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 II
—相対論的な場合—

成 田　 章

Matrix Elements of Current Operators between Bloch Functions in APW Band Theory II
—Relativistic case—

Akira NARITA

(2000年11月30日受理)

The relativistic APW band calculations have been successfully used for computations of the electronic states in f-electron materials. Their results can be applicable for the calculations of the spectra of optical conductivity tensor describing the optical properties of the solids. In this paper, the matrix elements of the current operators included in the conductivity tensor are calculated using the Bloch functions in the relativistic APW band calculations. The expressions can be used even for the numerical calculations of the off-diagonal components of the tensor as well as for the diagonal ones. The matrix elements in the non-relativistic limit are also given.

1. はじめに

我々は希土類およびアクチニド化合物すなわちf電子系における光吸収や磁気光学効果などのスペクトルを，バンド理論の立場から理論的に説明することに興味を持っている[1-2]。これらのスペクトルは光伝導度を用いて表現されるので，その基本式として久保公式から導かれる光伝導度テンソルを用いる。光伝導度に含まれる電子状態に対しては，バンド計算から得られるエネルギーや波動関数を利用する[3-4]。バンド計算の方法には密度汎関数法に基づくAPW 法を採用する[5]。波動関数は電流演算子の行列要素を計算するために必要である。前回，我々は行列要素を非相対論的 APW 法における Bloch 関数を用いて計算しそれらに対する表式を導いた[6]。しかし，よく知られているように希土類およびアクチニド化合物に対しては相対論的効果が重要であり，バンドエネルギーと Bloch 関数としてこの効果を考慮した APW 法 (RAPW 法) から求めたものを使用しなければならない[7]。

この論文では，RAPW 法における Bloch 関数 $|\nu\boldsymbol{k}\rangle$ を用いて電流演算子の行列要素 $\langle\nu'\boldsymbol{k}|J_\alpha|\nu\boldsymbol{k}\rangle$ $(\alpha = x, y, z)$ を計算して，最終的な結果を非相対論的に導かれた表式と似た形にまとめることを試みる。ここで ν はバンドの番号, $\boldsymbol{k}$ は BZ 内の波数ベクトル，J_α は電流演算子である。以下では，非相対論的な場合について計算した前回の論文[6]を I として引用し記述も I に準じて行う。

2. 電流演算子と RAPW 法における Bloch 関数

電流演算子 $J_\alpha(\alpha = x, y, z)$ は，$J_\alpha = -e\dot{\alpha}$ で与えられる。$-e$ は電子の電荷を表し $e>0$ とする。RAPW 法においては電子について相対論的効果を考慮したハミルトニアン H は Dirac によるもので次式で与えられる[8]。

$$H = \begin{pmatrix} mc^2 + V(\boldsymbol{r}) & c\sigma\cdot\boldsymbol{p} \\ c\sigma\cdot\boldsymbol{p} & -mc^2 + V(\boldsymbol{r}) \end{pmatrix} \tag{2.1}$$

m, $\boldsymbol{p}$ はそれぞれ電子の質量と運動量, c は光速である。σ は Pauli のスピン行列であり $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$

とすると各成分は次の式で定義される。

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},\quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix},\quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{2.2}$$

$V(\boldsymbol{r})$ は周期ポテンシャルでありMuffin-tin (MT)球内では球対称，MT球間では一定値である。以下では，$\hbar = 1$ とする単位系を採用する。$\dot{\alpha} = -i[\alpha, H]$ より交換関係を(2.1)を用いて計算すると J_α は次のように与えられる。

$$J_\alpha = -e\dot{\alpha} = ie[\alpha, H] = -ec\begin{pmatrix} 0 & \sigma_\alpha \\ \sigma_\alpha & 0 \end{pmatrix} \tag{2.3}$$

RAPWバンド計算から求めることができるBloch関数 $|\nu\boldsymbol{k}\rangle$ はRAPW法における基底関数 $\psi^{RAPW}_{im}(\boldsymbol{r}, E_{\nu k})$ 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[5),7)]。

$$|\nu\boldsymbol{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{im} c_{im}(\nu\boldsymbol{k})\,\psi^{RAPW}_{im}(\boldsymbol{r}, E_{\nu k}) \tag{2.4}$$

$$\boldsymbol{k}_i = \boldsymbol{k} + \boldsymbol{G}_i \tag{2.5}$$

ここで V は結晶の体積であり，$|\nu\boldsymbol{k}\rangle$ は規格化されているとしている。$\boldsymbol{G}_i$ は逆格子ベクトルであり(2.4)における i についての和は $\boldsymbol{G}_i$ に関する和を表す。また，m はスピンを表し $m = \pm 1/2$ である。$E_{\nu k}$ はバンドエネルギー，$c_{im}(\nu\boldsymbol{k})$ は規格化因子を含めた固有ベクトルで共にRAPWバンド計算から求めることができる。$\psi^{RAPW}_{im}(\boldsymbol{r}, E_{\nu k})$ は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。電子の座標 $\boldsymbol{r}$ がMT球間にあるときは，$\psi^{RAPW}_{im}(\boldsymbol{r}, E_{\nu k})$ は平面波であり次のように与えられる。

$$\psi^{RAPW}_{im}(\boldsymbol{r}, E_{\nu k}) = A(W_i)\begin{pmatrix} \chi(m) \\ \dfrac{1}{2mc}\hat{B}_i\chi(m) \end{pmatrix}\exp(i\boldsymbol{k}_i\cdot\boldsymbol{r}) \tag{2.6}$$

$$A(W_i) = \sqrt{\frac{mc^2 + W_i}{2W_i}},\quad W_i = mc^2\sqrt{1 + \frac{\boldsymbol{k}_i^2}{m^2c^2}} \tag{2.7}$$

$$\hat{B}_i = B^0_i(\sigma\cdot\boldsymbol{k}_i),\qquad B^0_i = \frac{2}{1 + W_i/mc^2} \tag{2.8}$$

ここで $\chi(m)$ はスピン関数であり $\sigma_z\chi(m) = 2m\chi(m)$ の性質を持つ。$\boldsymbol{r}$ が格子ベクトル $\boldsymbol{R}_n$ で指定される単位胞内におけるs番目のMT球（sMT球と表す）の内部にあるとき $\psi^{RAPW}_{im}(\boldsymbol{r}, E_{\nu k})$ は次のように与えられる。

$$\psi^{RAPW}_{im}(\boldsymbol{r}, E_{\nu k}) = \exp(i\boldsymbol{k}_i\cdot\boldsymbol{q}_s)A(W_i) \times\sum_{\kappa\mu} i^l A^{(s)}_{\kappa\mu}(\nu\boldsymbol{k}im)\begin{pmatrix} g^{(s)}_{\kappa\nu}(r_s)\,\chi_{\kappa\mu} \\ if^{(s)}_{\kappa\nu}(r_s)\,\chi_{-\kappa,\mu} \end{pmatrix} \tag{2.9}$$

$$\chi_{\kappa\mu} = \sum_{\lambda=\pm 1/2}\langle l, 1/2, \mu-\lambda, \lambda\,|\,j, \mu\rangle\, Y_{l,\mu-\lambda}(\hat{\boldsymbol{r}}_s)\,\chi(\lambda) \tag{2.10}$$

(2.9)において κ についての和は0を除いて負と正の整数全体について行う。$l = l(\kappa)$ は方位量子数，$j = j(\kappa)$ は全角運動量の大きさであって共に κ の関数である。それらの関係は l については $l = \kappa$ $(\kappa > 0)$，$l = -\kappa - 1(\kappa < 0)$ であり，j については $j = l - 1/2(\kappa > 0)$，$j = l + 1/2(\kappa < 0)$ である。j はまとめて $j = |\kappa| - 1/2$ のように書ける。$\boldsymbol{q}_s$ は単位胞の原点から測ったsMT球の中心の位置ベクトル，$\boldsymbol{r}_s$ は $\boldsymbol{r}_s = \boldsymbol{r} - \boldsymbol{R}_n - \boldsymbol{q}_s$ でありsMT球の中心から測った電子の位置ベクトルである。$g^{(s)}_{\kappa\nu}(r_s)$ は動径波動関数の大きい成分，$f^{(s)}_{\kappa\nu}(r_s)$ は小さい成分である。$\langle l, 1/2, \mu-\lambda, \lambda\,|\,j, \mu\rangle$ はClebsch-Gordan係数である。演算子 $\hat{\kappa} = -\sigma\cdot\boldsymbol{l} - 1$ を定義すると $\hat{\kappa}\chi_{\kappa\mu} = \kappa\chi_{\kappa\mu}$ が成り立つことがわかっている。(2.9)においてはこの固有値 κ についての和がとられている。$Y_{l,\mu-\lambda}(\hat{\boldsymbol{r}}_s)$ は球面調和関数，$\hat{\boldsymbol{r}}_s$ は $\boldsymbol{r}_s$ の向きを表す単位ベクトルである。$A^{(s)}_{\kappa\mu}(\nu\boldsymbol{k}im)$ はsMT球の境界面において(2.6)で与えられる平面波と(2.9)で与えられる波動関数が連続になるように決められたものであり次のように与えられる。

$$A^{(s)}_{\kappa\mu}(\nu\boldsymbol{k}im) = 4\pi\frac{j_l(k_iR_s)}{g^{(s)}_{\kappa\nu}(R_s)}B_{\kappa\mu}(im) \tag{2.11}$$

$$B_{\kappa\mu}(im) = \langle l, 1/2, \mu-m, m\,|\,j, \mu\rangle\, Y^*_{l,\mu-m}(\hat{\boldsymbol{k}}_i) \tag{2.12}$$

R_s はsMT球の半径，$j_l(x)$ は l 次の球ベッセル関数である。$A^{(s)}_{\kappa\mu}(\nu\boldsymbol{k}im)$ は(2.6)と(2.9)の大きい成分どうしを連続につないで得られたもので，このとき小さい成分は連続になっていない。磁気光学効果のようにスピン―軌道相互作用が重要である場合は小さい成分も連続にしておかなければならないと考えられる。この論文では，取りあえず(2.9)のように大きい成分のみが連続である場合を扱い，小さい成分の連続性をも考慮した場合は別の論文で扱うことにする。

3．電流演算子の行列要素

$\langle\nu'\boldsymbol{k}|J_\alpha|\nu\boldsymbol{k}\rangle$ を計算する。α は $\alpha = x, y, z$ である。格子の周期性から結晶全体にわたる積分は，単位胞の個数を N とすると，単位胞における積分の値を N 倍したものに等しいので次式が成立する。

$$\langle\nu'\boldsymbol{k}|J_\alpha|\nu\boldsymbol{k}\rangle = N\langle\nu'\boldsymbol{k}|J_\alpha|\nu\boldsymbol{k}\rangle_\Omega \tag{3.1}$$

ここで，右辺の添字 Ω はその積分の範囲が単位胞であることを表す。以下では単位胞の体積も Ω で表すことにする。このとき $\Omega = V/N$ の関係がある。さ

らに Ω における積分を MT 球内と MT 球間の領域に分けて行う。

$$N\langle\nu'\boldsymbol{k}|J_\alpha|\nu\boldsymbol{k}\rangle_\Omega = N\langle\nu'\boldsymbol{k}|J_\alpha|\nu\boldsymbol{k}\rangle_{\text{out}} + \sum_s N\langle\nu'\boldsymbol{k}|J_\alpha|\nu\boldsymbol{k}\rangle_{\text{sMT}} \quad (3.2)$$

ここで，添字 out および sMT は積分範囲がそれぞれ MT 球間と sMT 球内部の領域であることを示す。ここで以下における議論のために，任意のベクトル $A=(A_x, A_y, A_z)$ に対して成分 $A_\pm$ を式 $A_\pm = A_x \pm iA_y$ で定義しておく。$\alpha=\pm$ のとき成分 A_α は $A_\pm$ を表すものとする。

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

MT 球間における RAPW 基底関数は平面波(2.6)で与えられるので，これと電流演算子に対する式(2.3)を用いると

$$N\langle\nu'\boldsymbol{k}|J_\alpha|\nu\boldsymbol{k}\rangle_{\text{out}} = \frac{e}{2m\Omega}\sum_{im}\sum_{jn} c^*_{im}(\nu'\boldsymbol{k}')c_{jn}(\nu\boldsymbol{k}) \times A(W_i)A(W_j)\Delta^{\text{II}}_{ij}\langle\chi(m)|\hat{B}_\alpha(ij)|\chi(n)\rangle \quad (3.3)$$

$$\Delta^{\text{II}}_{ij} = \int_{\text{out}} \exp(i(\boldsymbol{k}_j-\boldsymbol{k}_i)\cdot\boldsymbol{r})\,d\boldsymbol{r} = \Omega\delta_{ij} - \sum_s 4\pi R_s^2 P^{(s)}_{ij}\frac{j_1(K_{ij}R_s)}{K_{ij}} \quad (3.4)$$

$$\hat{B}_\alpha(ij) = \hat{B}_i\sigma_\alpha + \sigma_\alpha\hat{B}_j \quad (3.5)$$

$$P^{(s)}_{ij} = \exp(i(\boldsymbol{k}_j-\boldsymbol{k}_i)\cdot\boldsymbol{q}_s) \quad (3.6)$$

となる。ここで，$K_{ij}=|\boldsymbol{k}_i-\boldsymbol{k}_j|=|\boldsymbol{G}_i-\boldsymbol{G}_j|$ である。Δ^{II}_{ij} は位相因子の out における積分であり，Ω における積分から MT 球内における積分を引くことによって計算した。$\hat{B}_\alpha(ij)$ は(2.8)を用い更に $\sigma_\alpha(\sigma\cdot\boldsymbol{k}) = k_\alpha + i(\boldsymbol{k}\times\sigma)_\alpha$ と $(\sigma\cdot\boldsymbol{k})\sigma_\alpha = k_\alpha - i(\boldsymbol{k}\times\sigma)_\alpha$ を利用すると

$$\hat{B}_\alpha(ij) = (B^0_i k_{i\alpha} + B^0_j k_{j\alpha}) - i\left[(B^0_i\boldsymbol{k}_i - B^0_j\boldsymbol{k}_j)\times\sigma\right]_\alpha \quad (3.7)$$

である。この式の第2項はスピン－軌道相互作用による相対論的効果から生ずる項である。これと(3.4)を(3.3)に代入して整理すると $N\langle\nu'\boldsymbol{k}|J_\alpha|\nu\boldsymbol{k}\rangle_{\text{out}}$ は次のように書ける。

$$N\langle\nu'\boldsymbol{k}|J_\alpha|\nu\boldsymbol{k}\rangle_{\text{out}} = -\frac{e}{m}\sum_{im} c^*_{im}(\nu'\boldsymbol{k})c_{im}(\nu\boldsymbol{k})A(W_i)^2B^0_ik_{i\alpha} \quad (3.8\text{a})$$

$$+\frac{e}{2m\Omega}\sum_i\sum_j\sum_m c^*_{im}(\nu'\boldsymbol{k})c_{jm}(\nu\boldsymbol{k})A(W_i)A(W_j) \times\sum_s(4\pi R_s^2)P^{(s)}_{ij}\frac{j_1(K_{ij}R_s)}{K_{ij}}(B^0_ik_{i\alpha}+B^0_jk_{j\alpha}) \quad (3.8\text{b})$$

$$-i\frac{e}{2m\Omega}\sum_{im}\sum_{jn} c^*_{im}(\nu'\boldsymbol{k})c_{jn}(\nu\boldsymbol{k})A(W_i)A(W_j) \times\sum_s(4\pi R_s^2)P^{(s)}_{ij}\frac{j_1(K_{ij}R_s)}{K_{ij}} \times\left[(B^0_i\boldsymbol{k}_i - B^0_j\boldsymbol{k}_j)\times\langle m|\sigma|n\rangle\right]_\alpha \quad (3.8\text{c})$$

ここで，$\alpha = x, y, z, \pm$ であることに注意するべきである。

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

(3.2)の右辺第2項における $N\langle\nu'\boldsymbol{k}|J_\alpha|\nu\boldsymbol{k}\rangle_{\text{sMT}}$ の計算について述べる。Bloch 関数 $|\nu\boldsymbol{k}\rangle$ と RAPW 基底関数 $\psi^{RAPW}_{im}(\boldsymbol{r}, E_{\nu k})$ はそれぞれ(2.4)と(2.9)で与えられ，さらに J_α が(2.3)で与えられることから $N\langle\nu'\boldsymbol{k}|J_\alpha|\nu\boldsymbol{k}\rangle_{\text{sMT}}$ は次のようになる。

$$N\langle\nu'\boldsymbol{k}|J_\alpha|\nu\boldsymbol{k}\rangle_{\text{sMT}} = -\frac{e}{\Omega}\sum_{im}\sum_{jn} c^*_{im}(\nu'\boldsymbol{k})c_{jn}(\nu\boldsymbol{k}) \times P^{(s)}_{ij}A(W_i)A(W_j)M^{(s)}_\alpha(\nu'\boldsymbol{k}im;\nu\boldsymbol{k}jn) \quad (3.9)$$

$$M^{(s)}_\alpha(\nu'\boldsymbol{k}im;\nu\boldsymbol{k}jn) = ic\sum_{\kappa'\mu'}\sum_{\kappa\mu}(-i)^{l'}i^lA^{(s)*}_{\kappa'\mu'}(\nu'\boldsymbol{k}im)A^{(s)}_{\kappa\mu}(\nu\boldsymbol{k}jn) \times\Big[\langle g^{(s)}_{\kappa'\nu'}f^{(s)}_{\kappa\nu}\rangle\langle\chi_{\kappa'\mu'}|\sigma_\alpha|\chi_{-\kappa,\mu}\rangle - \langle f^{(s)}_{\kappa'\nu'}g^{(s)}_{\kappa\nu}\rangle\langle\chi_{-\kappa',\mu}|\sigma_\alpha|\chi_{\kappa\mu}\rangle\Big] \quad (3.10)$$

(3.10)を変形する。その前に $l(-\kappa)$ と $l(\kappa)$ の関係について調べておく。それは次の式で与えられる。

$$l(-\kappa) = l(\kappa) - \Delta \quad (3.11)$$

$$\Delta = \Delta(\kappa) = \text{sgn}(\kappa) = \begin{cases} 1 (\kappa>0) \\ -1 (\kappa<0) \end{cases} \quad (3.12)$$

式(3.10)の右辺にある［　　］の中の第1項において変換 $\kappa = -\kappa_1$ を行い，(3.11)を用いると $i^{l(-\kappa_1)} = -i\cdot i^{l(\kappa_1)}\text{sgn}(\kappa_1)$ を得る。そして κ_1 を再び κ に戻す。また，［　　］の中の第2項においては $\kappa' = -\kappa'_1$ に変換して第1項に対するのと同様の手続きを行う。こうすると(3.10)は次のようになる。

$$M^{(s)}_\alpha(\nu'\boldsymbol{k}im;\nu\boldsymbol{k}jn) = \sum_{\kappa'\mu'}\sum_{\kappa\mu}(-i)^{l'}i^l\langle\chi_{\kappa'\mu'}|\sigma_\alpha|\chi_{\kappa,\mu}\rangle \times\Big[\text{sgn}(\kappa)A^{(s)*}_{\kappa'\mu'}(\nu'\boldsymbol{k}im)A^{(s)}_{-\kappa,\mu}(\nu\boldsymbol{k}jn)S^{(s)}_1(\kappa'\nu';-\kappa,\nu) + \text{sgn}(\kappa')A^{(s)*}_{-\kappa,\mu'}(\nu'\boldsymbol{k}im)A^{(s)}_{\kappa\mu}(\nu\boldsymbol{k}jn)S^{(s)}_2(-\kappa',\nu';\kappa\nu)\Big]$$

(3.13)

$$S_1^{(s)}(\varkappa'\nu';\varkappa\nu) = c\langle g_{\varkappa'\nu'}^{(s)}, f_{\varkappa\nu}^{(s)}\rangle = c\int_0^{R_s} g_{\varkappa'\nu'}^{(s)}(r) f_{\varkappa\nu}^{(s)}(r)\, r^2 dr \qquad (3.14\text{a})$$

$$S_2^{(s)}(\varkappa'\nu';\varkappa\nu) = c\langle f_{\varkappa'\nu'}^{(s)}, g_{\varkappa\nu}^{(s)}\rangle = c\int_0^{R_s} f_{\varkappa'\nu'}^{(s)}(r) g_{\varkappa\nu}^{(s)}(r)\, r^2 dr \qquad (3.14\text{b})$$

明らかに $S_2^{(s)}(\varkappa'\nu';\varkappa\nu) = S_1^{(s)}(\varkappa\nu;\varkappa'\nu')$ の関係が成り立つ。我々が計算しなければならないのは(3.13)で与えられる $M_\alpha^{(s)}(\nu'\boldsymbol{k}im;\nu\boldsymbol{k}jn)$ であるが，$\alpha = +$ と $\alpha = z$ について行えば十分である。$\alpha = -$ に対するものは，$\alpha = +$ についてのものから関係式 $M_-^{(s)}(\nu'\boldsymbol{k}im;\nu\boldsymbol{k}jn) = M_+^{(s)}(\nu\boldsymbol{k}jn;\nu'\boldsymbol{k}im)^*$ を用いて求めることが出来る。$M_\alpha^{(s)}(\nu'\boldsymbol{k}im;\nu\boldsymbol{k}jn)$ の計算は長くなるので次の節で行う。

4．$M_\alpha^{(s)}(\nu'\boldsymbol{k}im;\nu\boldsymbol{k}jn)$ の計算

4.1 $M_+^{(s)}(\nu'\boldsymbol{k}im;\nu\boldsymbol{k}jn)$ の計算

(3.13)から $\alpha = +$ のときのものをここで計算する。最初に，$\langle\chi_{\varkappa'\mu'}|\sigma_+|\chi_{\varkappa,\mu}\rangle$ を(2.10)を用いて計算する。その計算における球面調和関数の積についての角度積分とスピンについての積分は容易であり結果は

$$\langle\chi_{\varkappa'\mu'}|\sigma_+|\chi_{\varkappa,\mu}\rangle = 2\delta_{l'l}\,\delta_{\mu',\mu+1}\langle l, 1/2, \mu+1/2, 1/2|j', \mu+1\rangle \times\langle l, 1/2, \mu+1/2, -1/2|j, \mu\rangle \qquad (4.1)$$

のようになる。ここで $l' = l(\varkappa')$，$j' = j(\varkappa')$ である。この式において $\varkappa' = \varkappa$ と $\varkappa' = -\varkappa-1$ のときに $l' = l$ が成立つことを考慮して(3.13)における $\varkappa'$ と μ' に関する和を実行する。このとき，記号を少し簡単化するために，各量につけた上付の (s) と波数ベクトル $\boldsymbol{k}$ を省略すると次のようになる。

$$M_+(\nu'im;\nu jn) = M_{1+}(\nu'im;\nu jn) + M_{2+}(\nu'im;\nu jn) \qquad (4.2)$$

$$M_{1+}(\nu'im;\nu jn) = 2\sum_{\varkappa\mu}\mathrm{sgn}(\varkappa)\langle l, 1/2, \mu+1/2, 1/2|j, \mu+1\rangle\langle l, 1/2, \mu+1/2, -1/2|j, \mu\rangle \times\Big[A_{\varkappa,\mu+1}^*(\nu'im)A_{-\varkappa,\mu}(\nu jn)S_1(\varkappa\nu';-\varkappa,\nu) + A_{-\varkappa,\mu+1}^*(\nu'im)A_{\varkappa\mu}(\nu jn)S_2(-\varkappa,\nu';\varkappa\nu)\Big] \qquad (4.3\text{a})$$

$$M_{2+}(\nu'im;\nu jn) = 2\sum_{\varkappa\mu}\langle l, 1/2, \mu+1/2, 1/2|j', \mu+1\rangle\langle l, 1/2, \mu+1/2, -1/2|j, \mu\rangle$$
$$\times\Big[\mathrm{sgn}(\varkappa)A_{-\varkappa-1,\mu+1}^*(\nu'im)A_{-\varkappa,\mu}(\nu jn)S_1(-\varkappa-1,\nu';-\varkappa,\nu) - \mathrm{sgn}(\varkappa+1)A_{\varkappa+1,\mu+1}^*(\nu'im)A_{\varkappa\mu}(\nu jn)S_2(\varkappa+1,\nu';\varkappa\nu)\Big] \qquad (4.3\text{b})$$

ここで $j = j(\varkappa), j' = j(-\varkappa-1)$ である。(4.3a)は $\varkappa' = \varkappa$ から生ずる項，(4.3b)は $\varkappa' = -\varkappa-1$ から生ずる項である。(2.9)において $\varkappa = 0$ は和から除かれているので，(4.3a)でも $\varkappa = 0$ の項は除かれている。(4.3b)では $\varkappa = 0$ と $\varkappa = -1$ の項が除かれている。従って，(4.3b)の $\mathrm{sgn}(\varkappa+1)$ は $\mathrm{sgn}(\varkappa)$ で置き換えることができる。(4.3a)における Clebsch-Gordan 係数の積は計算すればわかるように $\varkappa$ の正負に対して同じ $\varkappa$ 依存性を持つ。$a_1(\varkappa\mu)$ をこの係数を用いて次式で定義する。

$$a_1(\varkappa\mu) = -\frac{1}{2\varkappa-1}\langle l, 1/2, \mu+1/2, 1/2|j, \mu+1\rangle \times\langle l, 1/2, \mu+1/2, -1/2|j, \mu\rangle = \frac{1}{(2\varkappa-1)(2\varkappa+1)}\sqrt{(\varkappa+\mu+1/2)(\varkappa-\mu-1/2)} \qquad (4.4\text{a})$$

(4.3b)におけるものについても同様で $a_2(\varkappa\mu)$ を次のように定義する。

$$a_2(\varkappa\mu) = \langle l, 1/2, \mu+1/2, 1/2|j', \mu+1\rangle \times\langle l, 1/2, \mu+1/2, -1/2|j, \mu\rangle = \frac{1}{2\varkappa+1}\sqrt{(\varkappa+\mu+1/2)(\varkappa+\mu+3/2)} \qquad (4.4\text{b})$$

4.1.1 $M_{1+}(\nu'im;\nu jn)$

(4.3a)における Clebsch-Gordan 係数を(4.4a)で定義した $a_1(\varkappa\mu)$ を用いて書き換え，次に右辺の [ ]の中第1項における $\varkappa$ を $\varkappa+1$ に，第2項の $\varkappa$ を $-\varkappa-1$ にそれぞれ変換して $a_1(\varkappa+1,\mu) = a_1(-\varkappa-1,\mu)$ を用いる。こうすると(4.3a)は次のようになる。

$$M_{1+}(\nu'im);\nu jn) = -2\sum_{\varkappa\mu}\mathrm{sgn}(\varkappa+1)a_1(\varkappa+1,\mu) \times A_{\varkappa+1,\mu+1}^*(\nu'im)A_{-\varkappa-1,\mu}(\nu jn) \times[(2\varkappa+1)S_1(\varkappa+1,\nu';-\varkappa-1,\nu)$$

$$+(2\kappa+3)S_2(\kappa+1, \nu'; -\kappa-1, \nu)] \quad (4.5)$$

ここで(2.11)を用いる。そして次式で定義される量 $h(\kappa'\nu'; \kappa\nu)$ を導入する。

$$h(\kappa'\nu'; \kappa\nu) = \frac{(\kappa'-\kappa-1)S_1(\kappa'\nu'; \kappa\nu)+(\kappa'-\kappa+1)S_2(\kappa'\nu'; \kappa\nu)}{g_{\kappa'\nu'}(R_s)g_{\kappa\nu}(R_s)} \quad (4.6)$$

この $h(\kappa'\nu'; \kappa\nu)$ は Appendix A に示したように，MT 球内における動径波動関数による双極子行列要素や対数微分などで表すことができる。$h(\kappa\nu; \kappa'\nu') = -h(\kappa'\nu'; \kappa\nu)$ の関係式が成り立つことは容易にわかる。(2.11)と(4.6)を用いると，(4.5)は次のように表すことができる。

$$M_{1+}(\nu' im; \nu jn) = 8\pi \sum_{\kappa} j_{l(\kappa+1)}(k_i R_s) j_{l(-\kappa-1)}(k_j R_s) \times h(\kappa+1, \nu'; -\kappa-1, \nu) G_{\kappa}^{(1+)}(im; jn) \quad (4.7)$$

$$G_{\kappa}^{(1+)}(im; jn) = -4\pi \,\mathrm{sgn}(\kappa+1) \sum_{\mu} a_1(\kappa+1, \mu) \times B^{*}_{\kappa+1,\mu+1}(im) B_{-\kappa-1,\mu}(jn) \quad (4.8)$$

(4.7)における κ 和では $\kappa = -1$ が和から除かれていることに注意するべきである。次に(4.7)における κ 和を $\kappa \geq 0$ と $\kappa \leq -2$ に分け，$\kappa \leq -2$ については $\kappa \to -\kappa-2$ に変換する。こうするとどちらについても κ 和の範囲は $\kappa \geq 0$ となる。結局，(4.7)は次のようになる。

$$M_{1+}(\nu' im; \nu jn) = 8\pi \sum_{\kappa=0}^{\infty} \Big[j_{l(\kappa+1)}(k_i R_s) j_{l(-\kappa-1)}(k_j R_s) \times h(\kappa+1, \nu'; -\kappa-1, \nu) G_{\kappa}^{(1+)}(im; jn) + j_{l(-\kappa-1)}(k_i R_s) j_{l(\kappa+1)}(k_j R_s) \times h(-\kappa-1, \nu'; \kappa+1, \nu) G_{-\kappa-2}^{(1+)}(im; jn) \Big] \quad (4.9)$$

(4.9)に含まれる球ベッセル関数の次数は $l = l(\kappa)$ とすると $\kappa \geq 0$ のとき $l(\kappa+1) = l+1$，$l(-\kappa-1) = l$ と書けることを注意しておく。また，$G_{-\kappa-2}^{(1+)}(im; jn)$ は Appendix B に示したように

$$G_{-\kappa-2}^{(1+)}(im; jn) = (-1)^{-m-n} G_{\kappa}^{(1+)}(j, -n; i, -m) \quad (4.10)$$

と書ける。これらから(4.9)は次のようになる。ただし，和をとる文字は κ の代わりに l を用いる。

$$M_{1+}(\nu' im; \nu jn) = 8\pi \sum_{l=0}^{\infty} \Big[F_l(ij) h(l+1, \nu'; -l-1, \nu) G_l^{(1+)}(im; jn) + (-1)^{-m-n} F_l(ji) h(-l-1, \nu'; l+1, \nu) \times G_l^{(1+)}(j, -n; i, -m) \Big] \quad (4.11)$$

$$F_l(ij) = j_{l+1}(k_i R_s) j_l(k_j R_s) \quad (4.12)$$

式(4.11)で $\kappa = \pm(l+1)$ に対する状態の全角運動量は等しいので $M_{1+}(\nu' im; \nu jn)$ はこの角運動量が保存する状態間の遷移 ($\Delta j = 0$ を満足する) から生じていることがわかる。さらに，[　]の中第1項は遷移 $(l, \uparrow) \to (l+1, \downarrow)$ $(\Delta l = 1, \Delta s = -1)$ から生じ，第2項は逆の遷移 $(l+1, \downarrow) \to (l, \uparrow)$ $(\Delta l = -1, \Delta s = 1)$ から生ずることがわかる。これらはスピンの向きが反転する遷移である。$G_l^{(1+)}(im; jn)$ の計算は Appendix C で述べる。

4.1.2　$M_{2+}(\nu' im; \nu jn)$

(4.3b)において(4.4b)を代入して，[　]の中第1項で変換 $\kappa \to \kappa+1$ を実行して(2.11)と(4.6)を用いると次のようになる。

$$M_{2+}(\nu' im; \nu jn) = 4\pi \sum_{\kappa} \Big[j_{l(-\kappa-2)}(k_i R_s) j_{l(-\kappa-1)}(k_j R_s) \times h(-\kappa-2, \nu'; -\kappa-1, \nu) G_{\kappa}^{(2+)}(im; jn) + j_{l(\kappa+1)}(k_i R_s) j_{l(\kappa)}(k_j R_s) \times h(\kappa+1, \nu'; \kappa, \nu) G_{\kappa}^{(3+)}(im; jn) \Big] \quad (4.13)$$

$$G_{\kappa}^{(2+)}(im; jn) = -4\pi \,\mathrm{sgn}(\kappa+1) \sum_{\mu} a_2(\kappa+1, \mu) \times B^{*}_{-\kappa-2,\mu+1}(im) B_{-\kappa-1,\mu}(jn) \quad (4.14\mathrm{a})$$

$$G_{\kappa}^{(3+)}(im; jn) = -4\pi \,\mathrm{sgn}(\kappa+1) \sum_{\mu} a_2(\kappa, \mu) \times B^{*}_{\kappa+1,\mu+1}(im) B_{\kappa,\mu}(jn) \quad (4.14\mathrm{b})$$

(4.13)における κ 和を $\kappa \geq 0$ と $\kappa \leq -1$ に分け，後者については変換 $\kappa \to -\kappa-2$ を行う。そして κ の代わりに文字 l を用いると(4.13)は次のようになる。

$$M_{2+}(\nu' im; \nu jn) = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} F_l(ij) \Big[h(-l-2, \nu'; -l-1, \nu) G_l^{(2+)}(im; jn) + h(l+1, \nu'; l\nu) G_l^{(3+)}(im; jn) \Big] \quad (4.15\mathrm{a})$$

$$+ 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} F_l(ji) \Big[h(l\nu'; l+1, \nu) G_{-l-2}^{(2+)}(im; jn) + h(-l-1, \nu'; -l-2, \nu) G_{-l-2}^{(3+)}(im; jn) \Big] \quad (4.15\mathrm{b})$$

ここで，$l(-\kappa-2) = l+1$ $(\kappa \geq 0)$ を用いた。$F_l(ij)$ は(4.12)で定義されている。また，l 和においては，$h(\kappa'\nu'; \kappa\nu)$ の κ' または κ の値が 0 となるときの l

の値は和から除かれていることに注意しなければならない。具体的には，$h(l+1, \nu'; l\nu)$ と $h(l\nu'; l+1, \nu)$ を含む項では l の値の範囲は $l \geq 1$ である。次の関係式が Appendix B で証明されている。

$$G^{(3+)}_{-\kappa-2}(im;jn) = (-1)^{-m-n} G^{(2+)}_{\kappa}(j,-n;i,-m) \tag{4.16}$$

これを用いると $M_{2+}(\nu' im; \nu jn)$ は次のようになる。

$$M_{2+}(\nu' im; \nu jn)$$
$$= 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} F_l(ij)\Big[h(-l-2, \nu'; -l-1, \nu)\, G^{(2+)}_l(im;jn) + h(l+1, \nu'; l\nu)\, G^{(3+)}_l(im;jn)\Big] \tag{4.17 a}$$
$$+(-1)^{-m-n} \times 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} F_l(ji)\Big[h(-l-1, \nu'; -l-2, \nu)\, G^{(2+)}_l(j,-n;i,-m) + h(l\nu'; l+1, \nu)\, G^{(3+)}_l(j,-n;i,-m)\Big] \tag{4.17 b}$$

(4.17 a) は遷移 $(ls) \to (l+1, s)$ $(s = \uparrow, \downarrow)$ から生ずるもので，選択則 $\Delta l = 1, \Delta s = 0$, 従って $\Delta j = 1$ が成り立っている。(4.17 b) は遷移 $(l+1, s) \to (ls)$ $(s = \uparrow, \downarrow)$ から生じ選択則 $\Delta l = -1$, $\Delta s = 0, \Delta j = -1$ が成立している。これらはともにスピンの向きが保存される遷移である。$G^{(2+)}_l(im;jn)$ と $G^{(3+)}_l(im;jn)$ の計算については Appendix C で言及する。

4.2 $M^{(s)}_\alpha(\nu' \boldsymbol{k} im; \nu \boldsymbol{k} jn)$ の最終式

(4.2)，(4.11) および (4.17) から $M^{(s)}_+(\nu' \boldsymbol{k} im; \nu \boldsymbol{k} jn)$ は次のようになる。ただし，Appendix A における (A.12) も用いてこれまで省略して来た sMT を表す s と波数ベクトル $\boldsymbol{k}$ もここで戻すことにする。

$$M^{(s)}_\alpha(\nu' \boldsymbol{k} im; \nu \boldsymbol{k} jn)$$
$$= 4\pi R_s^2 (E_{\nu' k} - E_{\nu k})\, r^{(s)}_\alpha(\nu' \boldsymbol{k} im; \nu \boldsymbol{k} jn) \tag{4.18 a}$$
$$+ \frac{4\pi R_s^3}{2m} L^{(s)}_\alpha(\nu' \boldsymbol{k} im; \nu \boldsymbol{k} jn) \tag{4.18 b}$$
$$- i \frac{4\pi R_s^2}{2m} \frac{j_1(K_{ij} R_s)}{K_{ij}} \Big[(\boldsymbol{k}_i - \boldsymbol{k}_j) \times \langle m|\sigma|n\rangle\Big]_\alpha \tag{4.18 c}$$

ここで $\alpha = +$ であることに注意しなければならない。(4.18 a)，(4.18 b)，(4.18 c) はそれぞれ (A.12) の第1項，第2項，第3項から生じたものである。また，各量は次式で定義される。

$$r^{(s)}_\alpha(\nu' \boldsymbol{k} im; \nu \boldsymbol{k} jn) = \tilde{r}^{(s)}_\alpha(\nu' \boldsymbol{k} im; \nu \boldsymbol{k} jn) + (-1)^{-m-n} \tilde{r}^{(s)}_\alpha(\nu \boldsymbol{k} j, -n; \nu' \boldsymbol{k} i, -m) \tag{4.19 a}$$
$$\tilde{r}^{(s)}_\alpha(\nu' \boldsymbol{k} im; \nu \boldsymbol{k} jn) = \sum_{l=0}^{\infty} F^{(s)}_l(ij)\Big[2\langle l+1, \nu' \boldsymbol{k}|r|-l-1, \nu \boldsymbol{k}\rangle_s\, G^{(1\alpha)}_l(im;jn) + \langle -l-2, \nu' \boldsymbol{k}|r|-l-1, \nu \boldsymbol{k}\rangle_s\, G^{(2\alpha)}_l(im;jn) + \langle l+1, \nu' \boldsymbol{k}|r|l, \nu \boldsymbol{k}\rangle_s\, G^{(3\alpha)}_l(im;jn)\Big] \tag{4.19 b}$$
$$L^{(s)}_\alpha(\nu' \boldsymbol{k} im; \nu \boldsymbol{k} jn) = \tilde{L}^{(s)}_\alpha(\nu' \boldsymbol{k} im; \nu \boldsymbol{k} jn) - (-1)^{-m-n} \tilde{L}^{(s)}_\alpha(\nu \boldsymbol{k} j, -n; \nu' \boldsymbol{k} i, -m) \tag{4.20 a}$$
$$\tilde{L}^{(s)}_\alpha(\nu' \boldsymbol{k} im; \nu \boldsymbol{k} jn) = \sum_{l=0}^{\infty} F^{(s)}_l(ij)\Big[2\{L_s(l+1, \nu' \boldsymbol{k}) - L_s(-l-1, \nu \boldsymbol{k})\}\, G^{(1\alpha)}_l(im;jn) + \{L_s(-l-2, \nu' \boldsymbol{k}) - L_s(-l-1, \nu \boldsymbol{k})\}\, G^{(2\alpha)}_l(im;jn) + \{L_s(l+1, \nu' \boldsymbol{k}) - L_s(l, \nu \boldsymbol{k})\}\, G^{(3\alpha)}_l(im;jn)\Big] \tag{4.20 b}$$

(4.18 c) は次のようにしてわかる。(A.12) の第3項から生ずるのは直接的には次の形である。

$$\frac{4\pi R_s^2}{2m} \sum_{l=0}^{\infty} \Big[F^{(s)}_l(ij)\, \Gamma^{(\alpha)}_l(im;jn) - (-1)^{-m-n} F^{(s)}_l(ji)\, \Gamma^{(\alpha)}_l(j,-n;i,-m)\Big] \tag{4.21}$$

ここで

$$\Gamma^{(\alpha)}_l(im;jn) = 4(l+1)\, G^{(1\alpha)}_l(im;jn) - G^{(2\alpha)}_l(im;jn) + G^{(3\alpha)}_l(im;jn) \tag{4.22}$$

である。(4.22) の右辺は Appendix C の表に示した $G^{(q+)}_l(im;jn)$ $(q = 1, 2, 3)$ から計算すると次のようになることがわかる。

$$\Gamma^{(+)}_l(im;jn) = -\langle m|\sigma_z|n\rangle G^{(+)}_l(ij) + \langle m|\sigma_+|n\rangle G^{(z)}_l(ij) \tag{4.23 a}$$
$$(-1)^{-m-n} \Gamma^{(+)}_l(j,-n;i,-m) = -\langle m|\sigma_z|n\rangle G^{(+)}_l(ji) + \langle m|\sigma_+|n\rangle G^{(z)}_l(ji) \tag{4.23 b}$$

ここで $G^{(\mu)}_l(ij)$ $(\mu = +, z)$ は Appendix C で定義

されている。(4.23)を用いると(4.21)の l 和は実行できる。そのとき論文Iで証明した次の等式を用いる。

$$\sum_{l=0}^{\infty}\left[F_l^{(s)}(ij)\,G_l^{(\alpha)}(ij)-F_l^{(s)}(ji)\,G_l^{(\alpha)}(ji)\right]$$

$$=(k_{i\alpha}-k_{j\alpha})\frac{j_1(K_{ij}R_s)}{K_{ij}} \qquad (4.24)$$

これを利用して整理すると(4.21)は(4.18 c)となる。

上で(4.18)は $\alpha=+$ についてのものであると述べたが，実はそれは $\alpha=-,x,y,z$ についても成り立つ。このことについて説明する。$\alpha=-$ のときは，関係式 $M_-^{(s)}(\nu'kim;\nu kjn)=M_+^{(s)}(\nu'kjn;\nu kim)^*$ を利用して求めることができる。これらから次の関係式が成り立つことが容易にわかる。

$$r_-^{(s)}(\nu'kim;\nu kjn)=-r_+^{(s)}(\nu kjn;\nu'kim)^* \qquad (4.25\,\mathrm{a})$$

$$\tilde{r}_-^{(s)}(\nu'kim;\nu kjn)=(-1)^{1-m-n}\tilde{r}_+^{(s)}(\nu'ki,-m;\nu kj,-n)^* \qquad (4.25\,\mathrm{b})$$

$$L_-^{(s)}(\nu'kim;\nu kjn)=L_+^{(s)}(\nu kjn;\nu'kim) \qquad (4.26\,\mathrm{a})$$

$$\tilde{L}_-^{(s)}(\nu'kim;\nu kjn)=(-1)^{1-m-n}\tilde{L}_+^{(s)}(\nu'ki,-m;\nu kj,-n)^* \qquad (4.26\,\mathrm{b})$$

また，$M_x^{(s)}(\nu'kim;\nu kjn)$ と $M_y^{(s)}(\nu'kim;\nu kjn)$ は次の式から求めることができる。

$$M_x^{(s)}(\nu'kim;\nu kjn)=\frac{1}{2}\left[M_+^{(s)}(\nu'kim;\nu kjn)+M_-^{(s)}(\nu'kim;\nu kjn)\right] \qquad (4.27\,\mathrm{a})$$

$$M_y^{(s)}(\nu'kim;\nu kjn)=\frac{1}{2i}\left[M_+^{(s)}(\nu'kim;\nu kjn)-M_-^{(s)}(\nu'kim;\nu kjn)\right] \qquad (4.27\,\mathrm{b})$$

$$r_x^{(s)}(\nu'kim;\nu kjn)=\frac{1}{2}\left[r_+^{(s)}(\nu'kim;\nu kjn)+r_-^{(s)}(\nu'kim;\nu kjn)\right] \qquad (4.28\,\mathrm{a})$$

$$r_y^{(s)}(\nu'kim;\nu kjn)=\frac{1}{2i}\left[r_+^{(s)}(\nu'kim;\nu kjn)-r_-^{(s)}(\nu'kim;\nu kjn)\right] \qquad (4.28\,\mathrm{b})$$

$$L_x^{(s)}(\nu'kim;\nu kjn)=\frac{1}{2}\left[L_+^{(s)}(\nu'kim;\nu kjn)+L_-^{(s)}(\nu'kim;\nu kjn)\right] \qquad (4.29\,\mathrm{a})$$

$$L_y^{(s)}(\nu'kim;\nu kjn)=\frac{1}{2i}\left[L_+^{(s)}(\nu'kim;\nu kjn)-L_-^{(s)}(\nu'kim;\nu kjn)\right] \qquad (4.29\,\mathrm{b})$$

(4.25 b)，(4.28)より $G_l^{(q\alpha)}(im;jn)$ $(q=1,2,3)$ の間には次の関係があることがわかる。

$$G_l^{(q-)}(im;jn)=(-1)^{1-m-n}G_l^{(q+)}(i,-m;j,-n)^* \qquad (4.30\,\mathrm{a})$$

$$G_l^{(qx)}(im;jn)=\frac{1}{2}\left[G_l^{(q+)}(im;jn)+G_l^{(q-)}(im;jn)\right] \qquad (4.30\,\mathrm{b})$$

$$G_l^{(qy)}(im;jn)=\frac{1}{2i}\left[G_l^{(q+)}(im;jn)-G_l^{(q-)}(im;jn)\right] \qquad (4.30\,\mathrm{c})$$

(4.30)を用いると $\alpha=-,x,y$ のときも，(4.22)は $\alpha=+$ に対する(4.23)と似た形に書くことができ，最終的に(4.18 c)のようにまとめることができる。

$\alpha=z$ のときの $M_z^{(s)}(\nu'kim;\nu kjn)$ については，これまでに $M_+^{(s)}(\nu'kim;\nu kjn)$ を計算したのと同じようなやり方で計算するとやはり(4.18)の形に求めることができる。ただしこのときは，$G_\kappa^{(qz)}(im;jn)$ $(q=1,2,3)$ は次式で与えられる。

$$G_\kappa^{(1z)}(im;jn)=-\frac{4\pi\,\mathrm{sgn}(\kappa+1)}{(2\kappa+1)(2\kappa+3)}\times\sum_\mu \mu B^*_{\kappa+1,\mu}(im)B_{-\kappa-1,\mu}(jn) \qquad (4.31\,\mathrm{a})$$

$$G_\kappa^{(2z)}(im;jn)=\frac{4\pi}{(2\kappa+3)}\sum_\mu \times\sqrt{(\kappa+3/2-\mu)(\kappa+3/2+\mu)}B^*_{-\kappa-2,\mu}(im)B_{-\kappa-1,\mu}(jn) \qquad (4.31\,\mathrm{b})$$

$$G_\kappa^{(3z)}(im;jn)=\frac{4\pi}{(2\kappa+1)}\sum_\mu \times\sqrt{(\kappa+1/2+\mu)(\kappa+1/2-\mu)}B^*_{\kappa+1,\mu+1}(im)B_{\kappa,\mu}(jn) \qquad (4.31\,\mathrm{c})$$

次の関係式が成り立つこともAppendix Bと同じようにして容易に証明できる。

$$G_{-\kappa-2}^{(1z)}(im;jn)=-G_\kappa^{(1z)}(jn;im)^*=(-1)^{-m-n}G_\kappa^{(1z)}(j,-n;i,-m) \qquad (4.32\,\mathrm{a})$$

$$G_{-\kappa-2}^{(2z)}(im;jn)=-G_\kappa^{(3z)}(jn;im)^*=(-1)^{-m-n}G_\kappa^{(3z)}(j,-n;i,-m) \qquad (4.32\,\mathrm{b})$$

$$G_{-\kappa-2}^{(3z)}(im;jn)=-G_\kappa^{(2z)}(jn;im)^*=(-1)^{-m-n}G_\kappa^{(2z)}(j,-n;i,-m) \qquad (4.32\,\mathrm{c})$$

$G_l^{(qz)}(im;jn)$ $(q=1,2,3)$ の計算はAppendix Cに示した。

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

(3,1)，(3.2)，(3.8)，(4.18)を利用すると電流演算子 $\langle \nu' k | J_\alpha | \nu k \rangle (\alpha = x, y, z, \pm)$ の表式を論文Iで導出した非相対論の場合と似た形に求めることができる[6]。それは次のように与えられる。

$$\langle \nu' \boldsymbol{k} | J_\alpha | \nu \boldsymbol{k} \rangle = \sum_{q=1}^{5} J_\alpha^{(q)} (\nu' \boldsymbol{k}, \nu \boldsymbol{k}) \tag{5.1}$$

$$J_\alpha^{(1)} (\nu' \boldsymbol{k}, \nu \boldsymbol{k}) = -\frac{e}{\Omega} (E_{\nu' k} - E_{\nu k}) \sum_{im} \sum_{jn} c_{im}^* (\nu' \boldsymbol{k}) c_{jn} (\nu \boldsymbol{k}) A(W_i) A(W_j) \sum_s (4\pi R_s^2) P_{ij}^{(s)} r_\alpha^{(s)} (\nu' \boldsymbol{k}im ; \nu \boldsymbol{k}jn) \tag{5.2a}$$

$$J_\alpha^{(2)} (\nu' \boldsymbol{k}, \nu \boldsymbol{k}) = -\frac{e}{2m\Omega} \sum_{im} \sum_{jn} c_{im}^* (\nu' \boldsymbol{k}) c_{jn} (\nu \boldsymbol{k}) A(W_i) A(W_j) \sum_s (4\pi R_s^3) P_{ij}^{(s)} L_\alpha^{(s)} (\nu' \boldsymbol{k}im ; \nu \boldsymbol{k}jn) \tag{5.2b}$$

$$J_\alpha^{(3)} (\nu' \boldsymbol{k}, \nu \boldsymbol{k}) = \frac{e}{2m\Omega} \sum_i \sum_j \sum_m c_{im}^* (\nu' \boldsymbol{k}) c_{jm} (\nu \boldsymbol{k}) A(W_i) A(W_j) \sum_s (4\pi R_s^3) P_{ij}^{(s)} \frac{J_1(K_{ij} R_s)}{K_{ij}} (B_i^0 k_{i\alpha} + B_j^0 k_{j\alpha}) \tag{5.2c}$$

$$J_\alpha^{(4)} (\nu' \boldsymbol{k}, \nu \boldsymbol{k}) = -\frac{e}{m} \sum_{im} c_{im}^* (\nu' \boldsymbol{k}) c_{im} (\nu \boldsymbol{k}) A(W_i)^2 B_i^0 k_{i\alpha} \tag{5.2d}$$

$$J_\alpha^{(5)} (\nu' \boldsymbol{k}, \nu \boldsymbol{k}) = i \frac{e}{2m\Omega} \sum_{im} \sum_{jn} c_{im}^* (\nu' \boldsymbol{k}) c_{jn} (\nu \boldsymbol{k}) A(W_i) A(W_j) \sum_s (4\pi R_s^2) P_{ij}^{(s)} \frac{j_1(K_{ij} R_s)}{K_{ij}} \Big[(b_i \boldsymbol{k}_i - b_j \boldsymbol{k}_j) \times \sigma_{mm} \Big]_\alpha \tag{5.2e}$$

ここで，$b_i = 1 - B_i^0$，$\sigma_{mm} = \langle m | \sigma | n \rangle$ である。$J_\alpha^{(5)} (\nu' \boldsymbol{k}, \nu \boldsymbol{k})$ は(3.8 c)と(4.18 c)をまとめた項であり非相対論では存在しなかったものである。$J_\alpha^{(q)} (\nu' \boldsymbol{k}, \nu \boldsymbol{k})$ $(q = 1, 2)$ のエルミート性は(4.25 a)，(4.26 a)，(4.28)，(4.29)などを利用すると容易に証明することができる。また，$J_\alpha^{(q)} (\nu' \boldsymbol{k}, \nu \boldsymbol{k})$ $(q = 3, 4, 5)$ がエルミートであることは(5.2 c)～(5.2 e)から容易にわかる。

6．非相対論的極限

光速 c を $c \to \infty$ とすれば非相対論の場合に移行する。(5.2)においてこの極限を実行してみよう。そのために，最初，(2.7)と(2.8)よりこの極限において $A(W_i) \to 1$，$B_i^0 \to 1$ となることに注意しなければならない。これより $J_\alpha^{(5)} (\nu' \boldsymbol{k}, \nu \boldsymbol{k}) \to 0$ となることがわかり，この項が存在しないという非相対論の結果に一致する。また，この極限ではスピン―軌道相互作用が消えるので異なるスピン状態は独立となり，固有ベクトル $c_{im} (\nu \boldsymbol{k})$ は

$$c_{i\uparrow} (\nu \boldsymbol{k}) \to c_i (\nu \boldsymbol{k}), \quad c_{i\downarrow} (\nu \boldsymbol{k}) \to 0$$

または

$$c_{i\uparrow} (\nu \boldsymbol{k}) \to 0, \quad c_{i\downarrow} (\nu \boldsymbol{k}) \to c_i (\nu \boldsymbol{k})$$

となる。ただし，$c_i (\nu \boldsymbol{k})$ は実数であることに注意しなければならない。従って，$J_\alpha^{(3)} (\nu \boldsymbol{k}', \nu \boldsymbol{k})$ と $J_\alpha^{(4)} (\nu' \boldsymbol{k}, \nu \boldsymbol{k})$ はともに論文Iで求めた結果に一致することが容易にわかる。

次に，$J_\alpha^{(1)} (\nu' \boldsymbol{k}, \nu \boldsymbol{k})$ について考える。非相対論の極限において，量子数 κ は方位量子数 l に移行する。つまり，$\kappa(l) \to l$ となる。これより(4.19 b)は

$$\tilde{r}_\alpha^{(s)} (\nu' \boldsymbol{k}im ; \nu \boldsymbol{k}jn) = \sum_{l=0}^{\infty} F_l^{(s)} (ij) \langle l+1, \nu' \boldsymbol{k} | r | l, \nu \boldsymbol{k} \rangle_s S_l^{(\alpha)} (im ; jn) \tag{6.1}$$

$$S_l^{(\alpha)} (im ; jn) = 2G_l^{(1\alpha)} (im ; jn) + G_l^{(2\alpha)} (im ; jn) + G_l^{(3\alpha)} (im ; jn) \tag{6.2}$$

となる。Appendix C の表に示した結果を用いると $S_l^{(\alpha)} (im ; jn)$ は容易に計算できて

$$S_l^{(\alpha)} (im ; jn) = \delta_{mn} G_l^{(\alpha)} (ij) \tag{6.3}$$

となる。ここで，$G_l^{(\alpha)} (ij)$ は $\alpha = +, z$ については Appendix C に定義されているが，他の $\alpha (= -, x, y)$ については論文Iにおいて定義されたように，

$$G_l^{(-)} (ij) = G_l^{(+)} (ij)^*,$$
$$G_l^{(x)} (ij) = [G_l^{(+)} (ij) + G_l^{(-)} (ij)]/2,$$
$$G_l^{(y)} (ij) = [G_l^{(+)} (ij) - G_l^{(-)} (ij)]/2i$$

である。これらのことから $J_\alpha^{(1)} (\nu' \boldsymbol{k}, \nu \boldsymbol{k})$ も論文Iの結果に一致することがわかる。さらに，(4.20 a)についても同様に考えて，$J_\alpha^{(2)} (\nu' \boldsymbol{k}, \nu \boldsymbol{k})$ も論文Iの結果に一致することが容易にわかる。

最後に，非相対論の極限において得られる $J_\alpha^{(q)} (\nu' \boldsymbol{k}, \nu \boldsymbol{k})$ $(q = 1 \sim 5)$ をまとめておく。

$$J_\alpha^{(1)} (\nu' \boldsymbol{k}, \nu \boldsymbol{k}) = -\frac{e}{\Omega} (E_{\nu' k} - E_{\nu k}) \sum_i \sum_j c_i (\nu' \boldsymbol{k}) c_j (\nu \boldsymbol{k})$$

$$\times\sum_s (4\pi R_s^2) P_{ij}^{(s)}\, r_\alpha^{(s)}(\nu' \boldsymbol{k} i;\nu \boldsymbol{k} j) \tag{6.4a}$$

$$J_\alpha^{(2)}(\nu'\boldsymbol{k},\nu\boldsymbol{k}) = -\frac{e}{2m\Omega}\sum_i\sum_j c_i(\nu'\boldsymbol{k})\,c_j(\nu\boldsymbol{k})$$
$$\times\sum_s (4\pi R_s^3) P_{ij}^{(s)}\, L_\alpha^{(s)}(\nu' \boldsymbol{k} i;\nu \boldsymbol{k} j) \tag{6.4b}$$

$$J_\alpha^{(3)}(\nu'\boldsymbol{k},\nu\boldsymbol{k}) = \frac{e}{2m\Omega}\sum_i\sum_j c_i(\nu'\boldsymbol{k})\,c_j(\nu\boldsymbol{k})$$
$$\times\sum_s (4\pi R_s^2) P_{ij}^{(s)}\frac{j_1(K_{ij}R_s)}{K_{ij}}(k_{i\alpha}+k_{j\alpha}) \tag{6.4c}$$

$$J_\alpha^{(4)}(\nu'\boldsymbol{k},\nu\boldsymbol{k}) = -\frac{e}{m}\sum_i c_i(\nu'\boldsymbol{k})\,c_i(\nu\boldsymbol{k})\,k_{i\alpha} \tag{6.4d}$$

$$J_\alpha^{(5)}(\nu'\boldsymbol{k},\nu\boldsymbol{k}) = 0 \tag{6.4e}$$

ただし，(6.4 a)の $r_\alpha^{(s)}(\nu'\boldsymbol{k}i;\nu\boldsymbol{k}j)$ と(6.4 b)の $L_\alpha^{(s)}(\nu'\boldsymbol{k}i;\nu\boldsymbol{k}j)$ は次の式で与えられる。

$$r_\alpha^{(s)}(\nu'\boldsymbol{k}i;\nu\boldsymbol{k}j)$$
$$=\sum_{l=0}^{\infty}\Big[F_l^{(s)}(ij)\,G_l^{(\alpha)}(ij)\langle l+1,\nu'\boldsymbol{k}|r|l,\nu\boldsymbol{k}\rangle_s$$
$$-F_l^{(s)}(ji)\,G_l^{(\alpha)}(ji)\langle l,\nu'\boldsymbol{k}|r|l+1,\nu\boldsymbol{k}\rangle_s\Big] \tag{6.5}$$

$$L_\alpha^{(s)}(\nu'\boldsymbol{k}i;\nu\boldsymbol{k}j)$$
$$=\sum_{l=0}^{\infty}\Big[F_l^{(s)}(ij)\,G_l^{(\alpha)}(ij)\{L_s(l+1,\nu'\boldsymbol{k})-L_s(l,\nu\boldsymbol{k})\}$$
$$-F_l^{(s)}(ji)\,G_l^{(\alpha)}(ji)\{L_s(l,\nu'\boldsymbol{k})-L_s(l+1,\nu\boldsymbol{k})\}\Big] \tag{6.6}$$

7．まとめ

相対論的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各成分 $\sigma_{\alpha\beta}(\omega)$ に含まれる電流演算子の行列要素 $\langle\nu'\boldsymbol{k}|J_\alpha|\nu\boldsymbol{k}\rangle$ に対する表式が導出された。これらは $\sigma_{\alpha\beta}(\omega)$ の数値計算に使うことができる。また，非相対論的極限をとることにより相対論的効果を考慮しないときの表式も与えられた。

Appendix A：$h(\kappa'\nu';\kappa\nu)$ に関する計算

簡略記号 $a=(\kappa'\nu')$，$b=(\kappa\nu)$ を導入し，$P_u(r)=rg_u(r)$，$Q_u(r)=crf_u(r)\,(u=a,b)$ とおくと(3.14)は次のように書ける。

$$S_1(a;b)=\int_0^{R_s}P_a(r)\,Q_b(r)\,dr \tag{A.1a}$$

$$S_2(a;b)=\int_0^{R_s}Q_a(r)\,P_b(r)\,dr \tag{A.1b}$$

sMT内における，$P_u(r)$，$Q_u(r)\,(u=a,b)$ に対するDirac方程式は

$$P'_u(r)+\frac{\kappa_u}{r}P_u(r)=\left(2m+\frac{E_u-V_s(r)}{c^2}\right)Q_u(r) \tag{A.2a}$$

$$Q'_u(r)-\frac{\kappa_u}{r}Q_u(r)=-(E_u-V_s(r))\,P_u(r) \tag{A.2b}$$

である。プライムは r に関する微分を表し，$\kappa_a=\kappa'$，$\kappa_b=\kappa$，$E_a=E_{\nu'}$，$E_b=E_\nu$ 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 a)，(A.2 b)で $u=a$ としたものを$(\mathrm{A.2a})_a$，$(\mathrm{A.2b})_a$ と表すことにする。$u=b$ のときも同様である。$(\mathrm{A.2b})_b\times P_a(r)-(\mathrm{A.2b})_a\times P_b(r)$ を計算すると次式を得る。

$$(E_{\nu'}-E_\nu)P_a(r)P_b(r)=P_a(r)Q'_b(r)-Q'_a(r)P_b(r)$$
$$+\frac{1}{r}(\kappa'Q_a(r)P_b(r)-\kappa P_a(r)Q_b(r)) \tag{A.3}$$

次に，$-(\mathrm{A.2a})_b\times Q_a(r)+(\mathrm{A.2a})_a\times Q_b(r)$ を計算すると次式を得る。

$$\frac{1}{c^2}(E_{\nu'}-E_\nu)Q_a(r)Q_b(r)$$
$$=P'_a(r)Q_b(r)-Q_a(r)P'_b(r)$$
$$+\frac{1}{r}(\kappa'P_a(r)Q_b(r)-\kappa Q_a(r)P_b(r)) \tag{A.4}$$

(A.3)と(A.4)を辺々加えて少々変形すると次のようになる。

$$(E_{\nu'}-E_\nu)\,r\left[P_a(r)P_b(r)+\frac{1}{c^2}Q_a(r)Q_b(r)\right]$$
$$=\frac{d}{dr}(rP_a(r)Q_b(r))-\frac{d}{dr}(rQ_a(r)P_b(r))$$
$$+(\kappa'-\kappa-1)P_a(r)Q_b(r)+(\kappa'-\kappa+1)Q_a(r)P_b(r) \tag{A.5}$$

この式の両辺を r に関して $0\le r\le R_s$ に亘って積分し(A.1)を用いると次のようになる。

$$(E_{\nu'}-E_\nu)\int_0^{R_s}r\left[P_a(r)P_b(r)+\frac{1}{c^2}Q_a(r)Q_b(r)\right]dr$$
$$=R_sP_a(R_s)Q_b(R_s)-R_sQ_a(R_s)P_b(R_s)$$
$$+(\kappa'-\kappa-1)S_1(a,b)+(\kappa'-\kappa+1)S_2(a;b) \tag{A.6}$$

(A.6)の両辺を $g_a(R_s)g_b(R_s)=P_a(R_s)P_b(R_s)/R_s^2$ で割り(4.6)で定義した $h(a;b)$ を用いると

$$h(a;b) = R_s^2(E_{\nu'}-E_\nu)\times\int_0^{R_s} r\left[\tilde{P}_a(r)\tilde{P}_b(r)+\frac{1}{c^2}\tilde{Q}_a(r)\tilde{Q}_b(r)\right]dr + R_s^3(\tilde{Q}_a(R_s)-\tilde{Q}_b(R_s)) \quad (\mathrm{A}.7)$$

となる。ただし，$\tilde{P}_u(r)$，$\tilde{Q}_u(r)$ は $P_u(R_s)$ で規格化されたもので，次式で定義されるものである。

$$\tilde{P}_u(r) = \frac{P_u(r)}{P_u(R_s)},\quad \tilde{Q}_u(r) = \frac{Q_u(r)}{P_u(R_s)} \quad (\mathrm{A}.8)$$

ここで，(2.9)からわかるように sMT 球内における原子的波動関数 $|u\rangle_s$ を式

$$|u\rangle_s = \frac{1}{P_u(R_s)}\begin{pmatrix} g_u(r)\chi_{\kappa\mu} \\ if_u(r)\chi_{-\kappa,\mu}\end{pmatrix} \quad (\mathrm{A}.9)$$

により定義すると，(A.7)の右辺第1項の積分は $|a\rangle_s$ と $|b\rangle_s$ による動径双極子モーメントの行列要素であり

$$\langle a|\,r\,|b\rangle_s = \int_0^{R_s} r\left[\tilde{P}_a(r)\tilde{P}_b(r)+\frac{1}{c^2}\tilde{Q}_a(r)\tilde{Q}_b(r)\right]dr \quad (\mathrm{A}.10)$$

のように書ける。さらに，次の量を定義する。

$$L_s(u) = 2m\tilde{Q}_u(R_s)-\frac{\kappa_u}{R_s} \quad (\mathrm{A}.11)$$

$L_u(R_s)$ は非相対論の極限 ($c\to\infty$) において対数微分 $P'_{l(u)}(R_s)/P_{l(u)}(R_s)$ に一致する。これは，(A.2 a)において $c\to\infty$として，そのとき $\kappa_u\to l(u)$ となることから容易にわかる。ただし，$l(a)=l'$，$l(b)=l$ である。(A.7)は，(A.10)と(A.11)を用いて書き換えると次のようになる。

$$h(a;b) = h^{(s)}(a;b) = R_s^2(E_{\nu'}-E_\nu)\langle a|\,r\,|b\rangle_s + \frac{R_s^3}{2m}(L_s(a)-L_s(b))+\frac{R_s^2}{2m}(\kappa'-\kappa) \quad (\mathrm{A}.12)$$

Appendix B：(4.10)と(4.16)の証明

最初に(4.10)を証明する。$G_\kappa^{(1+)}(im;jn)$ の定義式(4.8)より

$$G_{-\kappa-2}^{(1+)}(im;jn) = 4\pi\,\mathrm{sgn}(\kappa+1)\sum_\mu a_1(-\kappa-1,\mu)\times B^*_{-\kappa-1,\mu+1}(im)B_{\kappa+1,\mu}(jn) \quad (\mathrm{B}.1)$$

ここで変換 $\mu\to-\mu-1$ を行い，(4.4 a)から導かれる性質 $a_1(-\kappa-1,-\mu-1)=a_1(\kappa+1,\mu)$ を用いると

$$G_{-\kappa-2}^{(1+)}(im;jn) = 4\pi\,\mathrm{sgn}(\kappa+1)\sum_\mu a_1(\kappa+1,\mu)\times B^*_{-\kappa-1,-\mu}(im)B_{\kappa+1,-\mu-1}(jn) \quad (\mathrm{B}.2)$$

を得る。$B_{\kappa\mu}(im)$ に対する定義式(2.12)において，Clebsch-Gordan 係数についての性質

$$\langle j_1j_2,-m_1,-m_2|j,-m_1-m_2\rangle = (-1)^{j-j_1-j_2}\langle j_1j_2m_1m_2|j,m_1+m_2\rangle \quad (\mathrm{B}.3)$$

と $Y_{lm}(\hat{k})$ についての性質 $Y^*_{lm}(\hat{k})=(-1)^mY_{l,-m}(\hat{k})$ を用いると次の関係式を得る。

$$B_{\kappa,-\mu}(im) = (-1)^{j-l-1/2-\mu-m}B^*_{\kappa,\mu}(i,-m) \quad (\mathrm{B}.4)$$

(B.4)を用いると(B.2)において次式を得る。

$$B^*_{-\kappa-1,-\mu}(im)B_{\kappa+1,-\mu-1}(jn) = (-1)^pB^*_{\kappa+1,\mu+1}(j,-n)B_{-\kappa-1,\mu}(i,-m) \quad (\mathrm{B}.5)$$

ただし，$p=j(\kappa+1)+j(-\kappa-1)-l(\kappa+1)-l(-\kappa-1)-1-2\mu-1-m-n$ である。p は位相因子なのでその中に含まれる偶数は除くことができる。$-2\mu-1$ は偶数，また，$l(\kappa+1)=l+\Delta$，$l(-\kappa-1)=l$，$j(\kappa+1)=j(-\kappa-1)=|\kappa+1|-1/2$ であることに注意して，p から偶数を除くと $p=\Delta-m-n$ となる。Δ は(3.12)で定義されているように $\Delta=\pm1$ なので $(-1)^p=-(-1)^{-m-n}$ と書ける。従って，(B.2)は次のようになる。

$$G_{-\kappa-2}^{(1+)}(im;jn) = (-1)^{-m-n}G_\kappa^{(1+)}(j,-n;i,-m) \quad (\mathrm{B}.6)$$

これで(4.10)は証明できた。

次に(4.16)を証明する。$G_\kappa^{(3+)}(im;jn)$ の定義式(4.14 b)より

$$G_{-\kappa-2}^{(3+)}(im;jn) = 4\pi\,\mathrm{sgn}(\kappa+1)\sum_\mu a_2(-\kappa-2,\mu)\times B^*_{-\kappa-1,\mu+1}(im)B_{-\kappa-2,\mu}(jn) \quad (\mathrm{B}.7)$$

と書ける。ここで変換 $\mu\to-\mu-1$ を行い，(4.4 b)から導かれる性質 $a_2(-\kappa-2,-\mu-1)=-a_2(\kappa+1,\mu)$ を用い，さらに(B.4)から得られる(B.5)に対応する式

$$B^*_{-\kappa-1,-\mu}(im)B_{-\kappa-2,-\mu-1}(jn) = (-1)^{-m-n}B^*_{-\kappa-2,\mu+1}(j,-n)B_{-\kappa-1,\mu}(i,-m) \quad (\mathrm{B}.8)$$

を利用して最後に(4.14 a)を用いると証明するべき次式を得る。

$$G_{-\kappa-2}^{(3+)}(im;jn) = (-1)^{-m-n}G_\kappa^{(2+)}(j,-n;i,-m) \quad (\mathrm{B}.9)$$

Appendix C：$G_l^{(q\alpha)}(im;jn)$ ($\alpha=+,z$；$q=1,2,3$) の計算

C.1　$G_l^{(q+)}(im;jn)$ ($q=1,2,3$)

$\underline{G_l^{(1+)}(im;jn)}$

$G_l^{(1+)}(im;jn)$ の定義式(4.8)において $a_1(l+1,\mu)$ に対する定義式(4.4a)を用いる。また，$B^*_{l+1,\mu+1}(im)$ と $B_{-l-1,\mu}(jn)$ の定義式(2.12)においてそこに含まれる Clebsch-Gordan 係数を計算すると次のようになる。

$$\langle l+1, 1/2, \mu+1-m, n | l+1/2, \mu+1\rangle = -\frac{2m}{[l+1]}\sqrt{l+3/2-2m(\mu+1)} \qquad \text{(C.1a)}$$

$$\langle l, 1/2, \mu-n, n | l+1/2, \mu\rangle = \frac{1}{[l]}\sqrt{l+1/2+2n\mu} \qquad \text{(C.1b)}$$

ここで $[l]=\sqrt{2l+1}$，$m=\pm1/2$，$n=\pm1/2$ である。これらから $G_l^{(1+)}(im;jn)$ は次のようになる。

$$G_l^{(1+)}(im;jn) = A_l^{(1)}\frac{8\pi m}{[l][l+1]}\sum_\mu b_{1+}(l\mu;m,n) \times Y_{l+1,\mu+1-m}(\hat{\boldsymbol{k}}_i)\,Y^*_{l,\mu-n}(\hat{\boldsymbol{k}}_j) \qquad \text{(C.2)}$$

$$b_{1+}(l\mu;m,n) = \sqrt{(l+1/2-\mu)(l+3/2+\mu)} \times\sqrt{(l+3/2-2m(\mu+1))(l+1/2+2n\mu)} \qquad \text{(C.3)}$$

ここで，$A_l^{(1)}=[l]^{-2}[l+1]^{-2}$ である。m，n の各値について $G_l^{(1+)}(im;jn)$ を計算した結果を表に示す。

	$n=1/2$	$n=-1/2$
$m=\frac{1}{2}$	$-(l+\hat{l}_{jz})G_l^{(+)}(ij)$	$(l+1+\hat{l}_{jz})G_l^{(z)}(ij)$
$m=-\frac{1}{2}$	$-\hat{l}_{j+}G_l^{(+)}(ij)$	$(l+1+\hat{l}_{jz})G_l^{(+)}(ij)$

この表では，共通因数 $A_l^{(1)}$ は除かれており，各量はすぐ下に定義されている。結果の証明は後で行う。

$$G_l^{(+)}(ij) = -4\pi\sum_q s_{lq}Y_{l+1,q+1}(\hat{\boldsymbol{k}}_i)\,Y^*_{lq}(\hat{k}_j) \qquad \text{(C.4)}$$

$$G_l^{(z)}(ij) = 4\pi\sum_q t_{lq}Y_{l+1,q}(\hat{\boldsymbol{k}}_i)\,Y^*_{lq}(\hat{\boldsymbol{k}}_j) \qquad \text{(C.5)}$$

$$s_{lq} = \frac{\sqrt{(l+1+q)(l+2+q)}}{[l][l+1]} \qquad \text{(C.6a)}$$

$$t_{lq} = \frac{\sqrt{(l+1+q)(l+1-q)}}{[l][l+1]} \qquad \text{(C.6b)}$$

$$\hat{\boldsymbol{k}}_j = (\sin\theta_j\cos\phi_j,\ \sin\theta_j\sin\phi_j,\ \cos\theta_j) \qquad \text{(C.7)}$$

$$\hat{l}_{jz} = -i\frac{\partial}{\partial\phi_j},\quad \hat{l}_{j+} = e^{i\phi_j}\left(\frac{\partial}{\partial\theta_j}+i\cot\theta_j\frac{\partial}{\partial\phi_j}\right) \qquad \text{(C.8)}$$

$G_l^{(+)}(ij)$，$G_l^{(z)}(ij)$ は論文Ⅰでも重要な役割を果たした量であり，(C.4)，(C.5)の q 和は実行でき簡単な形に表すことができる。それについては論文Ⅰを参照されたい。$\hat{l}_{jz}$，$\hat{l}_{j+}$ は角運動量演算子である。

$m=n=1/2$ のときの結果を証明しよう。このとき(C.3)は次のようになる。

$$b_{1+}(l\mu;\uparrow,\uparrow) = (l+1/2-\mu) \times\sqrt{(l+1/2+\mu)(l+3/2+\mu)} \qquad \text{(C.9)}$$

これを(C.2)に代入して，変換 $\mu=q+1/2$ を行うと

$$G_l^{(1+)}(i\uparrow;j\uparrow) = 4\pi A_l^{(1)}\sum_q (l-q)s_{lq}Y_{l+1,q+1}(\hat{\boldsymbol{k}}_i)\,Y^*_{lq}(\hat{\boldsymbol{k}}_j) \qquad \text{(C.10)}$$

となる。ここで，$\hat{l}_{jz}Y^*_{lq}(\boldsymbol{k}_j) = -qY^*_{lq}(\hat{\boldsymbol{k}}_j)$ と(C.4)を用いると(C.10)が表に示した結果になることは容易にわかる。表に示した他のものについては省略するが，同じように証明できる。

<u>$G_l^{(2+)}(im;jn)$</u>

(C.1)を用いて(4.14a)に含まれる Clebsch-Gordan 係数を計算すると $G_l^{(2+)}(im;jn)$ は次のようになる。

$$G_l^{(2+)}(im;jn) = -A_l^{(2)}\frac{4\pi}{[l][l+1]}\sum_\mu b_{2+}(l\mu;m,n) \times Y_{l+1,\mu+1-m}(\hat{\boldsymbol{k}}_i)\,Y^*_{l,\mu-n}(\hat{\boldsymbol{k}}_j) \qquad \text{(C.11)}$$

$$b_{2+}(l\mu;m,n) = \sqrt{(l+3/2+\mu)(l+5/2+\mu)} \times\sqrt{(l+3/2+2m(\mu+1))(l+1/2+2n\mu)} \qquad \text{(C.12)}$$

ここで，$A_l^{(2)}=[l+1]^{-2}$ である。$G_l^{(1+)}(im;jn)$ についてと同様に m，n の各値について $G_l^{(2+)}(im;jn)$ を計算すると次のようになる。ただし，共通因数 $A_l^{(2)}$ は除いてある。

	$n=1/2$	$n=-1/2$
$m=\frac{1}{2}$	$(l+3-\hat{l}_{jz})G_l^{(+)}(ij)$	$-(l+2-\hat{l}_{jz})G_l^{(z)}(ij)$
$m=-\frac{1}{2}$	$-\hat{l}_{j+}G_l^{(+)}(ij)$	$(l+1+\hat{l}_{jz})G_l^{(+)}(ij)$

<u>$G_l^{(3+)}(im;jn)$</u>

これまでと同様に計算すると(4.14b)で定義される $G_l^{(3+)}(im;jn)$ は $A_l^{(3)}=[l]^{-2}$ とすると次のようになる。

$$G_l^{(3+)}(im;jn) = -A_l^{(3)}\frac{16\pi mn}{[l][l+1]}\sum_\mu b_{3+}(l\mu;m,n) \times Y_{l+1,\mu+1-m}(\hat{\boldsymbol{k}}_i)\,Y^*_{l,\mu-n}(\hat{\boldsymbol{k}}_j) \qquad \text{(C.13)}$$

$$b_{3+}(l\mu;m,n) = \sqrt{(l+1/2+\mu)(l+3/2+\mu)} \times\sqrt{(l+3/2-2m(\mu+1))(l+1/2-2n\mu)} \qquad \text{(C.14)}$$

	$n=1/2$	$n=-1/2$
$m=1/2$	$(l+\hat{l}_{jz})\,G_l^{(+)}(ij)$	$(l-\hat{l}_{jz})\,G_l^{(z)}(ij)$
$m=-1/2$	$\hat{l}_{j+}G_l^{(+)}(ij)$	$(l-\hat{l}_{jz})\,G_l^{(+)}(ij)$

共通因数 $A_l^{(3)}$ は除いてある。最後に，容易に証明できる関係式を述べておく。それは次のものである。

$$(\hat{l}_{iz}+\hat{l}_{jz})\,G_l^{(+)}(ij)=G_l^{(+)}(ij) \qquad (\mathrm{C.15a})$$

$$(\hat{l}_{iz}+\hat{l}_{jz})\,G_l^{(z)}(ij)=0 \qquad (\mathrm{C.15b})$$

$$(\hat{l}_{i+}+\hat{l}_{j+})\,G_l^{(+)}(ij)=0 \qquad (\mathrm{C.15c})$$

$$(\hat{l}_{i}+\hat{l}_{j+})\,G_l^{(z)}(ij)=-G_l^{(z)}(ij) \qquad (\mathrm{C.15d})$$

C.2 $G_l^{(qz)}(im;jn)\,(q=1,2,3)$

以下で用いる $A_l^{(q)}\,(q=1,2,3)$ は上のC.1で定義されており，表では $G_l^{(q+1)}(im;jn)$ に対するのと同様にこの因数は除かれている。

<u>$G_l^{(1z)}(im;jn)$</u>

(4.31a)で定義される $G_l^{(1z)}(im;jn)$ は次のようになる。

$$G_l^{(1z)}(im;jn)=A_l^{(1)}\frac{8\pi m}{[l][l+1]}\sum_\mu b_{1z}(l\mu;m,n)\times Y_{l+1,\mu-m}(\hat{\boldsymbol{k}}_i)\,Y^*_{l,\mu-n}(\hat{\boldsymbol{k}}_j) \qquad (\mathrm{C.16})$$

$$b_{1z}(l\mu;m,n)=\mu\sqrt{(l+3/2-2m\mu)\,(l+1/2+2n\mu)} \qquad (\mathrm{C.17})$$

	$n=1/2$	$n=-1/2$
$m=\frac{1}{2}$	$\left(\frac{1}{2}-\hat{l}_{jz}\right)G_l^{(z)}(ij)$	$-\left(\frac{1}{2}+\hat{l}_{jz}\right)G_l^{(+)}(ij)^*$
$m=-\frac{1}{2}$	$\left(\frac{1}{2}-\hat{l}_{jz}\right)G_l^{(+)}(ij)$	$\left(\frac{1}{2}+\hat{l}_{jz}\right)G_l^{(z)}(ij)$

<u>$G_l^{(2z)}(im;jn)$</u>

(4.31b)で定義される $G_l^{(2z)}(im;jn)$ は次のようになる。

$$G_l^{(2z)}(im;jn)=A_l^{(2)}\frac{4\pi}{[l][l+1]}\sum_\mu b_{2z}(l\mu;m,n)\times Y_{l+1,\mu-m}(\hat{\boldsymbol{k}}_i)\,Y^*_{l,\mu-n}(\hat{\boldsymbol{k}}_j) \qquad (\mathrm{C.18})$$

$$b_{2z}(l\mu;m,n)=\sqrt{(l+3/2-\mu)\,(l+3/2+\mu)}\times\sqrt{(l+3/2+2m\mu)\,(l+1/2+2n\mu)} \qquad (\mathrm{C.19})$$

	$n=1/2$	$n=-1/2$
$m=\frac{1}{2}$	$(l+2-\hat{l}_{jz})\,G_l^{(z)}(ij)$	$(l+1-\hat{l}_{jz})\,G_l^{(+)}(ij)^*$
$m=-\frac{1}{2}$	$-(l+1+\hat{l}_{jz})\,G_l^{(+)}(ij)$	$(l+2+\hat{l}_{jz})\,G_l^{(z)}(ij)$

<u>$G_l^{(3z)}(im;jn)$</u>

(4.31c)で定義される $G_l^{(3z)}(im;jn)$ は次のようになる。

$$G_l^{(3z)}(im;jn)=A_l^{(3)}\frac{16\pi mn}{[l][l+1]}\sum_\mu b_{3z}(l\mu;m,n)\times Y_{l+1,\mu-m}(\hat{\boldsymbol{k}}_i)\,Y^*_{l,\mu-n}(\hat{\boldsymbol{k}}_j) \qquad (\mathrm{C.20})$$

$$b_{3z}(l\mu;m,n)=\sqrt{(l+1/2-\mu)\,(l+1/2+\mu)}\times\sqrt{(l+3/2-2m\mu)\,(l+1/2-2n\mu)} \qquad (\mathrm{C.21})$$

	$n=1/2$	$n=-1/2$
$m=\frac{1}{2}$	$(l+\hat{l}_{jz})\,G_l^{(z)}(ij)$	$-(l-\hat{l}_{jz})\,G_l^{(+)}(ij)^*$
$m=-\frac{1}{2}$	$(l+\hat{l}_{jz})\,G_l^{(+)}(ij)$	$(l-\hat{l}_{jz})\,G_l^{(z)}(ij)$

謝　辞

RAPW 法について有益な議論をして戴きました新潟大学理学部，長谷川彰教授に感謝します。

参考文献

1) R. Pittini, J. Schoenes and P. Wachter: J. Magn. Magn. Mater., **177** (1998) 472.
2) W. Reim and J. Schoenes: *Ferromagnetic Materials*, Vol. 5, eds. K.H.J. Buschow and E. P. Wohlfarth, North-Holland, 1990.
3) 大石浩司, 成田章：秋田高専研究紀要, **34** (1999) 83.
4) P.M. Oppeneer: J. Magn. Magn. Mater., **188** (1998) 275.
5) V.V. Nemoshkalenko and V.N. Antronov: *Computational Methods in Solid State Physics*, Gordon and Breach Science Publishers, 1998.
6) 大石浩司, 成田章：秋田高専研究紀要, **34** (1999) 74.
7) T.L. Loucks: *Augmented Plane Wave Method*, W.A. Benjamin Inc., 1967.
8) L.I. Schiff: *Quantum Mechanics* (third edition), McGraw-Hill. Inc,. 1968.