-i\theta\boldsymbol{g}} \underbrace{\boldsymbol{U}^\dagger \boldsymbol{U}}_{=1} \boldsymbol{d} = e^{-i\theta\boldsymbol{G}} \boldsymbol{c}$$

$$\mathcal{U}\boldsymbol{c}^\dagger\mathcal{U}^\dagger = \boldsymbol{c}^\dagger e^{+i\theta\boldsymbol{G}}$$

$$U e^{-i\theta g} U^\dagger = e^{-i\theta G}$$

$$\mathcal{G} = \boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{S} = \boldsymbol{n} \cdot \sum_i \boldsymbol{S}_i$$

$\mathcal{G} = \frac{1}{2}\vec{n}\cdot\sigma$

$$\mathcal{U} = e^{i\theta\mathcal{G}}$$

$e^{i\theta\mathcal{G}}\, c_i\, e^{-i\theta\mathcal{G}} = \underbrace{e^{-i\theta\mathcal{G}}}_{= u}\, c_i$

に対して

c_i

$$\mathcal{U}\boldsymbol{c}_i\mathcal{U}^\dagger = \mathcal{U}\begin{pmatrix} c_{i\uparrow} \\ c_{i\downarrow} \end{pmatrix}\mathcal{U}^\dagger = u\begin{pmatrix} c_{i\uparrow} \\ c_{i\downarrow} \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} d_{i\uparrow} \\ d_{i\downarrow} \end{pmatrix}$$

$$u = e^{-i\frac{\theta}{2}\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}},$$

$$u^\dagger = u^{-1}$$

$$\det u = e^{i\frac{\theta}{2}\boldsymbol{n}\cdot\mathbf{Tr}\boldsymbol{\sigma}} = 1$$

$\sigma^\dagger = \sigma$

$\mathrm{Tr}\,\sigma_{x,y,z} = 0$

$u^\dagger = \begin{pmatrix} \alpha^* & \beta^* \\ -\beta & \alpha \end{pmatrix}$

これを $u \in SU(2)$ と書く。より具体的には

$u^\dagger u = \sigma_0$

$$u = \begin{pmatrix} \alpha & -\beta^* \\ \beta & \alpha^* \end{pmatrix}, \quad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$$

$u^\dagger u = 1$

$$\mathcal{U} c_i \mathcal{U}^\dagger = u c_i$$

$$\mathcal{U} H \mathcal{U}^\dagger = ?$$

$\mathcal{U}$ に関して，まずホッピング項並びに化学ポテンシャルの項は

$$\sum_s c^\dagger_{i,s} c_{j,s} = \mathbf{c}^\dagger_i \mathbf{c}_j = \begin{pmatrix} c^\dagger_{i\uparrow} & c^\dagger_{i\downarrow} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{j\uparrow} \\ c_{j\downarrow} \end{pmatrix}$$

$$= \quad c_i^\dagger u^\dagger \quad u c_j$$

$$\mathcal{U}(\mathbf{c}^\dagger_i \mathbf{c}_j)\mathcal{U}^\dagger = \mathcal{U}\mathbf{c}^\dagger_i \underbrace{\mathcal{U}^\dagger \mathcal{U}}_{1} \mathbf{c}_j \mathcal{U}^\dagger = \mathbf{c}^\dagger_i u^\dagger u \mathbf{c}_j = \boxed{\mathbf{c}^\dagger_i \mathbf{c}_j}$$

と不変である。

$n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$: 相互作用項？

また，相互作用項であるが，サイトのラベル i を省略して

$$\mathcal{U}\boldsymbol{c}\mathcal{U}^\dagger = u\boldsymbol{c} = \begin{pmatrix}\alpha & -\beta^* \\ \beta & \alpha^*\end{pmatrix}\boldsymbol{c} = \begin{pmatrix}\alpha c_\uparrow - \beta^* c_\downarrow \\ \beta c_\uparrow + \alpha^* c_\downarrow\end{pmatrix}$$

$\mathcal{U} n_\uparrow n_\downarrow \mathcal{U}^\dagger$

$u \in SU(2) \Rightarrow |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$

$\mathcal{U}^\dagger \mathcal{U}$

$$\mathcal{U}n_\uparrow\mathcal{U} = (\alpha^* c_\uparrow^\dagger - \beta c_\downarrow^\dagger)(\alpha c_\uparrow - \beta^* c_\downarrow) = |\alpha|^2 n_\uparrow + |\beta|^2 n_\downarrow - \alpha\beta c_\downarrow^\dagger c_\uparrow - \alpha^*\beta^* c_\uparrow^\dagger c_\downarrow$$

$$\mathcal{U}n_\downarrow\mathcal{U} = (\beta^* c_\uparrow^\dagger + \alpha c_\downarrow^\dagger)(\beta c_\uparrow + \alpha^* c_\downarrow) = \underset{\text{Ⓐ}}{|\beta|^2 n_\uparrow} + \underset{\text{Ⓑ}}{|\alpha|^2 n_\downarrow} + \underset{\text{Ⓒ}}{\alpha\beta c_\downarrow^\dagger c_\uparrow} + \underset{\text{Ⓓ}}{\alpha^*\beta^* c_\uparrow^\dagger c_\downarrow}$$

$\mathcal{U} n_\uparrow \mathcal{U}$

$= \mathcal{U} c_\uparrow^\dagger \mathcal{U}^\dagger \, \mathcal{U} c_\uparrow \mathcal{U}$

$$\begin{aligned}
\mathcal{U}n_\uparrow n_\downarrow\mathcal{U}^\dagger &= (|\alpha|^2 n_\uparrow + |\beta|^2 n_\downarrow - \alpha\beta c_\downarrow^\dagger c_\uparrow - \alpha^*\beta^* c_\uparrow^\dagger c_\downarrow)|\beta|^2 n_\uparrow \quad \text{Ⓐ} \\
&+ (|\alpha|^2 n_\uparrow + |\beta|^2 n_\downarrow - \alpha\beta c_\downarrow^\dagger c_\uparrow - \alpha^*\beta^* c_\uparrow^\dagger c_\downarrow)|\alpha|^2 n_\downarrow \quad \text{Ⓑ} \\
&+ (|\alpha|^2 n_\uparrow + |\beta|^2 n_\downarrow - \alpha\beta c_\downarrow^\dagger c_\uparrow - \alpha^*\beta^* c_\uparrow^\dagger c_\downarrow)\alpha\beta c_\downarrow^\dagger c_\uparrow \quad \text{Ⓒ} \\
&+ (|\alpha|^2 n_\uparrow + |\beta|^2 n_\downarrow - \alpha\beta c_\downarrow^\dagger c_\uparrow - \alpha^*\beta^* c_\uparrow^\dagger c_\downarrow)\alpha^*\beta^* c_\uparrow^\dagger c_\downarrow \quad \text{Ⓓ} \\
&= |\alpha|^2|\beta|^2 n_\uparrow + |\beta|^4 n_\uparrow n_\downarrow - \alpha\beta|\beta|^2 c_\downarrow^\dagger c_\uparrow + 0 \\
&+ |\alpha|^4 n_\uparrow n_\downarrow + |\alpha|^2|\beta|^2 n_\downarrow + 0 - \alpha^*\beta^*|\alpha|^2 c_\uparrow^\dagger c_\downarrow \\
&+ 0 + \alpha\beta|\beta|^2 c_\downarrow^\dagger c_\uparrow + 0 - |\alpha|^2|\beta|^2 n_\uparrow(1 - n_\downarrow) \\
&+ |\alpha|^2\alpha^*\beta^* c_\uparrow^\dagger c_\downarrow + 0 - |\alpha|^2|\beta|^2 n_\downarrow(1 - n_\uparrow) + 0 \\
&= (|\alpha|^2 + |\beta|^2)^2 n_\uparrow n_\downarrow = n_\uparrow n_\downarrow
\end{aligned}$$

$1 - cc^\dagger$

$cc^\dagger c = c$

$c^\dagger n = 0$

$1 - cc^\dagger$

$c^\dagger c \cdot c^\dagger = c^\dagger$

$n c^\dagger = c^\dagger c c^\dagger = c^\dagger(1 - c^\dagger c) = c^\dagger$

よって

$$\mathcal{U}H\mathcal{U}^\dagger = H$$

$$\mathcal{G} = \boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{S} = \boldsymbol{n} \cdot \sum_i \boldsymbol{S}_i$$

$$\mathcal{U} = e^{i\theta\mathcal{G}}$$

$$e^{i\theta g} H e^{-i\theta g} = H$$

よって θ で微分して　　$\theta = 0$

$$[g, H] = 0$$

$$[H, \boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{S}] = 0$$

$\boldsymbol{n}$ を x, y, z 軸方向にとれば

3回使うと

$$\boxed{[H, \boldsymbol{S}] = \boldsymbol{0}}$$

とスピンが保存する。これをハバード模型の SU(2) 対称性と呼ぶ。