ノート：対称点近傍のノードの構造について

塩崎　謙

November 29, 2020

Abstract

このノートでは，ある対称点近傍におけるノードと対称点の既約表現の関係について考える．

1　同変トム同型の実装

Input data:

- $n \in \{1,2,3\}$
- G: 群
- $p_g \in O(n)$群: $\boldsymbol{k} = (k_1, \dots, k_n)^T \mapsto p_g \boldsymbol{k}$. $s_g := \det p_g \in \{\pm 1\}$と書く．
- $\phi_g \in \{0,1\}$: ユニタリ/反ユニタリ
- $c_g \in \{\pm 1\}$
- $z_{g,h}$: 乗数系

対称性は以下：

$$\hat{g} H(\boldsymbol{k}) \hat{g}^{-1} = c_g H(p_g \boldsymbol{k}) \tag{1}$$

Diracハミルトニアン：

$$H(\boldsymbol{k}) = \sum_{j=1}^{n} k_j \gamma_j + m\gamma_0. \tag{2}$$

$n = 1,2,3$について，質量項$m\gamma_0$の分類を与える．

1.1　波数$\mathbf{k} = 0$におけるK群

$$\begin{aligned} G_0 &:= \mathrm{Ker}\,\phi_g \cap \mathrm{Ker}\,c_g, & (3)\\ TG_0 &:= \mathrm{Ker}\,(1-\phi) \cap \mathrm{Ker}\,c_g, & (4)\\ CG_0 &:= \mathrm{Ker}\,(1-\phi) \cap \mathrm{Ker}\,(-c_g), & (5)\\ \Gamma G_0 &:= \mathrm{Ker}\,(\phi) \cap \mathrm{Ker}\,(-c_g) & (6) \end{aligned}$$

を導入する．

$$G = G_0 + TG + CG_0 + \Gamma G_0. \tag{7}$$

G_0の既約表現を$\alpha, \beta, \dots$と書く．既約表現αに対して，次のWigner判定条件と，直交関係を計算する．

$$W_\alpha^T = \frac{1}{|G_0|} \sum_{g \in TG_0} z_{g,g} \chi_{g^2}^\alpha \in \{\pm 1, 0\}, \tag{8}$$

$$W_\alpha^C = \frac{1}{|G_0|} \sum_{g \in CG_0} z_{g,g} \chi_{g^2}^\alpha \in \{\pm 1, 0\}, \tag{9}$$

$$O_{\alpha\beta}^T = \frac{1}{|G_0|} \sum_{g \in G_0} [\frac{z_{g,T}}{z_{T,T^{-1}gT}} (\chi_{T^{-1}gT}^\alpha)^*]^* \chi_g^\beta \in \{0, 1\}, \tag{10}$$

$$O_{\alpha\beta}^C = \frac{1}{|G_0|} \sum_{g \in G_0} [\frac{z_{g,C}}{z_{C,C^{-1}gC}} (\chi_{C^{-1}gC}^\alpha)^*]^* \chi_g^\beta \in \{0, 1\}, \tag{11}$$

$$O_{\alpha\beta}^\Gamma = \frac{1}{|G_0|} \sum_{g \in G_0} [\frac{z_{g,\Gamma}}{z_{\Gamma,\Gamma^{-1}g\Gamma}} \chi_{\Gamma^{-1}g\Gamma}^\alpha]^* \chi_g^\beta \in \{0, 1\}. \tag{12}$$

ここで，T, C, Γはそれぞれ$TG_0, CG_0, \Gamma G_0$の代表元である．また，$h \in G$で”マップ”した既約指標

$$\chi_g^{h\alpha} = \frac{z_{g,h}}{z_{h,h^{-1}gh}} \times \begin{cases} \chi_{h^{-1}gh}^\alpha & (\phi_h = 1), \\ (\chi_{h^{-1}gh}^\alpha)^* & (\phi_h = -1) \end{cases} \tag{13}$$

を導入した．以下の19通りの有効AZクラスを得る．

A, A_T, A_C, A_Γ, $\mathrm{A}_{T,C}$,
AIII, AIII_T,
AI, AI_C,
BDI,
D, D_T,
DIII,
AII, AII_C,
CII,
C, C_T,
CI.

1.2 各EAZクラスにおける，ギャップのあるハミルトニアンに対する対称性演算子の構成

G_0の表現行列を$D_g^\alpha, g \in G_0$と書く．「ギャップのある」の意味は，PHSに対する表現行列を，占有状態と非占有状態を入れ替える演算子に取る，ということ．

準備として，次の問題を考えよう．

$W_\alpha^\Gamma = 1$なるカイラルクラスにおいては，G_0の既約表現αに対して， $G_0 + \Gamma G_0$の既約表現$\alpha\pm$であって，$D_{g \in G_0}^{\alpha\pm} = D_g^\alpha, D_{g \in \Gamma G_0}^{\alpha-} = -D_g^{\alpha+}$なるものが存在する．（表現の中心拡大．）このとき，$W_\alpha^T = 1$の場合に，既約表現$\alpha\pm$に対するT（C）のWigner判定条件の値は？

$$W_{\alpha\pm}^T = \frac{1}{|G_0 + \Gamma G_0|} \sum_{g \in TG_0 + CG_0} z_{g,g} \chi_{g^2}^{\alpha\pm} \tag{14}$$

$$= \frac{1}{2} \frac{1}{|G_0|} (\sum_{g \in TG_0} z_{g,g} \chi_{g^2}^\alpha + \sum_{g \in CG_0} z_{g,g} \chi_{g^2}^\alpha) \tag{15}$$

$$= \frac{1}{2} (W_\alpha^T + W_\alpha^C) \tag{16}$$

$$= \begin{cases} 1 & (\mathrm{BDI}) \\ 0 & (\mathrm{DIII, CI}) \\ -1 & (\mathrm{CII}) \end{cases} \tag{17}$$

ここで，$g^2 \in G_0$を用いた．よって，BDIの場合に限り， $G_0 + \Gamma G_0$の表現$\alpha\pm$を全体$G = (G_0 + \Gamma G_0) + T(G_0 + \Gamma G_0)$に拡張できる．この拡張された行列を，同じ記号で$D_g^{\alpha\pm}$と書く．つまり，

$$\hat{g} = D_g^{\alpha\pm} K^{\phi_g}, \quad g \in G \tag{18}$$

とすると，$\hat{g}$は乗数系$z_{g,h}$を満たす表現となる．

- A.
  $D_g^\alpha, g \in G_0$.
- AIII.
  $G_0 + \Gamma G_0$の既約表現$\alpha\pm$であって， $D_{g\in G_0}^{\alpha\pm} = D_g^\alpha, D_{g\in\Gamma G_0}^{\alpha-} = -D_g^{\alpha+}$なるものが存在する．このD$_g^{\alpha+}$を用いて，

  $$\hat{g} = D_g^{\alpha+} \sigma_y^{\frac{1-c_g}{2}} \tag{19}$$

  と定義する．
- AI.
  $G_0 + TG_0$の表現αであって，$D_{g\in G_0}^\alpha = D_g^\alpha$なるものが存在する．この$D_g^\alpha$を用いて，

  $$\hat{g} = D_g^\alpha K^{\phi_g} \tag{20}$$

  と定義する．
- D.
  $G_0 + CG_0$の表現αであって，$D_{g\in G_0}^\alpha = D_g^\alpha$なるものが存在する．この$D_g^\alpha$を用いて，

  $$\hat{g} = D_g^\alpha (\sigma_x K)^{\phi_g} \tag{21}$$

  と定義する．
- AII.
  乗数系を$z'_{g,h} = (-1)^{\phi_g\phi_h} z_{g,h}$と取り替えるとクラスAIに．乗数系$z'_{g,h}$における群$G_0 + TG_0$の表現$\alpha$であって，$D_{g\in G_0}^\alpha = D_g^\alpha$なるものが存在する．この$D_g^\alpha$を用いて，

  $$\hat{g} = D_g^\alpha (i\sigma_y K)^{\phi_g} \tag{22}$$

  と定義すると，$\hat{g}$は乗数系$z_{g,h}$を満たす$G_0 + TG_0$の表現である．
- C.
  乗数系を$z'_{g,h} = (-1)^{\phi_g\phi_h} z_{g,h}$と取り替えるとクラスDに．乗数系$z'_{g,h}$における群$G_0 + CG_0$の表現$\alpha$であって，$D_{g\in G_0}^\alpha = D_g^\alpha$なるものが存在する．この$D_g^\alpha$を用いて，

  $$\hat{g} = D_g^\alpha (i\sigma_y K)^{\phi_g} \tag{23}$$

  と定義すると，$\hat{g}$は乗数系$z_{g,h}$を満たす$G_0 + CG_0$の表現である．
- BDI.
  上で注意したように， Gの表現$D_g^{\alpha\pm} K^{\phi_g}$が存在する．この行列を用いて，

  $$\hat{g} = \begin{cases} D_g^{\alpha\pm} & (g \in G_0) \\ D_g^{\alpha\pm} K & (g \in TG_0) \\ D_g^{\alpha\pm} \sigma_x K & (g \in CG_0) \\ D_g^{\alpha\pm} \sigma_x & (g \in \Gamma G_0) \end{cases} \tag{24}$$

  と定義する．

- DIII.
乗数系$z'_{g,h}=(-1)^{\phi_g\phi_h}(-1)^{\frac{1-c_g}{2}\frac{1-c_h}{2}}z_{g,h}$に対するAZクラスはBDI．上の議論より，乗数系$z'_{g,h}$を満たす表現行列$D_g^{\alpha\pm}K^{\phi_g}, g\in G$が存在する．

$$\hat{g}=\begin{cases} D_g^{\alpha\pm} & (g\in G_0) \\ D_g^{\alpha\pm}i\sigma_y K & (g\in TG_0) \\ D_g^{\alpha\pm}K & (g\in CG_0) \\ D_g^{\alpha\pm}i\sigma_y & (g\in \Gamma G_0) \end{cases} \tag{25}$$

と定義する．

- CI.
乗数系$z'_{g,h}=(-1)^{\frac{1-c_g}{2}\frac{1-c_h}{2}}z_{g,h}$に対するAZクラスはBDI．上の議論より，乗数系$z'_{g,h}$を満たす表現行列$D_g^{\alpha\pm}K^{\phi_g}, g\in G$が存在する．

$$\hat{g}=\begin{cases} D_g^{\alpha\pm} & (g\in G_0) \\ D_g^{\alpha\pm}K & (g\in TG_0) \\ D_g^{\alpha\pm}i\sigma_y K & (g\in CG_0) \\ D_g^{\alpha\pm}i\sigma_y & (g\in \Gamma G_0) \end{cases} \tag{26}$$

と定義する．

- CII.
乗数系$z'_{g,h}=(-1)^{\phi_g\phi_h}z_{g,h}$に対するAZクラスはBDI．上の議論より，乗数系$z'_{g,h}$を満たす表現行列$D_g^{\alpha\pm}K^{\phi_g}, g\in G$が存在する．

$$\hat{g}=\begin{cases} D_g^{\alpha\pm} & (g\in G_0) \\ D_g^{\alpha\pm}i\tau_y K & (g\in TG_0) \\ D_g^{\alpha\pm}(-i\tau_y\sigma_x)K & (g\in CG_0) \\ D_g^{\alpha\pm}\sigma_x & (g\in \Gamma G_0) \end{cases} \tag{27}$$

と定義する．

1.3 既約表現を保たない対称性が存在するとき

まずは例として，スピンレス系の文様群$p1121'$を考えよう．

$$H(\boldsymbol{k})=k_1\gamma_1+k_2\gamma_2+m\gamma_0, \tag{28}$$
$$\hat{c}H(\boldsymbol{k})\hat{c}^{-1}=H(-\boldsymbol{k}),\quad \hat{c}^2=1, \tag{29}$$
$$\hat{T}H(\boldsymbol{k})\hat{T}^{-1}=H(-\boldsymbol{k}),\quad \hat{T}^2=1, \tag{30}$$
$$\hat{T}\hat{c}=\hat{c}\hat{T}. \tag{31}$$

$n=2$のCCの一般論より，再定義は，

$$\tilde{c}=\gamma_1\gamma_2\hat{c},\quad \tilde{c}^2=-1, \tag{32}$$
$$\tilde{T}=\gamma_1\gamma_2\hat{T},\quad \tilde{T}^2=-1, \tag{33}$$
$$\tilde{T}\tilde{c}=\tilde{c}\tilde{T}. \tag{34}$$

よって，EAZクラスはA_T．このとき，$\mathrm{tr}\,[\gamma_0\hat{g}], \mathrm{tr}\,[\hat{g}]$はどのように書かれるだろうか．

まず，$\tilde{c}=i$セクターの2D Diracハミルトニアンは，一般論より，

$$H_{\tilde{c}=i}=k_1\sigma_x+k_2\sigma_y+m\sigma_z,\quad \tilde{c}=i \tag{35}$$

で与えられる．よって，

$$\hat{c} = \sigma_y \sigma_x \tilde{c} = \sigma_z, \quad \mathrm{tr}\,[\gamma_0 \hat{c}] = 2, \quad \mathrm{tr}\,[\hat{c}] = 0 \tag{36}$$

を得る．このとき，$\tilde{c} = -i$セクターのハミルトニアンは，$\tilde{T}$によるマップを取り，

$$H_{\tilde{c}=-i} = H(\boldsymbol{k})^* = k_1\sigma_x - k_2\sigma_y + m\sigma_z, \quad \tilde{c} = -i \tag{37}$$

で与えられる．よって，

$$\hat{c} = -\sigma_y \sigma_x \tilde{c} = \sigma_z, \quad \mathrm{tr}\,[\gamma_0 \hat{c}] = 2, \quad \mathrm{tr}\,[\hat{c}] = 0 \tag{38}$$

となり，$\tilde{c} = i$と同一の寄与を与える． $\mathrm{A}_T \to \mathrm{A} + \mathrm{A}$へのマップは，$\mathbb{Z} \to \mathbb{Z} \oplus \mathbb{Z}, 1 \mapsto (2, -2)$で与えられる．確認のため，フルのDiracハミルトニアンを書くと，

$$H = k_1\sigma_x + k_2\sigma_y\tau_z + m\sigma_z, \quad \hat{c} = \sigma_z, \quad \hat{T} = \sigma_z\tau_x K \tag{39}$$

で与えられるが，$1 \mapsto (2, -2)$が確認できる．

1.3.1 一般論

表現のマップをDiracハミルトニアンに対して一般化する．まずは，通常の表現のマップについて思い出す． $|i\rangle$をG_0の表現基底とする．つまり

$$\hat{g}\,|j\rangle = |i\rangle\,[D^\alpha_g]_{ij}. \tag{40}$$

$G_0 + TG_0$に対して，マップした表現$T\alpha$は以下で与えられる． $\hat{T}\,|i\rangle$を形式的な表現基底として，

$$\hat{g}\hat{T}\,|j\rangle = z_{g,T}\widehat{gT}\,|j\rangle = z_{g,T}/z_{T,T^{-1}gT}\hat{T}\widehat{T^{-1}gT}\,|j\rangle = z_{g,T}/z_{T,T^{-1}gT}\hat{T}\,|i\rangle\,[D^\alpha_{T^{-1}gT}]_{ij} = \hat{T}\,|i\rangle \left[z_{g,T}/z_{T,T^{-1}gT}[D^\alpha_{T^{-1}gT}]^*_{ij}\right] \tag{41}$$

より，

$$D^{T\alpha}_{g\in G_0} = z_{g,T}/z_{T,T^{-1}gT}[D^\alpha_{T^{-1}gT}]^* \tag{42}$$

が得られた．また，$\hat{T}$の表現行列は形式基底を用いて

$$T(|j\rangle\,, T\,|j\rangle) = (T\,|j\rangle\,, z_{T,T}\widehat{T^2}\,|j\rangle) = (|i\rangle\,, T\,|i\rangle)\begin{pmatrix} 0 & z_{T,T}[D^\alpha_{T^2}]_{ij} \\ \delta_{ij} & 0 \end{pmatrix} \tag{43}$$

つまり，

$$\hat{T} = \begin{pmatrix} 0 & z_{T,T}D^\alpha_{T^2} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} K \tag{44}$$

によって与えられる．

この構成を，有限次元のDiracハミルトニアンに対して拡張したい．対称性変換は波数$\boldsymbol{k}$を変化させないものとする．特に，

$$\hat{T}H(\boldsymbol{k})\hat{T}^{-1} = H(\boldsymbol{k}). \tag{45}$$

まず，G_0部分の対称性を満たすDiracハミルトニアンは，一般に

$$H_\alpha(\boldsymbol{k}) = \sum_{j=1}^{d} k_j\gamma_j \otimes \mathbf{1}_\alpha + m\gamma_0 \otimes \mathbf{1}_\alpha, \quad \hat{g} = \mathbf{1}_\gamma \otimes D^\alpha_g, \quad g \in G_0 \tag{46}$$

によって与えられる．ここで，Dirac行列の空間の単位行列を$\mathbf{1}_\gamma$と書いた．さて，全系のハミルトニアンを

$$H(\boldsymbol{k})=\begin{pmatrix}H_\alpha(\boldsymbol{k}) & \\ & H_{T\alpha}(\boldsymbol{k})\end{pmatrix} \tag{47}$$

と書く．対称性$\hat{T}H(\boldsymbol{k})\hat{T}^{-1}=H(\boldsymbol{k})$より，$H_{T\alpha}(\boldsymbol{k})$の形が定まる．

$$\hat{T}H(\boldsymbol{k})=\begin{pmatrix} & z_{T,T}D^\alpha_{T^2}H_{T\alpha}(\boldsymbol{k})^* \\ H_\alpha(\boldsymbol{k})^* & \end{pmatrix}, \tag{48}$$

$$H(\boldsymbol{k})\hat{T}=\begin{pmatrix} & z_{T,T}H_\alpha(\boldsymbol{k})D^\alpha_{T^2} \\ H_{T\alpha}(\boldsymbol{k}) & \end{pmatrix} \tag{49}$$

よって，この$\hat{T}$の表現行列においては，単に複素共役を取れば良い．

$$H_{T\alpha}(\boldsymbol{k})=H_\alpha(\boldsymbol{k})^*. \tag{50}$$

Diracハミルトニアンで書くと，

$$H_{T\alpha}(\boldsymbol{k})=\sum_{j=1}^{d}k_j\gamma_j^*+m\gamma_0^*. \tag{51}$$

PHS演算子$\hat{C}$，カイラル演算子$\hat{\Gamma}$によるマップも同様． $\hat{C}$の表現行列を

$$\hat{C}=\begin{pmatrix}0 & z_{C,C}D^\alpha_{C^2}\\ 1 & 0\end{pmatrix}K \tag{52}$$

とすると，対称性$\hat{C}H(\boldsymbol{k})\hat{C}^{-1}=-H(\boldsymbol{k})$より，

$$H_{C\alpha}(\boldsymbol{k})=-H_\alpha(\boldsymbol{k})^* \tag{53}$$

となる． $\hat{\Gamma}$の表現行列を

$$\hat{\Gamma}=\begin{pmatrix}0 & z_{\Gamma,\Gamma}D^\alpha_{\Gamma^2}\\ 1 & 0\end{pmatrix} \tag{54}$$

とすると，対称性$\hat{\Gamma}H(\boldsymbol{k})\hat{\Gamma}^{-1}=-H(\boldsymbol{k})$より，

$$H_{\Gamma\alpha}(\boldsymbol{k})=-H_\alpha(\boldsymbol{k}) \tag{55}$$

となる．

まとめると，以下の表．

EAZ class	$H(\boldsymbol{k})$	$\hat{g}, g\in G_0$
X_T	$H_\alpha(\boldsymbol{k})\oplus H_\alpha(\boldsymbol{k})^*$	$\hat{g}=D^\alpha_g\oplus D^{T\alpha}_g$
X_C	$H_\alpha(\boldsymbol{k})\oplus[-H_\alpha(\boldsymbol{k})^*]$	$\hat{g}=D^\alpha_g\oplus D^{C\alpha}_g$
X_Γ	$H_\alpha(\boldsymbol{k})\oplus[-H_\alpha(\boldsymbol{k})]$	$\hat{g}=D^\alpha_g\oplus D^{\Gamma\alpha}_g$
$\mathrm{X}_{T,C}$	$H_\alpha(\boldsymbol{k})\oplus H_\alpha(\boldsymbol{k})^*\oplus[-H_\alpha(\boldsymbol{k})^*]\oplus[-H_\alpha(\boldsymbol{k})]$	$\hat{g}=D^\alpha_g\oplus D^{T\alpha}_g\oplus D^{C\alpha}_g\oplus D^{TC\alpha}_g$

1.4 $n=1$のCornfeld-Chapman

$p_g=s_g\in\{\pm1\}$なので，p_gでなくs_gを用いる．

$$\hat{g}H(k_1)\hat{g}^{-1}=c_gH(s_gk_1), \tag{56}$$

$$H(k_1)=k_1\gamma_1+m\gamma_0. \tag{57}$$

再定義：

$$\tilde{g} = \gamma_1^{\frac{1-s_g}{2}} \hat{g}, \tag{58}$$

$$\tilde{g} H(k_1) \tilde{g}^{-1} = c_g s_g H(k_1). \tag{59}$$

乗数系の変化は

$$\tilde{g}\tilde{h} = \tilde{g}\gamma_1^{\frac{1-s_h}{2}} \hat{h} = (c_g s_g \gamma_1)^{\frac{1-s_h}{2}} \gamma_1^{\frac{1-s_g}{2}} z_{g,h} \widehat{gh} = (c_g s_g)^{\frac{1-s_h}{2}} z_{g,h} \widetilde{gh} \tag{60}$$

より，

$$\tilde{z}_{g,h} = (c_g s_g)^{\frac{1-s_h}{2}} z_{g,h}. \tag{61}$$

$$\tilde{G}_0 := \mathrm{Ker}\,\phi_g \cap \mathrm{Ker}\,c_g s_g, \tag{62}$$

$$\tilde{T}\tilde{G}_0 := \mathrm{Ker}\,(1-\phi) \cap \mathrm{Ker}\,c_g s_g, \tag{63}$$

$$\tilde{C}\tilde{G}_0 := \mathrm{Ker}\,(1-\phi) \cap \mathrm{Ker}\,(-c_g s_g), \tag{64}$$

$$\tilde{\Gamma}\tilde{G}_0 := \mathrm{Ker}\,(\phi) \cap \mathrm{Ker}\,(-c_g s_g) \tag{65}$$

を導入する．

$$G = \tilde{G}_0 + \tilde{T}\tilde{G} + \tilde{C}\tilde{G}_0 + \tilde{\Gamma}\tilde{G}_0. \tag{66}$$

$\tilde{G}_0$の既約表現$\tilde{\alpha}$に対してWigner判定条件と直交関係を計算し，有効AZクラスを得る．分類は，

$$\pi_1(C_s), \quad \pi_1(R_s) \tag{67}$$

によって得られる．

以下，特に断りなく，1.2の方法で構成された対称性演算子$\tilde{g}$を用いる．表にまとめると以下．

		$\tilde{G}_0$	$\tilde{T}\tilde{G}_0$	$\tilde{C}\tilde{G}_0$	$\tilde{\Gamma}\tilde{G}_0$
A	$D_g^{\tilde{\alpha}}$	$D_g^{\tilde{\alpha}}$			
AIII	$D_g^{\tilde{\alpha}+}\sigma_y^{\frac{1-c_g s_g}{2}}$	$D_g^{\tilde{\alpha}}$			$D_g^{\tilde{\alpha}+}\sigma_y$
AI	$D_g^{\tilde{\alpha}}K^{\phi_g}$	$D_g^{\tilde{\alpha}}$	$D_g^{\tilde{\alpha}}K^{\phi_g}$		
BDI	$D_g^{\tilde{\alpha}+}\sigma_x^{\frac{1-c_g s_g}{2}}K^{\phi_g}$	$D_g^{\tilde{\alpha}}$	$D_g^{\tilde{\alpha}}K$	$D_g^{\tilde{\alpha}+}\sigma_x K$	$D_g^{\tilde{\alpha}+}\sigma_x$
D	$D_g^{\tilde{\alpha}}(\sigma_x K)^{\phi_g}$	$D_g^{\tilde{\alpha}}$		$D_g^{\tilde{\alpha}}\sigma_x K$	
DIII	$D_g^{\tilde{\alpha}+}(i\sigma_y)^{\phi_g\frac{1+c_g s_g}{2}+(1-\phi_g)\frac{1-c_g s_g}{2}}K^{\phi_g}$	$D_g^{\tilde{\alpha}}$	$D_g^{\tilde{\alpha}}i\sigma_y K$	$D_g^{\tilde{\alpha}+}K$	$D_g^{\tilde{\alpha}+}i\sigma_y$
AII	$D_g^{\tilde{\alpha}}(i\sigma_y K)^{\phi_g}$	$D_g^{\tilde{\alpha}}$	$D_g^{\tilde{\alpha}}i\sigma_y K$		
CII	$D_g^{\tilde{\alpha}+}(i\tau_y)^{\phi_g\frac{1+c_g s_g}{2}+(1-\phi_g)\frac{1-c_g s_g}{2}}(-i\tau_y\sigma_x)^{\frac{1-c_g s_g}{2}}K^{\phi_g}$	$D_g^{\tilde{\alpha}}$	$D_g^{\tilde{\alpha}}i\tau_y K$	$D_g^{\tilde{\alpha}+}(-i\tau_y\sigma_x)K$	$D_g^{\tilde{\alpha}+}\sigma_x$
C	$D_g^{\tilde{\alpha}}(i\sigma_y K)^{\phi_g}$	$D_g^{\tilde{\alpha}}$		$D_g^{\tilde{\alpha}}i\sigma_y K$	
CI	$D_g^{\tilde{\alpha}+}(i\sigma_y)^{\frac{1-c_g s_g}{2}}K^{\phi_g}$	$D_g^{\tilde{\alpha}}$	$D_g^{\tilde{\alpha}}K$	$D_g^{\tilde{\alpha}+}i\sigma_y K$	$D_g^{\tilde{\alpha}+}i\sigma_y$

1.4.1 AIII

ハミルトニアンは

$$H = k_1\sigma_x + m\sigma_z. \tag{68}$$

これから，

$$\hat{g} = \gamma_1^{\frac{1-s_g}{2}} \tilde{g} = D_g^{\tilde{\alpha}+}\sigma_x^{\frac{1-s_g}{2}}\sigma_y^{\frac{1-c_g s_g}{2}}. \tag{69}$$

準同型$\mathbb{Z} \to \mathbb{Z}$の計算には$\mathrm{tr}\,[\gamma_0 \hat{g}], g \in G_0,$ が，$\mathbb{Z} \to \mathbb{Z}_2$の計算には$\mathrm{tr}\,[\hat{g}], g \in G_0,$が用いられる．$g \in G_0$のとき$c_g = 1$に注意すると，

$$\mathrm{tr}\,[\gamma_0 \hat{g}_{\in G_0}] = \mathrm{tr}\,[\sigma_z D_g^{\tilde{\alpha}+} \sigma_x^{\frac{1-s_g}{2}} \sigma_y^{\frac{1-c_g s_g}{2}}] = \delta_{s_g,-1} \times 2i \times \chi_g^{\tilde{\alpha}+}, \tag{70}$$

$$\mathrm{tr}\,[\hat{g}_{\in G_0}] = \mathrm{tr}\,[D_g^{\tilde{\alpha}+} \sigma_x^{\frac{1-s_g}{2}} \sigma_y^{\frac{1-c_g s_g}{2}}] = \delta_{s_g,1} \times 2 \times \chi_g^{\tilde{\alpha}}. \tag{71}$$

ここで，$\chi_{g \in \tilde{G}_0}^{\tilde{\alpha}+} = \chi_g^{\tilde{\alpha}}$を用いた．

1.4.2 $\mathbf{AIII}_T$

既約表現$\tilde{\alpha}$の寄与に加えて，$\tilde{T}\tilde{\alpha}$の寄与がある．ハミルトニアンは実なので，$\tilde{T}\tilde{\alpha}$セクターのハミルトニアンは$\tilde{\alpha}$セクターと同一．

$$H_{\tilde{T}\tilde{\alpha}}(k_1) = H_{\tilde{\alpha}}(k_1)^* = k_1 \sigma_x + m\sigma_z. \tag{72}$$

$\tilde{T}\tilde{\alpha}$セクターの対称性演算子を求めよう．$\tilde{\alpha}$セクターの対称性演算子は

$$\tilde{\rho}_g^{\tilde{\alpha}+} H(k_1) [\tilde{\rho}_g^{\tilde{\alpha}+}]^{-1} = c_g s_g H(k_1), \quad \tilde{\rho}_g^{\tilde{\alpha}+} = D_g^{\tilde{\alpha}+} \sigma_y^{\frac{1-c_g s_g}{2}}, \quad g \in \tilde{G}_0 + \tilde{\Gamma}\tilde{G}_0. \tag{73}$$

一般論より，$\tilde{T}$によるマップを構成すると

$$\tilde{\rho}_g^{\tilde{T}(\tilde{\alpha}+)} = \frac{z_{g,\tilde{T}}}{z_{\tilde{T},\tilde{T}^{-1}g\tilde{T}}} [\rho_{\tilde{T}^{-1}g\tilde{T}}^{\tilde{\alpha}+}]^* = \frac{z_{g,\tilde{T}}}{z_{\tilde{T},\tilde{T}^{-1}g\tilde{T}}} [D_{\tilde{T}^{-1}g\tilde{T}}^{\tilde{\alpha}+} \sigma_y^{\frac{1-c_g s_g}{2}}]^* = D_g^{\tilde{T}(\tilde{\alpha}+)} (-\sigma_y)^{\frac{1-c_g s_g}{2}}. \tag{74}$$

ここで，

$$D_g^{\tilde{T}(\tilde{\alpha}+)} := \frac{z_{g,\tilde{T}}}{z_{\tilde{T},\tilde{T}^{-1}g\tilde{T}}} [D_{\tilde{T}^{-1}g\tilde{T}}^{\tilde{\alpha}+}]^* \tag{75}$$

は$\tilde{G}_0 + \tilde{\Gamma}\tilde{G}_0$の既約表現$\tilde{\alpha}+$を$\tilde{T}$でマップした既約表現であり，$\tilde{G}_0$の既約表現$\tilde{T}\tilde{\alpha}$を$\tilde{G}_0 + \tilde{\Gamma}\tilde{G}_0$へ拡張した既約表現$(\tilde{T}\tilde{\alpha})+$ではないことに注意する．実際，$\tilde{T}(\tilde{\alpha}+)$と$(\tilde{T}\tilde{\alpha})+$を比較することは，一般にはできない．

すると，$\tilde{T}\tilde{\alpha}$セクターにおける，$G_0 + \Gamma G_0$の対称性演算子は，

$$\rho_g^{\tilde{T}(\tilde{\alpha}+)} = \gamma_1^{\frac{1-s_g}{2}} \tilde{\rho}_g^{\tilde{T}(\tilde{\alpha}+)} = D_g^{\tilde{T}(\tilde{\alpha}+)} \sigma_x^{\frac{1-s_g}{2}} (-\sigma_y)^{\frac{1-c_g s_g}{2}}. \tag{76}$$

$g \in G_0$のとき$c_g = 1$に注意すると

$$\mathrm{tr}\,[\gamma_0 \rho_{g \in G_0}^{\tilde{T}(\tilde{\alpha}+)}] = \mathrm{tr}\,[\sigma_z D_g^{\tilde{T}(\tilde{\alpha}+)} \sigma_x^{\frac{1-s_g}{2}} (-\sigma_y)^{\frac{1-s_g}{2}}] = \delta_{s_g,-1} \times (-2i) \times \chi_g^{\tilde{T}(\tilde{\alpha}+)}, \tag{77}$$

$$\mathrm{tr}\,[\rho_{g \in G_0}^{\tilde{T}(\tilde{\alpha}+)}] = \mathrm{tr}\,[D_g^{\tilde{T}(\tilde{\alpha}+)} \sigma_x^{\frac{1-s_g}{2}} (-\sigma_y)^{\frac{1-s_g}{2}}] = \delta_{s_g,1} \times 2 \times \chi_g^{\tilde{T}\tilde{\alpha}}. \tag{78}$$

$\tilde{\alpha}$と$\tilde{T}\tilde{\alpha}$セクターの寄与を合わせると，

$$\mathrm{tr}\,[\gamma_0 \hat{g}] = \delta_{s_g,-1} \times 2i \times [\chi_g^{\tilde{\alpha}+} - \chi_g^{\tilde{T}(\tilde{\alpha}+)}], \tag{79}$$

$$\mathrm{tr}\,[\hat{g}] = \delta_{s_g,1} \times 2 \times [\chi_g^{\tilde{\alpha}} + \chi_g^{\tilde{T}\tilde{\alpha}}] \tag{80}$$

を得る．

1.4.3 CI

ハミルトニアンは

$$H = k_1\sigma_x + m\sigma_z \tag{81}$$

$$\mathrm{tr}\,[\gamma_0 \hat{g}_{\in G_0}] = \mathrm{tr}\,[\sigma_z D_g^{\tilde{\alpha}+}(\sigma_x)^{\frac{1-s_g}{2}}(i\sigma_y)^{\frac{1-c_g s_g}{2}}] = \delta_{s_g,-1} \times (-2) \times \chi_g^{\tilde{\alpha}+}, \tag{82}$$

$$\mathrm{tr}\,[\hat{g}_{\in G_0}] = \mathrm{tr}\,[D_g^{\tilde{\alpha}+}\sigma_x^{\frac{1-s_g}{2}}(i\sigma_y)^{\frac{1-c_g s_g}{2}}] = \delta_{s_g,1} \times 2 \times \chi_g^{\tilde{\alpha}}. \tag{83}$$

1.4.4 DIII

ハミルトニアンは

$$H = k_1\sigma_x\tau_y + m\sigma_z\tau_y. \tag{84}$$

$$\mathrm{tr}\,[\gamma_0 \hat{g}_{\in G_0}] = \mathrm{tr}\,[\sigma_z\tau_y D_g^{\tilde{\alpha}+}(\sigma_x\tau_y)^{\frac{1-s_g}{2}}(i\sigma_y)^{\frac{1-c_g s_g}{2}}] = \delta_{s_g,-1} \times (-4) \times \chi_g^{\tilde{\alpha}+}, \tag{85}$$

$$\mathrm{tr}\,[\hat{g}_{\in G_0}] = \mathrm{tr}\,[D_g^{\tilde{\alpha}+}(\sigma_x\tau_y)^{\frac{1-s_g}{2}}(i\sigma_y)^{\frac{1-c_g s_g}{2}}] = \delta_{s_g,1} \times 4 \times \chi_g^{\tilde{\alpha}}. \tag{86}$$

1.4.5 AI

ハミルトニアンは

$$H = k_1\sigma_x + m\sigma_z \tag{87}$$

$$\mathrm{tr}\,[\hat{g}_{\in G_0}] = \mathrm{tr}\,[D_g^{\tilde{\alpha}}\sigma_x^{\frac{1-s_g}{2}}] = \delta_{s_g,1} \times 2 \times \chi_g^{\tilde{\alpha}}. \tag{88}$$

1.4.6 AI$_C$

$\tilde{C}\tilde{\alpha}$セクターのハミルトニアンは

$$H_{\tilde{C}\tilde{\alpha}}(k_1) = -H_{\tilde{\alpha}}(k_1)^* = -k_1\sigma_x - m\sigma_z. \tag{89}$$

$\tilde{\alpha}$セクターの対称性演算子$\tilde{\rho}_g^{\tilde{\alpha}} = D_g^{\tilde{\alpha}}, g \in \tilde{G}_0$に対して，$\tilde{C}\tilde{\alpha}$セクターの対称性演算子は

$$\tilde{\rho}_g^{\tilde{C}\tilde{\alpha}} = D_g^{\tilde{C}\tilde{\alpha}}, \quad g \in \tilde{G}_0. \tag{90}$$

したがって，

$$\mathrm{tr}\,[\gamma_1^{\frac{1-s_g}{2}}\tilde{\rho}_{g\in G_0}^{\tilde{C}\tilde{\alpha}}] = \mathrm{tr}\,[(-\sigma_x)^{\frac{1-s_g}{2}} D_g^{\tilde{C}\tilde{\alpha}}] = \delta_{s_g,1} \times 2 \times \chi_g^{\tilde{C}\tilde{\alpha}}. \tag{91}$$

$\tilde{\alpha}, \tilde{C}\tilde{\alpha}$セクターの両寄与を合わせると，

$$\mathrm{tr}\,[\hat{g}_{\in G_0}] = \delta_{s_g,1} \times 2 \times [\chi_g^{\tilde{\alpha}} + \chi_g^{\tilde{C}\tilde{\alpha}}]. \tag{92}$$

1.4.7 BDI

ハミルトニアンは

$$H = k_1\sigma_y\tau_y + m\sigma_z \tag{93}$$

$$\mathrm{tr}\,[\hat{g}_{\in G_0}] = \mathrm{tr}\,[D_g^{\tilde{\alpha}+}(\sigma_y\tau_y)^{\frac{1-s_g}{2}}\sigma_x^{\frac{1-c_g s_g}{2}}] = \delta_{s_g,1} \times 4 \times \chi_g^{\tilde{\alpha}}. \tag{94}$$

1.5 $n=2$のCornfeld-Chapman

$$\hat{g}H(\boldsymbol{k})\hat{g}^{-1} = c_g H(p_g \boldsymbol{k}), \tag{95}$$
$$H(\boldsymbol{k}) = k_1\gamma_1 + k_2\gamma_2 + m\gamma_0. \tag{96}$$

$$p_g = r_{\theta_g} m_1^{\frac{1-s_g}{2}}, \quad \theta_g \in (-\pi, \pi] \tag{97}$$

と$SO(2)$部分と鏡映部分に分ける．ここでr_θはθ回転，m_1はk_1方向の鏡映$m\boldsymbol{k} = (-k_1, k_2)$.

再定義：

$$\tilde{g} = \gamma_1^{\frac{1-s_g}{2}} e^{\frac{\theta_g}{2}\gamma_1\gamma_2}\hat{g}, \tag{98}$$
$$\tilde{g}H(\boldsymbol{k})\tilde{g}^{-1} = c_g s_g H(\boldsymbol{k}). \tag{99}$$

乗数系の変化は（計算略）

$$\tilde{g}\tilde{h} = z_{g,h}(c_g s_g)^{\frac{1-s_h}{2}} z'_{g,h}\widetilde{gh}. \tag{100}$$

ここで，$z'_{g,h} \in \{\pm 1\}$を，

$$\gamma_1^{\frac{1-s_h}{2}} e^{\frac{\theta_h}{2}\gamma_1\gamma_2}\gamma_1^{\frac{1-s_g}{2}} e^{\frac{\theta_g}{2}\gamma_1\gamma_2} = z'_{g,h}\gamma_1^{\frac{1-s_{gh}}{2}} e^{\frac{\theta_{gh}}{2}\gamma_1\gamma_2} \tag{101}$$

で定義した． $z'_{g,h}$は，$\gamma_1\gamma_2 \mapsto i\sigma_z$と置くことで計算実行される.

1.5.1 A

$$H = k_1\sigma_x + k_2\sigma_y + m\sigma_z. \tag{102}$$

$$e^{-\frac{\theta_g}{2}\gamma_1\gamma_2}\gamma_1^{\frac{1-s_g}{2}} = e^{-\frac{\theta_g}{2}i\sigma_z}\sigma_x^{\frac{1-s_g}{2}}. \tag{103}$$

$$\mathrm{tr}\,[\gamma_0\hat{g}] = \mathrm{tr}\,[\sigma_z e^{-\frac{\theta_g}{2}i\sigma_z}\sigma_x^{\frac{1-s_g}{2}} D_g^{\tilde{\alpha}}] = \delta_{s_g,1} \times (-2i\sin\frac{\theta_g}{2}) \times \chi_g^{\tilde{\alpha}}, \tag{104}$$
$$\mathrm{tr}\,[\hat{g}] = \mathrm{tr}\,[e^{-\frac{\theta_g}{2}i\sigma_z}\sigma_x^{\frac{1-s_g}{2}} D_g^{\tilde{\alpha}}] = \delta_{s_g,1} \times 2\cos\frac{\theta_g}{2} \times \chi_g^{\tilde{\alpha}}. \tag{105}$$

1.5.2 C

$$H = k_1\sigma_x + k_2\sigma_y + m\sigma_z. \tag{106}$$

Aと同一.

1.5.3 D

$$H = k_1\sigma_x\tau_y + k_2\sigma_y\tau_y + m\sigma_z. \tag{107}$$

$$e^{-\frac{\theta_g}{2}\gamma_1\gamma_2}\gamma_1^{\frac{1-s_g}{2}} = e^{-\frac{\theta_g}{2}i\sigma_z}(\sigma_x\tau_y)^{\frac{1-s_g}{2}}. \tag{108}$$

$$\mathrm{tr}\,[\gamma_0\hat{g}] = \mathrm{tr}\,[\sigma_z e^{-\frac{\theta_g}{2}i\sigma_z}(\sigma_x\tau_y)^{\frac{1-s_g}{2}}D_g^{\tilde{\alpha}}] = \delta_{s_g,1}\times(-4i\sin\frac{\theta_g}{2})\times\chi_g^{\tilde{\alpha}}, \tag{109}$$

$$\mathrm{tr}\,[\hat{g}] = \mathrm{tr}\,[e^{-\frac{\theta_g}{2}i\sigma_z}(\sigma_x\tau_y)^{\frac{1-s_g}{2}}D_g^{\tilde{\alpha}}] = \delta_{s_g,1}\times 4\cos\frac{\theta_g}{2}\times\chi_g^{\tilde{\alpha}}. \tag{110}$$

1.5.4 AI

$$H = k_1\sigma_x + k_2\sigma_y\tau_y + m\sigma_z \tag{111}$$

$$e^{-\frac{\theta_g}{2}\gamma_1\gamma_2}\gamma_1^{\frac{1-s_g}{2}} = e^{-\frac{\theta_g}{2}i\sigma_z\tau_y}\sigma_x^{\frac{1-s_g}{2}}. \tag{112}$$

$$\mathrm{tr}\,[\hat{g}] = \mathrm{tr}\,[e^{-\frac{\theta_g}{2}i\sigma_z\tau_y}\sigma_x^{\frac{1-s_g}{2}}D_g^{\tilde{\alpha}}] = \delta_{s_g,1}\times 4\cos\frac{\theta_g}{2}\times\chi_g^{\tilde{\alpha}}. \tag{113}$$

1.5.5 CI

$$H = k_1\sigma_x\tau_z + k_2\sigma_x\tau_x + m\sigma_z. \tag{114}$$

$$e^{-\frac{\theta_g}{2}\gamma_1\gamma_2}\gamma_1^{\frac{1-s_g}{2}} = e^{-\frac{\theta_g}{2}i\tau_y}(\sigma_x\tau_z)^{\frac{1-s_g}{2}}. \tag{115}$$

$$\mathrm{tr}\,[\hat{g}] = \mathrm{tr}\,[e^{-\frac{\theta_g}{2}i\tau_y}(\sigma_x\tau_z)^{\frac{1-s_g}{2}}D_g^{\tilde{\alpha}}(i\sigma_y)^{\frac{1-c_gs_g}{2}}] = \delta_{s_g,1}\times 4\cos\frac{\theta_g}{2}\times\chi_g^{\tilde{\alpha}}. \tag{116}$$

1.6 $n=3$のCornfeld-Chapman

$$\hat{g}H(\boldsymbol{k})\hat{g}^{-1} = c_gH(p_g\boldsymbol{k}), \tag{117}$$
$$H(\boldsymbol{k}) = k_1\gamma_1 + k_2\gamma_2 + k_3\gamma_3 + m\gamma_0. \tag{118}$$

$$p_g = r(\hat{n}_g,\theta_g)I^{\frac{1-s_g}{2}}, \quad \theta_g\in(-\pi,\pi] \tag{119}$$

と$SO(3)$部分と鏡映部分に分ける．ここで$r(\hat{n},\theta)$は$\hat{n}$軸周りθ回転，Iは反転$I\boldsymbol{k}=-\boldsymbol{k}$.

再定義：

$$\tilde{g} = (\gamma_1\gamma_2\gamma_3)^{\frac{1-s_g}{2}}q(\hat{n}_g,\theta_g)\hat{g}, \tag{120}$$
$$q(\hat{n},\theta) := e^{\frac{\theta}{2}(n_1\gamma_2\gamma_3+n_2\gamma_3\gamma_1+n_3\gamma_1\gamma_2)}, \tag{121}$$
$$\tilde{g}H(\boldsymbol{k})\tilde{g}^{-1} = c_gs_gH(\boldsymbol{k}). \tag{122}$$

乗数系の変化は（計算略）

$$\tilde{g}\tilde{h} = z_{g,h}(c_gs_g)^{\frac{1-s_h}{2}}z'_{g,h}\widetilde{gh}, \tag{123}$$

z'は

$$(\gamma_1\gamma_2\gamma_3)^{\frac{1-s_h}{2}}q(\hat{n}_h,\theta_h)(\gamma_1\gamma_2\gamma_3)^{\frac{1-s_g}{2}}q(\hat{n}_g,\theta_g) = z'_{g,h}(\gamma_1\gamma_2\gamma_3)^{\frac{1-s_{gh}}{2}}q(\hat{n}_{gh},\theta_{gh}) \tag{124}$$

で定義した． $z'_{g,h}$は，$(\gamma_2\gamma_3,\gamma_3\gamma_1,\gamma_1\gamma_2)=i\boldsymbol{\sigma}$と置くことで計算実行される．

1.6.1 AIII

$$H = \boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{\tau} \sigma_x + m\sigma_z. \tag{125}$$

$$q(\hat{n}_g, \theta_g)^\dagger (\gamma_3\gamma_2\gamma_1)^{\frac{1-s_g}{2}} = e^{-\frac{i\theta_g}{2}\hat{n}_g\cdot\boldsymbol{\tau}} (-i\sigma_x)^{\frac{1-s_g}{2}} \tag{126}$$

$$\mathrm{tr}\,[\gamma_0 \hat{g}_{\in G_0}] = \mathrm{tr}\,[\sigma_z e^{-\frac{i\theta_g}{2}\hat{n}_g\cdot\boldsymbol{\tau}} (-i\sigma_x)^{\frac{1-s_g}{2}} D_g^{\tilde{\alpha}+} \sigma_y^{\frac{1-c_g s_g}{2}}] = \delta_{s_g,-1} \times 4\cos\frac{\theta_g}{2} \times \chi_g^{\tilde{\alpha}+}, \tag{127}$$

$$\mathrm{tr}\,[\hat{g}_{\in G_0}] = \mathrm{tr}\,[e^{-\frac{i\theta_g}{2}\hat{n}_g\cdot\boldsymbol{\tau}} (-i\sigma_x)^{\frac{1-s_g}{2}} D_g^{\tilde{\alpha}+} \sigma_y^{\frac{1-c_g s_g}{2}}] = \delta_{s_g,1} \times 4\cos\frac{\theta_g}{2} \times \chi_g^{\tilde{\alpha}}. \tag{128}$$

1.6.2 CII

$$H = \boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{\tau} \sigma_y + m\sigma_z. \tag{129}$$

$$q(\hat{n}_g, \theta_g)^\dagger (\gamma_3\gamma_2\gamma_1)^{\frac{1-s_g}{2}} = e^{-\frac{i\theta_g}{2}\hat{n}_g\cdot\boldsymbol{\tau}} (-i\sigma_y)^{\frac{1-s_g}{2}} \tag{130}$$

$$\mathrm{tr}\,[\gamma_0 \hat{g}_{\in G_0}] = \mathrm{tr}\,[\sigma_z e^{-\frac{i\theta_g}{2}\hat{n}_g\cdot\boldsymbol{\tau}} (-i\sigma_y)^{\frac{1-s_g}{2}} D_g^{\tilde{\alpha}+} \sigma_x^{\frac{1-c_g s_g}{2}}] = \delta_{s_g,-1} \times (-4\cos\frac{\theta_g}{2}) \times \chi_g^{\tilde{\alpha}+}, \tag{131}$$

$$\mathrm{tr}\,[\hat{g}_{\in G_0}] = \mathrm{tr}\,[e^{-\frac{i\theta_g}{2}\hat{n}_g\cdot\boldsymbol{\tau}} (-i\sigma_y)^{\frac{1-s_g}{2}} D_g^{\tilde{\alpha}+} \sigma_x^{\frac{1-c_g s_g}{2}}] = \delta_{s_g,1} \times 4\cos\frac{\theta_g}{2} \times \chi_g^{\tilde{\alpha}}. \tag{132}$$

1.6.3 BDI

$$H = \boldsymbol{k} \cdot (\tau_x\mu_y, \tau_y, \tau_z\mu_y)\sigma_y + m\sigma_z. \tag{133}$$

$$q(\hat{n}_g, \theta_g)^\dagger (\gamma_3\gamma_2\gamma_1)^{\frac{1-s_g}{2}} = e^{-\frac{i\theta_g}{2}\hat{n}_g\cdot(\tau_x\mu_y,\tau_y,\tau_z\mu_y)^T} (-i\sigma_y)^{\frac{1-s_g}{2}} \tag{134}$$

$$\mathrm{tr}\,[\gamma_0 \hat{g}_{\in G_0}] = \mathrm{tr}\,[\sigma_z e^{-\frac{i\theta_g}{2}\hat{n}_g\cdot(\tau_x\mu_y,\tau_y,\tau_z\mu_y)^T} (-i\sigma_y)^{\frac{1-s_g}{2}} D_g^{\tilde{\alpha}+} \sigma_x^{\frac{1-c_g s_g}{2}}] = \delta_{s_g,-1} \times (-8\cos\frac{\theta_g}{2}) \times \chi_g^{\tilde{\alpha}+}, \tag{135}$$

$$\mathrm{tr}\,[\hat{g}_{\in G_0}] = \mathrm{tr}\,[e^{-\frac{i\theta_g}{2}\hat{n}_g\cdot(\tau_x\mu_y,\tau_y,\tau_z\mu_y)^T} (-i\sigma_y)^{\frac{1-s_g}{2}} D_g^{\tilde{\alpha}+} \sigma_x^{\frac{1-c_g s_g}{2}}] = \delta_{s_g,1} \times 8\cos\frac{\theta_g}{2} \times \chi_g^{\tilde{\alpha}}. \tag{136}$$

1.6.4 C

$$H = \boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{\sigma} \tau_x + m\tau_y. \tag{137}$$

$$q(\hat{n}_g, \theta_g)^\dagger (\gamma_3\gamma_2\gamma_1)^{\frac{1-s_g}{2}} = e^{-\frac{i\theta_g}{2}\hat{n}_g\cdot\boldsymbol{\sigma}} (-i\tau_x)^{\frac{1-s_g}{2}} \tag{138}$$

$$\mathrm{tr}\,[\hat{g}_{\in G_0}] = \mathrm{tr}\,[e^{-\frac{i\theta_g}{2}\hat{n}_g\cdot\boldsymbol{\sigma}} (-i\tau_x)^{\frac{1-s_g}{2}} D_g^{\tilde{\alpha}+}] = \delta_{s_g,1} \times 4\cos\frac{\theta_g}{2} \times \chi_g^{\tilde{\alpha}}. \tag{139}$$

1.6.5 CI

$$H = \boldsymbol{k} \cdot (\tau_x, \tau_y\mu_y, \tau_z)\sigma_x + m\sigma_z. \tag{140}$$

$$q(\hat{n}_g, \theta_g)^\dagger (\gamma_3\gamma_2\gamma_1)^{\frac{1-s_g}{2}} = e^{-\frac{i\theta_g}{2}\hat{n}_g\cdot(\tau_x\mu_y,\tau_y,\tau_z\mu_y)^T}(-i\sigma_x)^{\frac{1-s_g}{2}} \tag{141}$$

$$\mathrm{tr}\,[\hat{g}_{\in G_0}] = \mathrm{tr}\,[e^{-\frac{i\theta_g}{2}\hat{n}_g\cdot(\tau_x\mu_y,\tau_y,\tau_z\mu_y)^T}(-i\sigma_x)^{\frac{1-s_g}{2}} D_g^{\tilde{\alpha}+}(i\sigma_y)^{\frac{1-c_g s_g}{2}}] = \delta_{s_g,1} \times 8\cos\frac{\theta_g}{2} \times \chi_g^{\tilde{\alpha}}. \tag{142}$$

1.7 まとめ

$n = 1.$

AZ	$\mathrm{tr}\,[\gamma_0\hat{g}]$	$\mathrm{tr}\,[\hat{g}]$
AIII	$\delta_{s_g,-1} \times 2i \times \chi_g^{\tilde{\alpha}+}$	$\delta_{s_g,1} \times 2 \times \chi_g^{\tilde{\alpha}}$
AIII_T	$\delta_{s_g,-1} \times 2i \times [\chi_g^{\tilde{\alpha}+} - \chi_g^{\tilde{T}(\tilde{\alpha}+)}]$	$\delta_{s_g,1} \times 2 \times [\chi_g^{\tilde{\alpha}} + \chi_g^{\tilde{T}\tilde{\alpha}}]$
CI	$\delta_{s_g,-1} \times (-2) \times \chi_g^{\tilde{\alpha}+}$	$\delta_{s_g,1} \times 2 \times \chi_g^{\tilde{\alpha}}$
DIII	$\delta_{s_g,-1} \times (-4) \times \chi_g^{\tilde{\alpha}+}$	$\delta_{s_g,1} \times 4 \times \chi_g^{\tilde{\alpha}}$
AI		$\delta_{s_g,1} \times 2 \times \chi_g^{\tilde{\alpha}}$
AI_C		$\delta_{s_g,1} \times 2 \times [\chi_g^{\tilde{\alpha}} + \chi_g^{\tilde{C}\tilde{\alpha}}]$
BDI		$\delta_{s_g,1} \times 4 \times \chi_g^{\tilde{\alpha}}$

$n = 2.$

AZ	$\mathrm{tr}\,[\gamma_0\hat{g}]$	$\mathrm{tr}\,[\hat{g}]$
A	$\delta_{s_g,1} \times (-2i\sin\frac{\theta_g}{2}) \times \chi_g^{\tilde{\alpha}}$	$\delta_{s_g,1} \times 2\cos\frac{\theta_g}{2} \times \chi_g^{\tilde{\alpha}}$
C	$\delta_{s_g,1} \times (-2i\sin\frac{\theta_g}{2}) \times \chi_g^{\tilde{\alpha}}$	$\delta_{s_g,1} \times 2\cos\frac{\theta_g}{2} \times \chi_g^{\tilde{\alpha}}$
D	$\delta_{s_g,1} \times (-4i\sin\frac{\theta_g}{2}) \times \chi_g^{\tilde{\alpha}}$	$\delta_{s_g,1} \times 4\cos\frac{\theta_g}{2} \times \chi_g^{\tilde{\alpha}}$
AI		$\delta_{s_g,1} \times 4\cos\frac{\theta_g}{2} \times \chi_g^{\tilde{\alpha}}$
CI		$\delta_{s_g,1} \times 4\cos\frac{\theta_g}{2} \times \chi_g^{\tilde{\alpha}}$

$n = 3.$

AZ	$\mathrm{tr}\,[\gamma_0\hat{g}]$	$\mathrm{tr}\,[\hat{g}]$
AIII	$\delta_{s_g,-1} \times 4\cos\frac{\theta_g}{2} \times \chi_g^{\tilde{\alpha}+}$	$\delta_{s_g,1} \times 4\cos\frac{\theta_g}{2} \times \chi_g^{\tilde{\alpha}}$
CII	$\delta_{s_g,-1} \times (-4\cos\frac{\theta_g}{2}) \times \chi_g^{\tilde{\alpha}+}$	$\delta_{s_g,1} \times 4\cos\frac{\theta_g}{2} \times \chi_g^{\tilde{\alpha}}$
BDI	$\delta_{s_g,-1} \times (-8\cos\frac{\theta_g}{2}) \times \chi_g^{\tilde{\alpha}+}$	$\delta_{s_g,1} \times 8\cos\frac{\theta_g}{2} \times \chi_g^{\tilde{\alpha}}$
C		$\delta_{s_g,1} \times 4\cos\frac{\theta_g}{2} \times \chi_g^{\tilde{\alpha}}$
CI		$\delta_{s_g,1} \times 8\cos\frac{\theta_g}{2} \times \chi_g^{\tilde{\alpha}}$

このように，結果は$\theta_g \in (-\pi, \pi]$と既約指標$\chi^{\tilde{\alpha}}_{g\in\tilde{G}_0}$の$\tilde{G}_0 + \tilde{\Gamma}\tilde{G}_0$の拡大$\chi^{\tilde{\alpha}+}_{g\in\tilde{G}_0+\tilde{\Gamma}\tilde{G}_0}$にのみ依存する．対称性演算子の構成において，クラスDIII,CIについては$\tilde{\Gamma}\tilde{G}_0$の乗数系を$\tilde{z}'_{g,h} = -z_{g,h}, g, h \in \tilde{\Gamma}\tilde{G}_0$と取り替えた．上記の結果を，もとの乗数系$\tilde{z}_{g,h}$に対する既約指標の拡大$\chi_g^{\tilde{\alpha}+}$の場合に書き換えることができる．また，$\mathrm{tr}\,[\hat{g}]$は，$\mathbb{Z}_2$へのマップなので，符号に意味はなく，したがって相対的に$\mathrm{tr}\,[\gamma_0\hat{g}]$の符号に意味がないことを考慮すると，結果は以下のようにまとめられる．

カイラルクラスについては，群$\tilde{G}_0$の既約指標$\chi_g^{\tilde{\alpha}}$の乗数系$\tilde{z}_{g,h}$における$\tilde{G}_0 + \tilde{\Gamma}\tilde{G}_0$への拡大のひとつを$\chi_g^{\tilde{\alpha}+}$とする．

- $n=1$.

AZ	$\mathrm{tr}\,[\gamma_0\hat{g}]$	$\mathrm{tr}\,[\hat{g}]$
AIII	$\delta_{s_g,-1}\times 2i\times\chi_g^{\tilde{\alpha}+}$	$\delta_{s_g,1}\times 2\times\chi_g^{\tilde{\alpha}}$
CI	$\delta_{s_g,-1}\times 2i\times\chi_g^{\tilde{\alpha}+}$	$\delta_{s_g,1}\times 2\times\chi_g^{\tilde{\alpha}}$
DIII	$\delta_{s_g,-1}\times 4i\times\chi_g^{\tilde{\alpha}+}$	$\delta_{s_g,1}\times 4\times\chi_g^{\tilde{\alpha}}$
AI		$\delta_{s_g,1}\times 2\times\chi_g^{\tilde{\alpha}}$
BDI		$\delta_{s_g,1}\times 4\times\chi_g^{\tilde{\alpha}}$

- $n=2$.

AZ	$\mathrm{tr}\,[\gamma_0\hat{g}]$	$\mathrm{tr}\,[\hat{g}]$
A	$\delta_{s_g,1}\times 2i\sin\frac{\theta_g}{2}\times\chi_g^{\tilde{\alpha}}$	$\delta_{s_g,1}\times 2\cos\frac{\theta_g}{2}\times\chi_g^{\tilde{\alpha}}$
C	$\delta_{s_g,1}\times 2i\sin\frac{\theta_g}{2}\times\chi_g^{\tilde{\alpha}}$	$\delta_{s_g,1}\times 2\cos\frac{\theta_g}{2}\times\chi_g^{\tilde{\alpha}}$
D	$\delta_{s_g,1}\times 4i\sin\frac{\theta_g}{2}\times\chi_g^{\tilde{\alpha}}$	$\delta_{s_g,1}\times 4\cos\frac{\theta_g}{2}\times\chi_g^{\tilde{\alpha}}$
AI		$\delta_{s_g,1}\times 4\cos\frac{\theta_g}{2}\times\chi_g^{\tilde{\alpha}}$
CI		$\delta_{s_g,1}\times 4\cos\frac{\theta_g}{2}\times\chi_g^{\tilde{\alpha}}$

- $n=3$.

AZ	$\mathrm{tr}\,[\gamma_0\hat{g}]$	$\mathrm{tr}\,[\hat{g}]$
AIII	$\delta_{s_g,-1}\times 4\cos\frac{\theta_g}{2}\times\chi_g^{\tilde{\alpha}+}$	$\delta_{s_g,1}\times 4\cos\frac{\theta_g}{2}\times\chi_g^{\tilde{\alpha}}$
CII	$\delta_{s_g,-1}\times 4\cos\frac{\theta_g}{2}\times\chi_g^{\tilde{\alpha}+}$	$\delta_{s_g,1}\times 4\cos\frac{\theta_g}{2}\times\chi_g^{\tilde{\alpha}}$
BDI	$\delta_{s_g,-1}\times 8\cos\frac{\theta_g}{2}\times\chi_g^{\tilde{\alpha}+}$	$\delta_{s_g,1}\times 8\cos\frac{\theta_g}{2}\times\chi_g^{\tilde{\alpha}}$
C		$\delta_{s_g,1}\times 4\cos\frac{\theta_g}{2}\times\chi_g^{\tilde{\alpha}}$
CI		$\delta_{s_g,1}\times 8\cos\frac{\theta_g}{2}\times\chi_g^{\tilde{\alpha}}$

2 Diracハミルトニアンのトポロジカル数

各EAZクラスにおける，Diracハミルトニアン

$$H(\boldsymbol{k})=\sum_{i=1}^{d}k_i\gamma_i+m\gamma_0,\quad \hat{g}H(\boldsymbol{k})\hat{g}^{-1}=(-1)^{c_g}H(\boldsymbol{k}),\quad g\in G \tag{143}$$

が与えられたときの各種トポロジカル数についてまとめる．群Gの分解を

$$G=G_0+TG_0+CG_0+\Gamma G_0 \tag{144}$$

とする．

2.1 d=0

EAZ			既約分解公式
A	$\mathbb{Z}$	$\#(\alpha$ irreps$)$	$\frac{1}{\lvert G_0\rvert}\sum_{g\in G_0}(\chi_g^{\alpha})^*\mathrm{tr}\,[\gamma_0\hat{g}]$
AI	$\mathbb{Z}$	$\#(\alpha$ irreps$)$	$\frac{1}{\lvert G_0\rvert}\sum_{g\in G_0}(\chi_g^{\alpha})^*\mathrm{tr}\,[\gamma_0\hat{g}]$
AII	$\mathbb{Z}$	$\#(\alpha$ irreps$)$	$\frac{1}{\lvert G_0\rvert}\sum_{g\in G_0}(\chi_g^{\alpha})^*\mathrm{tr}\,[\gamma_0\hat{g}]\times\frac{1}{2}$
D	$\mathbb{Z}_2$	$\#(\alpha$ irreps$)$ mod 2	$\frac{1}{\lvert G_0\rvert}\sum_{g\in G_0}(\chi_g^{\alpha})^*\mathrm{tr}\,[\hat{g}]$ mod 2
BDI	$\mathbb{Z}_2$	$\#(\alpha$ irreps$)$ mod 2	$\frac{1}{\lvert G_0\rvert}\sum_{g\in G_0}(\chi_g^{\alpha})^*\mathrm{tr}\,[\hat{g}]$ mod 2

2.2 d=1

$$H(\boldsymbol{k})=k_1\gamma_1+m\gamma_0,\quad \hat{g}H(\boldsymbol{k})\hat{g}^{-1}=(-1)^{c_g}H(\boldsymbol{k}),\quad g\in G. \tag{145}$$

2.2.1 巻き付き数

クラスAIII. DIII, CIについては，$\mathbb{Z}$数は1d巻き付き数で与えられるが，一般には，$\Gamma^2=1$のようなカイラル演算子が必ずしも存在するわけではない．既約表現αを$G_0+\Gamma G_0$への拡大$\alpha\pm$の数を数えれば良い． [2] 以下で与えられる．

$$w_{1d}=\frac{1}{2}\{\#(\alpha+\ \text{irreps})-\#(\alpha-\ \text{irreps})\} \tag{146}$$

ここで，$\frac{1}{2}$は巻き付き数1を与えるDiracハミルトニアンの次元より．指標について，

$$\chi^{\alpha\pm}_{g\in G_0}=\chi^{\alpha}_g,\quad \chi^{\alpha-}_{g\in\Gamma G_0}=-\chi^{\alpha+}_g \tag{147}$$

に注意する．

$g\in\Gamma G_0$に対する対称性演算子$\hat{g}$をハミルトニアンと可換な対称性

$$\rho(g):=(i\gamma_0\gamma_1)^{c_g}\hat{g},\quad \rho(g)\rho(h)=z_{g,h}\rho(gh),\quad g\in G_0+\Gamma G_0 \tag{148}$$

と再定義する．$(i\gamma_0\gamma_1)^2=1$に注意．すると，

$$\begin{aligned}\#(\alpha\pm\ \text{irreps})&=\frac{1}{|G_0+\Gamma G_0|}\sum_{g\in G_0+\Gamma G_0}(\chi^{\alpha\pm}_g)^*\mathrm{tr}\,\rho(g) &(149)\\ &=\frac{1}{2}\frac{1}{|G_0|}\left(\sum_{g\in G_0}(\chi^{\alpha}_g)^*\mathrm{tr}\,\rho(g)\pm\sum_{g\in\Gamma G_0}(\chi^{\alpha+}_g)^*\mathrm{tr}\,\rho(g)\right) &(150)\end{aligned}$$

より，

$$w_{1d}=\frac{1}{2}\frac{1}{|G_0|}\sum_{g\in\Gamma G_0}(\chi^{\alpha+}_g)^*\mathrm{tr}\,\rho(g)=\frac{1}{2}\frac{1}{|G_0|}\sum_{g\in\Gamma G_0}(\chi^{\alpha+}_g)^*\mathrm{tr}\,[i\gamma_0\gamma_1\hat{g}] \tag{151}$$

を得る．

2.2.2 $\mathbb{Z}_2$数

クラスAI, BDIは$\mathbb{Z}_2$数で既約分解する． AIの模型は2×2, BDIの模型は4×4であることを踏まえると，$\mathbb{Z}_2$数は

$$\nu=\#(\alpha\ \text{irreps})\times\left\{\begin{array}{ll}\frac{1}{2} & (\text{AI})\\ \frac{1}{4} & (\text{BDI})\end{array}\right. \tag{152}$$

で与えられる．ここで，

$$\#(\alpha\ \text{irreps})=\frac{1}{|G_0|}\sum_{g\in G_0}(\chi^{\alpha}_g)^*\mathrm{tr}\,[\hat{g}]. \tag{153}$$

まとめ．

EAZ		既約分解公式
AIII	$\mathbb{Z}$	$\frac{1}{2}\frac{1}{\|G_0\|}\sum_{g\in\Gamma G_0}(\chi^{\alpha+}_g)^*\mathrm{tr}\,[\gamma_0\gamma_1\hat{g}]$
DIII	$\mathbb{Z}$	$\frac{1}{4}\frac{1}{\|G_0\|}\sum_{g\in\Gamma G_0}(\chi^{\alpha+}_g)^*\mathrm{tr}\,[\gamma_0\gamma_1\hat{g}]$
CI	$\mathbb{Z}$	$\frac{1}{2}\frac{1}{\|G_0\|}\sum_{g\in\Gamma G_0}(\chi^{\alpha+}_g)^*\mathrm{tr}\,[\gamma_0\gamma_1\hat{g}]$
AI	$\mathbb{Z}_2$	$\frac{1}{2}\frac{1}{\|G_0\|}\sum_{g\in G_0}(\chi^{\alpha}_g)^*\mathrm{tr}\,[\hat{g}]$ mod 2
BDI	$\mathbb{Z}_2$	$\frac{1}{4}\frac{1}{\|G_0\|}\sum_{g\in G_0}(\chi^{\alpha}_g)^*\mathrm{tr}\,[\hat{g}]$ mod 2

2.3 d=2

$$H(\boldsymbol{k}) = k_1\gamma_1 + k_2\gamma_2 + m\gamma_0, \quad \hat{g}H(\boldsymbol{k})\hat{g}^{-1} = (-1)^{c_g}H(\boldsymbol{k}), \quad g \in G. \tag{154}$$

2.3.1 Chern数

一般論より，既約表現αへの射影は

$$P_\alpha = \frac{\dim(\alpha)}{|G_0|}\sum_{g\in G_0}(\chi_g^\alpha)^*\hat{g}. \tag{155}$$

既約表現αにおけるChern数は以下で与えられる．

$$ch = \frac{1}{\dim(\alpha)}\frac{1}{2i}\mathrm{tr}\,[\gamma_0\gamma_1\gamma_2 P_\alpha] = \frac{1}{2i}\frac{1}{|G_0|}\sum_{g\in G_0}(\chi_g^\alpha)^*\mathrm{tr}\,[\gamma_0\gamma_1\gamma_2\hat{g}]. \tag{156}$$

2.3.2 $\mathbb{Z}_2$数

クラスDIII, AIIは$\mathbb{Z}_2$数で既約分解する．模型は4×4であることより，$\mathbb{Z}_2$数は

$$\nu = \frac{1}{4}\#(\alpha \text{ irreps}) \tag{157}$$

で与えられる．

まとめ．

EAZ		既約分解公式
A	$\mathbb{Z}$	$\frac{1}{2i}\frac{1}{\lvert G_0\rvert}\sum_{g\in G_0}(\chi_g^\alpha)^*\mathrm{tr}\,[\gamma_0\gamma_1\gamma_2\hat{g}]$
D	$\mathbb{Z}$	$\frac{1}{2i}\frac{1}{\lvert G_0\rvert}\sum_{g\in G_0}(\chi_g^\alpha)^*\mathrm{tr}\,[\gamma_0\gamma_1\gamma_2\hat{g}]$
C	$\mathbb{Z}$	$\frac{1}{4i}\frac{1}{\lvert G_0\rvert}\sum_{g\in G_0}(\chi_g^\alpha)^*\mathrm{tr}\,[\gamma_0\gamma_1\gamma_2\hat{g}]$
DIII	$\mathbb{Z}_2$	$\frac{1}{4}\frac{1}{\lvert G_0\rvert}\sum_{g\in G_0}(\chi_g^\alpha)^*\mathrm{tr}\,[\hat{g}] \bmod 2$
AII	$\mathbb{Z}_2$	$\frac{1}{4}\frac{1}{\lvert G_0\rvert}\sum_{g\in G_0}(\chi_g^\alpha)^*\mathrm{tr}\,[\hat{g}] \bmod 2$

2.4 d=3

$$H(\boldsymbol{k}) = k_1\gamma_1 + k_2\gamma_2 + k_3\gamma_3 + m\gamma_0, \quad \hat{g}H(\boldsymbol{k})\hat{g}^{-1} = (-1)^{c_g}H(\boldsymbol{k}), \quad g \in G. \tag{158}$$

2.4.1 巻き付き数

クラスAIII. BDI, CIIについては，$\mathbb{Z}$数は3d巻き付き数で与えられる．公式は1dの場合と同様にして，

$$w_{3d} = \frac{1}{4}\{\#(\alpha+ \text{ irreps}) - \#(\alpha- \text{ irreps})\} \tag{159}$$

で与えられる． $g\in\Gamma G_0$に対する対称性演算子$\hat{g}$をハミルトニアンと可換な対称性

$$\rho(g) := (\gamma_0\gamma_1\gamma_2\gamma_3)^{c_g}\hat{g}, \quad \rho(g)\rho(h) = z_{g,h}\rho(gh), \quad g \in G_0 + \Gamma G_0 \tag{160}$$

と再定義する．$(\gamma_0\gamma_1\gamma_2\gamma_3)^2=1$に注意.

$$w_{3d}=\frac{1}{4}\frac{1}{|G_0|}\sum_{g\in\Gamma G_0}(\chi_g^{\alpha+})^*\mathrm{tr}\,\rho(g)=\frac{1}{4}\frac{1}{|G_0|}\sum_{g\in\Gamma G_0}(\chi_g^{\alpha+})^*\mathrm{tr}\,[\gamma_0\gamma_1\gamma_2\gamma_3\hat{g}] \tag{161}$$

を得る.

2.4.2 $\mathbb{Z}_2$数

Cの模型は4×4：

$$H=\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{\sigma}\tau_x+m\tau_y,\quad C=\sigma_yK. \tag{162}$$

CIの模型は4×4：

$$H=\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{\sigma}\tau_x+m\tau_y,\quad C=\sigma_yK,\quad T=\sigma_y\tau_zK. \tag{163}$$

よって$\mathbb{Z}_2$数は

$$\nu=\frac{1}{4}\#(\alpha\ \mathrm{irreps}) \tag{164}$$

で与えられる．ここで，

$$\#(\alpha\ \mathrm{irreps})=\frac{1}{|G_0|}\sum_{g\in G_0}(\chi_g^{\alpha})^*\mathrm{tr}\,[\hat{g}]. \tag{165}$$

まとめ.

EAZ		既約分解公式
AIII	$\mathbb{Z}$	$\frac{1}{4}\frac{1}{|G_0|}\sum_{g\in\Gamma G_0}(\chi_g^{\alpha+})^*\mathrm{tr}\,[\gamma_0\gamma_1\gamma_2\gamma_3\hat{g}]$
BDI	$\mathbb{Z}$	$\frac{1}{8}\frac{1}{|G_0|}\sum_{g\in\Gamma G_0}(\chi_g^{\alpha+})^*\mathrm{tr}\,[\gamma_0\gamma_1\gamma_2\gamma_3\hat{g}]$
CII	$\mathbb{Z}$	$\frac{1}{4}\frac{1}{|G_0|}\sum_{g\in\Gamma G_0}(\chi_g^{\alpha+})^*\mathrm{tr}\,[\gamma_0\gamma_1\gamma_2\gamma_3\hat{g}]$
C	$\mathbb{Z}_2$	$\frac{1}{4}\frac{1}{|G_0|}\sum_{g\in G_0}(\chi_g^{\alpha})^*\mathrm{tr}\,[\hat{g}]\ \mathrm{mod}\ 2$
CI	$\mathbb{Z}_2$	$\frac{1}{4}\frac{1}{|G_0|}\sum_{g\in G_0}(\chi_g^{\alpha})^*\mathrm{tr}\,[\hat{g}]\ \mathrm{mod}\ 2$

2.5 一般のd次元

一般の偶数次元$d=2n$のとき，第nChern数ch_nは，

$$ch_n=\frac{1}{(2i)^n}\times\sum_{g\in G_0}(\chi_g^{\alpha})^*\mathrm{tr}\,[\gamma_0\gamma_1\cdots\gamma_{2n}\hat{g}]. \tag{166}$$

で与えられる．[1]

[1]

$$\begin{aligned}
&d=2:\quad \mathrm{tr}\,[\sigma_x\sigma_y\sigma_z]=2i,\\
&d=4\quad \mathrm{tr}\,[\sigma_x\tau_x\sigma_y\tau_x\sigma_z\tau_x\tau_y\tau_z]=(2i)^2,\\
&\vdots\\
&d=2n\quad \mathrm{tr}\,[\cdots]=(2i)^n.
\end{aligned}$$

一般の奇数次元$d=2n-1$において，Diracハミルトニアン

$$H(\boldsymbol{k})=\sum_{i=1}^{2n-1}k_i\gamma_i+m\gamma_0,\quad \hat{g}H(\boldsymbol{k})\hat{g}^{-1}=(-1)^{c_g}H(\boldsymbol{k}),\quad g\in G \tag{167}$$

において，$G_0+\Gamma G_0$の表現を

$$\rho(g):=(-i^n\gamma_0\cdots\gamma_{2n-1})\hat{g},\quad \rho(g)\rho(h)=z_{g,h}\rho(gh),\quad g,h\in G_0+\Gamma G_0 \tag{168}$$

によって定義すると，[2]$(2n-1)$次元巻き付き数はChern数と同様の表式

$$w_{2n-1}=\frac{1}{(2i)^n}\frac{1}{|G_0|}\sum_{g\in\Gamma G_0}(\chi_g^{\alpha+})^*\mathrm{tr}\,[\gamma_0\gamma_1\cdots\gamma_{2n-1}\hat{g}] \tag{169}$$

で与えられる．

$\mathbb{Z}_2$数はα既約表現の数を何らかの偶数で割ることにより与えられるが，α既約表現の数は，一般論から

$$\frac{1}{|G_0|}\sum_{g\in G_0}(\chi_g^{\alpha})^*\mathrm{tr}\,[\hat{g}] \tag{170}$$

で与えられる．

3 実関数表現(undercnst)

本節では，波数空間における磁気点群の作用

$$\boldsymbol{k}\mapsto p_g\boldsymbol{k},\quad g\in G \tag{171}$$

の実関数表現を与える．ここで，p_gは反ユニタリな対称性における-1を含むことに注意する．

3.1 1次元表現

$$f(\boldsymbol{k})=\sum_{n,m,l,n+m+l\leq d}a_{nml}k_x^n k_y^m k_z^l \tag{172}$$

を仮定して，1次元表現$\eta_g\in\{\pm1\}$に対して方程式

$$f(p_g\boldsymbol{k})=\eta_g f(\boldsymbol{k}) \tag{173}$$

をランダムに点$\boldsymbol{k}$を何点か選んで1次方程式を解く．

3.2 2次元表現

xy面内の回転行列は，高々16個のみ．その16個の回転行列に対して，tr を計算する． M_gを表現行列，χ_gを，２次元表現の指標とする．

[2] $(\gamma_0\cdots\gamma_{2n-1})^2=(-1)^n$に注意する．

- $\chi_g=2$であれば，$M_g=\mathbf{1}$．　$H=\{g\in G|\chi_g=2\}$はGの正規部分群．コセット分解G/Hに対する表現行列を求めれば十分．
- $\chi_g=1,0,-1,-2$に対して，可能な15個の回転行列の集合を作り，Tuplesで全ての可能な組み合わせを作り，$M_gM_h=M_{gh}, g,h\in G/H$を満たすものを取る．

得られた表現行列M_gに対して，方程式

$$\boldsymbol{f}(p_g\boldsymbol{k})=M_g\boldsymbol{f}(\boldsymbol{k}),\quad g\in G \tag{174}$$

を解く．

3.3　3次元表現

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{k})=(k_x,k_y,k_z)^T \tag{175}$$

のみ考えれば十分．（予想）

4　EAZクラスとgrading

K群の次数と対称性についてまとめる．

$$E_1^{p,-n}=K^{p-n}(X_p,X_{p-1})=\prod K^{p-n}(D^p,\partial D^p)=\prod K^{-n}(pt) \tag{176}$$

だった．次数$-n$の対称性が知りたい．次数0の対称性を

$$\hat{g}H\hat{g}^{-1}=(-1)^{c_g}H,\quad \hat{g}\hat{h}=z_{g,h}\widehat{gh},\quad \hat{g}=u_gK^{\phi_g} \tag{177}$$

とする．次数$-n$のシフトは，以下のカイラル対称性を加えることと等価．

$$\gamma_iH\gamma_i^{-1}=-H,\quad \{\gamma_i,\gamma_j\}=2\delta_{ij},\quad \hat{g}\gamma_i=(-1)^{c_g}\gamma_i\hat{g}. \tag{178}$$

まずは$n=1$のときの変化を見る．カイラル対称性γが加わることにより，群元が２倍となる．群元そのものも$\{\gamma g\}_{g\in G}$と書こう．

$$G'=G+\gamma G. \tag{179}$$

明らかに，

$$\phi_{\gamma g}=1,\quad c_{\gamma g}=1-c_g. \tag{180}$$

対称性演算子を

$$\widehat{\gamma g}:=\gamma\hat{g} \tag{181}$$

と定義すると，

$$\hat{g}\hat{h}=z_{g,h}\widehat{gh}, \tag{182}$$
$$\hat{g}\widehat{\gamma h}=\hat{g}\gamma\hat{h}=(-1)^{c_g}z_{g,h}\widehat{\gamma gh}, \tag{183}$$
$$\widehat{\gamma g}\hat{h}=\gamma\hat{g}\hat{h}=z_{g,h}\widehat{\gamma gh}, \tag{184}$$
$$\widehat{\gamma g}\widehat{\gamma h}=\gamma\hat{g}\gamma\hat{h}=(-1)^{c_g}z_{g,h}\widehat{gh}. \tag{185}$$

これをみると，

$$\epsilon_g := \begin{cases} 0 & (g \in G) \\ 1 & (g \in \gamma G) \end{cases} \tag{186}$$

を定義すると，

$$z'_{g,h} = (-1)^{c_g \epsilon_h} z_{g,h}, \quad g, h \in G + \gamma G \tag{187}$$

と書くことができる．

次に$n=2$の場合を考える． $\gamma_1 = \sigma_x, \gamma_2 = \sigma_z, H = \sigma_y \otimes H', \hat{g} = \sigma_y^{c_g} \otimes \hat{g}'$とおくと，$\gamma_1, \gamma_2$を消去できる．このとき，$\hat{g}'$が従う乗数系が変化する．

$$\hat{g}\hat{h} = \sigma_y^{c_g} \otimes \hat{g}' \sigma_y^{c_h} \otimes \hat{h}' = (-1)^{\phi_g c_h} \sigma_y^{c_{gh}} \otimes \hat{g}'\hat{h}' \tag{188}$$

より，

$$z'_{g,h} = (-1)^{\phi_g c_h} z_{g,h}. \tag{189}$$

また，c_gも変化する．

$$\hat{g}H = \sigma_y^{c_g} \otimes \hat{g}' \sigma_y \otimes H' = (-1)^{\phi_g} \sigma_y^{1-c_g} \hat{g}' H', \tag{190}$$

$$H\hat{g} = \sigma_y \otimes H' \sigma_y^{c_g} \otimes \hat{g}' = \sigma_y^{1-c_g} \otimes H'\hat{g}' \tag{191}$$

より，

$$\hat{g}' H' \hat{g}'^{-1} = (-1)^{\phi_g + c_g} H'. \tag{192}$$

つまり

$$c'_g = \phi_g + c_g \mod 2. \tag{193}$$

まとめると以下．

	G'	ϕ'_g	c'_g	$z'_{g,h}$	γ
$n=0$	G	ϕ_g	c_g	$z_{g,h}$	
$n=1$	$G+\gamma G$	ϕ_g	$c_g+\epsilon_g$	$(-1)^{c_g\epsilon_h} z_{g,h}$	$\hat{g}\gamma = (-1)^{c_g}\gamma\hat{g}, \quad g \in G$
$n=2$	G	ϕ_g	$c_g+\phi_g$	$(-1)^{\phi_g c_h} z_{g,h}$	
$n=3$	$G+\gamma G$	ϕ_g	$c_g+\phi_g+\epsilon_g$	$(-1)^{(c_g+\phi_g)\epsilon_h+\phi_g c_h} z_{g,h}$	$\hat{g}\gamma = (-1)^{c_g+\phi_g}\gamma\hat{g}, \quad g \in G$
$n=4$	G	ϕ_g	c_g	$(-1)^{\phi_g\phi_h} z_{g,h}$	
$n=5$	$G+\gamma G$	ϕ_g	$c_g+\epsilon_g$	$(-1)^{c_g\epsilon_h+\phi_g\phi_h} z_{g,h}$	$\hat{g}\gamma = (-1)^{c_g}\gamma\hat{g}, \quad g \in G$
$n=6$	G	ϕ_g	$c_g+\phi_g$	$(-1)^{\phi_g(c_h+\phi_h)} z_{g,h}$	
$n=7$	$G+\gamma G$	ϕ_g	$c_g+\phi_g+\epsilon_g$	$(-1)^{(c_g+\phi_g)\epsilon_h+\phi_g(c_h+\phi_h)} z_{g,h}$	$\hat{g}\gamma = (-1)^{c_g+\phi_g}\gamma\hat{g}, \quad g \in G$

- $\phi'_g = \phi_g = 0$のとき，偶数のnについては，$z'_{g,h} = z_{g,h}$，奇数のnについては$z'_{g,h} = (-1)^{c_g\epsilon_h} z_{g,h}$.
- 偶数次については，TRSとPHSの役割が入れ替わる．
- G_0の既約表現は超伝導ギャップ関数の1次元表現に依存しない．一方で，$G_0 + \gamma\Gamma G_0$の既約表現は，超伝導ギャップ関数の 1 次元表現に依存する．... だと思ったが，全ての場合について計算してみると，$G_0 + \gamma\Gamma G_0$の乗数系は，normal phaseだけで決まるようだ． 証明を考える

nが奇数の場合に，カイラル対称性γを新しい対称性として追加した計算は行いたくはない．$n \neq 0$の場合に$n=0$の既約指標以外のものが現れる可能性はあるか？

4.1 常伝導相

$G = G_0 + TG_0, c_g \equiv 0$として，

	G'	ϕ'_g	c'_g	$z'_{g,h}$
$n=0$	$\{G_0, TG_0, 0, 0\}$	ϕ_g	0	$z_{g,h}$
$n=1$	$\{G_0, TG_0, \gamma TG_0, \gamma G_0\}$	ϕ_g	ϵ_g	$z_{g,h}$
$n=2$	$\{G_0, 0, TG_0, 0\}$	ϕ_g	ϕ_g	$z_{g,h}$
$n=3$	$\{G_0, \gamma TG_0, TG_0, \gamma G_0\}$	ϕ_g	$\phi_g + \epsilon_g$	$(-1)^{\phi_g \epsilon_h} z_{g,h}$
$n=4$	$\{G_0, TG_0, 0, 0\}$	ϕ_g	0	$(-1)^{\phi_g \phi_h} z_{g,h}$
$n=5$	$\{G_0, TG_0, \gamma TG_0, \gamma G_0\}$	ϕ_g	ϵ_g	$(-1)^{\phi_g \phi_h} z_{g,h}$
$n=6$	$\{G_0, 0, TG_0, 0\}$	ϕ_g	ϕ_g	$(-1)^{\phi_g \phi_h} z_{g,h}$
$n=7$	$\{G_0, \gamma TG_0, TG_0, \gamma G_0\}$	ϕ_g	$\phi_g + \epsilon_g$	$(-1)^{\phi_g \epsilon_h + \phi_g \phi_h} z_{g,h}$

対応して，半端な並進も定義する．

$$t_g, g \in G \to t_{[g]}, g \in G + \gamma G. \tag{194}$$

4.2 超伝導相

$$G = \begin{cases} \{G_0, TG_0, CG_0, \Gamma G_0\} & (n=0,4) \\ \{G_0 + \Gamma\gamma G_0, T(G_0 + \Gamma\gamma G_0), C(G_0 + \Gamma\gamma G_0), \Gamma(G_0 + \Gamma\gamma G_0)\} & (n=1,3) \\ \{G_0, CG_0, TG_0, \Gamma G_0\} & (n=2,6) \\ \{G_0 + \Gamma\gamma G_0, C(G_0 + \Gamma\gamma G_0), T(G_0 + \Gamma\gamma G_0), \Gamma(G_0 + \Gamma\gamma G_0)\} & (n=3,7) \end{cases} \tag{195}$$

奇数のn次については，ユニタリな対称性は増えるが，必要な既約表現の数は増えないはず．既約表現を増やさないように定式化できるか？

考えてみよう． $n=1$はカイラル対称性がひとつ増えた場合のトポロジカル数． Diracハミルトニアンのトポロジカル数はすでにまとめたものがある．

EAZ		既約分解公式
AIII	$\mathbb{Z}$	$\frac{1}{2}\frac{1}{\lvert G_0\rvert}\sum_{g\in\Gamma G_0}(\chi_g^{\alpha+})^* \mathrm{tr}\,[\gamma_0\gamma_1\hat{g}]$
DIII	$\mathbb{Z}$	$\frac{1}{4}\frac{1}{\lvert G_0\rvert}\sum_{g\in\Gamma G_0}(\chi_g^{\alpha+})^* \mathrm{tr}\,[\gamma_0\gamma_1\hat{g}]$
CI	$\mathbb{Z}$	$\frac{1}{2}\frac{1}{\lvert G_0\rvert}\sum_{g\in\Gamma G_0}(\chi_g^{\alpha+})^* \mathrm{tr}\,[\gamma_0\gamma_1\hat{g}]$
AI	$\mathbb{Z}_2$	$\frac{1}{2}\frac{1}{\lvert G_0\rvert}\sum_{g\in G_0}(\chi_g^{\alpha})^* \mathrm{tr}\,[\hat{g}] \bmod 2$
BDI	$\mathbb{Z}_2$	$\frac{1}{4}\frac{1}{\lvert G_0\rvert}\sum_{g\in G_0}(\chi_g^{\alpha})^* \mathrm{tr}\,[\hat{g}] \bmod 2$

5 カイラル指数について

[3]

一般に，異なる既約表現間で，カイラリティを比較する方法は，ない．例えば，”total chirality”などは，定義できない場合もある．この点についてまとめる．

[3]（動機）AHSSの第一微分$d_1^{p,-n}$において，奇数のnについては，カイラル演算子のため，群元を 2 倍に拡張する必要があるが，なんとか群元を増やさずに第一微分の計算ができないだろうか？結論は，異なるセクター間のカイラリティを比較する方法は一般には存在しないので，群元を 2 倍にすることは避けられない．

群を$G = G_0 + \Gamma G_0$とする． G_0の既約表現αに対して，$\Gamma\alpha \sim \alpha$とする．すると，一般論より，$G_0 + \Gamma G_0$の既約表現$\alpha\pm$であって，

$$\chi^{\alpha\pm}_{g\in G_0} = \chi^{\alpha}_g, \quad \chi^{\alpha-}_{g\in\Gamma G_0} = -\chi^{\alpha+}_g \tag{196}$$

を満たすものが存在する． $\alpha+$と$\alpha-$を$G_0 + \Gamma G_0$の既約表現から選ぶ標準的な方法はない． $\alpha+, \alpha-$を固定したとき，カイラル指数は

$$\#(\alpha+\ \text{irreps}) - \#(\alpha-\ \text{irreps}) = \frac{1}{|G_0+\Gamma G_0|}\sum_{g\in G_0+\Gamma G_0}(\chi^{\alpha+}_g - \chi^{\alpha-}_g)^*\mathrm{tr}\,[\hat{g}] = \frac{1}{|G_0|}\sum_{g\in\Gamma G_0}(\chi^{\alpha+}_g)^*\mathrm{tr}\,[\hat{g}] \tag{197}$$

と定義される．

G_0の別の既約表現βが存在し，$\Gamma\beta \sim \beta$とする．このとき，既約表現$\beta+$を$G_0 + \Gamma G_0$の既約表現の集合から選ぶことにより， βセクターの正のカイラリティが定まる． αセクターの正のカイラリティ$\alpha+$とは一般には無関係であることに注意する．

部分群$H \subset G$に対して， Hがカイラル対称性を有する場合を考える． $H = H_0 + \Gamma H_0$． H_0の既約表現γに対して，$\Gamma\gamma \sim \gamma$とする．すると，γセクターの正のカイラリティが，$H_0 + \Gamma H_0$の既約表現から$\gamma+$を選ぶことにより定まる．

$\alpha+, \beta+$は$G_0 + \Gamma G_0$の既約表現なので，部分群$H_0 + \Gamma H_0$の既約表現である$\gamma\pm$と内積を取ることができる．部分群Hに制限したときの$\alpha+$のカイラル指数の変化が以下で与えられる．

$$(\gamma+, \alpha+) - (\gamma-, \alpha+) = \frac{1}{|H_0|}\sum_{g\in\Gamma H_0}(\chi^{\gamma+}_g)^*\chi^{\alpha+}_g. \tag{198}$$

この変化が有限値である場合は，カイラル指数の変化を通して，$\alpha+$と$\beta+$の正のカイラリティを比較することができる．

“total chirality”が定義できない例は， $G = \mathbb{Z}_4 = \{e, \sigma^2\} + \sigma\{e, \sigma^2\}$の場合．このとき，カイラル演算子を含むような$G$の意味のある部分群が存在しない．

6　ギャップレス点の電荷として第一微分を定式化できるか？

次数$n = -1$は$n = 0$の対称性クラスにおけるギャップレス点，としての意味がある．第一微分をギャップレス点の広がりとして解釈できるが，この際に，カイラル対称性を群に追加せずに定式化できるだろうか．

AIII_TとAIII_Cの違いを検出できるかどうかに興味がある．ここで，AIII_TはTによってカイラリティが変化しない，AIII_Cはカイラリティが変化する場合，として定義したい．

$$\mathrm{AIII}_T: \quad (1,1), \tag{199}$$

$$\mathrm{AIII}_C: \quad (1,-1). \tag{200}$$

両者は，カイラリティの総和に関して明確な違いがあるように思える．しかし，考えてみると，既約表現αと$T\alpha$とで，ギャップレス点のカイラリティを比較する方法がないようにも思える．この点を真面目に考えよう．

$G = G_0 + \Gamma G_0 + T(G_0 + \Gamma G_0)$とする．既約表現$\alpha$に対して，$W^{\Gamma}_{\alpha} = 1$，つまり，$\Gamma\alpha \sim \alpha$とする．このとき，一般論より，$G_0 + \Gamma G_0$の既約表現$\alpha\pm$であって，

$$D^{\alpha\pm}_{g\in G_0} = D^{\alpha}_g, \quad D^{\alpha-}_{g\in\Gamma G_0} = -D^{\alpha+}_{g\in\Gamma G_0} \tag{201}$$

なるものが存在する．詳細を見る． $\Gamma \in \Gamma G_0$をひとつ選ぶ． $\Gamma\alpha \sim \alpha$は，あるユニタリ行列U_αが存在して，

$$D_g^{\Gamma\alpha} = \frac{z_{g,\Gamma}}{z_{\Gamma,\Gamma^{-1}g\Gamma}} D^\alpha_{\Gamma^{-1}g\Gamma} = U_\alpha^{-1} D_g^\alpha U_\alpha \tag{202}$$

を意味する． $D_\Gamma^\alpha \sim U_\alpha$だが，$U(1)$位相を条件

$$z_{\Gamma,\Gamma} D^\alpha_{\Gamma^2} = U_\alpha^2 \tag{203}$$

で決める．U_αが解のとき，$-U_\alpha$も解であり，カイラリティに対応する．相対的にしか意味を持たないことに注意する．

$$D_\Gamma^{\alpha\pm} = \pm U_\alpha \tag{204}$$

と定義し，一般の$g \in \Gamma G_0$に対しては，

$$D^{\alpha\pm}_{g\Gamma} = z^{-1}_{g,\Gamma} D^\alpha_g (\pm U_\alpha), \quad g \in G_0 \tag{205}$$

と定義する．

そもそも，カイラリティの総和はいつでも定義できるだろうか？カイラリティの総和の定義は暗に$\{e, \Gamma\} \subset G_0 + \Gamma G_0$なる部分群の存在を仮定している． $\Gamma^2 = e$なる群元が存在する場合は問題ないが，一般にはそうではない場合もあるだろう．

$$G = \mathbb{Z}_4 = G_0 + \Gamma G_0 = \{e, \sigma^2\} + \sigma\{e, \sigma^2\} \tag{206}$$

なる場合を考えよう．乗数系を自明$z_{g,h} \equiv 1$とする． $Z_2 = \{e, \sigma^2\}$の既約表現は自明表現と符号表現がある．

$$D_e^+ = 1, \quad D^+_{\sigma^2} = 1, \tag{207}$$
$$D_e^- = 1, \quad D^-_{\sigma^2} = -1. \tag{208}$$

これをσでマップした既約表現は

$$D_g^{\sigma(\pm)} = D_g^\pm \tag{209}$$

となる．ユニタリ行列$U_\pm$を決める条件は

$$U_\pm^2 = D^\pm_{\sigma^2} = \pm 1 \tag{210}$$

となる． $U_+ \in \{\pm 1\}, U_- \in \{\pm i\}$である．この例を見ると，カイラリティの総和，は一般には定義できないことがわかる．

それではそもそも$(1,1), (1,-1)$を区別する必要はないか？単一のG_0だけを考えている状況ではカイラリティを比較する方法が存在しないが， G_0の部分群を取る場合には，カイラリティを適切に合わせる必要があるだろう．つまり，対称性を$G_0 \to G_0'$と落としたときに，カイラリティの変化の符号を計算する必要がありそうだ．

再び例を考える．

$$G = \mathbb{Z}_2 \times \mathbb{Z}_2 = G_0 + \Gamma G_0 = \{e, \sigma_1\} + \sigma_2\{e, \sigma_1\} \tag{211}$$

なる場合を考えよう．乗数系を自明$z_{g,h} \equiv 1$とする． $Z_2 = \{e, \sigma^1\}$の既約表現は自明表現と符号表現がある．

$$D_e^{\alpha_0} = 1, \quad D^{\alpha_0}_{\sigma_1} = 1, \tag{212}$$
$$D_e^{\alpha_1} = 1, \quad D^{\alpha_1}_{\sigma_1} = -1. \tag{213}$$

これをσ_2でマップした既約表現は

$$D_g^{\sigma_2 \alpha_j} = D_g^{\alpha_j} \tag{214}$$

となる．ユニタリ行列U_{α_j}を決める条件は

$$[U_{\alpha_j}]^2 = D_e^{\alpha_j} = 1 \tag{215}$$

となる．よって，$U_{\alpha_j} \in \{\pm 1\}$である．４通りの選び方がある．

$$D_{\sigma_2}^{\alpha_0 +} = \eta_0, \quad D_{\sigma_2}^{\alpha_1 +} = \eta_1, \quad \eta_0, \eta_1 \in \{\pm 1\}. \tag{216}$$

各４通りの選び方について，$\mathbb{Z}_2 \times \mathbb{Z}_2$の既約表現を並べる．

$$(\eta_0, \eta_1) = (1, 1) : \qquad \begin{array}{c|cccc} & e & \sigma_1 & \sigma_2 & \sigma_2\sigma_1 \\ \hline D^{\alpha_0 +} & 1 & 1 & 1 & 1 \\ D^{\alpha_0 -} & 1 & 1 & -1 & -1 \\ D^{\alpha_1 +} & 1 & -1 & 1 & -1 \\ D^{\alpha_1 -} & 1 & -1 & -1 & 1 \end{array} \tag{217}$$

$$(\eta_0, \eta_1) = (1, -1) : \qquad \begin{array}{c|cccc} & e & \sigma_1 & \sigma_2 & \sigma_2\sigma_1 \\ \hline D^{\alpha_0 +} & 1 & 1 & 1 & 1 \\ D^{\alpha_0 -} & 1 & 1 & -1 & -1 \\ D^{\alpha_1 +} & 1 & -1 & -1 & 1 \\ D^{\alpha_1 -} & 1 & -1 & 1 & -1 \end{array} \tag{218}$$

$$(\eta_0, \eta_1) = (-1, 1) : \qquad \begin{array}{c|cccc} & e & \sigma_1 & \sigma_2 & \sigma_2\sigma_1 \\ \hline D^{\alpha_0 +} & 1 & 1 & -1 & -1 \\ D^{\alpha_0 -} & 1 & 1 & 1 & 1 \\ D^{\alpha_1 +} & 1 & -1 & 1 & -1 \\ D^{\alpha_1 -} & 1 & -1 & -1 & 1 \end{array} \tag{219}$$

$$(\eta_0, \eta_1) = (-1, -1) : \qquad \begin{array}{c|cccc} & e & \sigma_1 & \sigma_2 & \sigma_2\sigma_1 \\ \hline D^{\alpha_0 +} & 1 & 1 & -1 & -1 \\ D^{\alpha_0 -} & 1 & 1 & 1 & 1 \\ D^{\alpha_1 +} & 1 & -1 & -1 & 1 \\ D^{\alpha_1 -} & 1 & -1 & 1 & -1 \end{array} \tag{220}$$

対称性を部分群$H = \{e\} + \sigma_2\{e\}$に落とすと，$H$のカイラリティの定義と比較して，$G$の各セクターのカイラリティの，$H$のカイラリティへの変化が定義できる．

この例を見ると，カイラリティの総和が定義できそうであるが，$U_\pm$の選び方に依存するだろう．

6.1 back up

ギャップレス点のハミルトニアン，及び対称性演算子は具体的に

$$H = 0, \quad \hat{g} = D_g^{\alpha +}, \quad g \in G_0 + \Gamma G_0 \tag{221}$$

によって与えられる．与えられた任意のハミルトニアンに対して，ギャップレス点の電荷は，$\alpha\pm$の数の差，つまり，

$$\frac{1}{|G_0 + \Gamma G_0|} \sum_{g \in G_0 + \Gamma G_0} \{(\chi_g^{\alpha +})^* - (\chi_g^{\alpha -})\} \mathrm{tr}\,[\hat{g}] = \frac{1}{|G_0|} \sum_{g \in \Gamma G_0} (\chi_g^{\alpha +})^* \mathrm{tr}\,[\hat{g}] \tag{222}$$

で与えられる． $\alpha\pm$の選び方に依存することに注意． αセクターのカイラリティに対して，相対的に$T\alpha$セクターのカイラリティを一意に決める方法があれば，γを群に追加した既約表現の計算をしなくても良い． AIII$_T$の仮定より，$T\alpha$とαは非等価． $T \in TG_0$をひとつ選び，既約表現$T\alpha$は

$$D^{T\alpha}_{g\in G_0} = \frac{z_{g,T}}{z_{T,T^{-1}gT}}[D^{\alpha}_{T^{-1}gT}]^* \tag{223}$$

で与えられる．

7　E_2ページの計算

次のコホモロジーを計算したい．

$$A \xrightarrow{f} B \xrightarrow{g} C. \tag{224}$$

$g \circ f = 0$である．ねじれ部分を$\mathbb{Z}$に拡張する．

$$\begin{array}{ccccc} P_A & \longrightarrow & P_B & \longrightarrow & P_C \\ \downarrow & & \downarrow & & \downarrow{\scriptstyle i_C} \\ \tilde{A} & \xrightarrow{\tilde{f}} & \tilde{B} & \xrightarrow{\tilde{g}} & \tilde{C} \\ \downarrow & & \downarrow & & \downarrow \\ A & \xrightarrow{f} & B & \xrightarrow{g} & C \end{array} \tag{225}$$

一般論より

$$\mathrm{Ker}\, g = \pi_{\tilde{B}}(\mathrm{Ker}\,(\tilde{g}\oplus i_C))/P_B, \quad \mathrm{Im}\, f = (\mathrm{Im}\,\tilde{f} + P_B)/P_B. \tag{226}$$

第 3 同型定理より，

$$\mathrm{Ker}\, g/\mathrm{Im}\, f = \pi_{\tilde{B}}(\mathrm{Ker}\,(\tilde{g}\oplus i_C))/(\mathrm{Im}\,\tilde{f} + P_B). \tag{227}$$

一般に，自由アーベル群$A \subset B$に対して，Bの基底をAの基底で展開する計算は，擬逆行列によって与えられる．

8　d_2の計算

8.1　2d, 絶縁体

先ずは最も簡単な状況として，2次元の常伝導相を考える． AHSSの計算によって，E_2ページ

$n=0$	$E_2^{0,0}$	$E_2^{1,0}$	$E_2^{2,0}$
$n=1$	$E_2^{0,-1}$	$E_2^{1,-1}$	$E_2^{2,-1}$
$E_2^{p,-n}$	$p=0$	$p=1$	$p=2$

が与えられている．対称性は以下．

	G'	ϕ'_g	c'_g	$z'_{g,h}$
$n=0$	$\{G_0, TG_0, 0, 0\}$	ϕ_g	0	$z_{g,h}$
$n=1$	$\{G_0, TG_0, \gamma TG_0, \gamma G_0\}$	ϕ_g	ϵ_g	$z_{g,h}$

0セルk_0近傍におけるバンド反転の模型

$$H(\boldsymbol{k}) = f(\boldsymbol{k})\gamma_1 + (k^2-\mu)\gamma_0, \quad \hat{g}H(\boldsymbol{k})\hat{g}^{-1} = (-1)^{c_g}H(g\boldsymbol{k}), \quad \hat{g}\hat{h} = z_{g,h}\widehat{gh}, \quad g,h \in G_{k_0} \tag{228}$$

を考える． $\boldsymbol{k} \to k_0$に制限することにより，$E_1^{0,0}$の元が定まる．

$$[\gamma_0] \in E_1^{0,0}. \tag{229}$$

$[\gamma_0] \notin E_2^{0,0}$，つまり，両立関係を満たさない場合は，1セル上の点ノードを意味する． $[\gamma_0] \in E_2^{0,0}$とする．このとき，一般点（GP）におけるハミルトニアン

$$H' = k_1\gamma_1 + k_2\gamma_0, \quad \hat{g}H'\hat{g}^{-1} = (-1)^{c_g}H', \quad g \in G_{\mathrm{GP}} \tag{230}$$

において，G_{GP}の元は波数を変化させないことに注意すると，

$$\hat{g}\gamma_1\hat{g}^{-1} = (-1)^{c_g}\gamma_1, \quad \hat{g}\gamma_0\hat{g}^{-1} = (-1)^{c_g}\gamma_0, \quad g \in G_{\mathrm{GP}} \tag{231}$$

が従い，γ_1は次数$n = 1$におけるカイラル対称性の役割を果たすことがわかる．よって，質量項γ_0は$E_1^{2,-1}$の元を定める．

$$[\gamma_0] \in E_1^{2,-1}. \tag{232}$$

9 Back up

10 AHSS第一微分の実装について（underconst）

- セル分割を行い，微分行列δを構成する．
- 全てのセルについて，ユニタリ群$(G_0)_k$の既約表現からなる格子を構成する．この格子を$\mathcal{C}^p$とする．
- 微分$\delta^p : \mathcal{C}^p \to \mathcal{C}^{p+1}$を構成する．これは，両立関係によって計算される．
- 軌道から代表セルk_i^pをひとつ選び，既約表現αに対してWignerテストを実行して，その代表セル$k_i^{(p)}$におけるベクトル$rb_i^{(p)} \in \mathcal{C}^p$を構成する．

$\mathbb{Z}$	A, AI	$(1, \cdots)$
	A_T	$(1, 1, \cdots)$
	A_C, AI_C, A_Γ	$(1, -1 \cdots)$
	AII	$(2, \cdots)$
	AII_C	$(2, -2 \cdots)$
	$A_{T,C}$	$(1, 1, -1, -1, \cdots)$
$\mathbb{Z}_2$	D	$(1, \cdots)$
	D_T	$(1, 1 \cdots)$
	BDI	$(1, \cdots)$

- 代表セルの表現を波数空間全体に誘導する．このベクトルを$b_i^{(p)}$とする． $b_1^p, \ldots, b_d^p$を$\mathbb{Z}$の元，$b_{d+1}^p, \ldots, d_D^p$を$\mathbb{Z}_2$の元とする．この際，$\mathbb{Z}$の基底ベクトルについては$c_h = 1$なる元については，ベクトルの元を(-1)倍するが，$\mathbb{Z}_2$のベクトルについては(-1)倍を取らないことに注意する．部分格子
$$\tilde{E}_1^{p,0} = \mathbb{Z}\langle b_1^p, \ldots, b_D^p \rangle \in \mathcal{C}^p, \tag{233}$$
$$P^p = \mathbb{Z}\langle 2b_{d+1}^p, \ldots, 2b_D^p \rangle \in \mathcal{C}^p \tag{234}$$
を導入すると，E_1ページは
$$E_1^{p,0} = \tilde{E}_1^{p,0} / P^p \tag{235}$$
で与えられる．
- 構成から，$b_1^p, \ldots, b_D^p$は$\tilde{E}_1^{p,0}$の直交基底であることに注意する．
$$(b_i^p, b_j^p) \propto \delta_{ij}. \tag{236}$$
したがって，任意の元$x \in \tilde{E}_1^{p,0}$のb_i^p成分は，
$$(b_i^p, x)/(b_i^p, b_i^p) \tag{237}$$
によって与えられる．

11 予想

空間3次元を考える．整数$n = 0, 1, 2, 3$に対して以下のDiracハミルトニアンを考える．

波数空間のある点$\boldsymbol{k}_0$を選ぶ．この点における小群をGとする．（$G_{\boldsymbol{k}_0}$と書くべきだが，$\boldsymbol{k}_0$は略す．）群Gは波数空間に

$$\boldsymbol{k} \mapsto g\boldsymbol{k} := \phi_g p_g \boldsymbol{k}, \quad g \in G \tag{238}$$

と作用する．ここで，p_gは$O(3)$の点群作用，$\phi_g \in \{\pm 1\}$は，ユニタリ/反ユニタリを指定する．実n次元表現ρに対して，以下のDiracハミルトニアンを考える．

$$H(\boldsymbol{k}) = \sum_{j=1}^{n} f_j(\boldsymbol{k})\gamma_j + m\gamma_0, \tag{239}$$

$$f_i(g\boldsymbol{k}) = [D_g^\rho]_{ij} f_j(\boldsymbol{k}). \tag{240}$$

ここで，D_g^ρは表現ρの表現行列．小群Gの対称性は，

$$\hat{g}H(\boldsymbol{k})\hat{g}^{-1} = c_g H(g\boldsymbol{k}), \quad \hat{g}\hat{h} = z_{g,h}\widehat{gh} \tag{241}$$

で与えられるが，Diracハミルトニアン(240)を仮定すると，波数空間への作用は実表現ρによって決まるため，$\boldsymbol{f} = (f_1, \dots, f_n)^T$をベクトル表記すると，以下のように書き換えることができる．

$$\hat{g}H(\boldsymbol{f})\hat{g}^{-1} = c_g H(D_g^\rho \boldsymbol{f}), \quad \hat{g}\hat{h} = z_{g,h}\widehat{gh}. \tag{242}$$

このタイプのDiracハミルトニアンの質量項$m\gamma_0$は，Cornfeld-Chapmanの方法[1]によって，表現論の問題に帰着させることができる．詳しくは，[2]を参照．

さて，$n = 0$の場合は，単に群Gの既約表現を得る．これは，Wigner判定条件によってアーベル群の構造を決定できる．これをKと書く．

ハミルトニアン(240)の質量項の分類によって得られるアーベル群を$K_\rho^{(n)}$と書こう．$\boldsymbol{k} = \boldsymbol{0}$に制限することにより，準同型

$$r : K_\rho^{(n)} \to K \tag{243}$$

を得る．この像を$r(K_\rho^{(n)})$と書く．$r(K_\rho^{(n)})$はKの部分群である．n次元実表現ρで和集合を取ったものを

$$K^{(n)} := \bigcup_\rho r(K_\rho^{(n)}) \tag{244}$$

と定義する．

予想. 以下の構造がある．

$$K^{(3)} \subset K^{(2)} \subset K^{(1)} \subset K^{(0)} = K. \tag{245}$$

部分群$K^{(n)}$の意味は以下の通り．（こちらも要説明）

- $K^{(3)}$は，ノードのないバンド構造．
- $K^{(2)}$は，点ノードが存在するか，あるいはノードのないバンド構造．
- $K^{(1)}$は，線ノードが存在するか，点ノードが存在するか，あるいはノードのないバンド構造．
- Kは，面ノードが存在するか，線ノードが存在するか，点ノードが存在するか，あるいはノードのないバンド構造．

したがって，各レベルの補集合を取ると，ノード構造の分類を得る．

- $K \backslash K^{(1)}$は面ノード．
- $K^{(1)} \backslash K^{(2)}$は線ノード．
- $K^{(2)} \backslash K^{(3)}$は点ノード．

以上の計算を実装することにより， AHSSの高次微分の実行，及び，対称性指標がノード構造を検出するかどうかを判定できる．

12　いくつかの例

12.1　P$\bar{1}$

$n=0$— $K=\mathbb{Z}^2$で，$I=\pm 1$の既約表現が生成子．

$n=1$— 自明表現ρ_0と非自明表現ρ_1がある．

自明表現の場合は，Dirac Hamiltonian

$$H = m_1\gamma_1 + m\gamma_0 \tag{246}$$

の分類となり，分類は自明．

非自明表現の場合は，1次元の反転対称性が存在する場合と等価．

$$H(f) = f\gamma_1 + m\gamma_0, \tag{247}$$

分類は$\mathbb{Z}$で，生成子は

$$H(f) = f\sigma_x + m\sigma_z, \quad I = \sigma_z. \tag{248}$$

$f=0$とすると，$(1,-1) \in K$にmapされる．

以上より，

$$K^{(1)} = \mathbb{Z}[(1,-1)]. \tag{249}$$

$n=2$— 自明表現と非自明表現の組み合わせ．

$\rho_0 \oplus \rho_0$の場合は，

$$H = m_1\gamma_1 + m_2\gamma_2 + m\gamma_0 \tag{250}$$

の分類となり，分類は$\mathbb{Z}^2$．生成子は

$$H = m_1\sigma_x + m_2\sigma_y + m\sigma_z, \quad I = \pm 1. \tag{251}$$

それぞれ，Kの自明元$(0,0) \in K$にマップされる．

$\rho_0 \oplus \rho_1$の場合は，

$$H = f\gamma_1 + m_1\gamma_2 + m\gamma_0 \tag{252}$$

の分類となり，分類は自明.

$\rho_1 \oplus \rho_1$の場合は，

$$H = f\gamma_1 + f_2\gamma_2 + m\gamma_0 \tag{253}$$

の分類となり，分類は$\mathbb{Z}^2$．生成子は

$$H(f_1, f_2) = f_1\sigma_x + f_2\sigma_y + m\sigma_z, \quad I = \pm\sigma_z. \tag{254}$$

で，それぞれ$\pm(1,-1) \in K$にマップされる.

以上より，

$$K^{(2)} = \mathbb{Z}[(1,-1)]. \tag{255}$$

$n = 3$— 自明表現と非自明表現の組み合わせ.

$\rho_0 \oplus \rho_0 \oplus \rho_0$の場合は，

$$H = m_1\gamma_1 + m_2\gamma_2 + m_3\gamma_3 + m\gamma_0 \tag{256}$$

の分類となり，分類は自明.

$\rho_0 \oplus \rho_0 \oplus \rho_1$の場合は，

$$H(f_1) = f_1\gamma_1 + m_2\gamma_2 + m_3\gamma_3 + m\gamma_0 \tag{257}$$

の分類となり，分類は$\mathbb{Z}$．生成子は

$$H(f_1) = f_1\sigma_x + m_2\sigma_z\tau_x + m_3\sigma_z\tau_y + m\sigma_z\tau_z, \quad I = \sigma_z \tag{258}$$

で$(0,0) \in K$にマップされる.

$\rho_0 \oplus \rho_1 \oplus \rho_1$の場合は，

$$H(f_1, f_2) = f_1\gamma_1 + f_2\gamma_2 + m_3\gamma_3 + m\gamma_0 \tag{259}$$

の分類となり，分類は自明.

$\rho_1 \oplus \rho_1 \oplus \rho_1$の場合は，

$$H(f_1, f_2, f_3) = f_1\gamma_1 + f_2\gamma_2 + f_3\gamma_3 + m\gamma_0 \tag{260}$$

の分類となり，分類は$\mathbb{Z}$．生成子は

$$H(f_1) = f_1\sigma_x\tau_x + f_2\sigma_x\tau_y + f_3\sigma_x\tau_z + m\sigma_z, \quad I = \sigma_z \tag{261}$$

で$(2,-2) \in K$にマップされる.

以上より，

$$K^{(3)} = \mathbb{Z}[(2,-2)]. \tag{262}$$

部分群の構造(245)の成立に注意しよう.

以上より，ノード構造について以下がわかる.

- $K \backslash K^{(1)} \ni (n,m), n \neq m$なるバンド反転は，面ノード.
- $K^{(1)} \backslash K^{(2)} = \emptyset$より，線ノードは存在しない.
- $K^{(2)} \backslash K^{(3)} \ni (2n-1)(1,-1)$のバンド反転は，点ノード.

12.2 Pm

両立関係が満たされない場合でも点ノードを検出できる例として，Pmを考える．

12.3 back up

問題設定：

- 任意の$n = 1, 2, 3$次元の実表現に対して，対応するn次元実関数ベクトルが存在するか？
- $k_x k_y, k_x^2 - k_y^2$が"独立"とは？
- 実表現は，Wigner判定条件によって系統的に構成できる． $W_\alpha^T = 1$なら実． $W_\alpha^T = 0$なら，２つを組み合わせる． $W_\alpha^T = -1$なら・・・

まずは練習として，各点群ごとに，実表現を構成する．

12.4 1次元表現

PG			
1			
-1	k_x	k_y	k_z
11m	k_z		
112	k_x	k_y	
2/m	k_z	k_x, k_y	$k_x k_z, k_y k_z$

$$f(p_g \boldsymbol{k}) = \eta_g f(\boldsymbol{k}) \tag{263}$$

を解く！ランダムに何点かとって１次方程式を解く．

12.5 2次元表現

与えられた２次元実表現から，どのようにして$O(3)$回転行列を得るか？

$$\boldsymbol{f}(p_g \boldsymbol{k}) = M_g \boldsymbol{f}(\boldsymbol{k}), \quad M_g M_h = M_{gh}, \quad g, h \in G. \tag{264}$$

M_gがそもそも$O(3)$回転行列であれば，結晶点群の$O(3)$行列のデータから検索できる．

References

[1] Eyal Cornfeld and Adam Chapman, *Classification of crystalline topological insulators and superconductors with point group symmetries*, Phys. Rev. B 99, 075105 (2019).

[2] Ken Shiozaki, *The classification of surface states of topological insulators and superconductors with magnetic point group symmetry*, arXiv:1907.09354