波数空間の乗数系についてのメモ

塩崎　謙

October 13, 2022

$\mathcal{G}$を磁気空間群，Tを並進群，$G=\mathcal{G}/T$を磁気点群とし，切断$\boldsymbol{a}:G\to\mathcal{G}$を選ぶ． $p_g\in O(d)$を点群の元$g\in G$の実空間における作用を表す$d\times d$直行行列とする． $\phi:G\to\pm 1$により，ユニタリ/反ユニタリを指定する．関係式

$$\{p_g|\boldsymbol{a}_g\}\{p_h|\boldsymbol{a}_h\}=\{1|p_g\boldsymbol{a}_h+\boldsymbol{a}_g-\boldsymbol{a}_{gh}\}\{p_{gh}|\boldsymbol{a}_{gh}\},\quad p_g\boldsymbol{a}_h+\boldsymbol{a}_g-\boldsymbol{a}_{gh}\in T, \tag{1}$$

に注意．

BZにおいて周期的な基底を考える．点群Gの表現行列$U_g(\boldsymbol{k})$は以下の関係式を満たす．

$$U_g(\phi_h p_h\boldsymbol{k})U_h(\boldsymbol{k})^{\phi_g}=z^{\rm int}_{g,h}e^{-i\phi_{gh}p_{gh}\boldsymbol{k}\cdot(p_g\boldsymbol{a}_h+\boldsymbol{a}_g-\boldsymbol{a}_{gh})}U_{gh}(\boldsymbol{k}) \tag{2}$$

ここで，行列Xに対して

$$X^{\phi_g}=\left\{\begin{array}{ll}X & (\phi_g=1),\\ X^* & (\phi_g=-1),\end{array}\right. \tag{3}$$

を導入した．また，$z^{\rm int}_{g,h}$は内部自由度からくる乗数系であり$\boldsymbol{k}$には依存しない．以下では$U_g(\boldsymbol{k})$はBZで周期的であるとする． $\boldsymbol{k}$における小群$G_{\boldsymbol{k}}\subset G$を

$$G_{\boldsymbol{k}}=\{g\in G|{}^\exists\mathbf{G}\in\hat{T}\text{ s.t. }\phi_g p_g\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}+\mathbf{G}\} \tag{4}$$

と書く．ここで，$\hat{T}$は逆格子ベクトルの集合．

$\boldsymbol{k}$における小群$\boldsymbol{k}\in G_{\boldsymbol{k}}$に群元を制限すると，(2)は

$$U_g(\boldsymbol{k})U_h(\boldsymbol{k})^{\phi_g}=z^{\rm int}_{g,h}e^{-i\boldsymbol{k}\cdot(p_g\boldsymbol{a}_h+\boldsymbol{a}_g-\boldsymbol{a}_{gh})}U_{gh}(\boldsymbol{k}),\quad g,h\in G_{\boldsymbol{k}} \tag{5}$$

となる．つまり，$\{U_g(\boldsymbol{k})\}_{g\in G_{\boldsymbol{k}}}$は小群$G_{\boldsymbol{k}}$の，乗数系$\{z^{\rm int}_{g,h}e^{-i\boldsymbol{k}\cdot(p_g\boldsymbol{a}_h+\boldsymbol{a}_g-\boldsymbol{a}_{gh})}\}_{g,h\in G_{\boldsymbol{k}}}$における（射影）表現．

$G_{\boldsymbol{k}}$のユニタリな対称性の元からなる部分群を

$$G^0_{\boldsymbol{k}}=\{g\in G_{\boldsymbol{k}}|\phi_g=1\} \tag{6}$$

と書く． pセル$\boldsymbol{k}$の表現$\{U_g(\boldsymbol{k})\}_{g\in G^0_{\boldsymbol{k}}}$の，$p$セル$\boldsymbol{k}$に隣接する$(p{+}1)$セル$\boldsymbol{k}'$における既約表現$\{\{U^\alpha_g(\boldsymbol{k}')\}_{g\in G^0_{\boldsymbol{k}'}}\}_\alpha$による既約分解を計算したい． $\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'$は異なる点であり，乗数系(2)が異なるため，$\boldsymbol{k}$の表現$\{U_g(\boldsymbol{k})\}_{g\in G^0_{\boldsymbol{k}}}$を乗数系を$\boldsymbol{k}'$の乗数系に合わせる必要がある．これは以下で実行できる．

$$U_g(\boldsymbol{k})\mapsto U_g(\boldsymbol{k})e^{-i(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{a}_g},\quad g\in G^0_{\boldsymbol{k}'}. \tag{7}$$

よって，既約分解公式は以下で与えられる．

$$U(\boldsymbol{k})=\bigoplus_\alpha n_\alpha U^\alpha(\boldsymbol{k}'), \tag{8}$$

$$n_\alpha=\frac{1}{|G^0_{\boldsymbol{k}'}|}\sum_{g\in G^0_{\boldsymbol{k}'}}\mathrm{tr}\,[U^\alpha_g(\boldsymbol{k}')]^*\mathrm{tr}\,[U_g(\boldsymbol{k})]e^{-i(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{a}_g}\in\mathbb{Z}_{\geq 0}. \tag{9}$$

波数点$\boldsymbol{k}$における乗数系を取り替えて，予め既約分解における因子$e^{-i(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{a}_g}$を消すことができる． $\boldsymbol{k}$における乗数系を以下のように取り替える．

$$U_g(\boldsymbol{k}) = u_g(\boldsymbol{k})e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a}_g}, \quad g \in G_{\boldsymbol{k}}. \tag{10}$$

乗数系の取替であるため，半ユニタリな元も含める．このとき，$u_g(\boldsymbol{k})$と因子$e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a}_g}$は共にBZにおいて周期的でないことに注意する．よって，$U_g(\boldsymbol{k}+\mathbf{G}) = U_g(\boldsymbol{k})$であるが，一般には$u_g(\boldsymbol{k}+\mathbf{G}) \neq u_g(\boldsymbol{k})$である．射影表現$\{u_g(\boldsymbol{k})\}_{g\in G_{\boldsymbol{k}}}$が従う乗数系は，

$$u_g(\boldsymbol{k})e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a}_g}[u_h(\boldsymbol{k})e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a}_h}]^{\phi_g} = z^{\mathrm{int}}_{g,h}e^{-i\boldsymbol{k}\cdot(p_g\boldsymbol{a}_h+\boldsymbol{a}_g-\boldsymbol{a}_{gh})}u_{gh}(\boldsymbol{k})e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a}_{gh}}, \quad g,h \in G_{\boldsymbol{k}}, \tag{11}$$

整形して以下を得る．

$$\boxed{u_g(\boldsymbol{k})u_h(\boldsymbol{k})^{\phi_g} = z^{\mathrm{int}}_{g,h}e^{i\phi_g\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a}_h}e^{-i\boldsymbol{k}\cdot p_g\boldsymbol{a}_h}u_{gh}(\boldsymbol{k}), \quad g,h \in G_{\boldsymbol{k}}} \tag{12}$$

乗数系を取り替えているだけなので，この乗数系はWigner判定条件にも適用できることに注意する．特に，ユニタリな群元に制限すると，

$$\boxed{u_g(\boldsymbol{k})u_h(\boldsymbol{k}) = z^{\mathrm{int}}_{g,h}e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{a}_h-p_g\boldsymbol{a}_h)}u_{gh}(\boldsymbol{k}), \quad g,h \in G^0_{\boldsymbol{k}}.} \tag{13}$$

射影表現$\{u_g(\boldsymbol{k})\}_{g\in G^0_{\boldsymbol{k}}}$を用いると既約分解公式は

$$n_\alpha = \frac{1}{|G^0_{\boldsymbol{k}'}|}\sum_{g\in G^0_{\boldsymbol{k}'}}(\mathrm{tr}\,[u^\alpha_g(\boldsymbol{k}')]e^{-i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{a}_g})^*(\mathrm{tr}\,[u_g(\boldsymbol{k})]e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a}_g})e^{-i(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{a}_g}, \tag{14}$$

より，$\boldsymbol{k}$依存する因子が消えて，以下のようになる．

$$\boxed{n_\alpha = \frac{1}{|G^0_{\boldsymbol{k}'}|}\sum_{g\in G^0_{\boldsymbol{k}'}}\mathrm{tr}\,[u^\alpha_g(\boldsymbol{k}')]^*\mathrm{tr}\,[u_g(\boldsymbol{k})]} \tag{15}$$

次に，波数点$\boldsymbol{k}$における表現$\{u_g(\boldsymbol{k})\}_{g\in G_{\boldsymbol{k}}}$が，$\boldsymbol{k}$と等価な波数点$\phi_h p_h\boldsymbol{k}+\mathbf{G}$における表現にどのようにマップされるかを見る．一般論より，

$$\mathrm{tr}\,[U_g(\phi_h p_h\boldsymbol{k}+\mathbf{G})] = \mathrm{tr}\,[U_g(\phi_h p_h\boldsymbol{k})] = \frac{z^{\boldsymbol{k}}_{g,h}}{z^{\boldsymbol{k}}_{h,h^{-1}gh}}\mathrm{tr}\,[U_{h^{-1}gh}(\boldsymbol{k})]^{\phi_h}, \quad g \in G_{\phi_h p_h\boldsymbol{k}} = hG_{\boldsymbol{k}}h^{-1}. \tag{16}$$

ここで，

$$z^{\boldsymbol{k}}_{g,h} = z^{\mathrm{int}}_{g,h}e^{-i\phi_{gh}p_{gh}\boldsymbol{k}\cdot(p_g\boldsymbol{a}_h+\boldsymbol{a}_g-\boldsymbol{a}_{gh})}, \quad g,h \in G, \tag{17}$$

である． $g \in G_{\phi_h p_h\boldsymbol{k}}$のとき$\phi_g p_g\phi_h p_h\boldsymbol{k} \equiv \phi_h p_h\boldsymbol{k}$であり，また$p_g\boldsymbol{a}_h+\boldsymbol{a}_g-\boldsymbol{a}_{gh} \in T$であるから，

$$z^{\boldsymbol{k}}_{g,h} = z^{\mathrm{int}}_{g,h}e^{-i\phi_h p_h\boldsymbol{k}\cdot(p_g\boldsymbol{a}_h+\boldsymbol{a}_g-\boldsymbol{a}_{gh})}, \quad g \in G_{\phi_h p_h\boldsymbol{k}}, \tag{18}$$

に注意する．

$$\mathrm{tr}\,[U_g(\phi_h p_h\boldsymbol{k}+\mathbf{G})] = \mathrm{tr}\,[u_g(\phi_h p_h\boldsymbol{k}+\mathbf{G})]e^{-i(\phi_h p_h\boldsymbol{k}+\mathbf{G})\cdot\boldsymbol{a}_g}, \quad g \in G_{\phi_h p_h\boldsymbol{k}}, \tag{19}$$

$$\mathrm{tr}\,[U_{h^{-1}gh}(\boldsymbol{k})] = \mathrm{tr}\,[u_{h^{-1}gh}(\boldsymbol{k})]e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a}_{h^{-1}gh}}, \quad g \in G_{\phi_h p_h\boldsymbol{k}}, \tag{20}$$

を代入すると，

$$
\begin{aligned}
&\mathrm{tr}\,[u_g(\phi_h p_h \boldsymbol{k}+\mathbf{G})] &(21)\\
&= e^{i(\phi_h p_h \boldsymbol{k}+\mathbf{G})\cdot \boldsymbol{a}_g} e^{-i\phi_{gh} p_{gh} \boldsymbol{k}\cdot(p_g \boldsymbol{a}_h+\boldsymbol{a}_g-\boldsymbol{a}_{gh})} e^{i\phi_{gh} p_{gh} \boldsymbol{k}\cdot(p_h \boldsymbol{a}_{h^{-1}gh}+\boldsymbol{a}_h-\boldsymbol{a}_{gh})} [\mathrm{tr}\,[u_{h^{-1}gh}(\boldsymbol{k})] e^{-i\boldsymbol{k}\cdot \boldsymbol{a}_{h^{-1}gh}}]^{\phi_h} &(22)\\
&= \frac{z^{\mathrm{int}}_{g,h}}{z^{\mathrm{int}}_{h,h^{-1}gh}} e^{i(\phi_h p_h \boldsymbol{k}+\mathbf{G})\cdot \boldsymbol{a}_g} e^{-i\phi_h p_h \boldsymbol{k}\cdot(p_g \boldsymbol{a}_h+\boldsymbol{a}_g-\boldsymbol{a}_{gh})} e^{i\phi_h p_h \boldsymbol{k}\cdot(p_h \boldsymbol{a}_{h^{-1}gh}+\boldsymbol{a}_h-\boldsymbol{a}_{gh})} [\mathrm{tr}\,[u_{h^{-1}gh}(\boldsymbol{k})] e^{-i\boldsymbol{k}\cdot \boldsymbol{a}_{h^{-1}gh}}]^{\phi_h} &(23)\\
&= \frac{z^{\mathrm{int}}_{g,h}}{z^{\mathrm{int}}_{h,h^{-1}gh}} e^{i\mathbf{G}\cdot \boldsymbol{a}_g} e^{-i\phi_h p_h \boldsymbol{k}\cdot p_g \boldsymbol{a}_h} e^{i\phi_h p_h \boldsymbol{k}\cdot \boldsymbol{a}_h} \mathrm{tr}\,[u_{h^{-1}gh}(\boldsymbol{k})]^{\phi_h}, \quad g \in G_{\phi_h p_h \boldsymbol{k}}. &(24)
\end{aligned}
$$

より，表現のマップは以下で与えられる.

$$
\boxed{\mathrm{tr}\,[u_g(\phi_h p_h \boldsymbol{k}+\mathbf{G})] = \frac{z^{\mathrm{int}}_{g,h}}{z^{\mathrm{int}}_{h,h^{-1}gh}} e^{i\mathbf{G}\cdot \boldsymbol{a}_g} e^{i\phi_h p_h \boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{a}_h-p_g \boldsymbol{a}_h)} \mathrm{tr}\,[u_{h^{-1}gh}(\boldsymbol{k})]^{\phi_h}, \quad g \in G_{\phi_h p_h \boldsymbol{k}}.} \tag{25}
$$

同じことだが，以下も便利.

$$
\boxed{\mathrm{tr}\,[u_{hgh^{-1}}(\phi_h p_h \boldsymbol{k}+\mathbf{G})] = \frac{z^{\mathrm{int}}_{hgh^{-1},h}}{z^{\mathrm{int}}_{h,g}} e^{i\mathbf{G}\cdot \boldsymbol{a}_{hgh^{-1}}} e^{i\phi_h p_h \boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{a}_h-p_{hgh^{-1}} \boldsymbol{a}_h)} \mathrm{tr}\,[u_g(\boldsymbol{k})]^{\phi_h}, \quad g \in G_{\boldsymbol{k}}.} \tag{26}
$$

A　乗数系の例

A.1　螺旋軸

n回の螺旋軸$k_z \in [0, 2\pi]$を考える． $U_g(k_z)$の乗数系においては，点群$\mathbb{Z}_n$の生成子をσとして，

$$
[U_\sigma(k_z)]^n = e^{-ik_z} \tag{27}
$$

である．一方で，$u_g(k_z)$の乗数系においては，

$$
[u_\sigma(k_z)]^n = [U_\sigma(k_z) e^{ik_z/n}]^n = 1 \tag{28}
$$

である.

$k_z = 0, 2\pi$を等価な異なる0セルとすると， $U_\sigma(0) = U_\sigma(2\pi)$であるが，乗数系の変化のため，

$$
u_\sigma(0) = u_\sigma(2\pi) e^{-2\pi i/n} \tag{29}
$$

に注意.

A.2　pmg

文様群pmgの$\boldsymbol{k} = (\pi, 0)$点を考える.

$$
G_{\boldsymbol{k}} = \{e, m_x, m_y, c_2\} \tag{30}
$$

である． $\boldsymbol{a}_{m_y} = (1/2, 0)$とする．波数点$(0,0)$においては鏡映$M_x$と映進$G_y$は可換$u_{m_x}(\mathbf{0}) u_{m_y}(\mathbf{0}) = u_{m_y}(\mathbf{0}) u_{m_x}(\mathbf{0})$であるが，$\boldsymbol{k} = (\pi, 0)$においては,

$$
\begin{aligned}
u_{m_x}(\pi,0) u_{m_y}(\pi,0) &= e^{i(\pi,0)\cdot((1/2,0)-m_x(1/2,0))} u_{c_2}(\pi,0) = -u_{c_2}(\pi,0), &(31)\\
u_{m_y}(\pi,0) u_{m_x}(\pi,0) &= e^{i(\pi,0)\cdot((0,0)-m_y(0,0))} u_{c_2}(\pi,0) = u_{c_2}(\pi,0), &(32)
\end{aligned}
$$

であるので，反可換

$$u_{m_x}(\pi, 0) u_{m_y}(\pi, 0) = u_{m_y}(\pi, 0) u_{m_x}(\pi, 0) \tag{33}$$

である．