

超伝導を結晶の「形」で分類する ～物性物理と数理～

統合自然学科 物質基礎科学コース 加藤雄介研究室 助教
角田 峻太郎

自己紹介

角田 峻太郎 (すみた しゅんたろう)

[経歴]

- 2015年3月：学士(理学) @京都大学
- 2017年3月：修士(理学) @京都大学
- 2020年3月：博士(理学) @京都大学
- 2020年4月–2022年8月：
理研 古崎物性理論研究室 特別研究員
- 2022年9月–現在：
東大総合文化 加藤雄介研究室 助教



<https://www.c.u-tokyo.ac.jp/info/about/visitors/maps-directions/campusmap.html>

趣味：テニス

週1でテニススクールに通っている

自己紹介

角田 峻太郎 (すみた しゅんたろう)

[経歴]

- 2015年3月：学士(理学) @京都大学
- 2017年3月：修士(理学) @京都大学
- 2020年3月：博士(理学) @京都大学
- 2020年4月–2022年8月：
理研 古崎物性理論研究室 特別研究員
- 2022年9月–現在：
東大総合文化 加藤雄介研究室 助教

本日の話

- 数学・物理が好きで理学部へ
 - 数学は難しかった... (幾何学??)
- 3回生から物理系に進む
 - 統計力学C(物性)の先生の授業が面白かった
- 大学院より専門：**物性物理学(理論)**
 - 物性でも数学が活かせる → **楽しい！**
 - 「物理らしい」と「数理手法」を良いバランスで面白い仕事をしたい

本題に入る前に

[今日の目標] 次の標語の意味を(何となく)理解してもらう
結晶の「形」に基づいて超伝導の「形」を分類する

- 専門用語も出しながら：雰囲気が伝わればよい
 - 全部はよく分からぬけど面白そう → とても嬉しいです
 - 全然意味不明だったしつまらなかった → 角田が悪いです
 - 内容が隅々まで完璧に理解できた → 今すぐ研究できます！
- 物性理論の人(角田)は何が面白い・大事だと感じているのか？

物性物理 = 「もの」の性質を調べる



- 身の回りの「もの」(大きさ： $10^{-10}\sim 1\text{m}$)
- 小学校～高校くらい
 - 金属/絶縁体：電気を通す/通さない
 - 強磁性体/常磁性体：磁石につく/つかない
- 固体電子物性 (\subset 物性物理)
 - 原子核は電子より遥かに重い → 主に電子の振る舞い($\sim 10^{23}$ 個)を調べる
 - 量子力学・統計力学などを駆使
- 基礎研究から応用研究まで：様々なデバイスに活かされている！

素朴な疑問：違いは何か？



物性物理 = 「もの」の性質を調べる



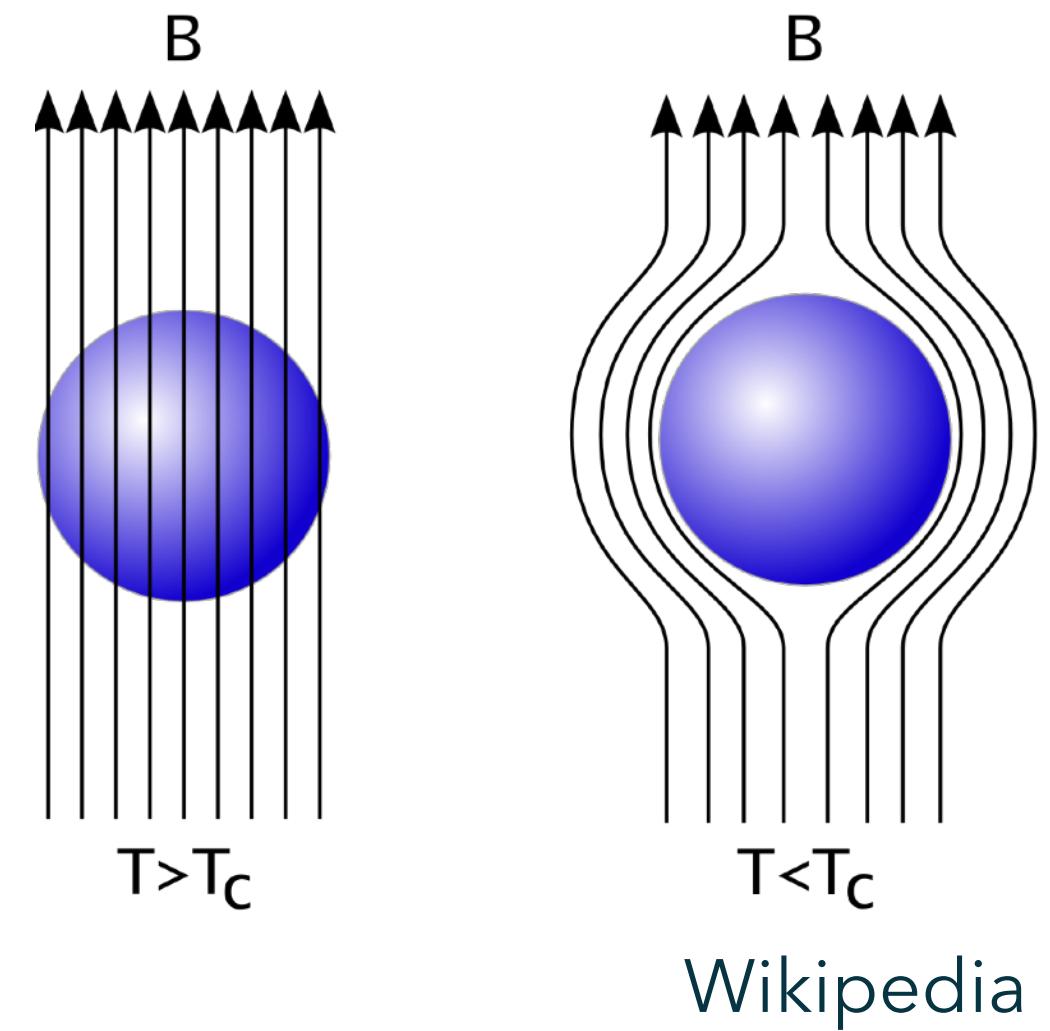
- 身の回りの「もの」(大きさ: $10^{-10} \sim 1\text{m}$)
- 小学校~高校くらい
- 金属/絶縁体: 電気を通す/通さない
- [今日の目標] 次の標語の意味を(何となく)理解してもらう
固₁結晶の「形」に基づいて超伝導の「形」を分類する
- 量子力学・統計力学などを駆使
- 基礎研究から応用研究まで: 様々なデバイスに活かされている!

素朴な疑問: 違いは何か?



超伝導

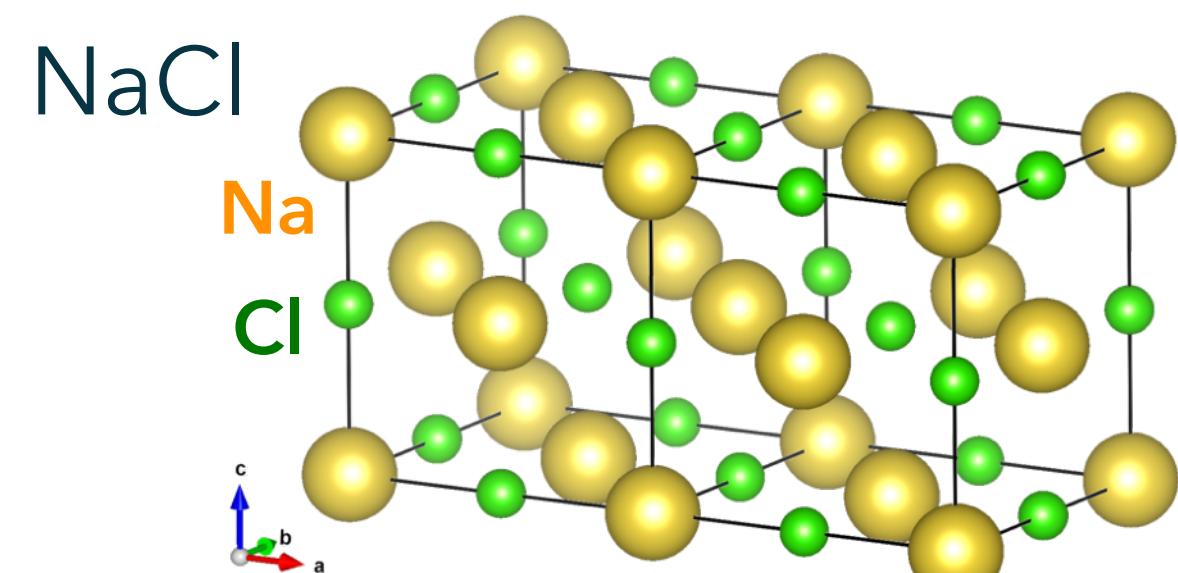
- 超伝導 : Kamerlingh Onnesが発見した現象(1911)
 - 金属が低温で電気抵抗ゼロ(Hg: $T_c = 4.2\text{K}$, Nb-Ti: $T_c = 10\text{K}$)
 - マイスナー効果(内部の磁束密度をゼロにする)
 - 応用例 : 超伝導電磁石(MRI・リニアモーターなど)
- Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS)理論(1957)
 - 2つの電子(フェルミオン)がCooper対を作り、ボソンとして量子凝縮
 - ノーベル物理学賞(1972)
 - 今日では、物性物理学の「花形」と言えるテーマ



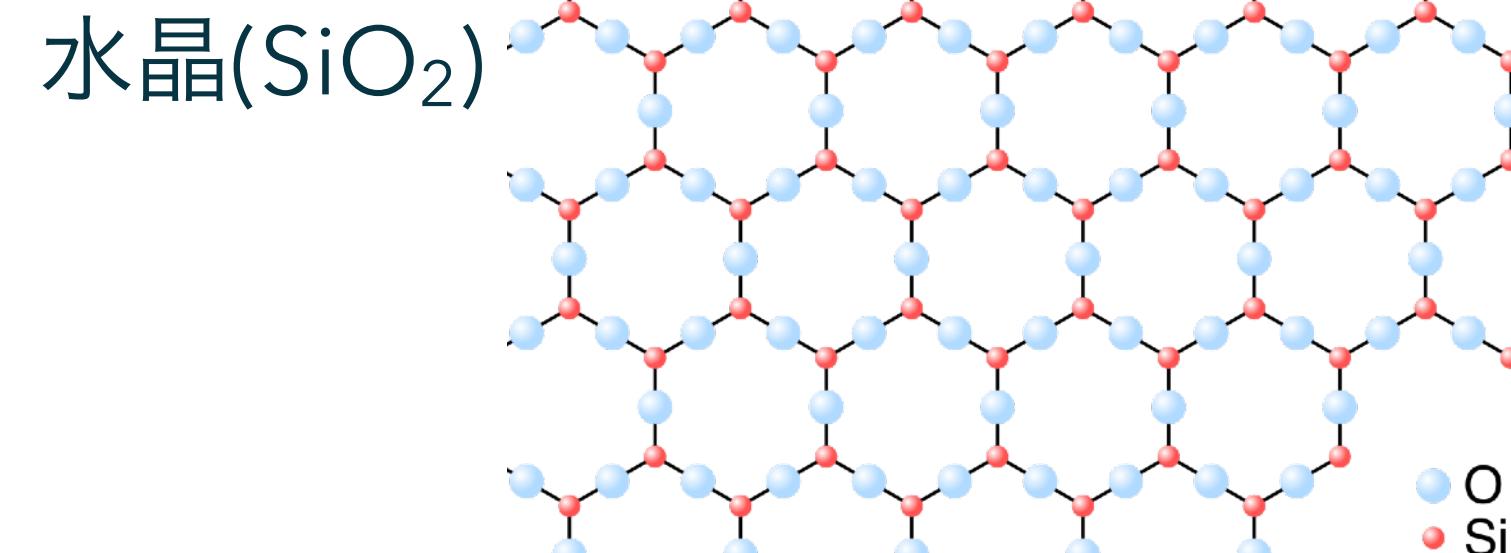
結晶



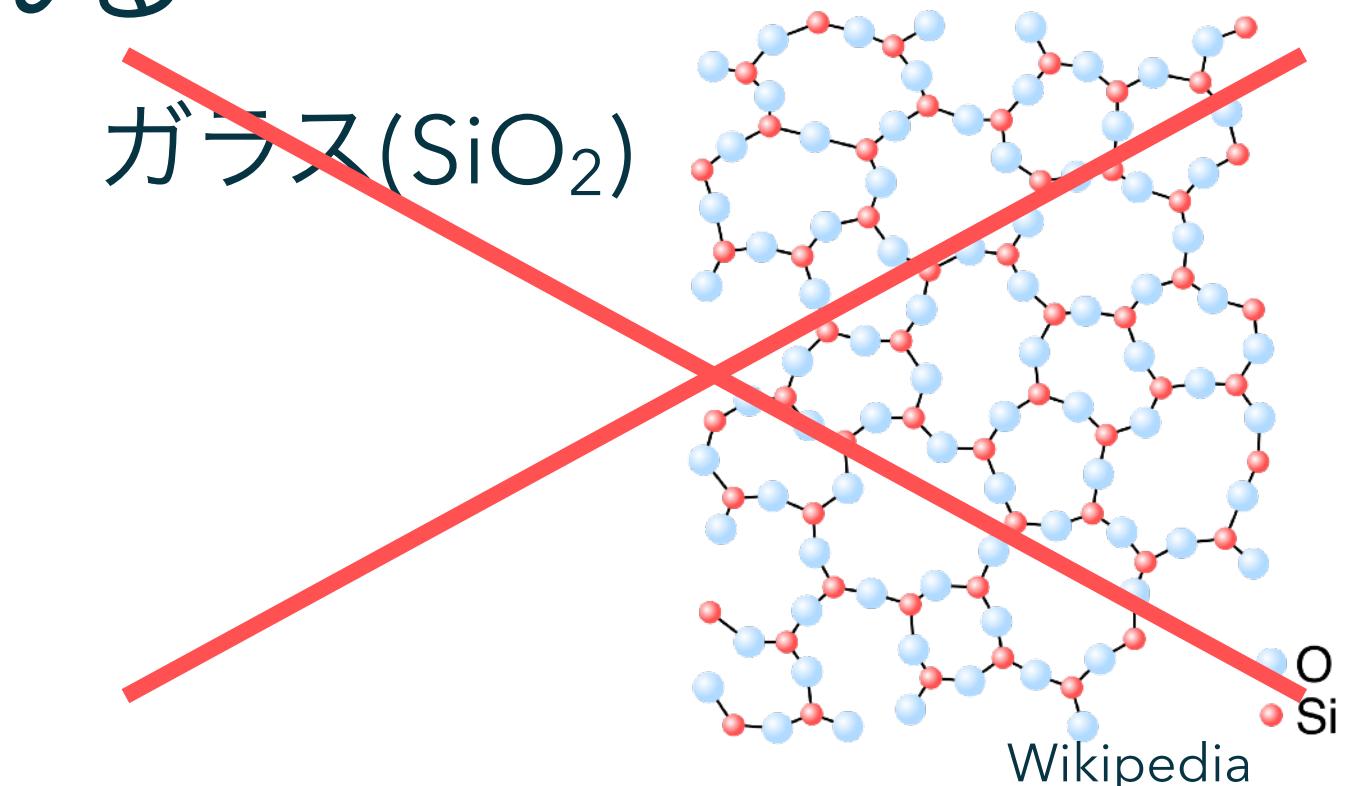
- 多くの超伝導体は**結晶** (例外: 準結晶・アモルファス)
- 一般的なイメージ... 塩の結晶、雪の結晶、水晶、etc.
- 物性理論での**結晶** = 周期構造(離散的並進対称性)をもつ物質
- 基本となる単位構造(単位胞)が周期的に繰り返される



Using VESTA:
K. Momma & F. Izumi, J. Appl. Crystallogr. **44**, 1272 (2011)



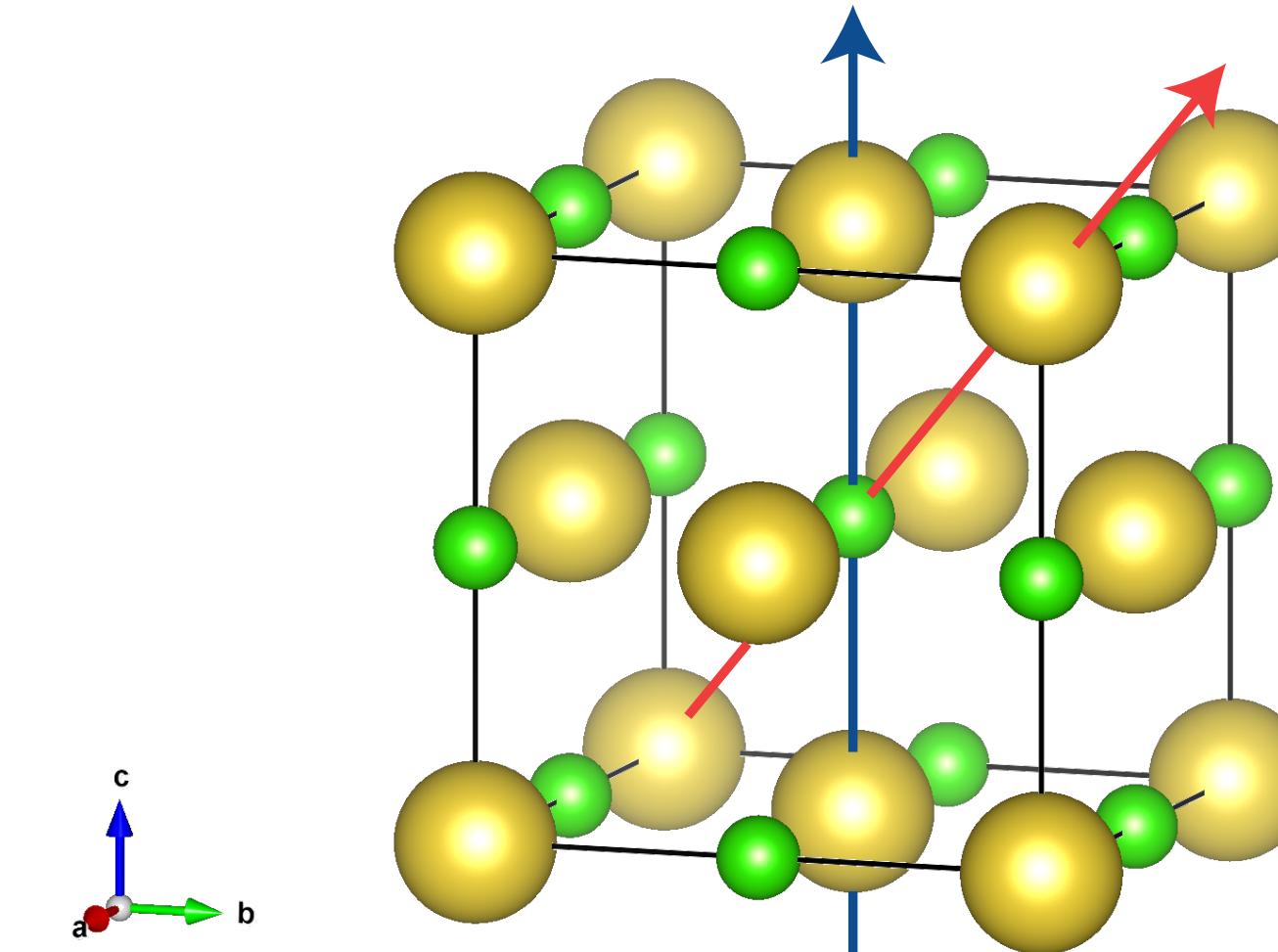
Wikipedia



ガラス(SiO₂)

結晶点群

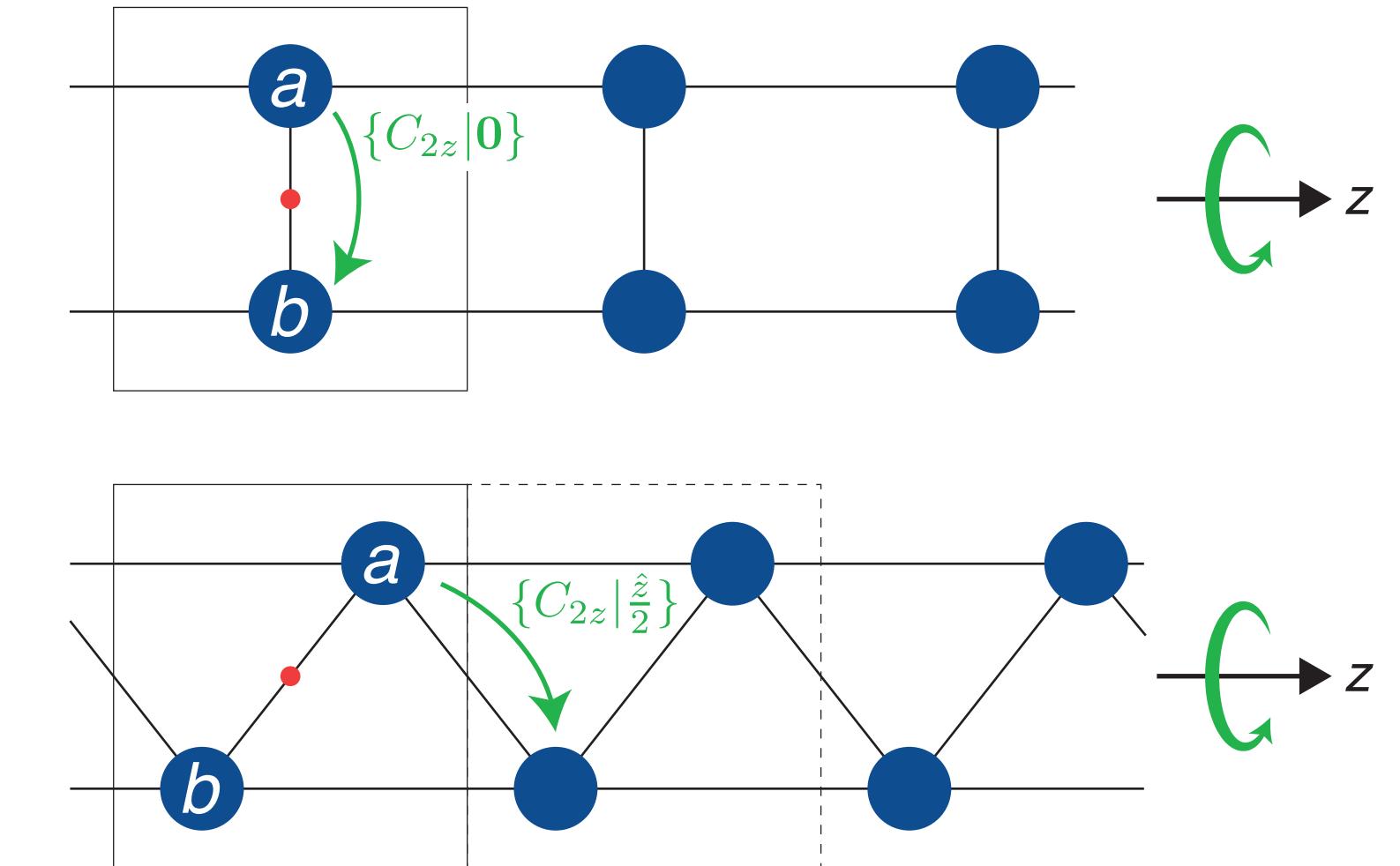
- 群(代数学)：集合とその上の二項演算が
結合法則・単位元の存在・逆元の存在 の3つの条件を満たす
- 結晶点群(全部で32種類)：結晶に作用する並進以外の対称操作を考える
 - 恒等操作(単位元)・回転操作・鏡映操作・空間反転操作・…
- 例) NaCl：点群 O_h
 - 青軸まわりの90°回転
 - 赤軸まわりの120°回転
 - 空間反転など



Using VESTA:
K. Momma & F. Izumi, J. Appl. Crystallogr. **44**, 1272 (2011)

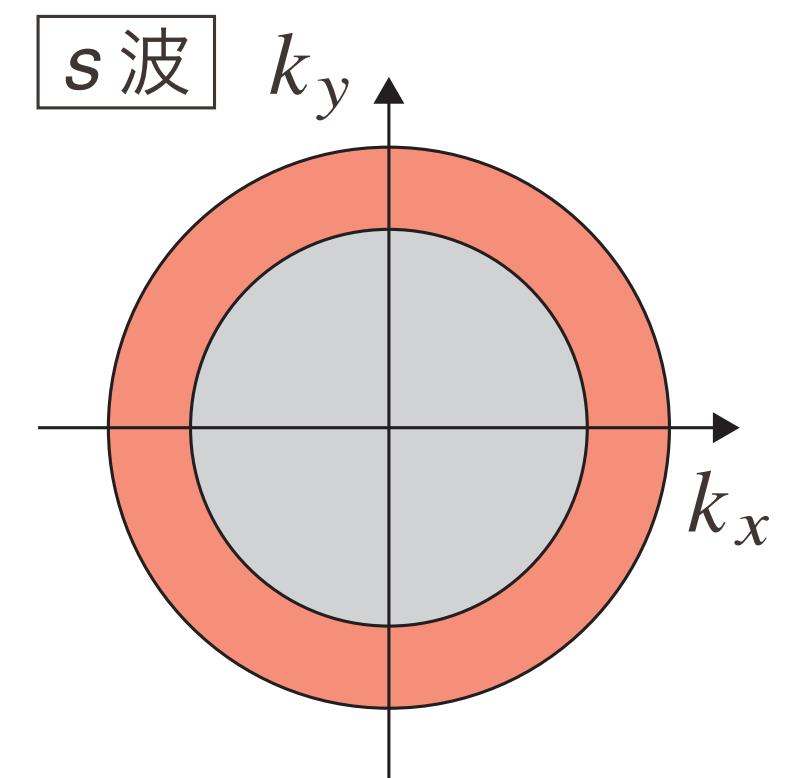
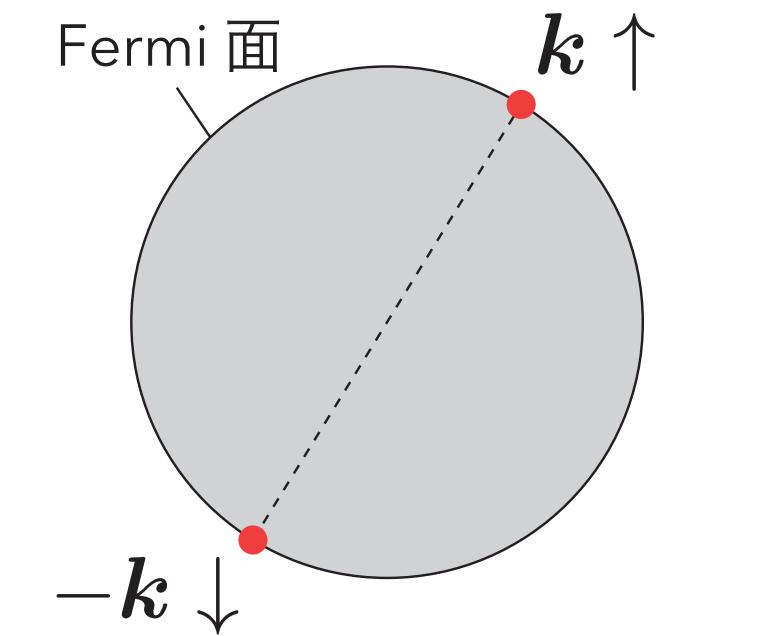
空間群

- 空間群：結晶に作用する並進も含めた対称操作を考える
 - “空間群 = 結晶点群 + 並進操作”
 - 全部で230種類(データベースがあるので覚える必要なし)
- 重要：らせん対称性のような「半端な並進」を含むものが考慮される
 - 例1) はしご格子： 180° 回転
 - 例2) ジグザグ格子： 180° 回転 + $1/2$ 並進
 - 「非共型対称性」という

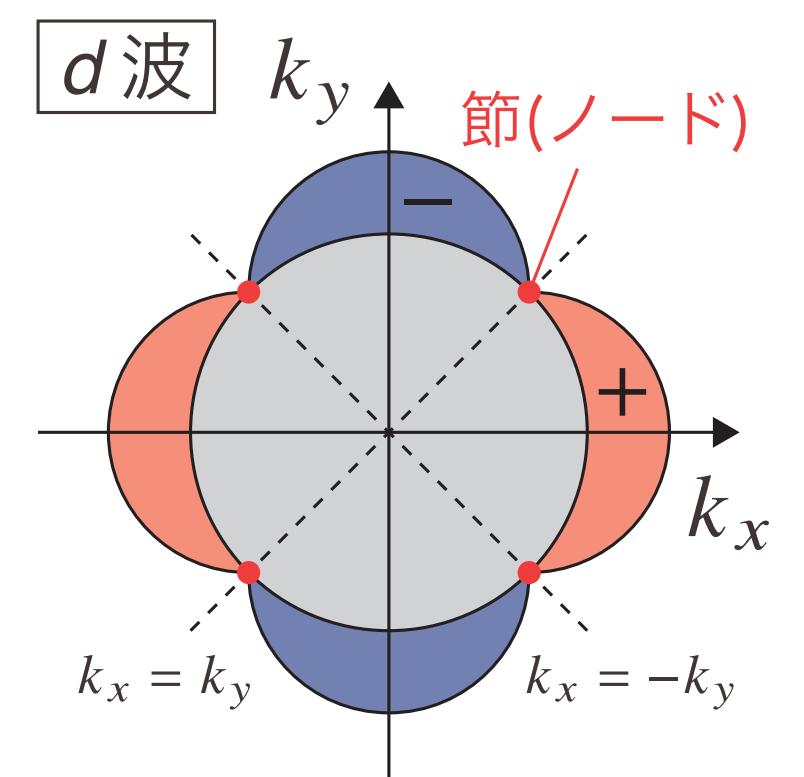


超伝導に戻る

- 座標 $r \xrightarrow{\text{フーリエ変換}} \text{運動量 } k$
- “バーチャルな” 運動量空間に持っていくことで簡単に
- 超伝導BCS理論：Cooper対の量子凝縮
 - (i) 重心運動量はゼロ(k と $-k$)
 - (ii) 全スピンはゼロ(\uparrow と \downarrow)
 - (iii) 対の「組み方」(秩序変数)は等方的(**s波**)
- Bednorz & Müller (1987): **銅酸化物高温超伝導体**の発見
- 異方的**d波超伝導**(1990s) → (iii)の条件を破る！



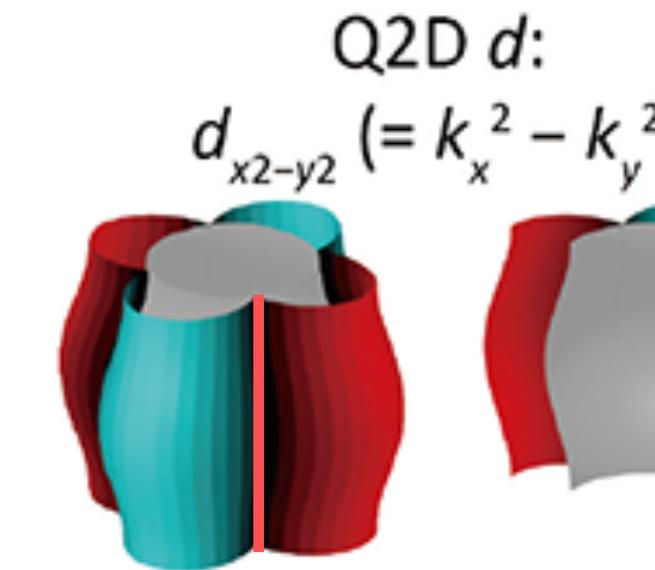
$$\Delta(k) = \Delta_0$$



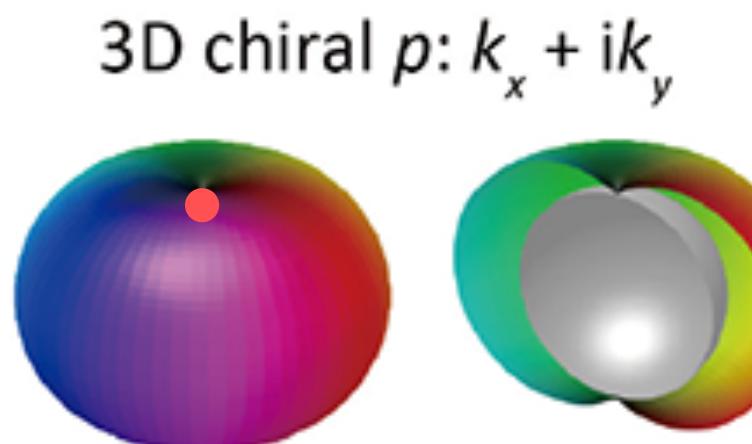
$$\Delta(k) = \Delta_0(k_x^2 - k_y^2)$$

超伝導の「節(ノード)」

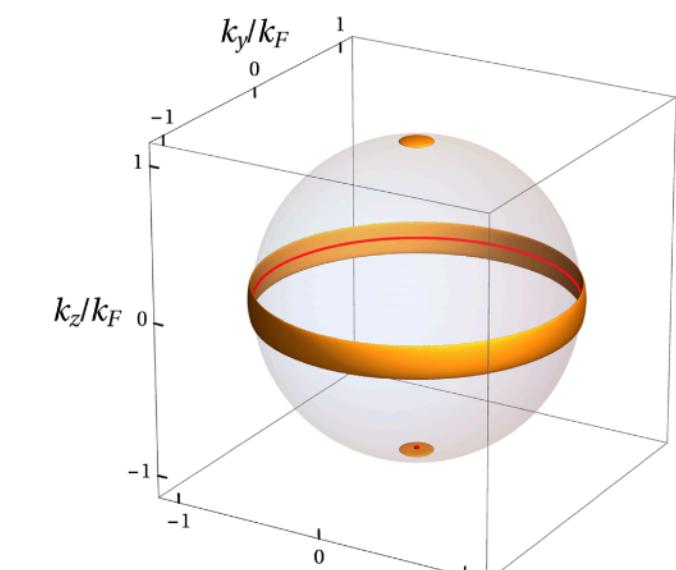
線ノード



点ノード



面ノード



- 様々な種類の異方的超伝導

- s 波、 d 波、 p 波、 f 波、... (cf. s, p, d, f 軌道) \leftrightarrow ノード構造

- 超伝導の種類(直接見えない)とノードの対応関係を知っておくと役に立つ

- 異方的超伝導のメカニズム解明・未知のタイプの超伝導の発見

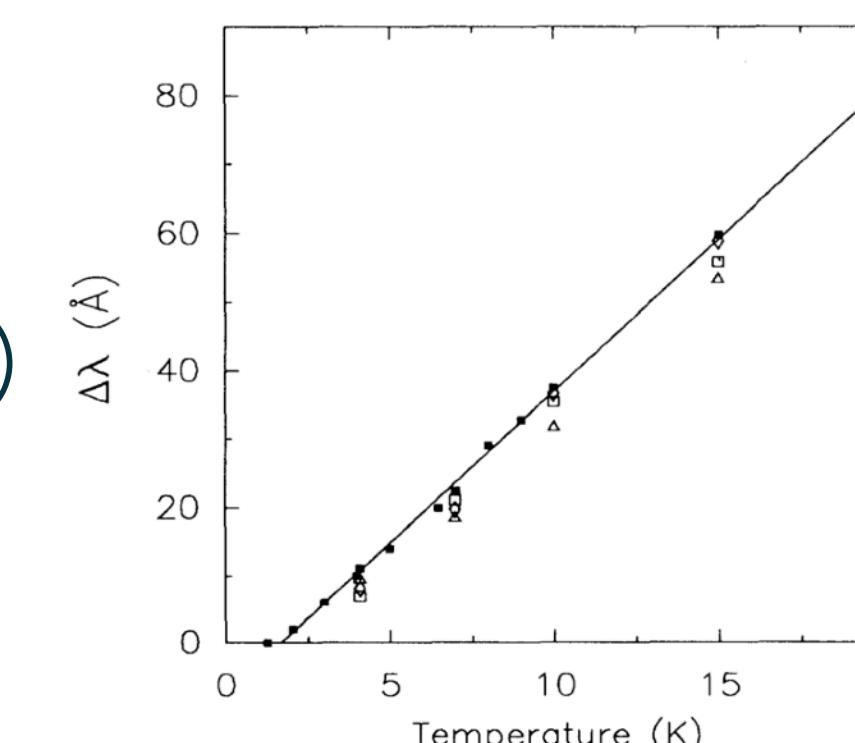
- 大事なこと：ノードは実験で見える！

- 銅酸化物高温超伝導体の例

[磁場侵入長]

T に対し線形 \rightarrow 線ノード！

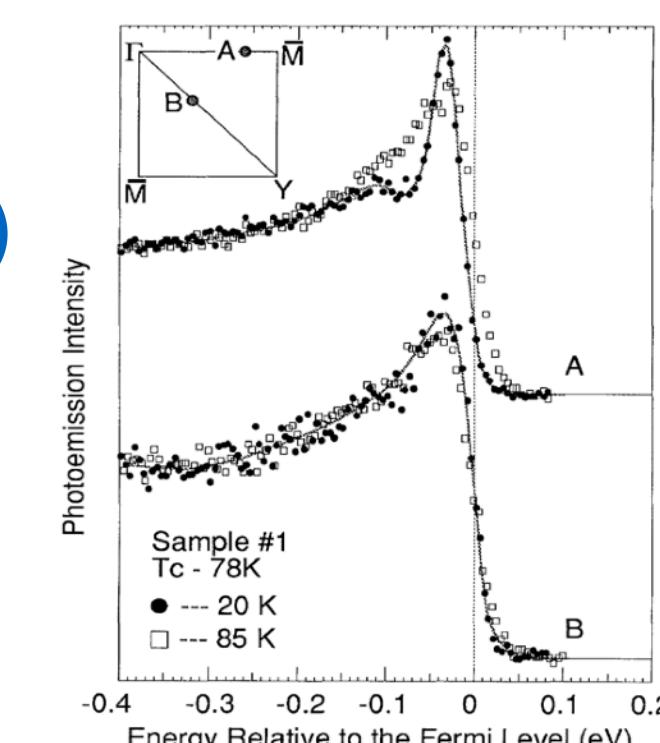
(cf. 指数関数的 \rightarrow フルギャップ)



W. N. Hardy et al. (1993)

[角度分解光電子分光]

$k_x = k_y$ で線ノード($d_{x^2-y^2}$ 波)



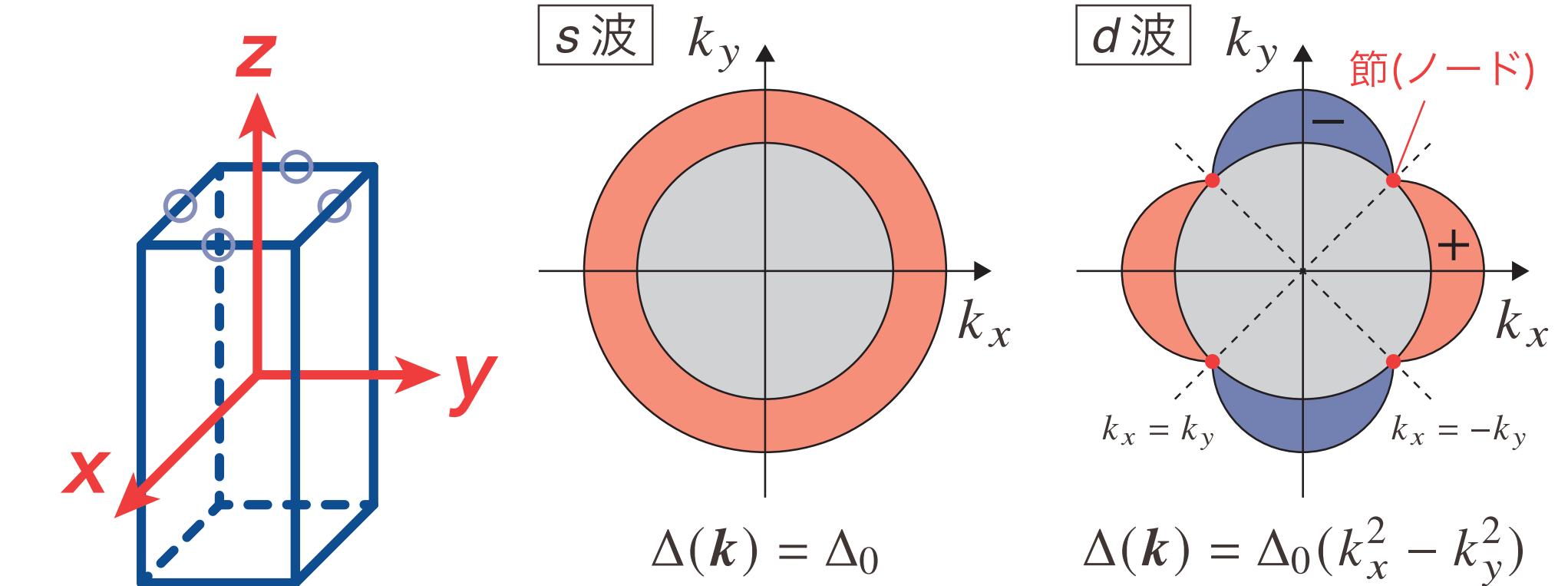
Z.-X. Shen et al. (1993)

超伝導を分類したい：群の表現論を使おう！

点群の既約表現を載せたサイト：http://gernot-katzers-spice-pages.com/character_tables/

- 表現：対称操作がどのように作用するか
- 例) 結晶点群 D_{4h} (底面が正方形の直方体)
 - z 軸まわりの $90^\circ, 180^\circ$ 回転 (C_4, C_2)
 - x, y 軸まわりの 180° 回転 (C_2')
 - [110] 軸まわりの 180° 回転 (C_2'')
 - 空間反転操作 (i)
 - **既約表現** = これ以上分解できない表現
 - ラベル : A_{1g}, A_{2g}, \dots (Mulliken記号)
 $\Gamma_1^+, \Gamma_2^+, \dots$ というラベルのこともある (Bethe記号)

D_{4h} $h=16$	E	$2C_4$	C_2	$2C'_2$	$2C''_2$	i	$2S_4$	σ_h	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$
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



超伝導を分類したい：群の表現論を使おう！

- 結晶の「形」で超伝導秩序変数を分類：物質の詳細によらない
- 結晶点群による分類 G. E. Volovik & L. P. Gor'kov (1984, 1985)
P. W. Anderson (1984)
 - レビュー：Sigrist-Ueda (1991)
- 例) 結晶点群 D_{4h}
 - 既約表現と超伝導の関係をリスト化
 - gerade/ungerade: 空間反転で偶/奇 (+/-)
 - 一般に、**空間反転奇の超伝導体は線ノードを持たない** (Blountの定理, 1985)

点群の範囲では

	Irreducible representation Γ	Basis function
線ノード @ $k_x \pm k_y = 0$	Γ_1^+ $\Gamma_3^+ (B_{1g})$ Γ_5^+	(a) $\psi(\Gamma_1^+; \mathbf{k}) = 1, k_x^2 + k_y^2, k_z^2$ $\psi(\Gamma_3^+; \mathbf{k}) = k_x^2 - k_y^2$ $\psi(\Gamma_5^+, 1; \mathbf{k}) = k_x k_z$ $\psi(\Gamma_5^+, 2; \mathbf{k}) = k_y k_z$
	$\Gamma_1^- (A_{1u})$	$\mathbf{d}(\Gamma_1^-; \mathbf{k}) = \hat{\mathbf{x}}k_x + \hat{\mathbf{y}}k_y, \hat{\mathbf{z}}k_z$
	Γ_2^- Γ_3^- Γ_4^- Γ_5^-	$\mathbf{d}(\Gamma_2^-; \mathbf{k}) = \hat{\mathbf{x}}k_y - \hat{\mathbf{y}}k_x$ $\mathbf{d}(\Gamma_3^-; \mathbf{k}) = \hat{\mathbf{x}}k_x - \hat{\mathbf{y}}k_y$ $\mathbf{d}(\Gamma_4^-; \mathbf{k}) = \hat{\mathbf{x}}k_y + \hat{\mathbf{y}}k_x$ $\mathbf{d}(\Gamma_5^-, 1; \mathbf{k}) = \hat{\mathbf{x}}k_z, \hat{\mathbf{z}}k_x$ $\mathbf{d}(\Gamma_5^-, 2; \mathbf{k}) = \hat{\mathbf{y}}k_z, \hat{\mathbf{z}}k_y$

結晶点群の分類では不十分なこと

- “Normanのゼロ点”(1995) : Blountの定理の例外を指摘
 - 奇parity超伝導体 UPt_3 で線ノードが発現しうる
 - らせん対称性(非共型対称性)が重要
→ 空間群(並進の情報を含む)を考える必要がある
- 空間群の表現論を用いて、結晶点群では不十分なことが実際に示された
 - Mackey (1953), Bradley & Davis (1970): 数学の定理(直積の誘導表現)
 - Yarzhemsky & Murav'ev (1992): 超伝導ノードへ適用できる
 - Micklitz & Norman (2009): 非共型対称性に起因する非自明な例を示した！

私の成果：空間群に基づく超伝導ノードの網羅的分類

- 空間群の表現論による超伝導ノード分類

- 入力：あらゆる空間群(結晶の形)と超伝導の種類

- 出力：超伝導ノード構造

- 実際の分類表

UPt₃

- UPt₃: $k_z = \pi$ にノード

(Micklitz-Normanの再現)

他にも様々な例が見つかる

No.	Short	\perp	Type	$k_{\perp} = 0$	$k_{\perp} = \pi$
(a) Monoclinic					
10	$P2/m$	y	(RM)	$A_g + 2A_u + B_u$	$A_g + 2A_u + B_u$
11	$P2_1/m$	y	(SM)	$A_g + 2A_u + B_u$	$A_g + 3B_u$
13	$P2/c$	y	(RG)	$A_g + 2A_u + B_u$	$A_g + 2A_u + B_u$
14	$P2_1/c$	y	(SG)	$A_g + 2A_u + B_u$	$A_g + 3B_u$
(b) Orthorhombic					
47	$Pmmm$	x	(RM)	$A_g + B_{3g} + 2A_u + B_{1u} + 2B_{2u} + 2B_{3u}$	$A_g + B_{3g} + 2A_u + B_{1u} + 2B_{2u} + 2B_{3u}$
		y	(RM)	$A_g + B_{3g} + 2A_u + B_{1u} + 2B_{2u} + B_{3u}$	$A_g + B_{3g} + 2A_u + B_{1u} + 2B_{2u} + B_{3u}$
		z	(RM)	$A_g + B_{1g} + 2A_u + 2B_{1u} + 2B_{2u} + B_{3u}$	$A_g + B_{1g} + 2A_u + 2B_{1u} + 2B_{2u} + B_{3u}$
(c) Tetragonal					
83	$P4/m$	z	(RM)	$A_g + B_g + 2A_u + 2B_u + E_u$	$A_g + B_g + 2A_u + 2B_u + E_u$
84	$P4_2/m$	z	(RM)	$A_g + B_g + 2A_u + 2B_u + E_u$	$A_g + B_g + 2A_u + 2B_u + E_u$
	$P4/n$	z	(RG)	$A_g + B_g + 2A_u + 2B_u + E_u$	$A_g + B_g + 2A_u + 2B_u + E_u$
	$P4_2/n$	z	(RG)	$A_g + B_g + 2A_u + 2B_u + E_u$	$A_{1g} + A_{2g} + B_{1g} + B_{2g} + 2A_{1u} + 2A_{3u} + 2B_{1u} + 2B_{2u} + 2E_u$
	$P4/mmm$	z	(RM)	$A_{1g} + A_{2g} + B_{1g} + B_{2g} + 2A_{1u} + 2A_{3u} + 2B_{1u} + 2B_{2u} + 2E_u$	$A_{1g} + B_{1g} + E_g + 2A_{1u} + A_{2u} + 2B_{1u} + 2B_{2u} + 3E_u$
	$P4/mcc$	z	(RM)	$A_{1g} + A_{2g} + B_{1g} + B_{2g} + 2A_{1u} + 2A_{3u} + 2B_{1u} + 2B_{2u} + 2E_u$	$A_{1g} + B_{1g} + E_g + 2A_{1u} + A_{2u} + 2B_{1u} + B_{2u} + 3E_u$
	$P4_2/mcc$	z	(RG)	$A_{1g} + B_{1g} + E_g + 2A_{1u} + A_{2u} + 2B_{1u} + B_{2u} + 3E_u$	$A_{1g} + B_{1g} + E_g + 2A_{1u} + A_{2u} + 2B_{1u} + B_{2u} + 3E_u$
中央面($k_i = 0$)					
境界面($k_i = \pi$)					
194	$P6_3/mmc$	z	(SM)	$A_{1g} + A_{2g} + 2E_{2g} + 2A_{1u} + 2A_{2u} + B_{1u} + B_{2u} + 2E_{1u} + 4E_{2u}$	$A_{1g} + A_{2g} + 2E_{2g} + 3B_{1u} + 3B_{2u} + 6E_{1u}$
		v	(RG)	$A_{1g} + B_{2g} + E_{1g} + E_{2g} + 2A_{1u} + A_{2u} + B_{1u} + 2B_{2u} + 3E_{1u} + 3E_{2u}$	$A_{1g} + B_{2g} + E_{1g} + E_{2g} + 2A_{1u} + A_{2u} + B_{1u} + 2B_{2u} + 3E_{1u} + 3E_{2u}$
53	$Pmna$	z	(RG)	$A_g + B_{1g} + 2A_u + B_{1u} + 2B_{2u} + B_{3u}$	$A_g + B_{1g} + 2A_u + B_{1u} + 2B_{2u} + B_{3u}$
		x	(RM)	$A_g + B_{3g} + 2A_u + B_{1u} + B_{2u} + B_{3u}$	$A_g + B_{3g} + 2A_u + B_{1u} + B_{2u} + B_{3u}$
		y	(RG)	$A_g + B_{2g} + 2A_u + B_{1u} + 2B_{2u} + B_{3u}$	$A_g + B_{2g} + 2A_u + B_{1u} + 2B_{2u} + B_{3u}$
		z	(SG)	$A_g + B_{1g} + 2A_u + B_{1u} + 2B_{2u} + B_{3u}$	$A_g + B_{1g} + 2A_u + B_{1u} + 2B_{2u} + B_{3u}$
54	$Pcca$	x	(SG)	$A_g + B_{3g} + 2A_u + B_{1u} + B_{2u} + 2B_{3u}$	$A_g + B_{3g} + 2A_u + B_{1u} + B_{2u} + 2B_{3u}$
		y	(RG)	$A_g + B_{2g} + 2A_u + B_{1u} + B_{2u} + B_{3u}$	$A_g + B_{2g} + 2A_u + B_{1u} + B_{2u} + B_{3u}$
		z	(RG)	$A_g + B_{1g} + 2A_u + B_{1u} + 2B_{2u} + B_{3u}$	$A_g + B_{1g} + 2A_u + B_{1u} + 2B_{2u} + B_{3u}$
55	$Pbam$	x	(SG)	$A_g + B_{3g} + 2A_u + B_{1u} + B_{2u} + 2B_{3u}$	$A_g + B_{3g} + 2A_u + B_{1u} + B_{2u} + 2B_{3u}$
		y	(SG)	$A_g + B_{2g} + 2A_u + B_{1u} + 2B_{2u} + B_{3u}$	$A_g + B_{2g} + 2A_u + B_{1u} + 2B_{2u} + B_{3u}$
		z	(RM)	$A_g + B_{1g} + 2A_u + B_{1u} + 2B_{2u} + B_{3u}$	$A_g + B_{1g} + 2A_u + B_{1u} + 2B_{2u} + B_{3u}$
56	$Pccn$	x	(SG)	$A_g + B_{3g} + 2A_u + B_{1u} + B_{2u} + 2B_{3u}$	$A_g + B_{3g} + 2A_u + B_{1u} + B_{2u} + 2B_{3u}$
		y	(SG)	$A_g + B_{2g} + 2A_u + B_{1u} + B_{2u} + B_{3u}$	$A_g + B_{2g} + 2A_u + B_{1u} + B_{2u} + B_{3u}$
		z	(RG)	$A_g + B_{1g} + 2A_u + B_{1u} + 2B_{2u} + B_{3u}$	$A_g + B_{1g} + 2A_u + B_{1u} + 2B_{2u} + B_{3u}$
57	$Pbcm$	x	(RG)	$A_g + B_{3g} + 2A_u + B_{1u} + B_{2u} + 2B_{3u}$	$A_g + B_{3g} + 2A_u + B_{1u} + B_{2u} + 2B_{3u}$
		y	(SG)	$A_g + B_{2g} + 2A_u + B_{1u} + B_{2u} + B_{3u}$	$A_g + B_{2g} + 2A_u + B_{1u} + B_{2u} + B_{3u}$
		z	(SM)	$A_g + B_{1g} + 2A_u + B_{1u} + 2B_{2u} + B_{3u}$	$A_g + B_{1g} + 2A_u + B_{1u} + 2B_{2u} + B_{3u}$
58	$Pnnm$	x	(SG)	$A_g + B_{3g} + 2A_u + B_{1u} + B_{2u} + 2B_{3u}$	$A_g + B_{3g} + 2A_u + B_{1u} + B_{2u} + 2B_{3u}$
		y	(SG)	$A_g + B_{2g} + 2A_u + B_{1u} + B_{2u} + B_{3u}$	$A_g + B_{2g} + 2A_u + B_{1u} + B_{2u} + B_{3u}$
		z	(RM)	$A_g + B_{1g} + 2A_u + B_{1u} + 2B_{2u} + B_{3u}$	$A_g + B_{1g} + 2A_u + B_{1u} + 2B_{2u} + B_{3u}$
59	$Pmmn$	x	(SM)	$A_g + B_{3g} + 2A_u + B_{1u} + B_{2u} + 2B_{3u}$	$A_g + B_{3g} + 2A_u + B_{1u} + B_{2u} + 2B_{3u}$
		y	(SM)	$A_g + B_{2g} + 2A_u + B_{1u} + B_{2u} + B_{3u}$	$A_g + B_{2g} + 2A_u + B_{1u} + B_{2u} + B_{3u}$
		z	(RM)	$A_g + B_{1g} + 2A_u + B_{1u} + 2B_{2u} + B_{3u}$	$A_g + B_{1g} + 2A_u + B_{1u} + 2B_{2u} + B_{3u}$
60	$Pbcn$	x	(SG)	$A_g + B_{3g} + 2A_u + B_{1u} + B_{2u} + 2B_{3u}$	$A_g + B_{3g} + 2A_u + B_{1u} + B_{2u} + 2B_{3u}$
		y	(RG)	$A_g + B_{2g} + 2A_u + B_{1u} + B_{2u} + B_{3u}$	$A_g + B_{2g} + 2A_u + B_{1u} + B_{2u} + B_{3u}$
		z	(SG)	$A_g + B_{1g} + 2A_u + B_{1u} + 2B_{2u} + B_{3u}$	$A_g + B_{1g} + 2A_u + B_{1u} + 2B_{2u} + B_{3u}$
61	$Pbca$	x	(SG)	$A_g + B_{3g} + 2A_u + B_{1u} + B_{2u} + 2B_{3u}$	$A_g + B_{3g} + 2A_u + B_{1u} + B_{2u} + 2B_{3u}$
		y	(SG)	$A_g + B_{2g} + 2A_u + B_{1u} + B_{2u} + B_{3u}$	$A_g + B_{2g} + 2A_u + B_{1u} + B_{2u} + B_{3u}$
		z	(SG)	$A_g + B_{1g} + 2A_u + B_{1u} + 2B_{2u} + B_{3u}$	$A_g + B_{1g} + 2A_u + B_{1u} + 2B_{2u} + B_{3u}$
62	$Pnma$	x	(SG)	$A_g + B_{3g} + 2A_u + B_{1u} + B_{2u} + 2B_{3u}$	$A_g + B_{3g} + 2A_u + B_{1u} + B_{2u} + 2B_{3u}$
		y	(SM)	$A_g + B_{2g} + 2A_u + B_{1u} + B_{2u} + B_{3u}$	$A_g + B_{2g} + 2A_u + B_{1u} + B_{2u} + B_{3u}$
		z	(SG)	$A_g + B_{1g} + 2A_u + B_{1u} + 2B_{2u} + B_{3u}$	$A_g + B_{1g} + 2A_u + B_{1u} + 2B_{2u} + B_{3u}$
63	$Cmcm$	x	(SM)	$A_g + B_{3g} + 2A_u + B_{1u} + B_{2u} + 2B_{3u}$	$A_g + B_{3g} + 2A_u + B_{1u} + B_{2u} + 2B_{3u}$
64	$Cmca$	x	(SG)	$A_g + B_{2g} + 2A_u + B_{1u} + B_{2u} + 2B_{3u}$	$A_g + B_{2g} + 2A_u + B_{1u} + B_{2u} + 2B_{3u}$
65	$Cmmm$	x	(RM)	$A_g + B_{1g} + 2A_u + B_{1u} + B_{2u} + B_{3u}$	$A_g + B_{1g} + 2A_u + B_{1u} + B_{2u} + B_{3u}$
66	$Cccm$	x	(RM)	$A_g + B_{1g} + 2A_u + B_{1u} + B_{2u} + B_{3u}$	$A_g + B_{1g} + 2A_u + B_{1u} + B_{2u} + B_{3u}$
67	$Cmma$	x	(RG)	$A_g + B_{1g} + 2A_u + B_{1u} + B_{2u} + B_{3u}$	$A_g + B_{1g} + 2A_u + B_{1u} + B_{2u} + B_{3u}$
68	$Ccca$	x	(RG)	$A_g + B_{1g} + 2A_u + B_{1u} + B_{2u} + B_{3u}$	$A_g + B_{1g} + 2A_u + B_{1u} + B_{2u} + B_{3u}$

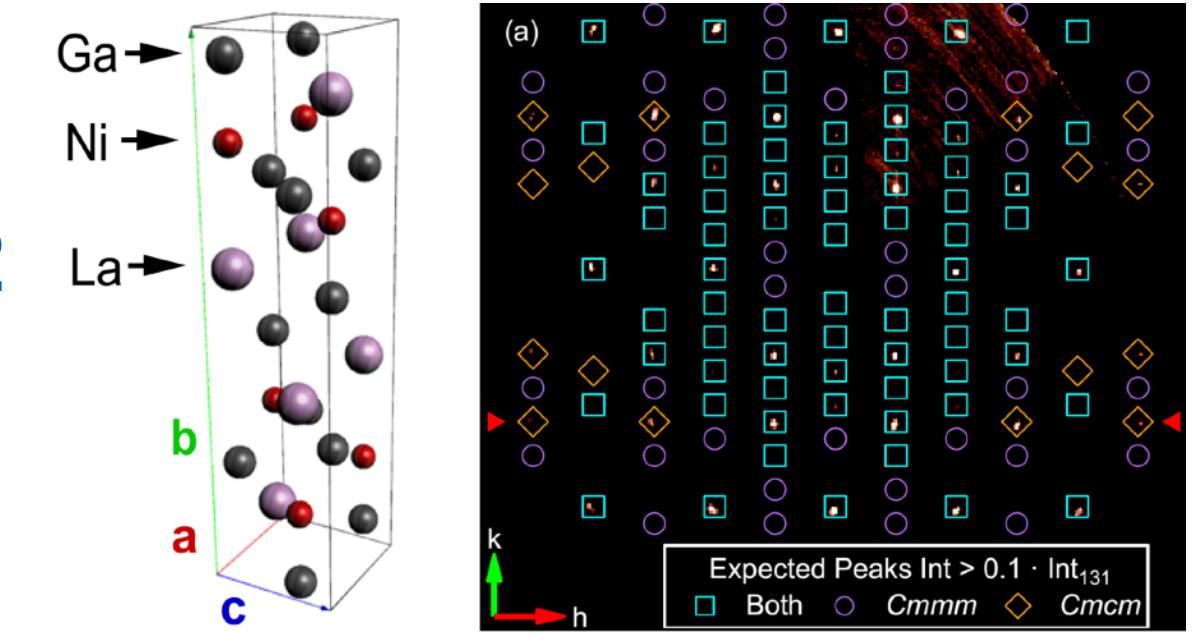
実験との協力

- UC Davisの実験グループとの共同研究：超伝導体 **LaNiGa₂**
- 「空間群Cmmmと思われていたが、Cmcmだった」
- Cmcmは非共型対称性を含む空間群**

→ 超伝導ギャップはどうなる？

- 実際に分類してみる
- 非共型に起因する変わった構造がある！**

J. R. Badger, Y. Quan, M. C. Staab, SS et al.,
Commun. Phys. 5, 22 (2022)



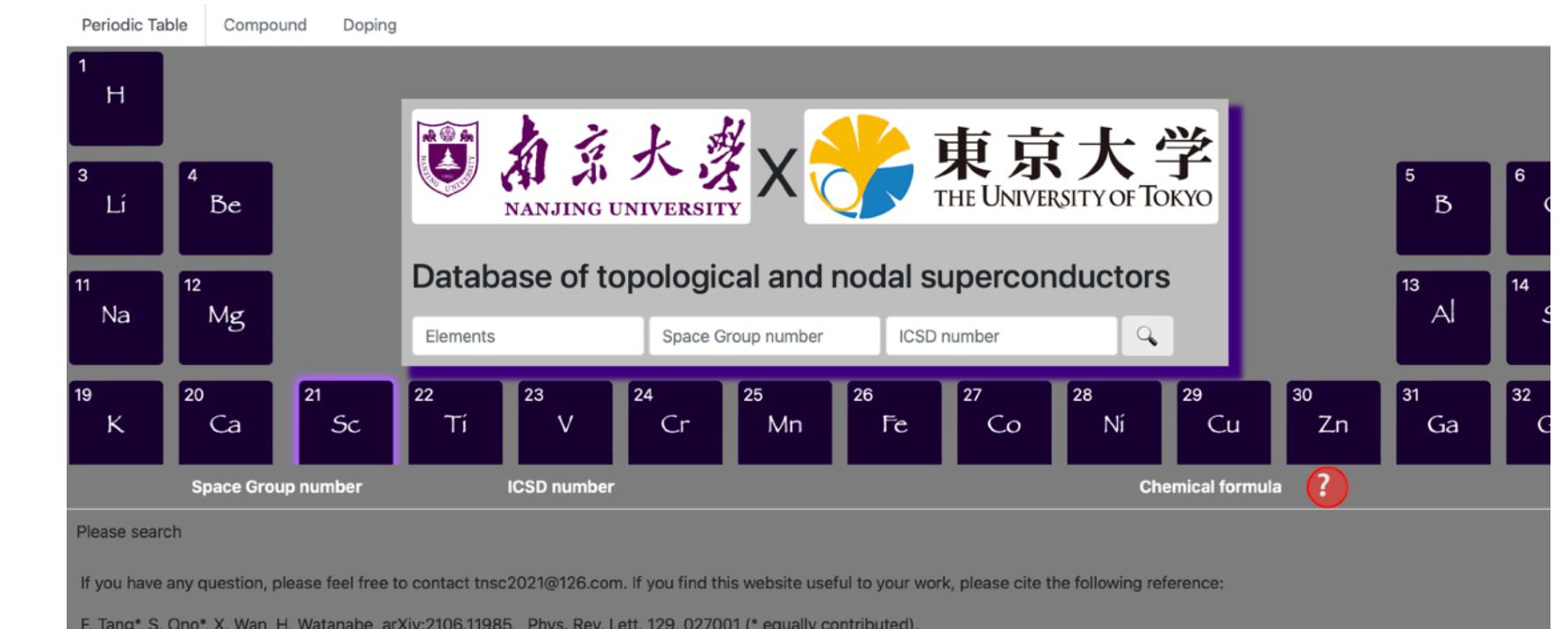
state	d/Δ_0 inside BZ	Δ/Δ_0 inside BZ	unitary? inside BZ	nodes					
				inside BZ		$(k_x, k_y, \pi/c)$		$(0, k_y, \pi/c)$	
				s.	a.s.	s.	a.s.	s.	a.s.
$^1A_{1g}$	singlet	$1(\uparrow\downarrow\rangle - \downarrow\uparrow\rangle)$	singlet	fully gapped		gap	gap	gap	gap
$^1B_{1g}$	singlet	$ XY (\uparrow\uparrow\rangle - \downarrow\downarrow\rangle)$	singlet	lines at $k_x, k_y = 0$	gap	gap	node	node	node
$^1B_{2g}$	singlet	$ XZ (\uparrow\uparrow\rangle - \downarrow\downarrow\rangle)$	singlet	lines at $k_x, k_z = 0$	gap	node	node	node	gap
$^1B_{3g}$	singlet	$ YZ (\uparrow\uparrow\rangle - \downarrow\downarrow\rangle)$	singlet	lines at $k_y, k_z = 0$	gap	node	gap	node	gap
$^3A_{1u}$	$(0, 0, 1)XYZ$	$1 XYZ (\uparrow\downarrow\rangle + \downarrow\uparrow\rangle)$	unitary	lines at $k_x, k_y, k_z = 0$	node	gap	node	node	gap
$^3A_{1ub}$	$(1, i, 0)XYZ$	$2 XYZ \uparrow\uparrow\rangle$ $0 \downarrow\downarrow\rangle$	non-unitary	lines at $k_x, k_y, k_z = 0$ surface	N/A		N/A	N/A	
$^3B_{1ua}$	$(0, 0, 1)Z$	$1 Z (\uparrow\downarrow\rangle + \downarrow\uparrow\rangle)$	unitary	line at $k_z = 0$	node	gap	node	gap	node
$^3B_{1ub}$	$(1, i, 0)Z$	$2 Z \uparrow\uparrow\rangle$ $0 \downarrow\downarrow\rangle$	non-unitary	line at $k_z = 0$ surface	N/A		N/A	N/A	
$^3B_{2ua}$	$(0, 0, 1)Y$	$1 Y (\uparrow\downarrow\rangle + \downarrow\uparrow\rangle)$	unitary	line at $k_y = 0$	gap	gap	gap	gap	node
$^3B_{2ub}$	$(1, i, 0)Y$	$2 Y \uparrow\uparrow\rangle$ $0 \downarrow\downarrow\rangle$	non-unitary	line at $k_y = 0$ surface	N/A		N/A	N/A	
$^3B_{3ua}$	$(0, 0, 1)X$	$1 X (\uparrow\downarrow\rangle + \downarrow\uparrow\rangle)$	unitary	line at $k_x = 0$	gap	gap	node	node	gap
$^3B_{3ub}$	$(1, i, 0)X$	$2 X \uparrow\uparrow\rangle$ $0 \downarrow\downarrow\rangle$	non-unitary	line at $k_x = 0$ surface	N/A		N/A	N/A	

state	d/Δ_0 inside BZ	Δ/Δ_0 inside BZ	unitary? inside BZ	nodes			
				inside BZ			
				$(k_x, k_y, \pi/c)$	$(0, k_y, \pi/c)$	$(k_x, 0, \pi/c)$	
A_{1g}	singlet	$1(\uparrow\downarrow\rangle - \downarrow\uparrow\rangle)$	singlet	fully gapped	gap	gap	gap
B_{1g}	singlet	$ XY (\uparrow\uparrow\rangle - \downarrow\downarrow\rangle)$	singlet	lines at $k_x, k_y = 0$	gap	gap	node
B_{2g}	singlet	$ XZ (\uparrow\uparrow\rangle - \downarrow\downarrow\rangle)$	singlet	lines at $k_x, k_z = 0$	node	gap	node
B_{3g}	singlet	$ YZ (\uparrow\uparrow\rangle - \downarrow\downarrow\rangle)$	singlet	lines at $k_y, k_z = 0$	node	gap	node
A_{1u}	(AX, BY, CZ)	$\sqrt{A^2 X^2 - B^2 Y^2} \uparrow\uparrow\rangle$ $+ CZ (\uparrow\downarrow\rangle + \downarrow\uparrow\rangle)$ $+\sqrt{A^2 X^2 - B^2 Y^2} \downarrow\downarrow\rangle$	unitary	none	node	gap	node
B_{1u}	$(AY, BX, CXYZ)$	$\sqrt{A^2 Y^2 - B^2 X^2} \uparrow\uparrow\rangle$ $+ CYZ (\uparrow\downarrow\rangle + \downarrow\uparrow\rangle)$ $+\sqrt{A^2 Y^2 - B^2 X^2} \downarrow\downarrow\rangle$	unitary	point on k_z axis	node	gap	node
B_{2u}	$(AZ, BXCY, CX)$	$\sqrt{A^2 Z^2 - B^2 X^2 Y^2} \uparrow\uparrow\rangle$ $+ CX (\uparrow\downarrow\rangle + \downarrow\uparrow\rangle)$ $+\sqrt{A^2 Z^2 - B^2 X^2 Y^2} \downarrow\downarrow\rangle$	unitary	point on k_y axis	gap	gap	gap
B_{3u}	$(AXYZ, BZ, CY)$	$\sqrt{A^2 X^2 Y^2 Z^2 - B^2 Z^2} \uparrow\uparrow\rangle$ $+ CY (\uparrow\downarrow\rangle + \downarrow\uparrow\rangle)$ $+\sqrt{A^2 X^2 Y^2 Z^2 - B^2 Z^2} \downarrow\downarrow\rangle$	unitary	point on k_x axis	gap	gap	gap

最近の進展：自動化プログラムによる分類

S. Ono & K. Shiozaki, Phys. Rev. X 12, 011021 (2022)

- トポロジカルK理論を用いた超伝導ノードの網羅的な分類
- 磁気空間群(1651) × 秩序変数の対称性(~10)に対する
分類データが掲載されている(7156ページ！)
- 物質データベースの提供 F. Tang, S. Ono et al.,
PRL 129, 027001 (2022)
 - 既知物質の情報 + 第一原理計算をもとに
どのようなノードがあるかを議論
- 数理手法をプログラムに落とし込み、
あらゆる物質の分類が可能に



<https://tnsc.nju.edu.cn/>

まとめ

[今日の目標] 次の標語の意味を(何となく)理解してもらう

結晶の「形」に基づいて超伝導の「形」を分類する

- (物性)物理学へ数理的な手法を持ち込むことは、時に役に立つ
 - 対称性・群論・トポロジーによる抽象化
→ 物質の詳細によらない、**普遍的な現象**を予言できる
- 物性物理の魅力：様々な切り口のテーマを設定でき、応用にも繋がる
 - (最近の角田) 現実の物質を見ることが重要 → 模型の構築・数値計算

(かなり偏った)参考文献

● 一般向け

- 長谷川「トポロジカル物質とは何か」

● 学部生

- J. J. サクライ (& ナボリターノ) 「現代の量子力学(上・下)」
- 田崎「統計力学I, II」

● 学部4年、大学院生～

- 小野寺「物性物理/物性化学のための群論入門」
- 犬井・田辺・小野寺「応用群論」
- 超伝導：教科書多数(選べなかった)

● 今回の研究内容

- 角田、小林「固体物理」55, 463 (2020) など
(ウェブサイトもご覧ください：<https://shuntarosumita.github.io/>)

