メモ

塩崎　謙

September 16, 2020

- 実空間における磁気点群作用の行列p_gに対して，波数空間への磁気点群作用の行列は

$$\tilde{p}_g = \phi_g [p_g^{-1}]^T$$

で与えられる．いちいち˜を導入するのは煩雑なので，共通の記号p_gを用い，文脈で判断する．

1　磁気空間群について

- Type Iは空間群, Type IIは空間群$\times \mathbb{Z}_2^T$．Type IVは空間群と半端な磁気並進（P,Cなどの下付き添え字によって指定）によって生成される．それ以外はType IIIであり，磁気対称性に$'$を付けて指定される． Wikipedia [1]の説明がわかりやすいだろう．
- BNSを用いる．
- Type IV磁気空間群における，半端な並進の表．[2]

Symbol	fractional
$\mathrm{P_S}$	$(0, 0, 1/2)$triclinic only
$\mathrm{P_a}$	$(1/2, 0, 0)$
$\mathrm{P_b}$	$(0, 1/2, 0)$
$\mathrm{P_c}$	$(0, 0, 1/2)$
$\mathrm{P_A}$	$(0, 1/2, 1/2)$
$\mathrm{P_B}$	$(1/2, 0, 1/2)$
$\mathrm{P_C}$	$(1/2, 1/2, 0)$
$\mathrm{P_I}$	$(1/2, 1/2, 1/2)$
$\mathrm{A_a}$	$(1/2, 0, 0)$
$\mathrm{A_b}$	$(0, 1/2, 0)$
$\mathrm{A_B}$	$(1/2, 0, 1/2)$
$\mathrm{B_b}$	$(0, 1/2, 0)$
$\mathrm{B_a}$	$(1/2, 0, 0)$
$\mathrm{B_A}$	$(0, 1/2, 1/2)$
$\mathrm{C_c}$	$(0, 0, 1/2)$
$\mathrm{C_a}$	$(1/2, 0, 0)$
$\mathrm{C_A}$	$(0, 1/2, 1/2)$
$\mathrm{F_S}$	$(1/2, 1/2, 1/2)$
$\mathrm{I_a}$	$(1/2, 0, 0)$
$\mathrm{I_b}$	$(0, 1/2, 0)$
$\mathrm{I_c}$	$(0, 0, 1/2)$
$\mathrm{R_I}$	$(0, 0, 1/2)$

[1] https://en.wikipedia.org/wiki/Magnetic_space_group

[2] https://stokes.byu.edu/iso/magneticspacegroupshelp.php

磁気層群は，対称性変換が

$$(x,y,z)\mapsto(q_x(x,y),q_y(x,y),\pm z)+(t_x,t_y,0) \tag{1}$$

で与えられる群であり，磁気空間群から機械的に検索することができる．検索の際には，(x,y,z)の軸を回転させる必要もあることに注意．磁気層群の名前をデータとして入れて，磁気空間群を検索すると良いだろう．名前の変換ルールは以下の通り．

- 回転なしのとき， $p\mapsto P, c\mapsto C$ のみ．
- $(x,y,z)\mapsto(y,z,x)$のとき（磁気層群のz軸が磁気空間群のx軸に対応）， $(p,p_a,p_b,p_C,c,c_a)\mapsto(P,P_b,P_c,P_A,A,A_b)$, 及び，映進について$(a,b,c)\mapsto(b,c,a)$.
- $(x,y,z)\mapsto(z,x,y)$のとき（磁気層群のz軸が磁気空間群のy軸に対応），$(p,p_a,p_b,p_C)\mapsto(P,P_c,P_a,P_B)$, 及び，映進について$(a,b,c)\mapsto(c,a,b)$.

2 $\mathbb{Z}_2$の処理

2.1 $\mathrm{Ker}\,C$

$$\begin{array}{ccccc}
P & \longrightarrow & \mathbb{Z}^D & \longrightarrow & \mathbb{Z}^D/P \\
\big\downarrow{\scriptstyle D'} & & \big\downarrow{\scriptstyle C'} & & \big\downarrow{\scriptstyle C} \\
\tilde{P} & \longrightarrow & \mathbb{Z}^d & \longrightarrow & \mathbb{Z}^d/\tilde{P}
\end{array} \tag{2}$$

計算したいのは$\mathrm{Ker}\,C$． Cは次の形

$$C=\begin{bmatrix} A & O \\ B & D \end{bmatrix}. \tag{3}$$

ここで，Aは$\mathbb{Z}$行列，B,Dは$\mathbb{Z}_2$行列． $\mathbb{Z}$の行列への$\mathbb{Z}_2$行列B,Dのリフトをひとつ取り，これをB',D'と書き，

$$C'=\begin{bmatrix} A & O \\ B' & D' \end{bmatrix} \tag{4}$$

と書く．

図式の可換性を確認する． $\mathbb{Z}^D$のベクトルを$(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}')^T$と書くと，

$$(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}')\xrightarrow{\mathrm{mod}\ 2}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})\xrightarrow{C}(A\boldsymbol{x},B\boldsymbol{x}+D\boldsymbol{y}), \tag{5}$$

$$(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}')\xrightarrow{C'}(A\boldsymbol{x},B'\boldsymbol{x}+D'\boldsymbol{y}')\xrightarrow{\mathrm{mod}\ 2}(A\boldsymbol{x},B\boldsymbol{x}+D\boldsymbol{y}) \tag{6}$$

より，図式の右側の可換性はOK．図式の左側は

$$\boldsymbol{y}'\xrightarrow{2}2\boldsymbol{y}'\xrightarrow{C'}2D'\boldsymbol{y}', \tag{7}$$

$$\boldsymbol{y}'\xrightarrow{D'}D'\boldsymbol{y}'\xrightarrow{2}2D'\boldsymbol{y}' \tag{8}$$

より．

$\mathbb{Z}^D$の元のうち，C'で送って部分格子$\tilde{P}$に入るものが$\mathrm{mod}\ 2\circ C'$でゼロに．mod 2を取り，

$$\mathrm{Ker}\,C\cong C'^{-1}(\tilde{P})/P \tag{9}$$

を得る．このとき，図式の左側の可換性より， $P \subset C'^{-1}(\tilde{P})$に注意． $C'^{-1}(\tilde{P})$を計算する．$\tilde{P}$の基底を$\tilde{\boldsymbol{p}}_1, \dots, \tilde{\boldsymbol{p}}_{d_p}$と書くと，条件$C'(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) \in \tilde{P}$は，あるベクトル$\tilde{\boldsymbol{n}} \in \mathbb{Z}^{d_p}$が存在して，

$$C'(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}') = \sum_{i=1}^{d_p} 2\tilde{n}_i \tilde{\boldsymbol{p}}_i \tag{10}$$

@@@

3 超伝導ギャップ関数と乗数系

ギャップ関数は磁気点群の何らかの表現をなす．自明表現でなければ常伝導状態の磁気空間群対称性の一部が破れるが（電磁場の自由度は考慮しない），電子の$U(1)$対称性を用いてある程度は対称性を回復できる．

常伝導の自由度の内部自由度由来の乗数系を$z^{\mathrm{sp}}_{g,h}$とする．ここでは電子系に限らず，$z^{\mathrm{sp}}_{g,h}$は一般の$U(1)$値を取るものとする． $\xi_g \in U(1), g \in P$に対して，超伝導ギャップ関数$\Delta(\boldsymbol{k})$が磁気点群Pに対して次の関係式を満たす場合を考える．

$$\xi_g \Delta(\phi_g p_g \boldsymbol{k}) = \begin{cases} U^{\boldsymbol{k}}_g \Delta(\boldsymbol{k}) [U^{-\boldsymbol{k}}_g]^T & (\phi_g = 1) \\ U^{\boldsymbol{k}}_g \Delta(\boldsymbol{k})^* [U^{-\boldsymbol{k}}_g]^T & (\phi_g = -1) \end{cases}, \tag{11}$$

$$\xi_g \xi_h^{\phi_g} = \xi_{gh} (z^{\mathrm{sp}}_{g,h})^2. \tag{12}$$

第 2 式の導出についてはAppendix **??**を見よ．電子系の場合はξ_gはPの 1 次元表現となる． BdGハミルトニアンを

$$H(\boldsymbol{k}) = \begin{pmatrix} h(\boldsymbol{k}) & \Delta(\boldsymbol{k}) \\ \Delta(\boldsymbol{k})^\dagger & -h(-\boldsymbol{k})^T \end{pmatrix}_\tau \tag{13}$$

とする．常伝導部分は磁気点群対称性を満たす．

$$U^{\boldsymbol{k}}_g h(\boldsymbol{k}) = h(\phi_g p_g \boldsymbol{k}) U^{\boldsymbol{k}}_g. \tag{14}$$

[3] BdGハミルトニアンは構成より，PHS

$$\rho_C H(\boldsymbol{k}) = -H(-\boldsymbol{k}) \rho_C, \quad \rho_C = \tau_x K \tag{16}$$

を持つ．（内部対称性なので$\boldsymbol{k}$依存せず，$\rho^{\boldsymbol{k}}_C$の$\boldsymbol{k}$を省いた．）さらに，磁気点群Pの対称性は

$$\rho^{\boldsymbol{k}}_g H(\boldsymbol{k}) = H(\phi_g p_g \boldsymbol{k}) \rho^{\boldsymbol{k}}_g, \quad \rho^{\boldsymbol{k}}_g = \begin{pmatrix} U^{\boldsymbol{k}}_g & \\ & \xi_g (U^{-\boldsymbol{k}}_g)^* \end{pmatrix}_\tau K^{\frac{1-\phi_g}{2}}, \quad g \in P \tag{17}$$

となる．関係式

$$\rho^{-\boldsymbol{k}}_g \rho_C = \xi_g \rho_C \rho^{\boldsymbol{k}}_g \tag{18}$$

に注意． P対称性を確認しよう． $\phi_g = 1$のとき

$$\rho^{\boldsymbol{k}}_g H(\boldsymbol{k}) = \begin{pmatrix} U^{\boldsymbol{k}}_g & \\ & \xi_g (U^{-\boldsymbol{k}}_g)^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h(\boldsymbol{k}) & \Delta(\boldsymbol{k}) \\ \Delta(\boldsymbol{k})^\dagger & -h(-\boldsymbol{k})^T \end{pmatrix} \tag{19}$$

$$= \begin{pmatrix} U^{\boldsymbol{k}}_g h(\boldsymbol{k}) & U^{\boldsymbol{k}}_g \Delta(\boldsymbol{k}) \\ \xi_g (U^{-\boldsymbol{k}}_g)^* \Delta(\boldsymbol{k})^\dagger & -\xi_g (U^{-\boldsymbol{k}}_g)^* h(-\boldsymbol{k})^T \end{pmatrix} \tag{20}$$

$$= \begin{pmatrix} h(p_g \boldsymbol{k}) U^{\boldsymbol{k}}_g & \xi_g \Delta(p_g \boldsymbol{k}) (U^{-\boldsymbol{k}}_g)^* \\ \Delta(p_g \boldsymbol{k})^\dagger U^{\boldsymbol{k}}_g & -\xi_g h(-p_g \boldsymbol{k})^T (U^{-\boldsymbol{k}}_g)^* \end{pmatrix} \tag{21}$$

$$= H(p_g \boldsymbol{k}) \rho^{\boldsymbol{k}}_g. \tag{22}$$

[3]フェルミオンの半交換関係より，$\Delta_{ij} = \langle \psi_i \psi_j \rangle = -\langle \psi_i \psi_j \rangle = -\Delta_{ji}$でギャップ関数は

$$\Delta(\boldsymbol{k})^T = -\Delta(-\boldsymbol{k}) \tag{15}$$

を満たすが，以下ではこの性質は用いない．また，PHSからも$\Delta(\boldsymbol{k})^T = -\Delta(-\boldsymbol{k})$が要請される．

$\phi_g=-1$のとき

$$\rho_g^{\boldsymbol{k}}H(\boldsymbol{k})=\begin{pmatrix}U_g^{\boldsymbol{k}}&\\&\xi_g(U_g^{-\boldsymbol{k}})^*\end{pmatrix}\begin{pmatrix}h(\boldsymbol{k})^*&\Delta(\boldsymbol{k})^*\\\Delta(\boldsymbol{k})^T&-h(-\boldsymbol{k})\end{pmatrix} \tag{23}$$

$$=\begin{pmatrix}U_g^{\boldsymbol{k}}h(\boldsymbol{k})^*&U_g^{\boldsymbol{k}}\Delta(\boldsymbol{k})^*\\\xi_g(U_g^{-\boldsymbol{k}})^*\Delta(\boldsymbol{k})^T&-\xi_g(U_g^{-\boldsymbol{k}})^*h(-\boldsymbol{k})\end{pmatrix} \tag{24}$$

$$=\begin{pmatrix}h(-p_g\boldsymbol{k})U_g^{\boldsymbol{k}}&\xi_g\Delta(p_g\boldsymbol{k})(U_g^{-\boldsymbol{k}})^*\\\Delta(-p_g\boldsymbol{k})^\dagger U_g^{\boldsymbol{k}}&-\xi_g h(p_g\boldsymbol{k})^T(U_g^{-\boldsymbol{k}})^*\end{pmatrix} \tag{25}$$

$$=H(-p_g\boldsymbol{k})\rho_g^{\boldsymbol{k}}. \tag{26}$$

より．

BdGハミルトニアンは磁気点群Pの対称性に加えてPHS Cを持つ．全体の対称性群$P\times\mathbb{Z}_2^C$に対する乗数系をひとつ決めよう．まずは，$\{\rho_g^{\boldsymbol{k}}\}_{g\in P}$の乗数系が常伝導部分と同一かどうかを確認しよう．

$$\rho_g^{\phi_h p_h\boldsymbol{k}}\rho_h^{\boldsymbol{k}}=\begin{pmatrix}U_g^{\phi_h p_h\boldsymbol{k}}&\\&\xi_g(U_g^{-\phi_h p_h\boldsymbol{k}})^*\end{pmatrix}_\tau K^{\frac{1-\phi_g}{2}}\times\begin{pmatrix}U_h^{\boldsymbol{k}}&\\&\xi_h(U_h^{-\boldsymbol{k}})^*\end{pmatrix}_\tau K^{\frac{1-\phi_h}{2}} \tag{27}$$

$$=\begin{pmatrix}z_{g,h}^{\boldsymbol{k}}U_{gh}^{\boldsymbol{k}}&\\&\xi_g\xi_h^{\phi_g}(z_{g,h}^{-\boldsymbol{k}}U_{gh}^{-\boldsymbol{k}})^*\end{pmatrix}K^{\frac{1-\phi_{gh}}{2}} \tag{28}$$

$$=z_{g,h}^{\boldsymbol{k}}\begin{pmatrix}U_{gh}^{\boldsymbol{k}}&\\&\xi_{gh}(U_{gh}^{-\boldsymbol{k}})^*\end{pmatrix}K^{\frac{1-\phi_{gh}}{2}}=z_{g,h}^{\boldsymbol{k}}\rho_{gh}^{\boldsymbol{k}}. \tag{29}$$

ここで，

$$\xi_g\xi_h^{\phi_g}(z_{g,h}^{-\boldsymbol{k}})^*=\xi_g\xi_h^{\phi_g}(z_{g,h}^{\mathrm{sp}}e^{i\phi_{gh}p_{gh}\boldsymbol{k}\cdot(p_g\boldsymbol{a}_h+\boldsymbol{a}_g-\boldsymbol{a}_{gh})})^* \tag{30}$$

$$=\xi_g\xi_h^{\phi_g}(z_{g,h}^{\mathrm{sp}})^*e^{-i\phi_{gh}p_{gh}\boldsymbol{k}\cdot(p_g\boldsymbol{a}_h+\boldsymbol{a}_g-\boldsymbol{a}_{gh})} \tag{31}$$

$$=\xi_{gh}z_{g,h}^{\mathrm{sp}}e^{-i\phi_{gh}p_{gh}\boldsymbol{k}\cdot(p_g\boldsymbol{a}_h+\boldsymbol{a}_g-\boldsymbol{a}_{gh})} \tag{32}$$

$$=\xi_{gh}z_{g,h}^{\boldsymbol{k}} \tag{33}$$

を用いた． $Cg=gC\in P\times\mathbb{Z}_2^C,g\in P$の形の元については

$$\rho_{Cg}^{\boldsymbol{k}}:=\rho_g^{-\boldsymbol{k}}\rho_C=\xi_g\rho_C\rho_g^{\boldsymbol{k}} \tag{34}$$

と定義しよう．すると，

$$\rho_g^{-\phi_h p_h\boldsymbol{k}}\rho_{Ch}^{\boldsymbol{k}}=\rho_g^{-\phi_h p_h\boldsymbol{k}}\rho_h^{-\boldsymbol{k}}\rho_C=z_{g,h}^{-\boldsymbol{k}}\rho_{gh}^{-\boldsymbol{k}}\rho_C=z_{g,h}^{-\boldsymbol{k}}\rho_{Cgh}^{\boldsymbol{k}}, \tag{35}$$

$$\rho_{Cg}^{\phi_h p_h\boldsymbol{k}}\rho_h^{\boldsymbol{k}}=\rho_g^{-\phi_h p_h\boldsymbol{k}}\rho_C\rho_h^{\boldsymbol{k}}=\rho_g^{-\phi_h p_h\boldsymbol{k}}\xi_h^{-1}\rho_h^{-\boldsymbol{k}}\rho_C=\xi_h^{-\phi_g}z_{g,h}^{-\boldsymbol{k}}\rho_{gh}^{-\boldsymbol{k}}\rho_C=\xi_h^{-\phi_g}z_{g,h}^{-\boldsymbol{k}}\rho_{Cgh}^{\boldsymbol{k}}, \tag{36}$$

$$\rho_{Cg}^{-\phi_h p_h\boldsymbol{k}}\rho_{Ch}^{\boldsymbol{k}}=\rho_g^{\phi_h p_h\boldsymbol{k}}\rho_C\rho_h^{-\boldsymbol{k}}\rho_C=\rho_g^{\phi_h p_h\boldsymbol{k}}\xi_h^{-1}\rho_h^{\boldsymbol{k}}=\xi_h^{-\phi_g}z_{g,h}^{\boldsymbol{k}}\rho_{gh}^{\boldsymbol{k}}. \tag{37}$$

となる．まとめると．

$$z_{g,Ch}^{\boldsymbol{k}}=z_{g,h}^{-\boldsymbol{k}}, \tag{38}$$

$$z_{Cg,h}^{\boldsymbol{k}}=\xi_h^{-\phi_g}z_{g,h}^{-\boldsymbol{k}}, \tag{39}$$

$$z_{Cg,Ch}^{\boldsymbol{k}}=\xi_h^{-\phi_g}z_{g,h}^{\boldsymbol{k}} \tag{40}$$

となる．

3.1　クラスC

クラスCのPHS

$$C^2 = -1 \tag{41}$$

の乗数系について考えよう．

$$C = \begin{pmatrix} & -1 \\ 1 & \end{pmatrix} K, \quad H_k = \begin{pmatrix} a_k & b_k \\ b_k^\dagger & c_k \end{pmatrix} \tag{42}$$

とすると，対称性$CH_k^* C^{-1} = -H_{-k}$は,

$$\begin{pmatrix} & -1 \\ 1 & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_k & b_k \\ b_k^\dagger & c_k \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} & 1 \\ -1 & \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -b_k^T & -c_k^* \\ a_k^* & b_k^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} & 1 \\ -1 & \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_k^* & -b_k^T \\ -b_k^* & a_k^* \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} a_{-k} & b_{-k} \\ b_{-k}^\dagger & c_{-k} \end{pmatrix} \tag{43}$$

より，

$$H_k = \begin{pmatrix} h_k & \Delta_k \\ \Delta_k^\dagger & -h_{-k}^T \end{pmatrix}, \quad h_k^\dagger = h_k, \quad \Delta_{-k} = \Delta_k^T \tag{44}$$

と書くことができる． h_kに磁気空間群の対称性

$$u_g^k h_k^{\phi_g} [u_g^k]^{-1} = h_{gk}, \quad gk := \phi_g p_g k \tag{45}$$

を課し，Δ_kにはクラスDと同様の以下の対称性を課す．

$$\xi_g \Delta(gk) = u_g^k \Delta(k)^{\phi_g} [u_g^{-k}]^T, \qquad \xi_g \xi_h^{\phi_g} = \xi_{gh} (z_{g,h}^{\mathrm{sp}})^2. \tag{46}$$

すると，

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} u_g^k & \\ & \xi_g [u_g^{-k}]^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h_k & \Delta_k \\ \Delta_k^\dagger & -h_{-k}^T \end{pmatrix}^{\phi_g} &= \begin{pmatrix} u_g^k h_k^{\phi_g} & u_g^k \Delta_k^{\phi_g} \\ \xi_g [u_g^{-k}]^* [\Delta_k^\dagger]^{\phi_g} & \xi_g [u_g^{-k}]^* [-h_{-k}^T]^{\phi_g} \end{pmatrix} & (47) \\ &= \begin{pmatrix} h_k u_g^k & \xi_g \Delta_{gk} [u_g^{-k}]^* \\ \Delta_{gk}^\dagger u_g^k & -\xi_g h_{-gk}^T [u_g^{-k}]^* \end{pmatrix} & (48) \\ &= \begin{pmatrix} h_{gk} & \Delta_{gk} \\ \Delta_{gk}^\dagger & -h_{-gk}^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_g^k & \\ & \xi_g [u_g^{-k}]^* \end{pmatrix} & (49) \end{aligned}$$

となり，対称性が復活する．

$$\rho_g^k := \begin{pmatrix} u_g^k & \\ & \xi_g [u_g^{-k}]^* \end{pmatrix} K^{\phi_g}, \quad \rho_C = i\tau_y K \tag{50}$$

と置く．Cを含めた代数関係を求めよう． ρ_g^kの表式はクラスDと同様だから，変更なし．問題はPHSとの代数関係.

$$\rho_{Cg}^k := \rho_g^{-k} \rho_C = \xi_g \rho_C \rho_g^k \tag{51}$$

と定義しよう．すると，

$$\rho_g^{-hk} \rho_{Ch}^k = \rho_g^{-hk} \rho_h^{-k} \rho_C = z_{g,h}^{-k} \rho_{gh}^{-k} \rho_C = z_{g,h}^{-k} \rho_{Cgh}^k, \tag{52}$$

$$\rho_{Cg}^{hk} \rho_h^h = \rho_g^{-hk} \rho_C \rho_h^k = \rho_g^{-hk} \xi_h^{-1} \rho_h^{-k} \rho_C = \xi_h^{-\phi_g} z_{g,h}^{-k} \rho_{gh}^{-k} \rho_C = \xi_h^{-\phi_g} z_{g,h}^{-k} \rho_{Cgh}^k, \tag{53}$$

$$\rho_{Cg}^{-hk} \rho_{Ch}^k = \rho_g^{hk} \rho_C \rho_h^{-k} \rho_C = -\rho_g^{hk} \xi_h^{-1} \rho_h^{\boldsymbol{k}} = -\xi_h^{-\phi_g} z_{g,h}^{\boldsymbol{k}} \rho_{gh}^{\boldsymbol{k}}. \tag{54}$$

となる．まとめると．

$$z_{g,Ch}^{\boldsymbol{k}} = z_{g,h}^{-\boldsymbol{k}}, \tag{55}$$

$$z_{Cg,h}^{\boldsymbol{k}} = \xi_h^{-\phi_g} z_{g,h}^{-\boldsymbol{k}}, \tag{56}$$

$$z_{Cg,Ch}^{\boldsymbol{k}} = -\xi_h^{-\phi_g} z_{g,h}^{\boldsymbol{k}} \tag{57}$$

となる．

4 超伝導体

- 磁気点群に$\mathbb{Z}_2^C = \{e, C\}$を追加する.
- $G \times \mathbb{Z}_2^C$の乗数系を求める. $g, h \in G$に対して,

$$
\begin{aligned}
z^{\boldsymbol{k}}_{g,Ch} &= z^{-\boldsymbol{k}}_{g,h}, && (58)\\
z^{\boldsymbol{k}}_{Cg,h} &= \xi_h^{-\phi_g} z^{-\boldsymbol{k}}_{g,h}, && (59)\\
z^{\boldsymbol{k}}_{Cg,Ch} &= \xi_h^{-\phi_g} z^{\boldsymbol{k}}_{g,h} && (60)
\end{aligned}
$$

- 表現のMapは,以下の公式.

$$
\chi^{\phi_h[p_h^T]^{-1}k}_{hgh^{-1}} = \frac{z^k_{hgh^{-1},h}}{z^k_{h,g}}[\chi^k_g]^{\phi_h}, \quad g \in G^0_k. \tag{61}
$$

- 軌道と代表点におけるユニタリ部分群の既約表現の数だけ,単位ベクトルを作る.

$$
b_{p,a,\alpha} = (\dots, 1, \dots) \tag{62}
$$

この単位ベクトルの集合に対して,制限を加える.

- Wigner判定条件を計算し,19通りのAZクラスを求める.

$$
G = G_0 + G_{\mathrm{TR}} + G_{\mathrm{PH}} + G_{\mathrm{chiral}} \tag{63}
$$

$$
\begin{aligned}
W^T &= \frac{1}{|G_0|}\sum_{g \in G_{\mathrm{TR}}} z_{g,g}\chi(g^2), && (64)\\
W^C &= \frac{1}{|G_0|}\sum_{g \in G_{\mathrm{PH}}} z_{g,g}\chi(g^2), && (65)\\
W^\Gamma &= \frac{1}{|G_0|}\sum_{g \in G_0} \chi(g)^* \frac{z_{g,c}}{z_{c,c^{-1}gc}}\chi(c^{-1}gc). && (66)
\end{aligned}
$$

$c^{-1}gc \in G_0$に注意. 対応表は以下.

W^T	W^C	W^Γ	AZ	$Classification$	$vector$
n/a	n/a	n/a	A	$\mathbb{Z}$	$(\dots, 1, \dots)$
n/a	n/a	1	$AIII$	0	$(\dots, 0, \dots)$
n/a	n/a	0	A_Γ	$\mathbb{Z}$	$(\dots, 1, \dots, -1, \dots)$
1	n/a	n/a	AI	$\mathbb{Z}$	$(\dots, 1, \dots)$
-1	n/a	n/a	AII	$2\mathbb{Z}$	$(\dots, 2, \dots)$
0	n/a	n/a	A_T	$\mathbb{Z}$	$(\dots, 1, \dots, 1, \dots)$
n/a	1	n/a	D	$\mathbb{Z}_2$	$(\dots, 1, \dots)$
n/a	-1	n/a	C	0	$(\dots, 0, \dots)$
n/a	0	n/a	A_C	$\mathbb{Z}$	$(\dots, 1, \dots, -1, \dots)$
0	0	0	$A_{T,C}$	$\mathbb{Z}$	$(\dots, 1, \dots, 1, \dots, -1, \dots, -1, \dots)$
0	0	1	$AIII_T$	0	$(\dots, 0, \dots, 0, \dots)$
1	0	0	AI_C	$\mathbb{Z}$	$(\dots, 1, \dots, -1, \dots)$
1	1	1	BDI	$\mathbb{Z}_2$	$(\dots, 1, \dots)$
0	1	0	D_T	$\mathbb{Z}_2$	$(\dots, 1, \dots, 1, \dots)$
-1	1	1	$DIII$	0	$(\dots, 0, \dots)$
-1	0	0	AII_C	$2\mathbb{Z}$	$(\dots, 2, \dots, -2, \dots)$
-1	-1	1	CII	0	$(\dots, 0, \dots)$
0	-1	0	C_T	0	$(\dots, 0, \dots, 0, \dots)$
1	-1	1	CI	0	$(\dots, 0, \dots)$

- Wigner判定条件が0となる場合に，対となる既約表現を探索する．この探索には，代表元$a \in G_{\mathrm{TR}}, b \in G_{\mathrm{PH}}$を要する．

$$O^T_{\alpha\beta} = \frac{1}{|G_0|}\sum_{g\in G_0} \chi_\alpha(g)^* \frac{z_{g,a}}{z_{a,a^{-1}ga}} \chi_\beta(a^{-1}ga)^* \tag{67}$$

- AHSSの計算． pセル軌道を$D^p_{a,i}$とする．最初のセルを代表元とする．$D^p_a := D^p_{a,1}$. pセル軌道bから$(p+1)$セル軌道aへの寄与を計算する． D^{p+1}_aに隣接するpセルのひとつを$h(D^p_b), h \in G \times \mathbb{Z}^C_2$とする．向きの一致/不一致を$s(h(D^p_b) \to D^{p+1}_a) \in \{\pm 1\}$とする．このとき，$D^p_b \to D^{p+1}_a$の寄与がある． D^p_bの既約表現βをD^{p+1}_aの既約表現で分解する． D^{p+1}_aのαへの寄与は

$$s(h(D^p_b) \to D^{p+1}_a) \times c(h) \times (h(\beta), \alpha) \in \mathbb{Z}. \tag{68}$$

ここで，$c(h) \in \{\pm 1\}$はPH型かどうかを指定する． $c(h)$を実装するひとつの方法は，既約表現$h(\beta)$の既約指標を予め(-1)倍することだ．これで，AZ対称性を考慮しない微分行列δ^p_1を得る．

$$\delta^p_1 : \mathcal{C}^p \to \mathcal{C}^{p+1}. \tag{69}$$

$\mathcal{C}^p$を，既約表現で生成される格子とする． $E^{0,0}_1, E^{1,0}_1$の基底ベクトルは，19通りのAZクラスに応じて，上の表で得られた成分を持つ． $E^{p,0}_1$の基底ベクトルの集合を$\boldsymbol{b}^{(p)}_j$と書く． $\boldsymbol{b}^{(p)}_j$は，既約表現で生成される格子の部分格子を定める．

$$E^{p,0}_1 = \mathrm{Im}\, \boldsymbol{b}^p_j. \tag{70}$$

微分$d^{0,0}_1$の行き先は，δ^0_1を$E^{0,0}_1$の基底ベクトルに作用させることにより得られる．例えば，ある基底ベクトル$\boldsymbol{b}^{(0)}$のAZクラスがA_Tのときは，

$$\boldsymbol{b}^{(0)} = (\dots, 1, 1, \dots)^T \tag{71}$$

の形をしている．もし，δ^0_1が

$$\delta^0_1 = \begin{pmatrix} \cdots 1 & 0 & \cdots \\ \cdots 0 & 1 & \cdots \\ & & \end{pmatrix} \tag{72}$$

の形を取るときは，

$$\delta^0_1 \boldsymbol{b}^{(0)} = (\dots, 1, 1, \dots)^T \in \mathcal{C}^1 \tag{73}$$

となる．これを$E^{1,0}_1$の基底で展開することにより，微分

$$d^{0,0}_1 : E^{0,0}_1 \to E^{1,0}_1 \tag{74}$$

を得る．展開するには，方程式

$$x_{1j}\boldsymbol{b}^{(1)}_1 + x_{2j}\boldsymbol{b}^{(1)}_2 + \cdots = \delta^0_1 \boldsymbol{b}^{(0)}_j \tag{75}$$

を解く．これは，基底$\boldsymbol{b}^{(1)}_i$の直交性 [4]を用いると，容易に解くことができる．つまり，

$$x_{ij} = \frac{(\boldsymbol{b}^{(1)}_i, \delta^0_1 \boldsymbol{b}^{(0)}_j)}{(\boldsymbol{b}^{(1)}_i, \boldsymbol{b}^{(1)}_i)}. \tag{76}$$

$x_{ij} \in \mathbb{Z}$は確認すべきだろう．これを$[d^{0,0}_1]_{ij} = x_{ij}$として，整数行列を得る．

[4]同変な波数点を$\mathcal{C}_p$に加えても直行性は保たれるだろうか．対称性が落ちる点があると，直交性が保たれない．実際，一般点を0セルに加えると，表現ランクとなり，直交しない．

準同型$\mathbb{Z}_2 \to \mathbb{Z}$は自明なので，$\boldsymbol{b}_i^{(1)}$の分類が$\mathbb{Z}$でかつ$\boldsymbol{b}_j^{(0)}$の分類が$\mathbb{Z}_2$である$x_{ij} \mapsto 0$とする．

$\mathbb{Z}_2$両立関係の処理をする． $\boldsymbol{b}_i^{(1)}$が$\mathbb{Z}_2$分類であれば，i成分が2のベクトル

$$(\dots, 2, \dots)^T \tag{77}$$

を$d_1^{0,0}$に加える．この行列をPと書く．リフト

$$\tilde{d}_1^{0,0} := (d_1^{0,0}, P) \tag{78}$$

を得る． $\tilde{d}_1^{0,0}$の核を取る． Nullspaceを用いれば整数ベクトルの集合であり，最小成分が±1の核を得る．

... Nullspaceを使うのは危険か？

これから，補助的な自由度を消すことにより，BSを得る．

- AIの計算．

$$\mathrm{Im}\,[AI \to E_1^{0,0}] \tag{79}$$

を計算したい． AIを生成する際に，PHSを考慮せずとも望みの結果が得られるのであれば楽だが，おそらくそうではないだろう． AIの計算にもWigner判定条件を施す．

計算は，$d_1^{0,0} : E_1^{0,0} \to E_1^{1,0}$の計算と同様．最初に，ユニタリ部分群を用いて，$\mathcal{C}_{\mathrm{AI}}$を構成し，Wigner判定条件を用いて，$\mathcal{C}_{\mathrm{AI}}$の部分格子$\boldsymbol{a}_j$を構成し，AIを得る．裸の微分行列

$$\delta_{\mathrm{AI}} : \mathcal{C}_{\mathrm{AI}} \to \mathcal{C}^0 \tag{80}$$

を計算する．これは，誘導表現を対象点において既約分解することにより得られる．準同型

$$d_{\mathrm{AI}} : AI \to E_1^{0,0} \tag{81}$$

の計算は$d_1^{0,0}$の計算と同様．

$$x_{ij} = \frac{(\boldsymbol{b}_i^{(0)}, \delta_{\mathrm{AI}}\boldsymbol{a}_j^{(0)})}{(\boldsymbol{b}_i^{(0)}, \boldsymbol{b}_i^{(0)})} \tag{82}$$

として，整数行列d_{AI}を得る．準同型$\mathbb{Z}_2 \to \mathbb{Z}$は自明なので，$\boldsymbol{b}_i^{(0)}$の分類が$\mathbb{Z}$でかつ$\boldsymbol{a}_j$の分類が$\mathbb{Z}_2$である$x_{ij} \mapsto 0$とする． $[d_{\mathrm{AI}}]_{ij} = x_{ij}$を得る．

- BS, AIが得られた． BS/AIを計算するために，第3同型定理を適用する． $\mathbb{Z}_2$分類なる基底$\boldsymbol{b}_j^{(0)}$に対して，基底ベクトル$(\dots, 2, \dots)$を加えたものをそれぞれBS_f, AI_fとする．

$$BS/AI = BS_f/AI_f. \tag{83}$$

右辺を計算するひとつの方法は，スミス標準形を用いてBS_fの基底を構成して，それでもってAI_fを展開するというもの．スミス標準形を用いて構成したBS_fの基底を$\boldsymbol{b}'_i$とする． $\boldsymbol{b}'_i$は直交基底とは限らない．

$$AI_f = \mathrm{Span}(\{\boldsymbol{a}'_i\}) \tag{84}$$

とすると，方程式

$$\boldsymbol{a}'_j = \sum n_{ij} \boldsymbol{b}'_i \tag{85}$$

を解く必要がある．

- 裸の微分行列$\delta_1^p : \mathcal{C}_p \to \mathcal{C}_{p+1}$から微分$d_1^{p,0} : E_1^{p,0} \to E_1^{p+1,0}$を構成する方法について．
  残念ながら，上記の公式x_{ij}は機能しない場合ばある． $A_C \to D$を考えよう．

$$\boldsymbol{b}_j^0 = (\dots, \overset{\alpha}{1}, \overset{\beta}{-1}, \dots),^T \tag{86}$$

$$\boldsymbol{b}_i^1 = (\dots, \overset{\gamma}{1}, \dots)^T \tag{87}$$

とする．もし両方の既約表現α, βからγへの既約分解が1であれば，裸の行列は以下の形を取る．

$$\delta_1^0 = \begin{pmatrix} \cdots & 1 & 1 & \cdots \end{pmatrix} \tag{88}$$

このとき，

$$\delta_1^0 \boldsymbol{b}_j^{(0)} = (\dots, \overset{\gamma}{0}, \dots)^T \tag{89}$$

となり，正しい結果とは異なる．この場合，正しい答えは，α, βの片方を取ることにより得られる．つまり，

$$(\gamma, \alpha) - (\gamma, \beta) \tag{90}$$

ではなく，

$$(\gamma, \alpha). \tag{91}$$

このように，行き先が$\mathbb{Z}_2$である場合は，$\delta_1^0 \boldsymbol{b}_j^{(0)}$を計算すると間違ってしまう．

一度全ての可能性について列挙してみるべきだろう． 0セルの表現をβ, 1セルの表現をαとする．
$\mathbb{Z} \to \mathbb{Z}$

$\boldsymbol{b}_i^{(1)} \backslash \boldsymbol{b}_j^{(0)}$	A	A_Γ	AI	AII	A_T	A_C	$A_{T,C}$
A	(α,β)	$(\alpha,\beta)-(\alpha,\Gamma\beta)$	(α,β)	$2(\alpha,\beta)$	$(\alpha,\beta)+(\alpha,T\beta)$	$(\alpha,\beta)-(\alpha,C\beta)$	$(\alpha,\beta)+(\alpha,T\beta)-(\alpha,C\beta)-(\alpha,TC\beta)$
A_Γ	n/a	$(\alpha,\beta)-(\alpha,\Gamma\beta)$	n/a	n/a	n/a	n/a	$(\alpha,\beta)+(\alpha,T\beta)-(\alpha,C\beta)-(\alpha,TC\beta)$
AI	n/a	n/a	(α,β)	$2(\alpha,\beta)$	$(\alpha,\beta)+(\alpha,T\beta)$	n/a	$(\alpha,\beta)+(\alpha,T\beta)-(\alpha,C\beta)-(\alpha,TC\beta)$
AII	n/a	n/a	$\frac{1}{2}(\alpha,\beta)$	(α,β)	$\frac{1}{2}[(\alpha,\beta)+(\alpha,T\beta)]$	n/a	$\frac{1}{2}[(\alpha,\beta)+(\alpha,T\beta)-(\alpha,C\beta)-(\alpha,TC\beta)]$
A_T	n/a	n/a	(α,β)	$\frac{1}{2}(\alpha,\beta)$	$(\alpha,\beta)+(\alpha,T\beta)$	n/a	$(\alpha,\beta)+(\alpha,T\beta)-(\alpha,C\beta)-(\alpha,TC\beta)$
A_C	n/a	n/a	n/a	n/a	n/a	$(\alpha,\beta)-(\alpha,C\beta)$	$(\alpha,\beta)+(\alpha,T\beta)-(\alpha,C\beta)-(\alpha,TC\beta)$
$A_{T,C}$	n/a	n/a	n/a	n/a	n/a	n/a	$(\alpha,\beta)+(\alpha,T\beta)-(\alpha,C\beta)-(\alpha,TC\beta)$
AI_C	n/a	n/a	n/a	n/a	n/a	n/a	$(\alpha,\beta)+(\alpha,T\beta)-(\alpha,C\beta)-(\alpha,TC\beta)$
AII_C	n/a	n/a	n/a	n/a	n/a	n/a	$\frac{1}{2}[(\alpha,\beta)+(\alpha,T\beta)-(\alpha,C\beta)-(\alpha,TC\beta)]$

以下の命題の真偽をはっきりさせた方が良いだろう．

- $\beta, T\beta$がG_0^kの異なる既約表現で，かつ$\alpha.T\alpha$が$G_0^{k+\delta k}$の異なる既約表現であるならば，(α,β)と$(\alpha,T\beta)$のいずれか一方はゼロ．

２点（i） $G_{\mathrm{TR}}^{k+\delta k} \subset G_{\mathrm{TR}}^k$であればTは共通に取ることができる．$C, \Gamma$も同様． (ii) $(\alpha, T\beta) = (T\alpha, \beta)$．$C, \Gamma$も同様．に注意すると，公式

$$\mathbb{Z} \to \mathbb{Z} : \quad \frac{(\boldsymbol{b}_i^{(1)}, \delta_1^0 \boldsymbol{b}_j^{(0)})}{(\boldsymbol{b}_i^{(1)}, \boldsymbol{b}_i^{(1)})} \in \mathbb{Z} \tag{92}$$

を示すことができる．

$\mathbb{Z}_2 \to \mathbb{Z}_2$

$\boldsymbol{b}_i^{(1)} \backslash \boldsymbol{b}_j^{(0)}$	D	BDI	D_T
D	(α,β)	(α,β)	$(\alpha,\beta)+(\alpha,T\beta)$
BDI	n/a	(α,β)	$(\alpha,\beta)+(\alpha,T\beta)$
D_T	n/a	(α,β)	$(\alpha,\beta)+(\alpha,T\beta)$

よってこの場合も公式

$$\mathbb{Z}_2 \to \mathbb{Z}_2: \quad \frac{(\boldsymbol{b}_i^{(1)}, \delta_1^0 \boldsymbol{b}_j^{(0)})}{(\boldsymbol{b}_i^{(1)}, \boldsymbol{b}_i^{(1)})} \in \mathbb{Z}_2 \tag{93}$$

が成立.

問題は$\mathbb{Z} \to \mathbb{Z}_2$の場合.

$\boldsymbol{b}_i^{(1)} \backslash \boldsymbol{b}_j^{(0)}$	A	A_Γ	AI	AII	A_T	A_C	$A_{T,C}$	AI_C	AII_C
D	n/a	n/a	n/a	n/a	n/a	(α,β)	$(\alpha,\beta)+(\alpha,T\beta)$	(α,β)	$2(\alpha,\beta)(=0)$
BDI	n/a	n/a	n/a	n/a	n/a	n/a	$(\alpha,\beta)+(\alpha,T\beta)$	(α,β)	$2(\alpha,\beta)(=0)$
D_T	n/a	n/a	n/a	n/a	n/a	n/a	$(\alpha,\beta)+(\alpha,T\beta)$	(α,β)	$2(\alpha,\beta)(=0)$

となり，Cを忘れた場合の公式と一致する．次を得る．

$$\mathbb{Z} \to \mathbb{Z}_2: \quad \frac{(\boldsymbol{b}_i^{(1)}, \delta_1^0 \tilde{\boldsymbol{b}}_j^{(0)})}{(\boldsymbol{b}_i^{(1)}, \boldsymbol{b}_i^{(1)})} \in \mathbb{Z}_2 \tag{94}$$

ここで，$\tilde{\boldsymbol{b}}_i^{(1)}$は，成分が正のみを取り出したベクトル.

5　磁気点群の 1 次元表現

磁気点群(G,ϕ)に対して，1次元表現をどのように機械的に構成するか．乗数系が自明な場合に，既約指標を構成し，1 次元表現のみ取り出しても良いが. . . ユニタリ部分群G_0の 1 次元表現に対して，Wigner判定条件を計算する.

$$W = \frac{1}{|G_0|} \sum_{g \in G_0} \xi((ag)^2) \tag{95}$$

注意として，必ずしも$\xi(g) \in \{\pm 1\}$は$W=1$である必要条件ではない． $W=1$の場合に，表現をG全体に拡張する．任意性があるが，ここでは

$$\xi(ag) = \xi(g), \quad g \in G_0 \tag{96}$$

とする.

6　原子絶縁体に対する，磁気空間群のBZで周期的な表現

まず，やりたいことを簡単な例で示す.

6.1　空間反転

空間群は$G = \mathbb{Z} \rtimes \mathbb{Z}_2$． $\mathbb{Z}, \mathbb{Z}_2$の生成子をそれぞれt_x, iと書く． $t_x i = i t_x^{-1}$に注意．位置1/2に対して小群$G_{1/2}$は

$$G_{1/2} = \{e, t_x i\} \subset G. \tag{97}$$

$G_{1/2} \cong \mathbb{Z}_2$の既約表現から$G$全体の誘導表現を構成する．一般論に従って，次のように実行する．$G_{1/2}$の既約表現は 2 通り.

$$\widehat{t_x i} \, |1/2, \pm\rangle = |1/2, \pm\rangle \times (\pm 1). \tag{98}$$

コセット分解は

$$G=\coprod_{n\in\mathbb{Z}} t_x^n G_{1/2}=\coprod_{n\in\mathbb{Z}}\{t_x^n, t_x^{n+1}i\}. \tag{99}$$

軌道$t_x^n G_{1/2}$に対応する表現基底を形式的に

$$|n+1/2,\pm\rangle := \widehat{t_x^n}\,|1/2,\pm\rangle \tag{100}$$

と導入する．これで誘導表現の表現基底が得られた．具体的な表現行列は以下のようになる．

$$\hat{t}_x\,|n+1/2,\pm\rangle=|(n+1)+1/2,\pm\rangle\,, \tag{101}$$

$$\hat{i}\,|n+1/2,\pm\rangle=\hat{i}\widehat{t_x^n}\,|1/2,\pm\rangle=\widehat{it_x^n}\,|1/2,\pm\rangle=\widehat{t_x^{-n}i}\,|1/2,\pm\rangle=\widehat{t_x^{-n-1}t_xi}\,|1/2,\pm\rangle \tag{102}$$

$$=\widehat{t_x^{-n-1}}\widehat{t_xi}\,|1/2,\pm\rangle=\widehat{t_x^{-n-1}}\,|1/2,\pm\rangle\times(\pm1).=|(-n-1)+1/2,\pm\rangle\times(\pm1). \tag{103}$$

波数空間に移るには，

$$|k,\pm\rangle:=\sum_{n\in\mathbb{Z}}|n+1/2,\pm\rangle\,e^{ikn} \tag{104}$$

とする．BZで周期的.

$$\hat{t}_x\,|k,\pm\rangle=|k,\pm\rangle\,e^{-ik},\quad \hat{i}\,|k,\pm\rangle=|-k,\pm\rangle\times(\pm e^{-ik}) \tag{105}$$

が確かめられる．

6.2 一般論

- 注）空間群そのものの表現として機械的に計算できる．

PVWに従う． $\mathcal{G}$を空間群とする．並進群をTと書き，並進の元をt_Rと書く． xを固定する部分群

$$\mathcal{G}_x=\{h\in\mathcal{G}|h(x):=p_hx+t_h=x\} \tag{106}$$

を導入する． UC内の位置xをひとつ取り，UC内の他の位置を $\{x_\sigma\}_{\sigma=1,2,\dots}$とする．$(x_1=x.)$ （x_σは，格子ベクトルの不定性はない．例えば，1/2と−1/2は異なる選び方．） $g_\sigma\in\mathcal{G}$を，$g_1=e, g_\sigma(x)=x_\sigma$となるように選ぶ． $\{g_\sigma\}_{\sigma=1,\dots,|\mathcal{W}_x|}$は$\mathcal{W}_x=(\mathcal{G}/\mathcal{G}_x)/T$の完全代表系である．

$\mathcal{G}_x$の表現から$\mathcal{G}$の誘導表現を構成する． $|i\rangle$を$\mathcal{G}_x$の表現u_x^rの基底とする．

$$\hat{h}\,|j\rangle=|i\rangle\,[u_x^r(h)]_{ij},\quad \hat{h}\hat{h}'\,|i\rangle=z_{h,h'}\widehat{hh'}\,|i\rangle\,,\quad h,h'\in\mathcal{G}_x. \tag{107}$$

次に，xの並進で得られる格子（を不変に保つ部分群）への誘導表現をつくる．形式的に表現基底

$$|\phi_{x,i,R}^r\rangle:=\hat{t}_R\,|i\rangle\,,\quad t_R\in T \tag{108}$$

を導入する．すると，

$$\hat{t}_{R'}\,|\phi_{x,i,R}^r\rangle=|\phi_{x,i,R+R'}^r\rangle\,, \tag{109}$$

$$\hat{h}\,|\phi_{x,j,R}^r\rangle=|\phi_{x,i,p_hR}^r\rangle\,[u_x^r(h)]_{ij} \tag{110}$$

を得る．ここで，$g\in\mathcal{G}, t_R\in T$に対して成立する関係式

$$gt_R=\{p_g|t_g\}\{1|t_R\}=\{p_g|p_gt_R+t_g\}=\{p_g|t_{p_gR}+t_g\}=\{1|t_{p_gR}\}\{p_g|t_g\}=t_{p_gR}g \tag{111}$$

を用いた．自由度$x_\sigma(\sigma=2,\dots,|\mathcal{W}_x|)$に対応する表現基底として，

$$|\phi^r_{x_\sigma,i,R}\rangle := \hat{t}_R\hat{g}_\sigma\,|i\rangle = \hat{g}_\sigma\hat{t}_{p_{g_\sigma}^{-1}R}\,|i\rangle = \hat{g}_\sigma\,|\phi^r_{x,i,p_{g_\sigma}^{-1}R}\rangle\,,\quad \sigma=1,\dots,|\mathcal{W}_\sigma|,\quad t_R\in T \tag{112}$$

とする．$\hat{t}_R$と$\hat{g}_\sigma$の順番は，

$$\hat{t}_{R'}\,|\phi^r_{x_\sigma,i,R}\rangle = |\phi^r_{x_\sigma,i,R+R'}\rangle \tag{113}$$

が成立するように取っている．

一般の空間群の元$g\in\mathcal{G}$に対して，$\{g_\sigma\}_{\sigma=1,\dots,|\mathcal{W}_x|}$は剰余類分解 $\mathcal{G}=\coprod_{t_R\in T,\sigma=1,\dots,|\mathcal{W}_x|}t_Rg_\sigma\mathcal{G}_x$の完全代表系であるので，$gg_\sigma=t_Rg_{\sigma'}h, h\in\mathcal{G}_x$, $t_R\in T$と一意的に書くことができる．

$$gg_s(x)=g(x_\sigma),\quad t_Rg_{\sigma'}h(x)=x_{\sigma'}+R \tag{114}$$

より，$R=g(x_\sigma)-x_{\sigma'}$である．特に，点群部分について，$p_gp_{g_\sigma}=p_{g_{\sigma'}}p_h$である．表現基底への$\hat{g}$作用を計算すると以下を得る．

$$\begin{aligned}
\hat{g}\,|\phi^r_{x_\sigma,i,R}\rangle &= \hat{g}\hat{g}_\sigma\,|\phi^r_{x,i,p_{g_\sigma}^{-1}R}\rangle & (115)\\
&= z_{g,g_\sigma}\widehat{gg_\sigma}\,|\phi^r_{x,i,p_{g_\sigma}^{-1}R}\rangle & (116)\\
&= z_{g,g_\sigma}\widehat{t_Rg_{\sigma'}h}\,|\phi^r_{x,i,p_{g_\sigma}^{-1}R}\rangle & (117)\\
&= \frac{z_{g,g_\sigma}}{z_{g_{\sigma'},h}}\hat{t}_R\hat{g}_{\sigma'}\hat{h}\,|\phi^r_{x,i,p_{g_\sigma}^{-1}R}\rangle & (118)\\
&= \frac{z_{g,g_\sigma}}{z_{g_{\sigma'},h}}\hat{t}_R\hat{g}_{\sigma'}\,|\phi^r_{x,i',p_hp_{g_\sigma}^{-1}R}\rangle\,[u^r_x(h)]_{i'i} & (119)\\
&= \frac{z_{g,g_\sigma}}{z_{g_{\sigma'},h}}\hat{t}_R\hat{g}_{\sigma'}\,|\phi^r_{x,i',p_{g_{\sigma'}}^{-1}p_gR}\rangle\,[u^r_x(h)]_{i'i} & (120)\\
&= \frac{z_{g,g_\sigma}}{z_{g_{\sigma'},h}}\hat{t}_{g(x_\sigma)-x_{\sigma'}}\,|\phi^r_{x_{\sigma'},i',p_gR}\rangle\,[u^r_x(h)]_{i'i} & (121)\\
&= \frac{z_{g,g_\sigma}}{z_{g_{\sigma'},h^g_{\sigma',\sigma}}}\hat{t}_{g(x_\sigma)-x_{\sigma'}}\,|\phi^r_{x_{\sigma'},i',p_gR}\rangle\,[u^r_x(h^g_{\sigma',\sigma})]_{i'i}. & (122)
\end{aligned}$$

ここで，

$$h^g_{\sigma',\sigma}=g_{\sigma'}^{-1}t_{x_{\sigma'}-g(x_\sigma)}gg_\sigma\in\mathcal{G}_x \tag{123}$$

と書いた．

波数空間における表現行列を得るには，

$$|\phi^r_{x_\sigma,i,k}\rangle = \sum_{t_R\in T}|\phi^r_{x_\sigma,i,R}\rangle\,e^{ik\cdot R} \tag{124}$$

を導入する．この定義は，波数kの逆格子ベクトルの並進に対して周期的であることに注意．

$$\hat{t}_R\,|\phi^r_{x_\sigma,i,k}\rangle = |\phi^r_{x_\sigma,i,k}\rangle\,e^{-ik\cdot R} \tag{125}$$

に注意すると，

$$\begin{aligned}
\hat{g}\,|\phi^r_{x_\sigma,i,k}\rangle &= e^{-ip_gk\cdot(g(x_\sigma)-x_{\sigma'})}\frac{z_{g,g_\sigma}}{z_{g_{\sigma'},h^g_{\sigma',\sigma}}}\,|\phi^r_{x_{\sigma'},i',p_gk}\rangle\,[u^r_x(h^g_{\sigma',\sigma})]_{i'i} & (126)\\
&= \sum_{\sigma',i',k'}|\phi^r_{x_{\sigma'},i',k'}\rangle\,[U^r_x(g)]_{\sigma'i'k',\sigma ik} & (127)
\end{aligned}$$

を得る．ここで表現行列

$$[U^r_x(g)]_{\sigma'i'k',\sigma ik}=\delta'_{x_{\sigma'},g(x_\sigma)}\delta_{k',p_gk}e^{-ik'\cdot(g(x_\sigma)-x_{\sigma'})}\frac{z_{g,g_\sigma}}{z_{g_{\sigma'},h^g_{\sigma',\sigma}}}[u^r_x(h^g_{\sigma',\sigma})]_{i'i} \tag{128}$$

を導入した．δ'_{x_1,x_2}は，単位胞内の自由度に対するデルタ行列であり，

$$\delta'_{x_1,x_2} = \left\{ \begin{array}{ll} 1 & (x_1 = x_2 + {}^{\exists}R), \\ 0 & (\text{otherwise}). \end{array} \right. \tag{129}$$

と定義される．

BZのひとつの点kに注目する．波数kにおける部分群$\mathcal{G}_k$を

$$\mathcal{G}_k := \{g \in |p_g k = k + {}^{\exists}G\} \tag{130}$$

と定義する．Gは逆格子ベクトル．定義から，並進Tは$\mathcal{G}_k$の部分群である．上記表現の$\mathcal{G}_k$への制限の指標は，対角成分を取り，

$$\chi^r_{x,k}(g) = \sum_{\sigma=1}^{|\mathcal{W}_x|} \delta'_{x_\sigma, g(x_\sigma)} e^{-ik\cdot(g(x_\sigma)-x_\sigma)} \frac{z_{g,g_\sigma}}{z_{g_\sigma,h^g_{\sigma,\sigma}}} \chi^r_x(h^g_{\sigma,\sigma}), \quad g \in \mathcal{G}_k \tag{131}$$

となる．この表式は，x_σの選び方に依存しない．実際，再定義$x_\sigma \mapsto x_\sigma + R_\sigma$に対して，

$$\begin{aligned} e^{-ik\cdot(g(x_\sigma)-x_\sigma)} &\mapsto e^{-ik\cdot(g(x_\sigma+R_\sigma)-(x_\sigma+R_\sigma))} && (132) \\ &= e^{-ik\cdot(g(x_\sigma)+p_g R_\sigma - x_\sigma - R_\sigma)} = e^{-ik\cdot(g(x_\sigma)-x_\sigma)} && (133) \end{aligned}$$

である．ここで$p_g k \equiv k$を用いた． g_σは$g_\sigma(x) = x_\sigma$なる$g_\sigma \in \mathcal{G}$と定義されていたことを思い出すと，逆に，$Tg_\sigma = \{t_R g_\sigma | t_R \in T\}$から好きな元を選んで，$x_\sigma = g_\sigma(x)$とすれば良い．軌道$Tg_\sigma$にのみ依存すると言っても良い．また，再定義$g_\sigma \mapsto g_\sigma h, h \in \mathcal{G}_x$に対して， $x_\sigma = g_\sigma(x) \mapsto g_\sigma h(x) = g_\sigma(x) = x_\sigma$と，一般論から（App）

$$\frac{z_{g,g_\sigma h}}{z_{g_\sigma h, h^{-1}h^g_{\sigma,\sigma}h}} \chi^r_x(h^{-1}h^g_{\sigma,\sigma}h) = \frac{z_{g,g_\sigma}}{z_{g_\sigma,h^g_{\sigma,\sigma}}} \chi^r_x(h^g_{\sigma,\sigma}), \quad h \in \mathcal{G}_x \tag{134}$$

に注意すると，$g_\sigma \in g_\sigma \mathcal{G}_x$を選ぶ必要もないことがわかる．（この点は，磁気対称性の場合は不成立かもしれない．）結局，指標は軌道$Tg_\sigma\mathcal{G}_x = \{t_R g_\sigma h | t_R \in T, h \in \mathcal{G}_x\}$にのみ依存する．結局，指標は$\mathcal{G}/T$の完全代表系$\{h\}$をひとつ選んで次のように書くことができる．

$$\chi^r_{x,k}(g) = \frac{1}{|\mathcal{G}_x|} \sum_{h \in \mathcal{G}/T} \delta'_{h(x),(gh)(x)} e^{-ik\cdot((gh)(x)-h(x))} \frac{z_{g,h}}{z_{h,h^{-1}t_{h(x)-(gh)(x)}gh}} \chi^r_x(h^{-1}t_{h(x)-(gh)(x)}gh), \quad g \in \mathcal{G}_k. \tag{135}$$

6.3 まとめ

以上を踏まえると，practicalには次のようにして指標を計算すれば良い．

1) 空間位置xをひとつ選ぶ． Wyckoff位置の完全系については，
https://stokes.byu.edu/iso/magneticspacegroups.php
からテキストデータが入手可能である．

2) 点群$\mathcal{G}/T$から空間群$\mathcal{G}$への切断$\mathcal{G}/T \to \mathcal{G}$をひとつ定める．つまり，点群の各元$n \in \mathcal{G}/T$に対して半端な並進$t_n$をひとつ決める． t_nのテキストデータも上記websiteから入手可能である．対応する空間群の元のSeitz表記は$\{p_n|t_n\}$で与えられる．

3) xを固定する，点群の部分群

$$(\mathcal{G}/T)_x := \{g \in \mathcal{G}/T | p_n x + t_n = x + {}^{\exists}R\} \tag{136}$$

を計算する．

4) 点群$\mathcal{G}/T$の乗数系を$z_{n,n'}, n, n' \in \mathcal{G}/T$とする．部分群$(\mathcal{G}/T)_x$の既約指標を計算する．これは，正則表現から計算可能．既約指標を$\chi^r_x(g \in (\mathcal{G}/T)_x)$とする．

5) 波数kに対して，kを固定する点群の部分群

$$(\mathcal{G}/T)_k = \{n \in \mathcal{G}/T | p_n k = k + {}^\exists G\} \tag{137}$$

を計算する．

6) 切断$n \mapsto \{p_n|t_n\}$に対して，指標は以下で与えられる．

$$\chi^r_{x,k}(n \in (\mathcal{G}/T)_k) \tag{138}$$
$$= \frac{1}{|(\mathcal{G}/T)_x|} \sum_{m \in \mathcal{G}/T} \delta_{m^{-1}nm \in (\mathcal{G}/T)_x} e^{-ik\cdot(\{p_n|t_n\}\{p_m|t_m\}(x) - \{p_m|t_m\}(x))} \frac{z_{n,m}}{z_{m,m^{-1}nm}} \chi^r_x(m^{-1}nm) \tag{139}$$
$$= \frac{1}{|(\mathcal{G}/T)_x|} \sum_{m \in \mathcal{G}/T} \delta_{m^{-1}nm \in (\mathcal{G}/T)_x} e^{-ik\cdot(p_n(p_m x + t_m) + t_n - (p_m x + t_m))} \frac{z_{n,m}}{z_{m,m^{-1}nm}} \chi^r_x(m^{-1}nm). \tag{140}$$

可読性に欠けるので，書き換える．

1) 空間位置xをひとつ選ぶ． Wyckoff位置の完全系については，
https://stokes.byu.edu/iso/magneticspacegroups.php
からテキストデータが入手可能である．

2) 点群の各元$g \in G$に対して半端な並進t_gをひとつ決める． t_gのテキストデータも上記websiteから入手可能である．対応する空間群の元のSeitz表記は$\{p_g|t_g\}$で与えられる．

3) xを固定する点群の部分群

$$G_x := \{g \in G | p_g x + t_g = x + {}^\exists R\} \tag{141}$$

を計算する．

4) 点群Gの乗数系を$z_{g,h}, g, h \in G$とする．部分群G_xの既約指標を計算する．これは，正則表現から計算可能．既約指標を$\chi^r_x(g \in G)$とする．

5) 波数kに対して，kを固定する点群の部分群

$$G_k = \{g \in G | p_g k = k + {}^\exists G\} \tag{142}$$

を計算する．

6) 切断$g \mapsto \{p_g|t_g\}$に対して，指標は以下で与えられる．

$$\chi^r_{x,k}(g \in G_k) = \frac{1}{|G_x|} \sum_{x \in G} \delta_{x^{-1}gx \in G_x} e^{-ik\cdot(p_g(p_x x + t_x) + t_g - (p_x x + t_x))} \frac{z_{g,x}}{z_{x,x^{-1}gx}} \chi^r_x(x^{-1}gx). \tag{143}$$

7 AI $\to E_1^{0,0}$

波数空間AU内の0セル軌道の代表点の集合を$\{k_i\}_{i=1,2,\dots}$とする．

$$\mathcal{G}_{k_i}/T \tag{144}$$

8 磁気空間群

まず，84種類の波数空間のAUのうち，時間反転を考慮したAUか，時間反転を考慮しないAUのどちらを用いるべきかを考えよう．結論として，時間反転を考慮したAUを用いるべきである．なぜなら，時間反転対称点が，時間反転を考慮しない場合のAUの0セルに存在しない可能性があるからである．例として，文様群$p3$を考えよう．M点はTRIMであるが，$p3$の0セルに含まれない．

- 84通りのAUを決める．
- 乗数系は
$$z^k_{g,h} = z^{\mathrm{int}}_{g,h} e^{-i\phi_{gh}[p^T_{gh}]^{-1}k\cdot(p_g t_h + t_g - t_{gh})}, \quad p_g t_h + t_g - t_{gh} \in BL. \tag{145}$$
- 各pセル軌道の代表点kについて，小群
$$G_k = \{g \in G | \phi_g p_g k \equiv k\} \tag{146}$$
及び乗数系
$$z^k_{g,h} = z^{\mathrm{int}}_{g,h} e^{-ik\cdot(p_g t_h + t_h - t_{gh})}, \quad g, h \in G_k \tag{147}$$
を計算する．
- ユニタリ部分群G^0_kの既約指標を計算し，代表元$a_k \in G_k/G^0_k$をひとつ選ぶ．全ての既約表現$u_{k\alpha}$に対して，Wigner判定条件
$$W_{k\alpha} = \frac{1}{|G^0_k|} \sum_{g\in G^0_k} z^k_{ga,ga} \chi^\alpha_k((ga)^2) \in \{0, 1, -1\} \tag{148}$$
を計算する．
- 軌道内の点に対して，代表点から表現をMapするには次のようにする． $g \in G^0_k$に対して，
$$U^{\phi_h[p^T_h]^{-1}k}_{hgh^{-1}} U^k_h = z^k_{hgh^{-1},h} U^k_{hg} = \frac{z^k_{hgh^{-1},h}}{z^k_{h,g}} U^k_h [U^k_g]^{\phi_h} \tag{149}$$
より，
$$\chi^{\phi_h[p^T_h]^{-1}k}_{hgh^{-1}} = \frac{z^k_{hgh^{-1},h}}{z^k_{h,g}} [\chi^k_g]^{\phi_h}, \quad g \in G^0_k. \tag{150}$$
- kにおける表現を$k+\delta k$に"平行移動"するには，BZで周期的でない場合の表現
$$U_k(\{p_g|t_g\}) = e^{-i\phi_g[p^T_g]^{-1}k\cdot t_g} D_g \tag{151}$$
に注意すると，
$$\chi^{k+\delta k}_g = e^{-i\phi_g[p^T_g]^{-1}\delta k\cdot t_g} \chi^k_g, \quad g \in G^0_k \cap G^{k+\delta k}_0 \tag{152}$$
で与えられる．
- $W_{k\alpha} = 0$なる基底$u_{k\alpha}$については，直交関係
$$O^{\alpha\beta}_k := (a_k u^\alpha_k, u^\beta_k) = \frac{1}{|G^0_k|} \sum_{g\in G^0_k} \left[\frac{z_{g,a}}{z_{a,a^{-1}ga}} \chi^\alpha_k(a^{-1}ga)^*\right]^* \chi^\beta_k(g) \tag{153}$$
$$= \frac{1}{|G^0_k|} \sum_{g\in G^0_k} \frac{z_{a,a^{-1}ga}}{z_{g,a}} \chi^\alpha_k(a^{-1}ga) \chi^\beta_k(g) \in \{0, 1\} \tag{154}$$
を用いて，$O^{\alpha\beta}_k = 1$なる基底$u_{k\beta}$を見つけ出し，基底集合から消去する．

- 両立関係の計算は以下の通り．まず，$G_{k+\delta k} \subset G_k$より， $a_{k+\delta k}$はG_k/G_k^0の代表元として使えることに注意する． $G_{k+\delta k}^0$の既約表現βに対して， βのAZクラスに対応して，既約分解は以下のようになる．

$$\begin{array}{ll} A & (*,\beta) \\ W_\beta = 1 & (*,\beta) \\ W_\beta = -1 & \frac{1}{2}(*,\beta) \\ W_\beta = 0 & (*,\beta) \end{array}$$

  さらに，G_k^0の既約表現のAZクラスに応じて，

$$\begin{array}{ll} A & * = \alpha \\ W_\beta = 1 & * = \alpha \\ W_\beta = -1 & * = \alpha \oplus \alpha \\ W_\beta = 0 & * = \alpha \oplus a_k\alpha \end{array}$$

  となるので，表にまとめると，

	A	$W_\beta = 1$	$W_\beta = -1$	$W_\beta = 0$
A	(α,β)	n/a	n/a	n/a
$W_\alpha = 1$	(α,β)	(α,β)	$\frac{1}{2}(\alpha,\beta)$	(α,β)
$W_\alpha = -1$	$2(\alpha,\beta)$	$2(\alpha,\beta)$	(α,β)	$2(\alpha,\beta)$
$W_\alpha = 0$	$(\alpha \oplus a_k\alpha,\beta)$	$(\alpha \oplus a_k\alpha,\beta)$	$\frac{1}{2}[(\alpha \oplus a_k\alpha,\beta)]$	$(\alpha \oplus a_k\alpha,\beta)$

  ここで，(α,β)の計算は通常の両立関係の計算． $(\alpha \oplus a_k\alpha,\beta)$ の計算だが，これは，G_k^0の基底に，追加の両立関係

$$u_{k\alpha} - u_{k,a_k\alpha} = 0 \tag{155}$$

  を導入することによって勝手に入る．また，$a_{k+\delta k}\beta$から計算される既約分解は，

$$(\alpha \oplus a_k\alpha,\beta) = (\alpha \oplus a_{k+\delta k}\alpha,\beta) = (a_{k+\delta k}\alpha \oplus \alpha, a_{k+\delta k}\beta) \tag{156}$$

  より，同一の両立関係を与え，新たな条件を生み出さない．よって，G_k^0の既約表現だけから全て計算できるだろう． $W_\alpha = -1, W_\beta = -1$だけ補正が必要で，微分$d_1$について，

  - $W_{k\alpha}$=-1なる列について，2倍に
  - $W_{k+\delta k,\beta}$=-1なる列について，1/2倍に

  する．

以上をまとめると，$E_2^{0,0}$の計算は以下のように実行できる．

- 84通りのAUを決める．
- 0,1セル軌道の代表点について，G_k^0の既約指標を計算する．
- 各既約指標に対して，Wigner判定条件の計算する． pセルの対角行列$\Lambda^{(p)}$を

$$\Lambda^{(p)}_{k\alpha,k\alpha} = \begin{cases} 2 & W_{k\alpha} = -1 \\ 1 & \text{otherwise} \end{cases} \tag{157}$$

  と定める．
- 0セルについて，$W_{k\alpha} = 0$については追加の両立関係を与える行列を

$$(\dots, 1, \dots, -1, \dots) \tag{158}$$

  で定義する．この行列をOとする．

- G_k^0の微分行列を$d_1^{0,0}$とする． $E_2^{0,0}$は，次の行列の核で与えられる．

$$\begin{pmatrix} [\Lambda^{(1)}]^{-1} d_1^{0,0} \Lambda^{(0)} \\ O \end{pmatrix} \tag{159}$$

この行列は1/2を含むので，整数係数の計算を行うには工夫が必要．ただし，$\mathbb{R}$係数の計算（次元など）については，このまま行うことができる．

- サイトxにおける既約表現を$\chi_x^r(g \in G_x^0)$とする．誘導表現の波数kにおける表現を求めたい．$g_i \in G$を単位胞内の異なるWyckoff位置に飛ぶための磁気点群の元とする． g_iは反ユニタリを含む．誘導表現は

$$\chi_{x,k}^r(g \in G_k) = \sum_i \delta_{g_i^{-1} g g_i \in G_x} e^{-ik\cdot(p_g(p_{g_i}x+t_{g_i})+t_g-(p_{g_i}x+t_{g_i}))} \frac{z_{g,g_i}}{z_{g_i,g_i^{-1}gg_i}} \chi_x^r(g_i^{-1}gg_i)^{\phi_{g_i}}. \tag{160}$$

一般論より，この表式は$g_i \mapsto g_i h, h \in G_x^0$に対して不変． ここで$G_x^0 \subset G_x$はユニタリ部分群．したがって，$g_i$がユニタリ・反ユニタリに関わらず，$g_i$を$g_i G_x^0$から選ぶ必要はない．次のように書ける．

$$\chi_{x,k}^r(g \in G_k) = \frac{1}{|G_x^0|} \sum_i \sum_{x \in g_i G_x^0} \delta_{x^{-1}gx \in G_x} e^{-ik\cdot(p_g(p_x x+t_x)+t_g-(p_x x+t_x))} \frac{z_{g,x}}{z_{x,x^{-1}gx}} \chi_x^r(x^{-1}gx)^{\phi_x}. \tag{161}$$

xが磁気対称性のとき，あやしい． ここで，Gは磁気点群．

ただし，この表式は，$x \in G_x \backslash G_x^0$でかつWigner判定条件

$$W_x^r = \frac{1}{|G_x^0|} \sum_{g \in G_x^0} z_{gx,gx} \chi_x^r((gx)^2) = 1 \tag{162}$$

のときに限りダブルカウントしてしまう．よって，この場合だけ， 2で割り，正しい表式は

$$\chi_{x,k}^r(g \in G_k) = \frac{1}{|G_x|} \sum_{x \in G} \delta_{x^{-1}gx \in G_x} e^{-ik\cdot(p_g(p_x x+t_x)+t_g-(p_x x+t_x))} \frac{z_{g,x}}{z_{x,x^{-1}gx}} \chi_x^r(x^{-1}gx)^{\phi_x} \times \begin{cases} \frac{1}{2} & (W_x^r = 1) \\ 1 & (\text{otherwise}) \end{cases} \tag{163}$$

- セル間の接続性の符号について．

まず，微分の符号をどのように決めるかを書き，そのあとでプログラム作成について書く．

pセルの軌道のラベルをa，軌道内のセルのラベルをiとする．全てのセルは，

$$\coprod_p \coprod_a \coprod_i D_{a,i}^p \tag{164}$$

と分解される．各軌道に対して，$i = 1$を代表セルとする． pセル$D_a^p \equiv D_{a,1}^p$を不変に保つ部分群$G_{D_a^p} \subset G$に対して，pセル軌道aは

$$\coprod_i D_{a,i}^p \cong (G/G_{D_a^p}) \times D_a^p \tag{165}$$

と表示される．ここで群作用の意味であるが，pセルを$D^p = (v_0 v_1 \cdots v_p)$と書いたとき，（$v_0, \dots, v_p$は座標）

$$g(D^p) = (p_g v_0 p_g v_1 \cdots p_g v_p) \tag{166}$$

である．（標語的に，向きをG同変に定めている，と言っても良い．）

pセルから$p+1$セルへの微分は，次のようにして符号を決める． $p+1$軌道の代表セル$D_a^{p+1}=(v_0\cdots v_{p+1})$に隣接する$p$セルのひとつを$D_{b,j}^p=gD_b^p=(p_g v_0'\cdots p_g v_p')$とする． pセル$D_{b,j}^p$は$p+1$セルD_a^{p+1}セルの境界の一部なので， $s_{b,j}^a\in\{\pm 1\}$を用いて

$$s_{b,j}^a(p_g v_0'\cdots p_g v_p')\in\partial(v_0\cdots v_{p+1})=(v_1\cdots v_{p+1})-(v_0v_2\cdots v_{p+1})+\cdots(-1)^p(v_0\cdots v_p) \tag{167}$$

である．この符号$s_{b,j}^a$が微分の符号となる．

次に，数値計算手法について考える．体心立方格子Iを例に取る．最小単位BZ/O_hとして，

$$v_0=(0,0,0),\quad v_1=(0,1,0),\quad v_2=(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0),\quad v_2=(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}) \tag{168}$$

を取ることができる． 0セル，1セル，2セル，3セルの集合を，それぞれ

$$\{(v_0),(v_1),(v_2),(v_3)\}, \tag{169}$$
$$\{(v_0v_1),(v_0v_2),(v_0v_3),(v_1v_2),(v_1v_3),(v_2v_3)\}, \tag{170}$$
$$\{(v_0v_1v_2),(v_0v_1v_3),(v_0v_2v_3),(v_1v_2v_3)\}, \tag{171}$$
$$\{(v_0v_1v_2v_3)\} \tag{172}$$

と取る．例えば，

$$(v_0v_1v_2)=(1-u-v)v_0+uv_1+vv_2 \tag{173}$$

などとパラメタ表示してpセルとして保存する．次に，全てのセルを点群O_hで移したセル集合を構成する．例えば，

$$\coprod_{g\in O_h}\{p_g(v_0v_1v_2),p_g(v_0v_1v_3),p_g(v_0v_2v_3),p_g(v_1v_2v_3)\}. \tag{174}$$

この集合には同一セルを複数回含まれるので，重なりを消去する．すると，体心立方格子の第一BZのセル分割

$$\mathcal{C}_p=\coprod\{(v_0\cdots v_p)\},\quad p=0,1,2,3 \tag{175}$$

を得る．境界写像∂は，機械的に構成できる．例えば，$\mathcal{C}_2\to\mathcal{C}_1$は

$$\partial(v_0v_1v_2)=(v_1v_2)-(v_0v_2)+(v_0v_1) \tag{176}$$

であるが，３つの1セルは，

$$(1-u-v)v_0+uv_1+vv_2\xrightarrow{u\to 1-u,v\to u}(1-u)v_1+uv_2=(v_0v_1), \tag{177}$$
$$\xrightarrow{u\to 0,v\to u}(1-u)v_0+uv_2=(v_0v_2), \tag{178}$$
$$\xrightarrow{u\to u,v\to 0}(1-u)v_0+uv_1=(v_0v_1) \tag{179}$$

と探索できる．よって，チェイン複体

$$\{\mathcal{C}_p,\partial\} \tag{180}$$

を得る．

次に，部分群$G\subset O_h$に対して，G同変なセル分割，及び微分を構成したい．なんらかの方法で，pセル集合を，軌道に分割する．

$$\mathcal{C}_p=\coprod_a(O_h/G_{D_a^p})\times D_a^p \tag{181}$$

ここで，D_a^pはpセル軌道aの代表セルで，$G_{D_a^p}\subset G$は，pセルD_a^pを不変に保つ部分群． $p+1$軌道の代表セル$D_a^{p+1}=(v_0\cdots v_{p+1})$の境界を，チェイン複体$\{\mathcal{C}_p,\partial\}$の境界写像$\partial$を用いて探索する．$D_j^{p+1}$の境界$p$セルの一つを，

$$g(D_b^p)=(p_g v_0'\cdots p_g v_p') \tag{182}$$

とする．ここで，D_b^pはpセル軌道bの代表セル．

@@@

- pセルの小群をpセル内の１点の小群に
- 超伝導のSIの計算においては，次の第3準同型定理を用いる． Gを群，K, HをGの正規部分群で，$K \subset H \subset G$とする．このとき，商H/KはG/Kの正規部分群であり，
$$(G/K)/(H/K) \cong G/H. \tag{183}$$
以下の形で使う．
$\{BS\}, \{AI\}$をそれぞれ常伝導状態のBS，AIとする．超伝導状態のBS, AIをそれぞれ$\{BS\}_{SC}, \{AI\}_{SC}$とする． $\{BS\}_{SC}, \{AI\}_{SC}$は，Kを超伝導状態において同一視される組み合わせとして，
$$\{BS\}_{SC} = \{BS\}/K, \quad \{AI\}_{SC} = \{AI\}/K \tag{184}$$
として得られる．よって，第3準同型定理により，
$$\{BS\}_{SC}/\{AI\}_{SC} \cong \{BS\}/\{AI\} \tag{185}$$
ここで，右辺はスミス標準形により計算可．
... この公式は超伝導の情報がどこにも入っていないので，かなり変... $\{AI\}$を，atomic superconductor $\{AS\}$に替えるべきか． -¿ おそらくYES
- 84通りのAUの構成は，バグが存在する．やはり，各ブラベー格子の最小分割を用いてそこから84通りのAU毎に軌道を構成する方法が良いだろう．

8.1 back up

PVWは以下のように書いている．

“As explained in the main text, when an irrep u_k^α is paired with a different irrep u_k^β under TR, we simply add to $\mathcal{C}$ an additional compatibility relation $n_k^\alpha = n_k^\beta$; when u_k^α is paired with itself, we demand n_k^α to be an even integer, which can be achieved by redefining $\tilde{n}_k^\alpha \equiv n_k^\alpha/2$ and a corresponding rewriting of $\mathcal{C}$ in terms of $\tilde{\boldsymbol{n}}$.”

まず，84種類の波数空間のAUのうち，時間反転を考慮したAUか，時間反転を考慮しないAUのどちらを用いるべきかを考えよう．結論として，時間反転を考慮したAUを用いるべきである．なぜなら，時間反転対称点が，時間反転を考慮しない場合のAUの0セルに存在しない可能性があるからである．例として，文様群$p3$を考えよう．M点はTRIMであるが，$p3$の0セルに含まれない．

AHSS：

1) AUのpセル軌道の代表点kについて，小群
$$G_k = \{g \in G | \phi_g p_g k \equiv k\} \tag{186}$$
及び乗数系
$$z_{g,h}^k = z_{g,h}^{\mathrm{int}} e^{-ik\cdot(p_g t_h + t_h - t_{gh})}, \quad g, h \in G_k \tag{187}$$
を計算する．
2) ユニタリ部分群G_k^0の既約指標を計算し，0セル軌道の代表元のG_k^0に対する基底
$$(u_{k_1}^{\alpha_1}, u_{k_1}^{\alpha_2}, \dots, u_{k_2}^{\alpha_1}, u_{k_2}^{\alpha_2}, \dots) \tag{188}$$
を構成する．この基底に対して制限を加える準同型（両立条件と呼ぶ）の核を取ることで$E_2^{0,0}$を構成する． $\{k_j\}_{k=1,\dots,}$は軌道のラベルであり，この軌道は磁気対称性も考慮されている．よって，磁気対称性aに対して，$-p_a k \neq k$なる２点$-p_a k, k$は同一軌道内にあるので，異なるk_jについて磁気対称性を考慮する必要はない．

3) $a_k \in G_k/G_k^0$の代表元をひとつ選ぶ.

4) $a_k u_k^\alpha$がどの基底にmapされるかの置換行列を計算する.

$$O_k^{\alpha\beta} := (au_k^\alpha, u_k^\beta) = \frac{1}{|G_k^0|}\sum_{g\in G_k^0}\left[\frac{z_{g,a}}{z_{a,a^{-1}ga}}\chi_k^\alpha(a^{-1}ga)^*\right]^* \chi_k^\beta(g) \tag{189}$$

$$= \frac{1}{|G_k^0|}\sum_{g\in G_k^0}\frac{z_{a,a^{-1}ga}}{z_{g,a}}\chi_k^\alpha(a^{-1}ga)\chi_k^\beta(g) \in \{0,1\} \tag{190}$$

である．このブロックを並べた行列を

$$O := \begin{pmatrix} O_{k_1} & & \\ & O_{k_2} & \\ & & \ddots \end{pmatrix} \tag{191}$$

とする．この行列を両立条件に加える.

5) 全ての基底u_k^αに対して，Wigner判定条件

$$W_k^\alpha = \frac{1}{|G_k^0|}\sum_{g\in G_k^0} z_{ga,ga}^k \chi_k^\alpha((ga)^2) \in \{0,1,-1\} \tag{192}$$

を計算する．ここで，結果の配列を

$$(W_{k_1}^{\alpha_1}, W_{k_1}^{\alpha_2}, \dots) \tag{193}$$

とする.

6) G_k^0に関する微分行列d_1を計算する．この微分は$W_k^\alpha = -1$が考慮されていないので，修正したい.

Wigner判定条件と既約表現の分解の対応をまとめる．まず，$G_{k+\delta k} \subset G_k, G_{k+\delta k}^0 \subset G_k^0$に注意する．$G_k^0$の既約表現を$\alpha$, $G_{k+\delta k}^0$の既約表現をβとする.

$$\begin{array}{cc}
AI \to A & (\alpha|_{G_{k+\delta k}^0}, \beta) \\
AII \to A & 2(\alpha|_{G_{k+\delta k}^0}, \beta) \\
A_T \to A & ((\alpha \oplus T\alpha)|_{G_{k+\delta k}^0}, \beta) \\
AI \to AI & (\alpha|_{G_{k+\delta k}^0}, \beta) \\
AII \to AI & 2(\alpha|_{G_{k+\delta k}^0}, \beta) \\
A_T \to AI & ((\alpha \oplus T\alpha)|_{G_{k+\delta k}^0}, \beta) \\
AI \to AII & (\alpha|_{G_{k+\delta k}^0}, \beta) \\
AII \to AII & 2(\alpha|_{G_{k+\delta k}^0}, \beta) \\
A_T \to AII & ((\alpha \oplus T\alpha)|_{G_{k+\delta k}^0}, \beta)
\end{array}$$

A　Mapped repについて

Gの表現$D_{g\in G}^\alpha$をg_iでmapした表現は

$$D_{g\in g_i G g_i^{-1}}^{g_i\alpha} = \frac{z_{g,g_i}}{z_{g_i,g_i^{-1}gg_i}}[D_{g_i^{-1}gg_i}^\alpha]^{\phi_{g_i}} \tag{194}$$

で与えられる．特に，指標は

$$\chi^{g_i\alpha}(g \in g_i G g_i^{-1}) = \frac{z_{g,g_i}}{z_{g_i,g_i^{-1}gg_i}}[\chi^\alpha(g_i^{-1}gg_i)]^{\phi_{g_i}} \tag{195}$$

$h \in G$に対して$g_i \mapsto g_i h$の取替で

$$\frac{z_{g,g_ih}}{z_{g_ih,h^{-1}g_i^{-1}gg_ih}}\chi(h^{-1}g_i^{-1}gg_ih)^{\phi_{g_i}} = \frac{z_{g,g_ih} \times z^{\phi_{g_i}}_{h,h^{-1}g_i^{-1}gg_ih}}{z_{g_ih,h^{-1}g_i^{-1}gg_ih} \times z^{\phi_{g_i}}_{g_i^{-1}gg_i,h}}\chi(g_i^{-1}gg_i)^{\phi_{g_i}}. \tag{196}$$

2コサイクル条件

$$\frac{z^{\phi_{g_i}}_{h,h^{-1}g_i^{-1}gg_ih} \times z_{g_i,g_i^{-1}gg_ih}}{z_{g_ih,h^{-1}g_i^{-1}gg_ih} \times z_{g_i,h}} = 1, \tag{197}$$

$$\frac{z^{\phi_{g_i}}_{g_igg_i,h} \times z_{g_i,g_i^{-1}gg_ih}}{z_{gg_i,h} \times z_{g_i,g_i^{-1}gg_i}} = 1, \tag{198}$$

$$\frac{z_{g_i,h} \times z_{g,g_ih}}{z_{gg_i,h} \times z_{g,g_i}} = 1, \tag{199}$$

に注意すると，

$$\frac{z_{g,g_ih} \times z^{\phi_{g_i}}_{h,h^{-1}g_i^{-1}gg_ih}}{z_{g_ih,h^{-1}g_i^{-1}gg_ih} \times z^{\phi_{g_i}}_{g_i^{-1}gg_i,h}} \tag{200}$$

$$= \frac{z_{g,g_ih} \times z_{g_i,h}}{z_{g_i,g_i^{-1}gg_ih} \times z^{\phi_{g_i}}_{g_i^{-1}gg_i,h}} \tag{201}$$

$$= \frac{z_{g,g_ih} \times z_{g_i,h}}{z_{gg_i,h} \times z_{g_i,g_i^{-1}gg_i}} \tag{202}$$

$$= \frac{z_{g,g_i}}{z_{g_i,g_i^{-1}gg_i}} \tag{203}$$

となり，g_iの選び方に依らないことがわかる．

B　転置の逆行列について

格子ベクトルを$\boldsymbol{a}_i$, 逆格子ベクトルを$\boldsymbol{b}_j$とする．

$$\boldsymbol{a}_i \cdot \boldsymbol{b}_j = 2\pi\delta_{ij}. \tag{204}$$

点群の行列は，実空間で定義されている．磁気空間群のデータは，格子ベクトルを基底とした場合の点群の行列のデータがある．つまり，

$$p\boldsymbol{a}_j = \sum_i \boldsymbol{a}_i p_{ij}. \tag{205}$$

なる行列p_{ij}のデータ．さて，波数空間に対する点群の行列はどのようになるか．

$$\boldsymbol{k} \cdot p^{-1}\boldsymbol{R} = [p^{-1}]^T\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{R} \tag{206}$$

より，波数空間においては転置の逆行列で作用する．式で書くと，

$$p\boldsymbol{b}_j = \sum_i \boldsymbol{b}_i [p^{-1}]_{ji}. \tag{207}$$

C Induced representation and Frobenius reciprocity

Let G a be finite group and H be a subgroup of G. Let $z_{g,h}$ be a factor system of a unitary representation of G defined by

$$\hat{g}\hat{h} = z_{g,h}\widehat{gh}, \qquad g,h \in G. \tag{208}$$

Given a representation of H, the induced representation of G is defined as follows. Let $\{g_a\}_{a=1,\dots,|G/H|}$ be a full set of representatives in G of the left cosets in G/H, i.e., for each $g \in G$ and each g_i there is an $h_i \in H$ and $j(i) \in \{1,\dots,|G/H|\}$ such that $gg_i = g_{j(i)}h_i$. Let $|i\rangle$ be a basis of the representation H,

$$\hat{h}\,|j\rangle = |i\rangle\,[D(h)]_{ij}, \qquad h \in H. \tag{209}$$

We introduce a formal basis $\hat{g}_i\,|i\rangle$. $g \in G$ acts on this basis as

$$\hat{g}\hat{g}_i\,|j\rangle = z_{g,g_i}\widehat{gg_i}\,|j\rangle = z_{g,g_i}\widehat{g_{j(i)}h_i}\,|j\rangle = \frac{z_{g,g_i}}{z_{g_{j(i)},h_i}}\hat{g}_{j(i)}\hat{h}\,|j\rangle = \frac{z_{g,g_i}}{z_{g_{j(i)},h_i}}\hat{g}_{j(i)}\,|i\rangle\,[D(h_i)]_{ji}. \tag{210}$$

This defines the induced representation. Restricting $g \in G$ into a subgroup $g_iHg_i^{-1} \subset G$, we have the block diagonal matrix

$$\hat{g}\hat{g}_i\,|j\rangle = \frac{z_{g,g_i}}{z_{g_i,g_i^{-1}gg_i}}\hat{g}_i\,|i\rangle\,[D(g_i^{-1}gg_i)]_{ji}, \qquad g \in g_iHg_i^{-1}. \tag{211}$$

In particular, the character $\psi(g)$ of the induced representation is given by

$$\psi(g) = \sum_{i=1}^{|G/H|}\delta_{j(i),i}\frac{z_{g,g_i}}{z_{g_{j(i)},h_i}}\chi(h_i) = \sum_{i=1}^{|G/H|}\delta_{j(i),i}\frac{z_{g,g_i}}{z_{g_i,g_i^{-1}gg_i}}\chi(g_i^{-1}gg_i), \tag{212}$$

where $\chi(h \in H)$ is the character of the representation of H. The final expression is shown to be independent with a representatives $\{g_i\}$: Under another choice $g_i \mapsto g_ih$ of representatives with $h \in H$, the ith component in the character $\psi(g)$ changes to

$$\frac{z_{g,g_ih}}{z_{g_ih,h^{-1}g_i^{-1}gg_ih}}\chi(h^{-1}g_i^{-1}gg_ih) = \frac{z_{g,g_ih}\times z_{h,h^{-1}g_i^{-1}gg_ih}}{z_{g_ih,h^{-1}g_i^{-1}gg_ih}\times z_{g_i^{-1}gg_i,h}}\chi(g_i^{-1}gg_i). \tag{213}$$

Using the 2-cocycle condition three times as in the followings

$$\frac{z_{h,h^{-1}g_i^{-1}gg_ih}\times z_{g_i,g_i^{-1}gg_ih}}{z_{g_ih,h^{-1}g_i^{-1}gg_ih}\times z_{g_i,h}} = 1, \tag{214}$$

$$\frac{z_{g_igg_i,h}\times z_{g_i,g_i^{-1}gg_ih}}{z_{gg_i,h}\times z_{g_i,g_i^{-1}gg_i}} = 1, \tag{215}$$

$$\frac{z_{g_i,h}\times z_{g,g_ih}}{z_{gg_i,h}\times z_{g,g_i}} = 1, \tag{216}$$

we have

$$\frac{z_{g,g_ih}}{z_{g_ih,h^{-1}g_i^{-1}gg_ih}}\chi(h^{-1}g_i^{-1}gg_ih) = \frac{z_{g,g_i}}{z_{g_i,g_i^{-1}gg_1}}\chi(g_i^{-1}gg_i). \tag{217}$$

We obtain the Frobenius formula for the projective representations

$$\psi(g) = \sum_{x\in G/H}\delta_{x^{-1}gx\in H}\frac{z_{g,x}}{z_{x,x^{-1}gx}}\chi(x^{-1}gx), \tag{218}$$

where x runs over a set of representatives of G/H. We have used that $gxH \in xH \Leftrightarrow x^{-1}gx \in H$. Also, since each term does not depend on representatives, we have

$$\psi(g) = \frac{1}{|H|}\sum_{x\in G,x^{-1}gx\in H}\frac{z_{g,x}}{z_{x,x^{-1}gx}}\chi(x^{-1}gx). \tag{219}$$

Introducing a (projective) class function $\tilde{\chi}(g)$ such that $\tilde{\chi}(g) = \chi(g)$ for $g \in H$ and $\tilde{\chi}(g) = 0$ for $g \in G \backslash H$, it can be written as

$$\psi(g) = \frac{1}{|H|} \sum_{x \in G} \frac{z_{g,x}}{z_{x,x^{-1}gx}} \tilde{\chi}(x^{-1}gx). \tag{220}$$

Let $\phi(g \in G)$ be a character of a representation of G. We have the Frobenius reciprocity

$$\begin{aligned}
\frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} \phi(g)^* \psi(g) &= \frac{1}{|G|} \frac{1}{|H|} \sum_{g \in G} \sum_{x \in G} \phi(g)^* \frac{z_{g,x}}{z_{x,x^{-1}gx}} \tilde{\chi}(x^{-1}gx) && (221) \\
&= \frac{1}{|G|} \frac{1}{|H|} \sum_{g \in G} \sum_{x \in G} \phi(x^{-1}gx)^* \tilde{\chi}(x^{-1}gx) && (222) \\
&= \frac{1}{|G|} \frac{1}{|H|} \sum_{g \in G} \sum_{x \in G} \phi(g)^* \tilde{\chi}(g) && (223) \\
&= \frac{1}{|H|} \sum_{g \in G} \phi(g)^* \tilde{\chi}(g) && (224) \\
&= \frac{1}{|H|} \sum_{h \in H} \phi|_H(h)^* \chi(h). && (225)
\end{aligned}$$

D back up

D.1 back up一般論

簡単のため，空間群とする．空間群を$\mathcal{G}$とする．点群をGとする．半端な並進をt_gと固定する．一般の空間群の元は$\{p_g|t_g+R\}, R \in BL$と書くことができる．$R \in BL$．点群の元をgと書く．一般論より，

$$R_{g,h} := p_g t_h + t_g - t_{gh} \in BL. \tag{226}$$

空間位置xに対して小群

$$\mathcal{G}_x = \{\{p_g|t_g+R\} \in \mathcal{G} | p_g x + t_g + R = x\} \subset \mathcal{G} \tag{227}$$

が定まる．小群$\mathcal{G}_x$の計算は以下のように実行する．まず，

$$G_x := \{g \in G | e^{i(p_g x + t_g - x)\cdot b_i} = 1, i = 1,2,3\} \subset G \tag{228}$$

を計算する．ここでb_iは逆格子ベクトル．

$$R_g := x - p_g x - t_g \in BL, \quad g \in G_x \tag{229}$$

として，並進部分R_gが定まる．R_gは次を満たす．

$$x \xrightarrow{h} p_h x + t_h = x + R_h \xrightarrow{g} p_g x + t_g + R_g + p_g R_h \tag{230}$$

より，

$$R_{gh} = p_g R_h + R_g, \quad g,h \in G_x. \tag{231}$$

以下と同値．

$$\{p_g|t_g+R_g\}\{p_h|t_h+R_h\} = \{p_{gh}|t_{gh}+R_{gh}\}, \quad g,h \in G_x. \tag{232}$$

これによって$\mathcal{G}_x \cong G_x$．

小群$\mathcal{G}_x$の表現をひとつえらび，表現基底を$|i\rangle$とする．

$$\widehat{\{p_g|t_g+R_g\}} |j\rangle = |i\rangle [D_g]_{ij}, \quad g \in G_x. \tag{233}$$

乗数系は点群に対するそれから決まる．$z_{g,h}, g,h \in G$. 空間群$\mathcal{G}$への誘導表現を構成する．

まずは位置xを並進させた格子から成る部分群

$$\mathcal{G}_{x+BL} := \{\{p_g|t_g+R\} | g \in G_x, R \in BL\} \subset \mathcal{G} \tag{234}$$

への誘導表現表現を求めて様子を見よう．形式的に基底

$$|R,i\rangle := \widehat{\{1|R\}} |i\rangle, \quad R \in BL \tag{235}$$

を導入する．また，波数基底

$$|k,i\rangle := \sum_{R \in BL} |R,i\rangle e^{ik\cdot R} \tag{236}$$

を導入する．すると，

$$\widehat{\{p_g|t_g\}} |R,j\rangle = \widehat{\{p_g|t_g+p_g R\}} |j\rangle = \widehat{\{1|p_g R - R_g\}}\widehat{\{p_g|t_g+R_g\}} |j\rangle = \widehat{\{1|p_g R - R_g\}} |i\rangle [D_g]_{ij} = |p_g R - R_g, i\rangle [D_g]_{ij}, \tag{237}$$

及び，

$$\widehat{\{p_g|t_g\}}\,|k,j\rangle = \sum_{R\in BL} |p_g R - R_g, i\rangle\,[D_g]_{ij} e^{ik\cdot R} = \sum_{R\in BL} |R,i\rangle\,[D_g]_{ij} e^{ik\cdot(p_g^{-1}(R+R_g))} = |\tilde{p}_g k, i\rangle\,[D_g]_{ij} e^{i\tilde{p}_g k\cdot R_g} \tag{238}$$

を得る．ここで，波数空間における点群の行列

$$\tilde{p}_g := [p_g^{-1}]^T \tag{239}$$

を導入した．“表現行列”

$$U_g(k) = e^{i\tilde{p}_g k\cdot R_g} D_g = e^{-i\tilde{p}_g k\cdot(p_g x + t_g - x)} D_g, \quad g \in G_x \tag{240}$$

を得た．

空間群$\mathcal{G}$への誘導表現を得るには，上で構成した$\mathcal{G}_{x+BL}$の表現をさらに$\mathcal{G}$へ誘導すれば良い．まず，G/G_xの代表元$g_a(a=1,\dots,|G/G_x|)$を選ぶ．($g_1 = e$として良い．) 空間群ののコセット分解は

$$\mathcal{G} = \coprod_{a=1}^{|G/G_x|} \{p_{g_a}|t_{g_a}\}\mathcal{G}_{x+BL}. \tag{241}$$

形式的に，基底

$$|R,a,i\rangle := \widehat{\{p_{g_a}|t_{g_a}\}}\,|R,i\rangle\,(= \widehat{\{p_{g_a}|t_{g_a}\}}\widehat{\{1|R\}}\,|i\rangle), \quad a=1,\dots,|G/G_x|, \quad R\in BL \tag{242}$$

を導入してみよう．しかし，これはやや都合が悪い．空間並進の作用を見ると，

$$\widehat{\{1|R'\}}\,|R,a,i\rangle = \widehat{\{1|R'\}}\widehat{\{p_{g_a}|t_{g_a}\}}\,|R,i\rangle = \widehat{\{p_{g_a}|t_{g_a} + R'\}}\,|R,i\rangle = \widehat{\{p_{g_a}|t_{g_a}\}}\widehat{\{1|p_{g_a}^{-1}R'\}}\,|R,i\rangle = \widehat{\{p_{g_a}|t_{g_a}\}}\,|R + p_{g_a}^{-1}R', i\rangle \tag{243}$$

となり，単なる並進とならない．これは，そもそも

$$|R,a,i\rangle := \widehat{\{p_{g_a}|t_{g_a} + p_{g_a}R\}}\,|i\rangle \tag{244}$$

となり，$a\neq 1$については単なる並進でないためである．

$\mathcal{G}_{x+BL}$への誘導表現を経由せずに，$\mathcal{G}_x$の表現から直接$\mathcal{G}$の誘導表現を構成すれば良い．形式基底

$$|R,a,i\rangle := \widehat{\{1|R\}}\widehat{\{p_{g_a}|t_{g_a}\}}\,|i\rangle = \widehat{\{p_{g_a}|t_{g_a} + R\}}\,|i\rangle \tag{245}$$

を導入する．明らかに，

$$\widehat{\{1|R'\}}\,|R,a,i\rangle = |R+R',a,i\rangle \tag{246}$$

を見たす．波数基底も

$$|k,a,i\rangle := \sum_{R\in BL} |R,a,i\rangle\, e^{ik\cdot R} \tag{247}$$

と定義する． $g\in G$に対して，$gg_a = g_{b(a)}h, h\in G_x$とする．すると，

$$\widehat{\{p_g|t_g\}}\,|R,a,j\rangle = \widehat{\{p_g|t_g\}}\widehat{\{p_{g_a}|t_{g_a} + R\}}\,|j\rangle \tag{248}$$

$$= z_{g,g_a}\widehat{\{p_{gg_a}|p_g(t_{g_a} + R) + t_g\}}\,|j\rangle \tag{249}$$

$$= z_{g,g_a}\widehat{\{p_{g_{b(a)h}}|p_g(t_{g_a} + R) + t_g\}}\,|j\rangle \tag{250}$$

$$= z_{g,g_a} z_{g_{b(a)},h}^{-1}\widehat{\{p_{g_{b(a)}}|p_g(t_{g_a} + R) + t_g - p_{g_{b(a)}}(t_h + R_h)\}}\widehat{\{p_h|t_h + R_h\}}\,|j\rangle \tag{251}$$

$$= z_{g,g_a} z_{g_{b(a)},h}^{-1}\widehat{\{p_{g_{b(a)}}|p_g(t_{g_a} + R) + t_g - p_{g_{b(a)}}(t_h + R_h)\}}\,|i\rangle\,[D_h]_{ij} \tag{252}$$

$$= z_{g,g_a} z_{g_{b(a)},h}^{-1}\widehat{\{p_{g_{b(a)}}|t_{g_{b(a)}} + p_g R - t_{g_{b(a)}} + p_g t_{g_a} + t_g - p_{g_{b(a)}}(t_h + R_h)\}}\,|i\rangle\,[D_h]_{ij} \tag{253}$$

となる．ここで，

$$-t_{g_{b(a)}}+p_gt_{g_a}+t_g-p_{g_{b(a)}}(t_h+R_h)\in BL \tag{254}$$

を確認しよう． $h=g_{b(a)}^{-1}gg_a$に注意する．

$$-t_{g_{b(a)}}+p_gt_{g_a}+t_g-p_{g_{b(a)}}(t_h+R_h)=(p_gt_{g_a}+t_g-t_{gg_a})-(p_{g_{b(a)}}t_{g_{b(a)}^{-1}gg_a}+t_{g_{b(a)}}-t_{gg_a})-p_{g_{b(a)}}R_{g_{b(a)}^{-1}gg_a} \tag{255}$$

$$=R_{g,g_a}-R_{g_{b(a)},g_{b(a)}^{-1}gg_a}-p_{g_{b(a)}}R_{g_{b(a)}^{-1}gg_a} \tag{256}$$

より．まとめると，与えられた点群の元$g\in G$に対して，$b\in\{1,\dots,|G/G_x|\}$を条件$g_b^{-1}gg_a\in G_x$によって定義すると，

$$\widehat{\{p_g|t_g\}}\,|R,a,j\rangle=z_{g,g_a}z_{g_{b(a)},g_{b(a)}^{-1}gg_a}^{-1}\,\widehat{\{p_{g_{b(a)}}|t_{g_{b(a)}}+p_gR+R_{g,g_a}-R_{g_{b(a)},g_{b(a)}^{-1}gg_a}-p_{g_{b(a)}}R_{g_{b(a)}^{-1}gg_a}\}}\,|i\rangle\,[D_{g_{b(a)}^{-1}gg_a}]_{ij} \tag{257}$$

$$=z_{g,g_a}z_{g_{b(a)},g_{b(a)}^{-1}gg_a}^{-1}\,|p_gR+R_{g,g_a}-R_{g_{b(a)},g_{b(a)}^{-1}gg_a}-p_{g_{b(a)}}R_{g_{b(a)}^{-1}gg_a},b(a),i\rangle\,[D_{g_{b(a)}^{-1}gg_a}]_{ij} \tag{258}$$

と作用する．波数基底では

$$\widehat{\{p_g|t_g\}}\,|k,a,j\rangle=z_{g,g_a}z_{g_{b(a)},g_{b(a)}^{-1}gg_a}^{-1}\sum_{R\in BL}|p_gR+R_{g,g_a}-R_{g_{b(a)},g_{b(a)}^{-1}gg_a}-p_{g_{b(a)}}R_{g_{b(a)}^{-1}gg_a},b(a),i\rangle\,e^{ik\cdot R}[D_{g_{b(a)}^{-1}gg_a}]_{ij} \tag{259}$$

$$=z_{g,g_a}z_{g_{b(a)},g_{b(a)}^{-1}gg_a}^{-1}\sum_{R\in BL}|p_gR+R_{g,g_a}-R_{g_{b(a)},g_{b(a)}^{-1}gg_a}-p_{g_{b(a)}}R_{g_{b(a)}^{-1}gg_a},b(a),i\rangle\,e^{ik\cdot R}[D_{g_{b(a)}^{-1}gg_a}]_{ij} \tag{260}$$

$$=z_{g,g_a}z_{g_{b(a)},g_{b(a)}^{-1}gg_a}^{-1}\sum_{R\in BL}|R,b(a),i\rangle\,e^{ik\cdot p_g^{-1}\{R-(R_{g,g_a}-R_{g_{b(a)},g_{b(a)}^{-1}gg_a}-p_{g_{b(a)}}R_{g_{b(a)}^{-1}gg_a})\}}[D_{g_{b(a)}^{-1}gg_a}]_{ij} \tag{261}$$

$$=z_{g,g_a}z_{g_{b(a)},g_{b(a)}^{-1}gg_a}^{-1}\,|\tilde{p}_gk,b(a),i\rangle\,e^{-i\tilde{p}_gk\cdot(R_{g,g_a}-R_{g_{b(a)},g_{b(a)}^{-1}gg_a}-p_{g_{b(a)}}R_{g_{b(a)}^{-1}gg_a})}[D_{g_{b(a)}^{-1}gg_a}]_{ij}. \tag{262}$$

これから，“表現行列”

$$[U_g^k]_{b(a)a}=\frac{z_{g,g_a}}{z_{g_{b(a)},g_{b(a)}^{-1}gg_a}^{-1}}e^{-i\tilde{p}_gk\cdot(R_{g,g_a}-R_{g_{b(a)},g_{b(a)}^{-1}gg_a}-p_{g_{b(a)}}R_{g_{b(a)}^{-1}gg_a})}D_{g_{b(a)}^{-1}gg_a} \tag{263}$$

を得る．

さて，我々が興味のあるのは指標である．トレースには$b(a)=a$なるブロック対角成分のみが効く．

$$\mathrm{tr}\,U_g^k=\sum_a\delta_{b(a),a}\frac{z_{g,g_a}}{z_{g_a,g_a^{-1}gg_a}^{-1}}e^{-i\tilde{p}_gk\cdot(R_{g,g_a}-R_{g_a,g_a^{-1}gg_a}-p_{g_a}R_{g_a^{-1}gg_a})}\chi_{g_a^{-1}gg_a} \tag{264}$$

ここで，条件$b(a)=a$は，$\delta_{g_a^{-1}gg_a\in G_x}$と等価．よって，

$$\mathrm{tr}\,U_g^k=\sum_{a=1}^{|G/G_x|}\delta_{g_a^{-1}gg_a\in G_x}\frac{z_{g,g_a}}{z_{g_a,g_a^{-1}gg_a}^{-1}}e^{-i\tilde{p}_gk\cdot(R_{g,g_a}-R_{g_a,g_a^{-1}gg_a}-p_{g_a}R_{g_a^{-1}gg_a})}\chi_{g_a^{-1}gg_a}. \tag{265}$$

一般論より，

$$\frac{z_{g,g_a}}{z_{g_a,g_a^{-1}gg_a}^{-1}}\chi_{g_a^{-1}gg_a} \tag{266}$$

は代表元g_aの取り方に依存しない．（App参照.）

$$R_{g,g_a} - R_{g_a,g_a^{-1}gg_a} - p_{g_a}R_{g_a^{-1}gg_a} = p_g t_{g_a} + t_g - p_{g_a}t_{g_a^{-1}gg_a} - t_{g_a} - p_{g_a}R_{g_a^{-1}gg_a} \tag{267}$$

についても類似の関係式があるだろう．証明を真似るため，まずは$R_{g,h}$が2コサイクル条件を満たすことを示す．

$$R_{g,h} = p_g t_h - t_{gh} + t_g, \tag{268}$$

$$\begin{aligned}(dR)_{g,h,k} &= p_g R_{h,k} - R_{gh,k} + R_{g,hk} - R_{g,h} &(269)\\ &= p_g(p_h t_k - t_{hk} + t_h) - (p_{gh}t_k - t_{ghk} + t_{gh}) + (p_g t_{hk} - t_{ghk} + t_g) - (p_g t_h - t_{gh} + t_g) = 0. &(270)\end{aligned}$$

より．すると，

$$\begin{aligned}&p_{g_a}R_{h,h^{-1}g_a^{-1}gg_ah} - R_{g_ah,h^{-1}g_a^{-1}gg_ah} + R_{g_a,g_a^{-1}gg_ah} - R_{g_a,h} = 0, &(271)\\ &p_{g_a}R_{g_a^{-1}gg_a,h} - R_{gg_a,h} + R_{g_a,g_a^{-1}gg_ah} - R_{g_a,g_a^{-1}gg_a} = 0, &(272)\\ &p_g R_{g_a,h} - R_{gg_a,h} + R_{g,g_ah} - R_{g,g_a} = 0 &(273)\end{aligned}$$

に注意すると，

$$\begin{aligned}&R_{g,g_ah} - R_{g_ah,h^{-1}g_a^{-1}gg_ah} &(274)\\ &= -p_g R_{g_a,h} + R_{gg_a,h} + R_{g,g_a} - p_{g_a}R_{h,h^{-1}g_a^{-1}gg_ah} - R_{g_a,g_a^{-1}gg_ah} + R_{g_a,h} &(275)\\ &= -p_g R_{g_a,h} + R_{g,g_a} - p_{g_a}R_{h,h^{-1}g_a^{-1}gg_ah} + R_{g_a,h} + p_{g_a}R_{g_a^{-1}gg_a,h} - R_{g_a,g_a^{-1}gg_a} &(276)\\ &= (R_{g,g_a} - R_{g_a,g_a^{-1}gg_a}) - p_g R_{g_a,h} - p_{g_a}R_{h,h^{-1}g_a^{-1}gg_ah} + R_{g_a,h} + p_{g_a}R_{g_a^{-1}gg_a,h} &(277)\\ & &(278)\end{aligned}$$

また，$R_g, g \in G_x$の性質

$$(dR)_{g,h} = p_g R_h - R_{gh} + R_g = 0, \quad g,h \in G_x \tag{279}$$

を思い出す．すると，$h \in G_x$に対して，

$$\begin{aligned}p_{g_ah}R_{h^{-1}g_a^{-1}gg_ah} &= p_{g_a}p_h R_{h^{-1}g_a^{-1}gg_ah} &(280)\\ &= p_{g_a}(R_{g_a^{-1}gg_ah} - R_h) &(281)\\ &= p_{g_a}(p_{g_a^{-1}gg_a}R_h + R_{g_a^{-1}gg_a} - R_h) &(282)\\ &= p_{g_a}R_{g_a^{-1}gg_a} + p_{g_a}(p_{g_a^{-1}gg_a}R_h - R_h) &(283)\\ &= p_{g_a}R_{g_a^{-1}gg_a} + p_{gg_a}R_h - p_{g_a}R_h. &(284)\end{aligned}$$

となり，ゴミが残る．

E back up 原子絶縁体に対する，磁気空間群の表現

あるWyckoff位置aは単位胞内の複数のサイトから成るが，代表サイトをxとする． $\mathcal{G}$を磁気空間群，Gをその磁気点群とし，切断$G \to \mathcal{G}$をひとつ選ぶ．切断を$\{p_g|t_g\}, g \in G$と書く．（点群の元をg, 行列をp_gと書いている.） $\phi_g \in \{\pm 1\}$をユニタリか，反ユニタリを指定する準同型写像とする．磁気点群Gの部分群

$$G_x = \{g \in G | p_g x + t_g \equiv x \text{ mod a lattice vector}\} \tag{285}$$

を導入する． G_xの誘導表現を構成することにより，Wyckoff位置aの磁気空間群の表現を得る．具体的には以下のように実行する．

磁気点群Gの乗数系を$z_{g,h}, g,h \in G$とする． $G^0 = \mathrm{Ker}\,\phi$，$G_x^0 = G_x \cap \mathrm{Ker}\,\phi$をそれぞれユニタリな部分群とする． G_x^0の既約指標$\chi_{g \in G_x^0}$に対して，G^0への誘導指標は，一般論より，

$$\psi_{g \in G^0} = \frac{1}{|G_x^0|} \sum_{x \in G^0} \frac{z_{g,x}}{z_{x,x^{-1}gx}} \delta_{x^{-1}gx \in G^0} \chi_{x^{-1}gx} \tag{286}$$

によって与えられる． Wyckoff位置aにおける他のサイトを求める必要はないことに注意． G^0/G_x^0の代表元を$g_b, b = 1, \ldots, |G^0/G_x^0|$とすると，コセット分解

$$G^0 = \coprod_b g_b G_x^0 \tag{287}$$

と自由度bが対応する．自由度bを固定する部分群は，$g_b G_x^0 g_b^{-1} \subset G^0$で与えられる．対応する磁気空間群の表現の指標は，波数をkとして，

$$\psi_{g \in G^0}^k = e^{-ip_g k \cdot t_g} \psi_{g \in G^0} \tag{288}$$

で与えられる．乗数系は

$$\psi_g^{p_h k} \psi_h^k = e^{-ip_g p_h k \cdot t_g} \psi_g e^{-ip_h k \cdot t_h} \psi_h = z_{g,h} e^{-ip_{gh} k \cdot (t_g + p_g t_h - t_{gh})} \psi_{gh}^k \tag{289}$$

となる．（この乗数系はBZで周期的な乗数系と一致する．）

例：*half lattice translation*— $G = \mathbb{Z}_2 = \{e, \sigma\}, p_\sigma = \mathrm{id}, t_\sigma = 1/2$とする． $z \equiv 1$． $G_x = \{e\}$であり，自明な表現$\chi_e = 1$のみ．このとき，$\psi_e = 2, \psi_\sigma = 0$．さらに，$\psi_e^k = 2, \psi_\sigma^k = 0$．乗数系は$(\sigma, \sigma) \to e^{-ik(1/2+1/2-0)} = e^{-ik}$．

- ψ_g^kは誘導表現によって構成されているので，原子の局在位置の情報がない．例えば，文様群$p4$において，原点と$(1/2, 1/2)$は共通の小群を持つため，同一のψ_g^kを与える．しかし，原点と$(1/2, 1/2)$は異なる空間群表現である．何かがおかしい...

さて，ψ_g^kはBZで周期的ではない．周期的にしたければ，Wyckoff位置aの自由度を全てxに移動するユニタリ変換を施す． Wyckoff位置aの，ユニタリな対称性によって移る，他の自由度の位置は

$$x_b = p_{g_b} x + t_{g_b} \quad (\text{mod a lattice vector}) \quad (b = 1, \ldots, |G^0/G_x^0|) \tag{290}$$

で与えられる．自由度の位置は代表元の取り方に依存しないはずである．つまり，$g_a h, h \in G_x^0$に対して，

$$p_{g_b G_x^0} x + t_{g_a G_x^0} \equiv p_{g_b} x + t_{g_b}. \tag{291}$$

並進のユニタリ変換は

$$V_{bc}^k = \delta_{bc} e^{-ik \cdot x_b} \tag{292}$$

で与えられる． ψ_g^kに対応する表現を$D_g^k = e^{-ip_g k \cdot t_g} D_g, \mathrm{tr}\,[D_g^k] = \psi_g^k$と書くと，ユニタリ変換されたBZで周期的な表現は

$$\tilde{D}_g^k = [V^{p_g k}]^{-1} D_g^k V^k, \quad [\tilde{D}_g^k]_{bc} = e^{-ip_g k \cdot (p_g x_c + t_g - x_b)} [D_g^k]_{bc} \tag{293}$$

となる．これから，BZで周期的な表現の指標は

$$\tilde{\psi}_g^k = \sum_b e^{-ip_g k \cdot (p_g x_b + t_g - x_b)} \frac{z_{g,g_b}}{z_{g_b, g_b^{-1} g g_b}} \delta_{g_b^{-1} g g_b \in G_x^0} \chi_{g_b^{-1} g g_b} \tag{294}$$

で与えられる．条件$g \in g_b G_x^0 g_b^{-1}$は，gが自由度を固定する条件，つまり，$p_g x_b + t_g - x_b \in BL$と等価．実際，空間群の性質のみから，

$$x \xrightarrow{h} p_h x + t_h \xrightarrow{g} p_g(p_h x + t_h) + t_g = p_{gh} x + p_g t_h + t_g, \tag{295}$$

$$x \xrightarrow{gh} p_{gh} x + t_{gh} \tag{296}$$

を比較して，2コサイクル

$$\Delta_{g,h} := p_g t_h + t_g - t_{gh} \in BL \tag{297}$$

が定義される．（AHSSの計算で導入済み）これを用いて，$x_b = p_{g_b} x + t_{g_b}$に注意して，また，$p_g x + t_g - x = a_g \in BL (g \in G_x^0)$を導入して，

$$\begin{aligned} p_g x_b + t_g - x_b &= p_g(p_{g_b} x + t_{g_b}) + t_g - (p_{g_b} x + t_{g_b}) && (298)\\ &= p_{g_b}(p_{g_b^{-1} g g_b} x - x) + p_g t_{g_b} + t_g - t_{g_b} && (299)\\ &= p_{g_b}(a_{g_b^{-1} g g_b} - t_{g_b^{-1} g g_b}) + p_g t_{g_b} + t_g - t_{g_b} && (300)\\ &= p_{g_b}(a_{g_b^{-1} g g_b} - t_{g_b^{-1} g g_b}) + t_{g g_b} + \Delta_{g, g_b} - t_{g_b} && (301)\\ &= p_{g_b} a_{g_b^{-1} g g_b} + \Delta_{g, g_b} - \Delta_{g_b, g_b^{-1} g g_b} \in BL. && (302) \end{aligned}$$

となる．したがって，k依存する部分はBZで周期的となる．数値計算の上では，与えられたxに対して，

$$p_g x_b + t_g - x_b = p_{g g_b} x + p_g t_{g_b} + t_g - p_{g_b} x - t_{g_b}. \tag{303}$$

とすればよい．さて，代表元$g_b \in g_b G_x^0$はできれば選びたくない．

E.1 あるk点における既約指標

波数kにおける既約指標が

$$\psi_g^k = e^{-i p_g k \cdot t_g} \psi_g \tag{304}$$

で与えられる．点群作用は波数を変化させる．ゾーン境界における表現は，逆格子ベクトルの補正が必要かどうかを考えよう．

原子絶縁体から決まる点群の表現行列D_gに対して，空間群の表現行列は

$$U_g^k = e^{-i p_g k \cdot t_g} D_g \tag{305}$$

と決まる．この表記において，kはBZで周期的ではないので，kと$k + \boldsymbol{G}$は異なる表現行列を与える．点群作用は波数を変化させるから，

$$U_g^{p_h k} U_h^k = z_{g,h} e^{-i p_{gh} k \cdot (p_g t_h + t_g - t_{gh})} U_{gh}^k \tag{306}$$

を得る．U_g^kはBZで周期的ではないが，$p_g t_h + t_g - t_{gh} \in BL$であるので，乗数系はBZで周期的．波数$k$における小群を

$$G_k^0 := \{g \in G^0 | p_g k \equiv k \text{ mod a reciprocal lattice vector}\} \tag{307}$$

と定義する．波数kにおける，表現行列は次のようになる．

F 波数空間AHSS再考

さて，波数空間AHSSもBZで周期的でない表式で走らせることができれば余計な手間が生じない．

References