

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

概要

本稿は、超伝導体中のギャップ・ノード構造を、対称性と群の表現論を用いて分類する手法について示したものである。特に、超伝導や群論についての基本的なところから出発して、例なども入れながらこの分類理論をできる限り平易に解説することを目指した。

目次

1	超伝導と超伝導ギャップ	3
1.1	歴史的背景 — なぜ超伝導ギャップを見たいのか? —	3
1.2	超伝導の平均場ハミルトニアン	4
1.3	本稿で取り扱う超伝導体	6
1.3.1	時空反転対称性の存在	6
1.3.2	結晶	7
1.3.3	弱結合極限	9
1.3.4	スピン軌道相互作用の存在	10
2	対称性と群の表現論	10
2.1	群についての基礎事項	10
2.2	結晶の対称性：空間群・点群	13
2.2.1	並進群	13
2.2.2	空間群と点群	13
2.2.3	空間群の座標系	15
2.2.4	共型/非共型空間群	15
2.2.5	磁気空間群・磁気点群	16
2.3	表現論の導入	16
2.3.1	波数空間への作用	17
2.3.2	PUA 表現	17

2.4	ハミルトニアンの対称性とエネルギーバンド・Bloch 状態	22
2.4.1	ハミルトニアンの対称性	22
2.4.2	小群とエネルギーバンド	24
2.4.3	Bloch 状態	26
2.5	小複表現の取り扱い	26
2.5.1	磁気小点群とその表現	26
2.5.2	Wigner の判定条件	29
3	超伝導ギャップ・ノード構造の分類手法	30
3.1	戦略	30
3.2	表現論に基づく超伝導ギャップ・ノードの分類	31
4	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	35
4.1	鏡映面上の分類：非共型性による非自明ギャップ構造	35
4.1.1	例：磁気空間群 $M = P6_3/mmc1'$ (#194.264)	35
4.1.2	一般化	37
4.2	回転軸上の分類：角運動量による非自明ギャップ構造	38
4.3	空間反転対称性が破れた場合	38
5	トポロジカルな分類理論との対応	40
A	Mackey の分解定理の証明	42
B	Mackey-Bradley の定理の計算	43

1 超伝導と超伝導ギャップ

1.1 歴史的背景 — なぜ超伝導ギャップを見たいのか？ —

超伝導は 1911 年に Kamerlingh Onnes ¹⁾ が発見した現象であり、金属の電気抵抗が低温で零になることや、マイスナー効果などの性質で知られている。超伝導の理論的解明に関する歴史的に重要な研究はいくつかあるが、その中の 1 つが 1957 年に登場した Bardeen–Cooper–Schrieffer による **BCS 理論** [1] である。BCS 理論はある種の平均場理論として知られており、「フェルミ面上の 2 電子が **Cooper 対** と呼ばれる束縛状態を形成し、量子凝縮を引き起こす」ことが超伝導が発現するための本質である、と捉えている。この Cooper 対の凝縮という考え方は、今日まで発見されてきたあらゆる超伝導体に対して正しいと考えられており、その意味で「広い意味での BCS 理論」は現在でも超伝導の標準的な理論として用いられている。他方、オリジナルの BCS 理論はそれ以外にも次のような基本的な仮定を置いている。²⁾

[BCS 理論の仮定その 1] Cooper 対の重心運動量は 0 である。

[BCS 理論の仮定その 2] Cooper 対の全スピンは 0 である。

[BCS 理論の仮定その 3] Cooper 対の対称性は等方的 (*s* 波) である。

これらの仮定をすべて満たすものを「狭い意味での BCS 理論」ということにする。

超伝導では、上で述べた「フェルミ面上の Cooper 対の凝縮」によって**超伝導ギャップ**と呼ばれるエネルギーギャップが開くことが知られている (超伝導ギャップについては後で定義するが、とりあえず今はそういうものがあるという程度で良い)。特に「狭い意味での BCS 理論」で記述される、いわゆる従来型と呼ばれる超伝導体においては、Cooper 対が等方的な対称性をもつ (仮定その 3) ので、フェルミ面の全域にわたって一定の超伝導ギャップが開く超伝導状態が実現する (フルギャップ超伝導)。

ところが 1980 年代以降、この「狭い意味での BCS 理論」の枠組みを超えるような超伝導体が多く見つめられるようになった。特に、BCS 理論の仮定その 2 またはその 3 を破るような超伝導体を**異方的超伝導体 (anisotropic superconductor)** と呼び、本稿ではこのような超伝導体に注目していく。³⁾ 異方的超伝導では一般に上述のフルギャップ超伝導とは異なり、フェルミ面上で超伝導ギャップが開かないような領域 (**ノード**) が現れる場合があることが知られている。例えば銅酸化物高温超伝導体は、ノードを有する代表的な物質群である。この物質は、発見当初は *s* 波の等方的な Cooper 対対称性をもつと考えられていたが、1990 年代頃からフルギャップの励起構造では説明

1) Heike Kamerlingh Onnes (1853–1926)。余談だが、ファーストネームが Heike でファミリーネームはまとめて Kamerlingh Onnes である。

2) BCS 理論に関するこのような記述の仕方は、文献 [2] を参考にしていく。

3) BCS 理論の仮定その 1 を破るような場合は Fulde–Ferrell–Larkin–Ovchinnikov (FFLO) 超伝導という。FFLO 超伝導を異方的超伝導に含める流儀もあるが、本稿では区別して考える。また、異方的超伝導体の中でも特に仮定その 2 を破るものを**スピン三重項超伝導体 (spin-triplet superconductor)** と呼ぶ。

できない実験結果が現れ始めた [3, 4]. 例えば, $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ における Hardy らの低温の磁場侵入長の測定は温度に対して線形のふるまいを示しており [5], これはフルギャップの超伝導体に見られる指数関数的なふるまいとは明らかに異なる. さらに, 角度分解光電子分光の実験によって, 線ノードをもつ超伝導ギャップ構造が直接観測されたことなどから, 実際には d 波の秩序変数をもつということが明らかになった [6–10].

上の例からも分かるように, 超伝導ギャップは異方的超伝導体の Cooper 対対称性や超伝導発現機構と密接に関連しており, かつ様々な実験によってアクセスできる重要な量である. したがって, このような量に対しての理論的なアプローチの方法を考えるのは大事な問題である. 実際, 超伝導体のもつ対称性に基づいて超伝導ギャップ構造を予言する方法が先行研究によって構築されてきており, 近年ではトポロジーの知識も組み合わせるより強固な分類理論が整備されつつある [11–41] (筆者もこのような分類理論に関わってきた一人である). 中でも特に, 対称性のなす群の表現論に基づく超伝導ギャップの分類理論 [18–24, 26–28, 30, 35, 36] について解説するのが本稿の目的である. この理論はかなり代数的な側面が強い手法であるが, 後に発展したトポロジカルな分類理論 [31–34, 40–42] とともに良い“対応関係”があることが分かってきているので, それについても紹介する.

以下, 本稿の構成について簡単に紹介する. 1.2 節では超伝導のハミルトニアンに関して簡単な導入を行い, 1.3 節では本稿で取り扱う超伝導体の条件について説明する. 2 節では (結晶の) 対称性と群の表現論に関する基本的な概念を説明する. 特に, 表現論によってハミルトニアン固有状態 (Bloch 状態) の情報をうまく表せるという点は重要である. 3 節では, これらの道具を用いて超伝導ギャップ・ノードの構造をどのように分類するかについて解説する. この手法の構成を理解するのが本稿の目的である. 4 節では, 構成した超伝導ギャップ・ノード構造の分類理論によって実際に導かれる非自明な結果の例を紹介する. 5 節では, 超伝導ギャップ・ノード構造の分類学について, 本稿で紹介する手法とトポロジカルな立場の分類理論との関連性について言及する.

1.2 超伝導の平均場ハミルトニアン

本稿で取り扱う超伝導体は, 広い意味での BCS 平均場理論に BCS 理論の仮定その 1 を課したもので記述されているものとする. このとき, 微視的な平均場ハミルトニアン H_{MF} は一般に

$$\hat{H}_{\text{MF}} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\nu, \nu'=1}^N [H_{\text{N}}(\mathbf{k})]_{\nu\nu'} c_{\nu}(\mathbf{k})^{\dagger} c_{\nu'}(\mathbf{k}) + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\nu, \nu'=1}^N \{[\Delta(\mathbf{k})]_{\nu\nu'} c_{\nu}(\mathbf{k})^{\dagger} c_{\nu'}(-\mathbf{k})^{\dagger} + \text{H.c.}\} \quad (1.1)$$

と書かれる (H.c. はエルミート共役の略). ここで $\mathbf{k} \in \mathbb{R}^d$ は波数や運動量と呼び, d 次元の実ベクトルとして表せる (d は空間次元). また $\nu, \nu' \in \{1, 2, \dots, N\}$ はスピン・軌道・副格子などの内部自由度を表す添字である. $c_{\nu}(\mathbf{k})$ ($c_{\nu}(\mathbf{k})^{\dagger}$) はこれらの波数と内部自由度に対応する電子の消滅 (生成) 演算子であり, 次のような関係式

$$[c_{\nu}(\mathbf{k}), c_{\nu'}(\mathbf{k})^{\dagger}]_{+} = \delta_{\nu, \nu'} \quad (1.2a)$$

$$[c_{\nu}(\mathbf{k}), c_{\nu'}(\mathbf{k})]_{+} = [c_{\nu}(\mathbf{k})^{\dagger}, c_{\nu'}(\mathbf{k})^{\dagger}]_{+} = 0 \quad (1.2b)$$

を満たす。ここで、 $[A, B]_{\pm} := AB \pm BA$ は交換・反交換子を表し、 $\delta_{\nu, \nu'}$ はクロネッカーのデルタを表す。式 (1.1) において、 $H_N(\mathbf{k})$ と $\Delta(\mathbf{k})$ は \mathbf{k} について連続な $N \times N$ 行列であり、それぞれ**正常状態のハミルトニアン**と**超伝導秩序変数**⁴⁾を表す。ただし、これらは任意の \mathbf{k} に対して次の関係式を満たすものとする：

$$H_N(\mathbf{k}) = H_N(\mathbf{k})^{\dagger} \quad (1.3a)$$

$$\Delta(\mathbf{k})^{\top} = -\Delta(-\mathbf{k}) \quad (1.3b)$$

特に後者の関係式 (1.3b) は、電子 (フェルミオン) の反可換性 [式 (1.2)] に起因する。

さて、ここで生成・消滅演算子を並べた $2N$ 次元ベクトル

$$\Psi(\mathbf{k}) := \begin{bmatrix} c_1(\mathbf{k}) & \dots & c_N(\mathbf{k}) & c_1(-\mathbf{k})^{\dagger} & \dots & c_N(-\mathbf{k})^{\dagger} \end{bmatrix}^{\top} \quad (1.4)$$

を考え、関係式 (1.2) を用いると、平均場ハミルトニアン (1.1) は次のように記述できる。

$$\hat{H}_{\text{MF}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \Psi(\mathbf{k})^{\dagger} H_{\text{BdG}}(\mathbf{k}) \Psi(\mathbf{k}) + \text{const} \quad (1.5)$$

ここで、 $2N \times 2N$ 行列 $H_{\text{BdG}}(\mathbf{k})$ は

$$H_{\text{BdG}}(\mathbf{k}) := \begin{bmatrix} H_N(\mathbf{k}) & \Delta(\mathbf{k}) \\ \Delta(\mathbf{k})^{\dagger} & -H_N(-\mathbf{k})^{\top} \end{bmatrix} \quad (1.6)$$

で定義され、**Bogoliubov–de Gennes (BdG) ハミルトニアン**という。正常状態のハミルトニアンや BdG ハミルトニアンはエルミート行列である [式 (1.3a) および $H_{\text{BdG}}(\mathbf{k}) = H_{\text{BdG}}(\mathbf{k})^{\dagger}$] ので対角化可能であり、その固有値 (エネルギー) はすべて実数となる。

定義 1.1 $H_N(\mathbf{k})$ や $H_{\text{BdG}}(\mathbf{k})$ の各固有値 (を \mathbf{k} の連続関数として見たもの) は**エネルギーバンド (energy band)** と呼ばれる。区別のため、前者を電子 (正常状態) のエネルギーバンド、後者を Bogoliubov 準粒子 (超伝導状態) のエネルギーバンドなどと呼ぶ。

定義 1.2 正常状態のエネルギーバンドが零点をもつとき、その集合を**フェルミ面 (Fermi surface)** と呼ぶ。⁵⁾

定義 1.3 Bogoliubov 準粒子のエネルギーバンドが零点をもつとき、その集合を**超伝導ノード (superconducting node)** と呼び、超伝導ノードをもつ超伝導体をノードル超伝導体やギャップレス超伝導体などと呼ぶ。

4) 超伝導であることが明らかな場合は、単に秩序変数と呼ぶこともある。

5) 後の例で示すように、ここでは化学ポテンシャル項は正常状態のハミルトニアンに既に取り入れているものとして考えている。

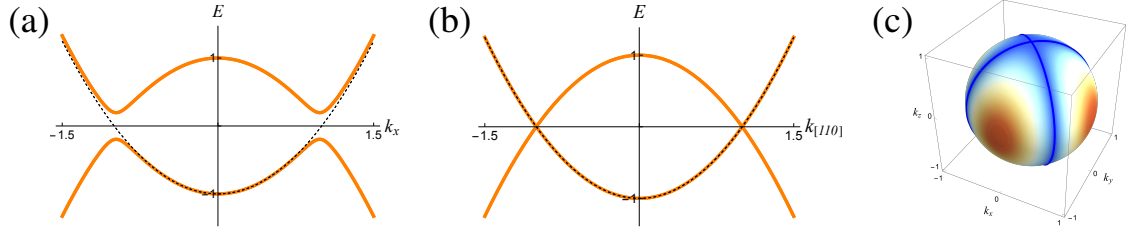


図 1 (a, b) 式 (1.7) で与えられる 3 次元 d 波超伝導体におけるエネルギーバンド ($\mu = 1, \Delta_d = 0.2$). (a) は直線 $k_y = k_z = 0$ 上, (b) は直線 $k_x = k_y (= k_{[110]}/\sqrt{2}), k_z = 0$ 上のエネルギーを示している. オレンジの実線は $H_{BdG}(\mathbf{k})$ の固有値, 黒の破線は $H_N(\mathbf{k})$ の固有値を表す. (c) フェルミ面上における $H_{BdG}(\mathbf{k})$ の正の固有値をカラープロットしたもの (青色が濃いほど 0 に近い値を表す). 黒の実線は零固有値, すなわち超伝導ノードの存在を表している.

超伝導が実現するためには必ずフェルミ面が存在する (金属である) 必要があるので, その存在は常に仮定するものとする. また, 上で定義したノードル超伝導体が本稿の主役である.

例 1.1 (連続模型・3 次元 d 波超伝導体) 簡単な具体例として, スピン縮退をした 3 次元 d 波超伝導体の連続模型を考える. 正常状態のハミルトニアンと超伝導秩序変数は次のように与えられる.

$$H_N(\mathbf{k}) = (\mathbf{k}^2 - \mu)\sigma_0, \quad \Delta(\mathbf{k}) = \Delta_d(k_x^2 - k_y^2)i\sigma_y \quad (1.7)$$

ただし i は虚数単位 $\sqrt{-1}$ であり, μ は化学ポテンシャル, Δ_d は秩序変数の大きさを表す. σ_0 は 2×2 の単位行列, $\sigma_{x,y,z}$ は Pauli 行列であり, スピンの内部自由度に対応している. 式 (1.7) を BdG ハミルトニアン (1.6) に代入し, 対角化した結果を図 1 に示す. ここから, k_x 方向 (直線 $k_y = k_z = 0$ 上) では $E = 0$ 付近で有限のギャップが開いているが [図 1(a)], $[110]$ 方向 (直線 $k_x = k_y (= k_{[110]}/\sqrt{2}), k_z = 0$ 上) ではギャップが開かず, 超伝導ノードが存在することが分かる [図 1(b)]. 図 1(c) の黒線はフェルミ面上に現れるノードの位置を示したものであり, $k_x \pm k_y = 0$ の面上に線ノードが現れていることが分かる.

上の例から分かるように, 超伝導状態のエネルギーバンドはおよそ, 正常状態のエネルギーバンド および それを \mathbf{k} - E 空間で点対称に反転したものを重ね, その交差点に秩序変数 $\Delta(\mathbf{k})$ に対応するギャップを開けることで得られる. この「 \mathbf{k} - E 空間で点対称に反転」する操作は 2.4.1 節で述べる粒子正孔対称性に対応する.

1.3 本稿で取り扱う超伝導体

ここで, 今後の議論において取り扱う超伝導体がどのようなものか整理しておく.

1.3.1 時空反転対称性の存在

現実の超伝導体は様々な対称性をもつが, 中でも特に重要なのは空間反転対称性 (spatial inversion symmetry) と時間反転対称性 (time-reversal symmetry) であり, まとめて時空反転対称

性と呼ぶことにする。⁶⁾ 本稿ではそれぞれ \mathcal{I} と \mathcal{T} という記号でこれらの対称性を表すことにする。詳しい議論は後述するが、時空反転対称性に共通の性質として「運動量 \mathbf{k} を $-\mathbf{k}$ に変換する」ということが挙げられる。空間反転対称性や時間反転対称性が存在するかは超伝導体によって異なる。しかし、BCS 理論の仮定その 1「Cooper 対の重心運動量は 0 である」が成り立つような超伝導体では、時空反転対称性の少なくともどちらか一方は存在すると考えるのが自然である。なぜなら、このような対称性が保存されていると、上記の性質から正常状態において運動量 \mathbf{k} にフェルミ面が存在すれば $-\mathbf{k}$ にもフェルミ面が存在することが保証され、フェルミ面上のすべての電子が重心運動量 0 の Cooper 対形成に寄与することが可能になるためである。このような考察から、以降の議論では空間反転対称性・時間反転対称性の少なくとも一方が保存されているような超伝導体のみを考えることにする。実際、大部分の超伝導体はこのような仮定を満たしている。⁷⁾

1.3.2 結晶

これまで発見されている多くの超伝導体は**結晶**，すなわち原子が空間的に離散並進対称性をもつように配列した物質であるため、本稿でもこのようなものを仮定する。⁸⁾ 結晶の構造は**結晶格子**と**基本構造**の 2 つで構成される。 d 次元の結晶格子は、基本並進ベクトルと呼ばれる互いに線形独立な d 個のベクトル $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_d \in \mathbb{R}^d$ によって特徴付けることができる。すなわち、格子ベクトルを

$$\mathbf{T} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + \dots + n_d \mathbf{a}_d \quad (n_1, n_2, \dots, n_d \in \mathbb{Z}) \quad (1.8)$$

で定義したとき、格子ベクトルが表す離散点 (\mathbf{T} の終点) を格子点と呼び、格子点の集合を結晶格子と呼ぶ。また、基本並進ベクトル $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_d$ で張られる平行多面体⁹⁾ $\{\sum_j x_j \mathbf{a}_j \mid 0 \leq x_j < 1\}$ を**単位胞 (unit cell)** と呼ぶ。基本構造は一つの単位胞に含まれる原子配置であり、すべての単位胞は同じ基本構造をもつ。単位胞の定義の仕方は一意ではなく、基本的なブロックになっている (すなわち、並進の作用によって \mathbb{R}^d 全体を重複なく埋め尽くす) 限りはどのような形状をしていてもよい。上記の平行多面体とは異なる単位胞の定義の仕方として、Wigner–Seitz セルがある。これは、結晶格子がもつ離散的な回転対称性や反転対称性 (後述) と同じ対称性をもつ単位胞となるので重要である。

定義 1.4 結晶格子のある格子点 \mathbf{T} の周りの **Wigner–Seitz セル**は、 \mathbf{T} とは異なる任意の格子点 \mathbf{T}' に対して $|\mathbf{T} - \mathbf{r}| < |\mathbf{T}' - \mathbf{r}|$ となるような点 $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^d$ の集合として定義される。もう少し直観的には、 \mathbf{T} から他の格子点へ向かうベクトルの垂直二等分面をすべて描いたとき、 \mathbf{T} からこれらの面を一つもよぎらずに到達できる領域が Wigner–Seitz セルである。

6) **粒子正孔対称性 (particle-hole symmetry)** も超伝導体においては重要な対称性の一つである。詳しくは後述。

7) 例外としては、例えば Re_6X ($\text{X} = \text{Zr}, \text{Hf}, \text{Ti}$) [43–45] や CaPtAs [46] といった物質が知られている。また、既に超伝導が実現している物質に対して外場を印加して対称性を破るような状況を想定する場合はこの仮定の限りではない。

8) もちろん例外もあり、アモルファスや準結晶といった離散並進対称性をもたない固体中でも超伝導は発見されている。特に後者の準結晶中の超伝導は 2018 年に観測され話題を呼んだが [47]、この場合には波数 \mathbf{k} が良い量子数とならないため 1.2 節で導入したハミルトニアンは適用できない。

9) 2 次元なら平行四辺形、3 次元なら平行六面体になる。

さて、ここまでは実空間上での議論であったが、1.2 節で導入したハミルトニアンは波数空間で表示されているので、結晶を考えることによる波数表示に対する影響を見ていく。まず、逆格子ベクトルを定義する。

定義 1.5 任意の格子ベクトル T に対し $e^{i\mathbf{K} \cdot T} = 1$ を満たす $\mathbf{K} \in \mathbb{R}^d$ を**逆格子ベクトル (reciprocal lattice vector)** と呼ぶ。

逆格子ベクトル全体は波数空間上で周期的に並んだ離散点の集合 (**逆格子**) を構成する。実際、任意の逆格子ベクトル \mathbf{K} は

$$\mathbf{K} = n_1 \mathbf{b}_1 + n_2 \mathbf{b}_2 + \cdots + n_d \mathbf{b}_d \quad (n_1, n_2, \dots, n_d \in \mathbb{Z}) \quad (1.9)$$

と書ける。ここで \mathbf{b}_j は

$$\mathbf{a}_j \cdot \mathbf{b}_k = 2\pi \delta_{jk}, \quad \forall j, k = 1, 2, \dots, d \quad (1.10)$$

を満たす逆格子の基本並進ベクトルである。例えば $d = 3$ ならば、 \mathbf{b}_j は

$$\mathbf{b}_1 := \frac{2\pi(\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}, \quad \mathbf{b}_2 := \frac{2\pi(\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1)}{\mathbf{a}_2 \cdot (\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1)}, \quad \mathbf{b}_3 := \frac{2\pi(\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2)}{\mathbf{a}_3 \cdot (\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2)} \quad (1.11)$$

と定義される。逆格子も周期的な離散点の集合であるから単位胞を定義できる。

定義 1.6 逆格子の原点の周りの Wigner-Seitz セルを**第一 Brillouin ゾーン**あるいは単に Brillouin ゾーンと呼ぶ。

結晶は実空間の任意の格子ベクトルの並進移動に対して不変である。このような系における一体ハミルトニアンの全てのエネルギー固有状態は、第一 Brillouin ゾーン内の波数ベクトル \mathbf{k} で指定されるグループに分類できる (**Bloch の定理**)。よって、以降は正常状態のハミルトニアン $H_N(\mathbf{k})$ や BdG ハミルトニアン $H_{\text{BdG}}(\mathbf{k})$ は任意の逆格子ベクトル \mathbf{K} の並進に対して不変である、すなわち

$$H_N(\mathbf{k} + \mathbf{K}) = H_N(\mathbf{k}), \quad H_{\text{BdG}}(\mathbf{k} + \mathbf{K}) = H_{\text{BdG}}(\mathbf{k}) \quad (1.12)$$

とし、波数 \mathbf{k} は第一 Brillouin ゾーン内に限って考える。

例 1.2 (2 次元正方格子上の d 波超伝導体) 基本並進ベクトル $\mathbf{a}_1 = [1, 0]^\top$, $\mathbf{a}_2 = [0, 1]^\top$ をもつ 2 次元の正方格子上に原子が配列した d 波超伝導体を考え、正常状態のハミルトニアンと超伝導秩序変数を次のように与える。

$$H_N(\mathbf{k}) = [-2t(\cos k_x + \cos k_y) - \mu]\sigma_0, \quad \Delta(\mathbf{k}) = \Delta_d(\cos k_x - \cos k_y)i\sigma_y \quad (1.13)$$

逆格子の基本並進ベクトルは $\mathbf{b}_1 = 2\pi[1, 0]^\top$, $\mathbf{b}_2 = 2\pi[0, 1]^\top$ である。実際、任意の逆格子ベクトルの並進に対して $H_N(\mathbf{k})$ や $\Delta(\mathbf{k})$ は不変であり、第一 Brillouin ゾーンは $\{(k_x, k_y) \mid -\pi \leq k_{x,y} < \pi\}$ で与えられる。

1.3.3 弱結合極限

例 1.1 では、正常状態のエネルギーバンドは 1 本 (スピン縮退まで考慮すれば 2 本) だけであったので、超伝導ギャップに関する議論も比較的行うことができた。しかし一般の物質中には軌道・副格子などの様々な内部自由度があるので、正常状態のエネルギーバンドは複数本存在する。超伝導状態では、これらのエネルギーバンドと \mathbf{k} - E 空間で反転させたバンドとの間の秩序変数 (非対角要素) をすべて考えることになる。このことを式の上でもう少し明示的に見てみよう。正常状態のハミルトニアンを対角化するようなユニタリ行列 $V(\mathbf{k})$ を考える：

$$V(\mathbf{k})^\dagger H_N(\mathbf{k}) V(\mathbf{k}) = \text{diag}[\varepsilon^{(1)}(\mathbf{k}), \dots, \varepsilon^{(N)}(\mathbf{k})] =: E_N(\mathbf{k}) \quad (1.14)$$

このとき、BdG ハミルトニアンを次のように変換する。

$$V_{\text{band}}(\mathbf{k})^\dagger H_{\text{BdG}}(\mathbf{k}) V_{\text{band}}(\mathbf{k}) = \begin{bmatrix} E_N(\mathbf{k}) & V(\mathbf{k})^\dagger \Delta(\mathbf{k}) V(-\mathbf{k})^* \\ [V(\mathbf{k})^\dagger \Delta(\mathbf{k}) V(-\mathbf{k})^*]^\dagger & -E_N(-\mathbf{k}) \end{bmatrix} \quad (1.15)$$

$$V_{\text{band}}(\mathbf{k}) = \begin{bmatrix} V(\mathbf{k}) & 0 \\ 0 & V(-\mathbf{k})^* \end{bmatrix} \quad (1.16)$$

このような表示を BdG ハミルトニアンの**バンド表示**という。また、バンド表示のもとでの秩序変数 $\Delta_{\text{band}}(\mathbf{k}) := V(\mathbf{k})^\dagger \Delta(\mathbf{k}) V(-\mathbf{k})^*$ について、¹⁰⁾ $\Delta_{\text{band}}(\mathbf{k})$ の各対角成分を**バンド内秩序変数 (intra-band order parameter)** といい、非対角成分を**バンド間秩序変数 (inter-band order parameter)** という。

例 1.3 簡単な例として、バンド表示された次のような 1 次元模型を考える。

$$H_N(k) = \begin{bmatrix} -2t_1 \cos k - \mu_1 & 0 \\ 0 & -2t_2 \cos k - \mu_2 \end{bmatrix}, \quad \Delta(k) = \begin{bmatrix} \Delta_{11} \sin k & \Delta_{12} \\ -\Delta_{12} & \Delta_{22} \sin k \end{bmatrix} \quad (1.17)$$

ただし、パラメータ t_j, μ_j, Δ_{jk} ($j, k \in \{1, 2\}$) はすべて実数とする。このハミルトニアンに関するエネルギーバンドを示したものが図 2 である。図 2(a) ではバンド内秩序変数 (Δ_{11}, Δ_{22}) を有限にしバンド間秩序変数 (Δ_{12}) を零としており、超伝導状態のエネルギーバンドは零点 (超伝導ノード) をもたないことが分かる。他方、図 2(b), 2(c) ではバンド間秩序変数のみを有限にしている。バンド間秩序変数が小さい場合には、その効果はほとんど有限エネルギーの領域にのみ現れるので、零エネルギー付近の励起には影響を与えないことが分かる [図 2(b)]。しかし、バンド間秩序変数が大きくなると、スペクトルが大きく変形してノードの有無を変えてしまうことが見て取れる [図 2(c)]。

上の例から示唆されるように、超伝導秩序変数が大きくなると、バンド間秩序変数が零エネルギー付近の励起に与える影響が一般には無視できなくなり、超伝導ノードの有無を予測するのが難しくなる。そこで、本稿では基本的に**超伝導秩序変数が零の極限**を考えることにする。このように仮定することで、バンドが複数あるような系でもバンド間秩序変数の影響を無視することができ、

¹⁰⁾ $\Delta_{\text{band}}(\mathbf{k})$ についても $\Delta_{\text{band}}(\mathbf{k})^T = -\Delta_{\text{band}}(-\mathbf{k})$ の関係が満たされる。

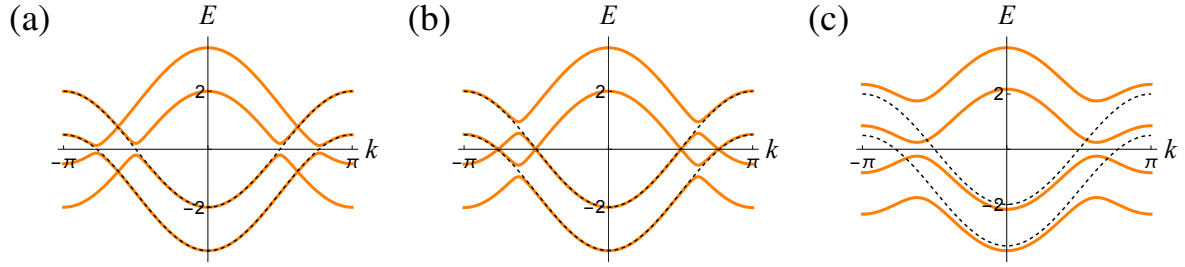


図 2 式 (1.17) で与えられる 1 次元超伝導体における，第一 Brillouin ゾーン $[-\pi, \pi)$ 内のエネルギーバンド ($t_1 = t_2 = 1$, $\mu_1 = 0$, $\mu_2 = 1.5$). 秩序変数 $(\Delta_{11}, \Delta_{12}, \Delta_{22})$ は (a) $(0.2, 0, 0.2)$, (b) $(0, 0.2, 0)$, (c) $(0, 1, 0)$ としている．オレンジの実線は $H_{\text{BdG}}(k)$ の固有値，黒の破線は $H_{\text{N}}(k)$ の固有値を表す．

ノードの有無はバンド内秩序変数が有限になるかどうかだけで判定することが可能になる．また，知られているほとんどの超伝導体において，超伝導のエネルギースケールは正常状態の典型的なエネルギースケール（飛び移り積分やスピン軌道相互作用など）に比べて十分小さいので，上記の仮定は妥当なものであると言える．

1.3.4 スピン軌道相互作用の存在

基本的にすべての物質において**スピン軌道相互作用 (spin-orbit coupling)** が働いていると考えられるので，その存在は仮定するものとする．ただし，実際にはスピン軌道相互作用が無視できるほど小さい物質もあり，そのような場合にはスピンと軌道の自由度は分離されるので，実質的にはスピinlessの超伝導体とみなすことができる．本稿で紹介する分類理論はこのようなスピinless超伝導体においても straightforward に適用できる．

2 対称性と群の表現論

本節では，超伝導体 (のハミルトニアン) がもつ**対称性**に注目し，それを数学的にどのように表すかということに注目する．ざっくり言えば，対称性 (対称操作) の集まりとその間の関係性は群を用いて表すことができ，その対称性をもつハミルトニアンの情報 (エネルギーバンドや超伝導ギャップ構造など) は群の表現論に落とし込んで考えることができる．本節では群とその表現論に関し，3 節で議論する超伝導ギャップ構造の分類学に必要な最低限の概念だけを導入することにする．物性物理学で用いられる群の表現論の詳細については，例えば文献 [48–54] などを参照されたい．

2.1 群についての基礎事項

本節では，群に関してのいくつかの概念を定義を列挙する形で導入する．

定義 2.1 集合 G とその上の二項演算 (または積) $\circ: G \times G \rightarrow G$ の組 (G, \circ) が**群 (group)** であると，任意の $g, h, k \in G$ に対して次の 3 つの条件を満たすことをいう．

1. (結合律) $g \circ (h \circ k) = (g \circ h) \circ k$

2. (単位元の存在) ある $E \in G$ が存在して $g \circ E = E \circ g = g$ となる. このような元 E は存在すれば一意であり, G の**単位元**と呼ぶ.
3. (逆元の存在) ある $x \in G$ が存在して $g \circ x = x \circ g = E$ となる. このような元 x は存在すれば一意であり, この x を g の G における**逆元**といい, 以降は g^{-1} と表す.

群 (G, \circ) がさらに

4. (交換律) $g \circ h = h \circ g$

を満たすとき, この群を**可換群 (アーベル群)** という.

注意 2.1 二項演算 \circ が明らかな場合には $g \circ h$ を省略して gh と書くことも多い. また, 群 (G, \circ) のことを単に群 G と表記することがほとんどである. 群 G に入っている元の個数を G の**位数 (order)** といい, $|G|$ と表記する.

定義 2.2 群 G の部分集合 L が, G において定義された積に関して群となっているとき, L を G の**部分群 (subgroup)** という. 特に, 単位元 E だけの集合と G 自身は常に G の部分群である. これら以外の部分群を真部分群という.

定義 2.3 L を群 G の部分群とする. 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 (normal subgroup)** という.

定義 2.4 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 (left coset)** 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 (right coset)** という.

注意 2.2 単位元 E について $EL = LE = L$ であるから, 部分群 L 自身は L を法とする剰余類となる. L を法とするすべての左剰余類と右剰余類は同じ元の個数を持ち, それは $|L|$ に等しい. また, 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 (index)** といい, 記号 $[G : L]$ で表す. G と L が有限群ならば $|G| = [G : L] \cdot |L|$ が成り立つ.

命題 2.1 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.

証明 L が正規部分群であることから任意の $g \in G, l \in L$ に対して $l' := glg^{-1}$ は L に属する. したがって, $gl = glg^{-1}g = l'g$ より $gL = Lg$ となる. □

定義 2.5 L を群 G の部分群とし, $q_1L, q_2L, \dots, q_{[G:L]}L$ を L を法とするすべての左剰余類とする.

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

$$G = \coprod_{\alpha=1}^{[G:L]} q_{\alpha}L \quad (2.1)$$

のように表すことを G の L による**左剰余類分解 (left coset decomposition)** という. 同様に**右剰余類分解 (right coset decomposition)** も定義できる. また, 各 $q_{\alpha} \in G$ を剰余類 $q_{\alpha}L$ の**代表元 (representative)** という. 特に単位元 E は常に剰余類 L の代表元として選ぶことが可能であるため, $q_1 = E$ と定めることにする.

定義 2.6 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 (L の正規性より右剰余類分解を考えてもよい). 集合 G/L を, L を法とするすべての左剰余類の集合と定義する, すなわち,

$$G/L := \{q_{\alpha}L \mid \alpha = 1, \dots, [G:L]\} \quad (2.2)$$

とする. このとき, 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. 実際, L が正規部分群であることから

$$(q_{\alpha}L)(q_{\beta}L) = q_{\alpha}q_{\beta}(q_{\beta}^{-1}Lq_{\beta})L = (q_{\alpha}q_{\beta})LL = (q_{\alpha}q_{\beta})L \quad (2.3)$$

が成り立つ. G/L 上のこの演算は結合律を満たし, 単位元 L をもち, G/L の元 $q_{\alpha}L$ の逆元は $q_{\alpha}^{-1}L$ であることが確かめられる. したがって, 集合 G/L に上記の演算を導入すると群をなす; これを G の L による**剰余群 (factor group, quotient group)** と呼ぶ.¹¹⁾

定義 2.7 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 (double coset)** という. 特に $K = L$ のとき, KgL 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

$$G = \coprod_{\alpha} Kd_{\alpha}L \quad (2.4)$$

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

定義 2.8 群 G_1, G_2 が与えられたとき, その集合としての直積 $G_1 \times G_2$ に,

$$(g_1, g_2)(h_1, h_2) = (g_1h_1, g_2h_2), \quad g_1, h_1 \in G_1, g_2, h_2 \in G_2 \quad (2.5)$$

として演算を定義すると, $G_1 \times G_2$ は群になる. これを G_1 と G_2 の**直積 (direct product)** という.

定義 2.9 G_1, G_2 を群とする. G_1 と G_2 の**半直積 (semi-direct product)** 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.

11) 剰余群のことを**商群**と呼ぶこともあるが, 後出の小群 (little group) と日本語の読みが同じで混同する恐れがあるため本稿では用いない.

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. $G = G_1 G_2$ である. すなわち, 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: $G_1 \cap G_2 = \{E\}$.

注意 2.3 群の直積は, 群の半直積の特別な場合である.

2.2 結晶の対称性：空間群・点群

1.3.2 節で仮定したように, 本稿では原子が周期的に配列した結晶の超伝導体を仮定する. このような結晶中で許される対称性 (対称操作) を特徴付ける重要な概念が, 本節で導入する空間群や点群と呼ばれるものである. 以降, 特に断りのない限り空間 3 次元の結晶を仮定する.

2.2.1 並進群

ある結晶を考え, その結晶格子を特徴付ける基本並進ベクトルを $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ とする. いま, 式 (1.8) で表される格子ベクトルを考えよう. 結晶の定義から, 格子ベクトル \mathbf{T} だけ結晶をずらしても結晶の原子配置は全く同じである. このような並進操作を $\{E|\mathbf{T}\}$ と書くことにする. すなわち, $\{E|\mathbf{T}\}$ という操作の点 $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^d$ への作用は

$$\{E|\mathbf{T}\}\mathbf{r} = \mathbf{r} + \mathbf{T} \quad (2.6)$$

で与えられる. 格子ベクトルによる並進操作の集合を \mathbb{T} とし, $\{E|\mathbf{T}\}, \{E|\mathbf{T}'\} \in \mathbb{T}$ に対しての積を

$$\{E|\mathbf{T}\}\{E|\mathbf{T}'\} := \{E|\mathbf{T} + \mathbf{T}'\} \in \mathbb{T} \quad (2.7)$$

で導入すれば, 明らかに \mathbb{T} は可換群をなす. このような群を (離散的) **並進群 (translation group)** と呼ぶ.

2.2.2 空間群と点群

結晶の対称性が最も低い場合には結晶を不変に保つ対称操作は並進だけであるが, より一般には空間反転や回転といった (等長変換の) 対称操作が許される対称性の高い結晶も存在する. 結晶の上で許されるこのような対称操作を集めたものを**空間群**という. いま考えている 3 次元空間の場合, 空間群は全部で 230 種類あることが知られている. 以降, 本稿では G という記号で空間群を表すことにする.

定義 2.10 空間群 (space group) は, 離散的並進群を正規部分群にもつような Euclid 群の部分群である.

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

- 恒等操作：何の移動もしない。
- 回転操作：空間内のすべての点のある軸 (回転軸) に対して回転させる。
- 鏡映操作：空間内のすべての点のある面 (鏡映面) について面対称に移動させる。
- 反転操作：空間内のすべての点のある点 (反転中心) について点対称に移動させる。
- 回映操作：空間内のすべての点のある軸 (回映軸) に対して回転させた後、その軸に垂直な面について面対称に移動させる (回転操作と鏡映操作の合成)。
- 回反操作：空間内のすべての点のある軸 (回反軸) に対して回転させた後、その軸上の一点について点対称に移動させる (回転操作と反転操作の合成)。
- 並進操作：空間内のすべての点を平行移動させる。

これらの中で、並進操作以外 (すなわち直交群 $O(3)$ の元) は空間内の少なくとも 1 点が不動点となる。このような対称操作だけを考えたものが**点群**である。

定義 2.11 点群 (point group) は、不動点を少なくとも 1 つもつような対称操作からなる群である。

特に、結晶で許されるような対称操作のみで構成される点群を**結晶点群**といい、全部で 32 種類あることが知られている。本稿では以降、点群と書くときはすべて結晶点群のことを指すものとし、点群の元を点群操作などと呼ぶ。いま、点群 P の不動点を $\mathbf{r}_0 \in \mathbb{R}^3$ と書くとき、 P の元 g の点 $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^3$ への作用は

$$g\mathbf{r} = p_g(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) + \mathbf{r}_0 \quad (2.8)$$

で与えられる。ここで、 $p_g \in O(3)$ は 3 次元直交行列である。

例 2.1 点群操作を表す記号として典型的なものを以下に示す。このような記号は他にもいくつか流儀があるので、文献によってその都度確認するのがよい。

- n 回回転 C_{nz} ： z 軸のまわりに $2\pi/n$ 回転させること。結晶中では $n = 2, 3, 4, 6$ しか取り得ないことが示せる。他にも、例えば x 軸まわりの 2 回回転は C_{2x} などと書く。
- 鏡映 M_z ： z 軸に垂直な面について面対称に移動させること。
- 空間反転 I ：ある点 (原点にとることが多い) について点対称に移動させること。

上のそれぞれの例について、直交行列 p_g は

$$p_{C_{nz}} = \begin{bmatrix} \cos \frac{2\pi}{n} & -\sin \frac{2\pi}{n} & 0 \\ \sin \frac{2\pi}{n} & \cos \frac{2\pi}{n} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad p_{M_z} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad p_I = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (2.9)$$

となる。

空間群 G に属する対称操作は一般に点群操作と並進操作の合成として書くことができる．すなわち， G の元 g の点 $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^3$ への作用は，ある $p_g \in O(3)$ と $\mathbf{t}_g \in \mathbb{R}^3$ を用いて

$$g\mathbf{r} = p_g\mathbf{r} + \mathbf{t}_g \quad (2.10)$$

のように与えられる．ここで， \mathbf{t}_g は基本並進ベクトルやその和の形とは限らないので注意が必要である (2.2.4 節も参照)．このような対称操作を表現する記号として $g = \{p_g|\mathbf{t}_g\}$ を用いる (Seitz 記法)．特に，点群操作として恒等操作を表す場合には E という記号で表す． T だけの並進操作を $\{E|T\}$ と表していたのはこのような理由による．また，上記の変換の合成からすぐに分かるように， G の元 g, g' の積は

$$gg' = \{p_g|\mathbf{t}_g\}\{p_{g'}|\mathbf{t}_{g'}\} = \{p_gp_{g'}|p_g\mathbf{t}_{g'} + \mathbf{t}_g\} \quad (2.11)$$

で与えられる．

2.2.3 空間群の座標系

空間群の元の表示の仕方は座標系の取り方に依存する．ある座標系での元 g の表示が $\{p_g|\mathbf{t}_g\}$ であるとする．このとき，座標系の原点を $\boldsymbol{\tau}$ だけずらすと

$$\{E|\boldsymbol{\tau}\}\{p_g|\mathbf{t}_g\}\{E|\boldsymbol{\tau}\}^{-1} = \{p_g|\mathbf{t}_g + \boldsymbol{\tau} - p_g\boldsymbol{\tau}\} \quad (2.12)$$

となり，並進部分が \mathbf{t}_g から $\mathbf{t}_g + \boldsymbol{\tau} - p_g\boldsymbol{\tau}$ に変化する．

2.2.4 共型/非共型空間群

空間群は全部で 230 種類あると述べたが，その中のグループ分けの仕方で重要な概念として，共型/非共型の性質がある．

定義 2.12 G を空間群とする． G がある点群 P と並進群 T の半直積 $P \ltimes T$ で表せるとき， G を**共型 (symmorphic)** であるという．¹²⁾ そうでない場合には， G を**非共型 (nonsymmorphic)** であるという．

230 種類の空間群のうち，共型なものは 73 個で非共型なものは 157 個ある．上の定義は分かりにくいのでもう少し直観的に言い換えると，座標系の原点をうまく選ぶことで任意の $g \in G$ に対して並進部分 \mathbf{t}_g を T の元として (すなわち基本並進ベクトルの和として) 表すことができれば共型である，ということである．逆に言えば，非共型な空間群ではどのような原点の選び方をしても， T に属さない「半端な並進」をもつような元が存在する．このような非共型な空間群を特徴付ける重要な対称操作が次の 2 つである．

- **螺旋 (screw) 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 (glide) 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．

¹²⁾ もし空間群の 2 元の演算が $\{p_g|\mathbf{t}_g\}\{p_{g'}|\mathbf{t}_{g'}\} \stackrel{?}{=} \{p_gp_{g'}|\mathbf{t}_g + \mathbf{t}_{g'}\}$ のような形をしていれば点群と並進群の直積と言えるが，実際には式 (2.11) のような形をしており直積の定義と相容れない．したがって半直積を考える必要がある．

今後の議論では、非共型空間群といえは螺旋操作や映進操作を含むような空間群であると考えれば基本的に差し支えない。各空間群がどのような元をもつかについては、今はデータベースが充実しているため気軽に調べることができる。例えば [55] などは参考になるだろう (筆者もよく利用している)。

例 2.2 $P6_3/mmc$ (#194) は六方晶の空間群であり、基本並進ベクトルは $\mathbf{a}_1 = [0, -a, 0]^T$, $\mathbf{a}_2 = [\frac{\sqrt{3}a}{2}, \frac{a}{2}, 0]^T$, $\mathbf{a}_3 = [0, 0, c]^T$ のように定められる。この空間群は並進操作に加えて、主軸螺旋 $\{C_{6z}|\frac{\mathbf{a}_3}{2}\}$, 回転 $\{C_{2y}|\mathbf{0}\}$, 反転 I で生成される群となっている。螺旋操作 $\{C_{6z}|\frac{\mathbf{a}_3}{2}\}$ がもつ半端な並進 $\frac{\mathbf{a}_3}{2}$ はどのような原点を選んでも消すことができない。実際、座標系の原点を $\boldsymbol{\tau} = [\tau_x, \tau_y, \tau_z]^T$ だけずらすと、並進部分は

$$\frac{\mathbf{a}_3}{2} + \boldsymbol{\tau} - p_{C_{6z}} \boldsymbol{\tau} = \left[\frac{\tau_x + \sqrt{3}\tau_y}{2}, \frac{-\sqrt{3}\tau_x + \tau_y}{2}, \frac{c}{2} \right]^T \quad (2.13)$$

となるが、 z 軸方向の半端な成分 $\frac{c}{2}$ は消えない。

2.2.5 磁気空間群・磁気点群

ここまで、結晶で許される対称操作としてユニタリなものを考えてきたが、実際には時間反転操作に代表されるような**反ユニタリ**な操作というものも存在する。反ユニタリな操作 m とは、対応する演算子 \hat{m} が反線形性

$$\hat{m}(c_1 |\psi_1\rangle + c_2 |\psi_2\rangle) = c_1^* (\hat{m} |\psi_1\rangle) + c_2^* (\hat{m} |\psi_2\rangle) \quad (2.14)$$

をもつようなものである。空間群や点群をこのような反ユニタリな操作まで拡張したものをそれぞれ**磁気空間群 (magnetic space group)** や**磁気点群 (magnetic point group)** と呼ぶ。磁気空間群は 1651 種類、磁気点群は 122 種類あることが知られている。これらに関する詳細な議論は文献 [48, 49] などを参照されたい。

本稿では M という記号で磁気空間群を表すことにする。一般に M には通常のユニタリな元も反ユニタリな元も含まれているが、これらを区別するための関数として

$$\phi: M \rightarrow \mathbb{Z}_2 = \{+1, -1\}, \quad \phi(m) = \begin{cases} +1 & m : \text{unitary} \\ -1 & m : \text{antiunitary} \end{cases} \quad (2.15)$$

を導入し、以降の議論でもしばしばこの関数を用いる。

2.3 表現論の導入

ここまで、結晶のもつ対称性 (対称操作) が空間群や点群の形で表されることを見てきた。一方で、この対称操作が今考えているハミルトニアンやそのエネルギー固有状態へどのように作用するのかということを議論するために、群の表現論が必要になる。この表現論について議論していく。

2.3.1 波数空間への作用

(磁気) 空間群の表現について考える前に, (磁気) 空間群の正規部分群である並進群 \mathbb{T} の表現を導入する. \mathbb{T} の表現を特徴付けるのが, 1.3.2 節で導入した波数 \mathbf{k} である.

定義 2.13 波数 \mathbf{k} に対応する並進群の元 $\{E|\mathbf{T}\} \in \mathbb{T}$ の表現を

$$\mu^{\mathbf{k}}(\{E|\mathbf{T}\}) = e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{T}} \quad (2.16)$$

と定義する.

定義 1.5 より, 任意の逆格子ベクトル \mathbf{K} に対して $\mu^{\mathbf{k}+\mathbf{K}}(\{E|\mathbf{T}\}) = \mu^{\mathbf{k}}(\{E|\mathbf{T}\})$ となり, \mathbf{k} と $\mathbf{k}+\mathbf{K}$ は同一の並進の表現を与える. したがって, 波数空間は定義 1.6 で導入した第一 Brillouin ゾーンのみを考えれば十分である.

次に, 磁気空間群の一般の元が波数 \mathbf{k} へどのように作用するかを考えよう. 式 (2.16) の表現基底を $|\mathbf{k}\rangle$ と書く. すなわち, \mathbf{T} だけの並進を表す演算子を \hat{T} とすると, これは波数 \mathbf{k} に対応する状態 (Bloch 状態) に対して

$$\hat{T}|\mathbf{k}\rangle = |\mathbf{k}\rangle e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{T}} \quad (2.17)$$

のように作用する (ハット ^ の意味については後にまた詳しく述べる). このとき, 磁気空間群の元 $m \in M$ を

$$m = \begin{cases} \{p_m|\mathbf{t}_m\} & m : \text{unitary} \\ \{Tp_m|\mathbf{t}_m\} & m : \text{antiunitary} \end{cases} \quad (2.18)$$

とする. T は (並進部分をもたない) 反ユニタリの時間反転操作で, 実空間ベクトルには自明に作用する. よって, $\{E|\mathbf{T}\}\{p_m|\mathbf{t}_m\} = \{p_m|\mathbf{t}_m + \mathbf{T}\} = \{p_m|\mathbf{t}_m\}\{E|p_m^{-1}\mathbf{T}\}$ より

$$\hat{T}(\hat{m}|\mathbf{k}\rangle) = \hat{m}(\widehat{p_m^{-1}\mathbf{T}}|\mathbf{k}\rangle) = \hat{m}(|\mathbf{k}\rangle e^{-i\mathbf{k} \cdot (p_m^{-1}\mathbf{T})}) = (\hat{m}|\mathbf{k}\rangle) e^{-i\phi(m)p_m\mathbf{k} \cdot \mathbf{T}} \quad (2.19)$$

となる. 最後の等号は, p_m が直交行列である ($p_m^{-1} = p_m^T$) ことを用いた. したがって, 磁気空間群の元 m は波数 \mathbf{k} に対して

$$m\mathbf{k} = \phi(m)p_m\mathbf{k} \quad (2.20)$$

と作用する.

2.3.2 PUA 表現

次に本節では, 群の表現論, 特に PUA 表現と呼ばれるものを導入する. 以下, 表記の簡単化のためにしばしば省略記号

$$\mu^m = \begin{cases} \mu & \text{if } \phi(m) = +1 \\ \mu^* & \text{if } \phi(m) = -1 \end{cases} \quad (2.21)$$

を用いる.

定義 2.14 M を群とする. M の **PUA 表現 (projective unitary–antiunitary representation)**¹³⁾ とは, M からある Hilbert 空間 \mathcal{H} 上の演算子への写像[^](ハット)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, $\phi(m) = +1$ ならば \hat{m} はユニタリな演算子, $\phi(m) = -1$ ならば \hat{m} は反ユニタリな演算子である.
2. ある写像 $\omega: M \times M \rightarrow \mathbb{U}(1)$ が存在して, 任意の $m_1, m_2 \in M$ に対して

$$\hat{m}_1 \hat{m}_2 = \omega(m_1, m_2) \widehat{m_1 m_2} \quad (2.22)$$

が成り立つ.

3. M の単位元 (恒等操作) E に対しての表現は \mathcal{H} 上の恒等演算子である.

ここで ω は M の **乗数系 (factor system)** と呼ばれ,

$$\omega(m, E) = \omega(E, m) = 1, \quad \forall m \in M \quad (2.23a)$$

$$\omega(m_1, m_2) \omega(m_1 m_2, m_3) = \omega(m_1, m_2 m_3) \omega(m_2, m_3)^{m_1}, \quad \forall m_1, m_2, m_3 \in M \quad (2.23b)$$

を満たすものとする. 関係式 (2.23b) は **2 コサイクル条件** と呼ばれ, PUA 表現の結合律を課すことによって得られる.

注意 2.4 本稿では有限次元の PUA 表現しか考えない. すなわち, 定義 2.14 において Hilbert 空間 \mathcal{H} は常に有限次元であるとしてよい.

例 2.3 簡単な例として, $P21'$ という磁気空間群 M を考える. これは, 磁気点群 $\{E, C_{2y}, \mathcal{T}, \mathcal{T}C_{2y}\}$ と (primitive な) 並進群の半直積で表されるような (共型な) 群である. いま, スピン 1/2 かつスピン軌道相互作用があるような系の 1 電子状態を考えると, π 回転操作 (C_{2y}) や時間反転操作 (\mathcal{T}) を 2 回行うことで -1 の位相がつく.¹⁴⁾ すなわち, $\hat{C}_{2y}^2 = -\hat{E}$, $\hat{\mathcal{T}}^2 = -\hat{E}$ である.

PUA 表現において, 乗数系が任意の $m_1, m_2 \in M$ に対して $\omega(m_1, m_2) = 1$ を満たすとき, 特に**線形表現 (linear representation)** と呼ぶ. 乗数系は系の内部自由度や並進操作などからくる位相因子を表すために重要な役割を果たす. より詳細な具体例は後の節で与えることにして, ここでは後の議論のために必要な概念を導入する.

定義 2.15 \mathcal{H} を N 次元 Hilbert 空間, $|\psi\rangle = \{|\psi\rangle_1, \dots, |\psi\rangle_n\}$ を \mathcal{H} の正規直交基底とする. また[^]を, 群 M から \mathcal{H} 上の演算子への写像として定まる PUA 表現とする. 各 $m \in M$ に対して $N \times N$ ユニ

13) 筆者の個人的な体感としては**射影表現 (projective representation)** と呼ばれることが多いが, 本稿ではユニタリ/反ユニタリな演算子を考えているということを強調するために PUA 表現という言葉を用いる.

14) 前者は回転群の表現に起因している. 実際, スピン 1/2 表現における y 軸まわりの θ 回転は $e^{-i\frac{\theta}{2}\sigma_y}$ で表され, $\theta = 2\pi$ のときこれは $-\sigma_0$ となる.

タリ行列 $\mu(m)$ を $\mu(m)_{ij} = {}_i\langle\phi|\hat{m}|\phi\rangle_j$ によって定めるとき、この $\mu(m)$ を PUA 表現 \hat{m} の**表現行列 (representation matrix)** と呼ぶ。各表現行列 $\mu(m)$ のトレースを**指標 (character)** と呼ぶ。

注意 2.5 乗数系 ω をもつ PUA 表現に対し、表現行列 μ は次の性質をもつ。

$$\mu(m_1)\mu(m_2)^{m_1} = \omega(m_1, m_2)\mu(m_1m_2), \quad \forall m_1, m_2 \in M \quad (2.24)$$

$$\mu(E) = \mathbf{1}_N \text{ (単位行列)} \quad (2.25)$$

本稿では表現行列たちのこともあまり区別せず PUA 表現と呼ぶ。実際の分類においては具体的な表現行列 (の指標) を与えて計算することがほとんどであるため、以降で導入する概念は基本的に表現行列をベースにして考える。

定義 2.16 群 M の 2 つの PUA 表現 (行列) を μ_1, μ_2 とする。あるユニタリ行列 V が存在して

$$\mu_1(m) = V^\dagger \mu_2(m) V^m, \quad \forall m \in M \quad (2.26)$$

が満たされるとき、この 2 つの PUA 表現は**同値 (equivalent)** であるといい、 $\mu_1 \simeq \mu_2$ と書く。

命題 2.2 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：

$$\text{tr}[\mu_1(g)] = \text{tr}[\mu_2(g)], \quad \forall g \in M \text{ s.t. } \phi(g) = 1 \quad (2.27)$$

注意 2.6 一般に反ユニタリな操作に対しては同値表現であっても指標は一致しない。命題 2.2 より、2 つの PUA 表現が同値かどうかを確かめるにはユニタリ部分の指標を比べさえすればよい。

定義 2.17 μ を群 M の PUA 表現とする。あるユニタリ行列 V による同値変換によって各行列 $\mu(m)$ を同じパターンにブロック対角化できる、すなわち

$$V^\dagger \mu(m) V^m = \begin{bmatrix} \mu^{(1)}(m) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \mu^{(2)}(m) & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \mu^{(k)}(m) \end{bmatrix} = \mu^{(1)}(m) \oplus \mu^{(2)}(m) \oplus \dots \oplus \mu^{(k)}(m), \quad \forall m \in M \quad (2.28)$$

のように k 個の PUA 表現 $\mu^{(1)}, \mu^{(2)}, \dots, \mu^{(k)}$ に直和分解できるとき、 μ を**可約 (reducible)** であるという。¹⁵⁾ PUA 表現 μ が複数個の PUA 表現に直和分解できないとき、 μ を**既約 (irreducible)** であるという。

¹⁵⁾ 厳密には、ここで導入した可約の概念は**完全可約 (completely reducible)** と呼ばれるべきものである。Maschke の定理より、有限群の PUA 表現はすべて完全可約になるので本稿では両者を区別しない [56, 57]。

表 1 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

例 2.4 (指標表) 命題 2.2 より, 有限群の表現はユニタリ部分の指標だけで同値かどうかを区別できる. このような理由から, 特に点群の既約表現の指標に関しては**指標表**として様々な文献でまとめられている (例えば, [48, 49, 55] など). 例として, D_{4h} と呼ばれる点群の線形表現に関する指標表を表 1 に示す. 上端の行が D_{4h} の各元, 左端の列が各既約表現のラベルを表している (Mulliken 記号). 各行の数字が既約表現の指標を表しており, 1 次元表現が 8 つ, 2 次元表現が 2 つあることが分かる.¹⁶⁾

命題 2.3 (Schur の補題) 群 M の PUA 表現 μ について

$$\mu(m)H^m\mu(m)^\dagger = H, \quad \forall m \in M \quad (2.29)$$

を満たす行列 H は, PUA 表現 μ が既約ならば, 単位行列の定数倍である.

定義 2.18 μ_1, μ_2 を群 M の PUA 表現とし, それぞれの乗数系を ω_1, ω_2 とする. これら 2 つの PUA 表現の**直積 (direct product) 表現**は, 乗数系 $\omega_1\omega_2$ をもつ M の PUA 表現であってその表現行列が

$$(\mu_1 \otimes \mu_2)(m)_{ij,kl} = \mu_1(m)_{ik}\mu_2(m)_{jl}, \quad \forall m \in M \quad (2.30)$$

となるものである.¹⁷⁾

16) Mulliken 記号では各既約表現の次数が分かるようになっており, A や B の場合は 1 次元表現, E の場合は 2 次元表現である. ここには無いが, 立方晶の場合には 3 次元表現が現れることがあり, T という記号で表される. 各記号の添字にある g と u はそれぞれ gerade と ungerade の略であり, 空間反転操作に対して偶か奇かという性質を表している.

17) 基底を使って表した方が分かりやすいかもしれない. すなわち, μ_1 の基底を $|\psi_1\rangle$, μ_2 の基底を $|\psi_2\rangle$ とすると,

$$\begin{aligned} \hat{m}(|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle)_{kl} &= (\hat{m}|\psi_1\rangle_k)(\hat{m}|\psi_2\rangle_l) \\ &= (|\psi_1\rangle_i \mu_1(m)_{ik})(|\psi_2\rangle_j \mu_2(m)_{jl}) = (|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle)_{ij} (\mu_1 \otimes \mu_2)(m)_{ij,kl} \end{aligned} \quad (2.31)$$

より, 直積表現は基底 $|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle$ をもつ.

μ を群 M の N 次元 PUA 表現とし、その基底を $|\psi\rangle = \{|\psi\rangle_1, \dots, |\psi\rangle_N\}$ とする：

$$\hat{m} |\psi\rangle_j = |\psi\rangle_i \mu(m)_{ij}, \quad m \in M \quad (2.32)$$

ここで、同じ項で添字が重なる場合はその添字について和を取ることにする (Einstein の縮約記法). 本稿ではしばしばこの記法を用いる. 次に、直積表現 $\mu \otimes \mu$ は

$$\hat{m}(|\psi\rangle \otimes |\psi\rangle)_{kl} = (|\psi\rangle \otimes |\psi\rangle)_{ij} \mu(m)_{ik} \mu(m)_{jl} \quad (2.33a)$$

$$\hat{m}(|\psi\rangle \otimes |\psi\rangle)_{lk} = (|\psi\rangle \otimes |\psi\rangle)_{ji} \mu(m)_{jl} \mu(m)_{ik} \quad (2.33b)$$

のように2通りに表すことができる. 両者の和・差を取れば

$$\hat{m} |\Psi_{\pm}\rangle_{kl} = |\Psi_{\pm}\rangle_{ij} \mu(m)_{ik} \mu(m)_{jl} \quad (2.34)$$

$$|\Psi_{\pm}\rangle_{kl} := (|\psi\rangle \otimes |\psi\rangle)_{kl} \pm (|\psi\rangle \otimes |\psi\rangle)_{lk} \quad (2.35)$$

のようになる. ここで定義した基底 $|\Psi_{\pm}\rangle$ について、 $|\Psi_+\rangle$ 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. 特に $|\Psi_{\pm}\rangle_{ij} = \pm |\Psi_{\pm}\rangle_{ji}$ に注意すると、式 (2.34) は

$$\hat{m} |\Psi_{\pm}\rangle_{kl} = \frac{1}{2} |\Psi_{\pm}\rangle_{ij} [\mu(m)_{ik} \mu(m)_{jl} \pm \mu(m)_{il} \mu(m)_{jk}] \quad (2.36)$$

と変形することができる.

定義 2.19 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 (symmetrized square)** 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 (antisymmetrized square)** と呼ぶ. すなわち、直積表現は $\mu \otimes \mu = [\mu \otimes \mu]_+ \oplus [\mu \otimes \mu]_-$ と直和分解できる.

定義 2.20 M を群、乗数系 $\omega: M \times M \rightarrow \mathbb{U}(1)$ を考える. L を M の部分群、 $\mu: L \rightarrow \mathbb{U}(N)$ を群 L の PUA 表現とする. このとき、 $m \in M$ による**表現 μ のマップ** $\mu_m: mLm^{-1} \rightarrow \mathbb{U}(N)$ は

$$\mu_m(mlm^{-1}) := \frac{\omega(mlm^{-1}, m)}{\omega(m, l)} \mu(l)^m, \quad l \in L \quad (2.37)$$

によって定められる. 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

$$\begin{aligned} \widehat{mlm^{-1}}(\hat{m} |\psi\rangle_j) &= \omega(mlm^{-1}, m) \widehat{ml} |\psi\rangle_j \\ &= \frac{\omega(mlm^{-1}, m)}{\omega(m, l)} \hat{m} (\hat{l} |\psi\rangle_j) = (\hat{m} |\psi\rangle_i) \frac{\omega(mlm^{-1}, m)}{\omega(m, l)} \mu(l)_{ij}^m \end{aligned} \quad (2.38)$$

となる.

2.4 ハミルトニアンの対称性とエネルギーバンド・Bloch 状態

上記で導入した PUA 表現は、ハミルトニアンが各波数点で有する対称性を表す演算子 (ユニタリ行列) として用いることができる。これは特に、ハミルトニアンの固有値であるエネルギーバンドの性質を表すために有用である。

2.4.1 ハミルトニアンの対称性

超伝導の平均場ハミルトニアン (1.5) のように、生成消滅演算子を並べたベクトル $\Psi(\mathbf{k})$ を用いて表される (一体の) ハミルトニアン

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \Psi(\mathbf{k})^\dagger H(\mathbf{k}) \Psi(\mathbf{k}) \quad (2.39)$$

を考える。ハミルトニアン行列 $H(\mathbf{k})$ の次元を N とする。

定義 2.21 M を磁気空間群とし、ハミルトニアン \hat{H} の固有状態が張る Hilbert 空間を \mathcal{H} とする。各元 $m \in M$ に対応する \mathcal{H} 上のユニタリ/反ユニタリ演算子 \hat{m} で、生成消滅演算子 $\Psi(\mathbf{k})^\dagger$ をユニタリ行列 $\mu^{\mathbf{k}}(m) \in U(N)$ によって

$$\hat{m} \Psi(\mathbf{k})^\dagger \hat{m}^{-1} = \Psi(m\mathbf{k})^\dagger \mu^{\mathbf{k}}(m), \quad \forall \mathbf{k} \quad (2.40)$$

と変換するものが存在するとする。ただし、 $\mu^{\mathbf{k}}(m)$ は任意の波数 \mathbf{k} と逆格子ベクトル \mathbf{K} および 任意の $m, m' \in M$ に対して、乗数系 $\omega_{\text{in}}: M \times M \rightarrow U(1)$ が存在して次の条件を満たすものとする¹⁸⁾

$$\mu^{m'\mathbf{k}}(m) \mu^{\mathbf{k}}(m')^m = \omega_{\text{in}}(m, m') \mu^{\mathbf{k}}(mm') \quad (2.41a)$$

$$\mu^{\mathbf{k}+\mathbf{K}}(m) = \mu^{\mathbf{k}}(m) \quad (2.41b)$$

また、特に並進部分群の元 $\{E|\mathbf{T}\} \in \mathbb{T}$ に対しては $\mu^{\mathbf{k}}(\{E|\mathbf{T}\}) = e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{T}} \mathbf{1}_N$ とする¹⁹⁾。このとき、ハミルトニアン \hat{H} が M 対称であるとは、任意の $m \in M$ に対して $\hat{m} \hat{H} \hat{m}^{-1} = \hat{H}$ が成り立つことである。

上の定義より、各波数 \mathbf{k} ごとに見たハミルトニアン行列 $H(\mathbf{k})$ に対しては対称性は次のように定められる。

定義 2.22 M を磁気空間群とする。 N 次元ハミルトニアン $H(\mathbf{k})$ が M 対称であるとは、 $m \in M$ に対してユニタリ行列 $\mu^{\mathbf{k}}(m) \in U(N)$ が存在して

$$\mu^{\mathbf{k}}(m) H(\mathbf{k})^m \mu^{\mathbf{k}}(m)^\dagger = H(m\mathbf{k}), \quad \forall \mathbf{k}, \forall m \in M \quad (2.42)$$

18) 乗数系 ω_{in} の添字は、特にスピンなどの内部自由度に起因するものであることを強調している。2.5 節で導入する非共型対称性に起因する乗数系 ω_{ns} と区別するためにこのような添字を用いた。

19) 本稿では Fourier 変換を真面目に導入していないのでやや天下りのだが、実空間表示の演算子から出発して、それに対する並進操作を適切に考えればこの表現が自然に導かれる。

が成り立つことである． $\mu^{\mathbf{k}}(m)$ に関する条件は定義 2.21 と同一である．

例 2.5 特に，ハミルトニアン $H(\mathbf{k})$ が空間反転対称性 I および時間反転対称性 \mathcal{T} をもつとは，それぞれ

$$\mu^{\mathbf{k}}(I)H(\mathbf{k})\mu^{\mathbf{k}}(I)^{\dagger} = H(-\mathbf{k}) \quad (2.43)$$

$$\mu^{\mathbf{k}}(\mathcal{T})H(\mathbf{k})^*\mu^{\mathbf{k}}(\mathcal{T})^{\dagger} = H(-\mathbf{k}) \quad (2.44)$$

を満たす適当な $\mu^{\mathbf{k}}(I)$, $\mu^{\mathbf{k}}(\mathcal{T})$ が存在することである．

例 2.6 例 1.2 で考えた 2 次元正方格子上的 d 波超伝導体のハミルトニアンについて，結晶対称性を考えてみよう．空間反転対称性，4 回回転対称性，時間反転対称性に対応するユニタリ行列をそれぞれ $\mu(I) = \sigma_0$, $\mu(C_4) = e^{-i\frac{\pi}{4}\sigma_z}$, $\mu(\mathcal{T}) = i\sigma_y$ とすると，正常状態のハミルトニアンは

$$\mu(I)H_N(\mathbf{k})\mu(I)^{\dagger} = H_N(-\mathbf{k}) \quad (2.45a)$$

$$\mu(C_4)H_N(\mathbf{k})\mu(C_4)^{\dagger} = H_N(C_4\mathbf{k}) \quad (2.45b)$$

$$\mu(\mathcal{T})H_N(\mathbf{k})^*\mu(\mathcal{T})^{\dagger} = H_N(-\mathbf{k}) \quad (2.45c)$$

を満たす．さらに，

$$U(I) = \begin{bmatrix} \mu(I) & 0 \\ 0 & \mu(I)^* \end{bmatrix}, \quad U(C_4) = \begin{bmatrix} \mu(C_4) & 0 \\ 0 & -\mu(C_4)^* \end{bmatrix}, \quad U(\mathcal{T}) = \begin{bmatrix} \mu(\mathcal{T}) & 0 \\ 0 & \mu(\mathcal{T})^* \end{bmatrix} \quad (2.46)$$

とおけば，BdG ハミルトニアンに対して

$$U(I)H_{\text{BdG}}(\mathbf{k})U(I)^{\dagger} = H_{\text{BdG}}(-\mathbf{k}) \quad (2.47a)$$

$$U(C_4)H_{\text{BdG}}(\mathbf{k})U(C_4)^{\dagger} = H_{\text{BdG}}(C_4\mathbf{k}) \quad (2.47b)$$

$$U(\mathcal{T})H_{\text{BdG}}(\mathbf{k})^*U(\mathcal{T})^{\dagger} = H_{\text{BdG}}(-\mathbf{k}) \quad (2.47c)$$

が成り立つので，この系は空間反転対称性，4 回回転対称性，時間反転対称性をもつ．

上の例のように，BdG ハミルトニアンの対称性 m を表すユニタリ行列 $U^{\mathbf{k}}(m)$ は，正常状態のハミルトニアンの対称性 m を表すユニタリ行列 $\mu^{\mathbf{k}}(m)$ を用いて

$$U^{\mathbf{k}}(m) = \begin{bmatrix} \mu^{\mathbf{k}}(m) & 0 \\ 0 & \chi_m \mu^{-\mathbf{k}}(m)^* \end{bmatrix} \quad (2.48)$$

と定義すればよい．ただし， $\chi_m \in U(1)$ は超伝導秩序変数の対称性を表し，

$$\mu^{\mathbf{k}}(m)\Delta(\mathbf{k})^m\mu^{-\mathbf{k}}(m)^{\top} = \chi_m\Delta(m\mathbf{k}) \quad (2.49)$$

によって定められる.²⁰⁾

磁気空間群の対称性に加えて、もう 1 つ重要なのが次の粒子正孔対称性である。

定義 2.23 N 次元ハミルトニアン $H(\mathbf{k})$ が**粒子正孔対称性 (particle-hole symmetry) \mathcal{P}** をもつとは、ユニタリ行列 $\mu(\mathcal{P}) \in U(N)$ が存在して

$$\mu(\mathcal{P})H(\mathbf{k})^*\mu(\mathcal{P})^\dagger = -H(-\mathbf{k}), \quad \forall \mathbf{k} \quad (2.50)$$

が成り立つことである。

BdG ハミルトニアン (1.6) は粒子正孔対称性をもつ。実際, $2N$ 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, 式 (1.3a), (1.3b) の性質より $\mu(\mathcal{P})H_{\text{BdG}}(\mathbf{k})^*\mu(\mathcal{P})^\dagger = -H_{\text{BdG}}(-\mathbf{k})$ を満たすことが確かめられる。したがって, 超伝導体中では粒子正孔対称性は常に存在すると考えてよい。²¹⁾

1.2 節の最後に軽く触れたように, 粒子正孔対称性をもつハミルトニアンは \mathbf{k} - E 空間で点対称なエネルギーバンドをもつ。実際, \mathbf{k} 点のハミルトニアン $H(\mathbf{k})$ の n 番目の固有値 $\varepsilon^{(n)}(\mathbf{k})$ に対する固有ベクトルを $v^{(n)}(\mathbf{k})$ とする, すなわち $H(\mathbf{k})v^{(n)}(\mathbf{k}) = \varepsilon^{(n)}(\mathbf{k})v^{(n)}(\mathbf{k})$ とすると,

$$\begin{aligned} H(-\mathbf{k})[\mu(\mathcal{P})v^{(n)}(\mathbf{k})^*] &= -\mu(\mathcal{P})[H(\mathbf{k})v^{(n)}(\mathbf{k})]^* \\ &= -\mu(\mathcal{P})[\varepsilon^{(n)}(\mathbf{k})v^{(n)}(\mathbf{k})]^* = -\varepsilon^{(n)}(\mathbf{k})[\mu(\mathcal{P})v^{(n)}(\mathbf{k})^*] \end{aligned} \quad (2.51)$$

が成り立つ (簡単のため縮退がない状況を考えてが, 縮退があっても同様である)。したがって, $-\mathbf{k}$ 点でのハミルトニアン $H(-\mathbf{k})$ は必ず固有値 $-\varepsilon^{(n)}(\mathbf{k})$ の固有ベクトル $\mu(\mathcal{P})v^{(n)}(\mathbf{k})^*$ をもつ。

2.4.2 小群とエネルギーバンド

本稿の最終目的は, 正常状態のフェルミ面が Brillouin ゾーンのある波数 \mathbf{k} に存在するとき, 超伝導状態において \mathbf{k} 上にギャップが開くか (有限の非対角要素が許されるか) を調べることである。そのために, 特定の波数点に絞って議論を行うことができる小群という概念を導入する。

定義 2.24 G を空間群, \mathbf{k} を波数とする。群 G に含まれる対称操作のうち, 逆格子ベクトル分の並進を許して \mathbf{k} 点を保存するような元だけを集めた集合

$$\mathcal{G}^{\mathbf{k}} := \{g \in G \mid g\mathbf{k} = \mathbf{k} + \mathbf{K}, \exists \mathbf{K} : \text{逆格子ベクトル}\} \quad (2.52)$$

20) 超伝導秩序変数が 2 次元以上の表現に属する場合は一般に自発的対称性の破れがあるため, $H_N(\mathbf{k})$ が対称性 m をもっていても $H_{\text{BdG}}(\mathbf{k})$ はもっていない ($U^{\mathbf{k}}(m)$ が定義できない) ことがある。式 (2.49) では暗に 1 次元表現に属する秩序変数を仮定している。他方, 例えば 2 次元表現 Γ に属する秩序変数は $\Delta(\mathbf{k}) = c_1\Delta_1(\mathbf{k}) + c_2\Delta_2(\mathbf{k})$ のように書いて, 各 $\Delta_i(\mathbf{k})$ について

$$\mu^{\mathbf{k}}(m)\Delta_j(\mathbf{k})^m\mu^{-\mathbf{k}}(m)^\top = \Delta_i(m\mathbf{k})\Gamma(m)_{ij}$$

のように変換する。

21) このような考え方は正確ではないという立場もあるようだが [58], 詳細は筆者も理解できていない。本稿では定義 2.23 の「粒子正孔対称性」に限って考えることにし, それは本文中で示したようにすべての BdG ハミルトニアンに対して保存される。

を考えると、これは G の部分群をなす。このような群を点 \mathbf{k} の**小群 (little group)** と呼び、 $\mathcal{G}^{\mathbf{k}}$ という記号で表す。同様に、磁気空間群 M に対して \mathbf{k} を保存するような部分群 $\mathcal{M}^{\mathbf{k}}$ を構成することができ、これを点 \mathbf{k} の**磁気小群 (magnetic little group)** と呼ぶ。また、上のような「 $g\mathbf{k} = \mathbf{k} + \mathbf{K}, \exists \mathbf{K} : \text{逆格子ベクトル}$ 」という条件を合同関係として $g\mathbf{k} \equiv \mathbf{k}$ と書くことにする。

定義 2.25 小群の既約 PUA 表現のうち、並進部分群 \mathbb{T} の元に対する表現行列が式 (2.16) のようになるものを**小表現 (small representation)** という。同様に、磁気小群の既約 PUA 表現で式 (2.16) を満たすものを**小複表現 (small corepresentation)** という。

命題 2.4 M を磁気空間群、 $H(\mathbf{k})$ を M 対称なハミルトニアンとする。このとき、任意の波数 \mathbf{k} に対して $H(\mathbf{k})$ の対称性を表すユニタリ行列 $\mu^{\mathbf{k}}$ は磁気小群 $\mathcal{M}^{\mathbf{k}}$ の PUA 表現となる。

証明 定義 2.21 より、任意の $m, m' \in \mathcal{M}^{\mathbf{k}}$ に対して $\mu^{\mathbf{k}}(m)\mu^{\mathbf{k}}(m')^m = \omega_{\text{in}}(m, m')\mu^{\mathbf{k}}(mm')$ となる。□

命題 2.4 より、 $\mu^{\mathbf{k}}$ は $\mathcal{M}^{\mathbf{k}}$ の PUA 表現であり、一般には可約である。したがって、あるユニタリ行列 $V(\mathbf{k})$ によって各表現行列 $\mu^{\mathbf{k}}(m)$ は

$$V(\mathbf{k})^\dagger \mu^{\mathbf{k}}(m) V(\mathbf{k})^m = \bigoplus_{n=1}^k \mu^{(n), \mathbf{k}}(m), \quad \forall m \in \mathcal{M}^{\mathbf{k}} \quad (2.53)$$

と既約表現 $\mu^{(n), \mathbf{k}}$ (次元を $d^{(n)}$ とする) の直和としてブロック対角化することができる。また、 $m \in \mathcal{M}^{\mathbf{k}}$ に対して $\mu^{\mathbf{k}}(m)H(\mathbf{k})^m\mu^{\mathbf{k}}(m)^\dagger = H(\mathbf{k})$ となるから、Schur の補題 (命題 2.3) より $H(\mathbf{k})$ は

$$V(\mathbf{k})^\dagger H(\mathbf{k}) V(\mathbf{k}) = \bigoplus_{n=1}^k \varepsilon^{(n)}(\mathbf{k}) \mathbf{1}_{d^{(n)}}, \quad \varepsilon^{(n)}(\mathbf{k}) \in \mathbb{R} \quad (2.54)$$

のように同時に対角化されることが分かる。一般に $\varepsilon^{(1)}(\mathbf{k}), \dots, \varepsilon^{(k)}(\mathbf{k})$ はすべて異なるので、小複表現 $\mu^{(n), \mathbf{k}}$ の次元 $d^{(n)}$ はエネルギー固有値 $\varepsilon^{(n)}(\mathbf{k})$ の**縮退度 (degeneracy)** を表す。

$\varepsilon^{(n)}(\mathbf{k})$ を \mathbf{k} の関数として見たものはまさしくエネルギーバンドである。次のような議論により、エネルギーバンドの固有状態は各 \mathbf{k} 点の磁気小群の既約表現によって理解することが可能になる。式 (2.54) より、 $V(\mathbf{k})$ の各列はハミルトニアン $H(\mathbf{k})$ のエネルギー固有ベクトルを表している。固有値 $\varepsilon^{(n)}(\mathbf{k})$ に対応する固有ベクトルのうち i 番目 ($i = 1, \dots, d^{(n)}$) のものを $v_i^{(n)}(\mathbf{k})$ と書く：

$$V(\mathbf{k}) = \begin{bmatrix} v_1^{(1)}(\mathbf{k}) & \dots & v_{d^{(1)}}^{(1)}(\mathbf{k}) & v_1^{(2)}(\mathbf{k}) & \dots & v_{d^{(2)}}^{(2)}(\mathbf{k}) & \dots & v_1^{(n)}(\mathbf{k}) & \dots & v_{d^{(n)}}^{(n)}(\mathbf{k}) \end{bmatrix} \quad (2.55)$$

このとき、式 (2.53) より

$$\mu^{\mathbf{k}}(m)v_j^{(n)}(\mathbf{k})^m = v_i^{(n)}(\mathbf{k})\mu^{(n), \mathbf{k}}(m)_{ij} \quad (2.56)$$

となり、 $\{v_i^{(n)}(\mathbf{k})\}_{i=1}^{d^{(n)}}$ は既約表現 $\mu^{(n), \mathbf{k}}$ の表現基底をなすことが分かる。

2.4.3 Bloch 状態

ハミルトニアン (2.39) を考える．式 (2.55) で導入した， $H(\mathbf{k})$ の固有ベクトル $v_i^{(n)}(\mathbf{k})$ を用いて

$$\phi_i^{(n)}(\mathbf{k})^\dagger := \Psi(\mathbf{k})^\dagger v_i^{(n)}(\mathbf{k}) \quad (2.57)$$

と定義すると，ハミルトニアンは

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon^{(n)}(\mathbf{k}) \phi_i^{(n)}(\mathbf{k})^\dagger \phi_i^{(n)}(\mathbf{k}) \quad (2.58)$$

のように対角化される．このとき，対応する一電子状態

$$|\mathbf{k}, n\rangle_i := \phi_i^{(n)}(\mathbf{k})^\dagger |\text{vac}\rangle \quad (2.59)$$

は **Bloch 状態** と呼ばれる ($|\text{vac}\rangle$ は真空状態)．

命題 2.5 Bloch 状態は

$$\hat{m} |\mathbf{k}, n\rangle_j = |\mathbf{k}, n\rangle_i \mu^{(n), \mathbf{k}}(m)_{ij}, \quad \forall m \in \mathcal{M}^{\mathbf{k}} \quad (2.60)$$

を満たす．

証明 式 (2.56) および $\hat{m} |\text{vac}\rangle = |\text{vac}\rangle$ を用いると，

$$\begin{aligned} \hat{m} |\mathbf{k}, n\rangle_j &= \hat{m} \Psi(\mathbf{k})^\dagger v_j^{(n)}(\mathbf{k}) |\text{vac}\rangle \\ &= [\hat{m} \Psi(\mathbf{k})^\dagger \hat{m}^{-1}] \hat{m} v_j^{(n)}(\mathbf{k}) |\text{vac}\rangle \\ &= \Psi(\mathbf{k})^\dagger \mu^{\mathbf{k}}(m) v_j^{(n)}(\mathbf{k}) \hat{m} |\text{vac}\rangle \\ &= \Psi(\mathbf{k})^\dagger v_i^{(n)}(\mathbf{k}) \mu^{(n), \mathbf{k}}(m)_{ij} |\text{vac}\rangle = |\mathbf{k}, n\rangle_i \mu^{(n), \mathbf{k}}(m)_{ij} \end{aligned} \quad (2.61)$$

となる．したがって，Bloch 状態は磁気小群 $\mathcal{M}^{\mathbf{k}}$ の既約表現 $\mu^{(n), \mathbf{k}}$ の表現基底をなす． \square

2.5 小複表現の取り扱い

ここまで，磁気小群 $\mathcal{M}^{\mathbf{k}}$ の既約 PUA 表現 (小複表現) $\mu^{(n), \mathbf{k}}$ を導入し，それは各 \mathbf{k} 点の Bloch 状態を基底にもつ表現行列であることを示してきた．したがって，与えられたハミルトニアンから求める各エネルギーバンドや Bloch 状態の性質を調べるためには小複表現の情報が得られれば良い．ところが，磁気小群 $\mathcal{M}^{\mathbf{k}}$ は無数の元をもつ並進部分群 \mathbb{T} をもつため，そのままでは取り扱いが少し面倒である．そこで， $\mathcal{M}^{\mathbf{k}}$ の \mathbb{T} による剰余群 (これは有限群である) を考え，その上の PUA 表現を考えるということがよく行われる．本節ではこの手法について見ていく．また，実際に表現を構築する際にはユニタリな操作だけを最初に考え，後から (存在すれば) 反ユニタリな操作を考慮するというを行う．これを機械的に行える Wigner の判定条件についても紹介する．

2.5.1 磁気小点群とその表現

上記のような目的から，(磁気) 小群の並進群による剰余群を導入する．

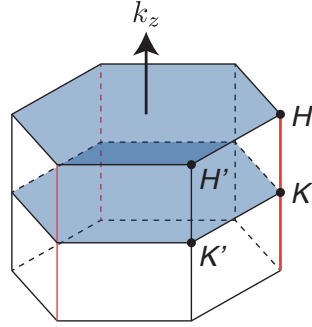


図 3 単純六方格子における Brillouin ゾーン.

定義 2.26 \mathcal{G}^k を小群とする. \mathcal{G}^k は並進群 \mathbb{T} を正規部分群にもつので, 剰余群 $\bar{\mathcal{G}}^k := \mathcal{G}^k / \mathbb{T}$ を定義することができる. これを**小点群 (little cogroup)**と呼ぶ.²²⁾同様に, 磁気小群 \mathcal{M}^k の並進群 \mathbb{T} による剰余群 $\bar{\mathcal{M}}^k := \mathcal{M}^k / \mathbb{T}$ を**磁気小点群 (magnetic little cogroup)**と呼ぶ. (磁気) 小点群には同型な (磁気) 点群が存在する.

例 2.7 例 2.2 で扱った空間群 $P6_3/mmc$ に時間反転操作 $\mathcal{T} = \{T|\mathbf{0}\}$ を加えた磁気空間群 $P6_3/mmc1'$ (#194.264) を考える. Brillouin ゾーンは図 3 に示されている.

- k として, 図 3 の青い領域で示す面 $k_z = 0, \pi/c$ 上の一般点をとる. これは鏡映 $\mathcal{M}_z = \{M_z|\frac{c}{2}\hat{z}\}$ および空間・時間反転操作の合成 $\mathfrak{T} = \{T|\mathbf{0}\}$ で不変なので, (磁気) 小群は

$$\mathcal{G}^{k_z=0, \pi/c} = \mathbb{T} \sqcup \mathcal{M}_z \mathbb{T} \quad (2.62a)$$

$$\mathcal{M}^{k_z=0, \pi/c} = \mathcal{G}^{k_z=0, \pi/c} \sqcup \mathfrak{T} \mathcal{G}^{k_z=0, \pi/c} \quad (2.62b)$$

のようになる. 小点群 $\bar{\mathcal{G}}^{k_z=0, \pi/c}$ は点群 $C_s = \{E, M_z\}$ と同型である.

- k として, 図 3 の赤線で示す $K-H$ 軸上の一般点をとる. これは 3 回回転 $C_{3z} = \{C_{3z}|\mathbf{0}\}$ および空間・時間反転操作の合成 \mathfrak{T} で不変なので, (磁気) 小群は

$$\mathcal{G}^{K-H} = \mathbb{T} \sqcup C_{3z} \mathbb{T} \sqcup C_{3z}^{-1} \mathbb{T} \quad (2.63a)$$

$$\mathcal{M}^{K-H} = \mathcal{G}^{K-H} \sqcup \mathfrak{T} \mathcal{G}^{K-H} \quad (2.63b)$$

のようになる. 小点群 $\bar{\mathcal{G}}^{K-H}$ は点群 $C_3 = \{E, C_{3z}, C_{3z}^{-1}\}$ と同型である.

磁気空間群 M に対し, 内部自由度に起因する乗数系 $\omega_{\text{in}}: M \times M \rightarrow \text{U}(1)$ をもつような表現を考えよう. ある波数 k を固定し, $\mu^{(n),k}$ を磁気小群 \mathcal{M}^k の小複表現, すなわち,

$$\mu^{(n),k}(m_1)\mu^{(n),k}(m_2)^{m_1} = \omega_{\text{in}}(m_1, m_2)\mu^{(n),k}(m_1 m_2), \quad \forall m_1, m_2 \in \mathcal{M}^k \quad (2.64)$$

22) 小点群という用語がどのくらい適切かは分からないが, 筆者の調べる限り, little cogroup に対応する適当な日本語がなかったので本稿ではこのように名付けることにする. おそらく一般的にはあまり通じないので注意が必要である.

とする．やや天下りの的ではあるが，この小複表現に対応する磁気小点群 $\bar{\mathcal{M}}^k$ の既約表現 $\bar{\mu}^{(n),k}$ を次の式で導入する：

$$\mu^{(n),k}(m) = e^{-ik \cdot \tau_m} \bar{\mu}^{(n),k}(\bar{m}), \quad \tau_m := t_m - t_{\bar{m}}, \quad m \in \mathcal{M}^k \quad (2.65)$$

ここで， $\bar{m} \in \bar{\mathcal{M}}^k$ は剰余類 $m\mathbb{T}$ の適当な代表元であり， t_m は m の並進部分である．²³⁾いま，式 (2.65) を式 (2.64) に代入すると，

$$\bar{\mu}^{(n),k}(\overline{m_1}) \bar{\mu}^{(n),k}(\overline{m_2})^{m_1} = \omega_{\text{in}}(m_1, m_2) \exp[-ik \cdot (\tau_{m_1 m_2} - \tau_{m_1} - \phi(m_1) \tau_{m_2})] \bar{\mu}^{(n),k}(\overline{m_1 m_2}) \quad (2.66)$$

が得られる．したがって式 (2.66) では，非共型対称性に起因する乗数系

$$\omega_{\text{ns}}^k(m_1, m_2) := \exp[-ik \cdot (\tau_{m_1 m_2} - \tau_{m_1} - \phi(m_1) \tau_{m_2})] \quad (2.67)$$

が新たに導入されていることになる．²⁴⁾すなわち，無数の元をもつ \mathcal{M}^k の小複表現 $\mu^{(n),k}$ は，適切な乗数系 $\omega^k := \omega_{\text{in}} \omega_{\text{ns}}^k$ を導入することで有限群 $\bar{\mathcal{M}}^k$ の表現 $\bar{\mu}^{(n),k}$ に落として扱うことができる．乗数系 ω_{ns}^k は考えている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り，その他の場合には自明な値 1 をとる．

ユニタリな小群 \mathcal{G}^k の小表現 $\gamma^{(n),k}$ についても上記と同様に，対応する小点群 $\bar{\mathcal{G}}^k$ の射影ユニタリ表現 $\bar{\gamma}^{(n),k}$ が自然に導入される．

例 2.8 例 2.7 で考えた磁気空間群 $P6_3/mmc1'$ を取り上げる．

- 鏡映面上の磁気小群 $\mathcal{M}^{k_z=0, \pi/c}$ の \mathbb{T} に関する剰余群 $\bar{\mathcal{M}}^{k_z=0, \pi/c}$ を考える場合，非共型対称性に起因する乗数系は一例として次の表のようになる：

$\omega_{\text{ns}}^{k_z=0, \pi/c}$	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	$e^{ik_z c}$	$e^{ik_z c}$

(2.68)

- K - H 軸上の磁気小群 \mathcal{M}^{K-H} に対しては，磁気小点群 $\bar{\mathcal{M}}^{K-H}$ の代表元をうまく取れば任意の $m_1, m_2 \in \mathcal{M}^{K-H}$ に対して $\omega_{\text{ns}}^{K-H}(m_1, m_2) = 1$ とできる．

ここまでの議論で，(磁気) 空間群およびその表現論に関する記号を沢山導入してきた．混乱を避けるため，これらの記号を表 2 にまとめておく．

23) 代表元の並進部分 $t_{\bar{m}}$ を引かなくても (τ_m の代わりに t_m としても) 矛盾なく定義はできる [48–50]．しかし，そのように定義すると逆格子ベクトル \mathbf{K} に対し $\bar{\mu}^{(n),k}$ と $\bar{\mu}^{(n),k+\mathbf{K}}$ が一致しなくなることがあり，あまり気持ち良くないので本稿では τ_m を用いて定義している．

24) ω_{ns} は ω_{in} と同様に 2 コサイクル条件を満たす：

$$\omega_{\text{ns}}^k(m_1, m_2) \omega_{\text{ns}}^k(m_1 m_2, m_3) = \omega_{\text{ns}}^k(m_1, m_2 m_3) \omega_{\text{ns}}^k(m_2, m_3)^{m_1}, \quad \forall m_1, m_2, m_3 \in \mathcal{M}^k$$

表 2 本稿で用いている (磁気) 空間群およびその表現論に関する記号. 1 列目の用語はユニタリ群, 3 列目の用語は (反ユニタリ操作を含む) 非ユニタリ群に関するものである. N/A は該当する適当な用語が (おそらく) ないことを示す.

用語	記法	用語	記法	意味
空間群	G	磁気空間群	M	系のもつ対称性 (対称操作) の集まり
小群	\mathcal{G}^k	磁気小群	\mathcal{M}^k	k 点を保存する操作
小表現	$\gamma^{(n),k}$	小複表現	$\mu^{(n),k}$	(磁気) 小群の既約 PUA 表現
小点群	$\bar{\mathcal{G}}^k$	磁気小点群	$\bar{\mathcal{M}}^k$	(磁気) 小群の並進群 \mathbb{T} による剰余群
N/A	$\bar{\gamma}^{(n),k}$	N/A	$\bar{\mu}^{(n),k}$	(磁気) 小点群の既約 PUA 表現

2.5.2 Wigner の判定条件

ここでは, PUA 表現 $\bar{\mu}^{(n),k}$ をユニタリな表現から構成する方法を示す. いま, 射影ユニタリ表現 $\bar{\gamma}^{(n),k}$ の具体的な表式が分かっているものとし, それに対応する PUA 表現 $\bar{\mu}^{(n),k}$ の表式を求めたいとしよう. それはすなわち, 小点群 $\bar{\mathcal{G}}^k$ にある反ユニタリ操作 \mathfrak{T} が加わって磁気小点群 $\bar{\mathcal{M}}^k = \bar{\mathcal{G}}^k \sqcup \mathfrak{T}\bar{\mathcal{G}}^k$ となったときに, 付加的な縮退が起きるかという問題に帰着する.²⁵⁾ この問題の解決策は既に知られており, **Wigner の判定条件 (Wigner's criterion)** [48, 49, 59, 60] と呼ばれる以下の式を評価すればよい:

$$W_{\mathfrak{T}}^{(n),k} := \frac{1}{|\bar{\mathcal{G}}^k|} \sum_{\bar{g} \in \bar{\mathcal{G}}^k} \omega^k(\mathfrak{T}g, \mathfrak{T}g) \text{tr}[\bar{\gamma}^{(n),k}((\mathfrak{T}g)^2)] = \begin{cases} 1 & \text{(a)} \\ -1 & \text{(b)} \\ 0 & \text{(c)} \end{cases} \quad (2.69)$$

この判定式の結果に応じて, PUA 表現 $\bar{\mu}^{(n),k}$ は次のように定められる. 定義 2.20 に従って, \mathfrak{T} による表現 $\bar{\gamma}^{(n),k}$ のマップを $\bar{\gamma}_{\mathfrak{T}}^{(n),k}(\bar{g}) := \frac{\omega^k(g, \mathfrak{T})}{\omega^k(\mathfrak{T}, \mathfrak{T}^{-1}g\mathfrak{T})} \bar{\gamma}^{(n),k}(\mathfrak{T}^{-1}g\mathfrak{T})^*$ と定めると²⁶⁾

$$\bar{\mu}^{(n),k}(\bar{g}) = \begin{cases} \bar{\gamma}^{(n),k}(\bar{g}) & \text{(a)} \\ \begin{bmatrix} \bar{\gamma}^{(n),k}(\bar{g}) & 0 \\ 0 & \bar{\gamma}^{(n),k}(\bar{g}) \end{bmatrix} & \text{(b)} \\ \begin{bmatrix} \bar{\gamma}^{(n),k}(\bar{g}) & 0 \\ 0 & \bar{\gamma}_{\mathfrak{T}}^{(n),k}(\bar{g}) \end{bmatrix} & \text{(c)} \end{cases} \quad \bar{\mu}^{(n),k}(\mathfrak{T}) = \begin{cases} U & \text{(a)} \\ \begin{bmatrix} 0 & -U \\ U & 0 \end{bmatrix} & \text{(b)} \\ \begin{bmatrix} 0 & \omega^k(\mathfrak{T}, \mathfrak{T}) \bar{\gamma}^{(n),k}(\mathfrak{T}^2) \\ 1 & 0 \end{bmatrix} & \text{(c)} \end{cases} \quad (2.70)$$

となる. ただし $\bar{g} \in \bar{\mathcal{G}}^k$ であり, U は $\bar{\gamma}_{\mathfrak{T}}^{(n),k}(\bar{g}) = U^\dagger \bar{\gamma}^{(n),k}(\bar{g})U$ を満たすユニタリ行列である. 式 (2.70) において, (a) の場合には $\bar{\mu}^{(n),k}(\bar{g})$ は $\bar{\gamma}^{(n),k}(\bar{g})$ と同一の表現行列となる. すなわち, 縮退度 (表現の次元) は反ユニタリ操作 \mathfrak{T} が加わっても変わらない. 他方, (b) や (c) の場合には付加的な縮退が生じ, 表現 $\bar{\mu}^{(n),k}$ の次元は $\bar{\gamma}^{(n),k}$ の 2 倍になる. これは, いわゆる Kramers 縮退と呼ばれるものの一般化に対応している.

²⁵⁾ 考えている磁気空間群が空間反転操作 \mathcal{I} と時間反転操作 \mathcal{T} をどちらももつ場合は, それらの合成操作 \mathcal{TI} を \mathfrak{T} と定義すればよい. なぜなら, このように定義した \mathfrak{T} は任意の波数 k を保存するので, すべての磁気小点群に含まれるからである.

²⁶⁾ $\bar{\mathcal{G}}^k$ は $\bar{\mathcal{M}}^k$ の正規部分群なので, $\mathfrak{T}\bar{\mathcal{G}}^k\mathfrak{T}^{-1} = \mathfrak{T}^{-1}\bar{\mathcal{G}}^k\mathfrak{T} = \bar{\mathcal{G}}^k$ である.

3 超伝導ギャップ・ノード構造の分類手法

本節では、ここまで準備してきた群の表現論を用いて、超伝導ギャップ構造を対称性の観点から解析する手法について説明する [18, 26–28, 30, 35].

3.1 戦略

詳しい議論に入る前に、どのようにして超伝導ギャップを分類するかを概観しよう．まず、正常状態のハミルトニアン $H_N(\mathbf{k})$ から出発する．Brillouin ゾーンのある波数 \mathbf{k} を固定すると、その波数点上の磁気小群 $M^{\mathbf{k}}$ およびその小複表現 $\mu^{(n),\mathbf{k}}$ を求めることができる．2.4.2 節で見たように、 $\mu^{(n),\mathbf{k}}$ は Bloch 状態 $|\mathbf{k}, n\rangle := \{|\mathbf{k}, n\rangle_i\}_{i=1}^{d^{(n)}}$ の情報をもっており、これは正常状態の n 番目のエネルギーバンド $\varepsilon^{(n)}(\mathbf{k})$ の固有状態になる．いま、フェルミ面上で超伝導ギャップが開くか否かに興味があるので、 $\varepsilon^{(n)}(\mathbf{k}) = 0$ を満たすような n と \mathbf{k} を考えることにする．実用上は、波数 \mathbf{k} として Brillouin ゾーン内の高対称な鏡映面あるいは回転軸上の一般点を取っておき、その領域のどこかをフェルミ面が横切っているという状況を考えるのがよい.²⁷⁾ フェルミ面は 2 次元曲面なので、鏡映面との交差は 1 次元の領域、回転軸との交差は 0 次元の点になる．

一方超伝導状態では、BCS 理論の仮定その 1 より、フェルミ面上の \mathbf{k} 点と $-\mathbf{k}$ 点で対を組むような重心運動量が 0 の Cooper 対が形成される．実際、1.3.1 節で述べたように、空間反転対称性 I と時間反転対称性 \mathcal{T} の少なくとも一方の存在を仮定すると、²⁸⁾ \mathbf{k} にフェルミ面が存在すれば $-\mathbf{k}$ にもフェルミ面が存在することが保証される．すなわち、 $d_\alpha := I$ または \mathcal{T} とすると、 $-\mathbf{k}$ 点の Bloch 状態 $|\mathbf{k}, n\rangle = d_\alpha |\mathbf{k}, n\rangle$ が得られる (記号 d_α は後の記述に合わせるために導入している)．したがって、 \mathbf{k} における超伝導ギャップ関数 (Cooper 対波動関数) は、おおよそこれら 2 つの Bloch 状態の直積 $|\mathbf{k}, n\rangle \otimes |\mathbf{k}, n\rangle$ を基底とする表現に従う．実際、これは同一のバンド番号 n をもつ 2 状態から構成されるので、まさしく求めたいバンド内秩序変数になっていることが分かる (1.3.3 節を参照)．ただし、秩序変数は式 (1.3b) で示したような性質 (フェルミオンの反可換性) を満たす必要があるもので、実際には上の表現を反対称化したものが求める超伝導ギャップの表現になる．

以下では、上記のような戦略に従って超伝導ギャップの表現を実際に計算する方法を導入する．具体的には、Mackey–Bradley の定理と呼ばれる表現論における定理を利用することで系統的に計算をすることができる．超伝導ギャップを分類するためにこの定理が使えることを示したのはおそらく 1992 年の Yarzhevsky–Murav’ev の論文 [18] が最初であり、次節の議論は彼らのアイデアを元に構成している.²⁹⁾

27) ここで紹介する手法自体は高対称な \mathbf{k} 点に限らず一般の波数で使えるが、あまりに対称性が低すぎる (磁気小点群の元が少なすぎる) と分類を行っても大して有用な情報が得られないので、基本的には高対称点を想定する．

28) 一般に、時間反転操作 $\mathcal{T} = \{T|t_{\mathcal{T}}\}$ は常磁性 (paramagnetic) または反強磁性 (antiferromagnetic) の物質において保存される．並進部分 $t_{\mathcal{T}}$ は常磁性体の場合は零であるが、反強磁性体の場合は並進群に属さない半端な並進になる．他方、強磁性 (ferromagnetic) の物質は時間反転対称性 \mathcal{T} をもたない．

29) 正確には Mackey と Bradley は共同研究をしていた訳ではない．後述する Mackey の分解定理 [61] を根底にして、それを Mackey 自身が誘導表現の直積へ拡張し [62], Bradley らが空間群へ適用した [49, 63]. Yarzhevsky–Murav’ev の論文 [18] が “Mackey–Bradley theorem” という表現の仕方をしているため、本稿でもそれに準じている．

3.2 表現論に基づく超伝導ギャップ・ノードの分類

Mackey–Bradley の定理がどのようなものか実際に見ていこう．そのために，制限表現と誘導表現という概念を導入する必要がある．

定義 3.1 $\mu: M \rightarrow \mathrm{U}(N)$ を群 M の PUA 表現， L を群 M の部分群とする．このとき， μ の L への制限表現 (restricted representation) $(\mu \downarrow L): L \rightarrow \mathrm{U}(N)$ を

$$(\mu \downarrow L)(l) := \mu(l), \quad l \in L \quad (3.1)$$

によって定義する． $\mu \downarrow L$ は $\mu|_L$ などと書くこともある．

例 3.1 磁気空間群として恒等操作と時間反転操作，並進操作のみを含む群 $M = \{E, \mathcal{T}\} \ltimes \mathbb{T}$ を考え，乗数系は $\hat{\mathcal{T}}^2 = -\hat{E}$ で与えられるものとする．

- 原点 (Γ 点) $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ は時間反転不変運動量であるので，磁気小点群は $\bar{M}^0 = \{E, \mathcal{T}\}$ となる．このとき，既約 PUA 表現は 2 次元表現が 1 つ存在して次のようになる．

$$\bar{\mu}^0(E) = \sigma_0, \quad \bar{\mu}^0(\mathcal{T}) = i\sigma_y \quad (3.2)$$

- 時間反転不変運動量ではない一般の波数 \mathbf{k} では，磁気小点群は自明な群 $\bar{M}^{\mathbf{k}} = \{E\}$ となる．よって自明な 1 次元既約表現 $\bar{\mu}^{\mathbf{k}}(E) = 1$ が 1 つある．

上記が意味することは，原点ではエネルギーバンドが必ず 2 重縮退しており，その周りの一般点では縮退が解けているということである．実際，表現 $\bar{\mu}^0$ の自明な群 $\{E\}$ への制限表現は $\bar{\mu}^0 \downarrow \{E\} = \bar{\mu}^{\mathbf{k}} \oplus \bar{\mu}^{\mathbf{k}}$ となり，時間反転操作 \mathcal{T} の存在がなくなると 2 つの 1 次元表現に直和分解されることが分かる．このように，部分群への制限表現を考えることで，対称性が高い波数から低い波数へエネルギーバンドがどのように繋がっているかを調べることができる．このような関係を**適合関係 (compatibility relation)** という．

定義 3.2 L を群 M の部分群とし， M を L の左剰余類に分解する：

$$M = \bigsqcup_{\alpha=1}^{N_2} q_\alpha L, \quad q_1 = E \quad (3.3)$$

ただし $N_2 := [M : L]$ である．このとき，乗数系 $\omega: M \times M \rightarrow \mathrm{U}(1)$ をもつ L の N_1 次元 PUA 表現 $\mu: M \rightarrow \mathrm{U}(N_1)$ の**誘導表現 (induced representation)** $(\mu \uparrow M): L \rightarrow \mathrm{U}(N_1 N_2)$ とは次で定義される群 M の PUA 表現のことである．

$$(\mu \uparrow M)(m) := \begin{cases} \frac{\omega(m, q_\beta)}{\omega(q_\alpha, q_\alpha^{-1} m q_\beta)} \mu(q_\alpha^{-1} m q_\beta)^{q_\alpha} & q_\alpha^{-1} m q_\beta \in L \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (3.4)$$

$\mu \uparrow M$ は μ^M などと書くこともある。

制限表現は、大きい群の表現は小さい部分群に制限しても成り立つ、ということなので比較的理解しやすいが、誘導表現については少し説明が必要だろう。 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、この基底と左剰余類分解 (3.3) を用いてより大きい群 M の表現を構成したい。そこで、形式的に $\widehat{q_\beta} |\psi\rangle$ という基底を導入すると、 $q_\alpha^{-1} m q_\beta \in L$ であれば

$$\begin{aligned} \hat{m}(\widehat{q_\beta} |\psi\rangle_j) &= \omega(m, q_\beta) \widehat{m q_\beta} |\psi\rangle_j \\ &= \frac{\omega(m, q_\beta)}{\omega(q_\alpha, q_\alpha^{-1} m q_\beta)} \widehat{q_\alpha} \left(\widehat{q_\alpha^{-1} m q_\beta} |\psi\rangle_j \right) \\ &= \frac{\omega(m, q_\beta)}{\omega(q_\alpha, q_\alpha^{-1} m q_\beta)} \widehat{q_\alpha} \left(|\psi\rangle_i \mu(q_\alpha^{-1} m q_\beta)_{ij} \right) = (\widehat{q_\alpha} |\psi\rangle_i) \frac{\omega(m, q_\beta)}{\omega(q_\alpha, q_\alpha^{-1} m q_\beta)} \mu(q_\alpha^{-1} m q_\beta)_{ij}^{q_\alpha} \end{aligned} \quad (3.5)$$

となることが確かめられる。よって、基底 $\{\widehat{q_\alpha} |\psi\rangle_i\}_{i=1, \dots, N_1; \alpha=1, \dots, N_2}$ は式 (3.4) で定められる $N_1 N_2$ 次元 PUA 表現の基底をなす。この誘導表現の概念を用いることで、磁気小群 M^k の表現 μ^k から磁気空間群 M の表現 $\mu^k \uparrow M$ を構成することができる。

制限表現と誘導表現に関して重要なのが次の定理である。

定理 3.1 (Mackey の分解定理 [61, 64]) M を群、 $\omega: M \times M \rightarrow \mathbb{U}(1)$ を乗数系とする。 M の部分群 M, N を取り、その (M, N) -両側剰余類分解を

$$M = \coprod_{\alpha} M d_{\alpha} N, \quad d_1 = E \quad (3.6)$$

とする。また、 $N_{\alpha} := d_{\alpha} N d_{\alpha}^{-1}$ と定義し、乗数系 ω をもつ N の任意の PUA 表現 μ に対して、 d_{α} による N_{α} への μ のマップを μ_{α} とする：

$$\mu_{\alpha}(d_{\alpha} m d_{\alpha}^{-1}) = \frac{\omega(d_{\alpha} m d_{\alpha}^{-1}, d_{\alpha})}{\omega(d_{\alpha}, m)} \mu(m)^{d_{\alpha}}, \quad \forall m \in N \quad (3.7)$$

このとき、 $\mathcal{L}_{\alpha} := M \cap N_{\alpha}$ とすると次が成り立つ。

$$(\mu \uparrow M) \downarrow M \simeq \bigoplus_{\alpha} (\mu_{\alpha} \downarrow \mathcal{L}_{\alpha}) \uparrow M \quad (3.8)$$

証明 付録 A を参照のこと。 □

定理 3.1 は有限群の表現論における強力な道具として知られている。ところで、Bloch 状態を表す表現として $\mu^{(n), k}$ を導入してきた訳であるが、超伝導では 2 電子が対を作るので 3.1 節で述べたようにこの表現の直積のようなものを考えたい。そこで、Mackey の分解定理の直積表現への拡張を行ったのが次の定理である。

定理 3.2 (Mackey–Bradley の定理 [49, 62–64]) 定理 3.1 の前提条件で $M = N$ としたものを考え、群 $\mathcal{L}_\alpha = M \cap M_\alpha$ の PUA 表現 $v_\alpha := (\mu_\alpha \otimes \mu) \downarrow \mathcal{L}_\alpha$ を導入する．次に、 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、 $d_\alpha M \cap Md_\alpha^{-1}$ は空でないで、その共通部分の元 $z = d_\alpha m = m' d_\alpha^{-1}$ ($m, m' \in M$) を一つ固定する． $\mathcal{K}_\alpha := \mathcal{L}_\alpha \sqcup z \mathcal{L}_\alpha$ とすると、 \mathcal{L}_α は \mathcal{K}_α の指数 2 の正規部分群である．行列 S を

$$S_{ji,kl} := \frac{\omega(z, d_\alpha)}{\omega(d_\alpha, d_\alpha^{-1} z)} \mu(m')_{ik} \mu(m)_{jl}^{d_\alpha} \quad (3.9)$$

によって定義すると、表現 v_α の群 \mathcal{K}_α への拡張 v_α^+ と v_α^- が存在して、 $v_\alpha^\pm(z) = \pm S$ となる．以上を用いると、誘導表現の直積に関して

$$[(\mu \uparrow M) \otimes (\mu \uparrow M)]_\pm \simeq ([\mu \otimes \mu]_\pm \uparrow M) \oplus \left(\bigoplus_{\alpha \in A} v_\alpha^+ \uparrow M \right) \oplus \left(\bigoplus_{\beta \in B} v_\beta \uparrow M \right) \quad (3.10)$$

が導かれる．

証明 特に自己逆元な両側剰余類に関する表現 v_α^\pm の構成が重要であるので、付録 B にその部分を示した．定理全体の証明については、文献 [49, 63] を参照されたい． \square

ようやく Mackey–Bradley の定理が登場したが、このままでは超伝導ギャップとどのような関係があるのか理解するのは難しい．そこで、議論を分かりやすくするために次の命題を導入しよう．

命題 3.1 定理 3.2 において、 M が空間反転操作 I または時間反転操作 \mathcal{T} を含むような磁気空間群であるとする．また、時間反転不変運動量でないような k を取り、 M の部分群 M として磁気小群 M^k を考えると、 $I, \mathcal{T} \notin M^k$ となる．³⁰⁾ このとき、次の 3 つの性質が成り立つ．

- 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．すなわち、 $d_\alpha k \equiv -k$ となるような元 d_α に対し $\alpha \in A$ である．
- 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．
- 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 以下のように比較的容易に示すことができる．

- 仮定より $d_\alpha \notin M^k$ であり、かつ $d_\alpha^2 k \equiv -d_\alpha k \equiv k$ より $d_\alpha^2 \in M^k$ である．したがって $M^k d_\alpha^{-1} M^k = M^k d_\alpha^{-1} d_\alpha^2 M^k = M^k d_\alpha M^k$ となり、 $\alpha \in A$ であることが分かる．

30) 3.1 節で述べたように、Brillouin ゾーンの鏡映面や回転軸上の一般点における超伝導ギャップの分類を考えるので、この仮定は自然である．フェルミ面が時間反転不変運動量びつたりのところにあるという状況はかなり特殊なケースなので除外して考える．

- (ii) 任意の $m \in \mathcal{M}^k$ に対し $mk \equiv k$ であるから, $d_\alpha m d_\alpha^{-1} k \equiv -d_\alpha m k \equiv d_\alpha k \equiv k$ となる. したがって $\mathcal{M}_\alpha^k = d_\alpha \mathcal{M}^k d_\alpha^{-1} = \mathcal{M}^k$ であり, $\mathcal{L}_\alpha = \mathcal{M}^k \cap \mathcal{M}_\alpha^k = \mathcal{M}^k$ が成り立つ.
- (iii) $d_\alpha = d_\alpha E \in d_\alpha \mathcal{M}^k$ かつ $d_\alpha = d_\alpha^2 d_\alpha^{-1} \in \mathcal{M}^k d_\alpha^{-1}$ であるから, $d_\alpha \in d_\alpha \mathcal{M}^k \cap \mathcal{M}^k d_\alpha^{-1}$ が成り立つ.

□

命題 3.1 より, 以下では自明でない自己逆元な両側剰余類 $\alpha \in A$ で, $d_\alpha = z = I$ または \mathcal{T} であるような状況を考えよう. 定理 3.2 において, PUA 表現 μ を磁気小群 \mathcal{M}^k の小複表現 $\mu^{(n),k}$ であるとする, PUA 表現 ν_α は $\nu_\alpha^{(n),k} = \mu_\alpha^{(n),k} \otimes \mu^{(n),k}$ のように書くことができる. $\mu^{(n),k}$ 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. これを反対称化したものが式 (3.10) 右辺の ν_α を $\nu_\alpha^{(n),k,-}$ としたものである. これはまさしく 3.1 節で示した目的の表現になっている! まとめて, 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.³¹⁾

群 $\mathcal{K}_\alpha^k = \mathcal{M}^k + d_\alpha \mathcal{M}^k$ の PUA 表現 $\nu_\alpha^{(n),k,-}$ の指標は, 次の式に従って計算することができる (導出は付録 B を参照).

$$\text{tr}[\nu_\alpha^{(n),k,-}(m)] = \frac{\omega_{\text{in}}(m, d_\alpha)}{\omega_{\text{in}}(d_\alpha, d_\alpha^{-1} m d_\alpha)} \text{tr}[\mu^{(n),k}(d_\alpha^{-1} m d_\alpha)]^{d_\alpha} \text{tr}[\mu^{(n),k}(m)] \quad (3.11a)$$

$$\text{tr}[\nu_\alpha^{(n),k,-}(d_\alpha m)] = -\omega_{\text{in}}(d_\alpha m, d_\alpha m) \text{tr}[\mu^{(n),k}(d_\alpha m d_\alpha m)] \quad (3.11b)$$

ただし, $m \in \mathcal{M}^k$ であり, 2 番目の式では $\phi(d_\alpha m) = 1$ と仮定する.

また, 2.5.1 節で行ったように, 実用上は並進群で適切に割った剰余群で議論するのがよい. よって, 磁気小点群の表現 $\bar{\mu}^{(n),k}$ から出発すると, 群 $\bar{\mathcal{K}}_\alpha^k := \mathcal{K}_\alpha^k / \mathbb{T}$ の PUA 表現 $\bar{\nu}_\alpha^{(n),k,-}$ は乗数系 ω^k を用いて

$$\text{tr}[\bar{\nu}_\alpha^{(n),k,-}(\bar{m})] = \frac{\omega^k(m, d_\alpha)}{\omega^k(d_\alpha, d_\alpha^{-1} m d_\alpha)} \text{tr}[\bar{\mu}^{(n),k}(\overline{d_\alpha^{-1} m d_\alpha})]^{d_\alpha} \text{tr}[\bar{\mu}^{(n),k}(\bar{m})] \quad (3.12a)$$

$$\text{tr}[\bar{\nu}_\alpha^{(n),k,-}(\overline{d_\alpha m})] = -\omega^k(d_\alpha m, d_\alpha m) \text{tr}[\bar{\mu}^{(n),k}(\overline{d_\alpha m d_\alpha m})] \quad (3.12b)$$

のように求めることができる. 式 (3.12) によって PUA 表現 $\bar{\nu}_\alpha^{(n),k,-}$ の指標を求めることができたから, これを群 $\bar{\mathcal{K}}_\alpha^k$ (を点群として見たもの) の既約表現に分解するのがよい.³²⁾ 既約分解の結果にある既約表現が含まれていなかったとすると, その既約表現に対応するバンド内秩序変数はこの k 点で零にならなければならない, すなわち超伝導ノードが存在することが分かる [18]. 逆に, ある既約表現が含まれていれば, 対応する超伝導ギャップ関数は開くことが許される. したがって, 表現 $\bar{\nu}_\alpha^{(n),k,-}$ を求めることで, 高対称な k 点上の超伝導ノードの有無を知ることができる.

31) スピン軌道相互作用がない系では, (スピン部分が完全に分離しているので) 磁気空間群に基づく分類は軌道部分だけを議論していることになる. 特にスピン-重項の超伝導秩序変数について考える場合は, スピン部分が反対称なので軌道部分是对称化されている. よって, このときは反対称化された表現 $\nu_\alpha^{(n),k,-}$ ではなく対称化された表現 $\nu_\alpha^{(n),k,+}$ の方を見ればよい.

32) $\bar{\nu}_\alpha^{(n),k,-}$ は直積 $\mu_\alpha^{(n),k} \otimes \mu^{(n),k}$ から構成された表現なので, 乗数系は $(\omega^k)^2$ をもつ. しかし, ふつう ω^k は ± 1 の値しか取らないので, 結局点群の線形表現で既約分解することができる.

4 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

3 節では、超伝導ギャップ構造の表現論に基づく分類手法を導入した。この手法を用いて、筆者らは Brillouin ゾーンの鏡映面上 [34, 35]・回転軸上 [35, 42] の k 点についてそれぞれ網羅的な分類を行ってきた。本節は、これらの研究によって得られた種々の非自明なギャップ構造の結果を紹介する。3 節の記述は正確性と一般性を重視したためやや抽象的になってしまったので、その理解の助けにもなると思われる。

4.1 鏡映面上の分類：非共型性による非自明ギャップ構造

最初に、Brillouin ゾーンの鏡映面上の分類結果を紹介する。ここでは、**非共型対称性**によってもたらされる乗数系 ω_{ns}^k の波数依存性が非自明なギャップ構造を導く。

4.1.1 例：磁気空間群 $M = P6_3/mmc1'$ (#194.264)

イメージを掴むために、具体例として例 2.7, 2.8 でも扱った磁気空間群 $M = P6_3/mmc1'$ を考えてみよう。例えば、重い電子系超伝導体 UPt_3 はこのような磁気空間群に属すると考えられている。 M は鏡映操作 $M_z = \{M_z | \frac{c}{2}\}$ を含むので、以下の議論では Brillouin ゾーンの鏡映不変な面 $k_z = 0$ および $k_z = \pi/c$ を考えることにする。例 2.7 より、これらの鏡映面上での (磁気) 小群は $\mathfrak{T} = \mathcal{T}I$ となると

$$\mathcal{G}^{k_z=0, \pi/c} = \mathbb{T} \sqcup M_z \mathbb{T} \quad (4.1a)$$

$$\mathcal{M}^{k_z=0, \pi/c} = \mathcal{G}^{k_z=0, \pi/c} \sqcup \mathfrak{T} \mathcal{G}^{k_z=0, \pi/c} = \mathbb{T} \sqcup M_z \mathbb{T} \sqcup \mathfrak{T} \mathbb{T} \sqcup \mathfrak{T} M_z \mathbb{T} \quad (4.1b)$$

となる。(磁気) 小点群はこれらの \mathbb{T} による剰余群 $\bar{\mathcal{G}}^{k_z=0, \pi/c} = \mathcal{G}^{k_z=0, \pi/c} / \mathbb{T}$, $\bar{\mathcal{M}}^{k_z=0, \pi/c} = \mathcal{M}^{k_z=0, \pi/c} / \mathbb{T}$ である。次に、スピン軌道相互作用の存在を考慮すると、乗数系 ω_{in} は

ω_{in}	E	M_z	\mathfrak{T}	$\mathfrak{T} M_z$
E	1	1	1	1
M_z	1	-1	1	-1
\mathfrak{T}	1	1	-1	-1
$\mathfrak{T} M_z$	1	-1	-1	1

(4.2)

と定められる (乗数系は実際には一意に決まらないが、一例として示している)。一方、非共型対称性に起因する乗数系 $\omega_{\text{ns}}^{k_z=0, \pi/c}$ は式 (2.68) に与えられる通りである。非共型対称性のために $\omega_{\text{ns}}^{k_z=0, \pi/c}$ が k_z に依存することに注意しよう。

小点群 $\bar{\mathcal{G}}^{k_z=0, \pi/c}$ の既約射影ユニタリ表現 $\bar{\gamma}_{\pm 1/2}^{k_z=0, \pi/c}$ は、乗数系 (2.68), (4.2) を考慮すると

$$\bar{\gamma}_{\pm 1/2}^{k_z=0, \pi/c}(\bar{E}) = 1, \bar{\gamma}_{\pm 1/2}^{k_z=0, \pi/c}(\bar{M}_z) = \pm i \quad (4.3)$$

で与えられる (何か適当なエネルギーバンドを固定して考えているとし、バンドのインデックス n を省略した). ただし, 添字 $\pm 1/2$ はそれぞれ (半整数) スピンアップ状態とスピンドアウン状態に対応している. スピンアップ状態 (+1/2) を考えると, \mathfrak{T} に対する Wigner の判定条件 [48, 49, 59, 60] は

$$W_{\mathfrak{T}} = \frac{1}{2} \sum_{\tilde{g} \in \{E, \mathcal{M}_z\}} \omega^{k_z=0, \pi/c}(\mathfrak{T}g, \mathfrak{T}g) \text{tr}[\tilde{\gamma}_{+1/2}^{k_z=0, \pi/c} (\overline{(\mathfrak{T}g)^2})]$$

$$= \frac{1}{2}(-1 + e^{ik_z c}) = \begin{cases} 0 & k_z = 0 \\ -1 & k_z = \pi/c \end{cases} \quad (4.4)$$

となる. したがって式 (2.70) より, 磁気小点群 $\bar{\mathcal{M}}^{k_z=0, \pi/c}$ の PUA 表現 $\bar{\mu}^{k_z=0, \pi/c}$ は

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

(4.5)

のように構成することができる. なお, 今の場合にはスピンドアウン状態から出発して構成しても同値な PUA 表現が得られるため, 以下では両者を特に区別しない. 上記の結果から, 磁気小群の元 $m \in \mathcal{M}^{k_z=0, \pi/c}$ に対する小複表現は

$$\mu^{k_z=0, \pi/c}(m) = e^{-i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\tau}_m} \bar{\mu}^{k_z=0, \pi/c}(\bar{m}) \quad (4.6)$$

で与えられる.

ここで, 表現論に基づく超伝導ギャップ・ノードの分類 (3.2 節) を考えよう. いま, M は空間反転操作 I をもつので, 式 (3.12) において $d_\alpha = I$ とする. 正常状態の表現 [式 (4.5)] を用いると, ユニタリな元に対する超伝導ギャップ関数の表現 $\bar{v}_I^{k_z=0, \pi/c; -}$ の指標は

$$\text{tr}[\bar{v}_I^{k_z=0, \pi/c; -}(\bar{E})] = \frac{\omega^{k_z=0, \pi/c}(E, I)}{\omega^{k_z=0, \pi/c}(I, I E I)} \text{tr}[\bar{\mu}^{k_z=0, \pi/c}(\overline{I E I})] \text{tr}[\bar{\mu}^{k_z=0, \pi/c}(\bar{E})]$$

$$= 4 \quad (4.7a)$$

$$\text{tr}[\bar{v}_I^{k_z=0, \pi/c; -}(\bar{\mathcal{M}}_z)] = \frac{\omega^{k_z=0, \pi/c}(\mathcal{M}_z, I)}{\omega^{k_z=0, \pi/c}(I, I \mathcal{M}_z I)} \text{tr}[\bar{\mu}^{k_z=0, \pi/c}(\overline{I \mathcal{M}_z I})] \text{tr}[\bar{\mu}^{k_z=0, \pi/c}(\bar{\mathcal{M}}_z)]$$

$$= -e^{-ik_z c} (1 - e^{-ik_z c})^2 \quad (4.7b)$$

$$\text{tr}[\bar{v}_I^{k_z=0, \pi/c; -}(\bar{I})] = -\omega^{k_z=0, \pi/c}(I E, I E) \text{tr}[\bar{\mu}^{k_z=0, \pi/c}(\overline{I E I E})]$$

$$= -2 \quad (4.7c)$$

$$\text{tr}[\bar{v}_I^{k_z=0, \pi/c; -}(\overline{I \mathcal{M}_z})] = -\omega^{k_z=0, \pi/c}(I \mathcal{M}_z, I \mathcal{M}_z) \text{tr}[\bar{\mu}^{k_z=0, \pi/c}(\overline{I \mathcal{M}_z I \mathcal{M}_z})]$$

$$= 2e^{ik_z c} \quad (4.7d)$$

のように求めることができる. この表現 $\bar{v}_I^{k_z=0, \pi/c; -}$ は群 $\bar{\mathcal{G}}^{k_z=0, \pi/c} + I \bar{\mathcal{G}}^{k_z=0, \pi/c}$ の既約表現で分解す

ることができる．これは点群 C_{2h} と同型な群であり，次のような指標表をもつ：

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

(4.8)

これを用いて表現 $\bar{v}_I^{k_z=0, \pi/c; -}$ の既約分解を行うと，結果は以下のようになる：

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	$A_g \oplus 3B_u$

(4.9)

この結果は，Brillouin ゾーンの中央面 $k_z = 0$ と境界面 $k_z = \pi/c$ とで超伝導ギャップが異なる構造をもつことを意味している．両者の違いは非共型な螺旋対称性 $\{C_{2z}|\frac{c}{2}\hat{z}\}$ に起因している．例えば， $k_z = 0$ では既約分解に A_u が現れているが， $k_z = \pi/c$ ではそれは禁止されている．これはすなわち，超伝導秩序変数の対称性が A_u 表現に属している場合，³³⁾ $k_z = 0$ 面上では超伝導ギャップが開くが， $k_z = \pi/c$ 面上では線ノードが現れることを意味している．

4.1.2 一般化

ここまで，「非共型対称性に起因する鏡映面上の非自明な線ノード」の一例を見てきた．このような分類は他の様々な結晶対称性や磁性状態にも適用可能である．いま，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について網羅的な分類を行った結果を表 3 に示す [34, 35]．ここでは (A)–(F) の 6 種類の分類がある．(A), (B) は時間反転をもたない強磁性超伝導，(C)–(F) は時間反転をもつ常磁性または反強磁性超伝導を表している．分類において鍵となるのは，鏡映 (映進) 操作の並進部分 t_{M_z} および時間反転操作の並進部分 t_T の各 z 成分である． $[t_{M_z}]_z$ が零にとれず有限になる場合は，系に z 軸まわりの螺旋対称性があることを意味する．また， $[t_T]_z$ が有限になる場合は， z 方向に伝搬ベクトルをもつ反強磁性超伝導を考えていることになる．³⁴⁾ 例えば先ほどの $M = P6_3/mmc1'$ の例は螺旋をもつ常磁性超伝導なので，(E) のケースに該当することが分かる．表 3 から明らかなように， $[t_{M_z}]_z$ または $[t_T]_z$ が零でない場合 [(B), (D), (E), (F) の場合] に，Brillouin ゾーンの中央面 ($k_z = 0$) と境界面 ($k_z = \pi/c$) でギャップ構造が変化する．これは先ほどの例でも見た非共型対称性による帰結であり，実際様々な例でこの非自明なギャップ構造が提案されている [26–28, 30]．

33) UPt_3 では点群 D_{6h} の E_{2u} 表現に属する超伝導秩序変数が提案されており，この表現は部分群 C_{2h} の A_u 表現と対応している．

34) $[t_T]_z$ が零でも，(常磁性状態だけでなく) x, y 方向に伝搬ベクトルをもつ反強磁性状態は許されることに注意．

表 3 空間反転対称性をもつ超伝導体における、鏡映面上の超伝導ギャップ・ノード構造の分類結果 [35]. 4 列目と 5 列目は、Brillouin ゾーンの中央面 $k_z = 0$ と境界面 $k_z = \pi/c$ 上の超伝導ギャップ関数として許される表現をそれぞれ示している. 表現は点群 C_{2h} の既約表現で分解した形で表している.

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	$[t_{M_z}]_z = [t_T]_z = 0$	$A_g \oplus 2A_u \oplus B_u$	$A_g \oplus 2A_u \oplus B_u$
(D)	あり	$[t_{M_z}]_z = 0, [t_T]_z \neq 0$	$A_g \oplus 2A_u \oplus B_u$	$B_g \oplus 3A_u$
(E)	あり	$[t_{M_z}]_z \neq 0, [t_T]_z = 0$	$A_g \oplus 2A_u \oplus B_u$	$A_g \oplus 3B_u$
(F)	あり	$[t_{M_z}]_z \neq 0, [t_T]_z \neq 0$	$A_g \oplus 2A_u \oplus B_u$	$B_g \oplus A_u \oplus 2B_u$

4.2 回転軸上の分類：角運動量による非自明ギャップ構造

次に、Brillouin ゾーンの回転軸上での分類結果を紹介しよう. ここでは簡単のため、非共型対称性は一度忘れて共型な群だけを取り扱うことにする. しかし回転軸上では共型な場合でも、**正常 Bloch 状態の角運動量**に起因して非自明な超伝導ギャップ構造が現れる.³⁵⁾

空間反転対称性および n 回回転対称性 ($n = 2, 3, 4, 6$) をもつ常磁性超伝導体に対し、Brillouin ゾーンの回転軸上における超伝導ギャップの分類を行った結果を表 4 に示す. ここで注目すべきは、2 回回転の場合は鏡映面の場合と同じようにスピン $1/2$ の表現しかないが、3 回回転以上になると対称性が高くなるために $3/2$ や $5/2$ といった高スピン状態の表現が現れることである. そして超伝導ギャップの分類結果を見ていくと、2, 4 回回転では表現 $\bar{v}^{(n),k,-}$ は一意に定まるが、3, 6 回回転では角運動量に依存して異なる表現が現れることが分かる.

例えば C_{3v} 対称性を見てみると、 $E_{1/2}$ では E_u 表現が許されているのに対し、 $E_{3/2}$ では E_u は禁止されている. すなわち、 E_u に属する秩序変数をもつ超伝導体があるとき、角運動量 $1/2$ のバンドに対しては回転軸上でギャップが開き、 $3/2$ のバンドに対してはノードができることが分かる. 実際、我々は六方晶である $U\text{Pt}_3$ の有効模型を用いて、数値計算によってもこの結果を確かめることができた (図 4). 他にも、 UBe_{13} などの立方晶の結晶構造をもつ物質も $[111]$ 方向に 3 回回転軸をもつので、同様の角運動量依存ギャップ構造が期待される.

4.3 空間反転対称性が破れた場合

4.1 節および 4.2 節では、空間反転対称性をもつ超伝導体にのみ注目した分類結果を示していた. しかしながら、今回求めた超伝導ギャップ関数の表現に対する指標公式 [式 (3.12)] は、 $d_\alpha = \mathcal{T}$ に対しても成り立つため、空間反転対称性が破れた超伝導体についても (時間反転対称性さえあれば) 分類を行うことができる.³⁶⁾ このようなケースに対する分類結果はまた別の機会に紹介したい.

35) 回転軸上では非共型対称性は重要でないという意味ではない. 実際、映進対称性に起因して 2 回回転軸上のギャップ構造が変わる例も見つけられている [65].

36) 時空反転対称性をどちらも破る超伝導体については超伝導ギャップ関数の表現を求める公式はないが、これは逆に言えば、そのような超伝導体では基本的にギャップが開かない (Bogoliubov フェルミ面ができる) ことを意味するのでは

表 4 空間反転対称性をもつ常磁性超伝導体における，回転軸上の超伝導ギャップ・ノード構造の分類結果 [35]．1 列目は回転軸上の磁気小点群 \bar{M}^k を表し，ここでは $\mathfrak{T} = \mathcal{T}I$ としている．2 列目は \bar{M}^k の既約 PUA 表現 $\bar{\mu}^k$ (正常 Bloch 状態) を表し，対応する角運動量 (1/2, 3/2, 5/2) でラベル付けしている．3 列目は分類によって得られた超伝導ギャップ関数の表現 $\bar{\nu}^{k,-}$ であり，対応する群 $\bar{\mathcal{K}}^k = \bar{M}^k + I\bar{M}^k$ (のユニタリ部分) の既約表現で分解して示している．

\bar{M}^k	$\bar{\mu}^k$	$\bar{\nu}^{k,-}$
$C_2 \sqcup \mathfrak{T}C_2$	$E_{1/2}$	$A_g \oplus A_u \oplus 2B_u$
$C_3 \sqcup \mathfrak{T}C_3$	$E_{1/2}$	$A_g \oplus A_u \oplus E_u$
	$2B_{3/2}$	$A_g \oplus 3A_u$
$C_4 \sqcup \mathfrak{T}C_4$	$E_{1/2}, E_{3/2}$	$A_g \oplus A_u \oplus E_u$
$C_6 \sqcup \mathfrak{T}C_6$	$E_{1/2}, E_{5/2}$	$A_g \oplus A_u \oplus E_{1u}$
	$E_{3/2}$	$A_g \oplus A_u \oplus 2B_u$
$C_{2v} \sqcup \mathfrak{T}C_{2v}$	$E_{1/2}$	$A_g \oplus A_u \oplus B_{2u} \oplus B_{3u}$
$C_{3v} \sqcup \mathfrak{T}C_{3v}$	$E_{1/2}$	$A_{1g} \oplus A_{1u} \oplus E_u$
	$E_{3/2}$	$A_{1g} \oplus 2A_{1u} \oplus A_{2u}$
$C_{4v} \sqcup \mathfrak{T}C_{4v}$	$E_{1/2}, E_{3/2}$	$A_{1g} \oplus A_{1u} \oplus E_u$
$C_{6v} \sqcup \mathfrak{T}C_{6v}$	$E_{1/2}, E_{5/2}$	$A_{1g} \oplus A_{1u} \oplus E_{1u}$
	$E_{3/2}$	$A_{1g} \oplus A_{1u} \oplus B_{1u} \oplus B_{2u}$

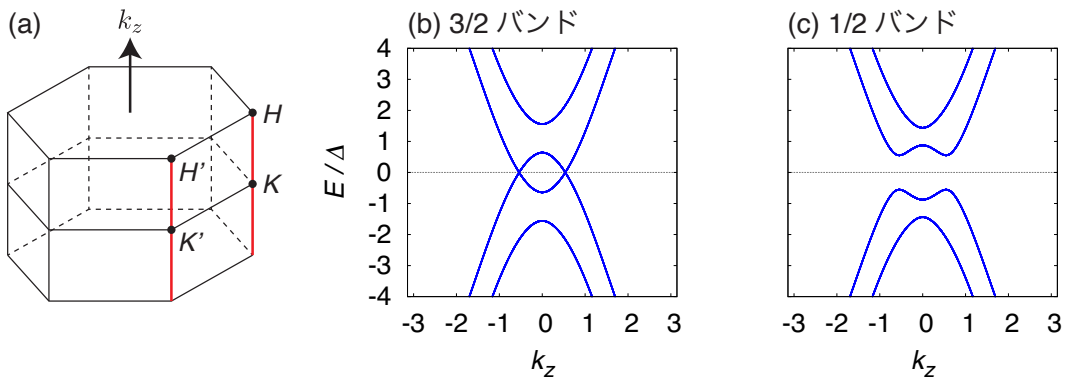


図 4 (a) 六方晶 Brillouin ゾーン内の 3 回回転軸 K - H ．(b, c) UPT_3 における K - H 線上での準粒子エネルギー分散 [35]．(b) と (c) はフェルミ面にかかるバンドが 3/2 と 1/2 の角運動量をもつ場合をそれぞれ表している．

表 5 空間反転対称性と時間反転対称性をもつ超伝導体 (C)–(F) における (ラベルは表 3 と対応), 鏡映面上の超伝導ギャップ・ノード構造のトポロジカルな分類結果 [34]. $2\mathbb{Z}$ や \mathbb{Z}_2 は面上でノードができることを意味し, 自明な分類 0 はギャップが開くことを表す. ここでは 0 次元トポロジカル数の分類のみ示している.

	A_g		B_g		A_u		B_u	
ケース	$k_z = 0$	$k_z = \pi/c$	$k_z = 0$	$k_z = \pi/c$	$k_z = 0$	$k_z = \pi/c$	$k_z = 0$	$k_z = \pi/c$
(C)	0	0	\mathbb{Z}_2	\mathbb{Z}_2	0	0	0	0
(D)	0	$2\mathbb{Z}$	\mathbb{Z}_2	0	0	0	0	$2\mathbb{Z}$
(E)	0	0	\mathbb{Z}_2	$2\mathbb{Z}$	0	$2\mathbb{Z}$	0	0
(F)	0	\mathbb{Z}_2	\mathbb{Z}_2	0	0	0	0	0

5 トポロジカルな分類理論との対応

本稿では, 群の表現論に基づく超伝導ギャップ・ノード構造の分類手法について解説し, それによって様々な非自明な結果が現れることを見てきた. 最後に, 本稿で導入した表現論的な手法による結果と, 最近発展を見せているトポロジカルな立場からの超伝導ギャップ・ノードの分類手法 [31–34, 40–42] による結果との間の比較を簡単に行いたい. このトポロジカルな分類手法について詳しくは説明しないが, 簡単に言葉で言えば次のようなものである: 注目する波数 \mathbf{k} (例えば鏡映面) における小群の小表現を考え, それが時間反転対称性・粒子正孔対称性・カイラル対称性に対してそれぞれ閉じているかどうかを見ることで,³⁷⁾ そのバンドがもつトポロジカルな性質を Altland–Zirnbauer クラスの分類学に帰着させることができる.

さて, このようなトポロジカルな手法を用いて得られた, 空間反転対称性と鏡映対称性をもつ超伝導体における, 鏡映面上の超伝導ギャップ・ノード構造の分類結果を表 5 に示す [34]. これは表現論による分類で得られた表 3 の結果に対応するものであり, 2 つの表の (C)–(F) のラベル付けはそれぞれ同じ状況を表していると思ってよい. 表 5 で $2\mathbb{Z}$ や \mathbb{Z}_2 といった非自明な分類が現れる場合は, 鏡映面上の任意の波数で (零エネルギーに状態がなければ) 0 次元のトポロジカル数が定義できることを意味する. 例えば $2\mathbb{Z}$ であれば, これは注目している正常状態のエネルギーバンドの各 \mathbf{k} 点における占有数を表す (係数 2 はスピン縮退に由来する). いま, 鏡映面とフェルミ面が交差していることを想定しているので, 鏡映面上で必ずこの占有数が変化する 1 次元的な領域が存在し, その領域はギャップレスにならなければならない; すなわち, 線ノードが現れる.³⁸⁾ よって一般に, 非自明な分類が得られる場合は超伝導ノードが発現することを意味する. 逆に, 分類が自明 (0) であればギャップが開くことが許される.

ないかと思っている.

37) 時間反転対称性と粒子正孔対称性に関しては反ユニタリな対称性なので, 2.5.2 節で導入した Wigner の判定条件を用いることでこれを確かめられる. カイラル対称性はユニタリなので違う形の公式が必要になる.

38) 表には載せていないが, 特に偶パリティ超伝導体の線ノードは 1 次元トポロジカル数 (巻き付き数) によっても特徴付けられることを示せる. この巻き付き数の存在は, 摂動に強いより安定なノードであることを示し, また表面状態としてマヨラナフラットバンドが現れることにも関わっている. 詳しくは文献 [34] を参照されたい.

表5のおおよその見方が分かったところで、これを表3との結果を比較してみよう。すると、次のことが分かる：

既約表現 Γ が表現論的分類 $\bar{\nu}_I^{k_z=0, \pi/c; -}$ に現れる (現れない) のは, Γ のトポロジカル的分類が自明 (非自明) になるときであり, かつそのときに限る。

すなわち, これら2つの分類手法から予想される超伝導ギャップ構造は全く整合的になる。ここには掲載しないが, 表4で得られた回転軸上の表現論的な分類結果に関しても, これとほぼ整合的になるトポロジカルな分類が得られている [42]。 「ほぼ」と言っているのは, 回転軸上の場合には対称性が高いので2次元表現に入る秩序変数が現れる場合があり, これに対する扱いが2つの手法で異なるためである。一般に多次元表現に属する秩序変数は自発的対称性の破れを伴うが, トポロジカルな分類はこれを考慮している (すなわち, 秩序状態の対称性を参照している)。他方, 表現論的分類は秩序する前の対称性を参照しており, それが秩序状態でも残ると仮定しているので自発的対称性の破れを考慮していない。よって, このような場合には両者の分類に若干の齟齬が生じる。

いずれにせよ, 表現論的な分類とトポロジカルな分類には密接な“対応関係”があることが分かった。ただし, この関係については色々な結果を比較した限りそうなっているという程度で, 厳密に示している訳ではない。³⁹⁾ また今回示した表現論による分類結果では, トポロジカルな分類で得られている \mathbb{Z} と \mathbb{Z}_2 の違いは分からなかったが, 最近表現論的な立場からこれらを区別する方法が (おそらく) 分かったので, 上記の関係と合わせて「予想」としてまとめ, 本稿の結びとしたい。

予想 5.1 表現論的な分類理論とトポロジカルな分類理論には, 自発的な対称性の破れがある場合を除いて次のような“対応関係”がある。

1. トポロジカルな分類において非自明な (\mathbb{Z} , $2\mathbb{Z}$, \mathbb{Z}_2 の) 0次元トポロジカル数が得られるのは, 表現論的な分類においてノードが予言されるときであり, かつそのときに限る。
2. トポロジカルな分類において \mathbb{Z}_2 の 0次元トポロジカル数が得られるならば, 表現論的な分類を同一の正常 Bloch 状態の直和に対して行ったときにギャップドであるという結果が得られる。

謝辞

本稿の執筆にあたって, 関連する共同研究を行った柳瀬陽一, 野本拓也, 塩崎謙, 小林伸吾, 佐藤昌利の各氏に感謝申し上げます。また, CREST 研究課題「物質のトポロジカル相の理論的探求」(JPMJCR19T2) の支援を頂きました。

³⁹⁾ インプットの情報が同じなので結果が一致するのは当然といえば当然のような気がするが, ちゃんと証明できるかと言われるとよく分からない。

A Mackey の分解定理の証明

定理 3.1 の証明を行う [49, 61, 64]. まず, 次の命題を示す.

命題 A.1 (M, N) -両側剰余類 $Md_\alpha N$ は N の左剰余類を $|M|/|\mathcal{L}_\alpha|$ 個 (したがって位数は $|M||N|/|\mathcal{L}_\alpha|$) だけ含む.

証明 左剰余類分解 $M = \coprod_{\beta=1}^{|M|/|\mathcal{L}_\alpha|} q_{\alpha\beta} \mathcal{L}_\alpha$ を考えると, 次の 2 つが成り立つ.

- (i) $m_1, m_2 \in \mathcal{L}_\alpha$ とすると, 任意の β に対し $q_{\alpha\beta} m_1 d_\alpha N = q_{\alpha\beta} m_2 d_\alpha N$ である.
(なぜなら, 任意の m_1, m_2 は $n_1, n_2 \in N$ を用いて $m_1 = d_\alpha n_1 d_\alpha^{-1}, m_2 = d_\alpha n_2 d_\alpha^{-1}$ と書けるので
(左辺) $= q_{\alpha\beta} d_\alpha n_1 N = q_{\alpha\beta} d_\alpha N = q_{\alpha\beta} d_\alpha n_2 N =$ (右辺) となるためである.)
- (ii) 相異なる $q_{\alpha\beta}$ に対し, $q_{\alpha\beta} d_\alpha N$ は相異なる N の左剰余類である.
($\beta_1 \neq \beta_2$ に対し $q_{\alpha\beta_1} d_\alpha N = q_{\alpha\beta_2} d_\alpha N$ と仮定する. すると, $q_{\alpha\beta_1} \in q_{\alpha\beta_2} d_\alpha N$ より $q_{\alpha\beta_1} \in q_{\alpha\beta_2} N_\alpha$ であり, また $q_{\alpha\beta_1}, q_{\alpha\beta_2} \in M$ であるから $q_{\alpha\beta_1} \in q_{\alpha\beta_2} \mathcal{L}_\alpha$ が成り立つ. しかし, これは $q_{\alpha\beta_1} \mathcal{L}_\alpha$ と $q_{\alpha\beta_2} \mathcal{L}_\alpha$ が相異なる左剰余類であることに矛盾する.)

したがって, (i) を用いると

$$Md_\alpha N = \coprod_{\beta=1}^{|M|/|\mathcal{L}_\alpha|} q_{\alpha\beta} \mathcal{L}_\alpha d_\alpha N \stackrel{(i)}{=} \coprod_{\beta=1}^{|M|/|\mathcal{L}_\alpha|} q_{\alpha\beta} d_\alpha N \quad (\text{A.1})$$

であり, (ii) より各 $q_{\alpha\beta} d_\alpha N$ は異なるので題意は示された. \square

これを用いて, Mackey の分解定理の証明を行う.

証明 命題 2.2 より, ユニタリ部分の指標が等しければ同値な PUA 表現と言えるので, ユニタリな元 $m \in M, \phi(m) = 1$ に対する指標の計算を行う. 命題 A.1 より, $M = \coprod_{\beta} q_{\alpha\beta} \mathcal{L}_\alpha$, $M = \coprod_{\alpha} Md_\alpha N = \coprod_{\alpha, \beta} q_{\alpha\beta} d_\alpha N$ と分解できるので

$$\begin{aligned} & \text{tr}[(\mu \uparrow M) \downarrow M](m) \\ &= \bigoplus_{\alpha, \beta} \frac{\omega(m, q_{\alpha\beta} d_\alpha)}{\omega(q_{\alpha\beta} d_\alpha, (q_{\alpha\beta} d_\alpha)^{-1} m q_{\alpha\beta} d_\alpha)} \text{tr}[\mu((q_{\alpha\beta} d_\alpha)^{-1} m q_{\alpha\beta} d_\alpha)^{q_{\alpha\beta} d_\alpha}] \\ &= \bigoplus_{\alpha} \left[\bigoplus_{\beta} \frac{\omega(m, q_{\alpha\beta} d_\alpha)}{\omega(q_{\alpha\beta} d_\alpha, d_\alpha^{-1} q_{\alpha\beta}^{-1} m q_{\alpha\beta} d_\alpha)} \cdot \frac{\omega(d_\alpha, d_\alpha^{-1} q_{\alpha\beta}^{-1} m q_{\alpha\beta} d_\alpha)^{q_{\alpha\beta}}}{\omega(q_{\alpha\beta}^{-1} m q_{\alpha\beta}, d_\alpha)^{q_{\alpha\beta}}} \text{tr}[\mu_\alpha(q_{\alpha\beta}^{-1} m q_{\alpha\beta})^{q_{\alpha\beta}}] \right] \quad (\text{A.2}) \end{aligned}$$

となる. ただし, α, β の直和は $d_\alpha^{-1} q_{\alpha\beta}^{-1} m q_{\alpha\beta} d_\alpha \in N$, すなわち $q_{\alpha\beta}^{-1} m q_{\alpha\beta} \in N_\alpha$ を満たすように取

る. いま, $q_{\alpha\beta} \in \mathcal{M}$ であるから結局 $q_{\alpha\beta}^{-1}mq_{\alpha\beta} \in \mathcal{L}_\alpha$ であることが分かる. 最終式の乗数系部分は

$$\begin{aligned} \frac{\omega(m, q_{\alpha\beta}d_\alpha)\omega(d_\alpha, d_\alpha^{-1}q_{\alpha\beta}^{-1}mq_{\alpha\beta}d_\alpha)^{q_{\alpha\beta}}}{\omega(q_{\alpha\beta}d_\alpha, d_\alpha^{-1}q_{\alpha\beta}^{-1}mq_{\alpha\beta}d_\alpha)\omega(q_{\alpha\beta}^{-1}mq_{\alpha\beta}, d_\alpha)^{q_{\alpha\beta}}} &= \frac{\omega(m, q_\alpha)\omega(q_{\alpha\beta}, d_\alpha)}{\omega(q_{\alpha\beta}, q_{\alpha\beta}^{-1}mq_{\alpha\beta}d_\alpha)\omega(q_{\alpha\beta}^{-1}mq_{\alpha\beta}, d_\alpha)^{q_{\alpha\beta}}} \\ &= \frac{\omega(m, q_{\alpha\beta})}{\omega(q_{\alpha\beta}, q_{\alpha\beta}^{-1}mq_{\alpha\beta})} \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

と変形できる (最後の等号で $\phi(m) = 1$ であることを用いている). したがって,

$$\begin{aligned} &\text{tr}[(\mu \uparrow M) \downarrow \mathcal{M}](m) \\ &= \bigoplus_\alpha \left[\bigoplus_\beta \frac{\omega(m, q_{\alpha\beta})}{\omega(q_{\alpha\beta}, q_{\alpha\beta}^{-1}mq_{\alpha\beta})} \text{tr}[\mu_\alpha(q_{\alpha\beta}^{-1}mq_{\alpha\beta})^{q_{\alpha\beta}}] \right] \quad \text{直和は } q_{\alpha\beta}^{-1}mq_{\alpha\beta} \in \mathcal{L}_\alpha \text{ を満たす} \\ &= \bigoplus_\alpha \text{tr}[(\mu_\alpha \downarrow \mathcal{L}_\alpha) \uparrow M](m) \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

となる. これは任意の $m \in \mathcal{M}$, $\phi(m) = 1$ に対して成り立つので, 題意は示された. \square

B Mackey–Bradley の定理の計算

M を群, \mathcal{M} を M の部分群とし, M の \mathcal{M} –両側剰余類分解を

$$M = \bigsqcup_\alpha \mathcal{M}d_\alpha \mathcal{M} \quad (\text{B.1})$$

とする. 特に自明でない自己逆元な両側剰余類

$$A = \{\alpha \mid \mathcal{M}d_\alpha \mathcal{M} = \mathcal{M}d_\alpha^{-1} \mathcal{M}, d_\alpha \neq E\} \quad (\text{B.2})$$

に注目し, ある $\alpha \in A$ を固定して考える. 仮定から任意の $m_1, m_2 \in \mathcal{M}$ に対して

$$m_1 d_\alpha m_2 = m_3 d_\alpha^{-1} m_4 \iff d_\alpha m_2 m_4^{-1} = m_1^{-1} m_3 d_\alpha^{-1} \quad (\text{B.3})$$

となる $m_3, m_4 \in \mathcal{M}$ が存在する. よって $d_\alpha \mathcal{M} \cap \mathcal{M}d_\alpha^{-1}$ は空集合ではないので, その要素 z を一つ取ると, ある $m, m' \in \mathcal{M}$ を用いて $z = d_\alpha m = m' d_\alpha^{-1}$ と書ける. したがって, $\mathcal{M}_\alpha := d_\alpha \mathcal{M} d_\alpha^{-1}$ と定義すると

$$z^2 = d_\alpha m m' d_\alpha^{-1} = m' m \in \mathcal{M}_\alpha \cap \mathcal{M} =: \mathcal{L}_\alpha$$

が成り立つ.

命題 B.1

$$\mathcal{K}_\alpha := \mathcal{L}_\alpha \sqcup z \mathcal{L}_\alpha \quad (\text{B.4})$$

と定義すると, \mathcal{L}_α は \mathcal{K}_α の指数 2 の正規部分群である.

証明 \mathcal{L}_α が正規部分群であることを示す.

- 単位元の存在：明らかに $E \in \mathcal{L}_\alpha$ である.
- 逆元の存在： $m_1 = d_\alpha m_2 d_\alpha^{-1} \in \mathcal{L}_\alpha$ ($m_1, m_2 \in \mathcal{M}$) とする. このとき, \mathcal{M} が群であることから $m_1^{-1} \in \mathcal{M}$ かつ $(d_\alpha m_2 d_\alpha^{-1})^{-1} = d_\alpha m_2^{-1} d_\alpha^{-1} \in \mathcal{M}_\alpha$ であるので, \mathcal{L}_α 内に逆元が存在する.
- 不変性：

$$z\mathcal{M}z^{-1} = d_\alpha \mathcal{M} d_\alpha^{-1} = \mathcal{M}_\alpha \quad (\text{B.5})$$

$$z\mathcal{M}_\alpha z^{-1} = m' d_\alpha^{-1} d_\alpha \mathcal{M} d_\alpha^{-1} d_\alpha m' = \mathcal{M} \quad (\text{B.6})$$

より, $l \in \mathcal{M}_\alpha \cap \mathcal{M}$ に対し $zlz^{-1} \in \mathcal{M}_\alpha \cap \mathcal{M}$ となる.

また, $d_\alpha \neq E$ より $z \notin \mathcal{M}$ であり, したがって $z \notin \mathcal{L}_\alpha$ である. よって $\mathcal{L}_\alpha \cap z\mathcal{L}_\alpha = \emptyset$ であるから, \mathcal{L}_α は \mathcal{K}_α の指数 2 の正規部分群となる. \square

次に, 乗数系 ω をもつ \mathcal{M} 上の PUA 表現 μ を考え, その基底を $|\psi\rangle$ とする. すなわち, 任意の $m_1, m_2 \in \mathcal{M}$ に対し

$$\hat{m}_1 |\psi\rangle_j = |\psi\rangle_i \mu(m_1)_{ij} \quad (\text{B.7})$$

$$\omega(m_1, m_2) \mu(m_1 m_2) = \mu(m_1) \mu(m_2)^{m_1} \quad (\text{B.8})$$

となる. また, d_α による表現 μ のマップ μ_α を導入する (すなわち, μ_α は \mathcal{M}_α 上の PUA 表現である). その表現基底を $|\psi_\alpha\rangle := \hat{d}_\alpha |\psi\rangle$ とすると, $l \in \mathcal{M}_\alpha$ に対し

$$\begin{aligned} \hat{l} |\psi_\alpha\rangle_j &= \hat{l} \hat{d}_\alpha |\psi\rangle_j \\ &= \frac{\omega(l, d_\alpha)}{\omega(d_\alpha, d_\alpha^{-1} l d_\alpha)} \hat{d}_\alpha \overline{d_\alpha^{-1} l d_\alpha} |\psi\rangle_j \\ &= |\psi_\alpha\rangle_i \frac{\omega(l, d_\alpha)}{\omega(d_\alpha, d_\alpha^{-1} l d_\alpha)} \mu(d_\alpha^{-1} l d_\alpha)_{ij}^{d_\alpha} \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

であるから,

$$\mu_\alpha(l) = \frac{\omega(l, d_\alpha)}{\omega(d_\alpha, d_\alpha^{-1} l d_\alpha)} \mu(d_\alpha^{-1} l d_\alpha)^{d_\alpha} \quad (\text{B.10})$$

となる. ここから, \mathcal{L}_α 上の PUA 表現 $\nu_\alpha := (\mu_\alpha \otimes \mu) \downarrow \mathcal{L}_\alpha$ を構成することができ, その基底は $|\psi_\alpha\rangle \otimes |\psi\rangle$ である. すなわち, $l \in \mathcal{L}_\alpha$ に対し

$$\begin{aligned} \hat{l} (|\psi_\alpha\rangle \otimes |\psi\rangle)_{kl} &= (\hat{l} |\psi_\alpha\rangle_k) (\hat{l} |\psi\rangle_l) \\ &= [|\psi_\alpha\rangle_i \mu_\alpha(l)_{ik}] [|\psi\rangle_j \mu(l)_{jl}] \\ &= (|\psi_\alpha\rangle \otimes |\psi\rangle)_{ij} \mu_\alpha(l)_{ik} \mu(l)_{jl} =: (|\psi_\alpha\rangle \otimes |\psi\rangle)_{ij} \nu_\alpha(l)_{ij,kl} \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

とする.

誘導表現 $\lambda_\alpha := \nu_\alpha \uparrow \mathcal{K}_\alpha$ を構成しよう．式 (B.4) より，基底 $[|\psi_\alpha\rangle \otimes |\psi\rangle, \hat{z}(|\psi_\alpha\rangle \otimes |\psi\rangle)]$ を用いると $k \in \mathcal{K}_\alpha$ に関してこの誘導表現は

$$\lambda_\alpha(k)_{aij,bkl} = \begin{cases} \left[\frac{\omega(k, z_b)}{\omega(z_a, z_a^{-1}kz_b)} \right]^2 \nu_\alpha(z_a^{-1}kz_b)_{ij,kl}^{z_a} & z_a^{-1}kz_b \in \mathcal{L}_\alpha \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (\text{B.12})$$

と定められる (簡単のため $z_1 = E, z_2 = z$ とした)．2つの表現 (μ_α と μ) の直積を考えているので，係数に現れる乗数系が2乗されることには注意が必要である．実際， $z_a^{-1}kz_b \in \mathcal{L}_\alpha$ のとき

$$\begin{aligned} \hat{k}\hat{z}_b(|\psi_\alpha\rangle \otimes |\psi\rangle)_{kl} &= \left[\frac{\omega(k, z_b)}{\omega(z_a, z_a^{-1}kz_b)} \right]^2 (\widehat{z_a z_a^{-1}kz_b} |\psi_\alpha\rangle_k) (\widehat{z_a z_a^{-1}kz_b} |\psi\rangle_l) \\ &= \hat{z}_b(|\psi_\alpha\rangle \otimes |\psi\rangle)_{ij} \left[\frac{\omega(k, z_b)}{\omega(z_a, z_a^{-1}kz_b)} \right]^2 \nu_\alpha(z_a^{-1}kz_b)_{ij,kl}^{z_a} \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

である．誘導表現 λ_α を具体的に行列で表せば，

$$\lambda_\alpha(l) = \begin{bmatrix} \nu_\alpha(l) & 0 \\ 0 & \left[\frac{\omega(l, z)}{\omega(z, z^{-1}lz)} \right]^2 \nu_\alpha(z^{-1}lz)^z \end{bmatrix}, \quad l \in \mathcal{L}_\alpha \quad (\text{B.14})$$

$$\lambda_\alpha(z) = \begin{bmatrix} 0 & \omega(z, z)^2 \nu_\alpha(z^2) \\ \mathbf{1} & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{B.15})$$

となる．表現 λ_α は，うまい基底変換によってブロック対角化することができる．そのために，次の命題を示す．

命題 B.2 ある正則行列 S が存在して，

$$\left[\frac{\omega(l, z)}{\omega(z, z^{-1}lz)} \right]^2 \nu_\alpha(z^{-1}lz)^z = S^{-1} \nu_\alpha(l) S^l, \quad l \in \mathcal{L}_\alpha \quad (\text{B.16})$$

$$\omega(z, z)^2 \nu_\alpha(z^2) = S S^z \quad (\text{B.17})$$

が成り立つ．

証明 基底 $\hat{z}(|\psi_\alpha\rangle \otimes |\psi\rangle)$ を変形すると

$$\begin{aligned} \hat{z}(|\psi_\alpha\rangle \otimes |\psi\rangle)_{kl} &= (\widehat{m' d_\alpha^{-1}} |\psi_\alpha\rangle_k) (\widehat{d_\alpha m} |\psi\rangle_l) \\ &= \frac{1}{\omega(z d_\alpha, d_\alpha^{-1}) \omega(d_\alpha, d_\alpha^{-1} z)} (|\psi\rangle_i \mu(m')_{ik}) (|\psi_\alpha\rangle_j \mu(m)_{jl}^{d_\alpha}) \\ &= (|\psi\rangle \otimes |\psi_\alpha\rangle)_{ij} \left[\frac{\omega(z, d_\alpha)}{\omega(d_\alpha, d_\alpha^{-1} z)} \mu(m')_{ik} \mu(m)_{jl}^{d_\alpha} \right] \end{aligned} \quad (\text{B.18})$$

となるので，正則行列 S を

$$S_{ji,kl} := \frac{\omega(z, d_\alpha)}{\omega(d_\alpha, d_\alpha^{-1} z)} \mu(m')_{ik} \mu(m)_{jl}^{d_\alpha} \quad (\text{B.19})$$

によって定義する．このとき，基底 $\hat{z}(|\psi_\alpha\rangle \otimes |\psi\rangle)$ に \hat{l} を作用させたものは

$$\begin{aligned}\hat{l}[\hat{z}(|\psi_\alpha\rangle \otimes |\psi\rangle)_{kl}] &= \hat{l}[(|\psi\rangle \otimes |\psi_\alpha\rangle)_{ij} S_{ji,kl}] \\ &= (|\psi\rangle \otimes |\psi_\alpha\rangle)_{mn} v_\alpha(l)_{mn,ji} S_{ji,kl}^l\end{aligned}\quad (\text{B.20})$$

となるが，一方で式 (B.13) より

$$\begin{aligned}\hat{l}[\hat{z}(|\psi_\alpha\rangle \otimes |\psi\rangle)_{kl}] &= \hat{z}(|\psi_\alpha\rangle \otimes |\psi\rangle)_{ij} \left[\frac{\omega(l, z)}{\omega(z, z^{-1}lz)} \right]^2 v_\alpha(z^{-1}lz)_{ij,kl}^z \\ &= (|\psi\rangle \otimes |\psi_\alpha\rangle)_{mn} S_{nm,ij} \left[\frac{\omega(l, z)}{\omega(z, z^{-1}lz)} \right]^2 v_\alpha(z^{-1}lz)^z\end{aligned}\quad (\text{B.21})$$

となるので， $v_\alpha(l) S^l = S \left[\frac{\omega(l, z)}{\omega(z, z^{-1}lz)} \right]^2 v_\alpha(z^{-1}lz)^z$ が導かれる．もう一つの関係式も同様に示すことができる．実際，基底 $\hat{z}(|\psi_\alpha\rangle \otimes |\psi\rangle)$ に \hat{z} を作用させたものを考えると

$$\begin{aligned}\hat{z}[\hat{z}(|\psi_\alpha\rangle \otimes |\psi\rangle)_{kl}] &= \hat{z}[(|\psi\rangle \otimes |\psi_\alpha\rangle)_{ij} S_{ji,kl}] \\ &= (|\psi_\alpha\rangle \otimes |\psi\rangle)_{mn} S_{mn,ji} S_{ji,kl}^z\end{aligned}\quad (\text{B.22})$$

$$\hat{z}[\hat{z}(|\psi_\alpha\rangle \otimes |\psi\rangle)_{kl}] = (|\psi_\alpha\rangle \otimes |\psi\rangle)_{mn} \omega(z, z)^2 v_\alpha(z^2)_{mn,kl} \quad (\text{B.23})$$

であるから， $SS^z = \omega(z, z)^2 v_\alpha(z^2)$ が成り立つ． \square

別証明 天下りのになるが， $S_{ji,kl} = \frac{\omega(z, d_\alpha)}{\omega(d_\alpha, d_\alpha^{-1}z)} \mu(m')_{ik} \mu(m)_{jl}^{d_\alpha}$ を用いて真面目に行列計算を行うことも当然示せる．⁴⁰⁾ 実際，例えば 2 番目の関係式は

$$\begin{aligned}S_{ij,mn} S_{mn,kl}^z &= \left[\frac{\omega(z, d_\alpha)}{\omega(d_\alpha, d_\alpha^{-1}z)} \right]^{1+\phi(z)} \mu(m')_{jm} \mu(m)_{in}^{d_\alpha} [\mu(m')_{nk} \mu(m)_{ml}^{d_\alpha}]^z \\ &= \left[\frac{\omega(z, d_\alpha)}{\omega(d_\alpha, d_\alpha^{-1}z)} \right]^{1+\phi(z)} \omega(m', m) \omega(m, m')^{d_\alpha} \mu(m'm)_{jl} \mu(mm')_{ik}^{d_\alpha} \\ &= \left[\frac{\omega(z, d_\alpha)}{\omega(d_\alpha, d_\alpha^{-1}z)} \right]^{1+\phi(z)} \omega(zd_\alpha, d_\alpha^{-1}z) \omega(d_\alpha^{-1}z, zd_\alpha)^{d_\alpha} \mu(z^2)_{jl} \mu(d_\alpha^{-1}z^2 d_\alpha)_{ik}^{d_\alpha} \\ &= \left[\frac{\omega(z, d_\alpha)}{\omega(d_\alpha, d_\alpha^{-1}z)} \right]^{1+\phi(z)} \omega(zd_\alpha, d_\alpha^{-1}z) \omega(d_\alpha^{-1}z, zd_\alpha)^{d_\alpha} \frac{\omega(d_\alpha, d_\alpha^{-1}z^2 d_\alpha)}{\omega(z^2, d_\alpha)} \mu_\alpha(z^2)_{ik} \mu(z^2)_{jl} \\ &= \omega(z, z)^2 v_\alpha(z^2)_{ij,kl}\end{aligned}\quad (\text{B.24})$$

のように示すことができる．最後の等号は，2 コサイクル条件を用いて

$$\begin{aligned}&\left[\frac{\omega(z, d_\alpha)}{\omega(d_\alpha, d_\alpha^{-1}z)} \right]^{1+\phi(z)} \cdot \omega(zd_\alpha, d_\alpha^{-1}z) \cdot \omega(d_\alpha, d_\alpha^{-1}z^2 d_\alpha) \omega(d_\alpha^{-1}z, zd_\alpha)^{d_\alpha} \cdot \frac{1}{\omega(z^2, d_\alpha)} \\ &= \left[\frac{\omega(z, d_\alpha)}{\omega(d_\alpha, d_\alpha^{-1}z)} \right]^{1+\phi(z)} \cdot \frac{\omega(z, z) \omega(d_\alpha, d_\alpha^{-1}z)^z}{\omega(z, d_\alpha)} \cdot \omega(d_\alpha, d_\alpha^{-1}z) \omega(z, zd_\alpha) \cdot \frac{\omega(z, z)}{\omega(z, zd_\alpha) \omega(z, d_\alpha)^z} \\ &= \left[\frac{\omega(z, d_\alpha)}{\omega(d_\alpha, d_\alpha^{-1}z)} \right]^{1+\phi(z)} \cdot \left[\frac{\omega(d_\alpha, d_\alpha^{-1}z)}{\omega(z, d_\alpha)} \right]^{1+\phi(z)} \omega(z, z)^2 \\ &= \omega(z, z)^2\end{aligned}\quad (\text{B.25})$$

40) Bradley–Cracknell の教科書 [49] では線形表現の場合にこのような方針で計算がされている．筆者も最初そうしたが，PUA 表現の場合は乗数系を整理するのがかなり面倒なのであまりおすすめはしない．

と変形した。1 番目の関係式も同様に導くことができるが、計算が煩雑になるので省略する。 \square

さて、命題 B.2 によって誘導表現 λ_α は

$$\lambda_\alpha(l) = \begin{bmatrix} \nu_\alpha(l) & 0 \\ 0 & S^{-1}\nu_\alpha(l)S^l \end{bmatrix}, \quad \lambda_\alpha(z) = \begin{bmatrix} 0 & SS^z \\ \mathbf{1} & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{B.26})$$

のように書けるので、行列 $\tilde{S} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & S \end{bmatrix}$ による基底変換

$$[|\psi_\alpha\rangle \otimes |\psi\rangle, \hat{z}(|\psi_\alpha\rangle \otimes |\psi\rangle)] \rightarrow [|\psi_\alpha\rangle \otimes |\psi\rangle, \hat{z}(|\psi_\alpha\rangle \otimes |\psi\rangle)]\tilde{S}^{-1} = [|\psi_\alpha\rangle \otimes |\psi\rangle, \hat{z}(|\psi_\alpha\rangle \otimes |\psi\rangle)S^{-1}] \quad (\text{B.27})$$

を考えると、この基底のもとでの表現行列は

$$\tilde{S}\lambda_\alpha(l)(\tilde{S}^l)^{-1} = \begin{bmatrix} \nu_\alpha(l) & 0 \\ 0 & \nu_\alpha(l) \end{bmatrix}, \quad \tilde{S}\lambda_\alpha(z)(\tilde{S}^z)^{-1} = \begin{bmatrix} 0 & S \\ S & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{B.28})$$

となる。したがって、もう一度簡単な基底変換を行うことでこれらの行列をブロック対角化することができる。すなわち、誘導表現 λ_α は 2 つの表現の直和 $\nu_\alpha^+ \oplus \nu_\alpha^-$ と同値である。ここで ν_α^\pm は乗数系 ω^2 をもつ PUA 表現であり、

$$\nu_\alpha^\pm(l) := \nu_\alpha(l), \quad \nu_\alpha^\pm(z) := \pm S \quad (\text{B.29})$$

によって定義される。ここで、表現 ν_α^\pm の基底についても議論しておこう。基底変換 (B.27) における最右辺の 2 つ目の要素は、式 (B.18) より

$$\begin{aligned} [\hat{z}(|\psi_\alpha\rangle \otimes |\psi\rangle)S^{-1}]_{ij} &= \hat{z}(|\psi_\alpha\rangle \otimes |\psi\rangle)_{kl}S_{kl,ij}^{-1} \\ &= (|\psi\rangle \otimes |\psi_\alpha\rangle)_{mn} \underbrace{S_{nm,kl}S_{kl,ij}^{-1}}_{\mathbf{1}_{nm,ij}} = (|\psi\rangle \otimes |\psi_\alpha\rangle)_{ji} \end{aligned} \quad (\text{B.30})$$

である。したがって、表現 ν_α^\pm の基底は

$$[|\psi_\alpha\rangle \otimes |\psi\rangle \pm \hat{z}(|\psi_\alpha\rangle \otimes |\psi\rangle)S^{-1}]_{ij} = (|\psi_\alpha\rangle \otimes |\psi\rangle)_{ij} \pm (|\psi\rangle \otimes |\psi_\alpha\rangle)_{ji} \quad (\text{B.31})$$

となる。すなわち、 ν_α^+ (ν_α^-) は \mathcal{K}_α 上の対称 (反対称) 表現になっている。

最後に、 ν_α^\pm の指標を求める公式を導出する。

命題 B.3 $l \in \mathcal{L}_\alpha$ に対して

$$\text{tr}[\nu_\alpha^\pm(l)] = \frac{\omega(l, d_\alpha)}{\omega(d_\alpha, d_\alpha^{-1}ld_\alpha)} \text{tr}[\mu(d_\alpha^{-1}ld_\alpha)]^{d_\alpha} \text{tr}[\mu(l)] \quad (\text{B.32})$$

$$\text{tr}[\nu_\alpha^\pm(zl)] = \pm \omega(zl, zl) \text{tr}[\mu(zlzl)] \quad (\text{B.33})$$

が成り立つ。ただし、2 番目の関係式では $\phi(zl) = 1$ と仮定する。

証明 $l \in \mathcal{L}_\alpha$ とすると, 式 (B.29) より

$$\begin{aligned} \text{tr}[\nu_\alpha^\pm(l)] &= \text{tr}[\nu_\alpha(l)] = \nu_\alpha(l)_{ij,ij} = \mu_\alpha(l)_{ii}\mu(l)_{jj} \\ &= \frac{\omega(l, d_\alpha)}{\omega(d_\alpha, d_\alpha^{-1}ld_\alpha)} \text{tr}[\mu(d_\alpha^{-1}ld_\alpha)]^{d_\alpha} \text{tr}[\mu(l)] \end{aligned} \quad (\text{B.34})$$

$$\begin{aligned} \text{tr}[\nu_\alpha^\pm(zl)] &= \frac{1}{\omega(z, l)^2} \text{tr}[\nu_\alpha(z)\nu_\alpha(l)^z] \\ &= \pm \frac{1}{\omega(z, l)^2} S_{ij,kl} \nu_\alpha(l)_{kl,ij}^z \\ &= \pm \frac{\omega(z, d_\alpha)\omega(l, d_\alpha)^z}{\omega(z, l)^2\omega(d_\alpha, d_\alpha^{-1}z)\omega(d_\alpha, d_\alpha^{-1}ld_\alpha)^z} \mu(zd_\alpha)_{jk}\mu(d_\alpha^{-1}z)_{il}^{d_\alpha} \mu(d_\alpha^{-1}ld_\alpha)_{ki}^{z d_\alpha} \mu(l)_{lj}^z \\ &= \pm \frac{\omega(z, d_\alpha)\omega(l, d_\alpha)^z \omega(zd_\alpha, d_\alpha^{-1}ld_\alpha)\omega(d_\alpha^{-1}z, l)^{d_\alpha}}{\omega(z, l)^2\omega(d_\alpha, d_\alpha^{-1}z)\omega(d_\alpha, d_\alpha^{-1}ld_\alpha)^z} \mu(zld_\alpha)_{ji}\mu(d_\alpha^{-1}zl)_{ij}^{d_\alpha} \\ &\stackrel{*}{=} \pm \frac{\omega(z, d_\alpha)\omega(l, d_\alpha)^z \omega(zd_\alpha, d_\alpha^{-1}ld_\alpha)\omega(d_\alpha^{-1}z, l)^{d_\alpha} \omega(zld_\alpha, d_\alpha^{-1}zl)}{\omega(z, l)^2\omega(d_\alpha, d_\alpha^{-1}z)\omega(d_\alpha, d_\alpha^{-1}ld_\alpha)^z} \mu(zlzl)_{jj} \\ &\stackrel{*}{=} \pm \omega(zl, zl) \text{tr}[\mu(zlzl)] \end{aligned} \quad (\text{B.35})$$

となる. *印を付した等号において $\phi(zl) = 1$ という仮定を用いた. 最後の等号における乗数系の計算は, 2 コサイクル条件を繰り返し用いることで

$$\begin{aligned} &\frac{\omega(z, d_\alpha)\omega(l, d_\alpha)^z \omega(zd_\alpha, d_\alpha^{-1}ld_\alpha)\omega(d_\alpha^{-1}z, l)^{d_\alpha} \omega(zld_\alpha, d_\alpha^{-1}zl)}{\omega(z, l)^2\omega(d_\alpha, d_\alpha^{-1}z)\omega(d_\alpha, d_\alpha^{-1}ld_\alpha)^z} \\ &= \frac{\omega(l, d_\alpha)^z}{\omega(z, l)^2\omega(d_\alpha, d_\alpha^{-1}z)} \cdot \frac{\omega(z, d_\alpha)\omega(zd_\alpha, d_\alpha^{-1}ld_\alpha)}{\omega(d_\alpha, d_\alpha^{-1}ld_\alpha)^z} \cdot \omega(zld_\alpha, d_\alpha^{-1}zl)\omega(d_\alpha^{-1}z, l)^{d_\alpha} \\ &\stackrel{*}{=} \frac{\omega(l, d_\alpha)^z}{\omega(z, l)^2\omega(d_\alpha, d_\alpha^{-1}z)} \cdot \omega(z, ld_\alpha) \cdot \omega(zld_\alpha, d_\alpha^{-1}z)\omega(zlzl, l) \\ &= \frac{\omega(zlzl, l)}{\omega(z, l)} \cdot \frac{\omega(z, ld_\alpha)\omega(l, d_\alpha)^z}{\omega(z, l)} \cdot \frac{\omega(zld_\alpha, d_\alpha^{-1}z)}{\omega(d_\alpha, d_\alpha^{-1}z)} \\ &\stackrel{*}{=} \frac{\omega(zlzl, l)}{\omega(z, l)} \cdot \frac{\omega(zl, d_\alpha)}{\omega(zl, d_\alpha)} \cdot \frac{\omega(zl, z)}{\omega(zl, d_\alpha)} \\ &\stackrel{*}{=} \omega(zl, zl) \end{aligned} \quad (\text{B.36})$$

のように示せる. □

参考文献

- [1]J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer, Phys. Rev. **108**, 1175 (1957).
- [2]柳瀬 陽一, 物性研究 **97**, 824 (2012).
- [3]D. J. Van Harlingen, Rev. Mod. Phys. **67**, 515 (1995).
- [4]C. C. Tsuei and J. R. Kirtley, Rev. Mod. Phys. **72**, 969 (2000).
- [5]W. N. Hardy, D. A. Bonn, D. C. Morgan, R. Liang, and K. Zhang, Phys. Rev. Lett. **70**, 3999 (1993).

- [6]Z.-X. Shen, D. S. Dessau, B. O. Wells, D. M. King, W. E. Spicer, A. J. Arko, D. Marshall, L. W. Lombardo, A. Kapitulnik, P. Dickinson, S. Doniach, J. DiCarlo, T. Loeser, and C. H. Park, Phys. Rev. Lett. **70**, 1553 (1993).
- [7]Z.-X. Shen and D. Dessau, Phys. Rep. **253**, 1 (1995).
- [8]H. Ding, J. C. Campuzano, A. F. Bellman, T. Yokoya, M. R. Norman, M. Randeria, T. Takahashi, H. Katayama-Yoshida, T. Mochiku, K. Kadowaki, and G. Jennings, Phys. Rev. Lett. **74**, 2784 (1995), Phys. Rev. Lett. **75**, 1425(E) (erratum).
- [9]M. R. Norman, M. Randeria, H. Ding, J. C. Campuzano, and A. F. Bellman, Phys. Rev. B **52**, 15107 (1995).
- [10]H. Ding, M. R. Norman, J. C. Campuzano, M. Randeria, A. F. Bellman, T. Yokoya, T. Takahashi, T. Mochiku, and K. Kadowaki, Phys. Rev. B **54**, 9678 (1996).
- [11]G. E. Volovik and L. P. Gor'kov, Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz. **39**, 550 (1984), [JETP Lett. **39**, 674 (1984)].
- [12]G. E. Volovik and L. P. Gor'kov, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **88**, 1412 (1985), [Sov. Phys. JETP **61**, 843 (1985)].
- [13]P. W. Anderson, Phys. Rev. B **30**, 4000 (1984).
- [14]K. Ueda and T. M. Rice, Phys. Rev. B **31**, 7114 (1985).
- [15]E. I. Blount, Phys. Rev. B **32**, 2935 (1985).
- [16]M. Sigrist and K. Ueda, Rev. Mod. Phys. **63**, 239 (1991).
- [17]T. Nomoto, K. Hattori, and H. Ikeda, Phys. Rev. B **94**, 174513 (2016).
- [18]V. G. Yarzhemsky and E. N. Murav'ev, J. Phys.: Condens. Matter **4**, 3525 (1992).
- [19]V. G. Yarzhemsky, Phys. Status Solidi B **209**, 101 (1998).
- [20]V. G. Yarzhemsky, Int. J. Quant. Chem. **80**, 133 (2000).
- [21]V. G. Yarzhemsky, AIP Conf. Proc. **678**, 343 (2003).
- [22]V. G. Yarzhemsky, J. Opt. Adv. Mater. **10**, 1759 (2008).
- [23]V. G. Yarzhemsky, J. Phys. Soc. Jpn. **87**, 114711 (2018).
- [24]V. G. Yarzhemsky, Symmetry **13**, 1435 (2021).
- [25]M. R. Norman, Phys. Rev. B **52**, 15093 (1995).
- [26]T. Micklitz and M. R. Norman, Phys. Rev. B **80**, 100506(R) (2009).
- [27]T. Micklitz and M. R. Norman, Phys. Rev. B **95**, 024508 (2017).
- [28]T. Micklitz and M. R. Norman, Phys. Rev. Lett. **118**, 207001 (2017).
- [29]Y. Yanase, Phys. Rev. B **94**, 174502 (2016).
- [30]T. Nomoto and H. Ikeda, J. Phys. Soc. Jpn. **86**, 023703 (2017).
- [31]T. c. v. Bzdušek and M. Sigrist, Phys. Rev. B **96**, 155105 (2017).
- [32]S. Kobayashi, K. Shiozaki, Y. Tanaka, and M. Sato, Phys. Rev. B **90**, 024516 (2014).
- [33]S. Kobayashi, Y. Yanase, and M. Sato, Phys. Rev. B **94**, 134512 (2016).
- [34]S. Kobayashi, S. Sumita, Y. Yanase, and M. Sato, Phys. Rev. B **97**, 180504(R) (2018).
- [35]S. Sumita and Y. Yanase, Phys. Rev. B **97**, 134512 (2018).
- [36]角田 峻太郎 小林 伸吾, 固体物理 **55**, 463 (2020).
- [37]S. Sumita, *Modern Classification Theory of Superconducting Gap Nodes* (Springer, Singapore, 2021).

- [38]S. Sumita and Y. Yanase, Prog. Theo. Exp. Phys. 10.1093/ptep/ptab124 (2021), ptab124.
- [39]K. V. Samokhin, Phys. Rev. B **100**, 054501 (2019).
- [40]S. Ono and K. Shiozaki, Phys. Rev. X **12**, 011021 (2022).
- [41]F. Tang, S. Ono, X. Wan, and H. Watanabe, arXiv:2106.11985 .
- [42]S. Sumita, T. Nomoto, K. Shiozaki, and Y. Yanase, Phys. Rev. B **99**, 134513 (2019).
- [43]R. P. Singh, A. D. Hillier, B. Mazidian, J. Quintanilla, J. F. Annett, D. M. Paul, G. Balakrishnan, and M. R. Lees, Phys. Rev. Lett. **112**, 107002 (2014).
- [44]D. Singh, J. A. T. Barker, A. Thamizhavel, D. M. Paul, A. D. Hillier, and R. P. Singh, Phys. Rev. B **96**, 180501 (2017).
- [45]D. Singh, S. K. P., J. A. T. Barker, D. M. Paul, A. D. Hillier, and R. P. Singh, Phys. Rev. B **97**, 100505 (2018).
- [46]T. Shang, M. Smidman, A. Wang, L.-J. Chang, C. Baines, M. K. Lee, Z. Y. Nie, G. M. Pang, W. Xie, W. B. Jiang, M. Shi, M. Medarde, T. Shiroka, and H. Q. Yuan, Phys. Rev. Lett. **124**, 207001 (2020).
- [47]K. Kamiya, T. Takeuchi, N. Kabeya, N. Wada, T. Ishimasa, A. Ochiai, K. Deguchi, K. Imura, and N. K. Sato, Nat. Commun. **9**, 154 (2018).
- [48]犬井 鉄郎, 田辺 行人, 小野寺 嘉孝, 「応用群論－群表現と物理学－」, 14th ed. (裳華房, 2003).
- [49]C. J. Bradley and A. P. Cracknell, *The Mathematical Theory of Symmetry in Solids* (Oxford University Press, Oxford, 1972).
- [50]渡辺 悠樹, 固体物理 **54**, 187 (2019).
- [51]渡辺 悠樹, 固体物理 **54**, 237 (2019).
- [52]渡辺 悠樹, 固体物理 **54**, 333 (2019).
- [53]渡辺 悠樹, 固体物理 **54**, 505 (2019).
- [54]渡辺 悠樹, 固体物理 **55**, 139 (2020).
- [55]Bilbao crystallographic server, <https://www.cryst.ehu.es/>.
- [56]H. Maschke, Mathematische Annalen **50**, 492 (1898).
- [57]H. Maschke, Mathematische Annalen **52**, 363 (1899).
- [58]M. R. Zirnbauer, J. Math. Phys. **62**, 021101 (2021).
- [59]E. P. Wigner, *Group Theory and its Application to the Quantum Mechanics of Atomic Spectra* (Academic Press, New York, 1959).
- [60]C. Herring, Phys. Rev. **52**, 361 (1937).
- [61]G. W. Mackey, Am. J. Math. **73**, 576 (1951).
- [62]G. W. Mackey, Am. J. Math. **75**, 387 (1953).
- [63]C. J. Bradley and B. L. Davies, J. Math. Phys. **11**, 1536 (1970).
- [64]P. M. van den Broek, J. Phys. A: Math. Gen. **11**, 813 (1978).
- [65]T. Yoshida, A. Daido, N. Kawakami, and Y. Yanase, Phys. Rev. B **99**, 235105 (2019).