

# 極小曲面を用いた 量子ノ構造

東北大多元研 藤田伸尚

# 骨子

1. 物質の安定構造
2. 周期的極小曲面
3. 曲面に拘束された電子
4. Bonnet族とバンド構造
5. 波動関数の対称性とノード線
6. まとめ

# 1. 物質の安定構造

# 1. 物質構造の安定性

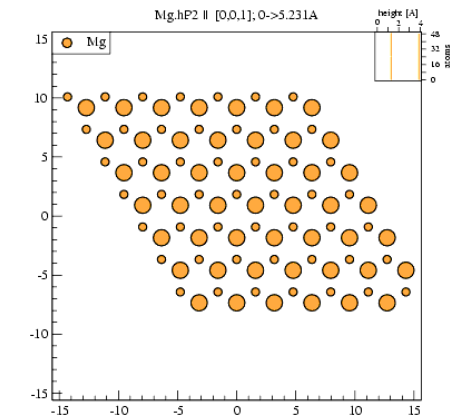
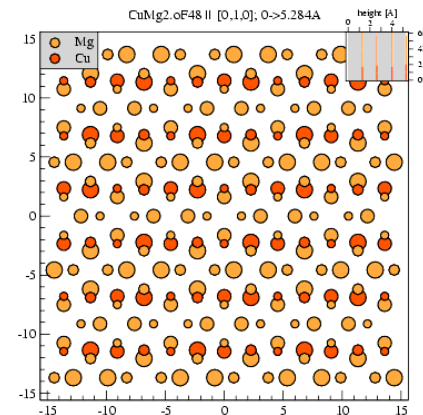
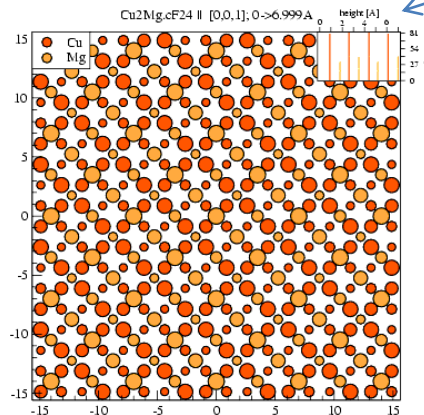
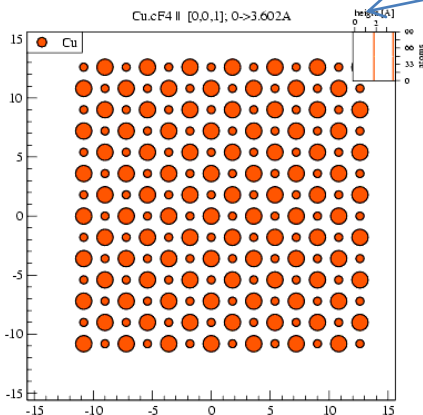
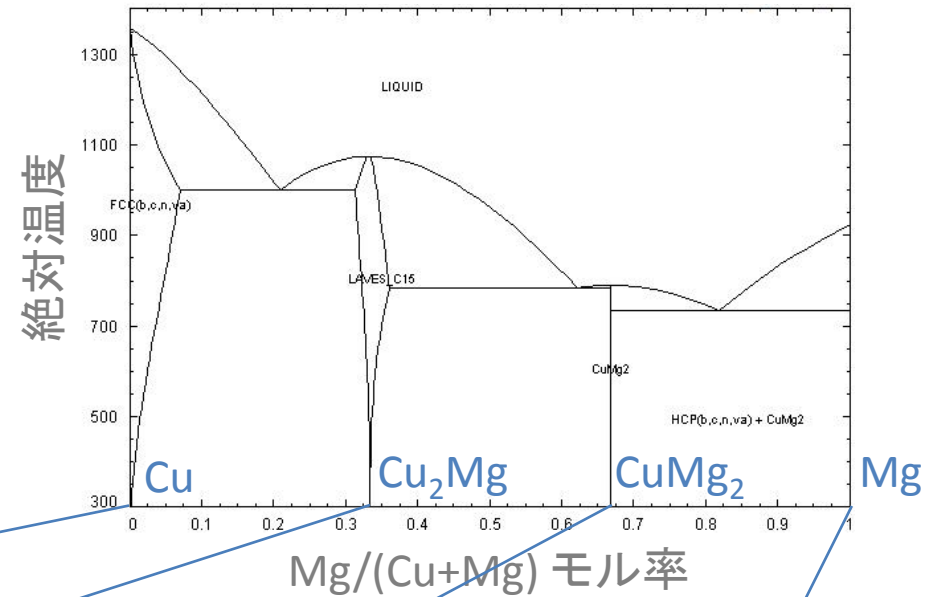
Cu-Mg 二元合金系の相図

自由エネルギー—最小

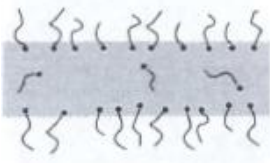
$$\Phi = U - ST - \mu N$$

⇔ 熱力学的平衡状態  
(安定構造)

- Gas
- Liquid
- Solid (*crystal/amorphous/quasicrystal*)



極小曲面を用いた量子ナノ構造



# シャボン膜の曲面構造

自由エネルギー  $\Phi = \iint_S \gamma dA = \gamma \underbrace{\iint_S dA}_{\text{(表面積)}}$

( $\gamma$ : 表面張力 [ $\text{J}/\text{m}^2 = \text{N}/\text{m}$ ])

→ 与えられた境界  $C$  に対し最小面積を持つ曲面

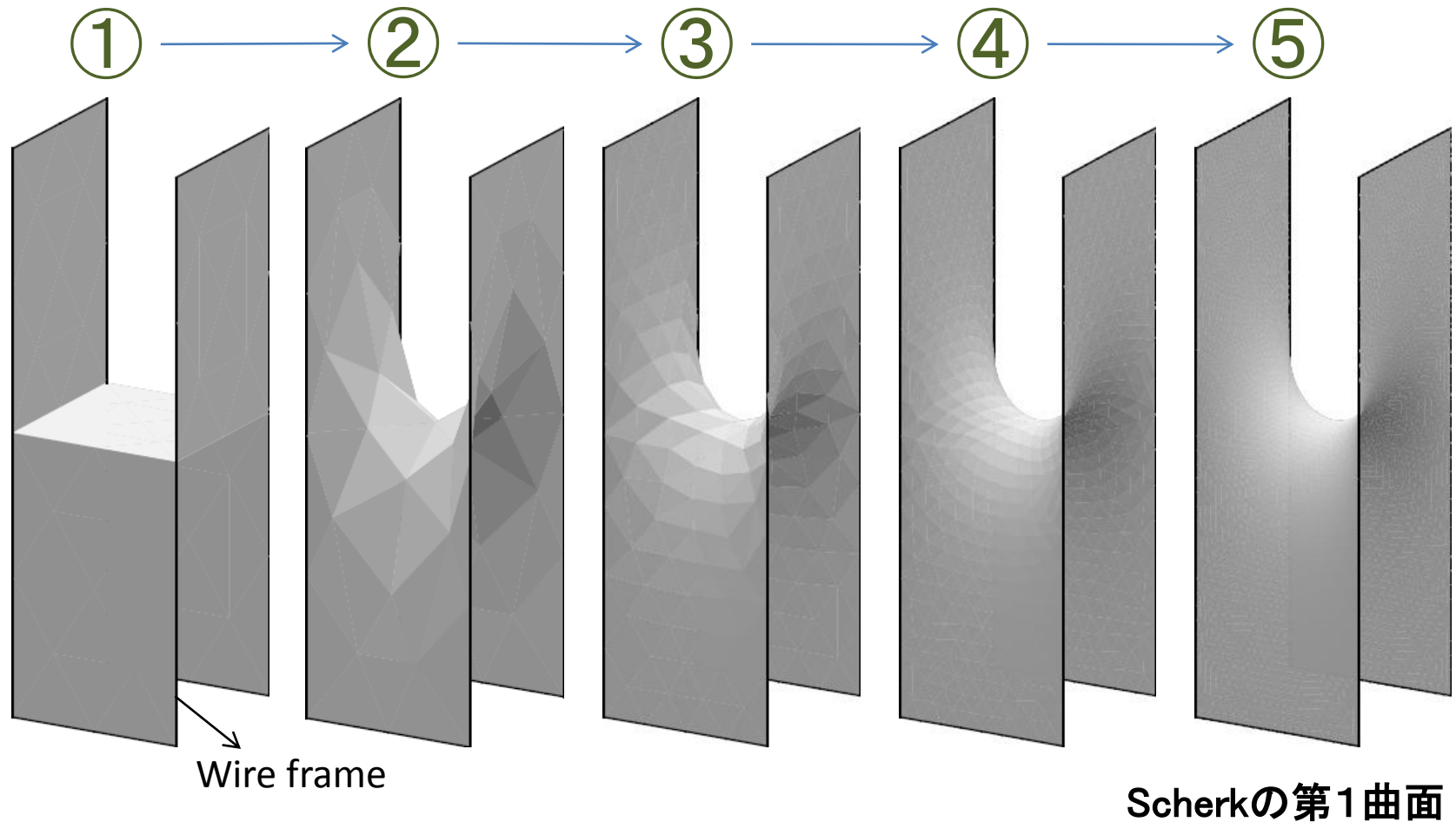


Plateau問題

J. A. F. Plateau,  
Statistique Expérimentale et Théorique des  
Liquides soumis aux seules Forces  
Moléculaires (Gauthier-Villars, Paris, 1873).

# 曲面の表面積の最小化

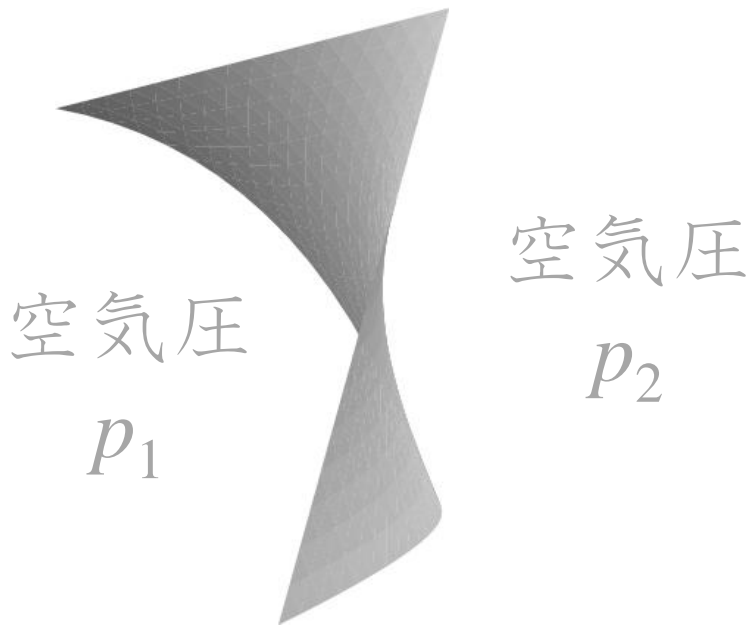
(‘Surface evolver’によるシミュレーション)



# 極小曲面

所与の境界条件に対する面積最小化曲面

⇔平均曲率  $H$  が至る所でゼロである曲面



Laplaceの法則

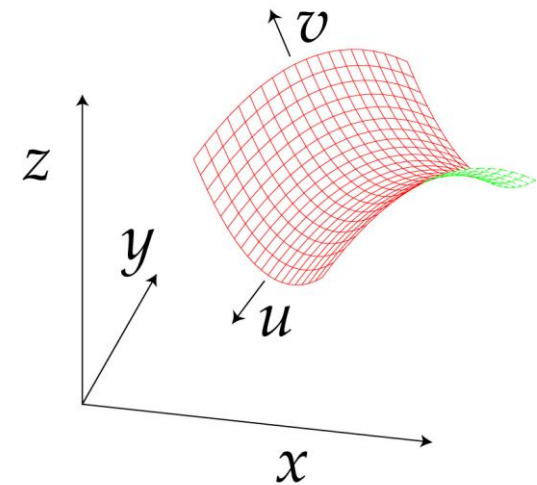
$$p_1 - p_2 = 2\gamma H$$



シャボン膜の両側で  
圧力差が無い場合のみ  
極小曲面が形成する

# Weierstrass-Enneper 表現

あらゆる極小曲面は、有理型関数  $F(\zeta)$  を用いて解析的に表現できる



$$\vec{x}(u, v) = \vec{x}(\zeta = u + iv) = \ell \operatorname{Re} \left( e^{i\alpha} \vec{\xi}(\zeta) \right) \quad (\in \mathbf{R}^3)$$

$$\vec{\xi}(\zeta) \quad (\in \mathbf{C}^3)$$

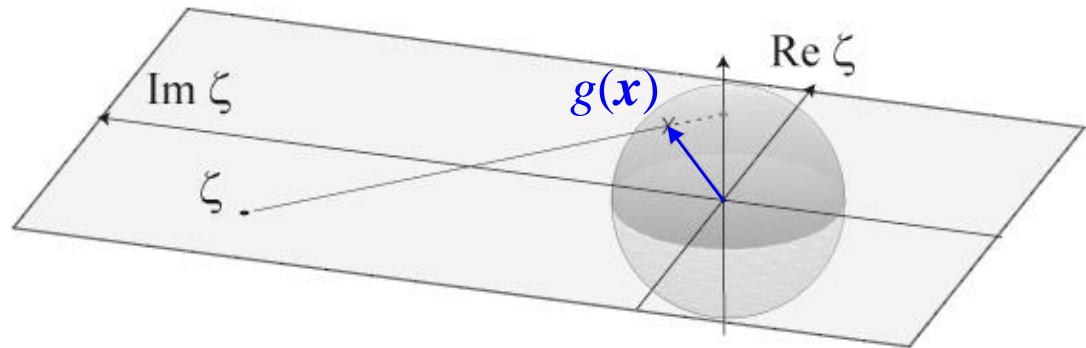
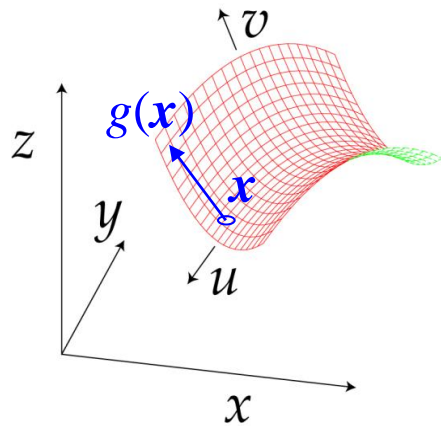
$\alpha = \text{Bonnet angle}$

$$= \left( \int^{\zeta} F(\zeta_1)(1 - \zeta_1^2) d\zeta_1, \int^{\zeta} iF(\zeta_1)(1 + \zeta_1^2) d\zeta_1, \int^{\zeta} 2F(\zeta_1)\zeta_1 d\zeta_1 \right)$$



# Weierstrass-Enneper表現

曲面上の各点のGauss写像  $g(\mathbf{x})$  と  
その複素平面 ( $\zeta$ 平面) へのステレオ投影



$$g(\mathbf{x}) = \frac{\partial_u \mathbf{x} \times \partial_v \mathbf{x}}{|\partial_u \mathbf{x} \times \partial_v \mathbf{x}|} = \left( \frac{2\operatorname{Re} \zeta}{|\zeta|^2 + 1}, \frac{2\operatorname{Im} \zeta}{|\zeta|^2 + 1}, \frac{|\zeta|^2 - 1}{|\zeta|^2 + 1} \right)$$

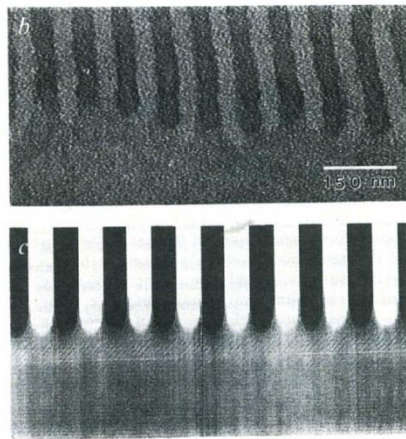
## 2. 周期的極小曲面

# 周期的極小曲面

高分子集合系（ソフトマター）において  
自己組織化により形成する

Scherkの曲面

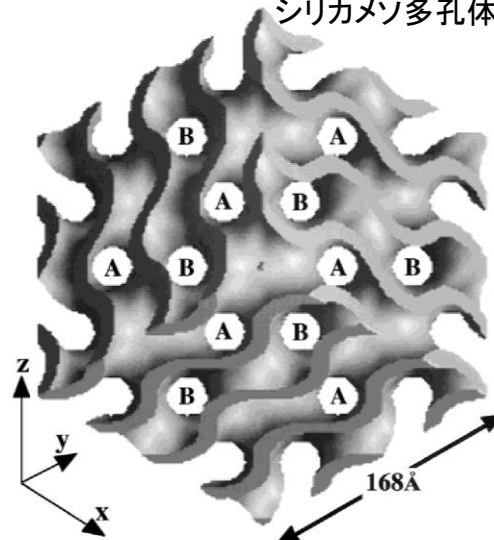
PS/PBブロック共重合体



E. L. Thomas et al.  
Nature 334, 598 (1988).

G曲面

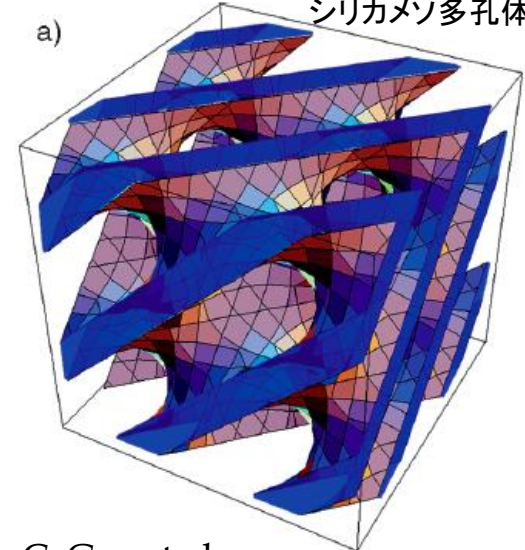
シリカメソ多孔体



O. Terasaki et al.  
Microsc. Microanal. 8, 35 (2002).

D曲面

シリカメソ多孔体

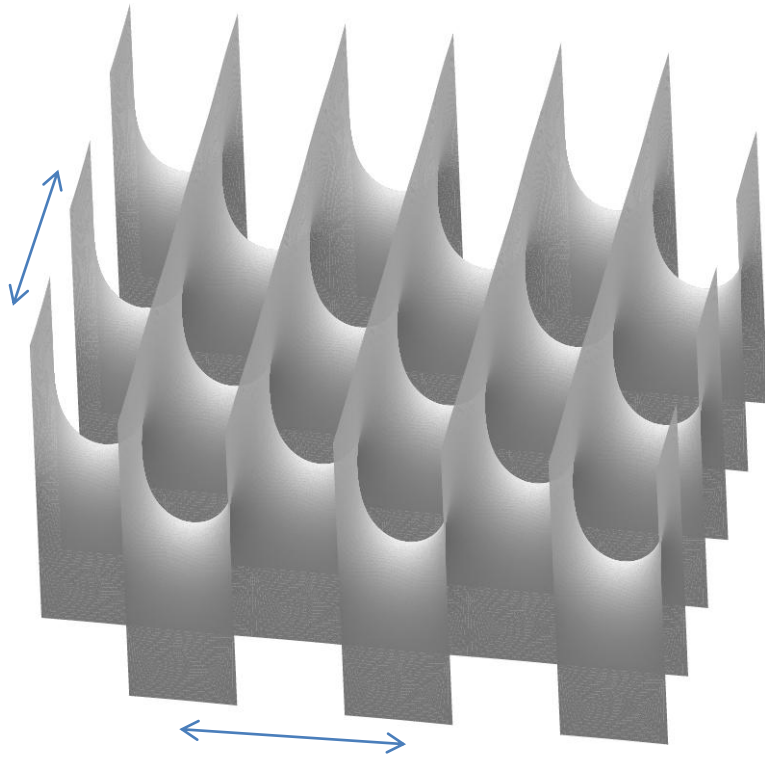


C. Gao et al.  
Angew. Chem. Int. Ed. 45, 4295 (2006).

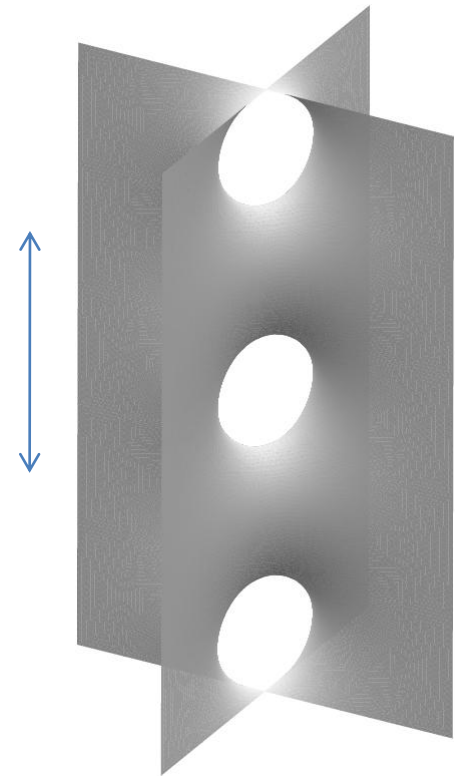
Reconstructed image from electron diffraction

# Scherkの曲面 (H.F. Scherk, 1834)

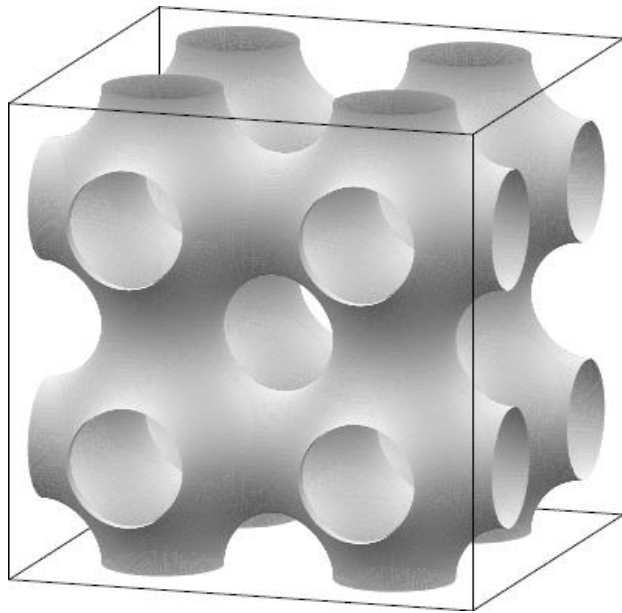
第1曲面 (二重周期)



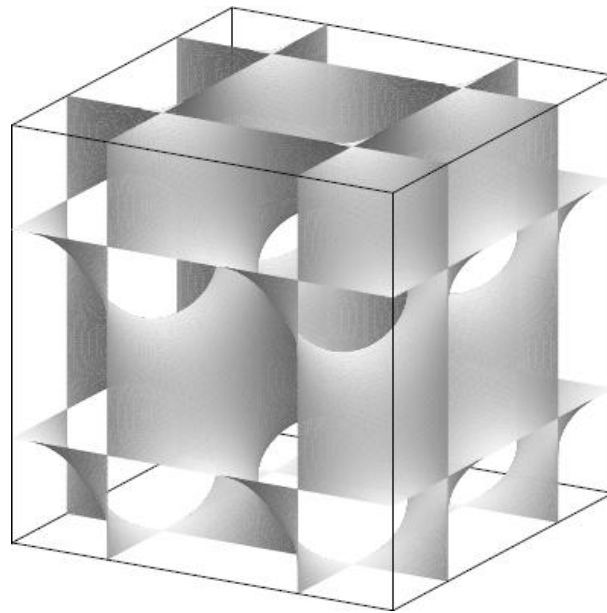
第2曲面 (一重周期)



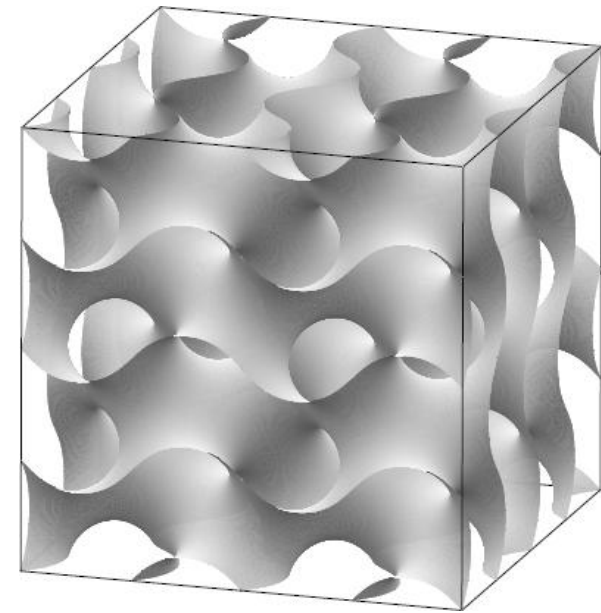
## P, D, G曲面 (三重周期)



SchwarzのP曲面  
(1890)



SchwarzのD曲面  
(1890)



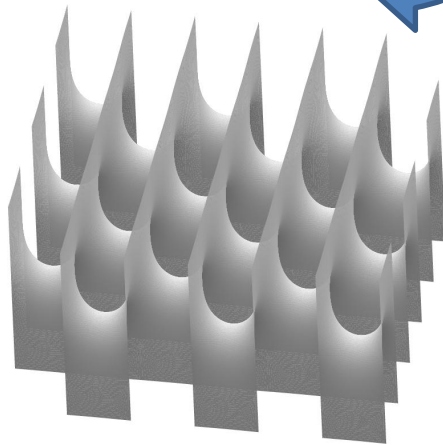
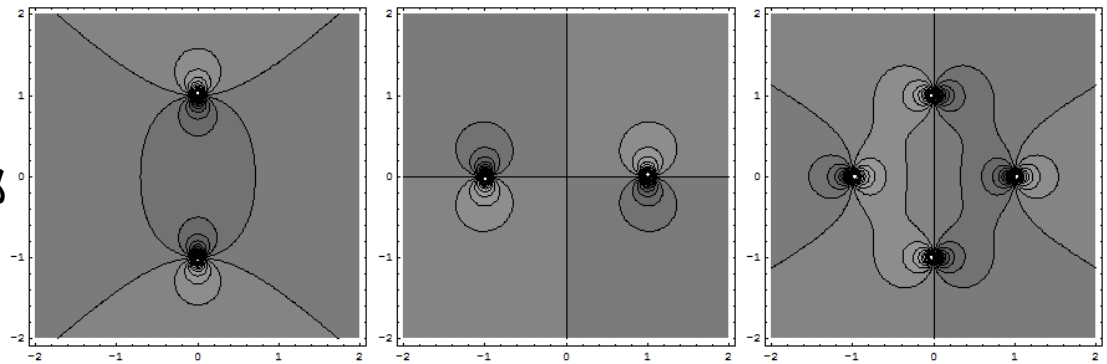
SchönのG曲面  
(1970)

# Weierstrass-Enneper積分の実行 (Scherk)

$$F(\zeta) = \frac{4}{\zeta^4 - 1}$$

$$\bar{\xi}(\zeta) = \left( \int^\zeta \underbrace{F(\zeta_1)(1-\zeta_1^2)}_{\downarrow} d\zeta_1, \int^\zeta \underbrace{iF(\zeta_1)(1+\zeta_1^2)}_{\downarrow} d\zeta_1, \int^\zeta \underbrace{2F(\zeta_1)\zeta_1}_{\downarrow} d\zeta_1 \right)$$

実部



$$\bar{\xi}(\zeta) = \left( \frac{2}{i} \ln \frac{1-i\zeta}{1+i\zeta}, \quad \frac{2}{i} \ln \frac{1+\zeta}{1-\zeta}, \quad 2 \ln \frac{1-\zeta^2}{1+\zeta^2} \right)$$

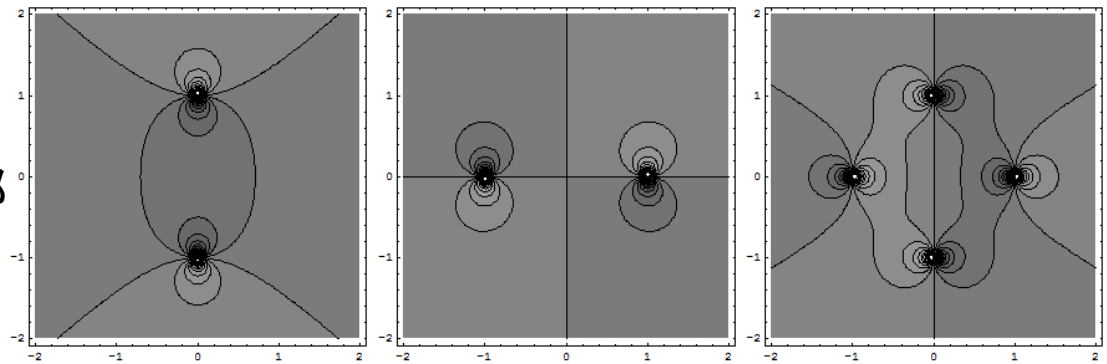
$$\bar{x}(\zeta) = \text{Re}(\bar{\xi}(\zeta))$$

# Weierstrass-Enneper積分の実行 (Scherk)

$$F(\zeta) = \frac{4}{\zeta^4 - 1}$$

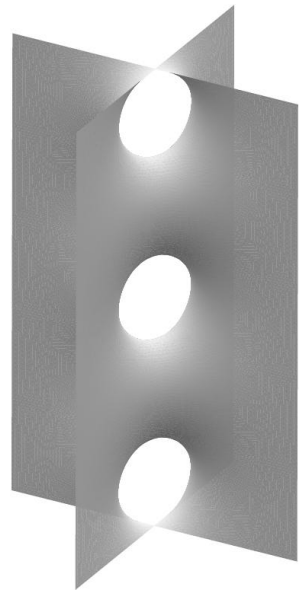
$$\bar{\xi}(\zeta) = \left( \int^\zeta \underbrace{F(\zeta_1)(1-\zeta_1^2)} d\zeta_1, \int^\zeta \underbrace{iF(\zeta_1)(1+\zeta_1^2)} d\zeta_1, \int^\zeta \underbrace{2F(\zeta_1)\zeta_1} d\zeta_1 \right)$$

実部



$$\bar{\xi}(\zeta) = \left( \frac{2}{i} \ln \frac{1-i\zeta}{1+i\zeta}, \frac{2}{i} \ln \frac{1+\zeta}{1-\zeta}, 2 \ln \frac{1-\zeta^2}{1+\zeta^2} \right)$$

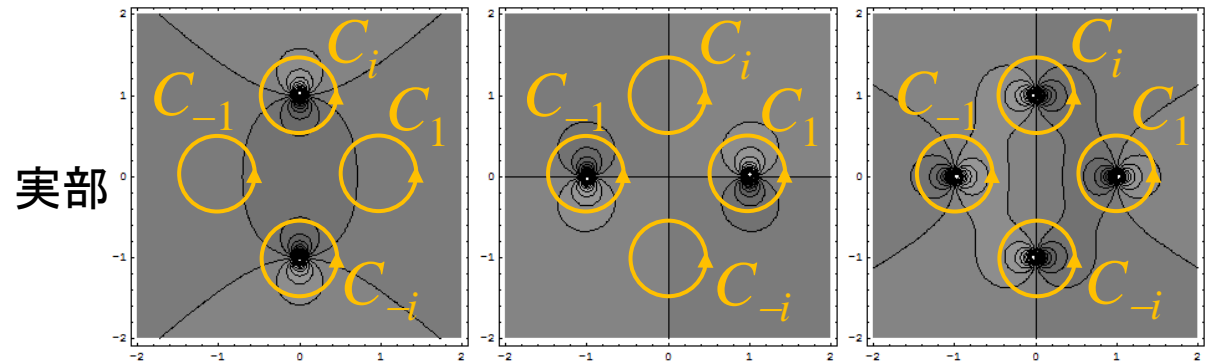
$$\bar{x}(\zeta) = \text{Re} \left( e^{\pi i/2} \bar{\xi}(\zeta) \right)$$



# 基本並進ベクトルの同定(Scherk)

$$F(\zeta) = \frac{4}{\zeta^4 - 1}$$

$$\vec{\xi}(\zeta) = \left( \int^\zeta \underbrace{F(\zeta_1)(1-\zeta_1^2)} d\zeta_1, \int^\zeta \underbrace{iF(\zeta_1)(1+\zeta_1^2)} d\zeta_1, \int^\zeta \underbrace{2F(\zeta_1)\zeta_1} d\zeta_1 \right)$$

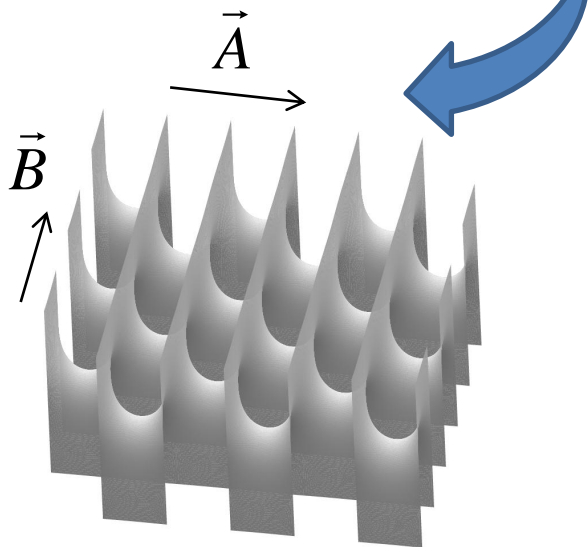


一位の極を反時計回りに周回する軌道上の積分は留数定理を用いて求められる。

$$\vec{\Xi}_{\pm 1} = (0, \mp 4\pi, 4i\pi), \quad \vec{\Xi}_{\pm i} = (\mp 4\pi, 0, -4i\pi)$$

$$\text{Re}(\vec{\Xi}_{\pm 1}) = \mp(0, 4\pi, 0) = \mp \vec{A}$$

$$\text{Re}(\vec{\Xi}_{\pm i}) = \mp(4\pi, 0, 0) = \mp \vec{B}$$

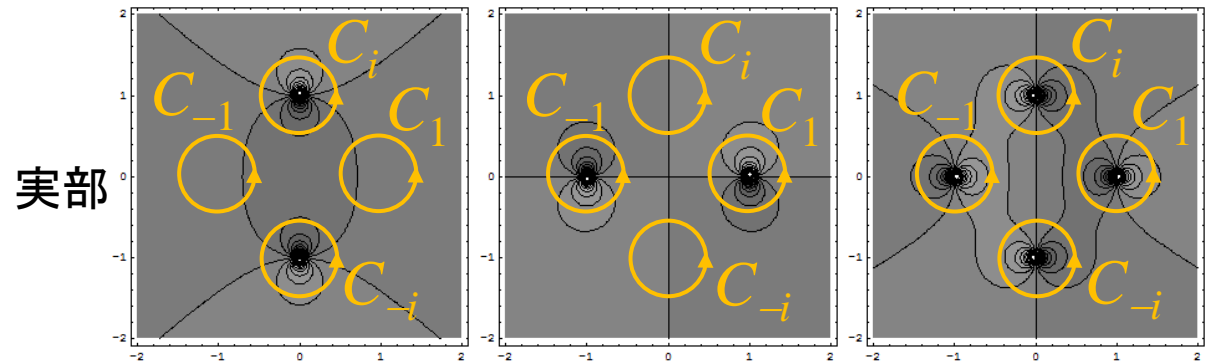




# 基本並進ベクトルの同定(Scherk)

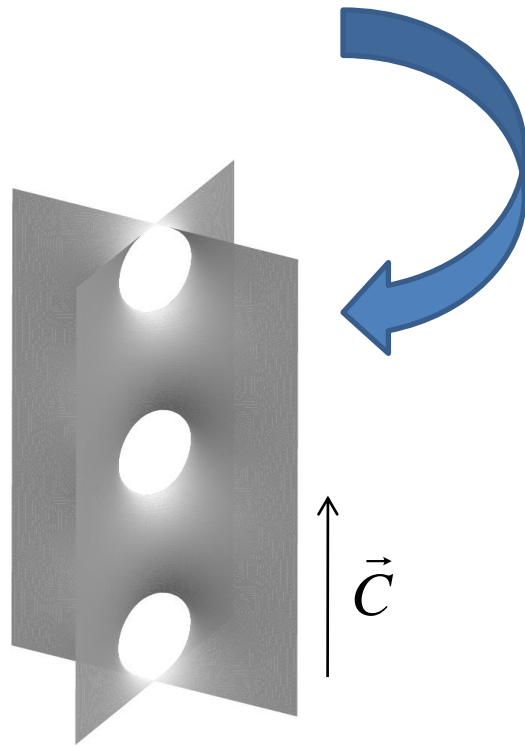
$$F(\zeta) = \frac{4}{\zeta^4 - 1}$$

$$\vec{\xi}(\zeta) = \left( \int^\zeta \underbrace{F(\zeta_1)(1-\zeta_1^2)} d\zeta_1, \int^\zeta \underbrace{iF(\zeta_1)(1+\zeta_1^2)} d\zeta_1, \int^\zeta \underbrace{2F(\zeta_1)\zeta_1} d\zeta_1 \right)$$



一位の極を反時計回りに周回する軌道上の積分は留数定理を用いて求められる。

$$\begin{aligned} \vec{\Xi}_{\pm 1} &= (0, \mp 4\pi, 4i\pi), \quad \vec{\Xi}_{\pm i} = (\mp 4\pi, 0, -4i\pi) \\ \operatorname{Re}\left(e^{\pi i/2} \vec{\Xi}_{\pm 1}\right) &= (0, 0, -4\pi) = -\vec{C} \\ \operatorname{Re}\left(e^{\pi i/2} \vec{\Xi}_{\pm i}\right) &= (0, 0, 4\pi) = \vec{C} \end{aligned}$$



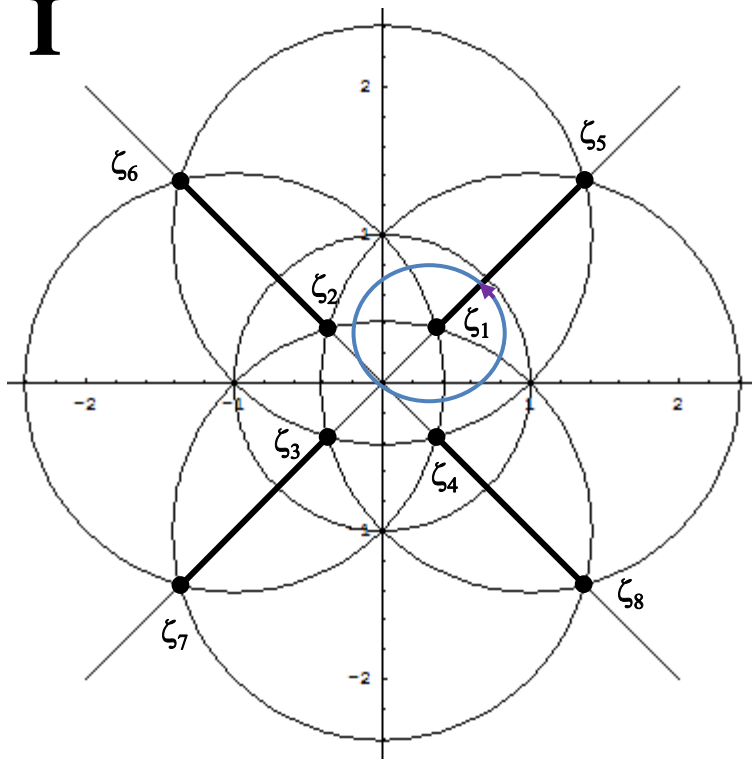
# Weierstrass-Enneper積分の実行(P, D, G曲面)

$$F(\zeta) = \frac{1}{\sqrt{1+14\zeta^4 + \zeta^8}}$$

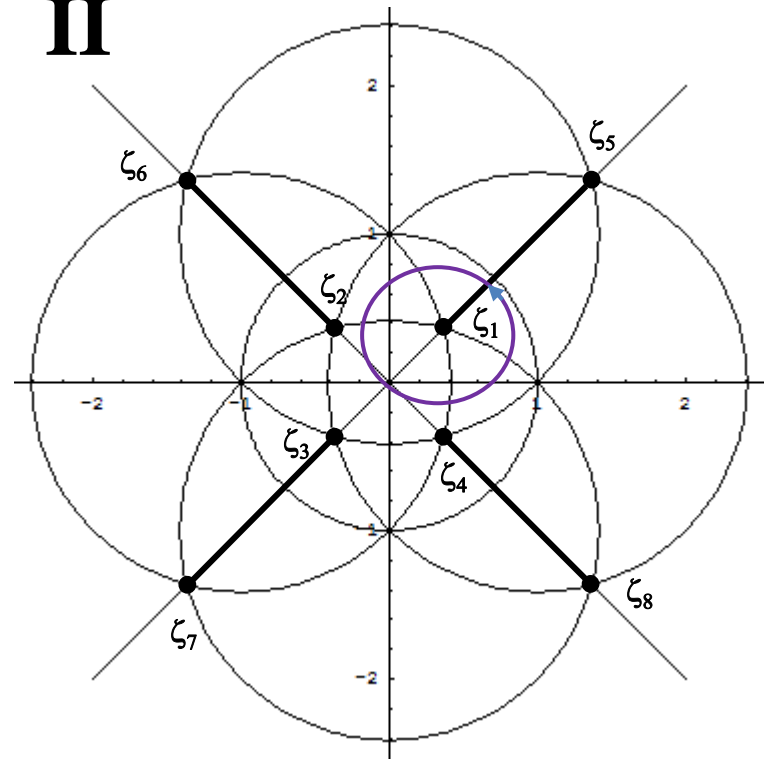
二位の分岐点 (branch point)

$$\{\zeta_j\}_{j=1,2,\dots,8} = \left\{ \frac{\sqrt{3} \pm 1}{\sqrt{2}} e^{i \frac{(2n+1)\pi}{4}} \right\}_{n=0,1,2,3}$$

**I**



**II**



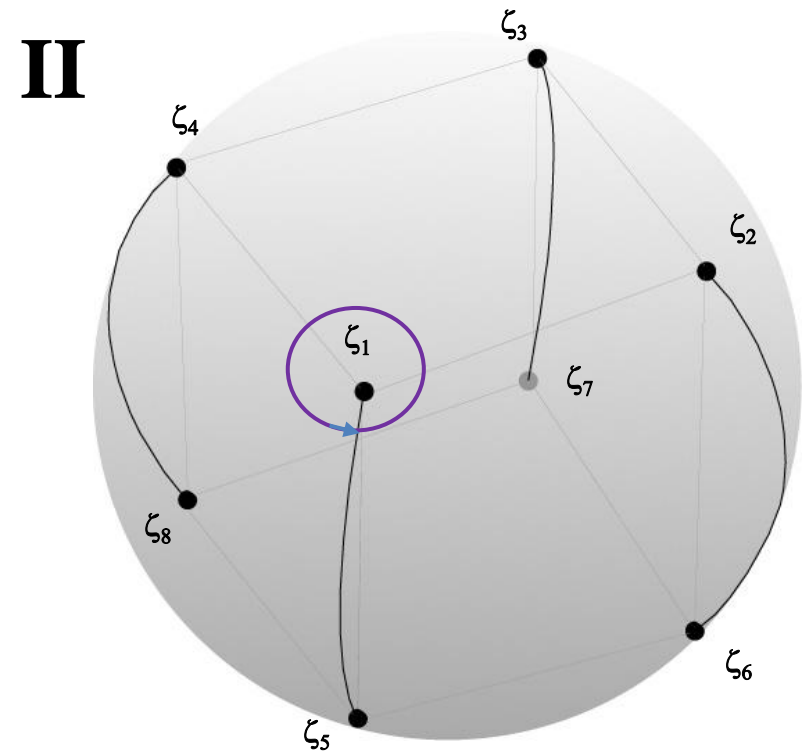
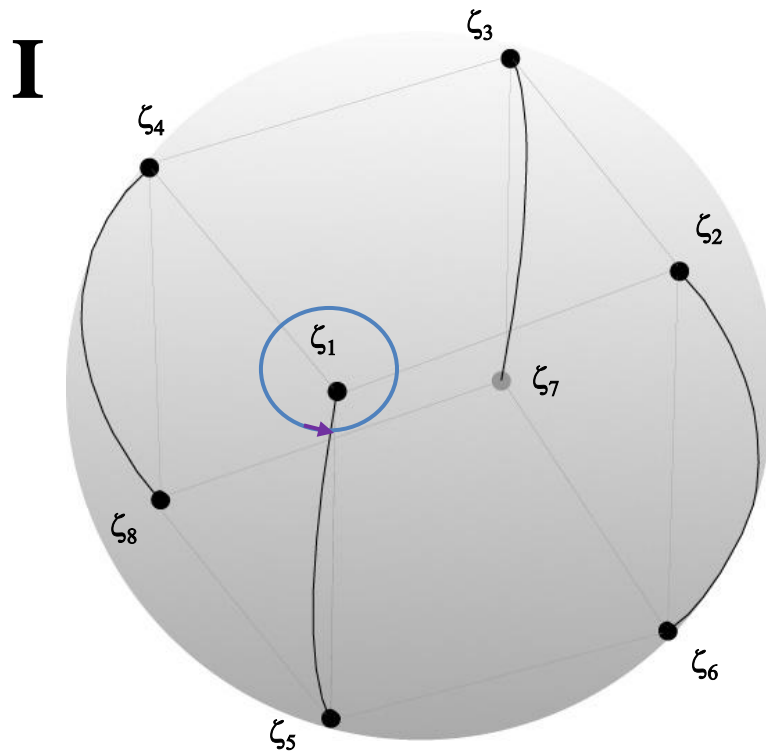
$F(z)$ の定義域：2枚の複素平面を接合したRiemann面

# Weierstrass-Enneper積分の実行(P, D, G曲面)

$$F(\zeta) = \frac{1}{\sqrt{1+14\zeta^4 + \zeta^8}}$$

二位の分岐点 (branch point)

$$\{\zeta_j\}_{j=1,2,\dots,8} = \left\{ \frac{\sqrt{3} \pm 1}{\sqrt{2}} e^{i \frac{(2n+1)\pi}{4}} \right\}_{n=0,1,2,3}$$



$F(z)$  の定義域：2枚のGauss球面を接合したRiemann面

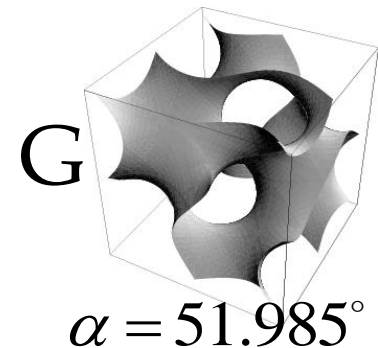
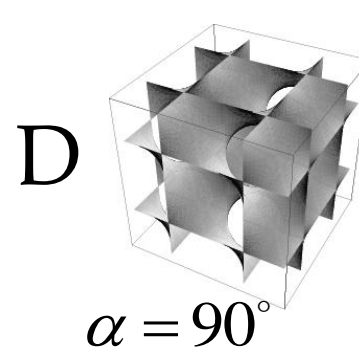
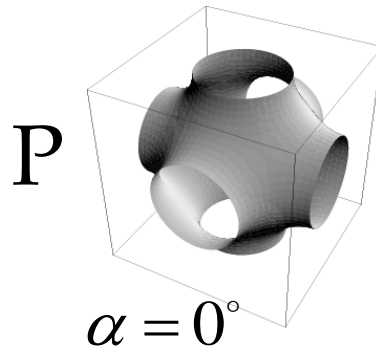
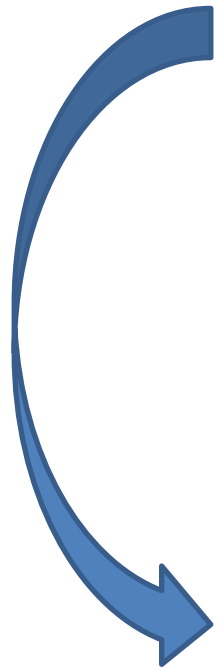
# Weierstrass-Enneper積分の実行(P, D, G曲面)

$$F(\zeta) = \frac{1}{\sqrt{1+14\zeta^4 + \zeta^8}}$$

$$\bar{\xi}(\zeta) = \left( f\left(\frac{2\zeta}{1+\zeta^2}\right), f\left(\frac{2i\zeta}{1-\zeta^2}\right), f\left(\frac{\zeta^2-1}{\zeta^2+1}\right) + f(1) \right)$$

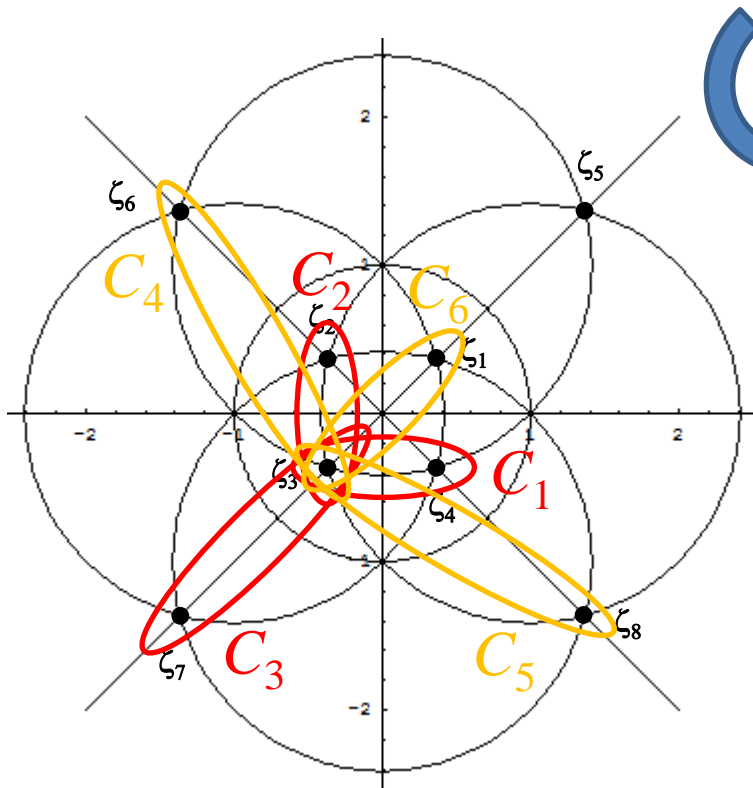
$$f(\mu) = \frac{1}{2} \int_0^\mu \frac{1}{\sqrt{1-v^2+v^4}} dv$$

$$\bar{x}(\zeta) = \text{Re}\left(e^{i\alpha} \bar{\xi}(\zeta)\right)$$



# 基本並進ベクトルの同定(P, D, G曲面)

$$F(\zeta) = \frac{1}{\sqrt{1+14\zeta^4 + \zeta^8}}$$



$$\vec{\Xi}_1 = (r, \quad is, \quad -is)$$

$$\vec{\Xi}_2 = (-is, \quad r, \quad is)$$

$$\vec{\Xi}_3 = (is, \quad -is, \quad r)$$

$$\vec{\Xi}_4 = (0, \quad -r - is, \quad r - is)$$

$$\vec{\Xi}_5 = (r - is, \quad 0, \quad -r - is)$$

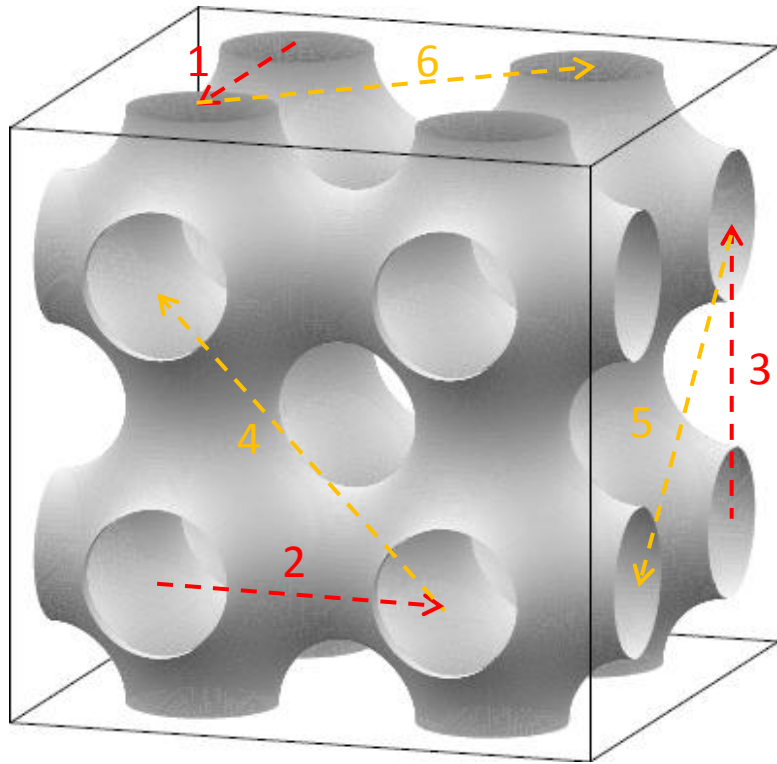
$$\vec{\Xi}_6 = (-r - is, \quad r - is, \quad 0)$$

$$r - is = 2e^{-\pi i/6} K(e^{-2\pi i/3})$$

$$r \approx 2.156, s = 1.686$$

Oguey & Sadoc, J. Phys. I France 3, 839 (1993)

# 基本並進ベクトルの同定(P曲面)



SchwarzのP曲面  
(1890)

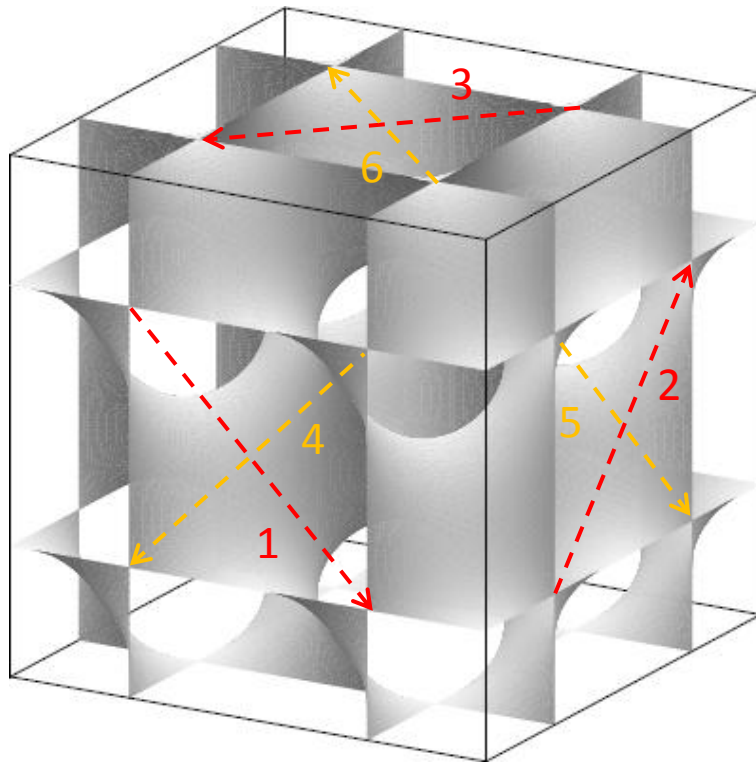
$$\begin{aligned} \text{Re}(\vec{\Xi}_1) &= (r, 0, 0) \\ \text{Re}(\vec{\Xi}_2) &= (0, r, 0) \\ \text{Re}(\vec{\Xi}_3) &= (0, 0, r) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Re}(\vec{\Xi}_4) &= (0, -r, r) \\ \text{Re}(\vec{\Xi}_5) &= (r, 0, -r) \\ \text{Re}(\vec{\Xi}_6) &= (-r, r, 0) \end{aligned}$$

$$r - is = 2e^{-\pi i/6} K(e^{-2\pi i/3})$$

$$r \approx 2.156, s = 1.686$$

# 基本並進ベクトルの同定(D曲面)



SchwarzのD曲面  
(1890)

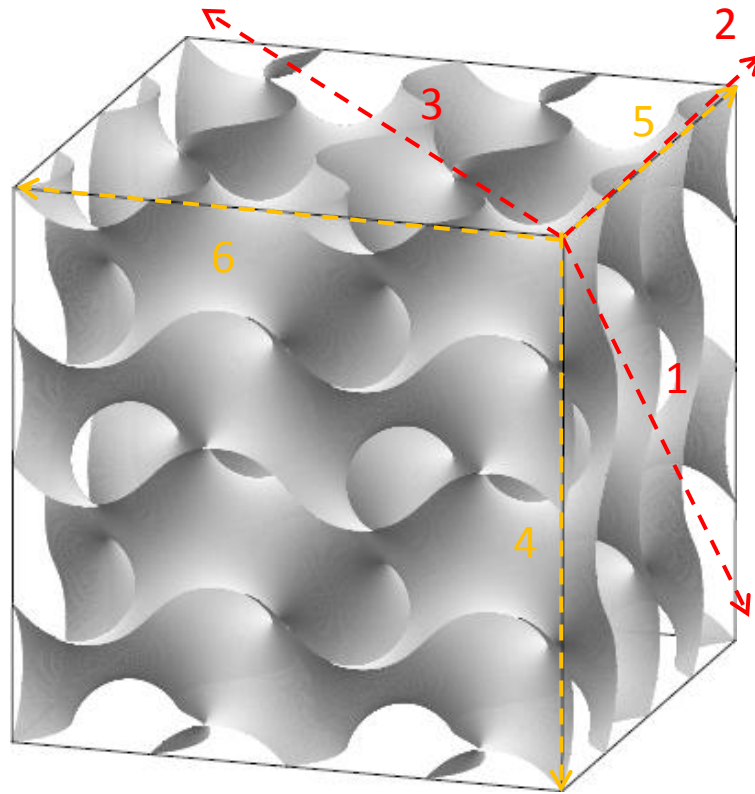
$$\begin{aligned} \text{Re}(i \vec{\Xi}_1) &= (0, s, -s) \\ \text{Re}(i \vec{\Xi}_2) &= (-s, 0, s) \\ \text{Re}(i \vec{\Xi}_3) &= (s, -s, 0) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Re}(i \vec{\Xi}_4) &= (0, -s, -s) \\ \text{Re}(i \vec{\Xi}_5) &= (-s, 0, -s) \\ \text{Re}(i \vec{\Xi}_6) &= (-s, -s, 0) \end{aligned}$$

$$r - is = 2e^{-\pi i/6} K(e^{-2\pi i/3})$$

$$r \approx 2.156, s = 1.686$$

# 基本並進ベクトルの同定(G曲面)



$$\operatorname{Re} \left( \frac{s+ir}{\sqrt{r^2+s^2}} \vec{\Xi}_1 \right) = (b, b, -b)$$

$$\operatorname{Re} \left( \frac{s+ir}{\sqrt{r^2+s^2}} \vec{\Xi}_2 \right) = (-b, b, b)$$

$$\operatorname{Re} \left( \frac{s+ir}{\sqrt{r^2+s^2}} \vec{\Xi}_3 \right) = (b, -b, b)$$

$$\operatorname{Re} \left( \frac{s+ir}{\sqrt{r^2+s^2}} \vec{\Xi}_4 \right) = (0, 0, -2b)$$

$$\operatorname{Re} \left( \frac{s+ir}{\sqrt{r^2+s^2}} \vec{\Xi}_5 \right) = (-2b, 0, 0)$$

$$\operatorname{Re} \left( \frac{s+ir}{\sqrt{r^2+s^2}} \vec{\Xi}_6 \right) = (0, -2b, 0)$$

SchönのG曲面  
(1970)

$$b = \frac{rs}{\sqrt{r^2+s^2}}$$

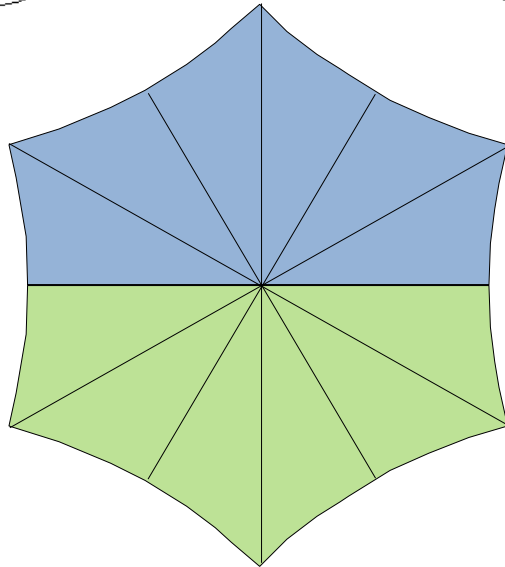
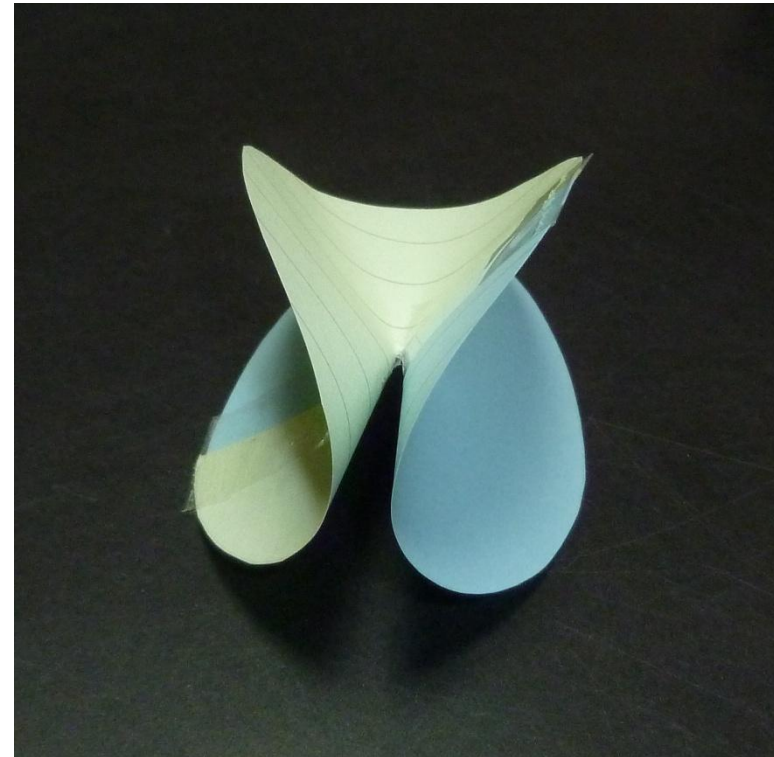
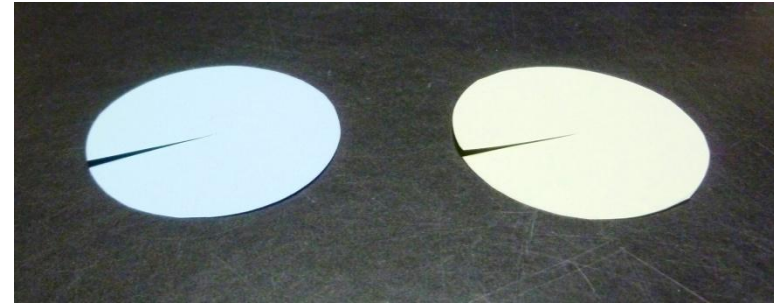
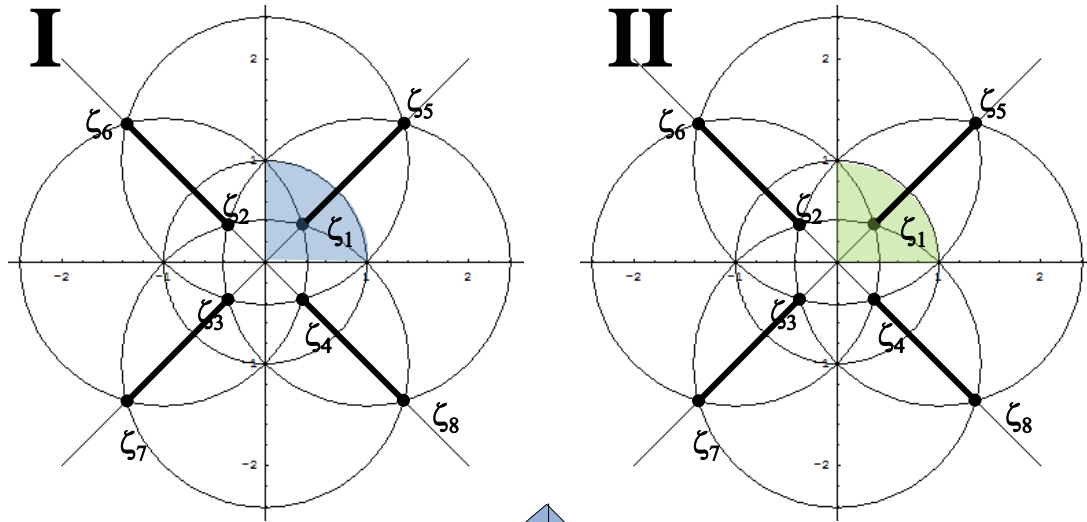
$$r - is = 2e^{-\pi i/6} K(e^{-2\pi i/3})$$

$$r \approx 2.156, s = 1.686$$

Oguey & Sadoc, J. Phys. I France 3, 839 (1993)



# 曲面の基本単位に関する考察



Poincaréモデル

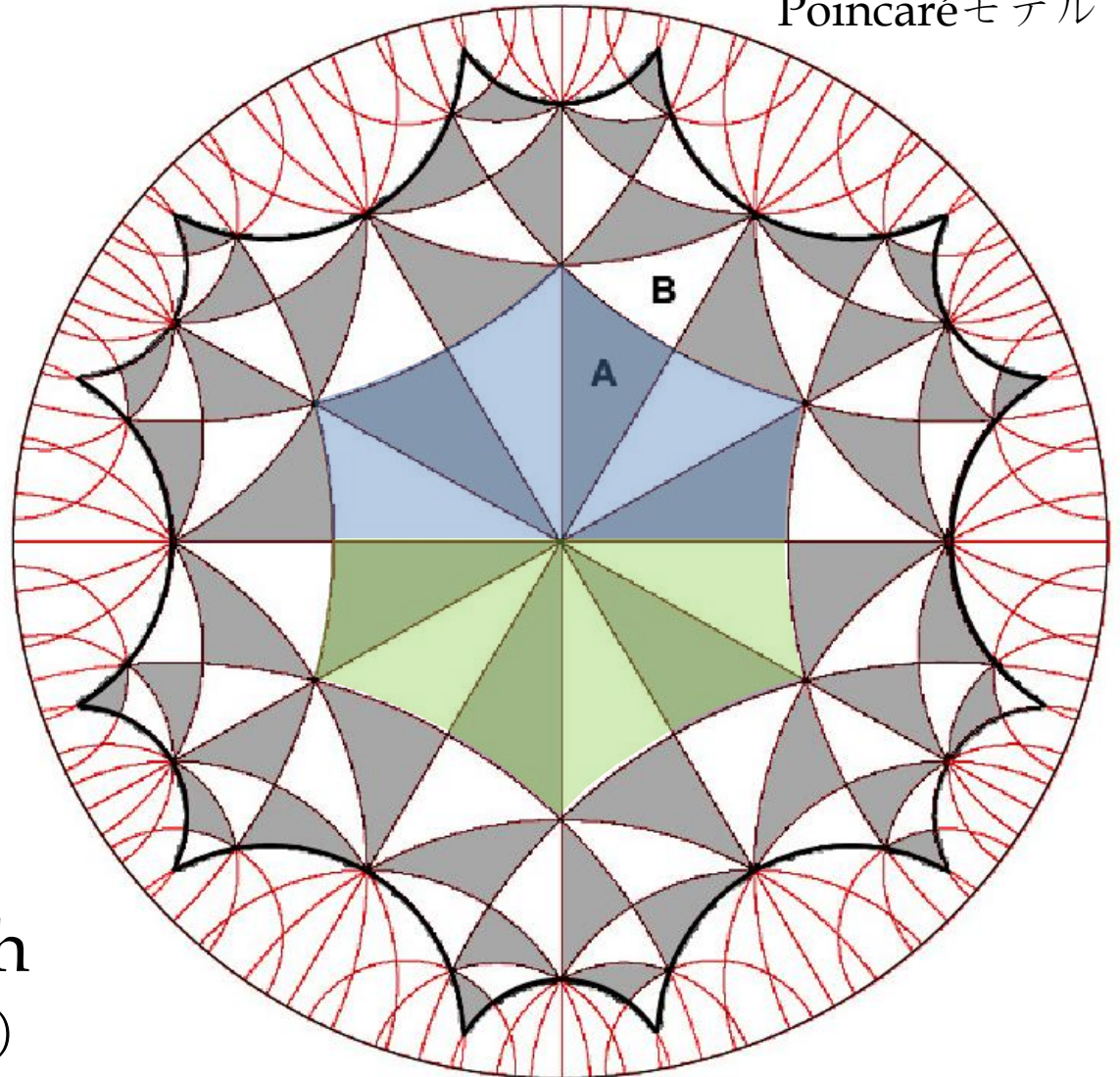
P · D · G 曲面の  
定義域なる  
Riemann面

↑ ↓ 同相写像  
(特異点以外は  
等角写像?)

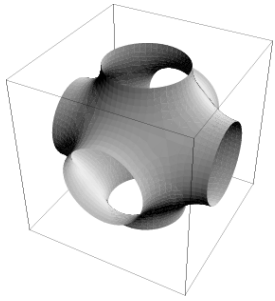
双曲平面上の  
対辺を同一視した  
十二角形(3-torus)

↑ ↓ 等角写像  
(共形変換)

Fundamental patch  
(単位胞 Unit cell)

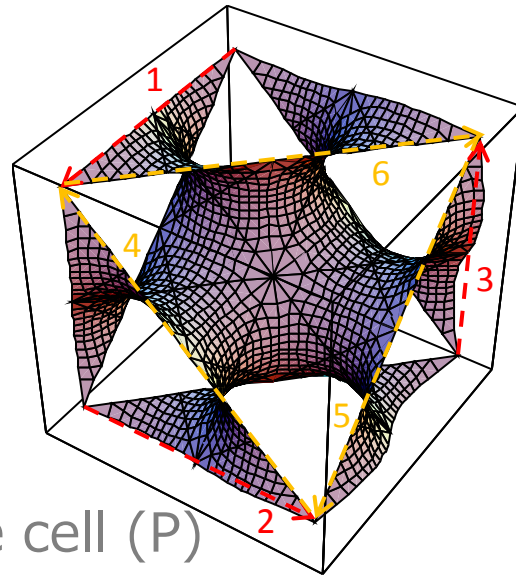


96 個の合同な(2,4,6)三角形からなる



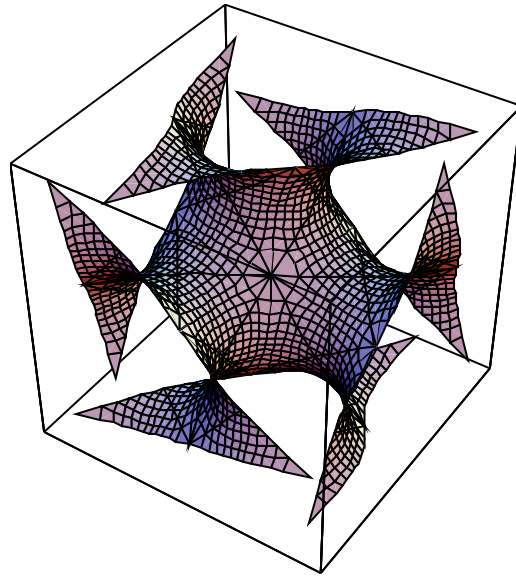
P表面

$$\alpha=0^\circ$$

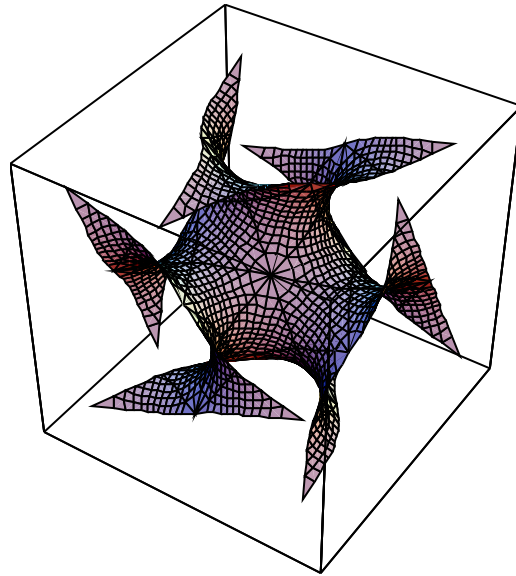


primitive cell (P)

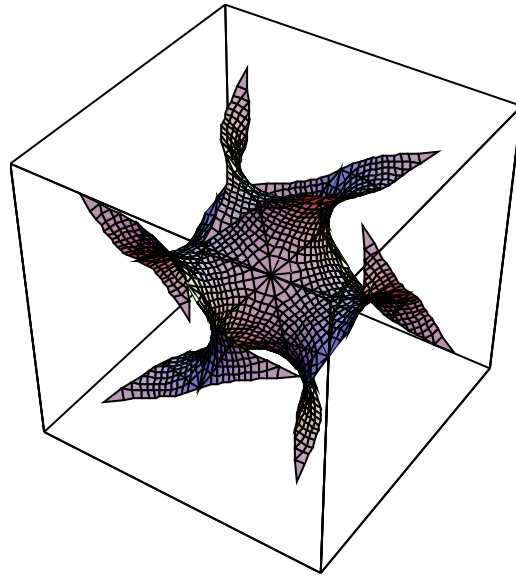
$$\alpha=9^\circ$$



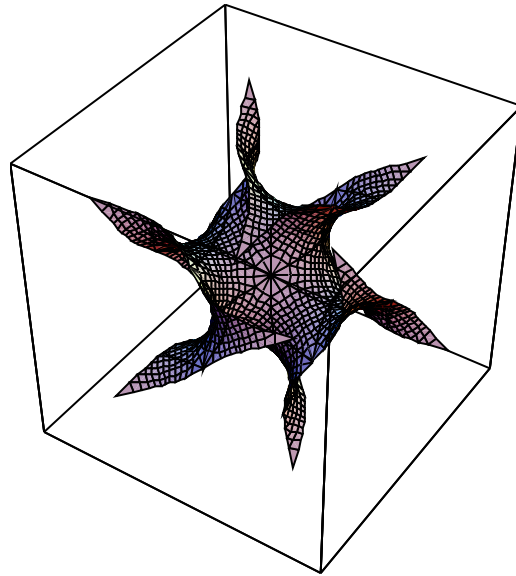
$$\alpha=18^\circ$$



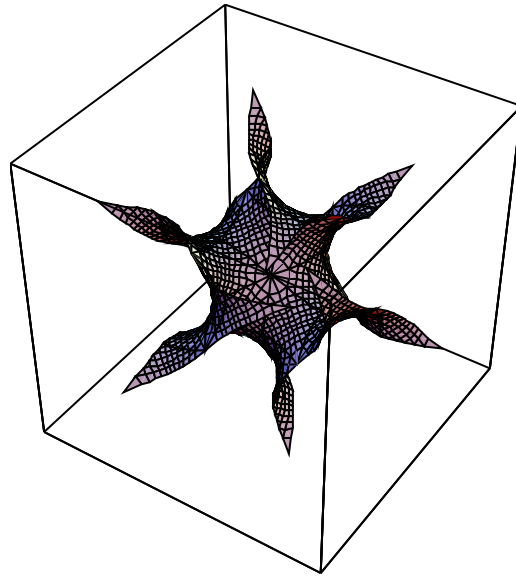
$$\alpha=27^\circ$$



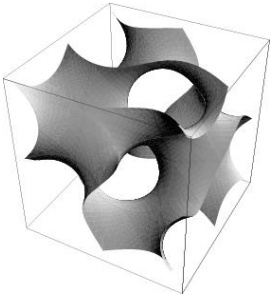
$$\alpha=36^\circ$$



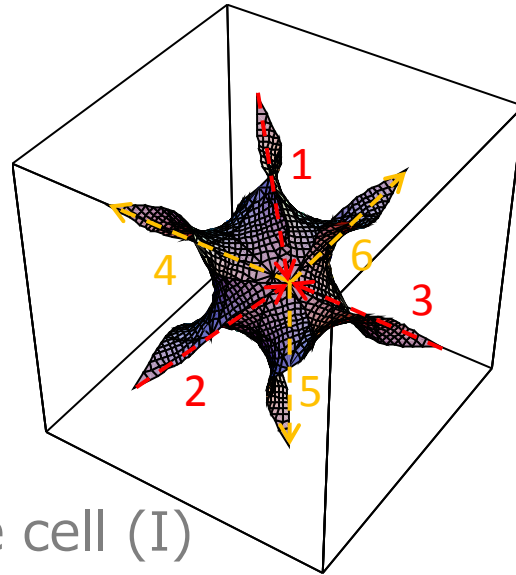
$$\alpha=45^\circ$$







G表面

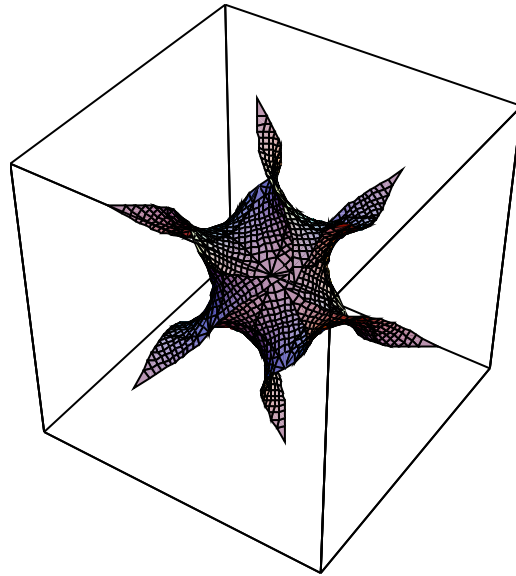


primitive cell (I)

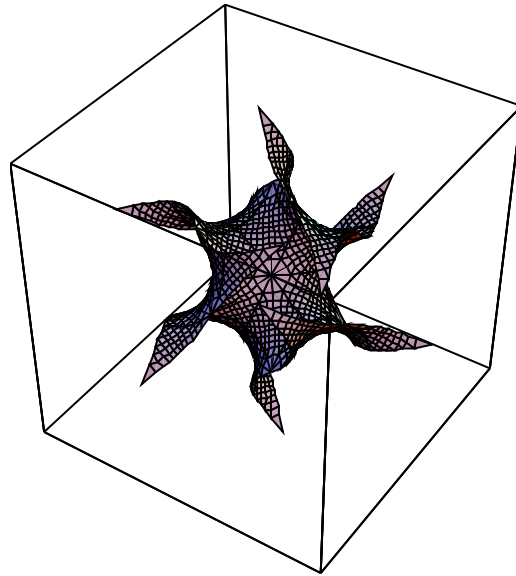
$$\alpha = 51.985^\circ$$

$$= \arctan \frac{r}{s}$$

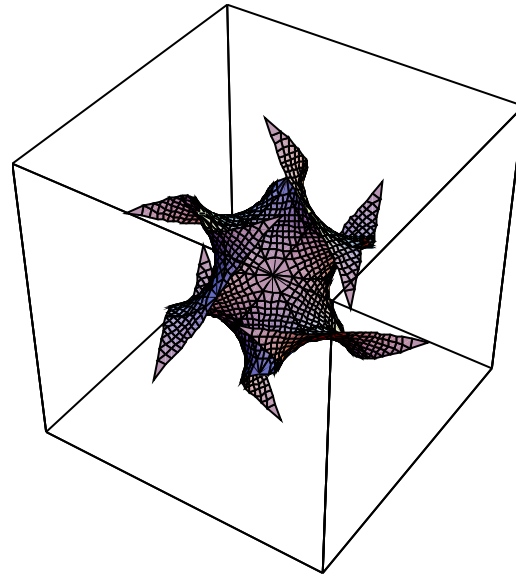
$$\alpha = 54^\circ$$



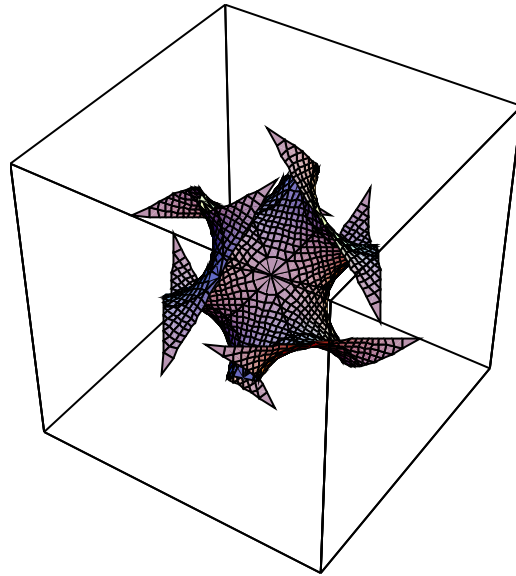
$$\alpha = 63^\circ$$

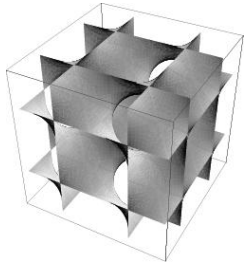


$$\alpha=72^\circ$$



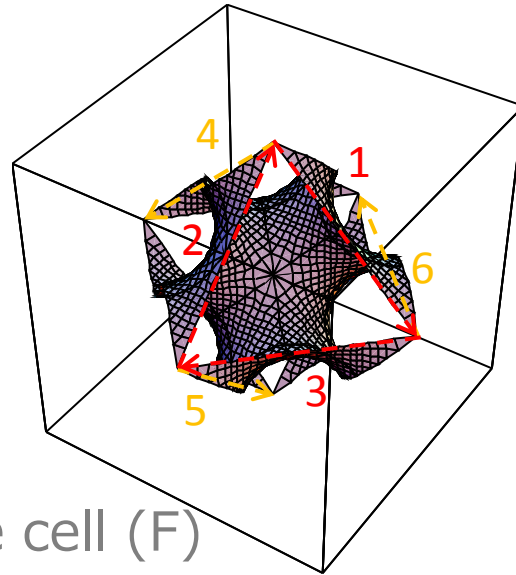
$$\alpha = 81^\circ$$



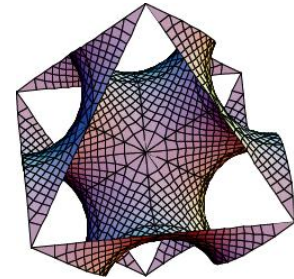
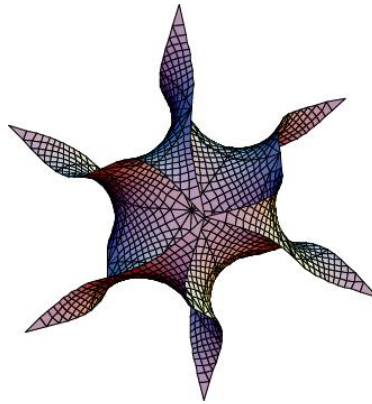
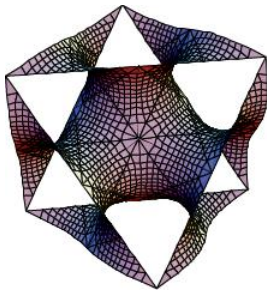
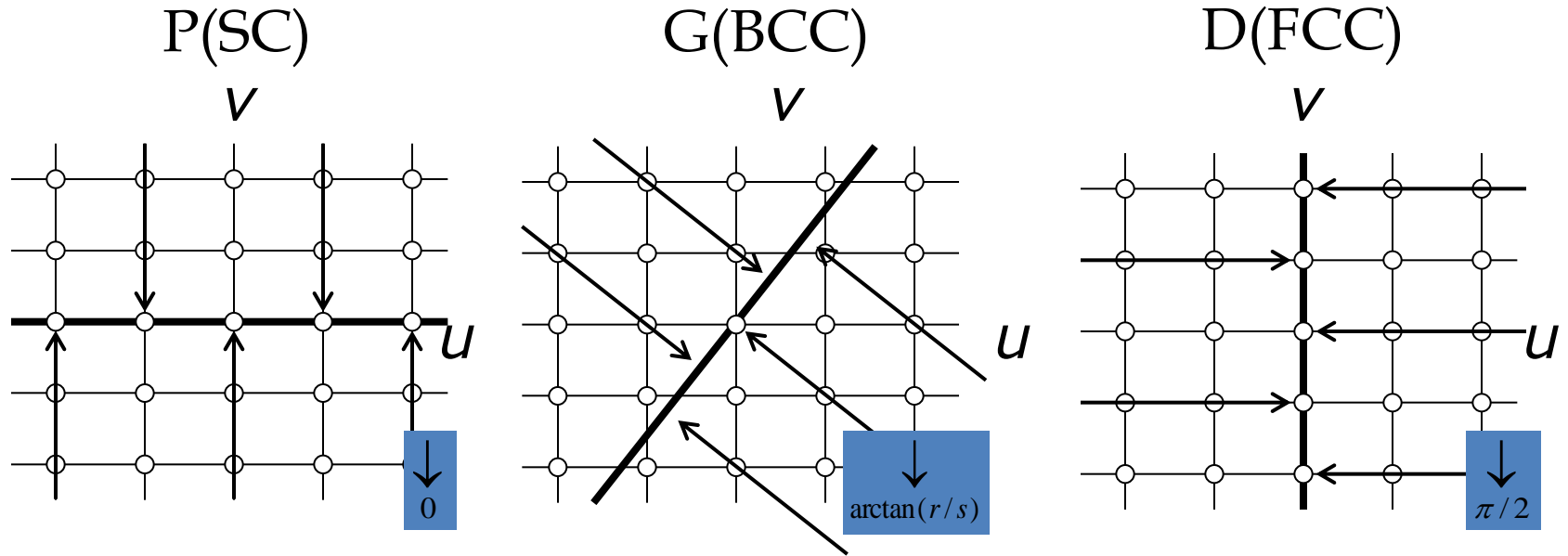


D表面

$$\alpha=90^\circ$$



primitive cell (F)



**Bonnet族**

# Bonnet変換

同一の $F(\zeta)$  に対して、一般に異なる  
Bonnet角  $\alpha$  を持つ幾つかの極小曲面が  
存在する。（極小曲面のBonnet族）



## 3. 曲面に拘束された電子

# 曲面上のSchrödinger 方程式

Jensen & Koppe, *Quantum Mechanics with Constraints*,  
Ann. Phys. 63, 586 (1971).

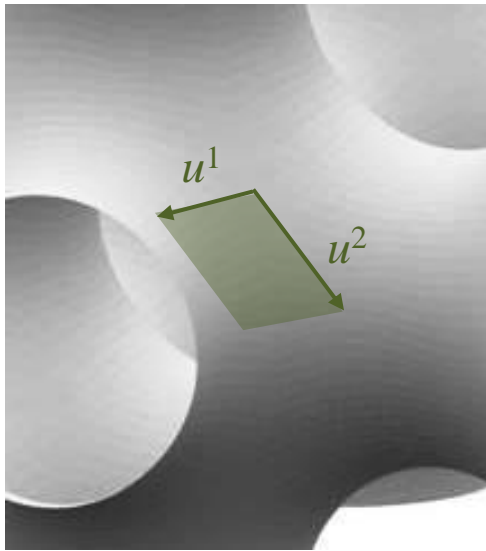
da Costa, *Quantum mechanics of a constrained particle*  
Phys. Rev. A 23, 1982 (1981)

Ikegami & Nagaoka, *Quantum Mechanics of an Electron on a Curved Interface*  
Prog. Theor. Phys. 106, 235 (1991)

Ikegami, Nagaoka, Takagi & Tanzawa, *Quantum Mechanics of a Particle on a Curved Surface – Comparison of Three Different Approaches*  
Prog. Theor. Phys. Suppl. 88, 229 (1992)

# 曲面上のSchrödinger 方程式

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\sqrt{g}} \sum_{j,k=1}^2 \frac{\partial}{\partial u^j} \sqrt{g} g^{jk} \frac{\partial}{\partial u^k} - \frac{\hbar^2}{8m} (\kappa_1 - \kappa_2)^2 \right\} \psi(u^1, u^2) = E \psi(u^1, u^2)$$

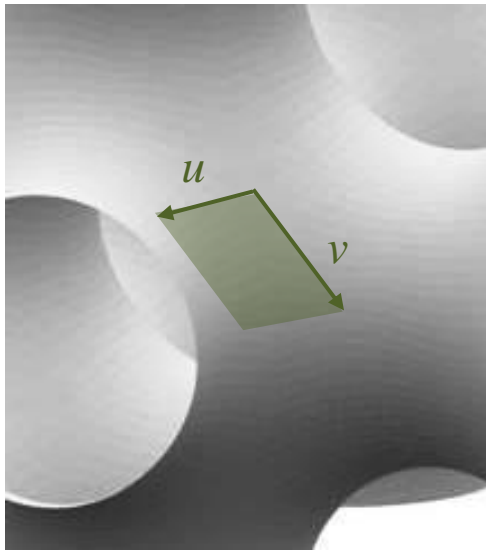


主曲率  $\kappa_1, \kappa_2$

曲面の計量  $ds^2 = g_{jk} du^j du^k$

# 曲面上のSchrödinger 方程式

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\sqrt{g}} \sum_{j,k=1}^2 \frac{\partial}{\partial u^j} \sqrt{g} g^{jk} \frac{\partial}{\partial u^k} - \frac{\hbar^2}{8m} (\kappa_1 - \kappa_2)^2 \right\} \psi(u^1, u^2) = E \psi(u^1, u^2)$$



主曲率  $\kappa_1, \kappa_2$

複素座標  $\zeta = u + iv$

**極小曲面**

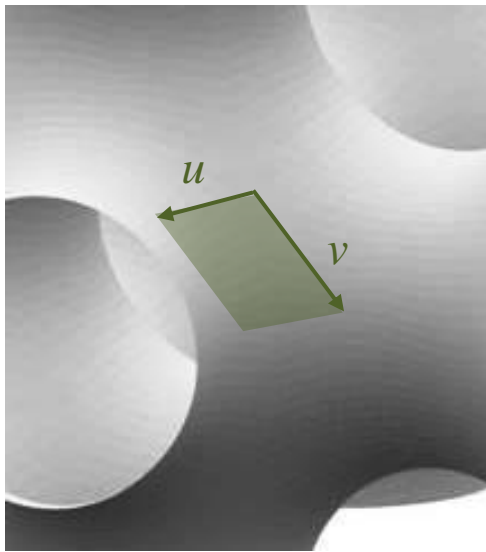
曲面の計量

$$ds^2 = \mu(\zeta) (du^2 + dv^2)$$

$$\mu(\zeta) = \ell^2 |F(\zeta)|^2 (1 + |\zeta|^2)^2$$

# 曲面上のSchrödinger 方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\mu(\zeta)} \left( \frac{\partial^2}{\partial u^2} + \frac{\partial^2}{\partial v^2} + \frac{4}{(1+|\zeta|^2)^2} \right) \psi(u, v) = E \psi(u, v)$$



主曲率  $\kappa_1, \kappa_2$

複素座標  $\zeta = u + iv$

**極小曲面**

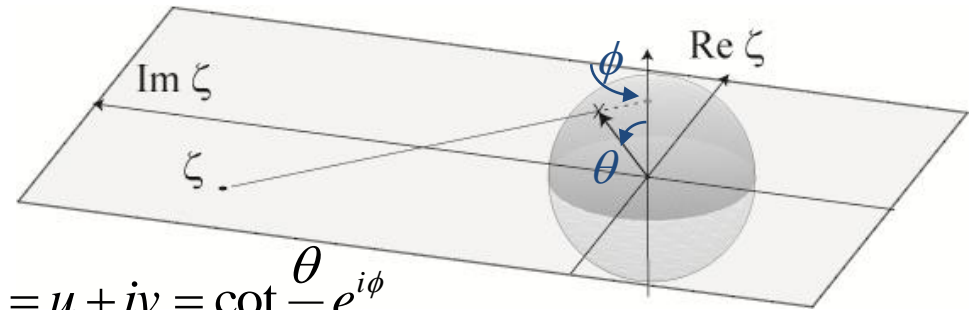
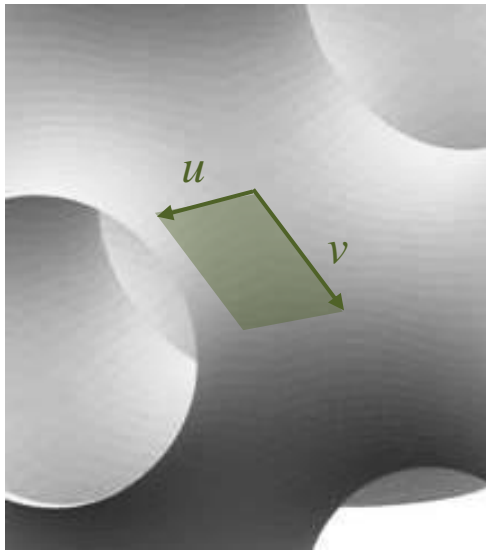
曲面の計量

$$ds^2 = \mu(\zeta) (du^2 + dv^2)$$

$$\mu(\zeta) = \ell^2 |F(\zeta)|^2 (1+|\zeta|^2)^2$$

# 曲面上のSchrödinger 方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\mu(\zeta)} \left( \frac{\partial^2}{\partial u^2} + \frac{\partial^2}{\partial v^2} + \frac{4}{(1+|\zeta|^2)^2} \right) \psi(u, v) = E \psi(u, v)$$



$$\zeta = u + iv = \cot \frac{\theta}{2} e^{i\phi}$$

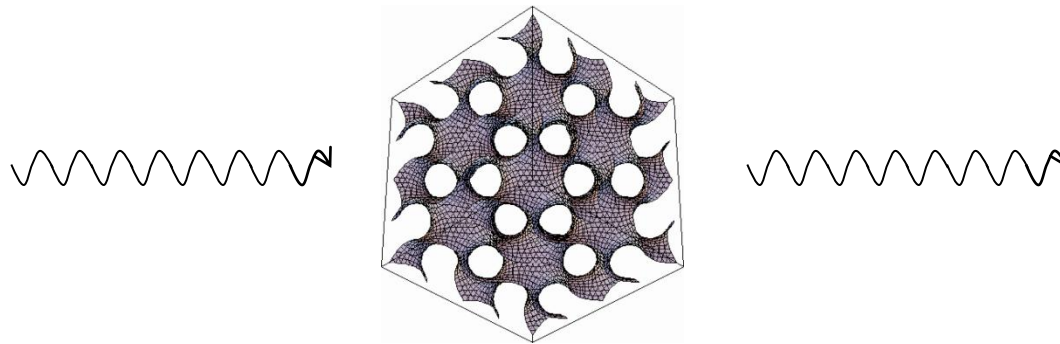
$$-\frac{(1 - \cos \theta)^4}{|F(\zeta)|^2} \left( \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + 1 \right) \psi(\theta, \phi) = \varepsilon \psi(\theta, \phi)$$

$$\varepsilon = \frac{8m\ell^2 E}{\hbar^2}$$

Aoki, Koshino, Takeda, Morise & Kuroki, *Electronic structure of periodic curved surfaces: Topological band structure*, Phys. Rev. B 65, 035102 (2001).

# 曲面上に拘束された電子

曲率・対称性・トポロジーが電子波の伝播と干渉を規定し、定常波(共鳴状態)を決定する



幾何学的に制御された電子構造(スペクトル)

*“Can one hear the shape of a drum ?”*

Marc Kac, Am. Math. Mon. 73, 1-23 (1966).

## 4. Bonnet族とバンド構造



# 結晶のバンド構造

固体電子論におけるブロッホの定理  
(Bloch's theorem)

## 周期ポテンシャル中の電子

$$\hat{H} \Psi = E \Psi$$

但し、 $\hat{H}$ はハミルトニアン演算子

$$\forall \vec{R} \in \Lambda \text{ に対して、 } T_{\vec{R}} \hat{H} = \hat{H} T_{\vec{R}}$$



## 固有関数系・固有値 (ブロッホ関数)

$$T_{\vec{R}} \Psi_{\vec{k}} = e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \Psi_{\vec{k}} \quad (\forall \vec{R} \in \Lambda)$$

$$E = E(\vec{k}) \quad (\text{バンド構造})$$

**並進対称群の1次元表現**

$\vec{k}$ 、及び、 $\vec{k} + \vec{G}$  ( $\forall \vec{G} \in \Lambda^*$ ) は同一の表現を与える。

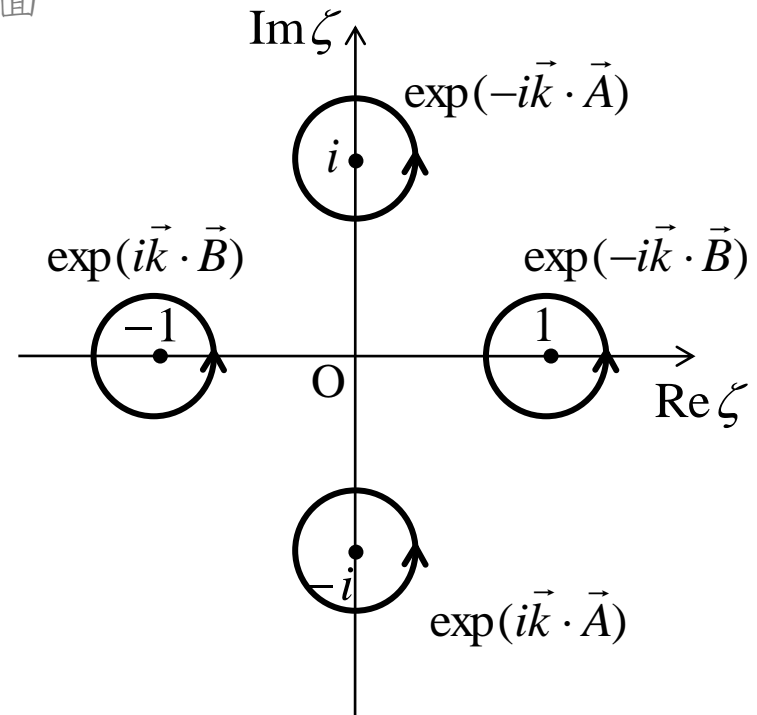
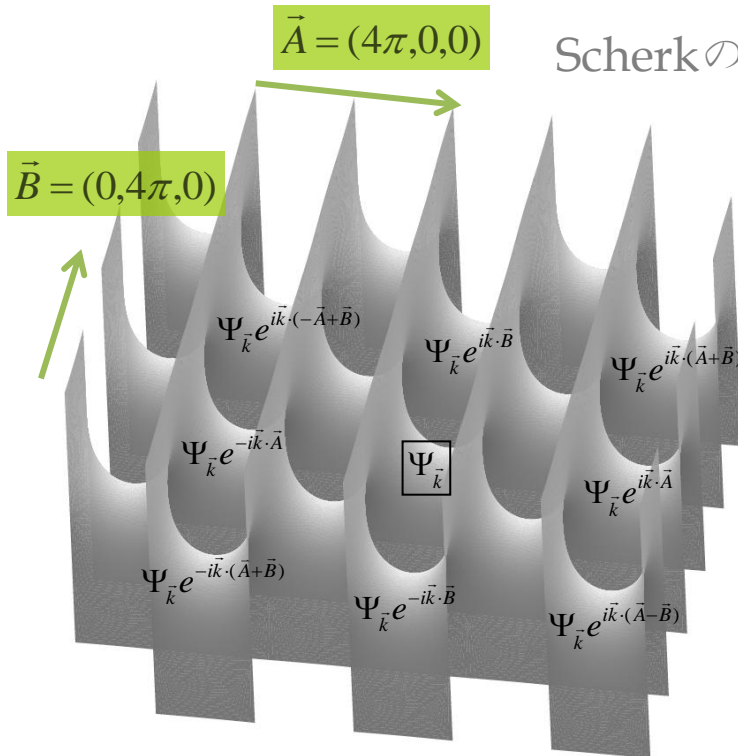
$$\therefore E(\vec{k} + \vec{G}) = E(\vec{k})$$

# 周期的極小曲面の場合 (Riemann面上)

$$-\frac{(1-\cos\theta)^4}{|F(\zeta)|^2} \left( \frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \cot\theta \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + 1 \right) \psi(\theta, \phi) = \varepsilon \psi(\theta, \phi)$$

➡  $\varepsilon = \varepsilon(\vec{k})$

バンド構造

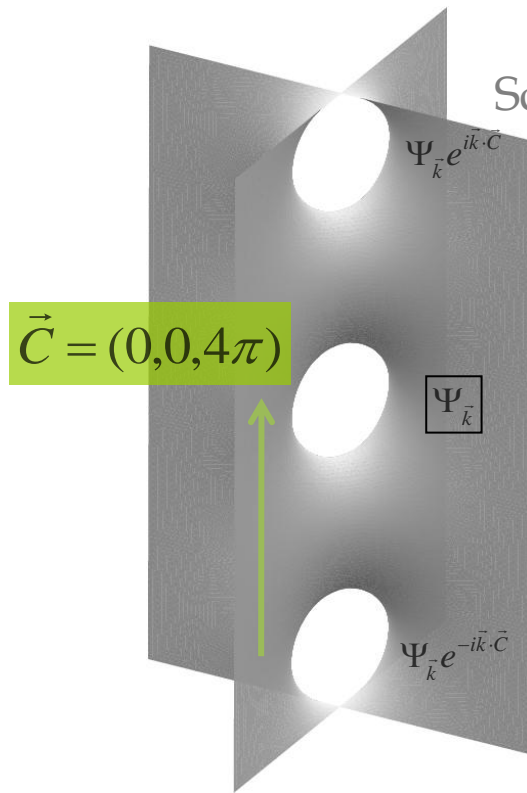


# 周期的極小曲面の場合 (Riemann面上)

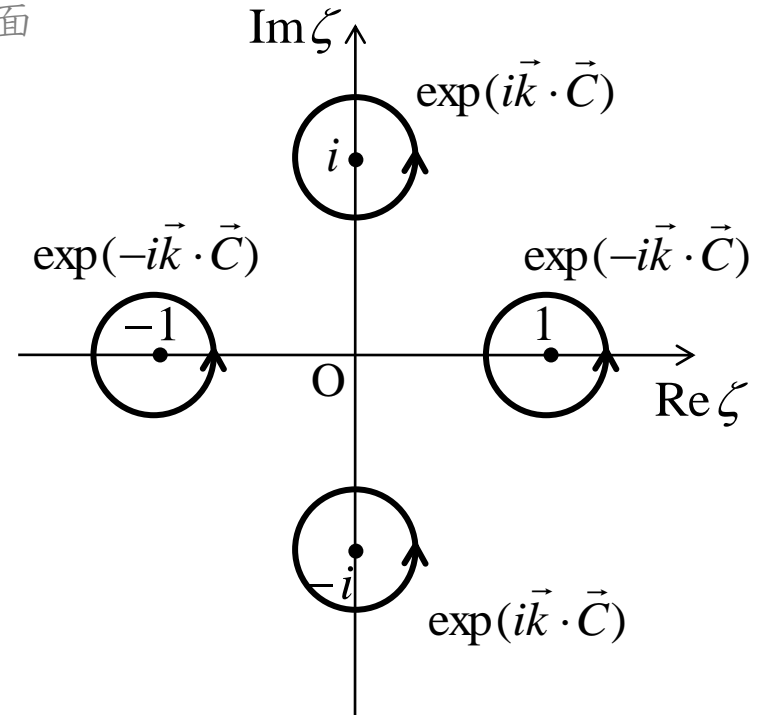
$$-\frac{(1-\cos\theta)^4}{|F(\zeta)|^2} \left( \frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \cot\theta \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + 1 \right) \psi(\theta, \phi) = \varepsilon \psi(\theta, \phi)$$

➡  $\varepsilon = \varepsilon(\vec{k})$

バンド構造



Scherkの第2曲面

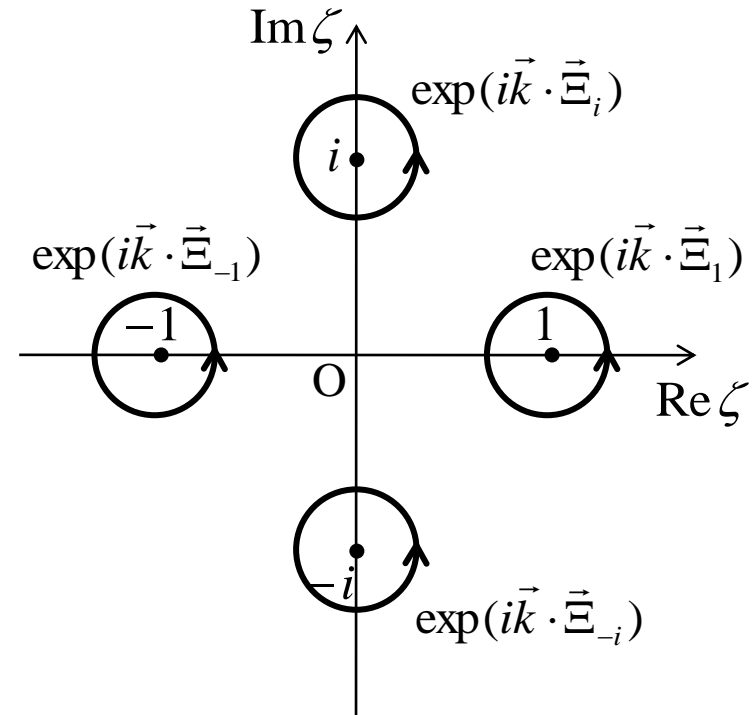
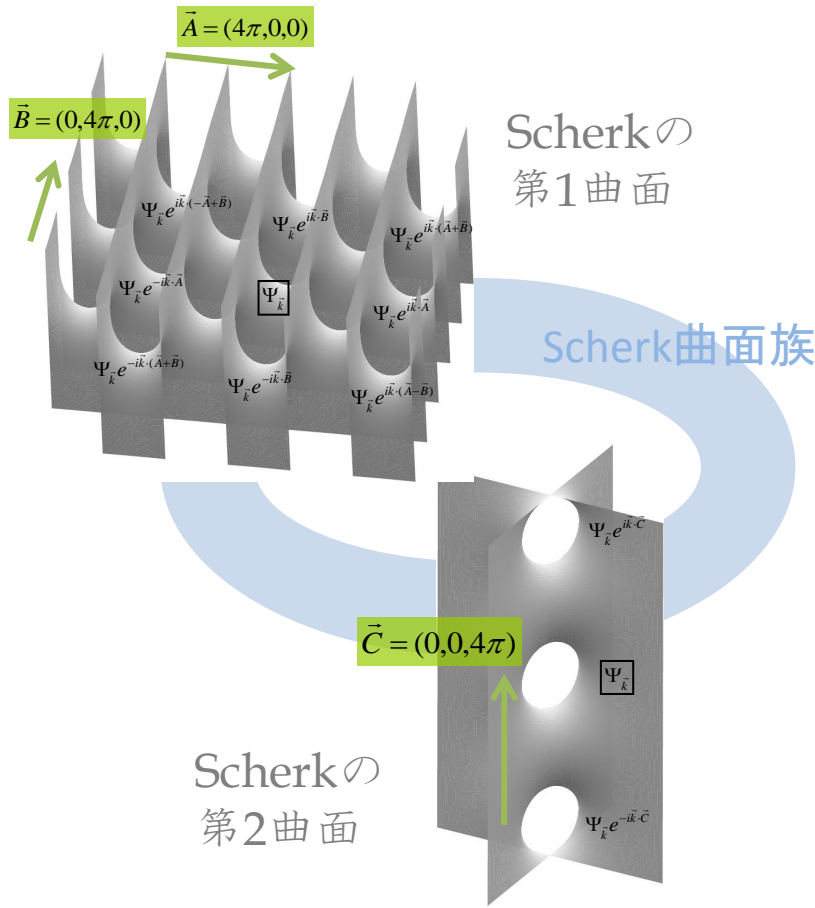


# 周期的極小曲面の場合 (Riemann面上)

$$-\frac{(1-\cos\theta)^4}{|F(\zeta)|^2} \left( \frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \cot\theta \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + 1 \right) \psi(\theta, \phi) = \varepsilon \psi(\theta, \phi)$$

→  $\varepsilon = \varepsilon(\vec{k})$

バンド構造



## 周期的極小曲面のバンド構造

$$-\frac{(1-\cos\theta)^4}{|F(\zeta)|^2} \left( \frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \cot\theta \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + 1 \right) \psi(\theta, \phi) = \varepsilon\psi(\theta, \phi)$$

Riemann面上の  
閉曲線に対する  
WE積分

$$\vec{\Xi}_j \in \mathbb{R}^6 \quad \rightarrow \quad \exp(i\vec{k} \cdot \vec{\Xi}_j)$$

Bloch位相

 Schrödinger eq.

Bonnet族の  
バンド構造

$$E(\vec{k})$$

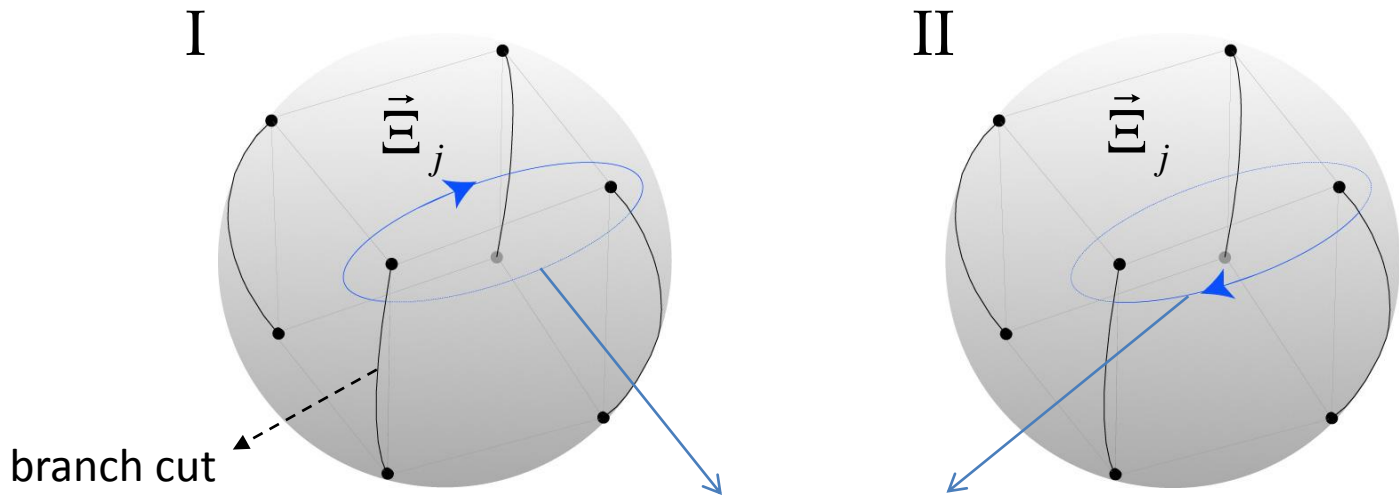
個別曲面の  
バンド構造

$$E(\vec{k}^{(\alpha)})$$



# P · D · G 曲面の場合

## Riemann面上の基本閉曲線に対する位相の回転



$$\exp(i\vec{k} \cdot \vec{\Xi}_j)$$

但し、 $\vec{k}, \vec{\Xi}_j \in \mathbb{R}^6$  ( $\leftarrow \mathbb{C}^3$ )

Bonnet族の  
バンド構造  $\varepsilon(\vec{k})$

## 基本格子ベクトル

$$\begin{aligned}\vec{\Xi}_1 &= (r, 0, 0, 0, s, -s), & \vec{\Xi}_4 &= (0, -r, r, 0, -s, -s) \\ \vec{\Xi}_2 &= (0, r, 0, -s, 0, s), & \vec{\Xi}_5 &= (r, 0, -r, -s, 0, -s) \\ \vec{\Xi}_3 &= (0, 0, r, s, -s, 0), & \vec{\Xi}_6 &= (-r, r, 0, -s, -s, 0)\end{aligned}$$

実空間 $\mathbb{R}^6(\mathbb{C}^3)$   
における  
並進対称群 $\Lambda_6$   
を生成

## 基本逆格子ベクトル

$$\vec{Q}_i \cdot \vec{\Xi}_j = 2\pi\delta_{ij} \Leftrightarrow$$

$$\begin{aligned}\vec{Q}_1 &= \pi(0, \bar{r}, \bar{r}, 0, \bar{s}, -\bar{s}), & \vec{Q}_4 &= \pi(0, -\bar{r}, \bar{r}, -\bar{s}, 0, 0) \\ \vec{Q}_2 &= \pi(\bar{r}, 0, \bar{r}, -\bar{s}, 0, \bar{s}), & \vec{Q}_5 &= \pi(\bar{r}, 0, -\bar{r}, 0, -\bar{s}, 0) \\ \vec{Q}_3 &= \pi(\bar{r}, \bar{r}, 0, \bar{s}, -\bar{s}, 0), & \vec{Q}_6 &= \pi(-\bar{r}, \bar{r}, 0, 0, 0, -\bar{s})\end{aligned}$$

逆格子空間 $\mathbb{R}^6(\mathbb{C}^3)$ における  
並進対称群 $\Lambda_6^*$ を生成

$$\therefore \exp(i\vec{Q}_i \cdot \vec{\Xi}_j) = 1$$

但し、 $\bar{r} = 1/r, \bar{s} = 1/s$

バンド構造  $\varepsilon(\vec{k})$  は、 $\Lambda_6^*$ -周期関数

$$\varepsilon(\vec{k} + \vec{G}) = \varepsilon(\vec{k}), \quad \forall \vec{G} \in \Lambda_6^*$$



## 基本逆格子ベクトル

逆格子空間  $\mathbb{R}^6(\mathbb{C}^3)$  における  
並進対称群  $\Lambda_6^*$  を生成

$$\vec{Q}_i \cdot \vec{\Xi}_j = 2\pi\delta_{ij} \Leftrightarrow$$

$$\vec{Q}_1 = \pi(0, \bar{r}, \bar{r}, 0, \bar{s}, -\bar{s}), \quad \vec{Q}_4 = \pi(0, -\bar{r}, \bar{r}, -\bar{s}, 0, 0)$$

$$\vec{Q}_2 = \pi(\bar{r}, 0, \bar{r}, -\bar{s}, 0, \bar{s}), \quad \vec{Q}_5 = \pi(\bar{r}, 0, -\bar{r}, 0, -\bar{s}, 0)$$

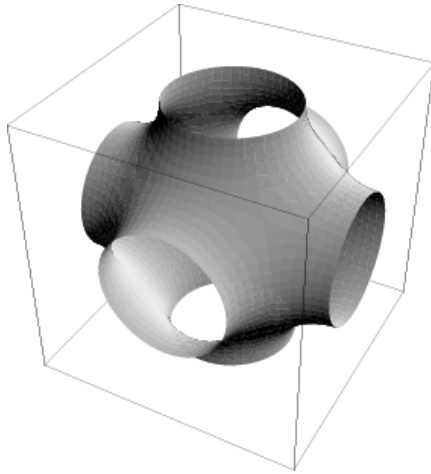
$$\vec{Q}_3 = \pi(\bar{r}, \bar{r}, 0, \bar{s}, -\bar{s}, 0), \quad \vec{Q}_6 = \pi(-\bar{r}, \bar{r}, 0, 0, 0, -\bar{s})$$

$$\therefore \exp(i\vec{Q}_i \cdot \vec{\Xi}_j) = 1$$

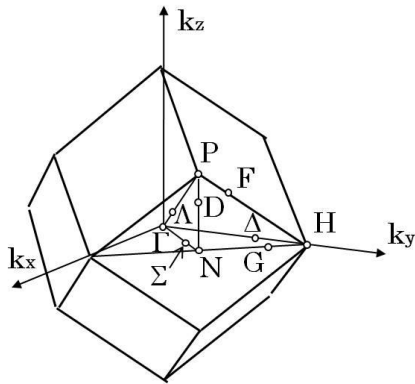
但し、 $\bar{r} = 1/r, \bar{s} = 1/s$



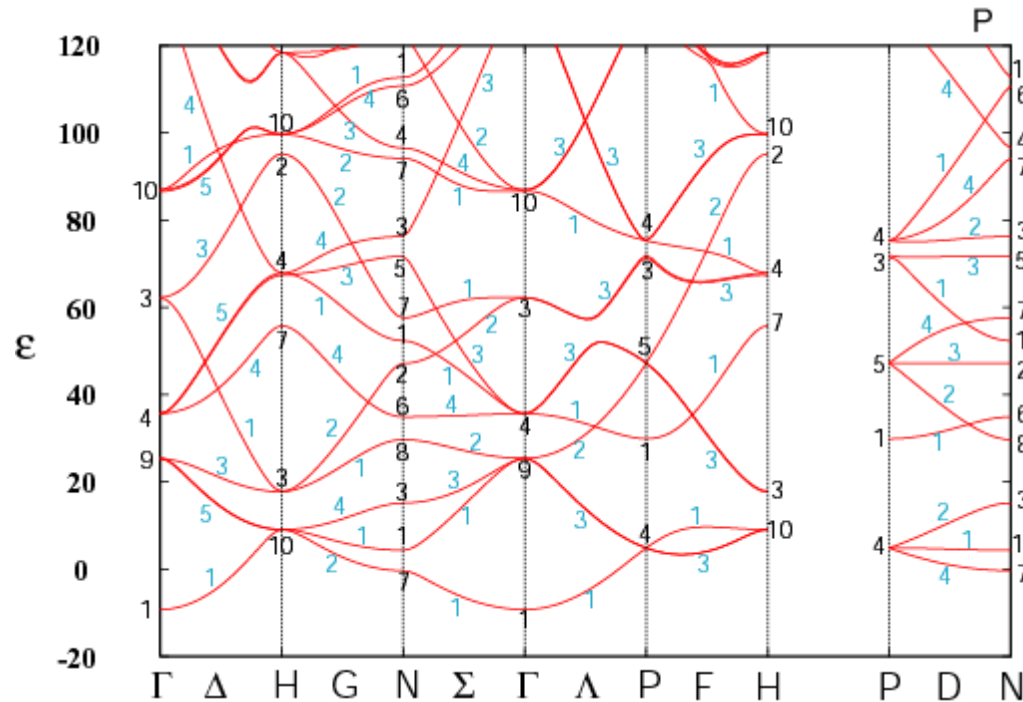
# P表面のバンド構造 $\varepsilon(\vec{k} \in \mathbb{E}_P)$



$Im3m / Pm3m$



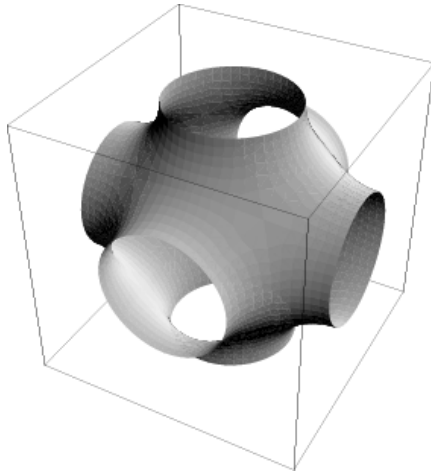
体心立方格子



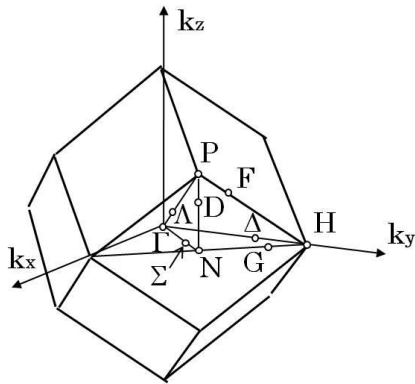
各エネルギー準位に付記されている数字は、当該波数における空間群の既約表現の番号

J. Zak et al, "The Irreducible Representations of Space Groups" (Benjamin, New York, 1969)

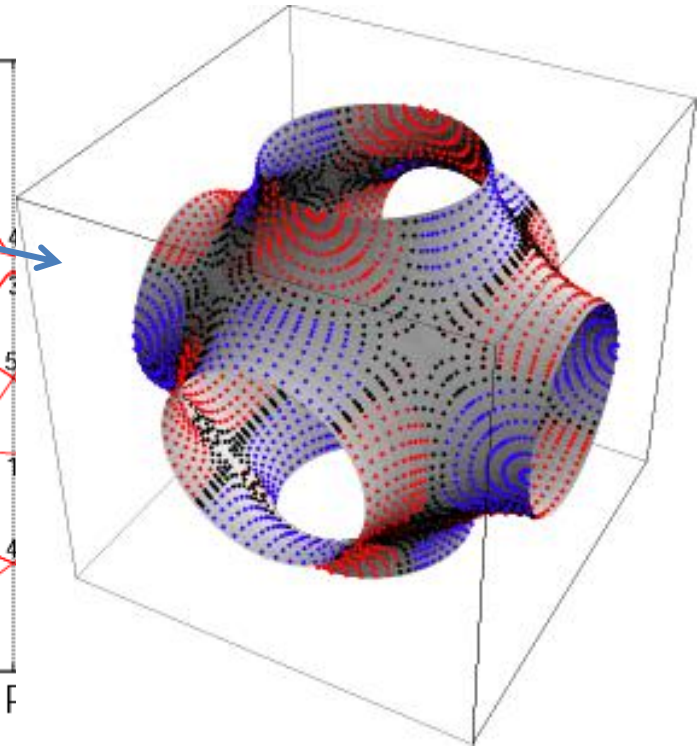
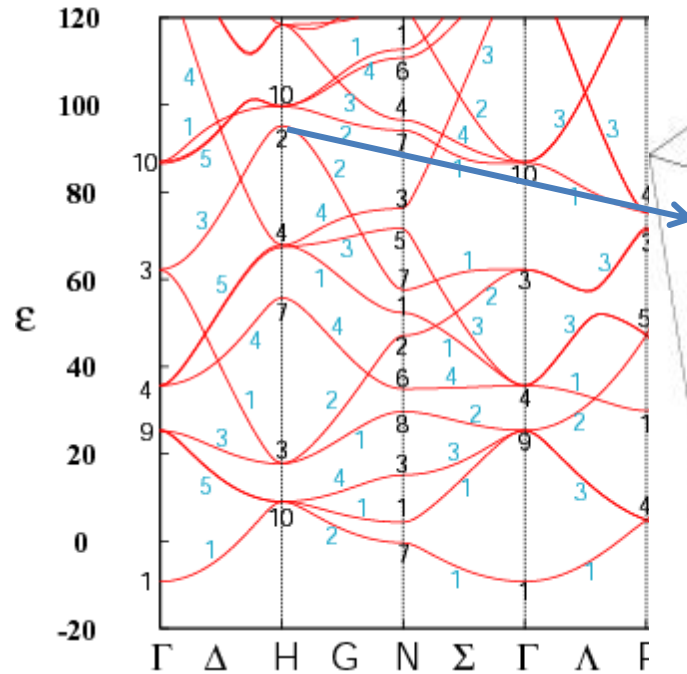
# P表面のバンド構造 $\varepsilon(\vec{k} \in \mathbb{E}_P)$



$Im\bar{3}m / Pm\bar{3}m$



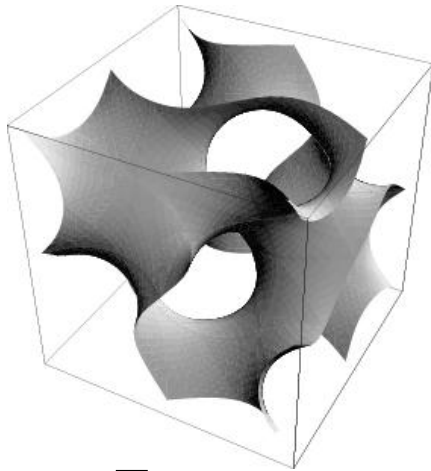
体心立方格子



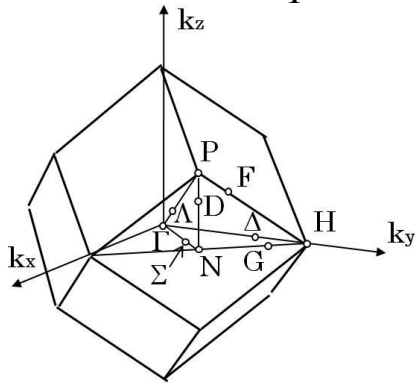
各エネルギー準位に付記されている数字は、当該波数における空間群の既約表現の番号

J. Zak et al, "The Irreducible Representations of Space Groups" (Benjamin, New York, 1969)

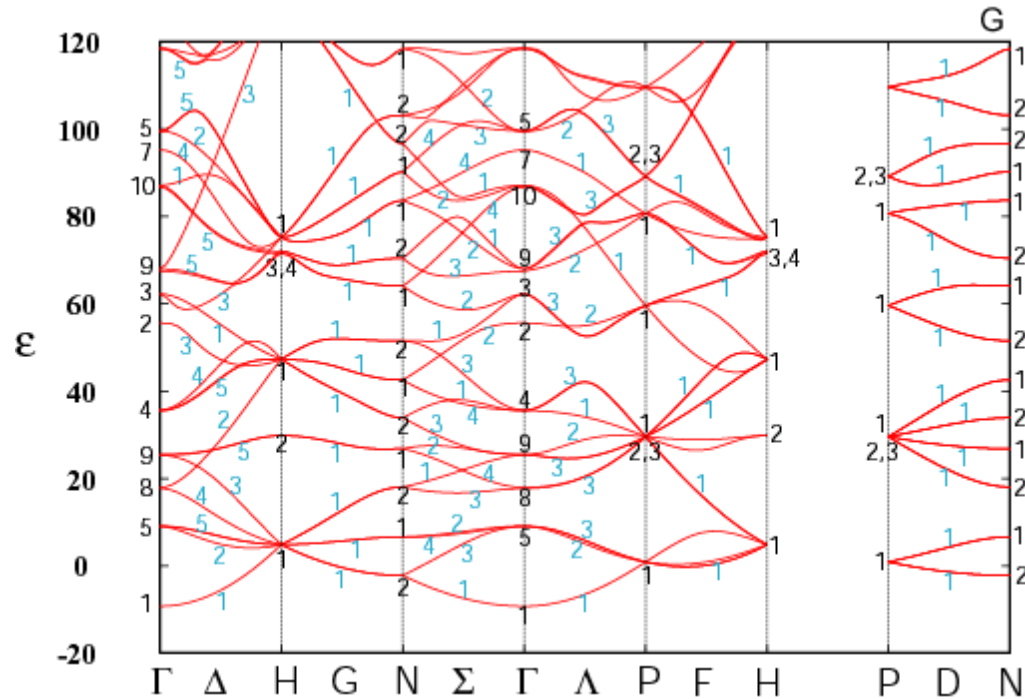
# G表面のバンド構造 $\varepsilon(\vec{k} \in \mathbb{E}_G)$



$Ia\bar{3}d / I4_132$



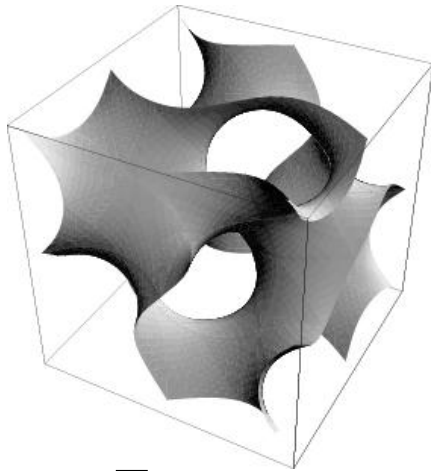
体心立方格子



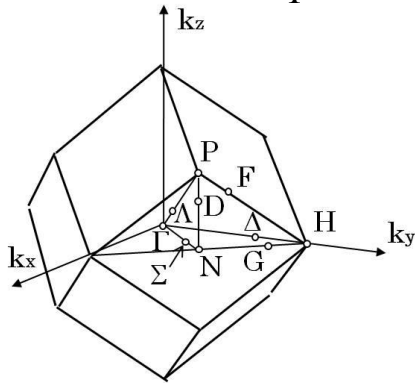
各エネルギー準位に付記されている数字は、当該波数における空間群の既約表現の番号

J. Zak et al, "The Irreducible Representations of Space Groups" (Benjamin, New York, 1969)

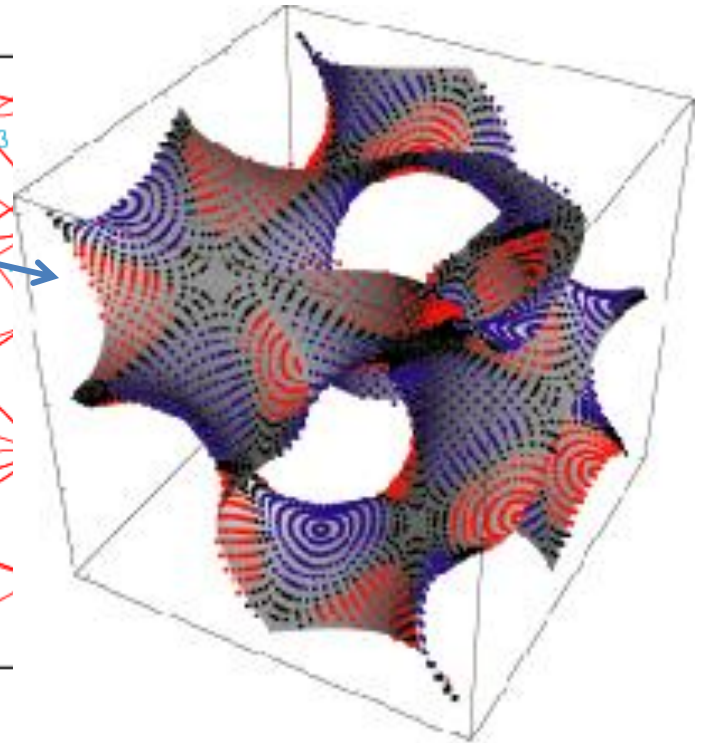
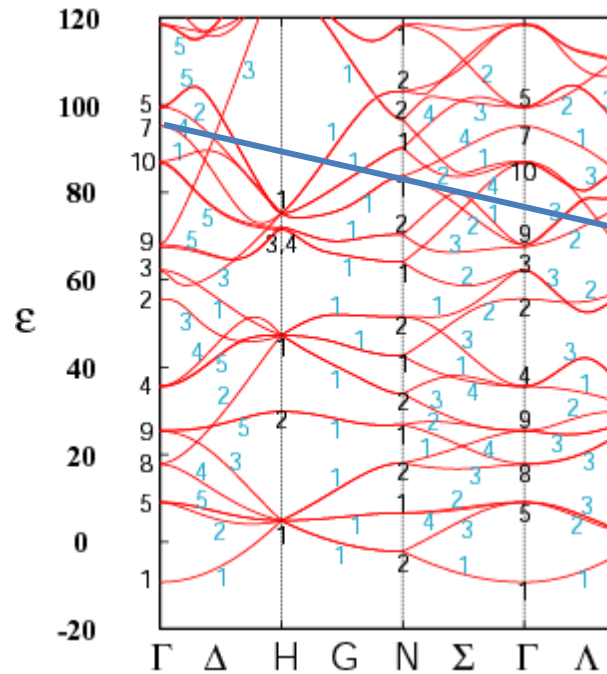
# G表面のバンド構造 $\varepsilon(\vec{k} \in \mathbb{E}_G)$



$Ia\bar{3}d / I4_132$



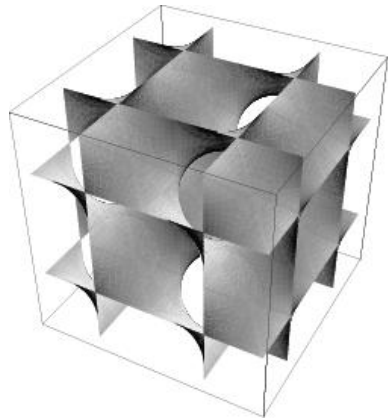
体心立方格子



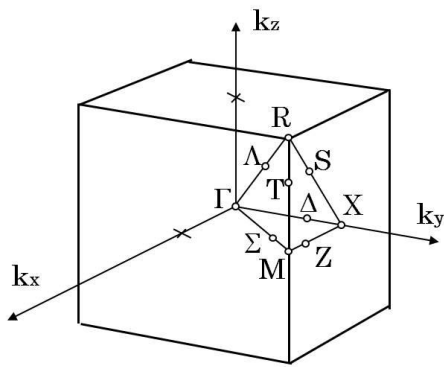
各エネルギー準位に付記されている数字は、当該波数における空間群の既約表現の番号

J. Zak et al, "The Irreducible Representations of Space Groups" (Benjamin, New York, 1969)

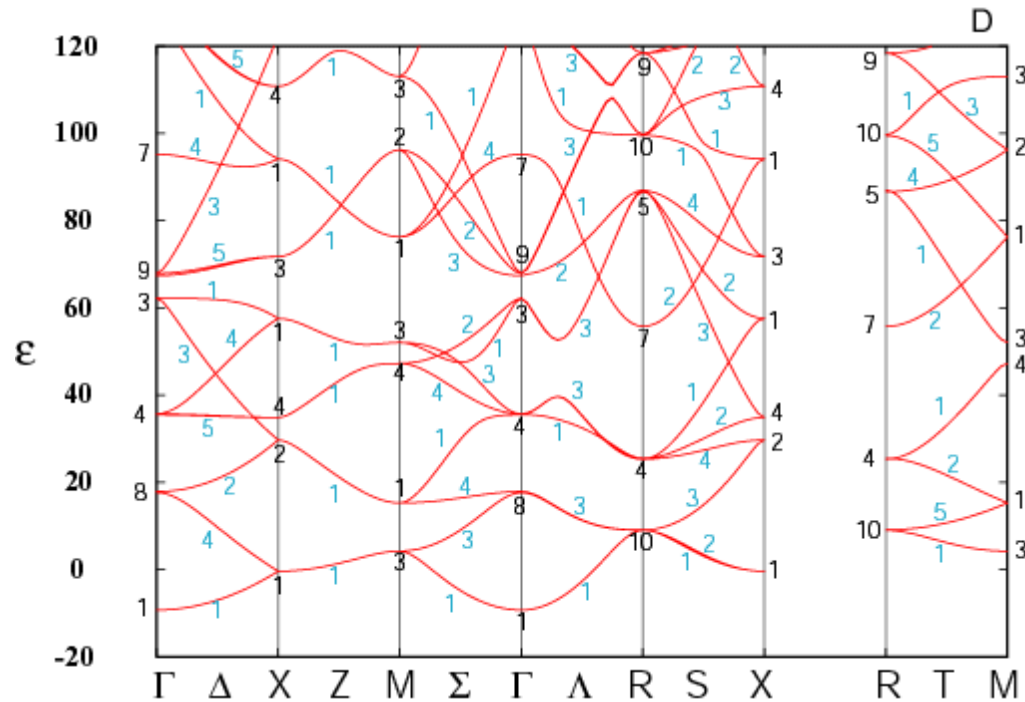
# D表面のバンド構造 $\varepsilon(\vec{k} \in \mathbb{E}_D)$



$Pn\bar{3}m / Fd\bar{3}m$



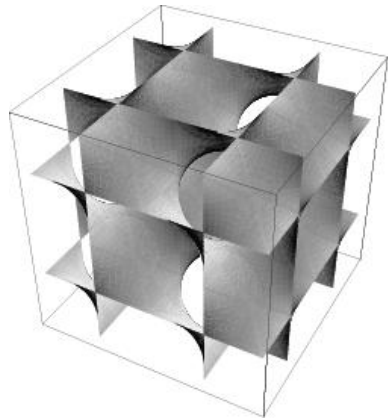
単純立方格子



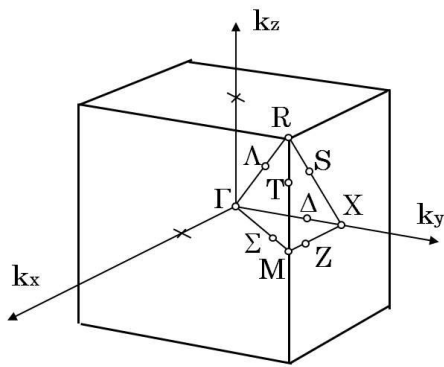
各エネルギー準位に付記されている数字は、当該波数における空間群の既約表現の番号

J. Zak et al, "The Irreducible Representations of Space Groups" (Benjamin, New York, 1969)

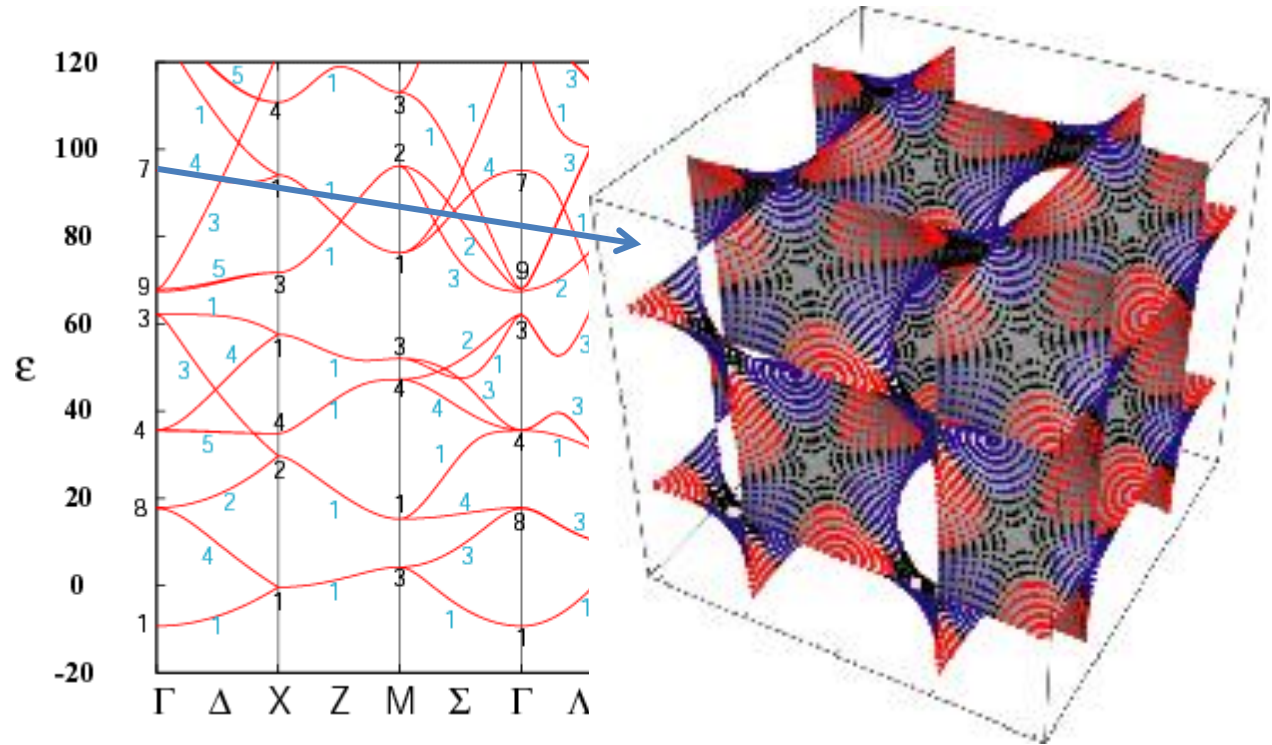
# D表面のバンド構造 $\varepsilon(\vec{k} \in \mathbb{E}_D)$



$Pn\bar{3}m / Fd\bar{3}m$



単純立方格子

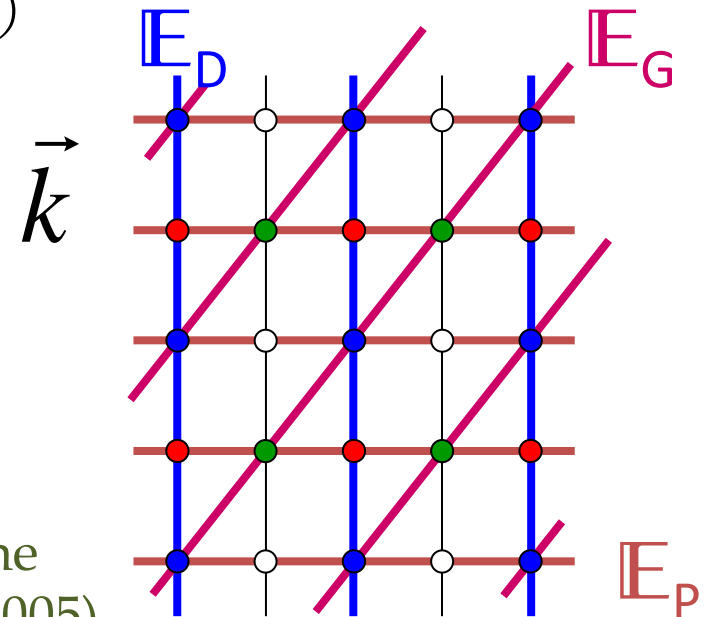


各エネルギー準位に付記されている数字は、当該波数における空間群の既約表現の番号

J. Zak et al, "The Irreducible Representations of Space Groups" (Benjamin, New York, 1969)

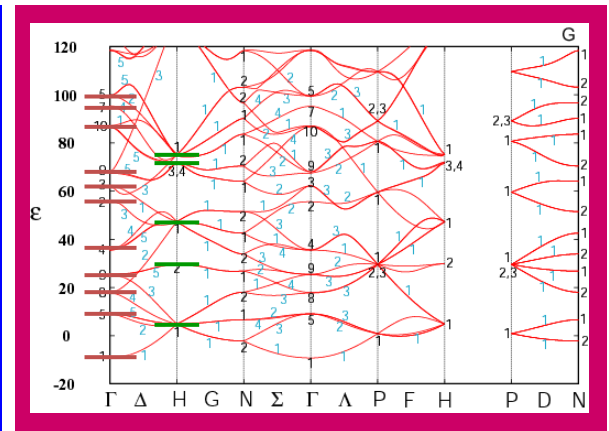
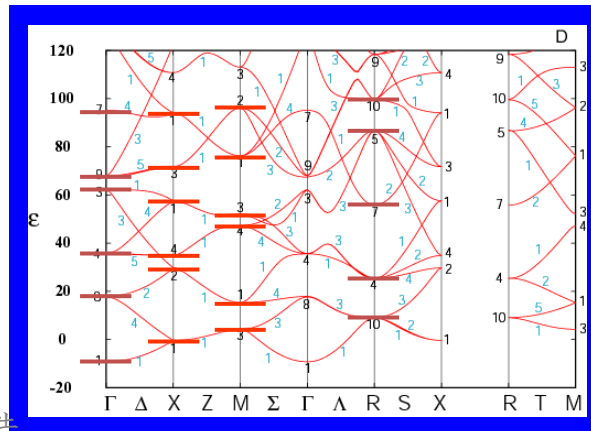
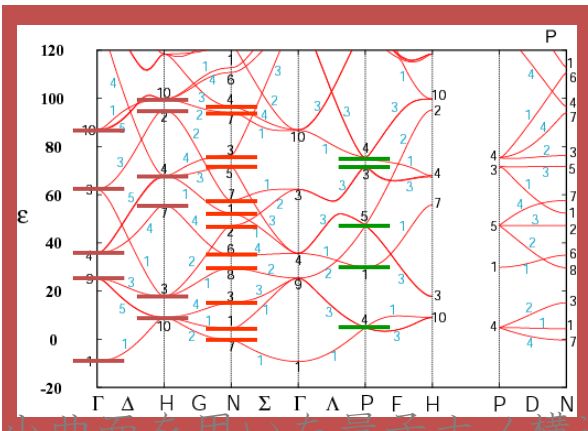
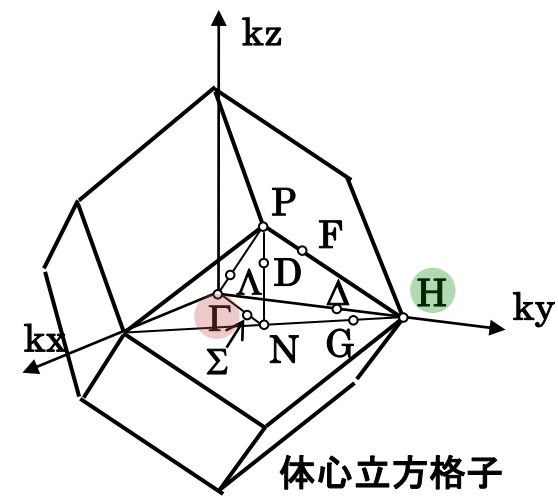
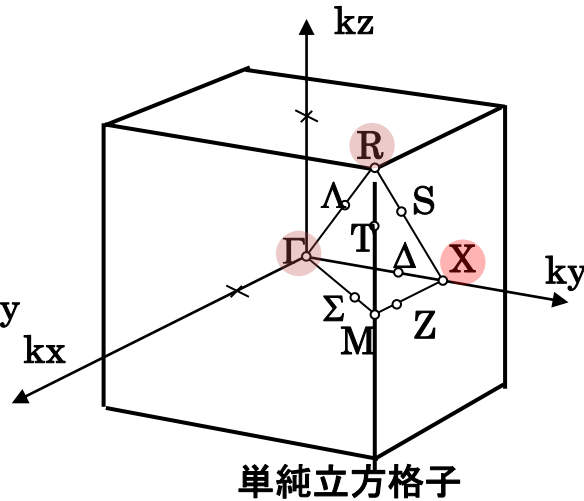
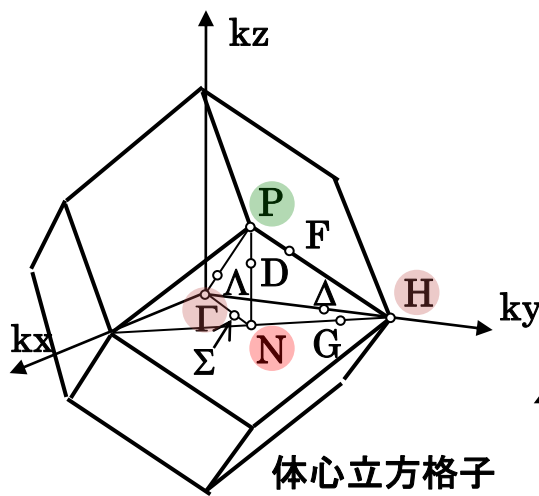
二つの曲面  $X, Y$  に対して  $\vec{k}_X + \vec{G} = \vec{k}_Y, \exists \vec{G} \in \Lambda_6^*$   
 を満たす波数  $\vec{k}_X, \vec{k}_Y$  における位相の回転は等価

エネルギー固有値  $\varepsilon(\vec{k}_X)$  と  $\varepsilon(\vec{k}_Y)$  は厳密に一致  
 $\Leftrightarrow$  バンド構造  $\varepsilon(\vec{k})$  において二つの部分空間上の  
 断面が交差する (バンド交差)



N. Fujita and O. Terasaki, "Band structure of the P, D, and G surfaces" *Phys. Rev. B* 72, 085459 (2005).

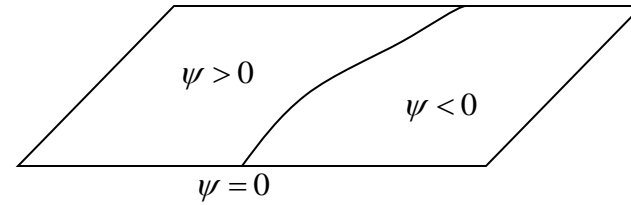
バンド交差	P曲面 Pm3m(Im3m)	D曲面 Fd3m(Pn3m)	G曲面 I4 <sub>1</sub> 32(Ia3d)
I	$\Gamma^1 (\Gamma^1, H^1)$	$\Gamma^1 (\Gamma^1, R^1)$	$\Gamma^1$
II	$M^3 (N^6)$	$X^3 (M^3, X^3)$	—
III	$R^1 (P^2)$	—	$H^1$



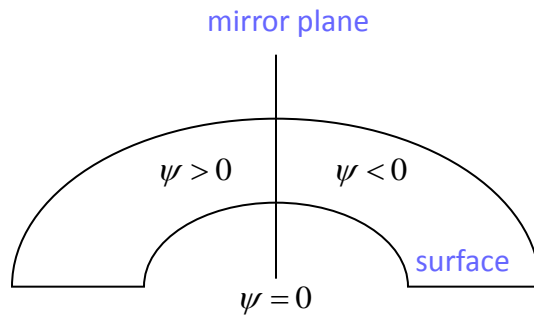


# 5. 波動関数の対称性と ノード線

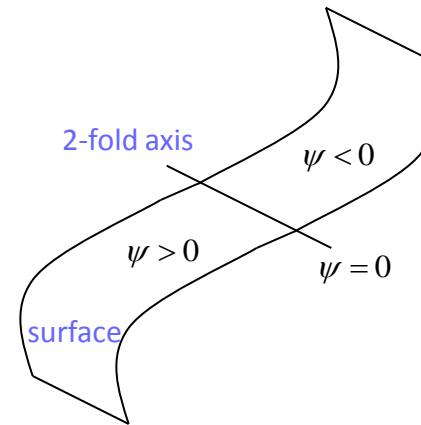
# ノード線



曲面上の曲線を不変に保つ対称操作に対して既約表現が奇ならば、ノード線が存在する

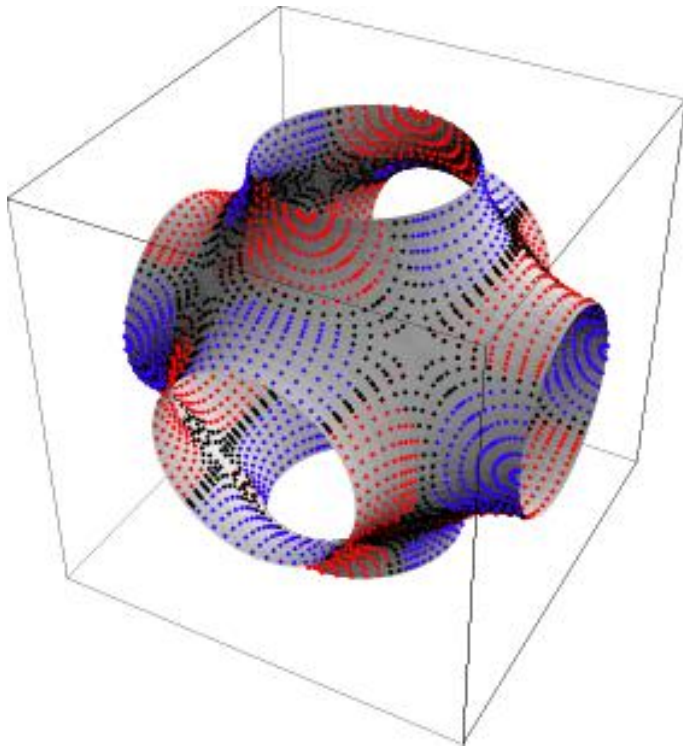


曲面と垂直交差する鏡映面



曲面上の二回軸

# P表面

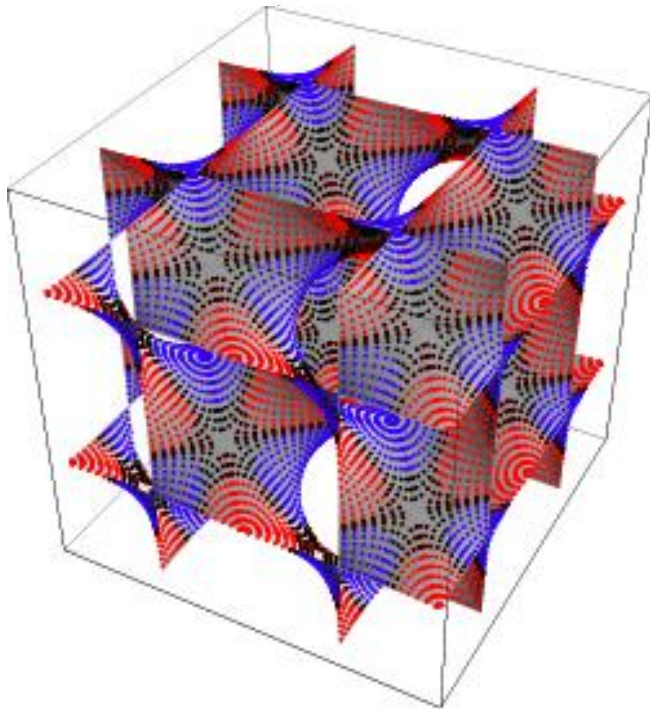


(two-fold axes  $U_d$ )  $U^{xy}, U^{\bar{x}y}, U^{yz}, U^{\bar{y}z}, U^{zx}, U^{\bar{z}x}$ ,  
 (mirrors  $\sigma_d$ )  $\sigma^{xy}, \sigma^{\bar{x}y}, \sigma^{yz}, \sigma^{\bar{y}z}, \sigma^{zx}, \sigma^{\bar{z}x}$ ,  
 (mirrors  $\sigma$ )  $\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z$ .

k-point	$G_k/T$	IR (nodal lines)
$\Gamma (0, 0, 0)$	$O_h$	$\Gamma_2(6U_d, 6\sigma_d), \Gamma_6(3\sigma, 6\sigma_d), \Gamma_7(6U_d, 3\sigma), \Gamma_8(3\sigma)$
$\Delta (k_x, 0, 0)$	$C_{4v}$	$\Delta_2(2\sigma, 2\sigma_d), \Delta_3(2\sigma_d), \Delta_4(2\sigma)$
$H (1, 0, 0)$	$O_h$	$H_1(6U_d), H_2(6\sigma_d), H_6(6U_d, 3\sigma, 6\sigma_d), H_7(3\sigma), H_8(3\sigma)$
$\Sigma (k_x, k_x, 0)$	$C_{2v}$	$\Sigma_2(U_d, \sigma_d), \Sigma_3(\sigma, \sigma_d), \Sigma_4(U_d, \sigma)$
$G (k_x, 1 - k_x, 0)$	$C_{2v}$	$G_1(U_d), G_2(\sigma_d), G_3(U_d, \sigma, \sigma_d), G_4(\sigma)$
$N (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	$D_{2h}$	$N_1(U^{\bar{x}y}), N_2(\sigma^{\bar{x}y}, \sigma^z), N_3(U^{xy}, U^{\bar{x}y}, \sigma^z, \sigma^{xy}), N_4(U^{xy}, \sigma^{xy}, \sigma^{\bar{x}y}),$ $N_5(U^{\bar{x}y}, \sigma^z, \sigma^{xy}, \sigma^{\bar{x}y}), N_6(\sigma^{xy}), N_7(U^{xy}, U^{\bar{x}y}, \sigma^{\bar{x}y}), N_8(U^{xy}, \sigma^z)$
$\Lambda (k_x, k_x, k_x)$	$C_{3v}$	$\Lambda_2(3\sigma_d)$
$F (k_x, 1 - k_x, 1 - k_x)$	$C_{3v}$	$F_2(3\sigma_d)$
$D (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, k_z)$	$C_{2v}$	$D_2(\sigma^{xy}), D_3(\sigma^{xy}, \sigma^{\bar{x}y}), D_4(\sigma^{\bar{x}y})$
$P (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	$T_d$	$P_2(6\sigma_d)$
$\Xi (k_x, k_y, 0)$	$C_s$	$\Xi_2(\sigma)$
$\Theta (k_x, k_x, k_z)$	$C_s$	$\Theta_2(\sigma_d)$
$B (k_x, 1 - k_x, k_z)$	$C_s$	$B_2(\sigma_d)$

# D表面

(mirrors  $\sigma_d$ )  $\sigma^{xy}, \sigma^{\bar{x}y}, \sigma^{yz}, \sigma^{\bar{y}z}, \sigma^{zx}, \sigma^{\bar{z}x}$ ,  
 (two-fold axes  $U_d$ )  $U^{xy}, U^{\bar{x}y}, U^{yz}, U^{\bar{y}z}, U^{zx}, U^{\bar{z}x}$ ,  
 (two-fold axes  $U$ )  $U^x, U^y, U^z$ .



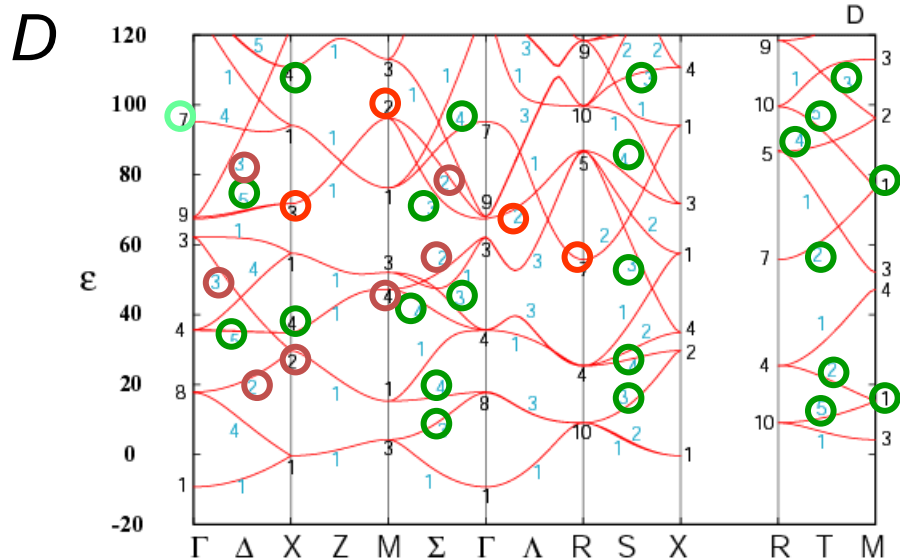
k-point	$G_k/T$	IR (nodal lines)
$\Gamma (0, 0, 0)$	$O_h$	$\Gamma_2(6U_d, 6\sigma_d), \Gamma_6(6\sigma_d), \Gamma_7(6U_d)$
$\Delta (k_x, 0, 0)$	$C_{4v}$	$\Delta_2(2\sigma_d), \Delta_3(2\sigma_d), \Delta_5(U)$
$X (\frac{1}{2}, 0, 0)$	$D_{4h}$	$X_2(2\sigma_d), X_3(U^x, U^{yz}, U^{\bar{y}z}), X_4(U^x)$
$\Sigma (k_x, k_x, 0)$	$C_{2v}$	$\Sigma_2(\sigma_d, U_d), \Sigma_3(\sigma_d), \Sigma_4(U_d)$
$Z (k_x, \frac{1}{2}, 0)$	$C_{2v}$	—
$M (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	$D_{4h}$	$M_1(U^z), M_2(U^z, 2\sigma_d), M_4(U^{xy}, U^{\bar{x}y})$
$\Lambda (k_x, k_x, k_x)$	$C_{3v}$	$\Lambda_2(3\sigma_d)$
$S (\frac{1}{2}, k_y, k_y)$	$C_{2v}$	$S_3(\sigma^{\bar{y}z}), S_4(\sigma^{\bar{y}z})$
$T (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, k_z)$	$C_{4v}$	$T_2(U^z), T_3(U^z), T_4(U^z), T_5(U^z)$
$R (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	$O_h$	$R_1(3U, 6U_d), R_2(3U, 6\sigma_d), R_3(3U), R_6(3U, 6U_d, 6\sigma_d), R_7(3U), R_8(3U)$
$\Xi (k_x, k_y, 0)$	$C_s$	—
$\Theta (k_x, k_x, k_z)$	$C_s$	$\Theta_2(\sigma_d)$
$A (\frac{1}{2}, k_y, k_z)$	$C_s$	—

ノード線（高密度）  $\Leftrightarrow$  波動関数は大きな空間的变化

$\Leftrightarrow$  大きな運動エネルギーが必要

多くノード線を伴う既約表現の固有関数は、低エネルギー領域には存在しないが、エネルギーの上昇と共に出現する。

周期的極小曲面の電子構造の大局的な特徴を理解する上で、ノード線が重要な手掛かりとなると期待される



k-point	$G_k/T$	IR (nodal lines)
$\Gamma (0, 0, 0)$	$O_h$	$\Gamma_2(6U_d, 6\sigma_d), \Gamma_6(6\sigma_d), \Gamma_7(6U_d)$
$\Delta (k_x, 0, 0)$	$C_{4v}$	$\Delta_2(2\sigma_d), \Delta_3(2\sigma_d), \Delta_5(U)$
$X (\frac{1}{2}, 0, 0)$	$D_{4h}$	$X_2(2\sigma_d), X_3(U^x, U^{yz}, U^{\bar{y}z}), X_4(U^x)$
$\Sigma (k_x, k_x, 0)$	$C_{2v}$	$\Sigma_2(\sigma_d, U_d), \Sigma_3(\sigma_d), \Sigma_4(U_d)$
$Z (k_x, \frac{1}{2}, 0)$	$C_{2v}$	—
$M (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	$D_{4h}$	$M_1(U^z), M_2(U^z, 2\sigma_d), M_4(U^{xy}, U^{x\bar{y}})$
$\Lambda (k_x, k_x, k_x)$	$C_{3v}$	$\Lambda_2(3\sigma_d)$
$S (\frac{1}{2}, k_y, k_y)$	$C_{2v}$	$S_3(\sigma^{\bar{y}z}), S_4(\sigma^{\bar{y}z})$
$T (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, k_z)$	$C_{4v}$	$T_2(U^z), T_3(U^z), T_4(U^z), T_5(U^z)$
$R (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	$O_h$	$R_1(3U, 6U_d), R_2(3U, 6\sigma_d), R_3(3U), R_6(3U, 6U_d, 6\sigma_d), R_7(3U), R_8(3U)$
$\Xi (k_x, k_y, 0)$	$C_s$	—
$\Theta (k_x, k_x, k_z)$	$C_s$	$\Theta_2(\sigma_d)$
$A (\frac{1}{2}, k_y, k_z)$	$C_s$	—

## 6. まとめ

- Weierstrass-Enneper表現による周期的極小曲面の記述
- 曲面のトポロジーは高次元におけるトポロジーの投影
- 周期的極小曲面に拘束された電子に対するSchrödinger方程式はWE表現に基づいて定式化可能
- 同一のBonnet族に属する周期的極小曲面に拘束された電子は、リーマン面上等価なSchrödinger方程式に従う
- リーマン面上の特異点を囲む任意の閉曲線における位相の回転が曲面のトポロジーによって指定される (Bloch条件)
- 個別曲面のバンド構造は高次元の仮想的バンド構造の物理空間断面として記述可能 (各バンド構造の接続)
- ノード線の発生と空間群の既約表現との関連付け