

対称性と群の表現論に基づく 超伝導ギャップ・ノード構造の分類理論

角田 峻太郎






2022年2月22日(1日目)

理化学研究所 古崎物性理論研究室

この講義の目的

超伝導のギャップ・ノードに関して、対称性がなす群の表現論に基づく (代数学的な) 分類学を解説する。得られた結果をトポロジカルな分類理論と比較する。

[参考文献]

-  ノート：
https://shuntarosumita.github.io/doc/notes/note/gap_classification_rep.pdf
-  犬井 鉄郎, 田辺 行人, 小野寺 嘉孝「応用群論 - 群表現と物理学 -」(裳華房, 2003)
-  C. J. Bradley and A. P. Cracknell, "The Mathematical Theory of Symmetry in Solids" (Oxford University Press, 1972)
-  渡辺 悠樹, 固体物理 **54**, 187; 237; 333; 505 (2019); **55**, 139 (2020)
-  角田 峻太郎, 小林 伸吾, 固体物理 **55**, 463 (2020)

超伝導と超伝導ギャップ

歴史的背景 – なぜ超伝導ギャップを見たいのか? –

超伝導の平均場ハミルトニアン

今回取り扱う超伝導体

対称性と群の表現論

群についての基礎事項

結晶の対称性：空間群・点群

表現論の導入

ハミルトニアンの対称性とエネルギーバンド・Bloch 状態

超伝導と超伝導ギャップ

超伝導の歴史的背景 (BCS 理論)

超伝導：Kamerlingh Onnes が発見した極低温現象 (1911)

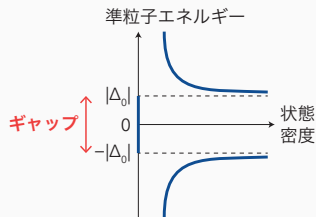
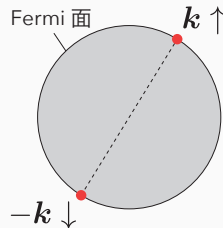
- 性質：電気抵抗ゼロ・マイスナー効果など
- 応用例：リニア新幹線・MRI など

Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS) 理論 (1957)

「フェルミ面上の 2 電子束縛状態 (Cooper 対) の量子凝縮」

(狭い意味での) BCS 理論の基本的な仮定

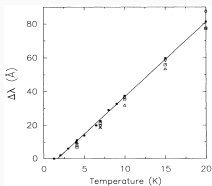
1. Cooper 対の重心運動量は 0
2. Cooper 対の全スピンは 0 (スピン一重項)
3. Cooper 対の対称性は等方的 (s 波)



異方的超伝導体とギャップ構造

「狭い意味での BCS 理論」の仮定 2 または 3 を破る **異方的超伝導体** の発見 (1980s~)

- 代表例：銅酸化物高温超伝導体



W. N. Hardy et al. (1993)

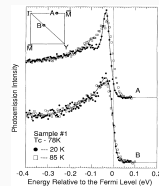
[磁場侵入長]

温度に対し線形 → **線ノード!**

(cf. 指数関数的 → フルギャップ)

[角度分解光電子分光]

$k_x = k_y$ で **線ノード ($d_{x^2-y^2}$ 波)**



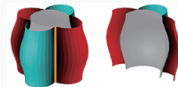
Z.-X. Shen et al. (1993)

- 様々な **ノード** 超伝導体
- ギャップ・ノード構造** は Cooper 対対称性と関連

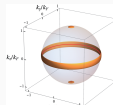
点ノード



線ノード



面ノード



S. Yonezawa, AAPS Bulletin (2016)

D. F. Agterberg, PRL (2017)

超伝導ギャップ・ノードに対する実験的・理論的アプローチ

超伝導ギャップ・ノード構造 (= 準粒子の励起構造) : 様々な実験で観測可能

Observable	$g = 2$ (point nodes)		$g = 1$ (line/double-Weyl nodes)		Full gap
	Uninflated	Inflated	Uninflated	Inflated	
$\Delta\lambda$	T^2	T^2	T	$T e^{-h/k_B T}$	$\frac{\Delta^{1/2}}{T^{1/2}} e^{-\Delta/k_B T}$
c, κ	T^3	$h^2 k_B T + \frac{7\pi^2}{5} (k_B T)^3$	T^2	$h k_B T + \frac{6}{\pi^2} h^2 e^{-h/k_B T}$	$\frac{\Delta^{5/2}}{T^{3/2}} e^{-\Delta/k_B T}$
γ	T^2	$h^2 + \frac{7\pi^2}{5} (k_B T)^2$	T	$h + \frac{6}{\pi^2} \frac{h^2}{k_B T} e^{-h/k_B T}$	$\frac{\Delta^{5/2}}{T^{5/2}} e^{-\Delta/k_B T}$
$\frac{1}{T_1 T}$	T^4	$h^4 + \frac{2\pi^2}{3} h^2 (k_B T)^2$	T^2	$h^2 + 4h k_B T e^{-h/k_B T}$	$\frac{\Delta}{T} \ln \frac{k_B T}{a_0} e^{-\Delta/k_B T}$

C. J. Lapp et al. (2020)

理論的には？ → 対称性とトポロジーに基づく分類理論

[秩序変数の点群的分類]

- G. E. Volovik & L. P. Gor'kov (1984, 1985)
- P. W. Anderson (1984)
- K. Ueda & T. M. Rice (1985)
- E. I. Blount (1985)
- M. Sigrist & K. Ueda, *RMP* (1991)
- T. Nomoto et al. (2016)

[ギャップの表現論的分類]

- V. G. Yarzhemsky & E. N. Murav'ev (1992)
- V. G. Yarzhemsky (1998, 2000, 2003, 2008, 2018, 2021)
- M. R. Norman (1995)
- T. Micklitz & M. R. Norman (2009, 2017)
- SS & Y. Yanase (2018)

[ギャップのトポロジカルな分類]

- T. Bzdušek & M. Sigrist (2017)
- S. Kobayashi et al. (2014, 2016, 2018)
- SS et al. (2019)
- SS & Y. Yanase, *PTEP* (2021)
- S. Ono & K. Shiozaki (2022)
- F. Tang, S. Ono et al., preprint

超伝導の平均場ハミルトニアン

BCS 理論の仮定その 1 「Cooper 対の重心運動量は 0」を満たす超伝導体を想定する。

$$\hat{H}_{\text{MF}} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\nu, \nu'=1}^N [H_{\text{N}}(\mathbf{k})]_{\nu\nu'} c_{\nu}(\mathbf{k})^{\dagger} c_{\nu}(\mathbf{k}) + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\nu, \nu'=1}^N \{ [\Delta(\mathbf{k})]_{\nu\nu'} c_{\nu}(\mathbf{k})^{\dagger} c_{\nu'}(-\mathbf{k})^{\dagger} + \text{H.c.} \}$$

- $\mathbf{k} \in \mathbb{R}^d$: 波数または運動量 (d は空間次元)
- $c_{\nu}(\mathbf{k}), c_{\nu}(\mathbf{k})^{\dagger}$: 波数 \mathbf{k} と内部自由度 ν に対応する電子の消滅・生成演算子
次の性質を満たす. ($[A, B]_{+} := AB + BA$ は反交換子)

$$[c_{\nu}(\mathbf{k}), c_{\nu'}(\mathbf{k})^{\dagger}]_{+} = \delta_{\nu, \nu'}, \quad [c_{\nu}(\mathbf{k}), c_{\nu'}(\mathbf{k})]_{+} = [c_{\nu}(\mathbf{k})^{\dagger}, c_{\nu'}(\mathbf{k})^{\dagger}]_{+} = 0$$

- $H_{\text{N}}(\mathbf{k})$: **正常状態のハミルトニアン** $H_{\text{N}}(\mathbf{k}) = H_{\text{N}}(\mathbf{k})^{\dagger}$ を満たす.
- $\Delta(\mathbf{k})$: **超伝導秩序変数** $\Delta(\mathbf{k})^{\text{T}} = -\Delta(-\mathbf{k})$ を満たす.

フェルミ面と超伝導ノード

$\Psi(\mathbf{k}) := \left[c_1(\mathbf{k}) \quad \dots \quad c_N(\mathbf{k}) \quad c_1(-\mathbf{k})^\dagger \quad \dots \quad c_N(-\mathbf{k})^\dagger \right]^\top$ を用いて次のように表す.

$$\hat{H}_{\text{MF}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \Psi(\mathbf{k})^\dagger H_{\text{BdG}}(\mathbf{k}) \Psi(\mathbf{k}) + \text{const}, \quad H_{\text{BdG}}(\mathbf{k}) := \begin{bmatrix} H_{\text{N}}(\mathbf{k}) & \Delta(\mathbf{k}) \\ \Delta(\mathbf{k})^\dagger & -H_{\text{N}}(-\mathbf{k})^\top \end{bmatrix}$$

$2N \times 2N$ 行列 $H_{\text{BdG}}(\mathbf{k})$ は **Bogoliubov-de Gennes (BdG) ハミルトニアン** という.

- $H_{\text{N}}(\mathbf{k})$ の各固有値： **電子 (正常状態) のエネルギーバンド**
正常状態のエネルギーバンドにおける零点の集合を **フェルミ面** と呼ぶ.
- $H_{\text{BdG}}(\mathbf{k})$ の各固有値： **Bogoliubov 準粒子 (超伝導状態) のエネルギーバンド**
超伝導状態のエネルギーバンドにおける零点の集合を **超伝導ノード** と呼ぶ.

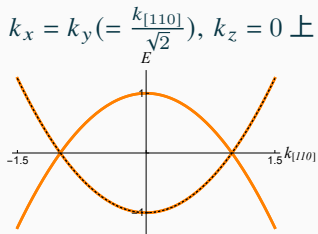
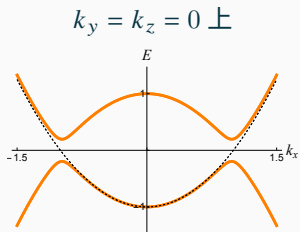
フェルミ面の存在 (金属であること) は常に仮定する.

例 (連続模型・3次元 d 波超伝導体)

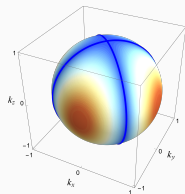
$$H_N(\mathbf{k}) = (\mathbf{k}^2 - \mu)\sigma_0, \quad \Delta(\mathbf{k}) = \Delta_d(k_x^2 - k_y^2)i\sigma_y \quad (i := \sqrt{-1})$$

μ : 化学ポテンシャル, Δ_d : 秩序変数の大きさ, σ_i : Pauli 行列 (スピンの内部自由度)

[$\mu = 1, \Delta_d = 0.2$ における $H_{\text{BdG}}(\mathbf{k})$ の固有値]



フェルミ面上の正固有値



以下のような条件を満たす超伝導体に限って話をする。

1. **時空反転対称性の存在**：

空間反転対称性 \mathcal{I} と時間反転対称性 \mathcal{T} の少なくとも一方は有する。

(どちらも運動量 k を $-k$ に変換する \rightarrow BCS 理論の仮定その 1 に有利に働く。)

2. **結晶**：離散並進対称性をもつ。

3. **弱結合極限**：超伝導秩序変数が零の極限を考える。

4. **スピン軌道相互作用の存在** (無くてもよいが、話を簡単にするために仮定する。)

条件 2 と 3 に関してはもう少し詳しく見る。

d 次元の結晶格子は，基本並進ベクトル $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_d \in \mathbb{R}^d$ によって特徴付けられる：

$$\mathbf{T} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + \dots + n_d \mathbf{a}_d \quad (n_1, n_2, \dots, n_d \in \mathbb{Z})$$

任意の格子ベクトル \mathbf{T} に対し $e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{T}} = 1$ を満たす $\mathbf{K} \in \mathbb{R}^d$ を**逆格子ベクトル**という．

$$\mathbf{K} = n_1 \mathbf{b}_1 + n_2 \mathbf{b}_2 + \dots + n_d \mathbf{b}_d, \quad \mathbf{a}_j \cdot \mathbf{b}_k = 2\pi \delta_{jk}, \quad \forall j, k = 1, \dots, d$$

逆格子空間の単位胞 (Wigner-Seitz セル) を **Brillouin ゾーン**という．

結晶の超伝導体では，**Bloch の定理**より任意の \mathbf{K} に対し $H_N(\mathbf{k} + \mathbf{K}) = H_N(\mathbf{k})$, $H_{\text{BdG}}(\mathbf{k} + \mathbf{K}) = H_{\text{BdG}}(\mathbf{k})$ とできる． よって波数 \mathbf{k} は Brillouin ゾーン内に限ってよい．

例 (2次元正方格子上の d 波超伝導体)

$$H_N(\mathbf{k}) = [-2t(\cos k_x + \cos k_y) - \mu] \sigma_0, \quad \Delta(\mathbf{k}) = \Delta_d(\cos k_x - \cos k_y) i \sigma_y$$

基本並進ベクトルは $\mathbf{a}_1 = [1, 0]^\top$, $\mathbf{a}_2 = [0, 1]^\top$; $\mathbf{b}_1 = 2\pi[1, 0]^\top$, $\mathbf{b}_2 = 2\pi[0, 1]^\top$ である．

正常状態のハミルトニアンを対角化するユニタリ行列 $V(\mathbf{k})$ を考える.

$$V(\mathbf{k})^\dagger H_N(\mathbf{k}) V(\mathbf{k}) = \text{diag}[\varepsilon^{(1)}(\mathbf{k}), \dots, \varepsilon^{(N)}(\mathbf{k})] =: E_N(\mathbf{k})$$

$V(\mathbf{k})$ による BdG ハミルトニアンの**バンド表示** ($\Delta_{\text{band}}(\mathbf{k}) := V(\mathbf{k})^\dagger \Delta(\mathbf{k}) V(-\mathbf{k})^*$):

$$V_{\text{band}}(\mathbf{k})^\dagger H_{\text{BdG}}(\mathbf{k}) V_{\text{band}}(\mathbf{k}) = \begin{bmatrix} E_N(\mathbf{k}) & \Delta_{\text{band}}(\mathbf{k}) \\ \Delta_{\text{band}}(\mathbf{k})^\dagger & -E_N(-\mathbf{k}) \end{bmatrix}, \quad V_{\text{band}}(\mathbf{k}) = \begin{bmatrix} V(\mathbf{k}) & 0 \\ 0 & V(-\mathbf{k})^* \end{bmatrix}$$

$\Delta_{\text{band}}(\mathbf{k})$ の各対角成分を**バンド内秩序変数**, 非対角成分を**バンド間秩序変数**という.

秩序変数が正常状態のエネルギースケールに比べて十分小さい**弱結合極限**であれば,
超伝導ギャップ・ノードの構造はバンド内秩序変数だけで判定できる.

例 (バンド表示された 1 次元模型)

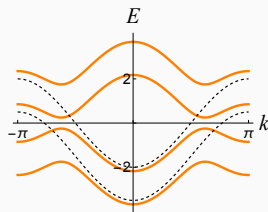
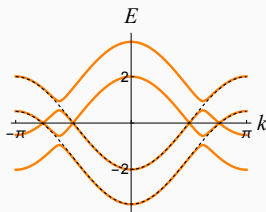
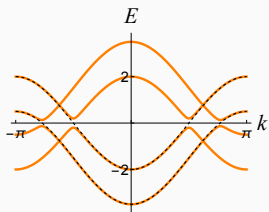
$$H_N(k) = \begin{bmatrix} -2t_1 \cos k - \mu_1 & 0 \\ 0 & -2t_2 \cos k - \mu_2 \end{bmatrix}, \quad \Delta(k) = \begin{bmatrix} \Delta_{11} \sin k & \Delta_{12} \\ -\Delta_{12} & \Delta_{22} \sin k \end{bmatrix}$$

[$t_1 = t_2 = 1, \mu_1 = 0, \mu_2 = 1.5$ におけるエネルギーバンド]

$(\Delta_{11}, \Delta_{12}, \Delta_{22}) = (0.2, 0, 0.2)$

$(\Delta_{11}, \Delta_{12}, \Delta_{22}) = (0, 0.2, 0)$

$(\Delta_{11}, \Delta_{12}, \Delta_{22}) = (0, 1, 0)$



対称性と群の表現論

群についての基礎事項

定義

集合 G に二項演算を入れたものが**群**であるとは、次が成り立つことである。

1. (結合律) 任意の $g, h, k \in G$ に対し $g(hk) = (gh)k$
2. (単位元の存在) 任意の $g \in G$ に対し、ある $E \in G$ が存在して $gE = Eg = g$
3. (逆元の存在) 任意の $g \in G$ に対し、ある $x \in G$ が存在して $gx = xg = E$

定義

群 G の部分集合 L がやはり群になっているとき、 L を G の**部分群**という。

特に、 $\{E\}$ や G 自身でない部分群を真部分群という。

また、任意の $l \in L$ と任意の $g \in G$ に対して glg^{-1} が L に属するとき、 L を G の**正規部分群**という。

定義

L を群 G の部分群, g を G の元とする. このとき,
 $gL := \{gl \mid l \in L\}$ を g における L を法とする**左剰余類**といい,
 $Lg := \{lg \mid l \in L\}$ を g における L を法とする**右剰余類**という.
相異なる左剰余類の個数は右剰余類の個数と等しく,
この数を G における L の**指数**といい, 記号 $[G : L]$ で表す.

命題

L が群 G の正規部分群であるとき, L を法とする左剰余類と右剰余類の概念は一致する. すなわち, G の任意の元 g に対して $gL = Lg$ である.

定義

L を群 G の部分群とし, $q_\alpha L$ ($\alpha = 1, \dots, [G:L]$) を L を法とする左剰余類とする. このとき, G を左剰余類たちの (集合としての) 直和によって $G = \coprod_{\alpha=1}^{[G:L]} q_\alpha L$ のように表すことを G の L による**左剰余類分解**といい, 各 $q_\alpha \in G$ を剰余類の**代表元**という. 特に $q_1 = E$ と定める.

定義

L を群 G の正規部分群とし, G の L による左剰余類分解 $G = \coprod_{\alpha=1}^{[G:L]} q_\alpha L$ を考える. 集合 $G/L := \{q_\alpha L \mid \alpha = 1, \dots, [G:L]\}$ を定め, G/L の2つの元 $q_\alpha L$ と $q_\beta L$ に対しての積を $(q_\alpha L)(q_\beta L)$ によって導入すると, これは G/L 上の演算を定める. この演算に関して G/L は群をなす; これを G の L による**剰余群**と呼ぶ.

定義

K, L を群 G の部分群, g を G の元とする. このとき,
 $KgL := \{kgl \mid k \in K, l \in L\}$ を g における (K, L) -**両側剰余類** という.
特に $K = L$ のとき, KgK を g における K -両側剰余類と呼ぶ.
また, G を両側剰余類たちの直和によって

$$G = \bigsqcup_{\alpha} Kd_{\alpha}L$$

のように表すことを G の (K, L) -**両側剰余類分解** という.

定義

G_1, G_2 を群とする. G_1 と G_2 の**半直積**とは, 次の3つの性質を満たす群 G のことで, $G = G_1 \rtimes G_2$ または $G = G_2 \rtimes G_1$ と表す.

1. G_1 は G の正規部分群かつ G_2 は G の部分群である.
2. 任意の $g \in G$ に対して $g_1 \in G_1, g_2 \in G_2$ が存在して $g = g_1 g_2$ と表せる.
3. G_1 と G_2 は自明な共通部分をもつ: $G_1 \cap G_2 = \{E\}$.

結晶の格子ベクトル T だけの並進操作を $\{E|T\}$ と書く。

- 実空間の点 $r \in \mathbb{R}^d$ への作用： $\{E|T\}r = r + T$
- 並進操作の積： $\{E|T\}\{E|T'\} := \{E|T + T'\}$

上記の積により、格子ベクトル分の並進操作の集合 \mathbb{T} は可換群をなす (離散的**並進群**)。)

結晶では一般に、空間反転や回転といった対称操作も許されることがある。

このような対称操作を集めたものを**空間群**という。

(すなわち、空間群は離散的並進群を正規部分群にもつ Euclid 群の部分群である。)

特に 3 次元 Euclid 空間 \mathbb{R}^3 における対称操作には次の 7 種類がある.

恒等操作・回転操作・鏡映操作・反転操作・回映操作・回反操作・並進操作

- 3 次元空間群は全部で 230 種類
- 並進操作以外は直交群 $O(3)$ の元であり, 空間内の少なくとも 1 点が不動点.
→ **点群**: 並進操作以外の対称操作からなる群 (特に**結晶点群**は 32 種類)
- 点群の操作の記号: n 回回転 C_{nz} ($n = 2, 3, 4, 6$), 鏡映 M_z , 反転 I など

空間群 G の元 $g = \{p_g | t_g\}$ ($p_g \in O(3)$, $t_g \in \mathbb{R}^3$) の, 点 $r \in \mathbb{R}^3$ への作用:

$$gr = p_g r + t_g$$

$g, g' \in G$ の積は $gg' = \{p_g | t_g\} \{p_{g'} | t_{g'}\} = \{p_g p_{g'} | p_g t_{g'} + t_g\}$ で与えられる.

空間群 G がある点群 P と並進群 \mathbb{T} の半直積 $P \ltimes \mathbb{T}$ で表せるとき、 G を**共型**であるという。そうでない場合には、 G を**非共型**であるという。

非共型な空間群では必ず、 \mathbb{T} に属さない「半端な並進」をもつような元が存在する：

- **螺旋操作**：回転操作の後、その回転軸と平行な方向に半端な並進操作を行う。
- **映進操作**：鏡映操作の後、その鏡映面と平行な方向に半端な並進操作を行う。

例 (非共型空間群 $P6_3/mmc$, #194)

基本並進ベクトルは $\mathbf{a}_1 = [0, -a, 0]^T$, $\mathbf{a}_2 = [\frac{\sqrt{3}a}{2}, \frac{a}{2}, 0]^T$, $\mathbf{a}_3 = [0, 0, c]^T$.

並進操作の他に、**主軸螺旋** $\{C_{6z}|\frac{a_3}{2}\}$, **回転** $\{C_{2y}|\mathbf{0}\}$, **反転** $\{I|\mathbf{0}\}$ で生成される群。

参考：Bilbao Crystallographic Server (https://www.cryst.ehu.es/cryst/get_gen.html)

磁気空間群・磁気点群：

時間反転操作に代表されるような**反ユニタリ**な操作まで空間群・点群を拡張したもの。
磁気空間群は 1651 種類，磁気点群は 122 種類ある。

磁気空間群 M に含まれるユニタリ/反ユニタリな元の区別として次を用いる：

$$\phi: M \rightarrow \mathbb{Z}_2 = \{+1, -1\}, \quad \phi(m) = \begin{cases} +1 & m : \text{unitary} \\ -1 & m : \text{antiunitary} \end{cases}$$

磁気空間群の元 m の実空間座標 \mathbf{r} ，波数 \mathbf{k} への作用：

$$m\mathbf{r} = p_m\mathbf{r} + \mathbf{t}_m, \quad m\mathbf{k} = \phi(m)p_m\mathbf{k}$$

M を群とする. M の **PUA 表現 (projective unitary-antiunitary representation)** は, M から Hilbert 空間 \mathcal{H} 上の演算子への写像 $\hat{\cdot}$ であって以下を満たすものである:

1. 任意の $m \in M$ に対して, $\phi(m) = +1 (-1)$ ならば \hat{m} は (反) ユニタリな演算子.
2. 写像 $\omega: M \times M \rightarrow U(1)$ が存在して, $\hat{m}_1 \hat{m}_2 = \omega(m_1, m_2) \widehat{m_1 m_2}$ ($\forall m_1, m_2 \in M$).
3. M の単位元 E に対しての表現は \mathcal{H} 上の恒等演算子である.

ω は M の **乗数系** と呼ばれ, 次を満たす.

$$\omega(m, E) = \omega(E, m) = 1, \quad \forall m \in M$$

$$\omega(m_1, m_2) \omega(m_1 m_2, m_3) = \omega(m_1, m_2 m_3) \omega(m_2, m_3)^{\phi(m_1)}, \quad \forall m_1, m_2, m_3 \in M$$

ただし, ω^m は $\phi(m) = +1 (-1)$ に対し $\omega (\omega^*)$ を与える略記号とする.

例 (磁気空間群 $P21'$, #3.2)

並進操作の他に, 回転 $\{C_{2y}|0\}$, 時間反転 \mathcal{T} で生成される (共型な) 群.

スピン $1/2$ の 1 電子状態における乗数系は $\hat{C}_{2y}^2 = -\hat{E}$, $\hat{\mathcal{T}}^2 = -\hat{E}$.

群 M の PUA 表現 $\hat{\mu}$ を考える (乗数系 ω).

N 次元 Hilbert 空間 \mathcal{H} の正規直交基底を $|\psi\rangle = \{|\psi\rangle_1, \dots, |\psi\rangle_N\}$ とするとき, 各 $m \in M$ に対して, $\mu(m)_{ij} = \langle \psi_i | \hat{m} | \psi_j \rangle$ によって定まる N 次元ユニタリ行列 $\mu(m)$ を PUA 表現 \hat{m} の **表現行列** という. 以降, 表現行列をベースにして考える.

$$\mu(m_1)\mu(m_2)^{m_1} = \omega(m_1, m_2)\mu(m_1m_2), \quad \forall m_1, m_2 \in M$$

$$\mu(E) = \mathbf{1}_N \text{ (単位行列)}$$

各表現行列 $\mu(m)$ のトレースを **指標** と呼ぶ.

表現の同値と可約・既約

群 M の 2 つの PUA 表現 μ_1, μ_2 に対し, あるユニタリ行列 V が存在して

$$\mu_1(m) = V^\dagger \mu_2(m) V^m, \quad \forall m \in M$$

が満たされるとき, μ_1 と μ_2 は同値であるといい, $\mu_1 \simeq \mu_2$ と書く.

群 M の n 次元 PUA 表現 μ がユニタリ行列 V による同値変換によって

$$V^\dagger \mu(m) V^m = \begin{bmatrix} \mu^{(1)}(m) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \mu^{(2)}(m) & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \mu^{(k)}(m) \end{bmatrix}, \quad \forall m \in M$$

のように PUA 表現 $\mu^{(1)}, \dots, \mu^{(k)}$ に直和分解できるとき, μ を可約であるという.

μ が複数個の PUA 表現に直和分解できないとき, μ を既約であるという.

命題

有限群 M の PUA 表現 μ_1 と μ_2 が同値である

\iff ユニタリな元に対する μ_1 と μ_2 の各指標は等しい:

$$\text{tr}[\mu_1(g)] = \text{tr}[\mu_2(g)], \quad \forall g \in M \text{ s.t. } \phi(g) = 1$$

- 有限群の PUA 表現は指標だけで区別可能.
- 点群の既約表現は**指標表**という形で様々な文献にまとめられている.
- A, B : 1次元, E : 2次元
- g, u : 偶・奇パリティ

例: 点群 D_{4h} の線形表現に関する指標表

D_{4h}	E	$2C_4$	C_2	$2C'_2$	$2C''_2$	I	$2IC_4$	M_h	$2M_v$	$2M_d$
A_{1g}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
A_{2g}	1	1	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1
B_{1g}	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	1	-1
B_{2g}	1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	1
E_g	2	0	-2	0	0	2	0	-2	0	0
A_{1u}	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1
A_{2u}	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1
B_{1u}	1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	-1	1
B_{2u}	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1
E_u	2	0	-2	0	0	-2	0	2	0	0

表現の直積

群 M の PUA 表現 μ_1, μ_2 (乗数系 ω_1, ω_2) の直積表現は、乗数系 $\omega_1\omega_2$ をもつ次の表現行列で定められる。

$$(\mu_1 \otimes \mu_2)(m)_{ij,kl} = \mu_1(m)_{ik}\mu_2(m)_{jl}, \quad \forall m \in M$$

μ を基底 $|\psi\rangle = \{|\psi\rangle_1, \dots, |\psi\rangle_N\}$ をもつ群 M の表現とする： $\hat{m}|\psi\rangle_j = |\psi\rangle_i \mu(m)_{ij}$ 。
直積表現 $\mu \otimes \mu$ に関して、基底 $|\Psi_{\pm}\rangle_{kl} := (|\psi\rangle \otimes |\psi\rangle)_{kl} \pm (|\psi\rangle \otimes |\psi\rangle)_{lk}$ を定義すると、 $|\Psi_+\rangle$ は独立な成分が $\frac{1}{2}N(N+1)$ 個、 $|\Psi_-\rangle$ は $\frac{1}{2}N(N-1)$ 個ある。

$$\hat{m}|\Psi_{\pm}\rangle_{kl} = \frac{1}{2}|\Psi_{\pm}\rangle_{ij} [\mu(m)_{ik}\mu(m)_{jl} \pm \mu(m)_{il}\mu(m)_{jk}]$$

直積表現 $\mu \otimes \mu$ のうち、 $|\Psi_+\rangle$ の張る表現を $[\mu \otimes \mu]_+$ と書いて対称表現と呼ぶ。
また、 $|\Psi_-\rangle$ の張る表現を $[\mu \otimes \mu]_-$ と書いて反対称表現と呼ぶ。

ハミルトニアン の 対称性

ハミルトニアン $H(k)$ が磁気空間群 M の **対称性** をもつとは、ユニタリ行列 $\mu^k(m)$ が存在して次が成り立つことである：

$$\mu^k(m)H(k)^m\mu^k(m)^\dagger = H(mk), \quad \forall k, \forall m \in M$$

ただし、 $\mu^k(m)$ は任意の波数 k と逆格子ベクトル K および 任意の $m, m' \in M$ に対して、乗数系 $\omega_{\text{in}}: M \times M \rightarrow \text{U}(1)$ が存在して次の条件を満たすものとする：

$$\mu^{m'k}(m)\mu^k(m')^m = \omega_{\text{in}}(m, m')\mu^k(mm'), \quad \mu^{k+K}(m) = \mu^k(m)$$

また、特に並進部分群の元 $\{E|T\} \in \mathbb{T}$ に対しては $\mu^k(\{E|T\}) = e^{-ik \cdot T} \mathbf{1}_N$ とする。

例 (空間反転対称性 \mathcal{I} ・ 時間反転対称性 \mathcal{T})

$$\mu^k(\mathcal{I})H(k)\mu^k(\mathcal{I})^\dagger = H(-k), \quad \mu^k(\mathcal{T})H(k)^*\mu^k(\mathcal{T})^\dagger = H(-k)$$

例 (2次元正方形格子上的 d 波超伝導体)

$$H_N(\mathbf{k}) = [-2t(\cos k_x + \cos k_y) - \mu]\sigma_0, \quad \Delta(\mathbf{k}) = \Delta_d(\cos k_x - \cos k_y)i\sigma_y$$

- 正常状態の空間反転・4回回転対称性： $\mu(\mathcal{I}) = \sigma_0$, $\mu(C_4) = e^{-i\frac{\pi}{4}}\sigma_z$
- 超伝導状態の空間反転・4回回転対称性：

$$U(\mathcal{I}) = \begin{bmatrix} \mu(\mathcal{I}) & 0 \\ 0 & +\mu(\mathcal{I})^* \end{bmatrix},$$

$$U(C_4) = \begin{bmatrix} \mu(C_4) & 0 \\ 0 & -\mu(C_4)^* \end{bmatrix}$$

$$U(\mathcal{I})H_{\text{BdG}}(\mathbf{k})U(\mathcal{I})^\dagger = H_{\text{BdG}}(-\mathbf{k}), \quad U(C_4)H_{\text{BdG}}(\mathbf{k})U(C_4)^\dagger = H_{\text{BdG}}(C_4\mathbf{k})$$

超伝導秩序変数の対称性は次で表せる： $\mu^{\mathbf{k}}(m)\Delta(\mathbf{k})^m\mu^{-\mathbf{k}}(m)^\top = \chi_m\Delta(m\mathbf{k})$, $\chi_m \in U(1)$

粒子正孔対称性

ハミルトニアン $H(\mathbf{k})$ が**粒子正孔対称性** \mathcal{P} をもつとは、ユニタリ行列 $\mu(\mathcal{P})$ が存在して次が成り立つことである：

$$\mu(\mathcal{P})H(\mathbf{k})^*\mu(\mathcal{P})^\dagger = -H(-\mathbf{k}), \quad \forall \mathbf{k}$$

このとき、エネルギーバンドは k - E 空間で点対称になる。

事実

BdG ハミルトニアンは粒子正孔対称性をもつ。

$2N$ 次元 BdG ハミルトニアン $H_{\text{BdG}}(\mathbf{k})$ に対し、 $\mu(\mathcal{P}) = \begin{bmatrix} 0 & 1_N \\ 1_N & 0 \end{bmatrix}$ とおくと、 $\mu(\mathcal{P})H_{\text{BdG}}(\mathbf{k})^*\mu(\mathcal{P})^\dagger = -H_{\text{BdG}}(-\mathbf{k})$ を満たす。