APWバンド理論におけるBloch関数による電流演算子の行列要素

成田　章・大石浩司*

Matrix Elements of Current Operator between Bloch Functions in APW Band Theory

Akira NARITA and Hiroshi OISHI

(1998年11月30日受理)

The APW band calculations give the knowledge about the band energies and the wave functions for the electronic states in the solids. These can be used for the calculations of the various physical quantities. In this paper, the matrix elements of the current operator between the Bloch functions obtained from the APW band calculation are evaluated. The expressions can be used for the numerical calculations of the diagonal component of the optical conductivity tensor. A treatment of the matrix elements in the numerical zone integration and their symmetrical properties are also given.

1．はじめに

固体内の電子状態を調べるために光を利用することは一つの有力な方法である。この方法は，他の方法に比べてかなり直接的に電子状態を調べることができるという長所を持っている[1-2]。固体についての通常の光物性では，反射率が測定され，そのスペクトルのKramers-Kronig解析を行って誘電率や光伝導度のスペクトルが求められている[1]。ここで，通常の光物性という意味は，光と固体の磁気との間の相互作用が存在しても，その物性量を磁場または磁化に関して展開したとき，0次から始まりしかも偶数巾だけを含む，ということである[3]。一方，理論サイドからは，光伝導度または誘電率を，何らかの方法で求めた電子状態を用いて計算し，実験から決められたものと比較検討することにより，その電子状態を調べることが行われている[2,4]。そのときの光伝導度は光伝導度テンソルの対角成分 $\sigma_{xx}(\omega)$ であり，これに対する基本式としては，有名な久保公式から導かれたものがしばしば使われる[5-6]。その公式は，固体内の電子がBloch状態にあれば

$$\sigma_{1xx}(\omega)=\frac{\pi}{V}\sum_{\nu',\nu}\sum_{k}|\langle\nu'\boldsymbol{k}|J_x|\nu\boldsymbol{k}\rangle|^2 \times\frac{f_{\nu k}(1-f_{\nu' k})}{E_{\nu' k}-E_{\nu k}}\delta(\omega-E_{\nu' k}+E_{\nu k}) \tag{1.1}$$

で与えられる。ここで，$\sigma_{1xx}(\omega)$ は複素量 $\sigma_{xx}(\omega)$ の実部を表し光の吸収に関係している。$E_{\nu k}$ はバンドエネルギー，$|\nu\boldsymbol{k}\rangle$ はBloch関数，J_x は電流演算子の x 成分，ν はバンドの番号，$\boldsymbol{k}$ はブリルアンゾーン(BZ)内の波数ベクトル，$f_{\nu k}=f(E_{\nu k})$ はFermi分布関数，V は固体の体積，ω は照射光の角振動数である。この論文では，$\hbar=1$ とする単位系を使用する。従って，ω は照射光のエネルギーに一致する。

また，物性量を磁場または磁化に関して展開したとき，1次から始まりしかも奇数巾だけを含むときは，この物性量に関する現象は磁気光学効果として知られている[7]。この代表的なものには，磁気光学カー効果とファラデー効果がある。カー効果は，光と磁気の相互作用の結果が反射光に現れるもので，金属的物質において顕著に観測される。ファラデー効果は，その結果が透過光に現れるもので非金属的物質において顕著である。これらの現象の詳細については文献を参照して戴きたいが，カー効果とファラデー効果は光伝導度テンソルの非対角成分 $\sigma_{xy}(\omega)$ に比例している[7]。これも複素量であり，光の吸収に

* 秋田高専専攻科学生

関係するのはその虚部 $\sigma_{2xy}(\omega)$ であって，これは久保公式より(1.1)と似た形に与えられる。

$$\sigma_{2xy}(\omega) = \frac{\pi}{4V}\sum_{\nu',\nu}\sum_{k}\left[|\langle\nu'\boldsymbol{k}|J_-|\nu\boldsymbol{k}\rangle|^2 - |\langle\nu'\boldsymbol{k}|J_+|\nu\boldsymbol{k}\rangle|^2\right] \times\frac{f_{\nu k}(1-f_{\nu' k})}{E_{\nu' k}-E_{\nu k}}\delta(\omega - E_{\nu' k}+E_{\nu k}) \tag{1.2}$$

ここで，$J_\pm = J_x \pm iJ_y$ である。カー効果やファラデー効果は，固体内の電子状態のなかで磁性を担う電子の状態を直接的に測定するというメリットを有する[7]。

$\sigma_{1xx}(\omega)$ や $\sigma_{2xy}(\omega)$ を具体的物質について理論的に計算するためには，$E_{\nu k}$ と電流演算子の行列要素 $\langle\nu'\boldsymbol{k}|J_\mu|\nu\boldsymbol{k}\rangle$ $(\mu = x, +, -)$ を知らなければならない。これら電子状態に関連する量をバンド計算から求め，それらを用いて $\sigma_{1xx}(\omega)$ や $\sigma_{2xy}(\omega)$ を数値的に計算する，という研究もいろいろ行われている[2,4,8,9]。我々も，LaSe についてこの種の計算を行って来た[10]。そのとき，バンド計算の方法として APW 法を採用したのであるが，バンドエネルギー $E_{\nu k}$ と固有ベクトルはバンド計算から直接求めることができる[11]。しかし，行列要素 $\langle\nu'\boldsymbol{k}|J_\mu|\nu\boldsymbol{k}\rangle$ は直接的には求めることができない。そこで，バンド計算から数値的に得られる固有ベクトルを用いて，行列要素の表式を求めておくことが必要となる。この論文の目的は，APW 法から計算された Bloch 関数を用いて行列要素 $\langle\nu'\boldsymbol{k}|J_\mu|\nu\boldsymbol{k}\rangle$ の表式を求めることである。

2．Bloch 関数と電流演算子

APW バンド計算から求めることができる Bloch 関数 $|\nu\boldsymbol{k}\rangle$ は，APW 基底関数 $\psi_i(\boldsymbol{r}, E_{\nu k})$ の 1 次結合で与えられ，それは次のように書くことができる[11]。

$$|\nu\boldsymbol{k}\rangle = \phi_{\nu k}(\boldsymbol{r}) = \sum_i c_i(\nu\boldsymbol{k})\,\psi_i(\boldsymbol{r}, E_{\nu k}) \tag{2.1}$$

$$\boldsymbol{k}_i = \boldsymbol{k} + \boldsymbol{G}_i \tag{2.2}$$

ここで，$|\nu\boldsymbol{k}\rangle$ は規格化されているとしている。$\boldsymbol{k}$ は BZ 内の波数ベクトル，$\boldsymbol{G}_i$ は逆格子ベクトルであり，(2.1)における i 和は $\boldsymbol{G}_i$ に関する和を表す。

$\psi_i(\boldsymbol{r}, E_{\nu k})$ は Muffin - tin 球（MT 球）の内部と MT 球間の領域（MT 球の外）では関数形が異なり，次のように与えられる。つまり，単位胞内の s 番目の MT 球を sMT と表すと，電子の座標 $\boldsymbol{r}$ が，格子ベクトル $\boldsymbol{R}_n$ で指定される単位胞の中の sMT 内にあるときは

$$\psi_i(\boldsymbol{r}, E_{\nu k}) = \psi_i^{(s)}(\boldsymbol{r}, \nu\boldsymbol{k}) = \frac{1}{\sqrt{V}}\exp(i\boldsymbol{k}_i\cdot\boldsymbol{r}_s) \times\sum_{lm} i^l A_{lm}^{(s)}(\nu\boldsymbol{k}i)\,R_l^{(s)}(\rho_s, E_{\nu k})\,Y_{lm}(\hat{\rho}_s) \tag{2.3}$$

である。ここで，$\rho_s = \boldsymbol{r} - \boldsymbol{R}_n - \boldsymbol{r}_s$ であり，$\boldsymbol{r}_s$ は単位胞における sMT の中心の位置ベクトルである。$R_l^{(s)}(\rho_s)$ は sMT 内での動径波動関数，$Y_{lm}(\hat{\rho}_s)$ は球面調和関数である。$\boldsymbol{r}$ が MT 球間にあるときは，$\psi_i(\boldsymbol{r}, E_{\nu k})$ は平面波で与えられ

$$\psi_i(\boldsymbol{r}, E_{\nu k}) = \frac{1}{\sqrt{V}}\exp(i\boldsymbol{k}_i\cdot\boldsymbol{r}) \tag{2.4}$$

である。$A_{lm}^{(s)}(\nu\boldsymbol{k}i)$ は，(2.3)と(2.4)の値が MT 球面上で連続であるという条件から決めることができ

$$A_{lm}^{(s)}(\nu\boldsymbol{k}i) = 4\pi\frac{j_l(k_i R_s)}{R_l^{(s)}(R_s, E_{\nu k})}\,Y_{lm}^*(\hat{\boldsymbol{k}}_i) \tag{2.5}$$

で与えられる。R_s は sMT の半径である。$j_l(x)$ は l 次の球ベッセル関数である。(2.1)の展開係数 $c_i(\nu\boldsymbol{k})$ はバンドエネルギー $E_{\nu k}$ に属する固有ベクトルの $\psi_i(\boldsymbol{r}, E_{\nu k})$ に対する成分であり，APW バンド計算において数値的に求めることができる。

電流演算子 J_μ $(\mu = x, y, z)$ は，$J_\mu = -e\dot{\mu}$ で与えられる。ここで，$-e$ は電子の電荷を表し $e > 0$ としている。ハミルトニアン H は，$H = p^2/2m + V(\boldsymbol{r})$ で与えられ，$V(\boldsymbol{r})$ は周期ポテンシャルであり MT 球内では球対称，MT 球間では一定値である。これより，J_μ は次のように与えられる。

$$J_\mu = -e\dot{\mu} = ie[\mu, H] = -(e/m)\,p_\mu = i(e/m)\frac{\partial}{\partial\mu} \tag{2.6}$$

3．電流演算子の行列要素

$\langle\nu'\boldsymbol{k}|J_\mu|\nu\boldsymbol{k}\rangle$ を計算する。μ は $\mu = x, y, z$ である。(2.1)より

$$\langle\nu'\boldsymbol{k}|J_\mu|\nu\boldsymbol{k}\rangle = \int_V \phi_{\nu' k}^*(\boldsymbol{r})\,J_\mu\,\phi_{\nu k}(\boldsymbol{r})\,d\boldsymbol{r} \tag{3.1}$$

ここで，積分範囲は結晶全体である。Bloch の定理 $\phi_{\nu k}(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R}_n) = \exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_n)\,\phi_{\nu k}(\boldsymbol{r})$ と(2.6)を用いると，J_μ が微分演算子で与えられるので，(3.1)の被積分関数はどの単位胞において積分しても値は等しい。これより，結晶内の単位胞の個数を N とすると，(3.1)は任意の単位胞における積分の値を N 倍したものに等しいので

$$\langle\nu'\boldsymbol{k}|J_\mu|\nu\boldsymbol{k}\rangle = N\int_\Omega \phi_{\nu' k}^*(\boldsymbol{r})\,J_\mu\,\phi_{\nu k}(\boldsymbol{r})\,d\boldsymbol{r} = N\langle\nu'\boldsymbol{k}|J_\mu|\nu\boldsymbol{k}\rangle_\Omega \tag{3.2}$$

となる。ここで，Ω は単位胞を表す。その体積も Ω で表すことにする。Ω における積分を MT 球内と MT 球間の領域に分けて行う。

$$\langle \nu' \boldsymbol{k}|J_\mu|\nu \boldsymbol{k}\rangle = N\langle \nu' \boldsymbol{k}|J_\mu|\nu \boldsymbol{k}\rangle_\Omega$$
$$= N\langle \nu' \boldsymbol{k}|J_\mu|\nu \boldsymbol{k}\rangle_{\mathrm{out}} + \sum_s N\langle \nu' \boldsymbol{k}|J_\mu|\nu \boldsymbol{k}\rangle_{\mathrm{sMT}} \tag{3.3}$$

ここで，out は積分範囲が MT 球間であることを示す。

3.1 $N\langle \nu' \boldsymbol{k}|J_\mu|\nu \boldsymbol{k}\rangle_{\mathrm{out}}$ の計算

MT 球間における APW 基底関数は平面波(2.4)で与えられるので，(2.1)と(2.6)を用いると

$$N\langle \nu' \boldsymbol{k}|J_\mu|\nu \boldsymbol{k}\rangle_{\mathrm{out}} = -\frac{e}{\Omega m}\sum_i\sum_j c_i(\nu' \boldsymbol{k})c_j(\nu \boldsymbol{k})k_{j\mu} \times \int_{\mathrm{out}} \exp(i(\boldsymbol{k}_j - \boldsymbol{k}_i)\cdot \boldsymbol{r})\,d\boldsymbol{r} \tag{3.4}$$

となる。ここで，$V = N\Omega$ を用いた。out における積分は，Ω における積分から MT 球内における積分を引いたものに等しいので

$$\int_{\mathrm{out}} \exp(i(\boldsymbol{k}_j - \boldsymbol{k}_i)\cdot \boldsymbol{r})\,d\boldsymbol{r} = \int_\Omega \exp(i(\boldsymbol{k}_j - \boldsymbol{k}_i)\cdot \boldsymbol{r})\,d\boldsymbol{r} - \sum_s \int_{\mathrm{sMT}} \exp(i(\boldsymbol{k}_j - \boldsymbol{k}_i)\cdot \boldsymbol{r})\,d\boldsymbol{r} \tag{3.5}$$

である。右辺の第 1 項目は容易に積分できて結果は $\Omega\delta_{ij}$ に等しい。第 2 項目は sMT の中心に原点を移して実行するとできる。結果は

$$\int_{\mathrm{sMT}} \exp(i(\boldsymbol{k}_j - \boldsymbol{k}_i)\cdot \boldsymbol{r})\,d\boldsymbol{r} = 4\pi R_s^2 \exp(i(\boldsymbol{k}_j - \boldsymbol{k}_i)\cdot \boldsymbol{r}_s)\frac{j_1(K_{ij}R_s)}{K_{ij}} \tag{3.6}$$

である。ここで，$K_{ij} = |\boldsymbol{k}_i - \boldsymbol{k}_j| = |\boldsymbol{G}_i - \boldsymbol{G}_j|$ である。これより，(3.4)は

$$N\langle \nu' \boldsymbol{k}|J_\mu|\nu \boldsymbol{k}\rangle_{\mathrm{out}} = -\frac{e}{m}\sum_i k_{i\mu}c_i(\nu' \boldsymbol{k})c_i(\nu \boldsymbol{k}) \tag{3.7a}$$
$$+\frac{e}{\Omega m}\sum_s 4\pi R_s^2 \sum_i\sum_j k_{j\mu}c_i(\nu' \boldsymbol{k})c_j(\nu \boldsymbol{k}) \times \exp(i(\boldsymbol{k}_j - \boldsymbol{k}_i)\cdot \boldsymbol{r}_s)\frac{j_1(K_{ij}R_s)}{K_{ij}} \tag{3.7b}$$

となる。

3.2 $N\langle \nu' \boldsymbol{k}|J_\mu|\nu \boldsymbol{k}\rangle_{\mathrm{sMT}}$ の計算

(3.3)の右辺第 2 項における $N\langle \nu' \boldsymbol{k}|J_\mu|\nu \boldsymbol{k}\rangle_{\mathrm{sMT}}$ の計算について述べる。Bloch 関数 $|\nu \boldsymbol{k}\rangle$ は(2.1)で与えられ，APW 基底関数 $\psi_i(\boldsymbol{r}, E_{\nu k})$ は(2.3)で与えられているので，

$$N\langle \nu' \boldsymbol{k}|J_\mu|\nu \boldsymbol{k}\rangle_{\mathrm{sMT}} = \sum_i\sum_j c_i(\nu' \boldsymbol{k})c_j(\nu \boldsymbol{k}) \times N\langle \psi_i^{(s)}(\boldsymbol{r}, \nu' \boldsymbol{k})|J_\mu|\psi_j^{(s)}(\boldsymbol{r}, \nu \boldsymbol{k})\rangle_{\mathrm{sMT}} \tag{3.8}$$

となる。(2.3)を(3.8)に代入して APW 基底関数の間の行列要素を計算しなければならないが，その計算は長くなるので節を改めて次節以降で記述する。そこでは，J_x, J_y の代わりに $J_\pm = J_x \pm iJ_y$ の行列要素を計算する方が簡単なので，これを計算する。この小節の残りでは，以降における計算の準備をしておく。$J_\pm$ については，(2.6)を用いて x と y に関する微分を極座標 r, θ, ϕ についてのものに変換すると

$$J_\pm = \frac{ie}{m}\left[\sin\theta\, e^{\pm i\phi}\left(\frac{\partial}{\partial r} \mp \frac{1}{r}l_z\right) \pm \frac{\cos\theta}{r}l_\pm\right] \tag{3.9}$$

となる。ここで，l_z は角運動量 $\boldsymbol{l} = \boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$ の z 成分，$l_\pm = l_x \pm il_y$ である。同様にして，J_z は

$$J_z = \frac{ie}{m}\left[\cos\theta\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}l_z\right) + \frac{\sin\theta\, e^{i\phi}}{r}l_-\right] \tag{3.10}$$

で与えられる。$N\langle \psi_i^{(s)}(\boldsymbol{r}, \nu' \boldsymbol{k})|J_\mu|\psi_j^{(s)}(\boldsymbol{r}, \nu \boldsymbol{k})\rangle_{\mathrm{sMT}} = M_\mu^{(s)}(\nu' \boldsymbol{k}i, \nu \boldsymbol{k}j)$ とすると，我々が計算しなければならないのは $\mu = +$ と $\mu = z$ のときのものである。$M_-^{(s)}(\nu' \boldsymbol{k}i, \nu \boldsymbol{k}j)$ は $M_+^{(s)}(\nu \boldsymbol{k}j, \nu' \boldsymbol{k}i)$ の複素共役に等しいので

$$M_-^{(s)}(\nu' \boldsymbol{k}i, \nu \boldsymbol{k}j) = M_+^{(s)}(\nu \boldsymbol{k}j, \nu' \boldsymbol{k}i)^* \tag{3.11}$$

の関係から，$M_+^{(s)}(\nu \boldsymbol{k}j, \nu' \boldsymbol{k}i)$ が求まっていればすぐに知ることができる。

4．$N\langle \psi_i^{(s)}(\boldsymbol{r}, \nu' \boldsymbol{k})|J_+|\psi_j^{(s)}(\boldsymbol{r}, \nu \boldsymbol{k})\rangle_{\mathrm{sMT}}$ の計算

(2.3)より

$$M_+^{(s)}(\nu' \boldsymbol{k}i, \nu \boldsymbol{k}j) = N\langle \psi_i^{(s)}(\boldsymbol{r}, \nu' \boldsymbol{k})|J_+|\psi_j^{(s)}(\boldsymbol{r}, \nu \boldsymbol{k})\rangle_{\mathrm{sMT}} \tag{4.1}$$
$$= -\frac{e}{\Omega m}P_{ij}^{(s)}\sum_{l'm'}\sum_{lm}(-i)^{l'}i^l A_{l'm'}^{(s)*}(\nu' \boldsymbol{k}i)A_{lm}^{(s)}(\nu \boldsymbol{k}j) \times \int_{\mathrm{sMT}} d\boldsymbol{r}R_{l'}^{(s)}(r, \nu' \boldsymbol{k})Y_{l'm'}^*(\hat{\boldsymbol{r}})J_+R_l^{(s)}(r, \nu \boldsymbol{k})Y_{lm}(\hat{\boldsymbol{r}}) \tag{4.2}$$

$$P_{ij}^{(s)} = \exp(i(\boldsymbol{k}_j - \boldsymbol{k}_i)\cdot \boldsymbol{r}_s) \tag{4.3}$$

となる。ここで，(3.9)を用いる。そのとき，l_z と l_+ を $Y_{lm}(\hat{\boldsymbol{r}})$ に作用させた結果は量子力学における角運動量の議論からよく知られている。また，

$$\cos\theta = \sqrt{\frac{4\pi}{3}}Y_{10}(\hat{\boldsymbol{r}}),\quad \sin\theta\, e^{\pm i\phi} = \mp\sqrt{\frac{8\pi}{3}}Y_{1,\pm1}(\hat{\boldsymbol{r}})$$

(4.4)

を用い，球面調和関数が3個かけ算された関数の θ と ϕ に関する積分については次の公式を用いる。

$$\langle l+1, m | Y_{10} | lm \rangle = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{\sqrt{(l+1+m)(l+1-m)}}{\sqrt{(2l+1)(2l+3)}} \tag{4.5a}$$

$$\langle l-1, m | Y_{10} | lm \rangle = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{\sqrt{(l+m)(l-m)}}{\sqrt{(2l+1)(2l-1)}} \tag{4.5b}$$

$$\langle l+1, m+1 | \ Y_{11} \ | lm \rangle = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \frac{\sqrt{(l+1+m)(l+2+m)}}{\sqrt{(2l+1)(2l+3)}} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} s_{lm} \tag{4.6a}$$

$$\langle l-1, m+1 | Y_{11} | lm \rangle = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \frac{\sqrt{(l-1-m)(l-m)}}{\sqrt{(2l+1)(2l-1)}} \tag{4.6b}$$

ここで，$| lm \rangle = Y_{lm}(\hat{r})$ である。$\langle l'm' |$ と $| lm \rangle$ との組み合わせについては，(4.5)，(4.6)において示した以外のものの積分値は 0 である。(4.2)において，θ と ϕ に関する積分を実行後 l', m' についての和を実行し，同類項をまとめるという一連の長い計算を行えば次のようになる。

$$M_+(\nu' i, \nu j) = -\frac{e}{\Omega m} P_{ij} \sum_{lm} \Big[s_{lm} A^*_{l+1,m+1}(\nu' i) A_{lm}(\nu j) \Big(\langle R_{l+1}(\nu') | r^2 | R'_l(\nu) \rangle - l \langle R_{l+1}(\nu') | r | R_l(\nu) \rangle \Big) + s_{l,-m} A^*_{lm}(\nu' i) A_{l+1,m-1}(\nu j) \Big(\langle R_l(\nu') | r^2 | R'_{l+1}(\nu) \rangle + (l+2) \langle R_l(\nu') | r | R_{l+1}(\nu) \rangle \Big) \Big] \tag{4.7}$$

ここで，$\boldsymbol{k}$ と sMT を表す s は省略した。s_{lm} は(4.6 a)で定義されている。また，

$$\langle R_{l'}(\nu') | r^n | R_l(\nu) \rangle = \int_0^{R_s} R_{l'}(r, \nu') r^n R_l(r, \nu) \, dr \tag{4.8}$$

である。ここで，$n = 1, 2$ である。(4.7)には，$R_l(r, \nu)$ の r に関する微分 $R'_l(r, \nu)$ も含まれていることに注意しなければならない。(4.7)の $s_{l,-m}$ を含む項において，$-m$ を m で置き換え，(2.5)から得られる関係式

$$A_{l,-m}(\nu j) = (-1)^m A^*_{lm}(\nu j) \tag{4.9}$$

を用いる。これは球面調和関数の性質 $Y^*_{lm}(\hat{\boldsymbol{k}}) = (-1)^m Y_{l,-m}(\hat{\boldsymbol{k}})$ [13]を用いると容易に証明できる。これより(4.7)は次のようになる。

$$M_+(\nu' i, \nu j) = -\frac{e}{\Omega m} P_{ij} \sum_{lm} s_{lm} \Big[A^*_{l+1,m+1}(\nu' i) A_{lm}(\nu j) S_1(l+1, \nu'; l\nu) - A_{lm}(\nu' i) A^*_{l+1,m+1}(\nu j) S_2(l\nu'; l+1, \nu) \Big] \tag{4.10}$$

$$S_1(l+1, \nu'; l\nu) = \int_0^{R_s} \Big[r^2 R_{l+1}(r, \nu') R'_l(r, \nu) - l r R_{l+1}(r, \nu') R_l(r, \nu) \Big] dr \tag{4.11}$$

$$S_2(l\nu'; l+1, \nu) = \int_0^{R_s} \Big[r^2 R_l(r, \nu') R'_{l+1}(r, \nu) + (l+2) r R_l(r, \nu') R_{l+1}(r, \nu) \Big] dr \tag{4.12}$$

Appendix A に示したように，$S_1(l+1, \nu'; l\nu)$ と $S_2(l\nu'; l+1, \nu)$ の右辺はともに積分できる。その結果は，(A.6)，(A.8)で与えられる。これらを用い，さらに(2.5)を用いると(4.10)は次のようになる。

$$M^{(s)}_+(\nu' i, \nu j)$$

$$= -\frac{e}{\Omega}(E_{\nu'} - E_\nu)(4\pi R_s^2) P^{(s)}_{ij} \sum_l \Big[F^{(s)}_l(ij) G^{(+)}_l(ij) \langle l+1, \nu' | r | l\nu \rangle_s - F^{(s)}_l(ji) G^{(+)}_l(ji) \langle l\nu' | r | l+1, \nu \rangle_s \Big] \tag{4.13a}$$

$$-\frac{e}{2\Omega m} R_s (4\pi R_s^2) P^{(s)}_{ij} \sum_l \Big[F^{(s)}_l(ij) G^{(+)}_l(ij) \Big\{ L_s(l+1, \nu') - L_s(l\nu) \Big\} - F^{(s)}_l(ji) G^{(+)}_l(ji) \Big\{ L_s(l\nu') - L_s(l+1, \nu) \Big\} \Big] \tag{4.13b}$$

$$+\frac{e}{2\Omega m}(4\pi R_s^2) P^{(s)}_{ij} \sum_l \Big[F^{(s)}_l(ij) G^{(+)}_l(ij) - F^{(s)}_l(ji) G^{(+)}_l(ji) \Big] \tag{4.13c}$$

ここで

$$F_l^{(s)}(ij) = j_{l+1}(k_i R_s)\, j_l(k_j R_s) \tag{4.14}$$

$$G_l^{(+)}(ij) = -4\pi \sum_m s_{lm} Y_{l+1,m+1}(\hat{\boldsymbol{k}}_i)\, Y^*_{lm}(\hat{\boldsymbol{k}}_j) \tag{4.15}$$

$$\langle l'\nu'|r|l\nu\rangle_s = \int_0^{R_s} P_{l'}^{(s)}(r,\nu')\, r P_l^{(s)}(r,\nu)\, dr \tag{4.16}$$

$$L_s(l\nu) = \frac{P_l'^{(s)}(R_s,\nu)}{P_l^{(s)}(R_s,\nu)} \tag{4.17}$$

である。$P_l^{(s)}(r,\nu)$は(2.3)で導入された動径波動関数と$P_l^{(s)}(r,\nu) = rR_l^{(s)}(r,\nu)$の関係にあり，Schrödinger方程式(A.3)の解であるが，$P_l^{(s)}(R_s,\nu) = 1$となるように規格化されている。これより(4.17)の分母は1に等しいことに注意しなければならない。また，Appendix Bにおいて示したように，(4.13c)のl和は実行でき，(B.7)で与えられる。従って，

$$(4.13\,\mathrm{c}) = -\frac{e}{2\Omega m}(4\pi R_s^2) P_{ij}^{(s)}(k_{j+} - k_{i+}) \times \frac{j_1(K_{ij}R_s)}{K_{ij}} \tag{4.18}$$

である。さらに，Appendix Dに示すように(4.15)のm和も実行でき，$G_l^{(+)}(ij)$はAppendix Eの(E.2)または(E.3)で与えられる。

5．$\langle\nu'\boldsymbol{k}|J_\mu|\nu\boldsymbol{k}\rangle$ $(\mu = x, y, z, \pm)$の表式

(3.3)，(3.7)，(3.8)，(4.1)，(4.13)，(4.18)より，$\langle\nu'\boldsymbol{k}|J_+|\nu\boldsymbol{k}\rangle$を求めることができる。そこでは，(4.18)と(3.7b)はまとめることができる。また，$\langle\nu'\boldsymbol{k}|J_-|\nu\boldsymbol{k}\rangle = \langle\nu\boldsymbol{k}|J_+|\nu'\boldsymbol{k}\rangle^*$より$J_-$の行列要素も求めることができる。次に，$J_x = (J_+ + J_-)/2$, $J_y = (J_+ - J_-)/2i$を用いると，$\langle\nu'\boldsymbol{k}|J_x|\nu\boldsymbol{k}\rangle$と$\langle\nu'\boldsymbol{k}|J_y|\nu\boldsymbol{k}\rangle$も求めることができる。さらに，$J_z$に対して(3.10)を用いて，上で$J_+$の行列要素を求めたのと同じように計算すると，$\langle\nu'\boldsymbol{k}|J_z|\nu\boldsymbol{k}\rangle$の表式も得ることができる。ただし，その計算も長い。それらに対する表式は同じ形を持っていて4項からなり，結果を示すと次のようになる。

$$\langle\nu'\boldsymbol{k}|J_\mu|\nu\boldsymbol{k}\rangle = J_\mu^{(1)}(\nu'\boldsymbol{k},\nu\boldsymbol{k}) + J_\mu^{(2)}(\nu'\boldsymbol{k},\nu\boldsymbol{k}) + J_\mu^{(3)}(\nu'\boldsymbol{k},\nu\boldsymbol{k}) + J_\mu^{(4)}(\nu'\boldsymbol{k},\nu\boldsymbol{k}) \tag{5.1}$$

$$J_\mu^{(1)}(\nu'\boldsymbol{k},\nu\boldsymbol{k}) = -\frac{e}{\Omega}(E_{\nu'\boldsymbol{k}} - E_{\nu\boldsymbol{k}}) \sum_s (4\pi R_s^2) \times \sum_i \sum_j c_i(\nu'\boldsymbol{k})\, c_j(\nu\boldsymbol{k})\, P_{ij}^{(s)} r_{ij}^{(\mu)}(\nu'\boldsymbol{k},\nu\boldsymbol{k};s) \tag{5.2}$$

$$J_\mu^{(2)}(\nu'\boldsymbol{k},\nu\boldsymbol{k}) = -\frac{e}{2\Omega m} \sum_s (4\pi R_s^3) \times \sum_i \sum_j c_i(\nu'\boldsymbol{k})\, c_j(\nu\boldsymbol{k})\, P_{ij}^{(s)} L_{ij}^{(\mu)}(\nu'\boldsymbol{k},\nu\boldsymbol{k};s) \tag{5.3}$$

$$J_\mu^{(3)}(\nu'\boldsymbol{k},\nu\boldsymbol{k}) = \frac{e}{2\Omega m} \sum_s 4\pi R_s^2 \sum_i \sum_j (k_{i\mu} + k_{j\mu}) \times c_i(\nu'\boldsymbol{k})\, c_j(\nu\boldsymbol{k})\, P_{ij}^{(s)} \frac{j_1(K_{ij}R_s)}{K_{ij}} \tag{5.4}$$

$$J_\mu^{(4)}(\nu'\boldsymbol{k},\nu\boldsymbol{k}) = -\frac{e}{m} \sum_i k_{i\mu} c_i(\nu'\boldsymbol{k})\, c_i(\nu\boldsymbol{k}) \tag{5.5}$$

ここで，$\mu = x, y, z, \pm$である。$P_{ij}^{(s)}$は(4.3)で定義される位相に関する量である。$r_{ij}^{(\mu)}(\nu'\boldsymbol{k},\nu\boldsymbol{k};s)$は双極子積分に関係する量，$L_{ij}^{(\mu)}(\nu'\boldsymbol{k},\nu\boldsymbol{k};s)$は対数微分に関係する量である。それらは次のように与えられる。

$$r_{ij}^{(\mu)}(\nu'\boldsymbol{k},\nu\boldsymbol{k};s) = \sum_l \Big[F_l^{(s)}(ij)\, G_l^{(\mu)}(ij) \langle l+1,\nu'\boldsymbol{k}|r|l\nu\boldsymbol{k}\rangle_s - F_l^{(s)}(ji)\, G_l^{(\mu)}(ji) \langle l\nu'\boldsymbol{k}|r|l+1,\nu\boldsymbol{k}\rangle_s\Big] \tag{5.6}$$

$$L_{ij}^{(\mu)}(\nu'\boldsymbol{k},\nu\boldsymbol{k};s) = \sum_l \Big[F_l^{(s)}(ij)\, G_l^{(\mu)}(ij) \Big\{L_s(l+1,\nu'\boldsymbol{k}) - L_s(l\nu\boldsymbol{k})\Big\} - F_l^{(s)}(ji)\, G_l^{(\mu)}(ji) \Big\{L_s(l\nu'\boldsymbol{k}) - L_s(l+1,\nu\boldsymbol{k})\Big\}\Big] \tag{5.7}$$

(5.6)，(5.7)における$G_l^{(\mu)}(ij)$は，Appendix Eに与えられている。(5.2)，(5.3)はMT球内部からの寄与を表し，(5.5)はMT球間からの寄与を表す。(5.4)は両者からの寄与を含む。(5.6)，(5.7)において，(4.14)からわかるように，[　]内の第1項目はl状態から$l+1$状態への遷移，第2項目は$l+1$状態からl状態への遷移を表し，その他の遷移は禁制である。$\mu = x, y, z$のときは，(5.2)～(5.5)がエルミートであることは容易にわかる。また，(5.2)～(5.5)において，Rydberg原子単位を採用したときは$e = \sqrt{2}$, $m = 1/2$であり，Hartree原子単位を採用したときは$e = m = 1$である。

6．光伝導度テンソルにおける電流演算子行列要素の取扱い

(1.1)で与えられる光伝導度 $\sigma_{1xx}(\omega)$ において，$\boldsymbol{k}$ に関する積分を行うときの行列要素 $\langle\nu'\boldsymbol{k}|J_x|\nu\boldsymbol{k}\rangle$ の取扱いについて述べる。簡単のため，結晶は立方対称を持つとする。そのとき，結晶は点群 O_h の任意の対称操作に関して不変である。O_h は48個の対称操作からなり，その中の一つの操作を T で表し，T に対応する座標変換の行列を $R(T)$ とする。このとき，$R(T)$ は直交行列である。以下では，$R(T)$ を単に R と記す。$\boldsymbol{k}$ が BZ の既約部分 (1/48) BZ 内にあるとすると，(1.1)における波数ベクトルに関する和は，この $\boldsymbol{k}$ に関する和と R に関する和の積に書くことができる。ただし，そのとき(1.1)の波数ベクトルは $R\boldsymbol{k}$ で置き換えなければならない。そこで，バンドエネルギーに関する対称性 $E_{\nu,R\boldsymbol{k}}=E_{\nu\boldsymbol{k}}$ を用いると，(1.1)は次のように書ける。

$$\sigma_{1xx}(\omega)=\frac{\pi}{V}\sum_{\nu',\nu}\sum_{\boldsymbol{k}}M^{(x)}_{\nu'\nu}(\boldsymbol{k})$$

$$\times\frac{f_{\nu\boldsymbol{k}}(1-f_{\nu'\boldsymbol{k}})}{E_{\nu'\boldsymbol{k}}-E_{\nu\boldsymbol{k}}}\delta(\omega-E_{\nu'\boldsymbol{k}}+E_{\nu\boldsymbol{k}}) \tag{6.1}$$

$$M^{(\mu)}_{\nu'\nu}(\boldsymbol{k})=\sum_R|\langle\nu',R\boldsymbol{k}|J_\mu|\nu,R\boldsymbol{k}\rangle|^2 \tag{6.2}$$

(6.2)では，$\mu=x,y,z$ である。また，(6.1)で $\boldsymbol{k}$ は (1/48) BZ にあることをいま一度注意しておく。ここで，Bloch 関数 $|\nu\boldsymbol{k}\rangle=\phi_{\nu\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})=e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}u_{\nu\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})$ と $R\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}=\boldsymbol{k}\cdot R^{-1}\boldsymbol{r}$ を用いると，この関数は次の性質を持つことがわかる。

$$\phi_{\nu,R\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})=\exp(i\boldsymbol{k}\cdot R^{-1}\boldsymbol{r})u_{\nu,R\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})=\phi_{\nu\boldsymbol{k}}(R^{-1}\boldsymbol{r}) \tag{6.3}$$

これより，(6.2)における $\langle\nu',R\boldsymbol{k}|J_\mu|\nu,R\boldsymbol{k}\rangle$ は

$$\langle\nu',R\boldsymbol{k}|J_\mu|\nu,R\boldsymbol{k}\rangle=\int\phi^*_{\nu'\boldsymbol{k}}(R^{-1}\boldsymbol{r})J_\mu\,\phi_{\nu\boldsymbol{k}}(R^{-1}\boldsymbol{r})\,d\boldsymbol{r} \tag{6.4}$$

となる。ここで，変数変換 $R^{-1}\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}'$ を行う。このとき $d\boldsymbol{r}=d\boldsymbol{r}'$ である。また，J_μ は(2.6)で与えられるので

$$J_\mu=i(e/m)\sum_\alpha\frac{\partial\alpha'}{\partial\mu}\frac{\partial}{\partial\alpha'}=\sum_\alpha\frac{\partial\alpha'}{\partial\mu}J_{\alpha'} \tag{6.5}$$

となる。ここで，$\alpha=x,y,z$ である。(6.5)において，

$$\alpha'=\sum_\beta a(R^{-1})_{\alpha\beta}\,\beta=\sum_\beta a(R)_{\beta\alpha}\beta \tag{6.6}$$

を用いると，$\partial\alpha'/\partial\mu=a(R)_{\mu\alpha}$であるから

$$J_\mu=\sum_\alpha a(R)_{\mu\alpha}J_{\alpha'} \tag{6.7}$$

である。(6.4)において(6.7)を用いると

$$\langle\nu',R\boldsymbol{k}|J_\mu|\nu,R\boldsymbol{k}\rangle=\sum_\alpha a(R)_{\mu\alpha}$$

$$\times\int\phi^*_{\nu'\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}')J_{\alpha'}\phi_{\nu\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}')\,d\boldsymbol{r}' \tag{6.8}$$

となる。これを用いると(6.2)で与えられる $M^{(\mu)}_{\nu'\nu}(\boldsymbol{k})$ は

$$M^{(\mu)}_{\nu'\nu}(\boldsymbol{k})=\sum_R\sum_\alpha\sum_\beta a(R)_{\mu\alpha}a(R)_{\mu\beta}$$

$$\times\langle\nu'\boldsymbol{k}|J_\alpha|\nu\boldsymbol{k}\rangle\langle\nu\boldsymbol{k}|J_\beta|\nu'\boldsymbol{k}\rangle \tag{6.9}$$

となる。ここで，(6.8)の $\boldsymbol{r}'$ 積分は $\boldsymbol{r}'=\boldsymbol{r}$ とすることにより $J_{\alpha'}$ は J_α と書くことができることを用いた。変換行列 R は，点群 O_h の T_{1u} 表現の表現行列になっているので，群論における大直交定理より[12)]

$$\sum_R a(R)_{\mu\alpha}a(R)_{\mu\beta}=\frac{g}{3}\delta_{\alpha\beta} \tag{6.10}$$

が成り立つ。右辺の因子(1/3)は T_{1u} が 3 次元表現であることによる。また，$g=48$ である。(6.10)を用いると(6.9)は次のようになる。

$$M^{(\mu)}_{\nu'\nu}(\boldsymbol{k})=gJ_{\nu'\nu}(\boldsymbol{k})^2 \tag{6.11}$$

$$J_{\nu'\nu}(\boldsymbol{k})^2=\frac{1}{3}\sum_\alpha|\langle\nu'\boldsymbol{k}|J_\alpha|\nu\boldsymbol{k}\rangle|^2 \tag{6.12}$$

(6.11)から次の等式が成り立つことも容易にわかる。

$$M^{(x)}_{\nu'\nu}(\boldsymbol{k})=M^{(y)}_{\nu'\nu}(\boldsymbol{k})=M^{(z)}_{\nu'\nu}(\boldsymbol{k}) \tag{6.13}$$

(6.11)を用いると，(6.1)における $\boldsymbol{k}$ に関する積分は (1/48) BZ で行うことができる。また，(6.11)では，$\boldsymbol{k}$ は (1/48) BZ にある必要はなく，BZ 内にあればよい。

次に，(1.2)で与えられる $\sigma_{2xy}(\omega)$ の行列要素についても，$\sigma_{1xx}(\omega)$ のときと同じような取扱いをしておきたいが，この場合は(6.10)に対応するものが 0 となってしまい，具合が悪い。その理由は，$\sigma_{2xy}(\omega)$ の計算においては，スピン一軌道相互作用が無視できないことにある。スピン一軌道相互作用を入れたときに，$\sigma_{1xx}(\omega)$ に対して行ったような行列要素の取扱いを正しく行うためには，2 重群を導入する必要がある[12)]。この扱いは別の論文で行うことにする。

7．まとめ

APW バンド理論における Bloch 関数を用いて，光伝導度テンソルの対角成分 $\sigma_{xx}(\omega)$ に含まれる電流演算子の行列要素に対する表式が導出された。また，それは，(6.13)で与えられる対称性を持つこと

が示された。その表式と対称性を利用して，BZ にわたる $\boldsymbol{k}$ 積分を (1/48) BZ で行って，数値的に $\sigma_{1xx}(\omega)$ を求めるための行列要素の取扱い方法が明らかにされた。

Appendix A：$S_1(l+1, \nu'; l\nu)$ と $S_2(l\nu'; l+1, \nu)$ の計算

簡略記号 $a=(l+1, \nu')$，$b=(l, \nu)$ を導入し，$P_u(r)=rR_u(r)\,(u=a, b)$ とおくと (4.11) は次のようになる。

$$S_1(a, b)=\int_0^{R_s} rP_a(r)\left[\frac{1}{r}P'_b(r)-\frac{l+1}{r^2}P_b(r)\right]dr \tag{A.1}$$

sMT 内における，$P_a(r)$，$P_b(r)$ についての Schrödinger 方程式は

$$-\frac{1}{2m}\left[P''_a(r)-\frac{(l+1)(l+2)}{r^2}P_a(r)\right]+V_s(r)P_a(r)=E_aP_a(r) \tag{A.2}$$

$$-\frac{1}{2m}\left[P''_b(r)-\frac{l(l+1)}{r^2}P_b(r)\right]+V_s(r)P_b(r)=E_bP_b(r) \tag{A.3}$$

である。$V_s(r)$ は sMT 内における MT ポテンシャルである。(A.2) と (A.3) の両辺にそれぞれ $P_b(r)$ と $P_a(r)$ をかけて辺々引くと次式を得る。

$$-\frac{l+1}{r^2}P_a(r)P_b(r)=-m(E_a-E_b)P_a(r)P_b(r)+\frac{1}{2}(P_a(r)P''_b(r)-P''_a(r)P_b(r)) \tag{A.4}$$

これを用いると (A.1) は

$$S_1(a, b)=-m(E_a-E_b)\int_0^{R_s} rP_a(r)P_b(r)\,dr+\int_0^{R_s}P_a(r)P'_b(r)\,dr+\frac{1}{2}\int_0^{R_s} r(P_a(r)P''_b(r)-P''_a(r)P_b(r))\,dr \tag{A.5}$$

となる。$P_aP''_b-P''_aP_b=(P_aP'_b-P'_aP_b)'$ を用いて第3項を部分積分すると，残りの計算は容易であり最終的に

$$S_1(a, b)=-m(E_a-E_b)\langle a|r|b\rangle+\frac{1}{2}R_sP_a(R_s)P_b(R_s)\left[\frac{1}{R_s}+L_b(R_s)-L_a(R_s)\right] \tag{A.6}$$

を得る。ここで，$L_u(R_s)\,(u=a, b)$ は対数微分であり次式で定義される。

$$L_u(R_s)=\frac{P'_u(R_s)}{P_u(R_s)} \tag{A.7}$$

(4.12) の $S_2(l\nu'; l+1, \nu)$ の積分も同じ方法でできる。結果は

$$S_2(c, d)=-m(E_c-E_d)\langle c|r|d\rangle+\frac{1}{2}R_sP_c(R_s)P_d(R_s)\left[\frac{1}{R_s}+L_d(R_s)-L_c(R_s)\right] \tag{A.8}$$

である。ここで，$c=(l, \nu')$，$d=(l+1, \nu)$ である。

Appendix B：(4.13c) の l 和

S を式 $x^2+y^2+z^2=R_s^2$ で与えられる半径 $R_s(=a)$ の球面とする。次の面積分を考える。

$$P=\int_S (x+iy)\exp(i(\boldsymbol{k}_j-\boldsymbol{k}_i)\cdot\boldsymbol{r})\,dS \tag{B.1}$$

ここで，$dS=a^2\sin\theta d\theta d\phi$，$x+iy=a\sin\theta e^{i\phi}$ である。(4.4) を用いると (B.1) は次のようになる。

$$P=a^3\int_S \exp(-i\boldsymbol{k}_i\cdot\boldsymbol{r})\left(-\sqrt{8\pi/3}\,Y_{11}(\theta, \phi)\right)\times\exp(i\boldsymbol{k}_j\cdot\boldsymbol{r})\,dS \tag{B.2}$$

よく知られた公式[13]

$$\exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})=4\pi\sum_{lm} i^l j_l(kr)\,Y^*_{lm}(\hat{\boldsymbol{k}})\,Y_{lm}(\theta, \phi) \tag{B.3}$$

を用い，次に (4.6) を用いて θ, ϕ 積分を実行して，少し長い計算をすると次式を得る。

$$P=i4\pi a^3\sum_l\left[F_l^{(s)}(ij)\,G_l^{(+)}(ij)-F_l^{(s)}(ji)\,G_l^{(+)}(ji)\right] \tag{B.4}$$

ここで，$F_l^{(s)}(ij)$，$G_l^{(+)}(ij)$ は (4.14)，(4.15) と同じものである。次に (B.1) を別の方法で計算する。(B.1) は

$$P=-i\left(\frac{\partial}{\partial k_x}+i\frac{\partial}{\partial k_y}\right)\int_S \exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})\,ds \tag{B.5}$$

と書ける。ここで，$\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}_j-\boldsymbol{k}_i$ である。この面積分は容易であり P は次のようになる。

$$P=-i\left(\frac{\partial}{\partial k_x}+i\frac{\partial}{\partial k_y}\right)\frac{\sin ka}{ka}=i4\pi a^3(k_{j+}-k_{i+})\frac{j_1(K_{ij}R_s)}{K_{ij}} \tag{B.6}$$

ここで，$k_{j+}=k_{jx}+ik_{jy}$，$K_{ij}=|\boldsymbol{k}|=|\boldsymbol{k}_j-\boldsymbol{k}_i|$ である。(B.4) と (B.6) を等しいとおくと次式を得る。

$$\sum_l\left[F_l^{(s)}(ij)\,G_l^{(+)}(ij)-F_l^{(s)}(ji)\,G_l^{(+)}(ji)\right]=(k_{i+}-k_{j+})\frac{j_1(K_{ij}R_s)}{K_{ij}} \tag{B.7}$$

S を(B.1)と同じであるとして，積分

$$Q = \int_S z\exp(i(\boldsymbol{k}_j-\boldsymbol{k}_i)\cdot\boldsymbol{r})\,ds \tag{B.8}$$

を考える。(B.7)を導いたのと同じようにして次の結果を得ることができる。

$$\sum_l\left[F_l^{(s)}(ij)\,G_l^{(z)}(ij)-F_l^{(s)}(ji)\,G_l^{(z)}(ji)\right]$$

$$=(k_{iz}-k_{jz})\frac{j_1(K_{ij}R_s)}{K_{ij}} \tag{B.9}$$

ここで，$G_l^{(z)}(ij)$ は(C.1)で定義されている。これは，$\langle\nu'\boldsymbol{k}|J_z|\nu\boldsymbol{k}\rangle$ の計算において利用できる。

Appendix C：$G_l^{(z)}(ij)$ の計算

$G_l^{(z)}(ij)$ は次式で与えられる。

$$G_l^{(z)}(ij) = 4\pi\sum_m t_{lm}Y_{l+1,m}(\hat{\boldsymbol{k}}_i)\,Y_{lm}^*(\hat{\boldsymbol{k}}_j) \tag{C.1}$$

ここで，$t_{lm}=\sqrt{(l+1+m)(l+1-m)}/\sqrt{(2l+1)(2l+3)}$ である。球面調和関数の定義式[13)]

$$Y_{lm}(\theta,\phi) = (-1)^m\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}P_l^m(\cos\theta)\,e^{im\phi} \tag{C.2}$$

を用いる。これは，$m<0$ のときにも Ledgendre 陪関数を次式で定義しておけば有効である[14)]。

$$P_l^m(x) = (-1)^m\frac{(l-\mu)!}{(l+\mu)!}P_l^\mu(x)\;(m<0,\mu=|m|) \tag{C.3}$$

$Y_{lm}^*(\hat{\boldsymbol{k}}) = (-1)^mY_{l,-m}(\hat{\boldsymbol{k}})$[13)] と(C.2)を用いると，(C.1)は

$$G_l^{(z)}(ij) = \sum_m(-1)^m(l+1-m)$$

$$\times P_{l+1}^m(u_{iz})P_l^{-m}(u_{jz})\exp(im(\phi_i-\phi_j)) \tag{C.4}$$

となる。ここで，$u_{iz}=\cos\theta_i=\hat{k}_{iz}=k_{iz}/k_i$，$\phi_i$ は $\hat{\boldsymbol{k}}_i$ の方位角である。漸化式[14)]

$$(l+1-m)P_{l+1}^m(x) = \left[(l+1)x-(1-x^2)\frac{d}{dx}\right]P_l^m(x) \tag{C.5}$$

を用いて，次に

$$\sum_m(-1)^mP_l^m(u_{iz})P_l^{-m}(u_{jz})\exp(im(\phi_i-\phi_j))$$

$$=\frac{4\pi}{2l+1}\sum_m Y_{lm}(\hat{\boldsymbol{k}}_i)\,Y_{lm}^*(\hat{\boldsymbol{k}}_j) = P_l(\hat{\boldsymbol{k}}_i\cdot\hat{\boldsymbol{k}}_j) \tag{C.6}$$

を用いると[14)]，m 和が実行でき

$$G_l^{(z)}(ij) = (l+1)u_{iz}P_l(\alpha)-(1-u_{iz}^2)\frac{\partial}{\partial u_{iz}}P_l(\alpha) \tag{C.7}$$

$$\alpha = \hat{\boldsymbol{k}}_i\cdot\hat{\boldsymbol{k}}_j$$

$$=u_{iz}u_{jz}+\sqrt{1-u_{iz}^2}\sqrt{1-u_{jz}^2}\cos(\phi_i-\phi_j) \tag{C.8}$$

となる。(C.7)における微分を，(C.8)を用いて実行すると次式を得る。

$$G_l^{(z)}(ij) = (l+1)u_{iz}P_l(\alpha)+(u_{iz}\alpha-u_{jz})P_l'(\alpha) \tag{C.9}$$

Appendix D：$G_l^{(+)}(ij)$ の計算

(4.15)で与えられる $G_l^{(+)}(ij)$ において，Appendix C の場合と同様に(C.2)を用いると次式を得る。

$$G_l^{(+)}(ij) = \exp(i\phi_i)\sum_m$$

$$\times(-1)^mP_{l+1}^{m+1}(u_{iz})P_l^{-m}(u_{jz})\exp(im\phi) \tag{D.1}$$

ここで，$\phi=\phi_i-\phi_j$ である。漸化式[14)]

$$\sqrt{1-x^2}P_{l+1}^{m+1}(x) = (l+1+m)P_l^m(x)$$

$$-(l+1-m)xP_{l+1}^m(x) \tag{D.2}$$

を用いると次式を得る。

$$G_l^{(+)}(ij) = \frac{\exp(i\phi_i)}{\sin\theta_i}\sum_m(-1)^m(l+1+m)$$

$$\times P_{l+1}^m(u_{iz})P_l^{-m}(u_{jz})\exp(im\phi) \tag{D.3}$$

$$-\exp(i\phi_i)\cot\theta_i\sum_m(-1)^m(l+1-m)$$

$$\times P_{l+1}^m(u_{iz})P_l^{-m}(u_{jz})\exp(im\phi) \tag{D.4}$$

ここで，$u_{iz}=\cos\theta_i$ を用いた。(D.4)は(C.4)と比較すると $G_l^{(z)}(ij)$ を用いて表せることがわかる。また，(D.3)において，$(l+1+m)\exp(im\phi)=(l+1-i\partial/\partial\phi)\exp(im\phi)$ と書いて(C.6)を使うことによって m 和が実行できる。これより次のようになる。

$$G_l^{(+)}(ij) = \frac{\exp(i\phi_i)}{\sin\theta_i}\left[l+1-i\frac{\partial}{\partial\phi}\right]P_l(\alpha)$$

$$-\exp(i\phi_i)\cot\theta_iG_l^{(z)}(ij) \tag{D.5}$$

ここで，α は(C.8)で与えられている。(D.5)において，

$$\frac{\partial}{\partial\phi}P_l(\alpha) = -\sin\theta_i\sin\theta_j\sin\phi P_l'(\alpha) \tag{D.6}$$

を用い，次に $G_l^{(z)}(ij)$ が(C.9)で与えられることを用いる。この後，長い計算をして $\hat{\boldsymbol{k}}_i=(u_{ix},u_{iy},u_{iz})$ で $u_{ix}=\sin\theta_i\cos\phi_i$，$u_{iy}=\sin\theta_i\sin\phi_i$ を用い，さらに $u_{i+}=u_{ix}+iu_{iy}$ を用いてまとめると次式を得る。

$$G_l^{(+)}(ij) = (l+1)u_{i+}P_l(\alpha)+(u_{i+}\alpha-u_{j+})P_l'(\alpha)$$

(D.7)

Appendix E : $G_l^{(\mu)}(ij)(\mu = x, y, z, \pm)$ の表式

Ledgendre関数についての漸化式[14)]

$$P_l'(\alpha) = \frac{l+1}{1-\alpha^2}\left[\alpha P_l(\alpha) - P_{l+1}(\alpha)\right] \qquad \text{(E.1a)}$$

$$= \frac{l}{1-\alpha^2}\left[P_{l-1}(\alpha) - \alpha P_l(\alpha)\right] \qquad \text{(E.1b)}$$

を用いて，(C.9)，(D.7)を書き換えると次のようになる。

$$G_l^{(\mu)}(ij) = \frac{l+1}{1-\alpha^2}\left[(u_{i\mu} - u_{j\mu}\alpha)P_l(\alpha) + (u_{j\mu} - u_{i\mu}\alpha)P_{l+1}(\alpha)\right] \qquad \text{(E.2)}$$

$$= u_{i\mu}P_{l+1}'(\alpha) - u_{j\mu}P_l'(\alpha) \qquad \text{(E.3)}$$

次に，$G_l^{(-)}(ij)$ を $G_l^{(+)}(ij)$ の複素共役

$$G_l^{(-)}(ij) = G_l^{(+)}(ij)^* \qquad \text{(E.4)}$$

により定義する。また，$G_l^{(x)}(ij)$ と $G_l^{(y)}(ij)$ を式

$$G_l^{(x)}(ij) = \frac{G_l^{(+)}(ij) + G_l^{(-)}(ij)}{2} \qquad \text{(E.5a)}$$

$$G_l^{(y)}(ij) = \frac{G_l^{(+)}(ij) - G_l^{(-)}(ij)}{2i} \qquad \text{(E.5b)}$$

で定義すると，これらは(E.2)，(E.3)と同じ形に書くことができる。従って，(E.2)，(E.3)では $\mu = x, y, z, \pm$ である。$\mu = x, y, z$ のときは，$u_{i\mu}$ は $\hat{\boldsymbol{k}}_i$ の μ 成分であり，$\mu = \pm$ のときは $u_{i\pm} = u_{ix} \pm i u_{iy}$ である。また，$\alpha = \hat{\boldsymbol{k}}_i \cdot \hat{\boldsymbol{k}}_j$ であり，$\alpha \neq \pm 1$ のときは(E.2)を用い，$\alpha = \pm 1$ のときは(E.3)を用いる。そのときは，$P_l'(1) = l(l+1)/2$，$P_l'(-1) = (-1)^{l+1}l(l+1)/2$ を用いる。

参考文献

1) F. Wooten: *Optical Properties of Solids,* Academic Press, 1972.
2) K.A. Gschneider, L. Eyring and S. Hufner (eds.): *Handbook on the Physics and Chemistry of Rare Earths,* Vol. 10, North-Holland, 1987.
3) H.S. Bennett and E.A. Stern: Phys. Rev., **137** (1965) A448.
4) S.P. Lim, B.R. Cooper, Q.G. Shen and D.L. Price: Physica B **186-188** (1993) 56.
5) R. Kubo: J. Phys. Soc. Jpn, **12** (1957) 570.
6) 原田大士, 成田章：秋田高専研究紀要, **31** (1996) 123.
7) W. Reim and J. Schoenes: *Ferromagnetic Materials,* Vol. 5, eds. K.H.J. Buschow and E. P. Wohlfarth, North-Holland, 1990.
8) A. Narita and J. Schoenes: Physica B **186-188** (1993) 580.
9) V.P. Antropov, A.I. Liechtenstein and B.H. Harmon: J. Magn. Magn. Mater., **140-144** (1995) 1161.
10) 大石浩司, 成田章：秋田高専研究紀要, **34** (1999) 83.
11) T.L. Loucks: *Augmented Plane Wave Method,* W.A. Benjamin Inc., 1967.
12) J.F. Cornwell: *Group Theory and Electronic Energy Bands in Solids,* North-Holland, 1969.
13) A. Messiah: *Quantum Mechanics,* North-Holland
14) 森口, 宇田川, 一松：「数学公式 III」, 岩波書店, 1960.