バンド構造の対称性と光伝導度テンソルの数値計算法

成田　章・佐々木　雅典*

Symmetry of Band Structure and Numerical Calculation Method of Optical Conductivity Tensor

Akira NARITA and Masanori SASAKI*

(2001年11月30日受理)

The numerical calculation method and the properties of the optical conductivity tensor $\tilde{\sigma}(\omega)$ are considered in terms of the band theory. The band calculations are usually carried out in an irreducible part of the Brillouin zone (BZ) determined by the symmetry included in the Hamiltonian H. When a wave vector in this part and a symmetrical operation of H are respectively denoted by $\boldsymbol{k}$ and R, the energies at $R\boldsymbol{k}$ are equal to those at $\boldsymbol{k}$. Further, the matrix elements of the current operators due to the Bloch functions can be given by the linear transformation of those at $\boldsymbol{k}$ using the rotation matrix corresponding to R, and the transformation does not depend on the existence of the spin-orbit interaction. By uses of these properties, the band energies and the matrix elements included in the formula for $\tilde{\sigma}(\omega)$ can be represented using only those in the irreducible part where the band calculations are performed. As a result of it, the region of $\boldsymbol{k}$-integral can be reduced to the part from whole BZ. In this paper, this transformed formula of $\tilde{\sigma}(\omega)$ is really derived. Then, the sum with respect to R of the product of the matrix elements for the current operators is changed into summation of the element in the direct product $R \otimes R$.

When H has the symmetry of the point group O_h, the summation with respect to R immediately mentioned above is easily performable, and gives the properties that the off-diagonal components of $\tilde{\sigma}(\omega)$ are all zero and the diagonal ones are all equal, and further makes the simple expression suitable for the numerical calculation for the diagonal component. For this reason, the magneto-optical phenomena can not be observed for a system having O_h symmetry. The similar summation is also carried out for the system having the lower symmetry of C_{4h} for verifying the possibility of the phenomena, and the some important properties of $\tilde{\sigma}(\omega)$ are obtained.

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り，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，反射率を測定してそのスペクトルのKramers-Kronig解析から光伝導度または誘電率テンソルの対角成分のスペクトルが求められている[1]。

また，通常の光物性とは異なって光と磁気の相互作用が関与する現象は，磁気光学効果として知られていて，代表的なものに磁気光学カー効果とファラデー効果がある[3-5]。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。磁気光学効果は，固体内における電子のなかで，磁性を担う電子の光学遷移が直接的に関係している，というメリットを有し，この効果の測定

* 秋田高専専攻科学生

により光伝導度テンソルの非対角成分のスペクトルを求めることができる。

一方，理論サイドからは，何らかの方法で求めた固体内の電子状態を用いて光伝導度テンソル $\sigma_{\alpha\beta}(\omega)\ (\alpha, \beta = x, y, z)$ を計算し，実験から決められたスペクトル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[2,6-10]。そのときの $\sigma_{\alpha\beta}(\omega)$ 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，電子が Bloch 状態にあればその表式は次のように与えられる[11-12]。

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega) = -\frac{i}{V}\sum_{\nu',\nu}\sum_{k} M_{\nu'\nu}^{(\beta\alpha)}(\boldsymbol{k})\frac{f_{\nu'k}-f_{\nu k}}{E_{\nu'k}-E_{\nu k}} \times\frac{1}{\omega-E_{\nu'k}+E_{\nu k}+i\delta} \tag{1.1}$$

$$M_{\nu'\nu}^{(\beta\alpha)}(\boldsymbol{k}) = \langle\nu'\boldsymbol{k}|J_\beta|\nu\boldsymbol{k}\rangle\langle\nu\boldsymbol{k}|J_\alpha|\nu'\boldsymbol{k}\rangle \tag{1.2}$$

ここで，$\delta = +0$，$E_{\nu k}$ はバンドエネルギー，$|\nu\boldsymbol{k}\rangle$ は Bloch 関数，J_α は電流演算子の α 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していることを注意しておく。従って，ω は照射光のエネルギーに一致する。光の吸収を表す量は，通常の光物性においては $\sigma_{xx}(\omega)$ の実部 $\sigma_{1xx}(\omega)$，磁気光学効果においては $\sigma_{xy}(\omega)$ の虚部 $\sigma_{2xy}(\omega)$ である。

$\sigma_{1xx}(\omega)$ 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 $\langle\nu'\boldsymbol{k}|J_\alpha|\nu\boldsymbol{k}\rangle$ を知らなければならない。これら電子状態に関する量をバンド計算から求めて次にそれらを用いて $\sigma_{1xx}(\omega)$ 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[6-10]。我々も，LaSe について $\sigma_{1xx}(\omega)$ の計算を行って来た[9]。また，Cooper や Oppeneer 等はバンド理論の立場から $\sigma_{2xy}(\omega)$ を計算しているが，計算方法についての詳細な記述がないために計算結果をにわかに信ずる気にはなれないし全面的に正しいわけにも行かないと思われる[6,8]。

この論文の目的は，バンド計算から得られる $E_{\nu k}$ と $|\nu\boldsymbol{k}\rangle$ を用いて $\sigma_{\alpha\beta}(\omega)$ を数値計算するとき，それを容易に実行するための手続きとそれに適した $\sigma_{\alpha\beta}(\omega)$ に対する公式を与えることである。つまり，バンド計算は BZ の既約部分で行われるので，式(1.1)で与えられる光伝導度テンソル $\sigma_{\alpha\beta}(\omega)$ を数値計算するためには，その式に含まれる $E_{\nu k}$ や $M_{\nu'\nu}^{(\beta\alpha)}(\boldsymbol{k})$ をこの既約部分におけるものだけを用いて書き換えておくと便利である。その変形の過程で，$\sigma_{\alpha\beta}(\omega)$ の重要な性質も導くことができる。これらのことは，2節と4節で述べることにする。

$\sigma_{\alpha\beta}(\omega)$ におけるもう一つの注意点は，式(1.1)の Fermi 分布関数についてである。式(1.1)では，$f_{\nu'k}-f_{\nu k}$ となっているがこれは数値積分の実行に対しては扱いにくい形である。都合が良いのは $f_{\nu k}(1-f_{\nu'k})$ の形である。この形に変形することは Appendix A で行う。

2．$\boldsymbol{k}$ 積分の範囲の既約部分への変換

$E_{\nu k}$ と $M_{\nu'\nu}^{(\beta\alpha)}(\boldsymbol{k})$ がわかっているとして話を進める。APW 法における $\langle\nu'\boldsymbol{k}|J_\alpha|\nu\boldsymbol{k}\rangle$ に対する表式は導出されているが，これについては文献を参照されたい[13-14]。

$\sigma_{\alpha\beta}(\omega)$ を計算するためには BZ に亘る $\boldsymbol{k}$ 積分を数値的に実行しなければならない。通常，バンド計算は BZ のある既約部分において行われるので，そこでの $E_{\nu k}$ と $|\nu\boldsymbol{k}\rangle$ は計算するが他の既約部分についてのものは計算しない。しかし，他の部分についてのものは結晶の対称性を利用して既約部分におけるものを用いて表すことができる[15]。従って，$\boldsymbol{k}$ 積分の範囲を BZ 全体から実際にバンド計算を行う既約部分に変換することができる。そのとき積分には，既約部分における $E_{\nu k}$ と $M_{\nu'\nu}^{(\beta\alpha)}(\boldsymbol{k})$ だけが含まれるので $\boldsymbol{k}$ 積分の範囲を狭くすることができて，数値積分に要する時間も節約することができる。ここでは，結晶は共型 (symmorphic) な空間群をもつものに限定し，さらに立方対称の点群 (O_h) を持つと仮定してこの変換を行う。その際，スピン－軌道相互作用がある場合とない場合の両方に言及する。

立方対称を仮定しているので，結晶は点群 O_h の任意の対称操作に関して不変に保たれる。これをもっと厳密に言うと，考察している結晶に対するハミルトニアンが O_h に含まれる対称操作に関して不変に保たれる，ということである。O_h は48個の対称操作からなり，その中の一つの操作を R で表し，操作 R に対応する座標変換の行列も同じ文字 R で表すことにする。このとき，行列 R は直交行列である。既約部分を BZ の中の不等式 $0 \leq k_x \leq k_y \leq k_z$ で与えられる領域にとり，これを(1/48)BZ と表すことにする。いま，$\boldsymbol{k}$ がこの (1/48)BZ 内にあるとすると，式(1.1)における波数ベクトルに関する和は，$\boldsymbol{k}$ に関する和と操作 R に関する和の積に書くことができる。ただし，そのとき式(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 $E_{\nu,Rk}=E_{\nu k}$ を用いると，(1.1)は次のように書くことができる。

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega)=-\frac{i}{V}\sum_{\nu',\nu}\sum_{k}S^{(\beta\alpha)}_{\nu'\nu}(\boldsymbol{k})\frac{f_{\nu'k}-f_{\nu k}}{E_{\nu'k}-E_{\nu k}}\times\frac{1}{\omega-E_{\nu'k}+E_{\nu k}+i\delta}\qquad(2.1)$$

$$S^{(\beta\alpha)}_{\nu'\nu}(\boldsymbol{k})=\sum_{R}M^{(\beta\alpha)}_{\nu'\nu}(R\boldsymbol{k})\qquad(2.2)$$

ここで，$\boldsymbol{k}\in(1/48)$BZ である。式(1.2)からわかるように $M^{(\beta\alpha)}_{\nu'\nu}(\boldsymbol{k})=M^{(\alpha\beta)}_{\nu\nu'}(\boldsymbol{k})$ が成り立つことから，等式

$$S^{(\beta\alpha)}_{\nu'\nu}(\boldsymbol{k})=S^{(\alpha\beta)}_{\nu\nu'}(\boldsymbol{k})\qquad(2.3)$$

が成り立つことが容易にわかる。この節の以下では，式(2.2)で与えられる $S^{(\beta\alpha)}_{\nu'\nu}(\boldsymbol{k})$ について考える。

Bloch 関数 $|\nu,R\boldsymbol{k}\rangle$ は $|\nu\boldsymbol{k}\rangle$ を用いて表すことができて，それは次の式で与えられる[15-16]。

$$|\nu,R\boldsymbol{k}\rangle=O(R)|\nu\boldsymbol{k}\rangle\qquad(2.4)$$

ここで $O(R)$ は対称操作 R に対応する演算子であり $O(R)=O_1(R)O_2(R)$ で与えられる。$O_1(R)$ と $O_2(R)$ はそれぞれ $|\nu\boldsymbol{k}\rangle$ の実空間部分とスピン空間部分に作用する演算子であり，R を単位ベクトル $\boldsymbol{n}$ 方向の軸の回りにおける角度 θ の右回り回転とすると，よく知られているように次の式で与えられる。

$$O_1(R)=\exp(-i\theta\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{n})\qquad(2.5)$$

$$O_2(R)=\exp(-i\theta\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}/2)=\cos(\theta/2)-i\sin(\theta/2)\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}\qquad(2.6)$$

ここで，$\boldsymbol{l}$ は軌道角運動量，$\sigma/2$ は電子のスピン角運動量である。これらの定義式より，$O_1(R)$ と $O_2(R)$ のエルミット共役演算子 $O_1^+(R)$ と $O_2^+(R)$ は逆演算子 $O_1^{-1}(R)$ と $O_2^{-1}(R)$ にそれぞれ等しいことは容易に証明できる。$O_i^{-1}(R)=O_i(R^{-1})\,(i=1,2)$ が成り立つことも容易にわかる。(2.4)を用いると，式(1.2)に含まれる電流演算子の行列要素に対して次式を得る。

$$\langle\nu',R\boldsymbol{k}|J_\beta|\nu,R\boldsymbol{k}\rangle=\langle\nu'\boldsymbol{k}|\hat{J}_\beta|\nu\boldsymbol{k}\rangle\qquad(2.7)$$

$$\hat{J}_\beta=O^+(R)J_\beta O(R)\qquad(2.8)$$

ここで，$O^+(R)=O_2^+(R)O_1^+(R)$ は $O(R)$ のエルミット共役演算子であり，性質 $O^+(R)=O^{-1}(R)=O(R^{-1})$ を持つことは上で述べたように，$O_1(R)$ と $O_2(R)$ がこの性質を持つことから容易にわかる。電流 J_β はベクトル演算子なので操作 R により次のように変換されることが一般的に証明できる[19]。

$$\hat{J}_\beta=\sum_{\mu}R_{\beta\mu}J_\mu\qquad(2.9)$$

ここで，$R_{\beta\mu}$ は変換行列 R の (β,μ) 要素であり Appendix C における(C.11)で定義される。Appendix B において実際に証明されるように，式(2.9)はスピン－軌道相互作用の有無によらず正しい。これを用いると(2.2)で与えられている $S^{(\beta\alpha)}_{\nu'\nu}(\boldsymbol{k})$ は

$$S^{(\beta\alpha)}_{\nu'\nu}(\boldsymbol{k})=\sum_{\mu}\sum_{\lambda}Q_{\beta\mu,\alpha\lambda}M^{(\mu\lambda)}_{\nu'\nu}(\boldsymbol{k})\qquad(2.10)$$

$$Q_{\beta\alpha,\mu\lambda}=\sum_{R}R_{\beta\mu}R_{\alpha\lambda}=\sum_{R}(R\otimes R)_{\beta\alpha,\mu\lambda}\qquad(2.11)$$

となる。ここで，$R\otimes R$ は行列 R どうしの直積を表す。変換行列 R は点群 O_h における既約表現の一つである T_{1u} 表現の表現行列になっているので[16]，群論における大直交定理

$$\sum_{R}R_{\beta\mu}R_{\alpha\lambda}=\frac{g}{3}\delta_{\alpha\beta}\delta_{\mu\lambda}\qquad(2.12)$$

を用いると $Q_{\beta\alpha,\mu\lambda}$ に対する R 和は実行できる[15,16]。右辺の因子(1/3)は T_{1u} が3次元表現であることによるものであり，g は O_h の位数であって $g=48$ である。これより式(2.10)は次のようになる。

$$S^{(\beta\alpha)}_{\nu'\nu}(\boldsymbol{k})=\delta_{\alpha\beta}\,gJ_{\nu'\nu}(\boldsymbol{k})^2\qquad(2.13)$$

$$J_{\nu'\nu}(\boldsymbol{k})^2=\frac{1}{3}\sum_{\mu}M^{(\mu\mu)}_{\nu'\nu}(\boldsymbol{k})=\frac{1}{3}\sum_{\mu}|\langle\nu'\boldsymbol{k}|J_\mu|\nu\boldsymbol{k}\rangle|^2\qquad(2.14)$$

(2.13)と(2.1)より光伝導度テンソルの非対角成分 $\sigma_{\alpha\beta}(\omega)\,(\alpha\neq\beta)$ は0であり，対角成分 $\sigma_{\alpha\alpha}(\omega)\,(\alpha=x,y,z)$ は α によらないことがわかる。これはスピン－軌道相互作用の有無にかかわらず正しく，O_h の対称性を仮定することにより当然予想される結果である。最後に，$\boldsymbol{k}\in(1/48)$BZ であることをいま一度注意しておく。

3．立方対称を持つ結晶の光伝導度テンソル

前節で述べたように，立方対称 O_h を持つ結晶に対しては光伝導度テンソルの非対角成分 $\sigma_{\alpha\beta}(\omega)$ $(\alpha\neq\beta)$ は0であり，対角成分 $\sigma_{\alpha\alpha}(\omega)\,(\alpha=x,y,z)$ は α によらない。このことを，式(2.1)で与えられる光伝導度テンソル $\sigma_{\alpha\beta}(\omega)$ を(2.13)を用いて書き換えると次のようになる。

$$\sigma_{\alpha\alpha}(\omega)=-i\frac{g}{V}\sum_{\nu',\nu}\sum_{k}J_{\nu'\nu}(\boldsymbol{k})^2\frac{f_{\nu'k}-f_{\nu k}}{E_{\nu'k}-E_{\nu k}}\times\frac{1}{\omega-E_{\nu'k}+E_{\nu k}+i\delta}\qquad(3.1)$$

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega)=0\,(\alpha\neq\beta)\qquad(3.2)$$

式(3.1)は $\boldsymbol{k}\in(1/48)$BZ なので対角成分 $\sigma_{\alpha\alpha}(\omega)$ の数値計算に適している。ただし，数値計算においては，Fermi 関数を含む部分 $(f_{\nu'k}-f_{\nu k})$ は Appendix A に述べた手続きに従って $f_{\nu k}(1-f_{\nu'k})$ と変形しておく方がよい。

4．光伝導度テンソルの非対角成分の取り扱い

上の2節と3節で述べたように点群 O_h を持つ空間的に等方的な結晶を考える限り，スピン－軌道相互作用を含むバンド構造を求めたとしても，それを用いて光伝導度テンソルを計算するとその非対角成分 $\sigma_{\alpha\beta}(\omega)\ (\alpha \neq \beta)$ は0になってしまう。このため例えば非対角成分 $\sigma_{xy}(\omega)$ を計算するためには，バンド構造の等方性を壊して対称性を O_h より低いものにしなければならない。磁気光学効果が磁化した物質に対して観測される理由はここにあり，このとき O_h の要素の中で磁化方向のまわりの回転は対称操作として残るが，それと垂直な方向のまわりの回転は対称操作ではなくなっている。対称性を O_h より低くしなければ磁気光学効果は起こらないのである。ここでは一定の磁場をかけて O_h の対称性を壊したときの光伝導度テンソルについて考える。

磁場をかけたときの相対論的Diracハミルトニアンは次のように書ける[20]。

$$H = \begin{pmatrix} mc^2 + V(\boldsymbol{r}) & c\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{p}+e\boldsymbol{A}/c) \\ c\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{p}+e\boldsymbol{A}/c) & -mc^2 + V(\boldsymbol{r}) \end{pmatrix} \tag{4.1}$$

ここで，$\boldsymbol{A}$ はベクトルポテンシャルであり磁場 $\boldsymbol{H}$ と $\boldsymbol{H} = \nabla\times\boldsymbol{A}$ の関係にある。一定磁場 $\boldsymbol{H}$ の方向を z 方向とすると $\boldsymbol{H} = \nabla\times\boldsymbol{A}$ を満足する $\boldsymbol{A}$ は

$$\boldsymbol{A} = \frac{1}{2}\boldsymbol{H}\times\boldsymbol{r} = \frac{1}{2}H(-y, x, 0) \tag{4.2}$$

で与えられる。これを(4.1)に代入してハミルトニアンを，磁場を含む項 H_0 と含まない項 H_1 に分ける。こうすると，H_0 はAppendix Bにおける(B.7)で与えられる通常のDiracハミルトニアンである。また，H_1 は次のように書くことができる。

$$H_1 = \frac{1}{2}eH\begin{pmatrix} 0 & (\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{\sigma})_z \\ (\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{\sigma})_z & 0 \end{pmatrix} \tag{4.3}$$

ここで，$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A} = H(x\sigma_y - y\sigma_x)/2 = H(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{\sigma})_z/2$ と書けることを用いた。H_0 は O_h の対称操作 R のもとで不変である。つまり，次式が成り立つ。

$$O^+(R)H_0O(R) = H_0(R \in O_h) \tag{4.4}$$

これは(2.8)のようなベクトルの変換が(2.9)のように書けることを用いれば容易に証明できる。しかし，H_1 は $R \in O_h$ を満足する全ての R に対して不変ではないがその部分群である点群 C_{4h} の要素に対しては不変である。つまり

$$O^+(R)H_1O(R) = H_1(R \in C_{4h}) \tag{4.5}$$

である。C_{4h} は4回軸の他にこの軸に垂直な平面に関する鏡映をもつ点群である。ここでは，4回軸として磁場が z 方向にあるので z 軸をとっている。

C_{4h} は8個の要素 $E, C_{4z}, C_{2z}, C_{4z}^{-1}, I, IC_{4z}, IC_{2z}, IC_{4z}^{-1}$ からなる。ただし，I は空間反転を表す。4個の要素 $E, C_{4z}, C_{2z}, C_{4z}^{-1}$ に対する回転行列は(C.3)を利用すると次のように与えられる。

$$R(E) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},\ R(C_{4z}) = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$R(C_{2z}) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},\ R(C_{4z}^{-1}) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{4.6}$$

これらの回転行列における全ての要素の符号を変えることにより，その操作と反転 I との積になっている操作の変換行列が得られる。

以上のように，Diracハミルトニアンは磁場を入れることにより O_h から C_{4h} に対称性が下がる。従って，BZの既約部分は O_h に対するものの1/8となる。この(1/8)BZを第一象限にとることにする。第2節では O_h 対称の場合に，バンド構造とBloch関数の対称性を利用して $\boldsymbol{k}$ 積分の範囲をBZの既約部分へ変換した。以下では，同じことを C_{4h} 対称の場合に実行してみる。この場合も，バンドエネルギーは関係式 $E_{\nu,R\boldsymbol{k}} = E_{\nu\boldsymbol{k}}$ を持つので，$S_{\nu'\nu}^{(\beta\alpha)}(\boldsymbol{k})$ に対して(2.10)と同じ式が成り立つ。ただし，R は $R \in C_{4h}$ なる対称操作であり $\boldsymbol{k} \in (1/8)BZ$ である。(2.10)において(4.6)を利用すると R 和は容易に計算できる。その結果，$S_{\nu'\nu}^{(\beta\alpha)}(\boldsymbol{k})$ は次のようになる。

$$S_{\nu'\nu}^{(xx)}(\boldsymbol{k}) = S_{\nu'\nu}^{(yy)}(\boldsymbol{k}) = \frac{g_1}{2}\left[M_{\nu'\nu}^{(xx)}(\boldsymbol{k}) + M_{\nu'\nu}^{(yy)}(\boldsymbol{k})\right] \tag{4.7a}$$

$$S_{\nu'\nu}^{(zz)}(\boldsymbol{k}) = g_1M_{\nu'\nu}^{(zz)}(\boldsymbol{k}) \tag{4.7b}$$

$$S_{\nu'\nu}^{(xy)}(\boldsymbol{k}) = -S_{\nu'\nu}^{(yx)}(\boldsymbol{k}) = \frac{g_1}{2}\left[M_{\nu'\nu}^{(xy)}(\boldsymbol{k}) - M_{\nu'\nu}^{(yx)}(\boldsymbol{k})\right] \tag{4.8}$$

$$S_{\nu'\nu}^{(zx)}(\boldsymbol{k}) = S_{\nu'\nu}^{(xz)}(\boldsymbol{k}) = S_{\nu'\nu}^{(yz)}(\boldsymbol{k}) = S_{\nu'\nu}^{(zy)}(\boldsymbol{k}) = 0 \tag{4.9}$$

ここで，$g_1 = 8$ でありこれは C_{4h} の位数である。等式 $M_{\nu'\nu}^{(yx)}(\boldsymbol{k})^* = M_{\nu'\nu}^{(xy)}(\boldsymbol{k})$ が成り立つことが，式(1.2)に示した $M_{\nu'\nu}^{(\beta\alpha)}(\boldsymbol{k})$ に対する定義式より容易にわかるので，これを(4.8)で利用すると $S_{\nu'\nu}^{(xy)}(\boldsymbol{k})^* = -S_{\nu'\nu}^{(xy)}(\boldsymbol{k})$ を得ることができる。これより $S_{\nu'\nu}^{(xy)}(\boldsymbol{k})$ は純虚数であることがわかる。

$S_{\nu'\nu}^{(\beta\alpha)}(\boldsymbol{k})$ について上で述べた結果から光伝導度テンソルが次の形になることは容易にわかる。

$$\tilde{\sigma}(\omega) = \begin{pmatrix} \sigma_{xx}(\omega) & \sigma_{xy}(\omega) & 0 \\ -\sigma_{xy}(\omega) & \sigma_{xx}(\omega) & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{zz}(\omega) \end{pmatrix} \tag{4.10}$$

これより，C_{4h} 対称のもとでは O_h のときに比べて非対角成分のなかに 0 でないもの $\sigma_{xy}(\omega)$ があって，性質 $\sigma_{yx}(\omega) = -\sigma_{xy}(\omega)$ を持つ。また，対角成分も全ては等しくなく $\sigma_{xx}(\omega) = \sigma_{yy}(\omega) \neq \sigma_{zz}(\omega)$ となっている。各成分は次の式で与えられる。

$$\sigma_{xx}(\omega) = -i\frac{g_1}{V}\sum_{\nu',\nu}\sum_{k} J^{(xx)}_{\nu'\nu}(\boldsymbol{k})\frac{f_{\nu'k}-f_{\nu k}}{E_{\nu'k}-E_{\nu k}} \times \frac{1}{\omega - E_{\nu'k}+E_{\nu k}+i\delta} \tag{4.11a}$$

$$J^{(xx)}_{\nu'\nu}(\boldsymbol{k}) = \frac{1}{2}(|\langle\nu'\boldsymbol{k}|J_x|\nu\boldsymbol{k}\rangle|^2 + |\langle\nu'\boldsymbol{k}|J_y|\nu\boldsymbol{k}\rangle|^2) \tag{4.11b}$$

$$\sigma_{zz}(\omega) = -i\frac{g_1}{V}\sum_{\nu',\nu}\sum_{k} J^{(zz)}_{\nu'\nu}(\boldsymbol{k})\frac{f_{\nu'k}-f_{\nu k}}{E_{\nu'k}-E_{\nu k}} \times \frac{1}{\omega - E_{\nu'k}+E_{\nu k}+i\delta} \tag{4.12a}$$

$$J^{(zz)}_{\nu'\nu}(\boldsymbol{k}) = |\langle\nu'\boldsymbol{k}|J_z|\nu\boldsymbol{k}\rangle|^2 \tag{4.12b}$$

$$\sigma_{xy}(\omega) = -\frac{g_1}{V}\sum_{\nu',\nu}\sum_{k} J^{(xy)}_{\nu'\nu}(\boldsymbol{k})\frac{f_{\nu'k}-f_{\nu k}}{E_{\nu'k}-E_{\nu k}} \times \frac{1}{\omega - E_{\nu'k}+E_{\nu k}+i\delta} \tag{4.13a}$$

$$J^{(xy)}_{\nu'\nu}(\boldsymbol{k}) = \frac{1}{2i}(\langle\nu'\boldsymbol{k}|J_x|\nu\boldsymbol{k}\rangle\langle\nu\boldsymbol{k}|J_y|\nu'\boldsymbol{k}\rangle - \langle\nu'\boldsymbol{k}|J_y|\nu\boldsymbol{k}\rangle\langle\nu\boldsymbol{k}|J_x|\nu'\boldsymbol{k}\rangle) \tag{4.13b}$$

ここで，$\boldsymbol{k} \in (1/8)B.Z.$ であり $J^{(xy)}_{\nu'\nu}(\boldsymbol{k})$ は実になるように選ばれている。

$\sigma_{xy}(\omega)$ の数値的な計算のためには式(4.13)が適している。ただし，$f_{\nu'k}-f_{\nu k}$ を $f_{\nu k}(1-f_{\nu'k})$ で置き換えるという Appendix A で述べる手続きをするのは当然である。しかし，ここで問題になるのは，磁場が入った場合のバンド計算を行って $E_{\nu k}$ と $|\nu\boldsymbol{k}\rangle$ を求めることである。式(4.3)で与えられる H_1 を見ればわかるように，これは座標 x, y を含むので磁場 H が小さくても空間的に遠方では十分大きくなる。このため，H_1 を摂動として扱うことは良くない。しかし，これ以外に方法はないようにも思われるので，結局，摂動論に頼るしかないであろう。摂動論で考えると，$\sigma_{xy}(\omega)$ において，これまでに明らかにしたように磁場 H の 0 次の項は消える。従って，1 次の項を求めなければならないが，これは大変に難儀なことであると思われる。

これまでは磁場を入れることによって O_h 対称性を壊したが，強磁性に対するバンド計算を行って磁化を作り出し O_h 対称性を壊したバンド構造と Bloch 関数を得て，それらを $\sigma_{xy}(\omega)$ の数値計算に使うのも一つのやり方であろう。

いずれにせよ，磁気光学効果は入射光が軌道とスピンの間の相互作用を仲立ちにして間接的に磁気と相互作用することにより起こるので，スピン－軌道相互作用を含むバンド計算を行うことは大前提であると思われる。

5．まとめと課題

バンド計算の立場から光伝導度テンソルの対角成分と非対角成分を数値的に計算する方法とそれらの性質について議論して次のことがらを明らかにした。

1)　バンド計算は通常ハミルトニアンが持っている対称性に従って決められるブリルアンゾーン (BZ) のある既約部分において行われる。この既約部分に含まれる任意の波数ベクトルを $\boldsymbol{k}$，ハミルトニアンの任意の対称操作を R で表すと，$R\boldsymbol{k}$ におけるバンドエネルギーは $\boldsymbol{k}$ におけるものに等しい。また，Bloch 関数による電流演算子の行列要素は，スピン－軌道相互作用の有無によらず回転行列 R を用いて $\boldsymbol{k}$ におけるものの線形変換で与えられる。光伝導度テンソルに対する表式において，これらの性質を利用すると $\boldsymbol{k}$ 積分に含まれるバンドエネルギーと行列要素はバンド計算を実行する既約部分におけるものだけを用いて表すことができ，その結果として $\boldsymbol{k}$ 積分の範囲を BZ 全体からその既約部分へ縮小することができる。この論文では，この変換を実際に行った表式を導いた。そのとき，表式に含まれる電流演算子の行列要素の積に関する R 和は，上で述べた回転行列の直積 $(R \otimes R)$ における要素の R に関する和に書き換えることができる。

2)　バンド構造を与えるハミルトニアンが点群 O_h の対称性を持つとき，上で述べた直積 $(R \otimes R)$ における要素の R に関する和は容易に実行できる。その結果，光伝導度テンソルの非対角成分は全て 0 であることと，対角成分は全て等しいことがわかった。そのときの対角成分に対する表式は数値計算に適している。

3)　磁気光学効果に関係している光伝導度テンソルの非対角成分が 0 でない値を持つためには，バンド構造の対称性が O_h より低くなければならない。このため，一定磁場を加えることにより対称性を C_{4h} へ下げて，光伝導度テンソルについて議論した。そして，上記1) で述べた直積の R 和を C_{4h} のもとで実行することにより，光伝導度テン

ソルの非対角成分のなかに 0 でないもの $\sigma_{xy}(\omega)$ があって性質 $\sigma_{yx}(\omega) = -\sigma_{xy}(\omega)$ を持つことがわかった。また，対角成分も全ては等しくなく $\sigma_{xx}(\omega) = \sigma_{yy}(\omega) \neq \sigma_{zz}(\omega)$ となることがわかった。バンド理論の立場から磁気光学効果を計算するためには，今後の課題は，すぐ上で述べたように，C_{4h} 対称を持つバンド構造と Bloch 関数をどのようにして求めるかである。

Appendix A　Fermi 分布関数の取り扱い

式(1.1)に含まれる Fermi 関数を $f_{\nu'k}-f_{\nu k} = f_{\nu'k}(1-f_{\nu k})-f_{\nu k}(1-f_{\nu'k})$ のように書くとそれは次のようになる。

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega) = -\frac{i}{V}\sum_{\nu',\nu}\sum_{k} M^{(\beta\alpha)}_{\nu'\nu}(\boldsymbol{k})\frac{f_{\nu'k}(1-f_{\nu k})}{E_{\nu'k}-E_{\nu k}} \times\frac{1}{\omega-E_{\nu'k}+E_{\nu k}+i\delta} \tag{A.1a}$$

$$+\frac{i}{V}\sum_{\nu',\nu}\sum_{k} M^{(\beta\alpha)}_{\nu'\nu}(\boldsymbol{k})\frac{f_{\nu k}(1-f_{\nu'k})}{E_{\nu'k}-E_{\nu k}} \times\frac{1}{\omega-E_{\nu'k}+E_{\nu k}+i\delta} \tag{A.1b}$$

上式右辺第 1 項において，ν と ν' を交換してまとめると次のようになる。

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{i}{V}\sum_{\nu',\nu}\sum_{k}\frac{f_{\nu k}(1-f_{\nu'k})}{E_{\nu'k}-E_{\nu k}} \times\left[\frac{M^{(\beta\alpha)}_{\nu'\nu}(\boldsymbol{k})}{\omega-E_{\nu'k}+E_{\nu k}+i\delta}+\frac{M^{(\alpha\beta)}_{\nu'\nu}(\boldsymbol{k})}{\omega+E_{\nu'k}-E_{\nu k}+i\delta}\right] \tag{A.2}$$

これより，[ ]の中の第 1 項は光の吸収，第 2 項は放出に関係していることがわかる。式(1.2)からわかるように $M^{(\alpha\alpha)}_{\nu'\nu}(\boldsymbol{k})$ は実なので，対角成分 $\sigma_{\alpha\alpha}(\omega)$ は実部と虚部に容易に分離できる。しかし，非対角成分は $M^{(\beta\alpha)}_{\nu'\nu}(\boldsymbol{k})$ が一般には実ではないので(A.2)から両者を分離することは難しい。分離できる形にするには，次のようにする。固体が点群 C_{4h} 対称を持てば関係式 $\sigma_{\alpha\beta}(\omega) = -\sigma_{\beta\alpha}(\omega)\,(\alpha \neq \beta)$ が成り立つ。このときはこの関係式を利用すると，$\sigma_{xy}(\omega)$ は $\sigma_{xy}(\omega) = [\sigma_{xy}(\omega)-\sigma_{yx}(\omega)]/2$ と書ける。これを計算することにより

$$\sigma_{xy}(\omega) = \frac{i}{2V}\sum_{\nu',\nu}\sum_{k}\left[M^{(yx)}_{\nu'\nu}(\boldsymbol{k})-M^{(xy)}_{\nu'\nu}(\boldsymbol{k})\right]\frac{f_{\nu k}(1-f_{\nu'k})}{E_{\nu'k}-E_{\nu k}} \times\left[\frac{1}{\omega-E_{\nu'k}+E_{\nu k}+i\delta}-\frac{1}{\omega+E_{\nu'k}-E_{\nu k}+i\delta}\right] \tag{A.3}$$

のようになる。さらに式(1.2)より行列要素の部分は

$$M^{(yx)}_{\nu'\nu}(\boldsymbol{k})-M^{(xy)}_{\nu'\nu}(\boldsymbol{k}) = \frac{i}{2}\left[|\langle\boldsymbol{\nu'k}|J_-|\boldsymbol{\nu k}\rangle|^2-|\langle\boldsymbol{\nu'k}|J_+|\boldsymbol{\nu k}\rangle|^2\right] \tag{A.4}$$

と書くことができるので純虚数であることがわかる。従って，(A.3)を実部と虚部へ分離することは容易である。ただし，$J_\pm = J_x \pm iJ_y$ である。

Appendix B　式(2.9)の証明

B.1　スピン軌道相互作用のない場合

スピン－軌道相互作用がない場合，ハミルトニアンは $H = \boldsymbol{p}^2/2m+V(\boldsymbol{r})$ と書けるとしてよい。電流演算子 J_μ は $J_\mu = -e\dot{x}_\mu$ で与えられるので $\dot{x}_\mu = [x_\mu, H]/i\hbar = p_\mu/m$ より運動量を用いて $J_\mu = -ep_\mu/m$ と書くことができる。ここで，$-e$ は電子の電荷である。従って変換 $\hat{J}_\mu$ は

$$\hat{J}_\mu = O^+(R)J_\mu O(R) = -\frac{e}{m}O_1^+(R)O_2^+(R)p_\mu O_2(R)O_1(R) = -\frac{e}{m}O_1^+(R)p_\mu O_1(R) \tag{B.1}$$

となり，p_μ の変換で表すことができる。ここで，$O_2(R)$ はスピンに依存する演算子なので $O_1(R)$ および p_μ と可換であること及び $O_2^+(R)O_2(R) = 1$ を用いた。本文の式(2.5)により定義したように，$O_1(R)$ は角運動量を用いて表すことができ，更に Euler の角 α, β, γ を用いるとよく知られているように

$$O_1(R) = \exp(-i\alpha l_z)\exp(-i\beta l_y)\exp(-i\gamma l_z) \tag{B.2}$$

の形にも書くことができる。ここで，(B.2)に含まれる指数関数型の演算子に対しては Maclaurin 展開による定義式，例えば $\exp(-i\alpha l_z)$ に対しては

$$\exp(-i\alpha l_z) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-i\alpha)^n}{n!}l_z^n \tag{B.3}$$

を用いる。そして交換関係

$$[l_z, p_x] = ip_y,\quad [l_z, p_y] = ip_x,\quad [l_y, p_x] = ip_z,\quad [l_y, p_z] = ip_x, \tag{B.4}$$

を利用して，少々長い計算をすることにより次の式を証明することができる。

$$O_1^+(R)p_\mu O_1(R) = \sum_{\lambda} R_{\mu\lambda}\,p_\lambda \tag{B.5}$$

ここで，$R_{\mu\lambda}$ は式(C.11)で定義される回転行列の (μ, λ) 要素である。この関係式を(B.1)に代入すると本文の式(2.9)を得ることができる。また，(B.5)は行ベクトル $\boldsymbol{p} = (p_x, p_y, p_z)$ を用いると

$$O_1^+(R)\boldsymbol{p}O_1(R) = \boldsymbol{p}R^{-1} \tag{B.6a}$$

のように書くことができる。この形の関係式は行ベクトル $\boldsymbol{r} = (x, y, z)$ と $\boldsymbol{l} = (l_x, l_y, l_z)$ に対しても成り立つことを容易に証明することができる。

$$O_1^+(R)\,\boldsymbol{r}O_1(R) = \boldsymbol{r}R^{-1} \tag{B.6b}$$

$$O_1^+(R)\,\boldsymbol{l}O_1(R) = \boldsymbol{l}R^{-1} \tag{B.6c}$$

この証明には，$\boldsymbol{r}$ と $\boldsymbol{l}$ および $\boldsymbol{l}$ どうしの間の交換関係が(B.4)で与えられる $\boldsymbol{p}$ と $\boldsymbol{l}$ とのものに似ていることを利用すればよい。

B.2 スピン軌道相互作用のある場合

スピン軌道相互作用がある場合として，相対論的 Dirac ハミルトニアンで記述される系を考える[20]。このハミルトニアンは

$$H = \begin{pmatrix} mc^2 + V(\boldsymbol{r}) & c\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p} \\ c\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p} & -mc^2 + V(\boldsymbol{r}) \end{pmatrix} \tag{B.7}$$

で与えられる。ここで，c は光速，$\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ は Pauli のスピン行列であり (C.1) で与えられる。$\dot{x}_\mu = [x_\mu, H]/i\hbar$ を計算することにより

$$J_\mu = -ec\begin{pmatrix} 0 & \sigma_\mu \\ \sigma_\mu & 0 \end{pmatrix} \tag{B.8}$$

となることは容易にわかる[20]。従って変換 $\hat{J}_\mu$ は

$$\hat{J}_\mu = O^+(R)J_\mu\,O(R) = -ec\begin{pmatrix} 0 & O_2^+(R)\,\sigma_\mu O_2(R) \\ O_2^+(R)\,\sigma_\mu O_2(R) & 0 \end{pmatrix} \tag{B.9}$$

となる。ここで $O_1(R)$ がスピン演算子と可換であることを用いた。Appendix C において証明するように

$$O_2^+(R)\,\sigma_\mu O_2(R) = \sum_\lambda R_{\mu\lambda}\,\sigma_\lambda \tag{B.10}$$

が成り立つので，これを用いると

$$\hat{J}_\mu = \sum_\lambda R_{\mu\lambda}\,J_\lambda \tag{B.11}$$

となる。これはスピン－軌道相互作用がないときと同じ形である。

相対論的効果には質量－速度項，Darwin 項およびスピン－軌道相互作用の3種類がある。Dirac ハミルトニアンはこれらの効果を全て含むが，非相対論的ハミルトニアンにスピン－軌道相互作用だけを加えたものもしばしば使われる。それは

$$H = \boldsymbol{p}^2/2m + V(\boldsymbol{r}) + \frac{1}{4m^2c^2}(\boldsymbol{\sigma}\times\nabla V(\boldsymbol{r}))\cdot\boldsymbol{p} \tag{B.12}$$

である[20]。これより $\dot{x}_\mu = [x_\mu, H]/i\hbar$ を計算することにより J_μ は

$$J_\mu = -e\dot{x}_\mu = -\frac{e}{m}\pi_\mu \tag{B.13}$$

となる。ここで，π はスピン－軌道相互作用がないときの $\boldsymbol{p}$ に対応するものであり

$$m\dot{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{\pi} = \boldsymbol{p} + \frac{1}{4mc^2}\boldsymbol{\sigma}\times\nabla V(\boldsymbol{r}) \tag{B.14}$$

で与えられる。計算の結果，π_x の変換 $\hat{\pi}_x$ は次のようになる。

$$\hat{\pi}_x = O^+(R)\,\pi_x O(R) = \sum_\lambda R_{x\lambda}\,p_\lambda + \frac{1}{4mc^2}\sum_\lambda D(R)_{x\lambda}(\boldsymbol{\sigma}\times\nabla V(\boldsymbol{r}))_\lambda \tag{B.15}$$

ここで，$D(R)_{x\lambda}$ は回転行列 R の (x, λ) 要素 $R_{x\lambda}$ に対する余因子である。R の行列式が1であることおよびこれの1行目に関する余因子展開より

$$\sum_\lambda R_{x\lambda}\,D(R)_{x\lambda} = 1 \tag{B.16}$$

が成り立つ。これと R の直交性

$$\sum_\lambda R_{x\lambda}{}^2 = 1 \tag{B.17}$$

を比較すると $D(R)_{x\lambda} = R_{x\lambda}$ であることがわかる。従って，

$$\hat{\pi}_x = \sum_\lambda R_{x\lambda}\left(p_\lambda + \frac{1}{4mc^2}(\boldsymbol{\sigma}\times\nabla V(\boldsymbol{r}))_\lambda\right) = \sum_\lambda R_{x\lambda}\,\pi_\lambda \tag{B.18}$$

となる。π_y, π_z も似た変換式で与えられることが同じように証明できる。これよりスピン－軌道相互作用が(B.12)のハミルトニアンにおける一つの項として与えられるときも J_μ は(B.11)と同じ変換に従うことがわかる。

Appendix C　式(B.10)の証明

(B.10)の証明を述べる前に補助定理を2つ証明しておく。

［補助定理1］

$\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ を Pauli のスピン行列

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

とし，$\boldsymbol{k}$ を任意の行ベクトル $\boldsymbol{k} = (k_x, k_y, k_z)$ とする。また，単位ベクトル $\boldsymbol{n} = (n_x, n_y, n_z)$ 方向の軸のまわりにおける角度 θ の右回り回転を R とする。このとき次の等式が成り立つ。

$$O_2^+(R)\,(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{k})\,O_2(R) = \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{k}S(R) \tag{C.2}$$

ただし，変換行列 $S(R)$ は

$$S(R)=\begin{pmatrix} c+n_x^2(1-c) & n_xn_y(1-c)-n_zs & n_xn_z(1-c)+n_ys \\ n_xn_y(1-c)+n_zs & c+n_y^2(1-c) & n_yn_z(1-c)-n_xs \\ n_xn_z(1-c)-n_ys & n_yn_z(1-c)+n_xs & c+n_z^2(1-c) \end{pmatrix} \tag{C.3}$$

で与えられる。ただし，$c=\cos\theta$, $s=\sin\theta$ である。

（証明）

演算子 $O_2(R)$，$O_2^+(R)$ はよく知られているように

$$O_2(R)=\exp(-i\theta\sigma\cdot\boldsymbol{n}/2)$$
$$=\cos(\theta/2)-i\sin(\theta/2)\,\sigma\cdot\boldsymbol{n} \tag{C.4a}$$
$$O_2^+(R)=\exp(i\theta\sigma\cdot\boldsymbol{n}/2)$$
$$=\cos(\theta/2)+i\sin(\theta/2)\,\sigma\cdot\boldsymbol{n} \tag{C.4b}$$

で与えられる[15-18]。(C.4) と次の公式

$$(\sigma\cdot\boldsymbol{k})(\sigma\cdot\boldsymbol{n})=\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{n}+i\sigma\cdot(\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{n}) \tag{C.5a}$$
$$\boldsymbol{n}\times(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{k})=(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{k})\boldsymbol{n}-(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{n})\boldsymbol{k} \tag{C.5b}$$

を用いて少し長い計算をすると

$$O_2^+(R)(\sigma\cdot\boldsymbol{k})O_2(R)$$
$$=\exp(i\theta\sigma\cdot\boldsymbol{n}/2)(\sigma\cdot\boldsymbol{k})\exp(-i\theta\sigma\cdot\boldsymbol{n}/2)$$
$$=\sigma\cdot\boldsymbol{K} \tag{C.6}$$
$$\boldsymbol{K}=\cos\theta\boldsymbol{k}-\sin\theta\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{k}+(1-\cos\theta)(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{k})\boldsymbol{n} \tag{C.7}$$

を得る。(C.7) より行ベクトル $\boldsymbol{K}=(K_x, K_y, K_z)$ の成分を計算すると次のようになる。

$$K_x=(A+n_x^2B)k_x+(n_xn_yB+n_zC)k_y+(n_xn_zB-n_yC)k_z \tag{C.8a}$$
$$K_y=(n_xn_yB-n_zC)k_x+(A+n_y^2B)k_y+(n_yn_zB+n_xC)k_z \tag{C.8b}$$
$$K_z=(n_xn_zB+n_yC)k_x+(n_yn_zB-n_xC)k_y+(A+n_z^2B)k_z \tag{C.8c}$$

ここで，$A=\cos\theta$, $B=1-\cos\theta$, $C=\sin\theta$ である。(C.8) を 3 次の行列 $S(R)$ を導入して $\boldsymbol{K}=\boldsymbol{k}S(R)$ のように書くと，$S(R)$ は (C.3) で与えられることが容易にわかる。（終り）

［補助定理 2］

回転操作 R がオイラーの角 α, β, γ を用いて表されるとき演算子 $O_2(R)$ は

$$O_2(R)$$
$$=\exp(-i\alpha\sigma_z/2)\exp(-i\beta\sigma_y/2)\exp(-i\gamma\sigma_z/2) \tag{C.9}$$

で与えられる[15]。このとき等式 (C.2) における行列 $S(R)$ は回転操作 R に対応する座標変換の行列 R に等しく

$$O_2^+(R)(\sigma\cdot\boldsymbol{k})O_2(R)=\sigma\cdot\boldsymbol{k}R \tag{C.10}$$

$$R=\begin{pmatrix}\cos\alpha & -\sin\alpha & 0\\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\beta & 0 & \sin\beta\\ 0 & 1 & 0\\ -\sin\beta & 0 & \cos\beta\end{pmatrix}$$
$$\times\begin{pmatrix}\cos\gamma & -\sin\gamma & 0\\ \sin\gamma & \cos\gamma & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix} \tag{C.11}$$

で与えられる。

（証明）

(C.9) を (C.10) の左辺に代入して，補助定理 1 を内側から順に 3 回使うと (C.11) の右辺は容易に証明できて，$S(R)=R$ であることがわかる。また，(C.11) で与えられる行列は文献を参照すると回転操作 R に対応する座標変換の行列に等しいこともわかる[15,19]。（終り）

ここで次のことを注意しておく。補助定理 1 と補助定理 2 で述べた回転操作が同じものであると見なせば，つまり 1 つの軸の回りの回転をオイラー角で表したと見れば，(C.3), (C.11) で与えられる 2 つの変換行列も同じものである。これから n_x, n_y, n_z, θ と α, β, γ との間の関係式を導くことができる。

補助定理 2 から式 (B.10) はすぐに証明できる。(C.10) は $\boldsymbol{k}=(1,0,0)$ とおくと

$$O_2^+(R)\sigma_xO_2(R)=\sum_\mu R_{x\mu}\,\sigma_\mu \tag{C.12}$$

となる。同様に，$\boldsymbol{k}=(0,1,0), (0,0,1)$ とおくことにより似たような式を得ることができる。これらをまとめると次のように表現できる。

$$O_2^+(R)\sigma_\alpha O_2(R)=\sum_\mu R_{\alpha\mu}\,\sigma_\mu \tag{C.13}$$

これは (B.10) 式である。

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) W. Reim and J. Schoenes: *Ferromagnetic Materials,* Vol. 5, eds. K.H.J. Buschow and E. P. Wohlfarth, North-Holland, 1990.
4) J. Schoenes: *Handbook on the Physics and Chemistry of the Actinides,* Vol. 1, eds. A.J. Freeman and G.H. Lander, North-Holland, 1984.

5) 佐藤勝昭：「光と磁気」, 朝倉書店(1990).
6) S.P. Lim, B.R. Cooper, Q.G. Shen and D.L. Price: Physica **B 186-188** (1993) 56.
7) V.P. Antropov, A.I. Liechtenstein and B.H. Harmon: J. Magn. Magn. Mater., **140-144** (1995) 1161.
8) P.M. Oppeneer: J. Magn. Magn. Mater., **188** (1998) 275.
9) 大石浩司, 成田章：秋田高専研究紀要, **34** (1999) 83.
10) A. Narita and J. Schoenes: Physica **B 186-188** (1993) 580.
11) R. Kubo: J. Phys. Soc. Jpn, **12** (1957) 570.
12) H.S. Bennett and E.A. Stern: Phys. Rev., **137** (1965) A448.
13) 成田章, 大石浩司：秋田高専研究紀要, **34** (1999) 74.
14) 成田章：秋田高専研究紀要, **36** (2001) 90.
15) 犬井鉄郎, 田辺行人, 小野寺嘉孝：「応用群論」, 裳華房 (1976)
16) J.F. Cornwell: *Group Theory and Electronic Energy Bands in Solids,* North-Holland, 1969.
17) A.W. Luehrmann: Adv. Phys., **17** (1968) 1.
18) C.J. Bradley and A.P. Cracknell: *The Mathematical Theory of Symmetry in Solids*, Clarendon Press (1972).
19) A. Messiah: *Quantum Mechanics,* Appendix C-IV, North-Holland, Amsterdam, 1969.
20) L.I. Schiff: *Quantum Mechanics,* McGraw-Hill Inc., 1968.