

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24日(2日目)

理化学研究所 古崎物性理論研究室

前回の復習

- 対象とする超伝導
 - 時空反転対称性の存在, 結晶, 弱結合極限, (スピン軌道相互作用の存在)
 - 超伝導ギャップの分類 \equiv バンド内秩序変数の分類
- 結晶のもつ対称性を表す群: (磁気) 空間群 \cdot (磁気) 点群
- 群の PUA 表現 (ω : 乗数系)

$$\hat{m}_1 \hat{m}_2 = \omega(m_1, m_2) \widehat{m_1 m_2}$$

$$\mu(m_1) \mu(m_2)^{m_1} = \omega(m_1, m_2) \mu(m_1 m_2)$$

- ハミルトニアンの対称性

$$\mu^{\mathbf{k}}(m) H(\mathbf{k})^m \mu^{\mathbf{k}}(m)^\dagger = H(m\mathbf{k})$$

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

対称性と群の表現論(つづき)

ハミルトニアン の 対称性とエネルギーバンド・Bloch 状態

小複表現の取り扱い

Wigner の判定条件

超伝導ギャップ・ノード構造の分類手法

戦略

表現論に基づく超伝導ギャップ・ノードの分類

高対称点における超伝導ギャップ・ノードの分類結果の例

鏡映面上の分類：非共型性による非自明ギャップ構造

対称性と群の表現論(つづき)

小群とエネルギーバンド

「 $mk = k + K, \exists K : \text{逆格子ベクトル}$ 」という条件を $mk \equiv k$ と書く。

- 磁気空間群 M に対し, $\mathcal{M}^k := \{m \in M \mid mk \equiv k\}$ を波数 k の**磁気小群**という。
- 磁気小群 \mathcal{M}^k の既約 PUA 表現 $\mu^{(n),k}$ で, 並進群の元 $\{E|T\} \in \mathbb{T}$ に対して $\mu^{(n),k}(\{E|T\}) = e^{-ik \cdot T} \mathbf{1}_{d^{(n)}}$ を満たすものを**小複表現**という。
- $H(k)$ の対称性を表すユニタリ行列 μ^k は磁気小群 \mathcal{M}^k の PUA 表現となる。

ハミルトニアン $H(k)$ と対称性 μ^k のユニタリ行列 $V(k)$ による同時ブロック対角化：

$$V(k)^\dagger H(k) V(k) = \bigoplus_{n=1}^k \varepsilon^{(n)}(k) \mathbf{1}_{d^{(n)}}, \quad V(k)^\dagger \mu^k(m) V(k)^m = \bigoplus_{n=1}^k \mu^{(n),k}(m), \quad \forall m \in \mathcal{M}^k$$

- $\varepsilon^{(n)}(k)$: n 番目のエネルギーバンド
- $\mu^{(n),k}$: 小複表現 (磁気小群の既約 PUA 表現)

$$V(\mathbf{k})^\dagger H(\mathbf{k}) V(\mathbf{k}) = \bigoplus_{n=1}^k \varepsilon^{(n)}(\mathbf{k}) \mathbf{1}_{d^{(n)}}, \quad V(\mathbf{k})^\dagger \mu^k(m) V(\mathbf{k})^m = \bigoplus_{n=1}^k \mu^{(n),k}(m), \quad \forall m \in \mathcal{M}^k$$

$V(\mathbf{k}) = [v_1^{(1)}(\mathbf{k}) \dots v_{d^{(1)}}^{(1)}(\mathbf{k}) v_1^{(2)}(\mathbf{k}) \dots v_{d^{(2)}}^{(2)}(\mathbf{k}) \dots v_1^{(n)}(\mathbf{k}) \dots v_{d^{(n)}}^{(n)}(\mathbf{k})]$ と書く.

- 演算子 $\phi_i^{(n)}(\mathbf{k})^\dagger := \Psi(\mathbf{k})^\dagger v_i^{(n)}(\mathbf{k})$ によるハミルトニアンへの対角化:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \Psi(\mathbf{k})^\dagger H(\mathbf{k}) \Psi(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon^{(n)}(\mathbf{k}) \phi_i^{(n)}(\mathbf{k})^\dagger \phi_i^{(n)}(\mathbf{k})$$

- 対応する一電子状態 (**Bloch 状態**): $|\mathbf{k}, n\rangle_i := \phi_i^{(n)}(\mathbf{k})^\dagger |\text{vac}\rangle$
- Bloch 状態は任意の $m \in \mathcal{M}^k$ に対し $\hat{m} |\mathbf{k}, n\rangle_j = |\mathbf{k}, n\rangle_i \mu^{(n),k}(m)_{ij}$ を満たす.

→ Bloch 状態は磁気小群 \mathcal{M}^k の小複表現 $\mu^{(n),k}$ の表現基底をなす.

磁気小点群とその表現

磁気小群 \mathcal{M}^k は並進部分群 \mathbb{T} によって無数の元をもつ。

→ 実用上は、剰余群 $\bar{\mathcal{M}}^k := \mathcal{M}^k / \mathbb{T}$ (磁気小点群) を考え、その上の PUA 表現を考える。

- 小複表現 $\mu^{(n),k}$ に対応する磁気小点群 $\bar{\mathcal{M}}^k$ の既約表現 $\bar{\mu}^{(n),k}$ を $\mu^{(n),k}(m) = e^{-ik \cdot \tau_m} \bar{\mu}^{(n),k}(\bar{m})$, $\tau_m := t_m - t_{\bar{m}}$ によって導入する。
- 乗数系は ω_{in} から $\omega^k := \omega_{\text{in}} \omega_{\text{ns}}^k$ へ変わる：

$$\bar{\mu}^{(n),k}(\bar{m}_1) \bar{\mu}^{(n),k}(\bar{m}_2)^{m_1} = \omega_{\text{in}}(m_1, m_2) \omega_{\text{ns}}^k(m_1, m_2) \bar{\mu}^{(n),k}(\overline{m_1 m_2})$$
$$\omega_{\text{ns}}^k(m_1, m_2) := \exp[-ik \cdot (\tau_{m_1 m_2} - \tau_{m_1} - \phi(m_1) \tau_{m_2})]$$

- ω_{ns}^k は磁気空間群が非共型かつ波数 k が Brillouin ゾーン境界上の場合のみ重要になる (その他の場合には自明な値にとれる)。

磁気小点群とその表現

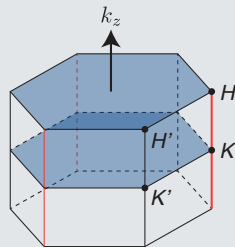
例 (磁気空間群 $P6_3/mmc1'$, #194.264)

空間群 $P6_3/mmc$ に時間反転操作 $\mathcal{T} = \{T|0\}$ を加えた群.

- 面 $k_z = 0, \pi/c$ 上の一般点は鏡映 $\mathcal{M}_z = \{M_z|\frac{c}{2}\hat{z}\}$, 空間・時間反転の合成 $\mathfrak{I} = \{TI|0\}$ で不変:

$$\mathcal{M}^{k_z=0, \pi/c} = \mathbb{T} \sqcup \mathcal{M}_z \mathbb{T} \sqcup \mathfrak{I} \mathbb{T} \sqcup \mathfrak{I} \mathcal{M}_z \mathbb{T}$$

$\omega_{\text{ns}}^{k_z=0, \pi/c}$	E	\mathcal{M}_z	\mathfrak{I}	$\mathfrak{I} \mathcal{M}_z$
E	1	1	1	1
\mathcal{M}_z	1	1	1	$e^{-ik_z c}$
\mathfrak{I}	1	1	1	1
$\mathfrak{I} \mathcal{M}_z$	1	1	$e^{ik_z c}$	$e^{ik_z c}$



磁気小点群とその表現

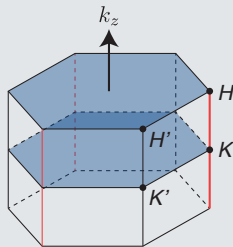
例 (磁気空間群 $P6_3/mmc1'$, #194.264)

空間群 $P6_3/mmc$ に時間反転操作 $\mathcal{T} = \{T|0\}$ を加えた群.

- K - H 軸上の一般点は 3 回回転 $C_{3z} = \{C_{3z}|0\}$,
鏡映 $M_d = \{M_{[1-10]}|\frac{c}{2}\hat{z}\}$ および
空間・時間反転の合成 $\mathfrak{I} = \{TI|0\}$ で不変:

$$\begin{aligned}\mathcal{G}^{K-H} &= \mathbb{T} \sqcup C_{3z} \mathbb{T} \sqcup C_{3z}^{-1} \mathbb{T} \\ &\quad \sqcup M_d \mathbb{T} \sqcup M_d C_{3z} \mathbb{T} \sqcup M_d C_{3z}^{-1} \mathbb{T} \\ \mathcal{M}^{K-H} &= \mathcal{G}^{K-H} \sqcup \mathfrak{I} \mathcal{G}^{K-H}\end{aligned}$$

- 乗数系は, H 上でなければ任意の $m_1, m_2 \in \mathcal{M}^{K-H}$ に対して $\omega_{\text{ns}}^{K-H}(m_1, m_2) = 1$ とできる.



表現のマップ

M を群, 乗数系 $\omega: M \times M \rightarrow U(1)$ を考える.

L を M の部分群, $\mu: L \rightarrow U(N)$ を群 L の PUA 表現とする.

$m \in M$ による **表現 μ のマップ** $\mu_m: mLm^{-1} \rightarrow U(N)$ は次で定められる.

$$\mu_m(mlm^{-1}) := \frac{\omega(mlm^{-1}, m)}{\omega(m, l)} \mu(l)^m, \quad l \in L$$

- 実際, μ の基底を $|\psi\rangle = \{|\psi\rangle_1, \dots, |\psi\rangle_N\}$ としたとき, μ_m の表現基底を形式的に $\hat{m}|\psi\rangle$ とすれば

$$\begin{aligned} \widehat{mlm^{-1}}(\hat{m}|\psi\rangle_j) &= \omega(mlm^{-1}, m) \widehat{ml}|\psi\rangle_j \\ &= \frac{\omega(mlm^{-1}, m)}{\omega(m, l)} \hat{m}(\hat{l}|\psi\rangle_j) = (\hat{m}|\psi\rangle_i) \frac{\omega(mlm^{-1}, m)}{\omega(m, l)} \mu(l)^m_{ij} \end{aligned}$$

Wigner の判定条件

ユニタリ群 $\bar{\mathcal{G}}^k := \mathcal{G}^k / \mathbb{T}$ の射影ユニタリ表現 $\bar{\gamma}^{(n),k}$ から小複表現 $\bar{\mu}^{(n),k}$ を構成する。

Wigner の判定条件

反ユニタリ操作 \mathfrak{I} が加わった群 $\bar{M}^k = \bar{\mathcal{G}}^k \sqcup \mathfrak{I}\bar{\mathcal{G}}^k$ に対して

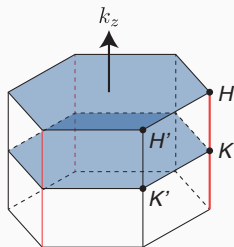
$$W_{\mathfrak{I}}^{(n),k} := \frac{1}{|\bar{\mathcal{G}}^k|} \sum_{\bar{g} \in \bar{\mathcal{G}}^k} \omega^k(\mathfrak{I}g, \mathfrak{I}g) \operatorname{tr}[\bar{\gamma}^{(n),k}(\overline{(\mathfrak{I}g)^2})] = \begin{cases} 1 & \text{(a)} \\ -1 & \text{(b)} \\ 0 & \text{(c)} \end{cases}$$

- (a) : 任意の $\bar{g} \in \bar{\mathcal{G}}^k$ に対して $\bar{\mu}^{(n),k}(\bar{g})$ と $\bar{\gamma}^{(n),k}(\bar{g})$ は同一の表現行列。
- (b, c) : 付加的な縮退が生じ、表現 $\bar{\mu}^{(n),k}$ の縮退度 (次元) は $\bar{\gamma}^{(n),k}$ の 2 倍になる。(おおよそ [Kramers 縮退の一般化](#) と思えばよい。)

具体例：磁気空間群 $P6_3/mmc1'$ (#194.264)

- 鏡映操作 $M_z = \{M_z | \frac{c}{2}\hat{z}\}$,
空間・時間反転の合成 $\mathfrak{I} = \{TI|0\}$ をもつ
- (復習) 磁気小群 $\mathcal{M}^{k_z=0, \pi/c} = \mathbb{T} \sqcup M_z \mathbb{T} \sqcup \mathfrak{I} \mathbb{T} \sqcup \mathfrak{I} M_z \mathbb{T}$
- 乗数系 $\omega^{k_z=0, \pi/c} = \omega_{\text{in}} \omega_{\text{ns}}^{k_z=0, \pi/c}$ の一例 (SOC あり)

$\omega^{k_z=0, \pi/c}$	E	M_z	\mathfrak{I}	$\mathfrak{I} M_z$
E	1	1	1	1
M_z	1	-1	1	$-e^{-ik_z c}$
\mathfrak{I}	1	1	-1	-1
$\mathfrak{I} M_z$	1	-1	$-e^{ik_z c}$	$e^{ik_z c}$



- 小点群 $\bar{\mathcal{G}}^{k_z=0, \pi/c}$ の既約射影ユニタリ表現： $\bar{\gamma}_{\pm 1/2}^{k_z=0, \pi/c}(\bar{E}) = 1$, $\bar{\gamma}_{\pm 1/2}^{k_z=0, \pi/c}(\bar{M}_z) = \pm i$
 - スピナップ (+1/2)・ダウン (-1/2) の 2 状態に対応

具体例：磁気空間群 $P6_3/mmc1'$ (#194.264)

- 小点群 $\bar{G}^{k_z=0, \pi/c}$ の既約射影ユニタリ表現： $\bar{\gamma}_{\pm 1/2}^{k_z=0, \pi/c}(\bar{E}) = 1$, $\bar{\gamma}_{\pm 1/2}^{k_z=0, \pi/c}(\bar{M}_z) = \pm i$
 - スピナップ (+1/2)・ダウン (-1/2) の 2 状態に対応
- $\bar{G}^{k_z=0, \pi/c}$ に $\bar{\mathfrak{I}}$ を加えたときの Wigner の判定条件 → **2 重縮退** (スピン縮退) する

$$W_{\bar{\mathfrak{I}}} = \frac{1}{2}(-1 + e^{ik_z c}) = \begin{cases} 0 & k_z = 0 \\ -1 & k_z = \pi/c \end{cases}$$

- 磁気小点群 $\bar{M}^{k_z=0, \pi/c}$ の PUA 表現 $\bar{\mu}^{k_z=0, \pi/c}$

	\bar{E}	\bar{M}_z	$\bar{\mathfrak{I}}$	$\bar{\mathfrak{I}}\bar{M}_z$
$\bar{\mu}^{k_z=0, \pi/c}$	$\begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} i & 0 \\ 0 & -ie^{-ik_z c} \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} 0 & -ie^{ik_z c} \\ -i & 0 \end{vmatrix}$

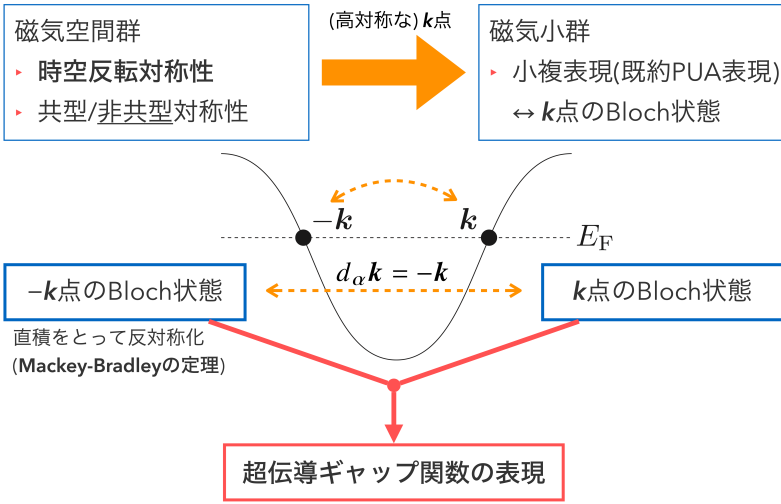
超伝導ギャップ・ノード構造の 分類手法

大まかなイメージ

- 仮定：時空反転対称性の存在・弱結合極限
→ 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
- 小複表現 $\mu^{(n),k}$ ：正常状態のバンド $\varepsilon^{(n)}(\mathbf{k})$ と Bloch 状態 $|\mathbf{k}, n\rangle$ の情報をもつ
- 特にフェルミ面上， $\varepsilon^{(n)}(\mathbf{k}) = 0$ なる n と \mathbf{k} に注目する
(実用上は \mathbf{k} として Brillouin ゾーン内の鏡映面や回転軸上の一般点をとる)
- BCS 理論の仮定その 1 「Cooper 対の重心運動量は 0」
→ 2 つの Bloch 状態 $|\mathbf{k}, n\rangle$ と $|\mathbf{-k}, n\rangle = d_\alpha |\mathbf{k}, n\rangle$ を考える ($d_\alpha := I$ or \mathcal{T})
- フェルミオンの反可換性より $\Delta(\mathbf{k})^\top = -\Delta(-\mathbf{k})$
→ **バンド内秩序変数は $|\mathbf{-k}, n\rangle \otimes |\mathbf{k}, n\rangle$ を基底とする反対称表現 $\nu^{(n),k,-}$ に従う。**

Yarzhemsky-Murav'ev (1992)： $\nu^{(n),k,-}$ は **Mackey-Bradley の定理**で計算できる！

概念図



制限表現

$\mu: M \rightarrow U(N)$ を群 M の PUA 表現, L を群 M の部分群とする.

μ の L への**制限表現** $(\mu \downarrow L): L \rightarrow U(N)$ を $(\mu \downarrow L)(l) := \mu(l)$ で定義する.

例 (磁気空間群 $P11'$, #1.2)

$M = \{E, \mathcal{T}\} \rtimes \mathbb{T}$ と表せる. 乗数系は $\hat{\mathcal{T}}^2 = -\hat{E}$ とする.

- 原点 $k = 0$ (時間反転不変運動量):
磁気小点群 $\bar{M}^0 = \{E, \mathcal{T}\}$, 既約 PUA 表現 $\bar{\mu}^0(E) = \sigma_0$, $\bar{\mu}^0(\mathcal{T}) = i\sigma_y$.
- 時間反転不変運動量ではない一般の波数 k :
磁気小点群 $\bar{M}^k = \{E\}$, (自明な) 既約 PUA 表現 $\bar{\mu}^k(E) = 1$.

制限表現は $\bar{\mu}^0 \downarrow \bar{M}^k = \bar{\mu}^k \oplus \bar{\mu}^k$

→ 原点ではエネルギーバンドが 2 重縮退しており, その周りでは縮退が解ける

適合関係: 対称性が高い波数から低い波数へバンドがどのように繋がっているか

誘導表現

L を群 M の部分群とし, M の左剰余類分解を考える: $M = \coprod_{\alpha=1}^{N_2} q_\alpha L$.
乗数系 $\omega: M \times M \rightarrow U(1)$ をもつ L の PUA 表現 $\mu: M \rightarrow U(N_1)$ の
誘導表現 $(\mu \uparrow M): L \rightarrow U(N_1 N_2)$ を次で定義する.

$$(\mu \uparrow M)(m) := \begin{cases} \frac{\omega(m, q_\beta)}{\omega(q_\alpha, q_\alpha^{-1} m q_\beta)} \mu(q_\alpha^{-1} m q_\beta)^{q_\alpha} & q_\alpha^{-1} m q_\beta \in L \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

- L の PUA 表現 μ の基底を $|\psi\rangle = \{|\psi\rangle_1, \dots, |\psi\rangle_{N_1}\}$ としたとき,
基底 $\{\widehat{q}_\alpha |\psi\rangle_i\}_{i=1, \dots, N_1; \alpha=1, \dots, N_2}$ は誘導表現の基底をなす:

$$\widehat{m}(\widehat{q}_\beta |\psi\rangle_j) = \dots = (\widehat{q}_\alpha |\psi\rangle_i) \frac{\omega(m, q_\beta)}{\omega(q_\alpha, q_\alpha^{-1} m q_\beta)} \mu(q_\alpha^{-1} m q_\beta)_{ij}^{q_\alpha} \quad \text{if } q_\alpha^{-1} m q_\beta \in L$$

- 磁気小群 M^k の表現 μ^k から磁気空間群 M の表現 $\mu^k \uparrow M$ を構成できる.

Mackey の分解定理

定理 (Mackey, 1951)

M, N を群 M の部分群とし, (M, N) -両側剰余類分解 $M = \coprod_{\alpha} M d_{\alpha} N$ を考える.
 N の PUA 表現 μ に対して, d_{α} による μ の $N_{\alpha} := d_{\alpha} N d_{\alpha}^{-1}$ へのマップを μ_{α} とする.
このとき, $\mathcal{L}_{\alpha} := M \cap N_{\alpha}$ とすると次が成り立つ.

$$(\mu \uparrow M) \downarrow M \simeq \bigoplus_{\alpha} (\mu_{\alpha} \downarrow \mathcal{L}_{\alpha}) \uparrow M$$

証明.

ノートの付録を参照のこと.

□

Mackey-Bradley の定理

定理 (Mackey, 1953; Bradley, 1970)

Mackey の分解定理で $M = N$ とし, 群 \mathcal{L}_α の表現 $\nu_\alpha := (\mu_\alpha \otimes \mu) \downarrow \mathcal{L}_\alpha$ を考える.
 M の M -両側剰余類を次の 3 種類に分類する:

- $d_1 = E$ についての自明な両側剰余類, すなわち M 自身.
- 自明でない自己逆元な両側剰余類: $A := \{\alpha \mid Md_\alpha M = Md_\alpha^{-1} M, d_\alpha \neq E\}$.
- 非自己逆元な両側剰余類: $B := \{\beta \mid Md_\beta M \neq Md_\beta^{-1} M\}$.

各 $\alpha \in A$ に対し, 共通部分 $d_\alpha M \cap Md_\alpha^{-1}$ の元 $z = d_\alpha m = m' d_\alpha^{-1}$ ($m, m' \in M$) を固定する.
行列 S を $S_{ji,kl} := \frac{\omega(z, d_\alpha)}{\omega(d_\alpha, d_\alpha^{-1} z)} \mu(m')_{ik} \mu(m)_{jl}^{d_\alpha}$ で定義する.

このとき, 群 $\mathcal{K}_\alpha := \mathcal{L}_\alpha \sqcup z\mathcal{L}_\alpha$ への表現 ν_α の拡張 ν_α^\pm が存在して, $\nu_\alpha^\pm(z) = \pm S$ となる.
以上を用いると, 誘導表現の直積に関して次が成り立つ.

$$[(\mu \uparrow M) \otimes (\mu \uparrow M)]_\pm \simeq ([\mu \otimes \mu]_\pm \uparrow M) \oplus \left(\bigoplus_{\alpha \in A} \nu_\alpha^\pm \uparrow M \right) \oplus \left(\bigoplus_{\beta \in B} \nu_\beta \uparrow M \right)$$

今回の問題における Mackey-Bradley の定理

命題

Mackey-Bradley の定理において、 M が I または \mathcal{T} を含む磁気空間群とする。時間反転不変運動量でない k を取り、 M を磁気小群 M^k とする ($I, \mathcal{T} \notin M^k$)。このとき、次の3つの性質が成り立つ。

1. $d_\alpha k \equiv -k$ となるような元 d_α に対し $\alpha \in A$ である。すなわち、 I や \mathcal{T} は自明でない自己逆元な両側剰余類の代表元として取ることができる。
2. 上のような代表元を取ったとき、 $M^k = M_\alpha^k = \mathcal{L}_\alpha^k$ である。
3. 共通部分 $d_\alpha M^k \cap M^k d_\alpha^{-1}$ の元 z として、常に $z = d_\alpha$ を選ぶことができる。

証明.

比較的容易に示せる (ノートを参照).

□

今回の問題における Mackey-Bradley の定理

- M^k -両側剰余類 $\alpha \in A$ で、代表元 $d_\alpha = z = I$ または \mathcal{T} とする.
- 磁気小群 M^k の小複表現 $\mu^{(n),k}$ に対して, $\nu_\alpha^{(n),k} = \mu_\alpha^{(n),k} \otimes \mu^{(n),k}$ を定める.
- $\mu^{(n),k}$ の表現基底は Bloch 状態 $|n, k\rangle$ であるから,
 $\nu_\alpha^{(n),k}$ の表現基底は $d_\alpha |n, k\rangle \otimes |n, k\rangle$ となる.
- $\nu_\alpha^{(n),k}$ を反対称化したものが $\nu_\alpha^{(n),k,-}$ である.
→ これは求めたい超伝導ギャップ関数の表現になっている!

標語

小複表現 $\mu^{(n),k}$ から出発して, $d_\alpha = I$ または \mathcal{T} としたときの PUA 表現 $\nu_\alpha^{(n),k,-}$ を構成すれば, その k 点における超伝導ギャップ関数の表現が求まる.

注: スピン軌道相互作用がない系におけるスピン一重項秩序変数を考える場合は, 対称化表現を用いる.

超伝導ギャップ関数の表現を求める公式

構成から，群 $\mathcal{K}_\alpha^k = \mathcal{M}^k + d_\alpha \mathcal{M}^k$ の PUA 表現 $v_\alpha^{(n),k,-}$ の指標を具体的に計算できる．
実用上は，群 $\bar{\mathcal{K}}_\alpha^k := \mathcal{K}_\alpha^k/T$ の PUA 表現 $\bar{v}_\alpha^{(n),k,-}$ を議論する ($\bar{m} \in \bar{\mathcal{M}}^k$)：

$$\begin{aligned}\mathrm{tr}[\bar{v}_\alpha^{(n),k,-}(\bar{m})] &= \frac{\omega^k(m, d_\alpha)}{\omega^k(d_\alpha, d_\alpha^{-1} m d_\alpha)} \mathrm{tr}[\bar{\mu}^{(n),k}(\overline{d_\alpha^{-1} m d_\alpha})]^{d_\alpha} \mathrm{tr}[\bar{\mu}^{(n),k}(\bar{m})] \\ \mathrm{tr}[\bar{v}_\alpha^{(n),k,-}(\overline{d_\alpha m})] &= -\omega^k(d_\alpha m, d_\alpha m) \mathrm{tr}[\bar{\mu}^{(n),k}(\overline{d_\alpha m d_\alpha m})], \quad \phi(d_\alpha m) = 1\end{aligned}$$

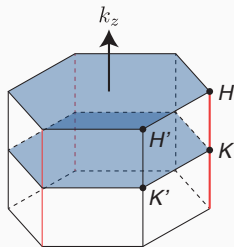
[ある波数 k 上の超伝導ギャップ分類の手続き]

1. 磁気小点群 $\bar{\mathcal{M}}^k$ の既約 PUA 表現 $\bar{\mu}^{(n),k}$ を求める．
2. 表現 $\bar{v}_\alpha^{(n),k,-}$ の指標を計算し，点群 $\bar{\mathcal{K}}_\alpha^k$ の既約表現に分解する．
 - 既約表現 Γ が含まれない： Γ に対応する秩序変数は k 点でノードを作る
 - 既約表現 Γ が含まれる： Γ に対応する秩序変数は k 点でギャップを開けられる

高対称点における超伝導ギャップ・ ノードの分類結果の例

具体例：磁気空間群 $P6_3/mmc1'$ (#194.264)

- 候補物質：重い電子系超伝導体 UPt_3
- 鏡映操作 $M_z = \{M_z | \frac{c}{2}\hat{z}\}$ をもつ
→ 鏡映面 $k_z = 0, \pi/c$ 上の超伝導ギャップ構造の分類
- (復習) 磁気小群 $\mathcal{M}^{k_z=0, \pi/c} = T \sqcup M_z T \sqcup \mathfrak{I} T \sqcup \mathfrak{I} M_z T$
- (復習) 磁気小点群 $\bar{\mathcal{M}}^{k_z=0, \pi/c}$ の PUA 表現 $\bar{\mu}^{k_z=0, \pi/c}$



	\bar{E}	\bar{M}_z	$\bar{\mathfrak{I}}$	$\bar{\mathfrak{I}M}_z$
$\bar{\mu}^{k_z=0, \pi/c}$	$\begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} i & 0 \\ 0 & -ie^{-ik_z c} \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} 0 & -ie^{ik_z c} \\ -i & 0 \end{vmatrix}$

具体例：磁気空間群 $P6_3/mmc1'$ (#194.264)

- Mackey-Bradley の定理から導かれる公式で $d_\alpha = I$ とする：

$$\begin{aligned}\mathrm{tr}[\bar{v}_I^{k,-}(\bar{m})] &= \frac{\omega^k(m, I)}{\omega^k(I, ImI)} \mathrm{tr}[\bar{\mu}^k(\overline{ImI})] \mathrm{tr}[\bar{\mu}^k(\bar{m})] \\ \mathrm{tr}[\bar{v}_I^{k,-}(\overline{Im})] &= -\omega^k(Im, Im) \mathrm{tr}[\bar{\mu}^k(\overline{ImIm})]\end{aligned}$$

- 超伝導ギャップの表現 $\bar{v}_I^{k_z=0, \pi/c; -}$ の指標を計算し、点群 C_{2h} の既約表現で分解：

C_{2h}	E	M_z	I	C_{2z}	既約分解
$\bar{v}_I^{k_z=0; -}$	4	0	-2	2	$A_g \oplus 2A_u \oplus B_u$
$\bar{v}_I^{k_z=\pi/c; -}$	4	4	-2	-2	$A_g \oplus 3B_u$

C_{2h}	E	M_z	I	C_{2z}
A_g	1	1	1	1
B_g	1	-1	1	-1
A_u	1	-1	-1	1
B_u	1	1	-1	-1

- 非共型対称性に起因して、 $k_z = 0$ と $k_z = \pi/c$ で超伝導ギャップの表現が異なる。

具体例：磁気空間群 $P6_3/mmc1'$ (#194.264)

- 元の点群 D_{6h} への誘導表現：

$$\bar{v}_I^{k_z=0;-} \uparrow D_{6h} \simeq A_{1g} \oplus A_{2g} \oplus 2E_{2g} \oplus 2A_{1u} \oplus 2A_{2u} \oplus B_{1u} \oplus B_{2u} \oplus 2E_{1u} \oplus 4E_{2u}$$

$$\bar{v}_I^{k_z=\pi/c;-} \uparrow D_{6h} \simeq A_{1g} \oplus A_{2g} \oplus 2E_{2g} \oplus 3B_{1u} \oplus 3B_{2u} \oplus 6E_{1u}$$

- UPT₃ では E_{2u} 表現に属する超伝導秩序変数が有力と考えられている
→ $k_z = 0$ 上でギャップが開き， $k_z = \pi/c$ 上で線ノードが現れる
Norman (1995), Micklitz-Norman (2009)
- スピン軌道相互作用をもつ超伝導体について，
奇パリティ秩序変数のとき 点群の解析の範囲 では線ノードは現れない Blount (1985)
- 非共型対称性によってこれまでの常識を覆す結果が現れた好例

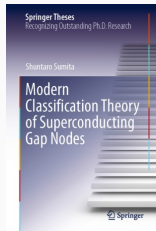
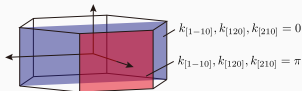
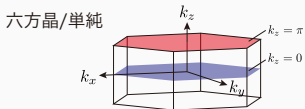
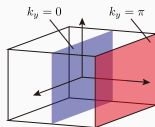
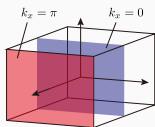
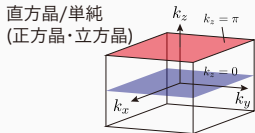
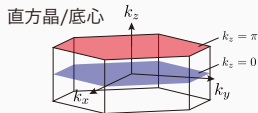
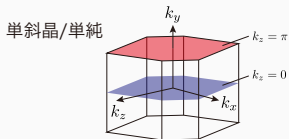
鏡映面上の超伝導ギャップ・ノード構造の分類

- 空間反転対称性および z 軸に垂直な鏡映 (映進) 対称性をもつ超伝導体
 - (A), (B) : 時間反転なし (強磁性), (C)-(F) : 時間反転あり (常磁性・反強磁性)
- 鍵となる要素は, 鏡映操作・時間反転操作の並進部分 $t_{M_z} \cdot t_{\mathcal{T}}$ の各 z 成分
 - $[t_{M_z}]_z \neq 0$: z 軸まわりの **螺旋対称性**
 - $[t_{\mathcal{T}}]_z \neq 0$: z 方向に伝搬ベクトルをもつ **反強磁性**

ケース	時間反転	重要な要素	$\bar{v}_I^{k_z=0;-}$	$\bar{v}_I^{k_z=\pi/c;-}$
(A)	なし	$[t_{M_z}]_z = 0$	A_u	A_u
(B)	なし	$[t_{M_z}]_z \neq 0$	A_u	B_u
(C)	あり	$[t_{M_z}]_z = [t_{\mathcal{T}}]_z = 0$	$A_g \oplus 2A_u \oplus B_u$	$A_g \oplus 2A_u \oplus B_u$
(D)	あり	$[t_{M_z}]_z = 0, [t_{\mathcal{T}}]_z \neq 0$	$A_g \oplus 2A_u \oplus B_u$	$B_g \oplus 3A_u$
(E)	あり	$[t_{M_z}]_z \neq 0, [t_{\mathcal{T}}]_z = 0$	$A_g \oplus 2A_u \oplus B_u$	$A_g \oplus 3B_u$
(F)	あり	$[t_{M_z}]_z \neq 0, [t_{\mathcal{T}}]_z \neq 0$	$A_g \oplus 2A_u \oplus B_u$	$B_g \oplus A_u \oplus 2B_u$

鏡映面上の超伝導ギャップ・ノード構造の分類

- 一般化：空間反転対称性および鏡映(映進)対称性をもつ 59 の空間群
 - Brillouin ゾーン境界に鏡映面をもつ 6 種類の Bravais 格子



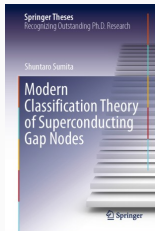
SS, Springer Theses (2021)

鏡映面上の超伝導ギャップ・ノード構造の分類

- 一般化：空間反転対称性および鏡映(映進)対称性をもつ59の空間群
- Brillouinゾーン境界に鏡映面をもつ6種類のBravais格子

No.	Space group	D_{2d}	D_{2h}
cubic			
20	T_d (F-23)	D_{2d}	D_{2h}
21	O_h (Fm-3m)	D_{2d}	D_{2h}
22	O_h (Fm-3m)	D_{2d}	D_{2h}
23	O_h (Fm-3m)	D_{2d}	D_{2h}
tetragonal			
24	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
25	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
26	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
27	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
28	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
29	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
30	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
31	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
32	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
33	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
34	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
35	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
36	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
37	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
38	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
39	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
40	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
41	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
42	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
43	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
44	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
45	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
46	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
47	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
48	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
49	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
50	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
51	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
52	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
53	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
54	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
55	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
56	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
57	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
58	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
59	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}

No.	Space group	D_{2d}	D_{2h}
cubic			
20	T_d (F-23)	D_{2d}	D_{2h}
21	O_h (Fm-3m)	D_{2d}	D_{2h}
22	O_h (Fm-3m)	D_{2d}	D_{2h}
23	O_h (Fm-3m)	D_{2d}	D_{2h}
tetragonal			
24	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
25	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
26	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
27	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
28	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
29	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
30	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
31	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
32	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
33	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
34	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
35	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
36	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
37	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
38	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
39	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
40	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
41	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
42	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
43	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
44	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
45	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
46	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
47	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
48	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
49	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
50	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
51	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
52	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
53	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
54	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
55	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
56	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
57	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
58	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}
59	C_{4v} (F-4mm)	D_{2d}	D_{2h}



SS, Springer Theses (2021)

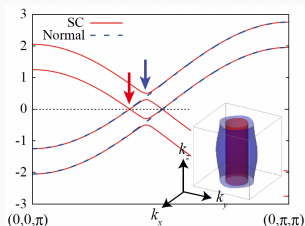
具体的な物質の例

- 反強磁性超伝導体 UPd_2Al_3

($M = P_b 2_1/m$, #11.56)

T. Nomoto & H. Ikeda, JPSJ (2017)

鏡映面	ギャップ
$k_z = 0$	$A_g \oplus 2A_u \oplus B_u$
$k_z = \pi/c$	$B_g \oplus A_u \oplus 2B_u$

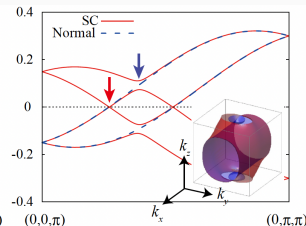


- 強磁性超伝導体 UCoGe

($M = Pn'm'a$, #62.446)

T. Nomoto & H. Ikeda, JPSJ (2017)

鏡映面	ギャップ
$k_z = 0$	A_u
$k_z = \pi/c$	B_u



具体的な物質の例

- 反強磁性超伝導体 UPd_2Al_3

($M = P_b 2_1/m$, #11.56)

T. Nomoto & H. Ikeda, JPSJ (2017)

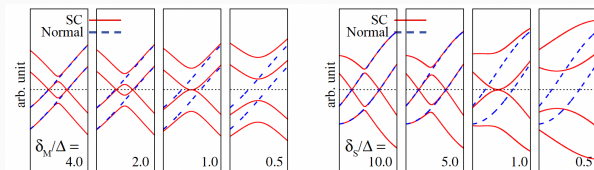
鏡映面	ギャップ
$k_z = 0$	$A_g \oplus 2A_u \oplus B_u$
$k_z = \pi/c$	$B_g \oplus A_u \oplus 2B_u$

- 強磁性超伝導体 UCoGe

($M = Pn'm'a$, #62.446)

T. Nomoto & H. Ikeda, JPSJ (2017)

鏡映面	ギャップ
$k_z = 0$	A_u
$k_z = \pi/c$	B_u



具体的な物質の例

- 反強磁性超伝導体 (?) Sr_2IrO_4

($M \simeq P_{Icca}$, #54.352)

SS et al., PRL (2017)

- ただし, $x \leftrightarrow z$ とする

鏡映面

ギャップ

$k_z = 0$	$A_g \oplus B_{1g} \oplus 2A_u \oplus 2B_{1u} \oplus B_{2u} \oplus B_{3u}$
$k_z = \pi/c$	$B_{2g} \oplus B_{3g} \oplus A_u \oplus B_{1u} \oplus 2B_{2u} \oplus B_{3u}$
$k_x = 0$	$A_g \oplus B_{3g} \oplus 2A_u \oplus B_{1u} \oplus B_{2u} \oplus 2B_{3u}$
$k_x = \pi/a$	$B_{1g} \oplus B_{2g} \oplus 3A_u \oplus 3B_{3u}$
$k_y = 0$	$A_g \oplus B_{2g} \oplus 2A_u \oplus B_{1u} \oplus 2B_{2u} \oplus B_{3u}$
$k_y = \pi/a$	$B_{1g} \oplus B_{3g} \oplus 3A_u \oplus 3B_{2u}$

