スピンの保存の議論をもう少し見通しよく議論するには，ハバード相互作用を次のように書き直すのが良い。サイトごとに議論して，まず，

$\boldsymbol{S} = \frac{1}{2} c^\dagger \sigma c$

$S_x = \frac{1}{2} (c_\uparrow^\dagger \; c_\downarrow^\dagger) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_\uparrow \\ c_\downarrow \end{pmatrix} = \frac{1}{2} (c_\uparrow^\dagger c_\downarrow + c_\downarrow^\dagger c_\uparrow)$

$S_y = \frac{1}{2} (c_\uparrow^\dagger \; c_\downarrow^\dagger) \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_\uparrow \\ c_\downarrow \end{pmatrix} = \frac{1}{2} i (-c_\uparrow^\dagger c_\downarrow + c_\downarrow^\dagger c_\uparrow)$

$$\boldsymbol{S}_z = \frac{1}{2}(n_\uparrow - n_\downarrow)$$
$$\boldsymbol{S}_+ = c_\uparrow^\dagger c_\downarrow = S_x + iS_y$$
$$\boldsymbol{S}_- = c_\downarrow^\dagger c_\uparrow = S_x - iS_y$$

$\vec{A} \cdot \vec{B} = \frac{1}{2}(A^+B^- + A^-B^+) + A^zB^z$

$n_\uparrow^2 = n_\uparrow = c_\uparrow^\dagger c_\uparrow$, $\quad n_\downarrow^2 = n_\downarrow = c_\downarrow^\dagger c_\downarrow$

$S_+ = S_x + iS_y = c_\uparrow^\dagger c_\downarrow$

だから

$$\boldsymbol{S}^2 = \frac{1}{2}(S_+S_- + S_-S_+) + S_z^2$$
$$= \frac{1}{2}(c_\uparrow^\dagger c_\downarrow c_\downarrow^\dagger c_\uparrow + c_\downarrow^\dagger c_\uparrow c_\uparrow^\dagger c_\downarrow) + \frac{1}{4}(n_\uparrow + n_\downarrow) - \frac{1}{2}n_\uparrow n_\downarrow$$

$c_\downarrow c_\downarrow^\dagger \qquad c_\uparrow c_\uparrow^\dagger$

$$= \frac{1}{2}n_\uparrow(1 - n_\downarrow) + \frac{1}{2}n_\downarrow(1 - n_\uparrow) + \frac{1}{4}(n_\uparrow + n_\downarrow) - \frac{1}{2}n_\uparrow n_\downarrow$$
$$= +\frac{3}{4}(n_\uparrow + n_\downarrow) - \frac{3}{2}n_\uparrow n_\downarrow$$
$$n_\uparrow n_\downarrow = -\frac{2}{3}\boldsymbol{S}^2 + \frac{1}{2}n$$

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

$$
\begin{aligned}
\mathcal{U}\boldsymbol{S}\mathcal{U}^\dagger &= \frac{1}{2}\mathcal{U}\boldsymbol{c}^\dagger\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{c}\mathcal{U}^\dagger \\
&= \frac{1}{2}\mathcal{U}\boldsymbol{c}^\dagger\mathcal{U}^\dagger\boldsymbol{\sigma}\mathcal{U}\boldsymbol{c}\mathcal{U}^\dagger \\
&= \frac{1}{2}\boldsymbol{c}^\dagger(u^\dagger\boldsymbol{\sigma}u)\boldsymbol{c}
\end{aligned}
$$

$c^\dagger u^\dagger$ $\quad$ $u\,c$

$u \in SU(2)$

$$u^\dagger\sigma_i u = \sum_j Q_{ij}\sigma_j$$ となる $Q_{ij} \in \mathbb{R}$ がある。

エルミート

$$\mathrm{Tr}\,u^\dagger\boldsymbol{\sigma}u = \mathrm{Tr}\,uu^\dagger\boldsymbol{\sigma} = \mathrm{Tr}\,\boldsymbol{\sigma} = 0$$

σ_0

$a \neq b$

$\sigma_a\sigma_b = -\sigma_b\sigma_a$

$\{\sigma_a, \sigma_b\} = 0$

$a = b$

$\sigma_a\sigma_b = \sigma_a^2 = \sigma_0$

$\{\sigma_a, \sigma_b\} = 2\sigma_0$

$\Rightarrow \{\sigma_a, \sigma_b\} = 2\delta_{ab}\sigma_0$

$= \frac{1}{2} c^\dagger (u^\dagger \sigma u)\, c \qquad = c\, \frac{1}{2}\sigma$

$$\mathcal{U}\begin{pmatrix}S_x\\ S_y\\ S_z\end{pmatrix}\mathcal{U}^\dagger = \boldsymbol{Q}\begin{pmatrix}S_x\\ S_y\\ S_z\end{pmatrix}$$

$$\{u^\dagger\sigma_i u, u^\dagger\sigma_j u\} = u^\dagger\{\sigma_i, \sigma_j\}u = u^\dagger 2\delta_{ij} u = 2\delta_{ij}$$

より

$$2\delta_{ij} = Q_{ij}Q_{ik}\{\sigma_j, \sigma_k\} = 2Q_{ij}Q_{ik} = 2(\tilde{\boldsymbol{Q}}\boldsymbol{Q})_{jk}$$

から

$$\tilde{\boldsymbol{Q}}\boldsymbol{Q} = I_3 \quad : 3\times 3\,単位行列, \quad \tilde{\boldsymbol{Q}} = \boldsymbol{Q}^{-1}$$

（$\tilde{\boldsymbol{Q}}$ は $\boldsymbol{Q}$ の転置行列。）これより $\boldsymbol{Q} \in O(3)$。実は $\det \boldsymbol{Q} = 1$ なので $\boldsymbol{Q} \in SO(3)$.

$u^\dagger \sigma_1 u \cdot u^\dagger \sigma_2 u \cdot u^\dagger \sigma_3 u$

$i\sigma_3$

$$
\begin{aligned}
\mathrm{Tr} u^\dagger \sigma_1\sigma_2\sigma_3 u &= \mathrm{Tr} u^\dagger (i) u = 2i \\
&= \sum_{ijk} \mathrm{Tr} Q_{1i}\sigma_i Q_{2j}\sigma_j Q_{3k}\sigma_k \\
&= \sum_{i\neq j,k} \mathrm{Tr} Q_{1i} Q_{2j} Q_{3k}\sigma_i\sigma_j\sigma_k + \sum_{i,k} \mathrm{Tr} \cancel{Q_{1i} Q_{2i}} Q_{3k}\sigma_k \\
&= \sum_{ijk\ell} \mathrm{Tr} Q_{1i} Q_{2j} Q_{3k} (i\epsilon_{ij\ell}\sigma_\ell\sigma_k) \\
&= \sum_{ijk} \mathrm{Tr} Q_{1i} Q_{2j} Q_{3k} i\epsilon_{ijk} = 2i \det \boldsymbol{Q}
\end{aligned}
$$

ℓ=k の時 σ=3

より $\det \boldsymbol{Q} = 1$。

$\tilde{S}\,\tilde{Q}$ $\quad QS$

$$\mathcal{U}\boldsymbol{S}^2\mathcal{U} = \mathcal{U}\tilde{\boldsymbol{S}}\mathcal{U}^\dagger\mathcal{U}\boldsymbol{S}\mathcal{U} = \tilde{\boldsymbol{S}}\tilde{\boldsymbol{Q}}\boldsymbol{Q}\boldsymbol{S} = \tilde{\boldsymbol{S}}\boldsymbol{S} = \boldsymbol{S}^2$$

ホッピング項の不変性と合わせて，次のハバード模型の SU(2) 不変性が従う。

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

$u = -1$

$\theta = 2\pi$

具体例を挙げておけば，

$$u = e^{-i\frac{\theta}{2}\sigma_z} = \cos\frac{\theta}{2} - i\sigma_z \sin\frac{\theta}{2}$$

$$\mathcal{U}c\mathcal{U}^\dagger = u\boldsymbol{c} = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\theta}{2}} & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\theta}{2}} \end{pmatrix} \boldsymbol{c} = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\theta}{2}} c_{i\uparrow} \\ e^{i\frac{\theta}{2}} c_{i\downarrow} \end{pmatrix}$$

$$\mathcal{U}\begin{pmatrix} S_x \\ S_y \\ S_z \end{pmatrix}\mathcal{U}^\dagger = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & 0 \\ \sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} S_x \\ S_y \\ S_z \end{pmatrix}$$

なお $\theta = 2\pi$ の時 $u = -1$ であり，$\mathcal{U}\boldsymbol{S}\mathcal{U}^\dagger = \boldsymbol{S}$ であるが，$\mathcal{U}c\mathcal{U}^\dagger = -\boldsymbol{c}$ と 2π 回転で電子は不変とはならない（スピノルの 2 価性）。

σ_y, σ_z についても同じ

$\sigma_x \sigma_x \sigma_x = \sigma_x$

$\sigma_y \sigma_x \sigma_y = \sigma_y i\sigma_z = +i^2\sigma_x = -\sigma_x$

$\sigma_z \sigma_x \sigma_z = i\sigma_y \sigma_z = i^2 \sigma_x = -\sigma_x$

⇒ 自分自身ではさむ→不変

自分以外ではさむ→ $-$

$$\begin{aligned} u^\dagger \sigma_x u &= (\cos\frac{\theta}{2} + i\sigma_z \sin\frac{\theta}{2})\sigma_x(\cos\frac{\theta}{2} - i\sigma_z \sin\frac{\theta}{2}) \\ &= \sigma_x(\cos^2\frac{\theta}{2} - \sin^2\frac{\theta}{2}) - \sigma_y(2\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}) \\ &= \sigma_x \cos\theta - \sigma_y \sin\theta \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} u^\dagger \sigma_y u &= (\cos\frac{\theta}{2} + i\sigma_z \sin\frac{\theta}{2})\sigma_y(\cos\frac{\theta}{2} - i\sigma_z \sin\frac{\theta}{2}) \\ &= \sigma_y(\cos^2\frac{\theta}{2} - \sin^2\frac{\theta}{2}) + \sigma_x(2\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}) \\ &= \sigma_x \sin\theta + \sigma_y \cos\theta \end{aligned}$$

$$u^\dagger \sigma_z u = \sigma_z$$