格子模型における対称性

山影　相

2012 年 9 月 26 日

格子模型

$$H=\sum_{\boldsymbol{nm}\alpha\beta}c^\dagger_{\boldsymbol{n}\alpha}t_{\boldsymbol{n}\alpha:\boldsymbol{m}\beta}c_{\boldsymbol{m}\beta}=\sum_{\boldsymbol{nm}}\boldsymbol{c}^\dagger_{\boldsymbol{n}}t_{\boldsymbol{nm}}\boldsymbol{c}_{\boldsymbol{m}} \tag{1}$$

を考える．ここで $\boldsymbol{n}$, $\boldsymbol{m}$ は格子点の位置を表すベクトル，α, β は内部自由度を表す添え字であるが，以下ではこれを省略することもある．この模型における跳び移り $t_{\boldsymbol{nm}}$ に対して系の対称性がどのように反映されるか見る．

一般に，状態 $|\boldsymbol{n}\alpha\rangle$ のユニタリー変換は，ユニタリー行列を U を用いて

$$|\boldsymbol{n}\alpha\rangle\to\hat{U}|\boldsymbol{n}\alpha\rangle=\sum_{\alpha'}|\tilde{\boldsymbol{n}}\alpha'\rangle U_{\alpha'\alpha} \tag{2}$$

と表せる．ここで $\tilde{\boldsymbol{n}}$ は $\boldsymbol{n}$ を変換した後の位置ベクトル ($\boldsymbol{n}\to\tilde{\boldsymbol{n}}$) である．一方，反ユニタリー変換は

$$|\boldsymbol{n}\alpha\rangle\to\hat{\Theta}|\boldsymbol{n}\alpha\rangle=\sum_{\alpha'}|\tilde{\boldsymbol{n}}\alpha'\rangle^* U_{\alpha'\alpha} \tag{3}$$

と表される．

これより，演算子 $\mathcal{O}$ の行列要素は

$$\mathcal{O}_{\alpha\beta}(\boldsymbol{n},\boldsymbol{m})=\langle\boldsymbol{n}\alpha|\mathcal{O}|\boldsymbol{m}\beta\rangle=\langle\boldsymbol{n}\alpha|\hat{U}^\dagger\hat{U}\mathcal{O}\hat{U}^\dagger\hat{U}|\boldsymbol{m}\beta\rangle=U^\dagger_{\alpha\alpha'}\tilde{\mathcal{O}}_{\alpha'\beta'}(\tilde{\boldsymbol{n}},\tilde{\boldsymbol{m}})U_{\beta'\beta} \tag{4}$$

すなわち，$\tilde{\mathcal{O}}(\tilde{\boldsymbol{n}},\tilde{\boldsymbol{m}})=U\mathcal{O}(\boldsymbol{n},\boldsymbol{m})U^\dagger$ という関係式を満たす．ここで，変換後の演算子を $\tilde{\mathcal{O}}=\hat{U}\mathcal{O}\hat{U}^\dagger$ と書いた．同様に，反ユニタリー変換の場合には

$$\mathcal{O}_{\alpha\beta}(\boldsymbol{n},\boldsymbol{m})=\langle\tilde{\boldsymbol{m}}\tilde{\beta}|\hat{\Theta}\mathcal{O}^\dagger\hat{\Theta}^{-1}|\tilde{\boldsymbol{n}}\tilde{\alpha}\rangle=U^\dagger_{\beta\beta'}\langle\tilde{\boldsymbol{m}}\beta'|\tilde{\mathcal{O}}^\dagger|\tilde{\boldsymbol{n}}\alpha'\rangle U_{\alpha'\alpha} \tag{5}$$

すなわち，

$$\tilde{\mathcal{O}}(\tilde{\boldsymbol{n}},\tilde{\boldsymbol{m}})=U\mathcal{O}^*(\boldsymbol{n},\boldsymbol{m})U^\dagger \tag{6}$$

が成り立つ．

演算子 $\mathcal{O}$ をハミルトニアンに選ぼう $(\mathcal{O} = H)$．系がユニタリー変換 $\hat{U}$ に対して不変なら，$\hat{U} H \hat{U}^\dagger = H$ であり，ゆえに，

$$t_{\tilde{\boldsymbol{n}}\tilde{\boldsymbol{m}}} = U t_{\boldsymbol{n}\boldsymbol{m}} U^\dagger \tag{7}$$

を満足しなければならない．同様に，反ユニタリー変換 $\hat{\Theta}$ に対して系が不変なら，

$$t_{\tilde{\boldsymbol{n}}\tilde{\boldsymbol{m}}} = U t^*_{\boldsymbol{n}\boldsymbol{m}} U^\dagger \tag{8}$$

である．