補足：ハバード模型の拡張（スピン軌道相互作用の導入）

スピン軌道相互作用を含む（第 2 量子化前の）ハミルトニアン

$$H = \sum_a \left[h(\boldsymbol{r}_a) + \zeta(\boldsymbol{l}_a \cdot \boldsymbol{s}_a)\right] + \frac{1}{2}\sum_{a\neq b} v(\boldsymbol{r}_a - \boldsymbol{r}_b) \tag{1}$$

ここで，$\boldsymbol{l}_a$, $\boldsymbol{s}_a$ は a 番目の電子の軌道角運動量，スピン角運動量を表す。場の演算子

$$\hat{\varphi}(\boldsymbol{r}, \sigma) = \sum_{j,s} \phi_j(\boldsymbol{r})\theta_s(\sigma)c_{j,s} \tag{2}$$

を用いて，一体項を第 2 量子化の形式にすると

$$\sum_\sigma \int d\boldsymbol{r}\hat{\varphi}^\dagger(\boldsymbol{r}, \sigma)\left[h(\boldsymbol{r}) + \zeta(\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{s})\right]\hat{\varphi}(\boldsymbol{r}, \sigma) \equiv \sum_{j,\alpha}\sum_{j',\alpha'} c^\dagger_{j,\alpha} h_{jj',\alpha\alpha'} c_{j',\alpha'} \tag{3}$$

ただし

$$\begin{aligned}
h_{jj',\alpha\alpha'} &= \sum_\sigma \int d\boldsymbol{r}\; \phi_j^*(\boldsymbol{r})\theta_\alpha^*(\sigma)\left[h(\boldsymbol{r}) + \zeta(\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{s})\right]\phi_{j'}(\boldsymbol{r})\theta_{\alpha'}(\sigma) \\
&= \underbrace{\int \phi_j^*(\boldsymbol{r})h(\boldsymbol{r})\phi_{j'}(\boldsymbol{r})d\boldsymbol{r}}_{=-t_{j,j'}}\delta_{\alpha,\alpha'} + \zeta\sum_{\xi=x,y,z}\int \phi_j^*(\boldsymbol{r})l_\xi\phi_{j'}(\boldsymbol{r})d\boldsymbol{r}\sum_\sigma \theta_\alpha^*(\sigma)s_\xi\theta_{\alpha'}(\sigma) \\
&\equiv -t_{j,j'}\delta_{\alpha,\alpha'} + i\boldsymbol{v}_{j,j'}\cdot\boldsymbol{\sigma}_{\alpha,\alpha'}
\end{aligned} \tag{4}$$

ここで，$\boldsymbol{\sigma}$ はパウリ行列 σ^x, σ^y, σ^z からなるベクトルである。また，空間軌道 $\{\phi_j\}$ は実関数とすると，$\boldsymbol{v}_{j,j'}$ は実ベクトルで，サイトの入れ替えに関して反対称となる：

$$\boldsymbol{v}_{j,j'} = -\,\boldsymbol{v}_{j',j} \tag{5}$$

以下，これを示していく。$\xi = x, y, z$ として，パウリ行列の要素 $\sigma^\xi_{\alpha,\alpha'}$ は

$$\sigma^\xi_{\alpha,\alpha'} = 2\sum_\sigma \theta_\alpha^*(\sigma)s_\xi\theta_{\alpha'}(\sigma) \tag{6}$$

なので，(4) より

$$v^\xi_{jj'} = -\frac{i}{2}\zeta\int \phi_j^*(\boldsymbol{r})l_\xi\phi_{j'}(\boldsymbol{r})d\boldsymbol{r} \equiv -\frac{i}{2}\zeta\langle j|l_\xi|j'\rangle \tag{7}$$

である。仮定より軌道関数は実関数なので，角運動量 $\boldsymbol{l}$ の行列要素

$$\langle j|\boldsymbol{l}|j'\rangle = \int \phi_j^*(\boldsymbol{r})\boldsymbol{l}\phi_{j'}(\boldsymbol{r})d\boldsymbol{r} = \int \phi_j(\boldsymbol{r})[\boldsymbol{r}\times(-i\hbar\nabla)]\phi_{j'}(\boldsymbol{r})d\boldsymbol{r} \tag{8}$$

は純虚数である。従って，$v^\xi_{jj'}$ は実数である。また，角運動量 $\boldsymbol{l}$ はエルミート演算子なので

$$\langle j|\boldsymbol{l}|j'\rangle = \langle j|\boldsymbol{l}^\dagger|j'\rangle = \langle j'|\boldsymbol{l}|j\rangle^* = -\langle j'|\boldsymbol{l}|j\rangle \tag{9}$$

これより，$\boldsymbol{v}_{jj'} = -\boldsymbol{v}_{j'j}$ を得る。