

ノート：arXiv:1907.09354の計算確認 同変Thom同型を用いた表面状態の分類計算

塩崎 謙

January 29, 2022

Abstract

[2]と[1]の結果の不一致を受けて、[1]の分類表の再計算を行った。不一致の例はスピングル電子系、磁気点群 $\bar{4}1'$ のB表現である。(ただし、[2]が同じ設定の分類問題を扱っているかどうかに関しては、未把握。) [1]の数値計算には一部間違いが存在することがわかった。つまり、[1]の定式化でなく、プログラム実装に間違いがあった。再計算結果は[1]のv2 (出版版)に掲載されている。再計算後においても、[2]の結果との不一致 (例えば、 $\bar{4}1'$ のB表現)は残った。2例 (スピングル $\bar{4}1'$ B表現, スピングル $62'2'B$ 表現)について、実空間AHSSの手計算結果もノート後半に残す。実空間AHSSの結果は[1]のv2と矛盾しない。

1 定式化の確認

対称性のデータは、

- 群 G ,
- 実空間への作用 $p_g \in O(3), \mathbf{x} \mapsto p_g \mathbf{x}$,
- 乗数系 $z_{g,h}$,
- 準同型 $\phi, c: G \rightarrow \mathbb{Z}_2 = \{\pm 1\}$.

対称性は

$$u_g H(\mathbf{k}) u_g^{-1} = c_g H(\mathbf{k}), \quad u_g u_h = z_{g,h} u_{gh}, \quad u_g i u_g^{-1} = \phi_g i. \quad (1)$$

$$s_g = \det p_g \in \pm \quad (2)$$

を導入する。また、 $p_g = I^{s_g} R_g$ として (I は空間反転), $R_g \in SO(3)$ を軸 \mathbf{n}_g 周りの θ_g 回転として、 (\mathbf{n}_g, θ_g) を固定する。

1.1 K_{AI} の構成

対称性のデータ(G, z, ϕ, c)に対してWigner判定条件を適用して、点群中心における K 群 K_{AI} を計算する。 ϕ, c に対して $G = G_0 + TG_0 + CG_0 + \Gamma G_0$ と分解する。 K_{AI} の格子は以下の規則で構成する。

- 分類が非自明な G_0 の既約表現に対して、ハミルトニアン H の表現次元を入れる。
- マップされる表現については、 c_h 倍する。

- \mathbb{Z}_2 分類については絶対値を取る.

以上の規則により,

$$\begin{array}{ll}
\text{A, AI} & (1) \\
\text{A}_T, \text{D}_T & (1, 1) \\
\text{A}_C, \text{AI}_C & (1, -1) \\
\text{A}_{T,C} & (1, 1, -1, -1) \\
\text{AII, D, BDI} & (2) \\
\text{AII}_C & (2, -2)
\end{array} \tag{3}$$

を得る. \mathbb{Z} 分類, \mathbb{Z}_2 分類の基底ベクトル (横ベクトル) を並べた行列をそれぞれ

$$V_{\mathbb{Z}} = \begin{pmatrix} v_1 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad V_{\mathbb{Z}_2} = \begin{pmatrix} v_1 \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{4}$$

と書く.

1.2 K の構成

次に, Cornfeld–Chapmanの方法により, u_g を内部対称性に変換する.

$$H(\mathbf{k}) = k_1\gamma_1 + k_2\gamma_2 + k_3\gamma_3 + m\Gamma_0 \tag{5}$$

とする.

$$q_g := e^{\frac{\theta_g}{2}(n_{g1}\gamma_2\gamma_3 + n_{g2}\gamma_3\gamma_1 + n_{g3}\gamma_1\gamma_2)} \tag{6}$$

として,

$$\rho_g := (\gamma_1\gamma_2\gamma_3)^{\frac{1-s_g}{2}} q_g u_g \tag{7}$$

とすると,

$$\rho_g H(\mathbf{k}) \rho_g^{-1} = c_g s_g H(\phi_g \mathbf{k}), \quad \rho_g \rho_h = \tilde{z}_{g,h} \rho_{gh}, \quad \rho_g i \rho_g^{-1} = \phi_g i. \tag{8}$$

ここで, 乗数系 $\tilde{z}_{g,h}$ は

$$\tilde{z}_{g,h} = z'_{g,h} (-1)^{\frac{1-c_g s_g}{2} \frac{1-s_h}{2}} z_{g,h}, \tag{9}$$

$$z'_{g,h} = q_h q_g q_{gh}^{-1} \in \pm 1 \tag{10}$$

で与えられる. 右作用に注意. $z'_{g,h}$ は (\mathbf{n}_g, θ_g) に対して決まり, スピNFL電子系の乗数系と必ずしも一致しない. また, $z'_{g,h}$ はユニタリ部分のみで決まり, 反ユニタリ対称性を含むスピNFL電子系の乗数系とはこの点においても異なる. データ $(G, \tilde{c}, \tilde{c} = cs, \phi)$ に対してWigner判定条件を適用して K 群 K を計算する. \tilde{c}, ϕ に対する G の分解を $G = G'_0 + T'G'_0 + C'G'_0 + \Gamma'G'_0$ とする. K の格子は以下の規則で構成する.

- カイラル対称性が存在して, カイラル対称性が G'_0 の既約表現 α 内で閉じる場合は, $G'_0 + \Gamma'G'_0$ の既約表現から表現の拡大 $\alpha+$ を1つ選ぶ.
- 分類が非自明な既約表現に対して, ハミルトニアン α の表現次元を入れる.
- マップされる表現については, ϕ_h 倍する. 該当するEAZクラスはAIII $_T$ のみ. $T(\alpha+)$ と $(T\alpha)+$ の不一致を符号 η で表現する.

- \mathbb{Z}_2 分類については絶対値を取る.

以上の規則により,

$$\begin{array}{ll}
\text{AIII, DIII, AII} & (4) \\
\text{CII, CI} & (8) \\
\text{AIII}_T & (4, -\eta 4) \\
\text{AII}_C & (4, 4)
\end{array} \tag{11}$$

を得る. \mathbb{Z} 分類, \mathbb{Z}_2 分類の基底ベクトル (横ベクトル) を並べた行列をそれぞれ

$$V'_Z = \begin{pmatrix} v_1 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad V'_{\mathbb{Z}_2} = \begin{pmatrix} v_1 \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{12}$$

と書く.

3D巻き付き数が時間反転対称性によって -1 倍される点について証明を残す. ハミルトニアン $H_\beta(\mathbf{k})$ の巻き付き数は,

$$w_\beta = \frac{1}{48\pi^2} \int \text{tr} \Gamma_\beta [[H_\beta(\mathbf{k})]^{-1} dH_\beta(\mathbf{k})]^3 \tag{13}$$

で与えられる. カイラル演算子 Γ の符号と, $G'_0 + \Gamma'G'_0$ への拡大 $\beta+$ の選び方が対応する. マップされた $T\beta$ のハミルトニアン, 及びカイラル演算子は

$$H_{T\beta}(\mathbf{k}) = TH_\beta(-\mathbf{k})T^{-1} \tag{14}$$

で与えられる. 変形して,

$$w_\beta = -\frac{1}{48\pi^2} \int \text{tr} (T^{-1}\Gamma_\beta T) [[H_{T\beta}(\mathbf{k})]^{-1} dH_{T\beta}(\mathbf{k})]^3 \tag{15}$$

を得る. $T\beta$ のカイラル演算子を $\Gamma_{T\beta}$ と書いたとき, $T^{-1}\Gamma_\beta T = \eta\Gamma_{T\beta}$ によって符号 η を定義すると, 関係式

$$w_\beta = -\eta w_{T\beta} \tag{16}$$

を得る.

1.3 第3同型定理

$$f: K_{\text{AI}} \rightarrow K \tag{17}$$

を計算したい. まず, 第3同型定理によって整数格子の問題に書き換える. に対して, $K/\text{Im} f$ を計算したい. K, K_{AI} のねじれ部分の \mathbb{Z} への拡張をそれぞれ

$$H \rightarrow \tilde{K} \rightarrow K, \tag{18}$$

$$H_{\text{AI}} \rightarrow \tilde{K}_{\text{AI}} \rightarrow K_{\text{AI}}, \tag{19}$$

と書く. すると,

$$\tilde{f}: \tilde{K}_{\text{AI}} \rightarrow \tilde{K} \tag{20}$$

に対して,

$$\text{Im} f = (\text{Im} \tilde{f} + H)/H \tag{21}$$

に注意すると, 第3同型定理より

$$K/\text{Im} f = \tilde{K}/(\text{Im} \tilde{f} + H) \tag{22}$$

となる.

1.4 $\tilde{f}: \tilde{K}_{AI} \rightarrow \tilde{K}$ の計算

$\mathbb{Z} \rightarrow \mathbb{Z}, \mathbb{Z} \rightarrow \mathbb{Z}_2, \mathbb{Z}_2 \rightarrow \mathbb{Z}_2$ で計算方法が異なる。 \mathbb{Z}_2 へのマップは全て絶対値を取ることに注意。 まず, G_0 の既約表現 α から構成されたハミルトニアン

$$H = \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\gamma} + \mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\Gamma} + m\Gamma_0 \quad (23)$$

に対して, $\mathbf{r} = \mathbf{0}$ と制限したハミルトニアン

$$H = \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\gamma} + m\Gamma_0 \quad (24)$$

の, $G'_0 + \Gamma G'_0$ の既約表現 β の 3D 巻き付き数を計算する行列 δ_{w_3} と G'_0 の既約表現 β の数を数える行列 δ_{ir} を構成する。

$$[\delta_{w_3}]_{\alpha\beta} = 4 \times \frac{1}{|G'_0|} \sum_{g \in G} \delta_{\phi_g, 1} \delta_{c_g, 1} \delta_{s_g, -1} \chi_{\beta^*}^*(g) 2 \cos \frac{\theta_g}{2} \chi_\alpha(g), \quad (25)$$

$$[\delta_{ir}]_{\alpha\beta} = 4 \times \frac{1}{|G'_0|} \sum_{g \in G} \delta_{\phi_g, 1} \delta_{c_g, 1} \delta_{s_g, 1} \chi_{\beta^*}^*(g) 2 \cos \frac{\theta_g}{2} \chi_\alpha(g). \quad (26)$$

この 2 つの行列は, K の分類が自明か非自明かに依存せず構成できる。 H の分解には, \mathbb{Z}_2 分類が自明な既約表現が含まれる可能性もあるので, また, K の \mathbb{Z}_2 分類のみに 1 を, 他に 0 を与える横ベクトルを $v'_{\mathbb{Z}_2}$ とし, \mathbb{Z}_2 分類が非自明な既約表現のみを数える行列

$$[\delta_{\mathbb{Z}_2}]_{\alpha\beta} := [\delta_{ir}]_{\alpha\beta} [v'_{\mathbb{Z}_2}]_\beta \quad (27)$$

を導入する。

$\mathbb{Z} \rightarrow \mathbb{Z}, \mathbb{Z} \rightarrow \mathbb{Z}_2, \mathbb{Z}_2 \rightarrow \mathbb{Z}, \mathbb{Z}_2 \rightarrow \mathbb{Z}_2$ の各種行列は以下。

$$[\tilde{f}]_{\mathbb{Z} \rightarrow \mathbb{Z}}_{\alpha\beta} = [V_{\mathbb{Z}} \cdot \delta_{w_3} \cdot (V'_{\mathbb{Z}})^+]_{\alpha\beta}, \quad (28)$$

$$[\tilde{f}]_{\mathbb{Z} \rightarrow \mathbb{Z}_2}_{\alpha\beta} = [\text{Abs}(V_{\mathbb{Z}}) \cdot \delta_{\mathbb{Z}_2} \cdot (V'_{\mathbb{Z}_2})^+]_{\alpha\beta}, \quad (29)$$

$$[\tilde{f}]_{\mathbb{Z}_2 \rightarrow \mathbb{Z}}_{\alpha\beta} = 0, \quad (30)$$

$$[\tilde{f}]_{\mathbb{Z}_2 \rightarrow \mathbb{Z}_2}_{\alpha\beta} = [V_{\mathbb{Z}_2} \cdot \delta_{\mathbb{Z}_2} \cdot (V'_{\mathbb{Z}_2})^+]_{\alpha\beta}, \quad (31)$$

$$(32)$$

ここで, Abs は要素の絶対値を取り, A^+ は A の擬似逆行列である。 擬似逆行列は, 方程式 $A \cdot x = b$ に解が存在しない場合はゼロ行列を与えるため, 方程式 $V \cdot \delta$ が V' で展開できるかどうかを確認する。(具体的には, $V \cdot \delta = V \cdot \delta \cdot (V')^+ \cdot V'$ を確認すれば良い。) 構成から, V' の基底は独立であるので, 解が一意であることに注意。

Im \tilde{f} は行列

$$\begin{pmatrix} \tilde{f}_{\mathbb{Z} \rightarrow \mathbb{Z}} & \tilde{f}_{\mathbb{Z} \rightarrow \mathbb{Z}_2} \\ \tilde{f}_{\mathbb{Z}_2 \rightarrow \mathbb{Z}} & \tilde{f}_{\mathbb{Z}_2 \rightarrow \mathbb{Z}_2} \end{pmatrix} \quad (33)$$

の横ベクトルで張られる。 Im $\tilde{f} + H$ で張られる空間は, K' の \mathbb{Z}_2 分類に対して (2) を加える。 つまり,

$$\text{Im } \tilde{f} + H = \begin{pmatrix} \tilde{f}_{\mathbb{Z} \rightarrow \mathbb{Z}} & \tilde{f}_{\mathbb{Z} \rightarrow \mathbb{Z}_2} \\ \tilde{f}_{\mathbb{Z}_2 \rightarrow \mathbb{Z}} & \tilde{f}_{\mathbb{Z}_2 \rightarrow \mathbb{Z}_2} \\ O & \mathbf{2} \end{pmatrix} =: M. \quad (34)$$

行列 M をスミス分解することにより, 商 $K/\text{Im } f$ を得る。 計算結果は [1]v2 を見よ。 Mathematica 計算ファイル名は "Classification_Surface_State.nb"

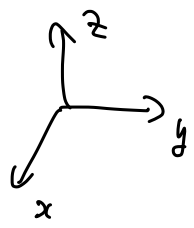
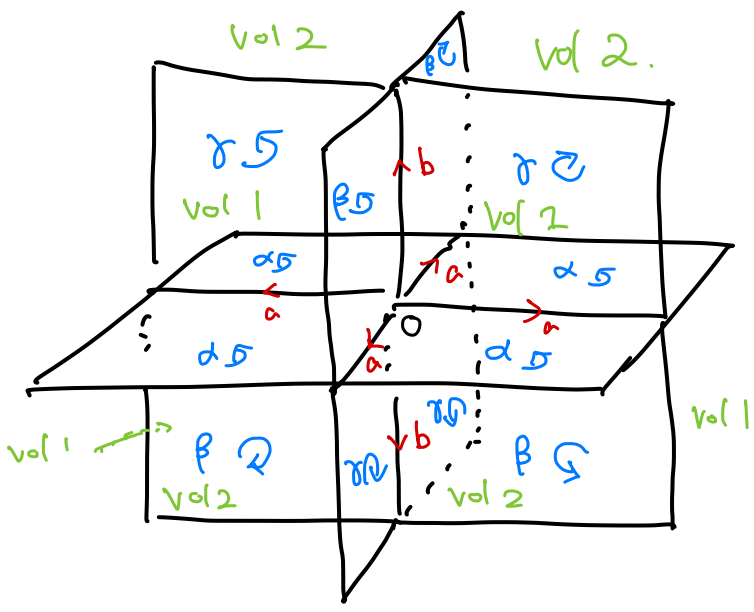
References

- [1] Shiozaki, Ken. "The classification of surface states of topological insulators and superconductors with magnetic point group symmetry." arXiv:1907.09354v1 (2019).
- [2] Zhang, Zhongyi, Jie Ren, and Chen Fang. "Classification of intrinsic topological superconductors jointly protected by time-reversal and point-group symmetries in three dimensions." arXiv:2109.14629v1 (2021).

4.1', B表現 実空間 AHSS

$$(x, y, z) \xrightarrow{f} (y, -x, -z)$$

面分割



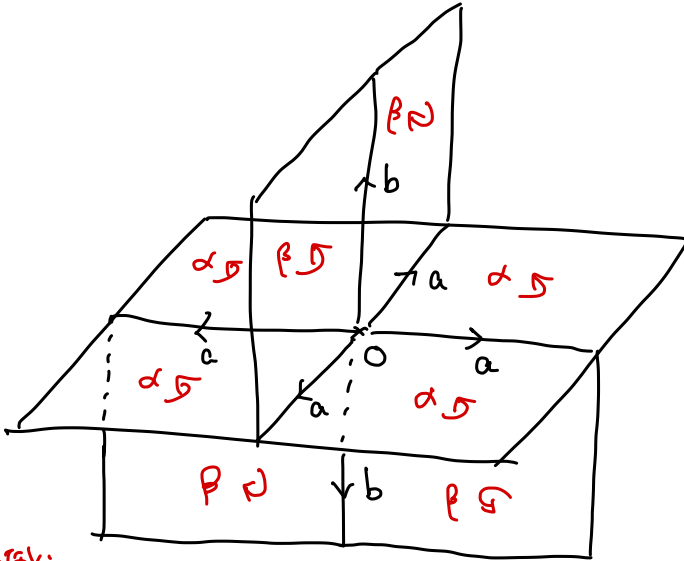
..... Vol は 4次元に2次元分割

面分割

→ γ or β 不変

$E'_{p, n}$	$\{0\}$	$\{a, b\}$	$\{\alpha, \beta, \gamma\}$	$\{Vol, Vol 2\}$
	$p=0$	$p=1$	$p=2$	$p=3$

SU(2) 格子理論



高次元格子理論

	A.T.C	III A.T.	III B.T.	III
$n=0$	\mathbb{Z}	0		
$n=1$	0	$\mathbb{Z}_2 + \mathbb{Z}$	$\mathbb{Z}_2 + \mathbb{Z}_2$	
$n=2$		$\mathbb{Z}_2 + 0$	$\mathbb{Z}_2 + \mathbb{Z}_2$	\mathbb{Z}_2
$n=3$			$\mathbb{Z} + \mathbb{Z}$	\mathbb{Z}
E^1_{p-n}	$\{0\}$ $p=0$	$\{a, b\}$ $p=1$	$\{d, \beta\}$ $p=2$	$\{vol\}$ $p=3$

EA2の導出口
= K^0 -ジ

2-D
III SC
がわかる。

3-D III SCは
synを両辺可。

↓

高次元格子理論の格子理論

$n=0$	\mathbb{Z}	0		
$n=1$	$0 + \mathbb{Z}$	$\mathbb{Z}_2 + 0$		
$n=2$	0	$\mathbb{Z}_2 + 0$	\mathbb{Z}_2	
$n=3$			\mathbb{Z}	
F^2_{p-n}	$p=0$	$p=1$	$p=2$	$p=3$

$= E^\infty$ K^0 -ジ

表面状態の分類は

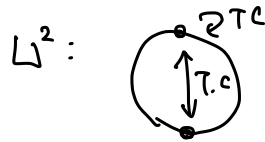
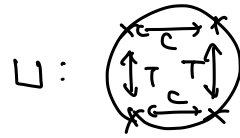
$\mathbb{Z}^2 + \mathbb{Z}_2$

⇒ Conifold-Chern-Simons 同値性

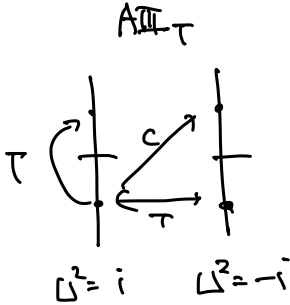
B-rep:
$$\begin{matrix} 1 & \sqrt{2} & 2 & \sqrt{2} \\ \hline 1 & -1 & 1 & -1 \end{matrix}$$

Sym. alg.

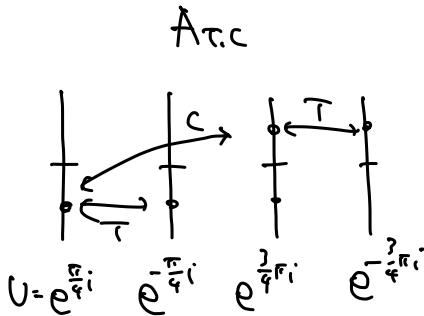
$$\left\{ \begin{array}{l} U H(\mathbb{K}) U^{-1} = H(k_y, -k_x, -k_z), \quad U^2 = -1, \quad (U^2)^2 = -1. \\ T H(\mathbb{K}) T^{-1} = H(-\mathbb{K}), \quad T^2 = -1 \\ C H(\mathbb{K}) C^{-1} = -H(-\mathbb{K}), \quad C^2 = 1. \\ T U = U T, \quad C U = -U C. \end{array} \right.$$



@ b



@ o



B 10p

$$\begin{array}{c|cccc}
 & 1 & 6 & 3 & 2 \\
 \hline
 B & 1 & -1 & 1 & -1
 \end{array}$$

$$C_2^x = -i\sigma^x$$

$$C_6^z = e^{-\frac{\pi}{3}i\sigma^z}$$

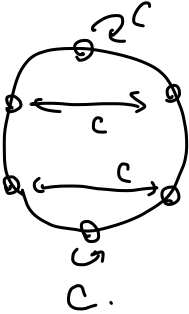
$$\begin{aligned}
 C_2^x C_6^z &= -i\sigma^x e^{-\frac{\pi}{3}i\sigma^z} \\
 &= e^{\frac{\pi}{3}i\sigma^z} (-i\sigma^x) \\
 &= (C_6^z)^{-1} \cdot C_2^x
 \end{aligned}$$

Sym. alg.

$$\left. \begin{aligned} (C_6^z)^6 &= -1, & C C_6^z &= -C_6^z C, \end{aligned} \right\}$$

$$\left. \begin{aligned} (C_2^x T)^2 &= (C_2^x)^2 T^2 = 1, & C_2^x T \cdot C_6^z &= (C_6^z)^{-1} \cdot C_2^x T. \end{aligned} \right\}$$

@ c



$$\Rightarrow D^2 + A_c^2$$

↓

$$C_6^z |\phi\rangle = \lambda |\phi\rangle \quad \lambda \in \mathbb{C}$$

$$C_6^z C_2^x T |\phi\rangle = C_2^x T (C_6^z)^{-1} |\phi\rangle$$

$$= C_2^x T \cdot \lambda^{-1} |\phi\rangle$$

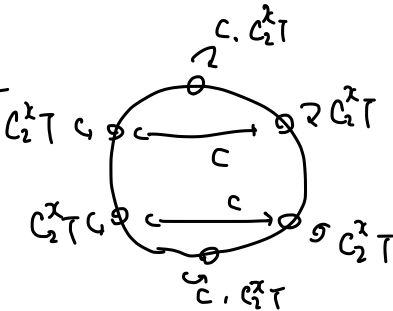
$$= \lambda C_2^x T |\phi\rangle$$

⇒ 本征值

@ a.b

$$\left. \begin{aligned} (C_2^x T)^2 &= 1 \\ C^2 &= 1 \end{aligned} \right\} \Rightarrow \text{BDI}$$

@ 0



$$\Rightarrow \text{BDI}^2 + \text{AIC}^2$$

$$\underline{E^1 (P \rightarrow \gamma)}$$

	$B\Omega^2 + A\Gamma_c^2$	$B\Omega^2 + B\Omega^2 + D^2 + A_c^2$	$P + D$	D
$u = 0$	$\mathbb{Z}_2^2 + \mathbb{Z}^2$	$\mathbb{Z}_2 + \mathbb{Z}_2 + \mathbb{Z}_2^2 + \mathbb{Z}^2$	$\mathbb{Z}_2 + \mathbb{Z}_2$	
$u = 1$	$\mathbb{Z}^2 + 0 \leftarrow$	$\mathbb{Z} + \mathbb{Z} + \mathbb{Z}_2^2 + 0$	$0 \leftarrow (\mathbb{Z}_2 + \mathbb{Z}_2)$	\mathbb{Z}_2
$u = 2$		$0 + 0 + \mathbb{Z}^2 + \mathbb{Z}^2 \leftarrow$	$\mathbb{Z} + \mathbb{Z}$	\mathbb{Z}
$u = 3$			$0 \leftarrow 2 \leftarrow 1$	0

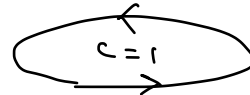
E^1	$\{0\}$	$\{a, b, c\}$	$\{a, \beta\}$	$\{vol\}$
$P=0$	$P=0$	$P=1$	$P=2$	$P=3$

$$d_{2,-2}^1 : \begin{matrix} a & \beta & c \\ \mathbb{Z} + \mathbb{Z} & \rightarrow & \mathbb{Z}^2 + \mathbb{Z}^2 \end{matrix}$$

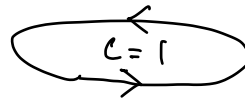
$(1, 0) \mapsto 0$
 $(0, 1) \mapsto (1, 1, 1, 1) \oplus 1$

$$d_{3,-2}^1 : \begin{matrix} vol & a & \beta \\ \mathbb{Z} & \rightarrow & \mathbb{Z} + \mathbb{Z} \end{matrix}$$

$1 \mapsto (2, 0)$



$\downarrow c_2^x T$

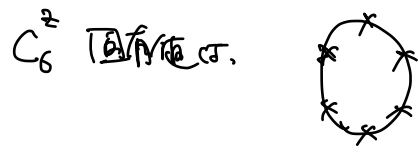
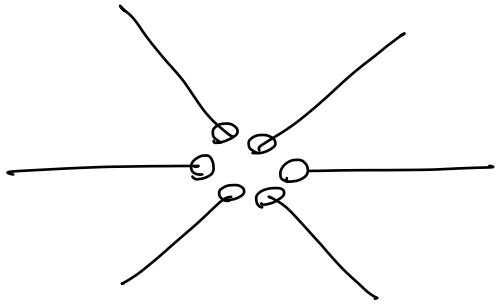


$$d_{2,-2}^1 : \begin{matrix} \beta \\ \mathbb{Z}_2 + \mathbb{Z}_2 & \rightarrow & \mathbb{Z} + \mathbb{Z} + \mathbb{Z}_2^2 \end{matrix}$$

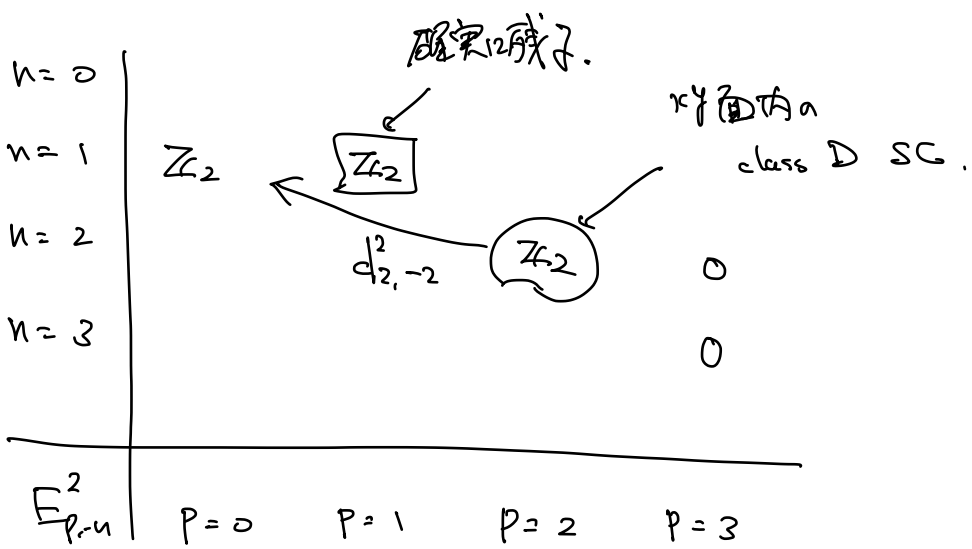
$(1, 0) \rightarrow 0$
 $(0, 1) \mapsto (0, 0, 1, 1)$

$$d_{1,-1}^1 : \begin{matrix} a & b & c \\ \mathbb{Z} + \mathbb{Z} + \mathbb{Z}_2^2 & \rightarrow & \mathbb{Z}_2^2 \\ (1, 0, 0) & \mapsto & (1, 1) \\ (0, 1, 0) & \mapsto & (1, 1) \end{matrix}$$

Table.
 $\Rightarrow \mathbb{Z}_2$ 的残子.



$E^2 \mathbb{P} \rightarrow \mathbb{P}$



$\Rightarrow \mathbb{Z}_2^2$ or \mathbb{Z}_2 .

24 (A) の 172 D SC は. sym 2 compatible の 2-axial 磁石.

$$H = k_x T_x - k_y T_y + m T_z,$$

$$= \begin{pmatrix} m & k e^{i\theta} \\ k e^{i\theta} & -m \end{pmatrix}$$

$$C_\phi = e^{i\phi T_z/2} \xrightarrow{C_{2\pi} = -I} \sim \begin{pmatrix} 1 & \\ & e^{i\phi} \end{pmatrix}.$$

$$\begin{aligned} C_\phi H(\theta) C_\phi^{-1} &= \begin{pmatrix} 1 & \\ & e^{i\phi} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\theta} & e^{i\theta} \\ & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \\ & e^{-i\phi} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} e^{-i(\theta+\phi)} & e^{i(\theta+\phi)} \\ & \end{pmatrix} = H(\theta+\phi). \end{aligned}$$

$$\leadsto C = T_x K.$$

$$\rightarrow C C_\phi = T_x e^{-i\phi T_z/2} = e^{i\phi T_z/2} T_x = C_\phi C.$$

.... C_6 の B-axial は 両立 CTaxial....

$$\Rightarrow \mathcal{A}_{2,2}^2 \text{ は } \mathbb{F}[\langle \sigma \rangle].$$

$$\Delta(k) = |\Delta| e^{in\phi} \text{ etc. } \dots$$

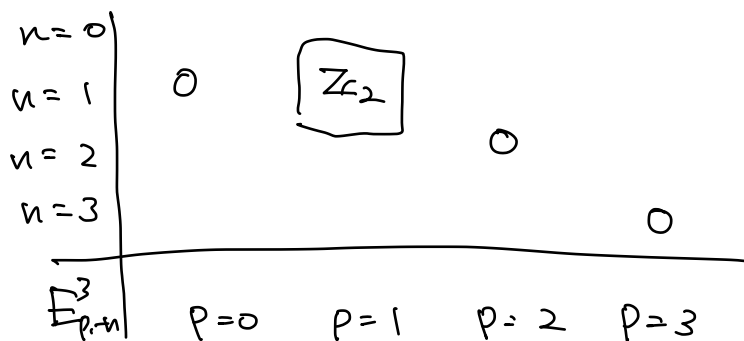
$$H = \begin{pmatrix} m & k^x e^{in\phi} \\ k^y e^{-in\phi} & -m \end{pmatrix}.$$

$$\text{Symmetry } C_\phi = e^{in\phi T_z/2} \rightarrow C_{2\pi} = (-1)^n.$$

$$C C_\phi = T_x e^{-in\phi T_z/2} = e^{in\phi T_z/2} T_x = C_\phi C.$$

... $T_x T_z$. B-rep is physical.

For E^3 1st-order is below.



⇒ 表面状態の分類は, Z_2 //

(update cf =) Corfield-Chapman の結果と一致.

(arxiv の ver 1 は 誤植 (L, P))