

物性理論における群論的分岐理論入門¹ (その3)²

—対称性の破れのための群論入門—

尾崎 正明

(2004 年 3 月 29 日受理)

は し が き

その1では群論と群論的分岐理論の基礎を群 G_0 に不変な多変数関数の変分問題に即して解説した。群 G_0 の既約表現と、その表現空間における固定部分群の考察により、群 G_0 に不変な関数の極値問題の解法が簡単化される事を示した。

その2では平均場近似の最も一般性のある理論である Hartree-Fock-Bogoljubov(HFB) 理論が、系の対称性の群 G_0 に不変な関数 F_{HFB} (HFB 自由エネルギー) の極値問題として定式化出来ることを示した。その1で述べた群論的分岐理論の手法を HFB 理論に適用し、2次元正方格子上的拡張 Hubbard 模型を例にとって電荷密度波、反強磁性等の超伝導状態以外の対称性が破れた状態を導き出した。

その3では群論的分岐理論を用いて、拡張 Hubbard 模型の超伝導状態、縮退 Hubbard 模型の軌道秩序状態等の対称性を考察する³。

第9章では2次元正方格子上的拡張 Hubbard 模型の超伝導状態のシングレットおよびトリプレット超伝導状態の群論的分類を行なう。s-波、d-波シングレット超伝導状態、多様なトリプレット超伝導状態が既約表現の固定部分群から自然に導かれることを示す。既約表現の固定部分群を系統的に求める方法を付録Fに詳しく説明した。ここで説明した方法を駆使すれば、他の既約表現の固定部分群も求めることができる。

第10章では2次元正方格子上的原子軌道が $(d_{yz}, d_{zx}), d_{xy}$ からなる縮退 Hubbard 模型における超伝導以外の状態の対称性について述べる。その中で各種の軌道秩序状態やスピン、軌道、電荷が関連しあう複雑な状態が固定部分群より系統的に得られることを示す。

以上は正方対称を持つ系についての議論であるが、その六方対称、立方対称を持つ系への適用は付録Fで用いた方法を使えば容易に出来ると考える。

¹本稿は、編集部の方から特にお願ひして執筆していただいた記事である。

²その1は物性研究 78 (2002), 511 に、その2は物性研究 80 (2003), 205 に掲載。

³反強磁性、強磁性と超伝導の共存状態、磁場中のボルテックス格子状態についても解説する予定であったが、紙面の都合で割愛する。

目次

第 9 章	2次元正方格子上的超伝導状態の群論的分類	481
9.1	一般的諸公式	481
9.2	スピンスingレット超伝導状態	492
9.3	スピントリプレット超伝導状態	500
第 10 章	縮退 Hubbard 模型における非超伝導状態の群論的分類	539
10.1	ハミルトニアンとその対称性の群 G_0	540
10.2	一般的諸公式	543
10.3	G_0 の既約表現	551
10.4	Γ 点非磁性状態	554
10.5	Γ 点磁性状態	561
10.6	M 点非磁性状態	567
10.7	M 点磁性状態	573
10.8	X 点非磁性状態	580
10.9	X 点磁性状態	585
10.10	2 段階相転移で起こりえる状態	593
付 録 F	スピントリプレット超伝導状態の固定部分群の導出	599
F.1	OPS(Opposite Spin Pairing) 状態	599
F.2	SSS(Single Spin Pairing) 状態	608
F.3	ESP(Equal Spin Pairing) 状態	611
付 録 G	その 1, その 2 正誤表	620
参考文献		623

その 1 主要目次

第 1 章	対称性の破れとは
第 2 章	群と部分群
第 3 章	既約表現
第 4 章	群不変な関数の変分問題の解の分岐理論
第 5 章	正方対称性を有する系のスピンスingレット超伝導の Ginzburg-Landau 理論

その 2 主要目次

第 6 章	変分問題としての Hartree-Fock-Bogoljubov 方程式とその解の対称性
第 7 章	2次元正方格子上的拡張 Hubbard 模型の対称性の群 G_0 とその既約表現
第 8 章	2次元正方格子上的拡張 Hubbard 模型の非超伝導状態

第9章 2次元正方格子上的拡張 Hubbard 模型の超伝導状態の群論的分類

第9章では2次元格子上的拡張 Hubbard 模型の超伝導状態を取り扱う²⁷⁾。通常の超伝導状態は並進対称性を有するので¹, 正方格子の空間群 $P = L(e_1, e_2)D_{4h}$ の既約表現 $\check{P}$ としてはオーダリングベクトルが Γ 点 $\mathbf{k} = (0, 0)$ の場合だけ考察する。この場合の最も一般的平均場ハミルトニアンは

$$H_m = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} \left\{ z^0(\mathbf{k})_{ss'} a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s'} + \frac{1}{2} z^2(\mathbf{k})_{ss'} a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{(-\mathbf{k})s'}^\dagger + \frac{1}{2} z^2(\mathbf{k})_{ss'}^* a_{(-\mathbf{k})s'} a_{\mathbf{k}s} \right\} \quad (9.1)$$

である。 $z^2(\mathbf{k})_{ss'}$ のタイプによって様々な超伝導状態が記述できる。

超伝導状態を考察するので $G_0 = P \times S \times R$ の既約表現が

$$\begin{aligned} \check{G}_0^{(\Gamma j, 0, 2)} &= \check{P}^{(\Gamma j)} \otimes \check{S}^{(0)} \otimes \check{R}^{(2)} \\ \check{G}_0^{(\Gamma j, 1, 2)} &= \check{P}^{(\Gamma j)} \otimes \check{S}^{(1)} \otimes \check{R}^{(2)} \end{aligned} \quad (9.2)$$

に属する不安定性 (第4章 $\ker L$ に対応) より導かれる状態を取り上げることになる。 $\check{G}_0^{(\Gamma j, 0, 2)}$ からはスピンスングレット超伝導状態が³, $\check{G}_0^{(\Gamma j, 1, 2)}$ からはスピントリプレット超伝導状態が導かれる。空間群 $L(e_1, e_2)D_{4h}$ の Γ 点での既約表現, すなわち D_{4h} の既約表現 j によってシングレットおよびトリプレット超伝導状態がさらに細分化される。

9.1 一般的諸公式

第9.1節では第9章全体にわたって使われる諸公式を挙げておく。(9.1)の平均場ハミルトニアンは次のように書き直すことができる。

$$\begin{aligned} H_m &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} \sum_{\lambda=0}^3 \left\{ x_0^\lambda(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}s}^\dagger \sigma_{ss'}^\lambda a_{\mathbf{k}s'} \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} y^\lambda(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}s}^\dagger (i\sigma^\lambda \sigma^2)_{ss'} a_{(-\mathbf{k})s'}^\dagger + \frac{1}{2} (y^\lambda(\mathbf{k}))^* a_{(-\mathbf{k})s'} (i\sigma^\lambda \sigma^2)_{ss'}^* a_{\mathbf{k}s} \right\} \end{aligned} \quad (9.3)$$

ここで

$$\sum_{\lambda=0}^3 x_0^\lambda(\mathbf{k}) \sigma_{ss'}^\lambda = z^0(\mathbf{k})_{ss'} \quad (9.4)$$

$$\sum_{\lambda=0}^3 y^\lambda(\mathbf{k}) (i\sigma^\lambda \sigma^2)_{ss'} = z^2(\mathbf{k})_{ss'} \quad (9.5)$$

¹ボルテックス状態, 反強磁性の存在下での超伝導状態は並進対称性を破っている。それらについて並進対称性がどのように破られるかについての群論的議論が可能であるが, 紙面の都合で割愛する。

である. (9.4) の両辺に $\sigma_{s's}^\mu$ を掛けて和 $\sum_{ss'}$ をとると

$$x_0^\mu(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \sum_{ss'} z^0(\mathbf{k})_{ss'} \sigma_{s's}^\mu \quad (9.6)$$

得る. (9.5) の両辺に $(i\sigma^\mu \sigma^2)_{s's}^*$ を掛けて和 $\sum_{ss'}$ をとると

$$y^\mu(\mathbf{k}) = \begin{cases} -\frac{1}{2} \sum_{ss'} z^2(\mathbf{k})_{ss'} (i\sigma^\mu \sigma^2)_{s's}^*, & \mu = 0 \text{ のとき} \\ \frac{1}{2} \sum_{ss'} z^2(\mathbf{k})_{ss'} (i\sigma^\mu \sigma^2)_{s's}^*, & \mu \neq 0 \text{ のとき} \end{cases} \quad (9.7)$$

を得る. ここでパウリ行列に関して成り立つ公式

$$\begin{aligned} \text{tr}[\sigma^\lambda \sigma^\mu] &= 2\delta_{\lambda\mu} \\ \text{tr}[(i\sigma^\lambda \sigma^2)(i\sigma^\mu \sigma^2)^*] &= \begin{cases} 2 & \lambda = \mu \neq 0 \text{ のとき,} \\ -2 & \lambda = \mu = 0 \text{ のとき,} \\ 0 & \lambda \neq \mu \text{ のとき} \end{cases} \end{aligned} \quad (9.8)$$

を使用した. 行列 $(i\sigma^\mu \sigma^2)$ をあらわに書くと

$$\begin{aligned} (i\sigma^0 \sigma^2) &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, & (i\sigma^1 \sigma^2) &= \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\ (i\sigma^2 \sigma^2) &= \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix}, & (i\sigma^3 \sigma^2) &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (9.9)$$

である. $(i\sigma^0 \sigma^2)$ は反対称行列, $(i\sigma^\mu \sigma^2)$ ($\mu \neq 0$) は対称行列であることに注目されたい.

$(y^1(\mathbf{k}), y^2(\mathbf{k}), y^3(\mathbf{k}))$ は ^3He の超流動の理論では

$$\mathbf{d}(\mathbf{k}) = (d_1(\mathbf{k}), d_2(\mathbf{k}), d_3(\mathbf{k})) \equiv (y^1(\mathbf{k}), y^2(\mathbf{k}), y^3(\mathbf{k})) \quad (9.10)$$

と記して $\mathbf{d}$ ベクトルと呼ばれる.

$x_0^\mu(\mathbf{k}), y^\mu(\mathbf{k})$ は次の条件を満たす.

命題 9.1. 平均場ハミルトニアン

$$\begin{aligned} H_m &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} \sum_{\mu=0}^3 \{ x_0^\mu(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}s}^\dagger \sigma_{ss'}^\mu a_{\mathbf{k}'} \\ &\quad + \frac{1}{2} y^\mu(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}s}^\dagger (i\sigma^\mu \sigma^2)_{ss'} a_{(-\mathbf{k})s'}^\dagger + \frac{1}{2} (y^\mu(\mathbf{k}))^* a_{(-\mathbf{k})s'} (i\sigma^\mu \sigma^2)_{ss'}^* a_{\mathbf{k}s} \} \end{aligned} \quad (9.11)$$

における $x_0^\mu(\mathbf{k})$ ($\mu = 0, 1, 2, 3$) は $\mathbf{k}$ の実数値関数であり, $y^0(\mathbf{k})$ は $\mathbf{k}$ の偶関数, $y^\mu(\mathbf{k})$ ($\mu = 1, 2, 3$) は $\mathbf{k}$ の奇関数である. すなわち

$$\begin{aligned} x_0^\mu(\mathbf{k})^* &= x_0^\mu(\mathbf{k}), \quad \mu = 0, 1, 2, 3 \\ y^0(-\mathbf{k}) &= y^0(\mathbf{k}) \\ y^\mu(-\mathbf{k}) &= -y^\mu(\mathbf{k}), \quad \mu = 1, 2, 3 \end{aligned} \quad (9.12)$$

が成り立つ.

証明. (9.11) はエルミート演算子であるので

$$\begin{aligned}
 \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} \sum_{\mu=0}^3 x_0^\mu(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}s}^\dagger \sigma_{ss'}^\mu a_{\mathbf{k}s'} &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} \sum_{\mu=0}^3 [x_0^\mu(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}s}^\dagger \sigma_{ss'}^\mu a_{\mathbf{k}s'}]^\dagger \\
 &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} \sum_{\mu=0}^3 x_0^\mu(\mathbf{k})^* a_{\mathbf{k}s'}^\dagger (\sigma_{ss'}^\mu)^* a_{\mathbf{k}s} \\
 &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} \sum_{\mu=0}^3 x_0^\mu(\mathbf{k})^* a_{\mathbf{k}s'}^\dagger \sigma_{s's}^\mu a_{\mathbf{k}s} \quad (9.13)
 \end{aligned}$$

が成り立つ. ここでパウリ行列 σ^μ のエルミート性 $(\sigma_{ss'}^\mu)^* = \sigma_{s's}^\mu$ を使った. これより

$$x_0^\mu(\mathbf{k})^* = x_0^\mu(\mathbf{k}), \quad \mu = 0, 1, 2, 3 \quad (9.14)$$

を得る.

$(i\sigma^0\sigma^2)$ の反対称性

$$(i\sigma^0\sigma^2)_{s's} = -(i\sigma^0\sigma^2)_{ss'} \quad (9.15)$$

と, $a_{\mathbf{k}s}^\dagger$ と $a_{(-\mathbf{k})s'}^\dagger$ の反交換性

$$a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{(-\mathbf{k})s'}^\dagger = -a_{(-\mathbf{k})s'}^\dagger a_{\mathbf{k}s}^\dagger \quad (9.16)$$

を使うと

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} y^0(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}s}^\dagger (i\sigma^0\sigma^2)_{ss'} a_{(-\mathbf{k})s'}^\dagger &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} y^0(\mathbf{k}) a_{(-\mathbf{k})s'}^\dagger (i\sigma^0\sigma^2)_{s's} a_{\mathbf{k}s}^\dagger \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{ss'} y^0(-\mathbf{k}') a_{\mathbf{k}'s'}^\dagger (i\sigma^0\sigma^2)_{s's} a_{(-\mathbf{k}')s}^\dagger \quad (9.17)
 \end{aligned}$$

を得る. 第2の等号で $\mathbf{k}' = -\mathbf{k}$ と置いた. したがって $y^0(\mathbf{k})$ は $\mathbf{k}$ の偶関数すなわち

$$y^0(-\mathbf{k}) = y^0(\mathbf{k}) \quad (9.18)$$

であることがわかる. 同様に $(i\sigma^\mu\sigma^2)$ ($\mu = 1, 2, 3$) の対称性

$$(i\sigma^\mu\sigma^2)_{ss'} = (i\sigma^\mu\sigma^2)_{s's} \quad (\mu = 1, 2, 3) \quad (9.19)$$

と $a_{\mathbf{k}s}^\dagger$ と $a_{(-\mathbf{k})s'}^\dagger$ の反交換性を使うと $\mu = 1, 2, 3$ に対して

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} y^\mu(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}s}^\dagger (i\sigma^\mu\sigma^2)_{ss'} a_{(-\mathbf{k})s'}^\dagger &= -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} y^\mu(\mathbf{k}) a_{(-\mathbf{k})s'}^\dagger (i\sigma^\mu\sigma^2)_{s's} a_{\mathbf{k}s}^\dagger \\
 &= -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{ss'} y^\mu(-\mathbf{k}') a_{\mathbf{k}'s'}^\dagger (i\sigma^\mu\sigma^2)_{s's} a_{(-\mathbf{k}')s}^\dagger \quad (9.20)
 \end{aligned}$$

を得る. したがって

$$y^\mu(-\mathbf{k}) = -y^\mu(\mathbf{k}), \quad \mu = 1, 2, 3$$

を得る. ■

(9.3) のハミルトニアン H_m は $L_0 = L(e_1, e_2)$ に対して不変である。 L_0 不変な状態に対して次の命題が成り立つ。

命題 9.2. H_m が $L_0 = L(e_1, e_2)$ に対して不変であれば、任意の s, s' および $\mathbf{k}, \mathbf{k}' (\neq \mathbf{k})$ に対して

$$\langle a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}'s'} \rangle = 0, \quad \langle a_{(-\mathbf{k}')s'} a_{\mathbf{k}s} \rangle = 0, \quad \langle a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{(-\mathbf{k}')s'}^\dagger \rangle = 0 \quad (9.21)$$

証明. 並進 $T(\mathbf{n}) \in L_0 (\mathbf{n} \neq 0)$ の作用に対して H_m が不変であるので、定理 6.3(その 2 p.228) より任意の s, s' および $\mathbf{k}, \mathbf{k}' (\neq \mathbf{k})$ に対して

$$\begin{aligned} \langle a_{(-\mathbf{k}')s'} a_{\mathbf{k}s} \rangle &= \langle (T(\mathbf{n}) \cdot a_{(-\mathbf{k}')s'}) (T(\mathbf{n}) \cdot a_{\mathbf{k}s}) \rangle \\ &= \langle (\exp(-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{n}) a_{(-\mathbf{k}')s'}) (\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}) a_{\mathbf{k}s}) \rangle \\ &= \exp(i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{n}) \langle a_{(-\mathbf{k}')s'} a_{\mathbf{k}s} \rangle \end{aligned}$$

$\mathbf{n}$ は任意であるので

$$\langle a_{(-\mathbf{k}')s'} a_{\mathbf{k}s} \rangle = 0 \quad (9.22)$$

を得る。同様に

$$\langle a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{(-\mathbf{k}')s'}^\dagger \rangle = 0 \quad (9.23)$$

が示される。 $\langle a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}'s'} \rangle = 0$ については命題 8.6(その 2 p.276) で証明した。 ■

つぎのように $\lambda^\mu(\mathbf{k})$, $\mu = 0, 1, 2, 3$ を定義する。

$$\lambda^\mu(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \sum_{ss'} \langle a_{(-\mathbf{k})s'} a_{\mathbf{k}s} \rangle (i\sigma^\mu \sigma^2)_{ss'}^* \quad (9.24)$$

$\lambda^\mu(\mathbf{k})$ をあらわに書くと (9.9) より

$$\begin{aligned} \lambda^0(\mathbf{k}) &= \frac{1}{2} [\langle a_{(-\mathbf{k})\downarrow} a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle - \langle a_{(-\mathbf{k})\uparrow} a_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle] \\ \lambda^1(\mathbf{k}) &= \frac{1}{2} [-\langle a_{(-\mathbf{k})\uparrow} a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle + \langle a_{(-\mathbf{k})\downarrow} a_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle] \\ \lambda^2(\mathbf{k}) &= \frac{1}{2} [-i\langle a_{(-\mathbf{k})\uparrow} a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle - i\langle a_{(-\mathbf{k})\downarrow} a_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle] \\ \lambda^3(\mathbf{k}) &= \frac{1}{2} [\langle a_{(-\mathbf{k})\downarrow} a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle + \langle a_{(-\mathbf{k})\uparrow} a_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle] \end{aligned} \quad (9.25)$$

が得られる。フェルミオンの消滅演算子の交換関係を使うと

$$\lambda^0(-\mathbf{k}) = \lambda^0(\mathbf{k}), \quad \lambda^\nu(-\mathbf{k}) = -\lambda^\nu(\mathbf{k}) \quad (\nu = 1, 2, 3) \quad (9.26)$$

を得る。

命題 9.3. 次の等式が成り立つ。

$$\langle a_{(-\mathbf{k})s'} a_{\mathbf{k}s} \rangle = \sum_{\mu=0}^3 (i\sigma^\mu \sigma^2)_{ss'} \lambda^\mu(\mathbf{k}) \quad (9.27)$$

証明. $(s, s') = (1, 1) = (\uparrow, \uparrow)$ の場合, (9.9), (9.25) を考慮して

$$\begin{aligned}
 (9.27) \text{ の左辺} &= \langle a_{(-\mathbf{k})\uparrow} a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle \\
 (9.27) \text{ の右辺} &= (i\sigma^1\sigma^2)_{11}\lambda^1(\mathbf{k}) + (i\sigma^2\sigma^2)_{11}\lambda^2(\mathbf{k}) \\
 &= (-1)\lambda^1(\mathbf{k}) + (i)\lambda^2(\mathbf{k}) \\
 &= (-1)\frac{1}{2}[-\langle a_{(-\mathbf{k})\uparrow} a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle + \langle a_{(-\mathbf{k})\downarrow} a_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle] + (i)\frac{1}{2}[-i\langle a_{(-\mathbf{k})\uparrow} a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle - i\langle a_{(-\mathbf{k})\downarrow} a_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle] \\
 &= \langle a_{(-\mathbf{k})\uparrow} a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle = (9.27) \text{ の左辺}
 \end{aligned} \tag{9.28}$$

$(s, s') = (1, 2) = (\uparrow, \downarrow)$ の場合

$$\begin{aligned}
 (9.27) \text{ の左辺} &= \langle a_{(-\mathbf{k})\downarrow} a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle \\
 (9.27) \text{ の右辺} &= (i\sigma^0\sigma^2)_{12}\lambda^0(\mathbf{k}) + (i\sigma^3\sigma^2)_{12}\lambda^3(\mathbf{k}) \\
 &= (1)\lambda^0(\mathbf{k}) + (1)\lambda^3(\mathbf{k}) \\
 &= \frac{1}{2}[\langle a_{(-\mathbf{k})\downarrow} a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle - \langle a_{(-\mathbf{k})\uparrow} a_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle] + \frac{1}{2}[\langle a_{(-\mathbf{k})\downarrow} a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle + \langle a_{(-\mathbf{k})\uparrow} a_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle] \\
 &= \langle a_{(-\mathbf{k})\downarrow} a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle = (9.27) \text{ の左辺}
 \end{aligned} \tag{9.29}$$

$(s, s') = (2, 1), (2, 2)$ の場合にも同様に証明できる. ■

SCF 条件, 自由エネルギー F_{HFB} の表式を導くために有用な等式を証明する.

命題 9.4. 次の等式が成り立つ.

$$\begin{aligned}
 &\frac{1}{2} \sum_{ss'} \sum_{ll'} \langle \mathbf{k}s, (-\mathbf{k})s' | V | \mathbf{k}'l, (-\mathbf{k}')l' \rangle (i\sigma^\mu\sigma^2)_{ss'}^* (i\sigma^\nu\sigma^2)_{ll'} \\
 &= \begin{cases} \langle \mathbf{k}\uparrow, (-\mathbf{k})\uparrow | V | \mathbf{k}'\uparrow, (-\mathbf{k}')\uparrow \rangle, & \mu = \nu \text{ のとき} \\ 0, & \mu \neq \nu \text{ のとき} \end{cases}
 \end{aligned} \tag{9.30}$$

証明. まず $\mu = \nu = 0$ の場合を考える. $(i\sigma^0\sigma^2)_{12} = 1, (i\sigma^0\sigma^2)_{21} = -1,$
 $(i\sigma^0\sigma^2)_{11} = (i\sigma^0\sigma^2)_{22} = 0$ を考慮すると

$$\begin{aligned}
 &\frac{1}{2} \sum_{ss'} \sum_{ll'} \langle \mathbf{k}s, (-\mathbf{k})s' | V | \mathbf{k}'l, (-\mathbf{k}')l' \rangle (i\sigma^0\sigma^2)_{ss'}^* (i\sigma^0\sigma^2)_{ll'} \\
 &= \frac{1}{2} [(1)(1)\langle \mathbf{k}\uparrow, (-\mathbf{k})\downarrow | V | \mathbf{k}'\uparrow, (-\mathbf{k}')\downarrow \rangle \\
 &\quad + (1)(-1)\langle \mathbf{k}\uparrow, (-\mathbf{k})\downarrow | V | \mathbf{k}'\downarrow, (-\mathbf{k}')\uparrow \rangle \\
 &\quad + (-1)(1)\langle \mathbf{k}\downarrow, (-\mathbf{k})\uparrow | V | \mathbf{k}'\uparrow, (-\mathbf{k}')\downarrow \rangle \\
 &\quad + (-1)(-1)\langle \mathbf{k}\downarrow, (-\mathbf{k})\uparrow | V | \mathbf{k}'\downarrow, (-\mathbf{k}')\uparrow \rangle] \\
 &= \langle \mathbf{k}\uparrow, (-\mathbf{k})\uparrow | V | \mathbf{k}'\uparrow, (-\mathbf{k}')\uparrow \rangle
 \end{aligned} \tag{9.31}$$

を得る. ここで (7.7)(その 2 p.233) より得られる関係

$$\begin{aligned}
 \langle \mathbf{k} \uparrow, (-\mathbf{k}) \downarrow | V | \mathbf{k}' \uparrow, (-\mathbf{k}') \downarrow \rangle &= \langle \mathbf{k} \downarrow, (-\mathbf{k}) \uparrow | V | \mathbf{k}' \downarrow, (-\mathbf{k}') \uparrow \rangle \\
 &= \langle \mathbf{k} \uparrow, (-\mathbf{k}) \uparrow | V | \mathbf{k}' \uparrow, (-\mathbf{k}') \uparrow \rangle \\
 &= \langle \mathbf{k} \downarrow, (-\mathbf{k}) \downarrow | V | \mathbf{k}' \downarrow, (-\mathbf{k}') \downarrow \rangle \\
 \langle \mathbf{k}s, (-\mathbf{k})s' | V | \mathbf{k}'l, (-\mathbf{k}')l' \rangle &= 0, \quad s \neq l \text{ または } s' \neq l' \text{ の場合}
 \end{aligned} \tag{9.32}$$

を使った.

$\mu = \nu = 1$ の場合を考える. $(i\sigma^1\sigma^2)_{11} = -1, (i\sigma^1\sigma^2)_{22} = 1, (i\sigma^1\sigma^2)_{12} = (i\sigma^1\sigma^2)_{21} = 0$ を考慮すると

$$\begin{aligned}
 &\frac{1}{2} \sum_{ss'} \sum_{ll'} \langle \mathbf{k}s, (-\mathbf{k})s' | V | \mathbf{k}'l, (-\mathbf{k}')l' \rangle (i\sigma^1\sigma^2)_{ss'}^* (i\sigma^1\sigma^2)_{ll'} \\
 &= \frac{1}{2} [(-1)(-1) \langle \mathbf{k} \uparrow, (-\mathbf{k}) \uparrow | V | \mathbf{k}' \uparrow, (-\mathbf{k}') \uparrow \rangle \\
 &\quad + (-1)(1) \langle \mathbf{k} \uparrow, (-\mathbf{k}) \uparrow | V | \mathbf{k}' \downarrow, (-\mathbf{k}') \downarrow \rangle \\
 &\quad + (1)(-1) \langle \mathbf{k} \downarrow, (-\mathbf{k}) \downarrow | V | \mathbf{k}' \uparrow, (-\mathbf{k}') \uparrow \rangle \\
 &\quad + (1)(1) \langle \mathbf{k} \downarrow, (-\mathbf{k}) \downarrow | V | \mathbf{k}' \downarrow, (-\mathbf{k}') \downarrow \rangle] \\
 &= \langle \mathbf{k} \uparrow, (-\mathbf{k}) \uparrow | V | \mathbf{k}' \uparrow, (-\mathbf{k}') \uparrow \rangle
 \end{aligned} \tag{9.33}$$

を得る. $\mu = \nu = 2, 3$ の場合も同様にして (9.30) が成り立つ.

$\mu = 0, \nu = 1$ の場合を考える.

$$\begin{aligned}
 &\frac{1}{2} \sum_{ss'} \sum_{ll'} \langle \mathbf{k}s, (-\mathbf{k})s' | V | \mathbf{k}'l, (-\mathbf{k}')l' \rangle (i\sigma^0\sigma^2)_{ss'}^* (i\sigma^1\sigma^2)_{ll'} \\
 &= \frac{1}{2} [(1)(-1) \langle \mathbf{k} \uparrow, (-\mathbf{k}) \downarrow | V | \mathbf{k}' \uparrow, (-\mathbf{k}') \uparrow \rangle \\
 &\quad + (1)(1) \langle \mathbf{k} \uparrow, (-\mathbf{k}) \downarrow | V | \mathbf{k}' \downarrow, (-\mathbf{k}') \downarrow \rangle \\
 &\quad + (-1)(-1) \langle \mathbf{k} \downarrow, (-\mathbf{k}) \uparrow | V | \mathbf{k}' \uparrow, (-\mathbf{k}') \uparrow \rangle \\
 &\quad + (-1)(1) \langle \mathbf{k} \downarrow, (-\mathbf{k}) \uparrow | V | \mathbf{k}' \downarrow, (-\mathbf{k}') \downarrow \rangle] \\
 &= 0
 \end{aligned} \tag{9.34}$$

同様にして, 他の $\mu \neq \nu$ の場合も (9.30) の左辺がゼロになることがわかる. ■

$y^\mu(\mathbf{k})$ は SCF 条件: 定理 6.1(その 2 p.221) の (6.85) を $a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{(-\mathbf{k})s'}^\dagger$ の係数に適用すると

$$\begin{aligned}
 \sum_{\nu=0}^3 y^\nu(\mathbf{k}) (i\sigma^\nu\sigma^2)_{ss'} &= \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{ll'} \langle \mathbf{k}s, (-\mathbf{k})s' | V | \mathbf{k}'l, (-\mathbf{k}')l' \rangle \langle a_{(-\mathbf{k}')l'} a_{\mathbf{k}l} \rangle \\
 &= \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{ll'} \sum_{\nu=0}^3 \langle \mathbf{k}s, (-\mathbf{k})s' | V | \mathbf{k}'l, (-\mathbf{k}')l' \rangle (i\sigma^\nu\sigma^2)_{ll'} \lambda^\nu(\mathbf{k}')
 \end{aligned} \tag{9.35}$$

を得る. ここで命題 9.3 を使った. (9.35) の両辺に $\frac{1}{2}(i\sigma^0\sigma^2)_{s's}^* = -\frac{1}{2}(i\sigma^0\sigma^2)_{ss'}^*$ を掛けて和 $\sum_{ss'}$ を取ると

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \sum_{ss'} \sum_{\nu=0}^3 y^\nu(\mathbf{k}) (i\sigma^\nu\sigma^2)_{ss'} (i\sigma^0\sigma^2)_{s's}^* \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{ss'} \sum_{ll'} \sum_{\nu=0}^3 \langle \mathbf{k}s, (-\mathbf{k})s' | V | \mathbf{k}'l, (-\mathbf{k}')l' \rangle (i\sigma^0\sigma^2)_{ss'}^* (i\sigma^\nu\sigma^2)_{ll'} \lambda^\nu(\mathbf{k}') \end{aligned} \quad (9.36)$$

を得る. (9.8) および命題 9.4 を使うと

$$y^0(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{k}'} \langle \mathbf{k} \uparrow, (-\mathbf{k}) \uparrow | V | \mathbf{k}' \uparrow, (-\mathbf{k}') \uparrow \rangle \lambda^0(\mathbf{k}') \quad (9.37)$$

を得る. (9.35) の両辺に $\frac{1}{2}(i\sigma^\mu\sigma^2)_{s's}^* = \frac{1}{2}(i\sigma^\mu\sigma^2)_{ss'}^*$ ($\mu = 1, 2, 3$) を掛けて和 $\sum_{ss'}$ を取ると

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \sum_{ss'} \sum_{\nu=0}^3 y^\nu(\mathbf{k}) (i\sigma^\nu\sigma^2)_{ss'} (i\sigma^\mu\sigma^2)_{s's}^* \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{ss'} \sum_{ll'} \sum_{\nu=0}^3 \langle \mathbf{k}s, (-\mathbf{k})s' | V | \mathbf{k}'l, (-\mathbf{k}')l' \rangle (i\sigma^\mu\sigma^2)_{ss'}^* (i\sigma^\nu\sigma^2)_{ll'} \lambda^\nu(\mathbf{k}') \end{aligned} \quad (9.38)$$

を得る. (9.8) および命題 9.4 を使い, (9.37) をあわせると $\mu = 0, 1, 2, 3$ に対して

$$\begin{aligned} y^\mu(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}'} \langle \mathbf{k} \uparrow, (-\mathbf{k}) \uparrow | V | \mathbf{k}' \uparrow, (-\mathbf{k}') \uparrow \rangle \lambda^\mu(\mathbf{k}') \\ &= \sum_{\mathbf{k}'} Z(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \lambda^\mu(\mathbf{k}') \end{aligned} \quad (9.39)$$

を得る. ここで

$$Z(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \equiv \langle \mathbf{k}s, (-\mathbf{k})s' | V | \mathbf{k}'s, (-\mathbf{k}')s' \rangle \quad (9.40)$$

である.

$$\begin{aligned} \mathbf{K} &= \mathbf{k}' \\ \mathbf{K}' &= -\mathbf{k} \\ \mathbf{q} &= \mathbf{k} - \mathbf{k}' \end{aligned} \quad (9.41)$$

とおくと, (7.7)(その2 p.233) より

$$\begin{aligned} Z(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= \langle \mathbf{K} + \mathbf{q}s, \mathbf{K}'s' | V | \mathbf{K}s, \mathbf{K}' + \mathbf{q}s' \rangle \\ &= \frac{1}{N} \{ U + 2V\gamma(\mathbf{q}) + 2J\gamma(\mathbf{K} - \mathbf{K}') \} \\ &= \frac{1}{N} \{ U + 2V\gamma(\mathbf{k} - \mathbf{k}') + 2J\gamma(\mathbf{k} + \mathbf{k}') \} \\ &= \sum_{i=1}^5 Z_i(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \end{aligned} \quad (9.42)$$

を得る. ここで

$$\begin{aligned}
Z_1^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= \frac{1}{N} U && \cdots A_{1g} \\
Z_2^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= \frac{1}{N} (V + J) \gamma(\mathbf{k}) \gamma(\mathbf{k}') && \cdots A_{1g} \\
Z_3^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= \frac{1}{N} (V + J) \eta(\mathbf{k}) \eta(\mathbf{k}') && \cdots B_{1g} \\
Z_4^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= \frac{2}{N} (V - J) \sin k_1 \sin k'_1 && \cdots E_u \\
Z_5^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= \frac{2}{N} (V - J) \sin k_2 \sin k'_2 && \cdots E_u
\end{aligned} \tag{9.43}$$

である. (8.45)(その2 p.273) と (9.39) をあわせて $x_0^\nu(\mathbf{k}), y^\nu(\mathbf{k})$ に対する SCF 条件

$$\begin{aligned}
x_0^0(\mathbf{k}) &= -2t\gamma(\mathbf{k}) - \mu + \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{i=1}^5 W_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^0(\mathbf{k}') \\
x_0^\nu(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{i=1}^5 Y_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^\nu(\mathbf{k}'), \quad \nu = 1, 2, 3 \\
y^\nu(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{i=1}^5 Z_i(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \lambda^\nu(\mathbf{k}')
\end{aligned} \tag{9.44}$$

を得る. ここで $\rho_0^\nu(\mathbf{k}) (\nu = 0, 1, 2, 3)$ は (8.11)(その2 p.267), $W_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ は (8.29), (8.30)(その2 p.270), $Y_i^0(\mathbf{k})$ は (8.34), (8.35)(その2 p.271) で定義されている.

自由エネルギー F_{HFB} は一般的表式 (6.64)(その2 p.217) を Hubbard モデル (7.6)(その2 p.233) に適用し, 命題 9.2 を考慮すると

$$\begin{aligned}
F_{\text{HFB}} &= 2 \sum_{\mathbf{k}} (-2t\gamma(\mathbf{k}) - \mu) \rho_0^0(\mathbf{k}) \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{ss'} \sum_{ll'} [\mathbf{k}s, \mathbf{k}'l \mid V \mid \mathbf{k}s', \mathbf{k}'l'] \langle a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s'} \rangle \langle a_{\mathbf{k}'l}^\dagger a_{\mathbf{k}'l'} \rangle \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{ss'} \sum_{ll'} \langle \mathbf{k}s, (-\mathbf{k})s' \mid V \mid \mathbf{k}'l, (-\mathbf{k}')l' \rangle \langle a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{(-\mathbf{k})s'}^\dagger \rangle \langle a_{(-\mathbf{k}')l'} a_{\mathbf{k}'l} \rangle \\
&+ \frac{1}{\beta} \sum_j \{ f_j \log f_j + (1 - f_j) \log(1 - f_j) \}
\end{aligned} \tag{9.45}$$

を得る. ここで

$$f_j = (1 + e^{\beta E_j})^{-1} \tag{9.46}$$

であり, E_j は (9.3) で定義される平均場ハミルトニアン H_m の固有値である. (9.45) の第2項は

(8.52)(その2 p.274) の第2項と第3項で与えられ, (9.45) の第3項は命題9.3と命題9.4を使うと

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{ss'} \sum_{ll'} \langle \mathbf{k}s, (-\mathbf{k})s' | V | \mathbf{k}'l, (-\mathbf{k}')l' \rangle \langle a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{(-\mathbf{k})s'}^\dagger \rangle \langle a_{(-\mathbf{k}')l'} a_{\mathbf{k}'l} \rangle \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{ss'} \sum_{ll'} \langle \mathbf{k}s, (-\mathbf{k})s' | V | \mathbf{k}'l, (-\mathbf{k}')l' \rangle \left(\sum_{\mu=0}^3 (i\sigma^\mu \sigma^2)_{ss'}^* \lambda^\mu(\mathbf{k})^* \right) \left(\sum_{\nu=0}^3 (i\sigma^\nu \sigma^2)_{ll'} \lambda^\nu(\mathbf{k}') \right) \\
 &= \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{i=1}^5 \sum_{\mu=0}^3 Z_i(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \lambda^\mu(\mathbf{k})^* \lambda^\mu(\mathbf{k}') \quad (9.47)
 \end{aligned}$$

を得る. したがって自由エネルギー F_{HFB} は

$$\begin{aligned}
 F_{\text{HFB}} &= 2 \sum_{\mathbf{k}} (-2t\gamma(\mathbf{k}) - \mu) \rho_0^0(\mathbf{k}) \\
 &+ \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{i=1}^5 W_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^0(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}') + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{i=1}^5 \sum_{\mu=0}^3 Y_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^\mu(\mathbf{k}) \rho_0^\mu(\mathbf{k}') \\
 &+ \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{i=1}^5 \sum_{\mu=0}^3 Z_i(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \lambda^\mu(\mathbf{k})^* \lambda^\mu(\mathbf{k}') \\
 &+ \frac{1}{\beta} \sum_j \{ f_j \log f_j + (1 - f_j) \log(1 - f_j) \} \quad (9.48)
 \end{aligned}$$

となる.

定義 9.1.

$$\begin{aligned}
 \rho_0^\mu(\mathbf{k}) &= \frac{1}{2} \sum_{ss'} \langle a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s'} \rangle \sigma_{ss'}^\mu \\
 \lambda^\mu(\mathbf{k}) &= \frac{1}{2} \sum_{ss'} \langle a_{(-\mathbf{k})s'} a_{\mathbf{k}s} \rangle (i\sigma^\mu \sigma^2)_{ss'}^*
 \end{aligned}$$

への $g \in G_0$ の作用を次のように定義する.

$$\begin{aligned}
 g \cdot \rho_0^\mu(\mathbf{k}) &\equiv \frac{1}{2} \sum_{ss'} \langle (g^{-1} \cdot a_{\mathbf{k}s}^\dagger) (g^{-1} \cdot a_{\mathbf{k}s'}) \rangle^{(*)} \sigma_{ss'}^\mu \\
 g \cdot \lambda^\mu(\mathbf{k}) &\equiv \frac{1}{2} \sum_{ss'} \langle (g^{-1} \cdot a_{(-\mathbf{k})s'}) (g^{-1} \cdot a_{\mathbf{k}s}) \rangle^{(*)} (i\sigma^\mu \sigma^2)_{ss'}^* \quad (9.49)
 \end{aligned}$$

ここで $X^{(*)}$ は g が時間反転 t を含む反ユニタリーの場合に X の複素共役を取ることを意味する.

g が H_m の固定部分群 $G(H_m)$ に属するとき g^{-1} も $G(H_m)$ に属する. そのとき
定理 6.3(その2 p.228) より

$$g \cdot \rho_0^\mu(\mathbf{k}) = \rho_0^\mu(\mathbf{k}), \quad g \cdot \lambda^\mu(\mathbf{k}) = \lambda^\mu(\mathbf{k}) \quad (g \in G(H_m)) \quad (9.50)$$

を得る. これより種々の状態に対して $\rho_0^\mu(\mathbf{k}), \lambda^\mu(\mathbf{k})$ の対称性を定めることが出来る.

命題 9.5. スピン回転 $u = u(\mathbf{n}, \theta) \in S$ の $\rho_0^\mu, \lambda^\mu(\mathbf{k})$ への作用は次式で与えられる.

$$\begin{aligned}
u \cdot \rho_0^0(\mathbf{k}) &= \rho_0^0(\mathbf{k}) \\
u \cdot \rho_0^\mu(\mathbf{k}) &= \sum_{\nu=1}^3 R(u^{-1})_{\nu\mu} \rho_0^\nu(\mathbf{k}) \quad (\mu = 1, 2, 3) \\
u \cdot \lambda^0(\mathbf{k}) &= \lambda^0(\mathbf{k}) \\
u \cdot \lambda^\mu(\mathbf{k}) &= \sum_{\nu=1}^3 R(u^{-1})_{\nu\mu} \lambda^\nu(\mathbf{k}) \quad (\mu = 1, 2, 3)
\end{aligned} \tag{9.51}$$

ここで $R(u^{-1})$ は $u^{-1} = u(\mathbf{n}, -\theta)$ に対応する 3 次元回転行列で $R(\mathbf{n}, -\theta)$ である.²

証明. (9.51) の第 4 式を証明する. $\mu = 1, 2, 3$ に対して

$$\begin{aligned}
u(\mathbf{n}, \theta) \cdot \lambda^\mu(\mathbf{k}) &= \frac{1}{2} \sum_{ss'} \langle (u^{-1} \cdot a_{(-\mathbf{k})s'}) (u^{-1} \cdot a_{\mathbf{k}s}) \rangle (i\sigma^\mu \sigma^2)_{ss'}^* \\
&= \frac{1}{2} \sum_{ss'} \langle \left(\sum_{t'} (u^{-1})_{t's'}^* a_{(-\mathbf{k})t'} \right) \left(\sum_t (u^{-1})_{ts}^* a_{\mathbf{k}t} \right) \rangle (i\sigma^\mu \sigma^2)_{ss'}^* \\
&= \frac{1}{2} \sum_{tt'} \left(\sum_{ss'} (u^{-1})_{ts}^* (i\sigma^\mu \sigma^2)_{ss'}^* (u^{-1})_{s't'}^\dagger \right) \langle a_{(-\mathbf{k})t'} a_{\mathbf{k}t} \rangle \\
&= \frac{1}{2} \sum_{tt'} \left(\sum_{ss'} (u^{-1})_{ts} (i\sigma^\mu \sigma^2)_{ss'} (u^{-1})_{s't'}^t \right)^* \langle a_{(-\mathbf{k})t'} a_{\mathbf{k}t} \rangle \\
&= \sum_{\nu=1}^3 R(u^{-1})_{\nu\mu} \frac{1}{2} \sum_{tt'} \langle a_{(-\mathbf{k})t'} a_{\mathbf{k}t} \rangle (i\sigma^\nu \sigma^2)_{tt'}^* \\
&= \sum_{\nu=1}^3 R(u^{-1})_{\nu\mu} \lambda^\nu(\mathbf{k})
\end{aligned} \tag{9.52}$$

ここで 5 番目の等号は (7.105)(その 2 p.250) を使った. 他の場合も命題 7.3(その 2 p.249) を使うと同様に証明できる ■

命題 9.6. $p \in D_{4h}, T(\mathbf{m}) \in L_0, \tilde{\phi} \in \Phi, t \in R$ の $\rho_0^\mu(\mathbf{k}), \lambda^\mu(\mathbf{k})$ への作用は次式で与えられる.

$$\begin{aligned}
p \cdot \rho_0^\mu(\mathbf{k}) &= \rho_0^\mu(p^{-1} \cdot \mathbf{k}), & p \cdot \lambda^\mu(\mathbf{k}) &= \lambda^\mu(p^{-1} \cdot \mathbf{k}) \\
T(\mathbf{m}) \cdot \rho_0^\mu(\mathbf{k}) &= \rho_0^\mu(\mathbf{k}), & T(\mathbf{m}) \cdot \lambda^\mu(\mathbf{k}) &= \lambda^\mu(\mathbf{k}) \\
\tilde{\phi} \cdot \rho_0^\mu(\mathbf{k}) &= \rho_0^\mu(\mathbf{k}), & \tilde{\phi} \cdot \lambda^\mu(\mathbf{k}) &= e^{i\phi} \lambda^\mu(\mathbf{k}) \\
t \cdot \rho_0^0(\mathbf{k}) &= \rho_0^0(-\mathbf{k}), & t \cdot \lambda^0(\mathbf{k}) &= \lambda^0(\mathbf{k})^* \\
t \cdot \rho_0^\nu(\mathbf{k}) &= -\rho_0^\nu(-\mathbf{k}), & t \cdot \lambda^\nu(\mathbf{k}) &= \lambda^\nu(\mathbf{k})^*, \quad (\nu = 1, 2, 3)
\end{aligned} \tag{9.53}$$

ここで $\mu = 0, 1, 2, 3$ である.

²((7.102)(その 2 p.249) 参照)

証明. $\lambda^\mu(\mathbf{k})$ について証明する. $p \in D_{4h}$ に対して (7.28)(その2 p.237) より

$$\begin{aligned} p \cdot \lambda^\mu(\mathbf{k}) &= \frac{1}{2} \sum_{ss'} \langle (p^{-1} \cdot a_{(-\mathbf{k})s'}) (p^{-1} \cdot a_{\mathbf{k}s}) \rangle (i\sigma^\mu \sigma^2)_{ss'}^* \\ &= \frac{1}{2} \sum_{ss'} \langle a_{(-p^{-1} \cdot \mathbf{k})s'} a_{(p^{-1} \cdot \mathbf{k})s} \rangle (i\sigma^\mu \sigma^2)_{ss'}^* \\ &= \lambda^\mu(p^{-1} \cdot \mathbf{k}) \end{aligned} \quad (9.54)$$

を得る. $T(\mathbf{m})$ に対する不変性は明らかである. $\tilde{\phi} \in \Phi$ に対して

$$\begin{aligned} \tilde{\phi} \cdot \lambda^\mu(\mathbf{k}) &= \frac{1}{2} \sum_{ss'} \langle (\tilde{\phi}^{-1} \cdot a_{(-\mathbf{k})s'}) (\tilde{\phi}^{-1} \cdot a_{\mathbf{k}s}) \rangle (i\sigma^\mu \sigma^2)_{ss'}^* \\ &= \frac{1}{2} \sum_{ss'} \langle (e^{i\frac{1}{2}\phi} a_{(-\mathbf{k})s'}) (e^{i\frac{1}{2}\phi} a_{\mathbf{k}s}) \rangle (i\sigma^\mu \sigma^2)_{ss'}^* \\ &= e^{i\phi} \frac{1}{2} \sum_{ss'} \langle a_{(-\mathbf{k})s'} a_{\mathbf{k}s} \rangle (i\sigma^\mu \sigma^2)_{ss'}^* \\ &= e^{i\phi} \lambda^\mu(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (9.55)$$

t に対する $\lambda^\mu(\mathbf{k})$ の変換性を考える.

$$\begin{aligned} t^2 \cdot a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger &= t \cdot (t \cdot a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger) = t \cdot (-a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger) = -a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \\ t^2 \cdot a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger &= -a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{aligned} \quad (9.56)$$

より $t^{-1} = -t$ である. したがって

$$\begin{aligned} t \cdot \lambda^0(\mathbf{k}) &= \frac{1}{2} \sum_{ss'} \langle (t^{-1} \cdot a_{(-\mathbf{k})s'}) (t^{-1} \cdot a_{\mathbf{k}s}) \rangle^* (i\sigma^0 \sigma^2)_{ss'}^* \\ &= \frac{1}{2} \{ \langle (-t \cdot a_{(-\mathbf{k})\downarrow}) (-t \cdot a_{\mathbf{k}\uparrow}) \rangle^* - \langle (-t \cdot a_{(-\mathbf{k})\uparrow}) (-t \cdot a_{\mathbf{k}\downarrow}) \rangle^* \} \\ &= \frac{1}{2} \{ \langle (-a_{\mathbf{k}\uparrow}) (a_{(-\mathbf{k})\downarrow}) \rangle^* - \langle (a_{\mathbf{k}\downarrow}) (-a_{(-\mathbf{k})\uparrow}) \rangle^* \} \\ &= \lambda^0(\mathbf{k})^* \end{aligned} \quad (9.57)$$

$$\begin{aligned} t \cdot \lambda^1(\mathbf{k}) &= \frac{1}{2} \sum_{ss'} \langle (t^{-1} \cdot a_{(-\mathbf{k})s'}) (t^{-1} \cdot a_{\mathbf{k}s}) \rangle^* (i\sigma^1 \sigma^2)_{ss'}^* \\ &= \frac{1}{2} \{ -\langle (-t \cdot a_{(-\mathbf{k})\uparrow}) (-t \cdot a_{\mathbf{k}\uparrow}) \rangle^* + \langle (-t \cdot a_{(-\mathbf{k})\downarrow}) (-t \cdot a_{\mathbf{k}\downarrow}) \rangle^* \} \\ &= \frac{1}{2} \{ -\langle a_{\mathbf{k}\downarrow} a_{(-\mathbf{k})\downarrow} \rangle^* + \langle a_{\mathbf{k}\uparrow} a_{(-\mathbf{k})\uparrow} \rangle^* \} \\ &= \lambda^1(\mathbf{k})^* \end{aligned} \quad (9.58)$$

$\lambda^2(\mathbf{k}), \lambda^3(\mathbf{k})$ についても同様な関係が成り立つことは容易に示される. $\rho_0^\mu(\mathbf{k})$ についても同様に証明できる. ■

$\rho_0^\mu(\mathbf{k}), \lambda^\mu(\mathbf{k})$ の対称性を考察するときによく使う (9.51) の特別の場合の関係式を挙げておく.

$$\begin{aligned}
u_{2x} \cdot \rho_0^1(\mathbf{k}) &= \rho_0^1(\mathbf{k}), & u_{2x} \cdot \rho_0^2(\mathbf{k}) &= -\rho_0^2(\mathbf{k}), & u_{2x} \cdot \rho_0^3(\mathbf{k}) &= -\rho_0^3(\mathbf{k}) \\
u_{2y} \cdot \rho_0^1(\mathbf{k}) &= -\rho_0^1(\mathbf{k}), & u_{2y} \cdot \rho_0^2(\mathbf{k}) &= \rho_0^2(\mathbf{k}), & u_{2y} \cdot \rho_0^3(\mathbf{k}) &= -\rho_0^3(\mathbf{k}) \\
u_{2z} \cdot \rho_0^1(\mathbf{k}) &= -\rho_0^1(\mathbf{k}), & u_{2z} \cdot \rho_0^2(\mathbf{k}) &= -\rho_0^2(\mathbf{k}), & u_{2z} \cdot \rho_0^3(\mathbf{k}) &= \rho_0^3(\mathbf{k}) \\
u_{2x} \cdot \lambda^1(\mathbf{k}) &= \lambda^1(\mathbf{k}), & u_{2x} \cdot \lambda^2(\mathbf{k}) &= -\lambda^2(\mathbf{k}), & u_{2x} \cdot \lambda^3(\mathbf{k}) &= -\lambda^3(\mathbf{k}) \\
u_{2y} \cdot \lambda^1(\mathbf{k}) &= -\lambda^1(\mathbf{k}), & u_{2y} \cdot \lambda^2(\mathbf{k}) &= \lambda^2(\mathbf{k}), & u_{2y} \cdot \lambda^3(\mathbf{k}) &= -\lambda^3(\mathbf{k}) \\
u_{2z} \cdot \lambda^1(\mathbf{k}) &= -\lambda^1(\mathbf{k}), & u_{2z} \cdot \lambda^2(\mathbf{k}) &= -\lambda^3(\mathbf{k}), & u_{2z} \cdot \lambda^3(\mathbf{k}) &= \lambda^3(\mathbf{k})
\end{aligned} \tag{9.59}$$

9.2 スピンシングレット 超伝導状態

既約表現 $\check{G}_0^{(\Gamma_j, 0, 2)} = \check{P}^{(\Gamma_j)} \otimes \check{S}^{(0)} \otimes \check{R}^{(2)}$ より導かれる状態を考察する. 既約表現 $\check{G}_0^{(\Gamma_j, 0, 2)}$ スピン回転群 S に対しては恒等表現であるので, $\check{G}_0^{(\Gamma_j, 0, 2)}$ の固定部分群は必ず S を含む. したがって H_m は S に不変である. $u_{2x}, u_{2z} \in S$ に対する $\rho_0^\mu(\mathbf{k}), \lambda^\mu(\mathbf{k})$ の不変性と (9.59) より

$$\rho_0^\nu(\mathbf{k}) = \lambda^\nu(\mathbf{k}) = 0 \quad (\nu = 1, 2, 3) \tag{9.60}$$

を得る. SCF 条件 (9.44) より $\nu = 1, 2, 3$ にたいして

$$\begin{aligned}
x_0^\nu(\mathbf{k}) &= 0 \\
y^\nu(\mathbf{k}) &= 0
\end{aligned} \tag{9.61}$$

を得る. したがって平均場ハミルトニアンは

$$H_m = \sum_{\mathbf{k}s} x_0^0(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s} + \left\{ \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} y^0(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}s}^\dagger (i\sigma^0 \sigma^2)_{ss'} a_{(-\mathbf{k})s'}^\dagger + H.C \right\} \tag{9.62}$$

となる. 命題 9.1 より $y^0(\mathbf{k})$ は $\mathbf{k}$ の偶関数であり, SCF 条件 (9.44) より $y^0(\mathbf{k})$ は $Z_1(\mathbf{k}, \mathbf{k}'), Z_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ からは D_{4h} の既約表現 A_{1g} に属する関数となり, $Z_3(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ からは B_{1g} 対称性を持つ関数となることがわかる. $Z_4(\mathbf{k}, \mathbf{k}'), Z_5(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ からは $y(\mathbf{k})$ は $\mathbf{k}$ の奇関数が得られ, スピンシングレット超伝導を導く既約表現としては $\check{G}_0^{(\Gamma_{A_{1g}}, 0, 2)}$ と $\check{G}_0^{(\Gamma_{B_{1g}}, 0, 2)}$ 場合だけを考察すればよい. この両既約表現とも空間反転 I に対して不変であるので, それらに対応する平均場ハミルトニアン H_m は I に不変である. したがって

$$\begin{aligned}
\sum_{\mathbf{k}s} x_0^0(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s} &= I \cdot \left\{ \sum_{\mathbf{k}s} x_0^0(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s} \right\} \\
&= \sum_{\mathbf{k}s} x_0^0(\mathbf{k}) (I \cdot a_{\mathbf{k}s}^\dagger) (I \cdot a_{\mathbf{k}s}) \\
&= \sum_{\mathbf{k}s} x_0^0(\mathbf{k}) a_{(-\mathbf{k})s}^\dagger a_{(-\mathbf{k})s} \\
&= \sum_{\mathbf{k}s} x_0^0(-\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s}
\end{aligned} \tag{9.63}$$

が得られ, $x_0^0(\mathbf{k})$ は

$$x_0^0(-\mathbf{k}) = x_0^0(\mathbf{k}) \quad (9.64)$$

を満たす.

$x_0^0(\mathbf{k})$ が $\mathbf{k}$ の実偶関数であり, $y^0(\mathbf{k})$ が $\mathbf{k}$ の偶関数であることを考慮すると, 次の式を得る.

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}s} x_0^0(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s} &= \sum_{\mathbf{k}} x_0^0(\mathbf{k}) (a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} + a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow}) \\ &= \sum_{\mathbf{k}} x_0^0(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} + \sum_{\mathbf{k}} x_0^0(-\mathbf{k}) a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\downarrow} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} x_0^0(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} x_0^0(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} x_0^0(\mathbf{k}) a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\downarrow} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} x_0^0(\mathbf{k}) a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\downarrow} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} x_0^0(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} x_0^0(\mathbf{k}) (1 - a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow}) \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} x_0^0(\mathbf{k}) a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\downarrow} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} x_0^0(\mathbf{k}) (1 - a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\downarrow}) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} x_0^0(\mathbf{k}) [a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} + a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\downarrow} - a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} - a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\downarrow}] + \sum_{\mathbf{k}} x_0^0(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (9.65)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}ss'} y^0(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}s}^\dagger (i\sigma^0 \sigma^2)_{ss'} a_{(-\mathbf{k})s'}^\dagger + H.C \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} y^0(\mathbf{k}) (a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger - a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\uparrow}^\dagger) + H.C \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} y^0(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} y^0(-\mathbf{k}) a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger + H.C \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} y^0(\mathbf{k}) (a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger - a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger) \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} y^0(\mathbf{k})^* (a_{(-\mathbf{k})\downarrow} a_{\mathbf{k}\uparrow} - a_{\mathbf{k}\uparrow} a_{(-\mathbf{k})\downarrow}) \end{aligned} \quad (9.66)$$

(9.65), (9.66) より (9.62) の平均場ハミルトニアンは次のように対角化される.

$$\begin{aligned}
 H_m &= \sum_{\mathbf{k}} x_0^0(\mathbf{k}) (a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} + a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow}) + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} y^0(\mathbf{k}) (a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger - a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\uparrow}^\dagger) \\
 &\quad + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} y^0(\mathbf{k})^* (a_{(-\mathbf{k})\downarrow} a_{\mathbf{k}\uparrow} - a_{(-\mathbf{k})\uparrow} a_{\mathbf{k}\downarrow}) \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} x_0^0(\mathbf{k}) [a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} + a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\downarrow} - a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger - a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger] + \sum_{\mathbf{k}} x_0^0(\mathbf{k}) \\
 &\quad + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} y^0(\mathbf{k}) (a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger - a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger) \\
 &\quad + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} y^0(\mathbf{k})^* (a_{(-\mathbf{k})\downarrow} a_{\mathbf{k}\uparrow} - a_{\mathbf{k}\uparrow} a_{(-\mathbf{k})\downarrow}) \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} (a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger, a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger, a_{\mathbf{k}\uparrow}, a_{(-\mathbf{k})\downarrow}) \begin{pmatrix} x_0^0(\mathbf{k}) & 0 & 0 & y^0(\mathbf{k}) \\ 0 & x_0^0(\mathbf{k}) & -y^0(\mathbf{k}) & 0 \\ 0 & -y^0(\mathbf{k})^* & -x_0^0(\mathbf{k}) & 0 \\ y^0(\mathbf{k})^* & 0 & 0 & -x_0^0(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}\uparrow} \\ a_{(-\mathbf{k})\downarrow} \\ a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \\ a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \\
 &\quad + \sum_{\mathbf{k}} x_0^0(\mathbf{k}) \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{A}_{\mathbf{k}}^\dagger \mathbf{X}(\mathbf{k}) \mathbf{A}_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} x_0^0(\mathbf{k}) \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{A}_{\mathbf{k}} U(\mathbf{k}) U^\dagger(\mathbf{k}) \mathbf{X}(\mathbf{k}) U(\mathbf{k}) U^\dagger(\mathbf{k}) \mathbf{A}_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} x_0^0(\mathbf{k}) \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \mathbf{E}(\mathbf{k}) \alpha_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} x_0^0(\mathbf{k}) \\
 &= \sum_{\mathbf{k}} E_0(\mathbf{k}) \{ \alpha_{1\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{1\mathbf{k}} + \alpha_{2\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{2\mathbf{k}} \} + \sum_{\mathbf{k}} \{ x_0^0(\mathbf{k}) - E_0(\mathbf{k}) \} \tag{9.67}
 \end{aligned}$$

ここで

$$\begin{aligned}
 X(\mathbf{k}) &= \begin{pmatrix} x_0^0(\mathbf{k}) & 0 & 0 & y^0(\mathbf{k}) \\ 0 & x_0^0(\mathbf{k}) & -y^0(\mathbf{k}) & 0 \\ 0 & -y^0(\mathbf{k})^* & -x_0^0(\mathbf{k}) & 0 \\ y^0(\mathbf{k})^* & 0 & 0 & -x_0^0(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \\
 A_{\mathbf{k}} &= (a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger, a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger, a_{\mathbf{k}\uparrow}, a_{(-\mathbf{k})\downarrow}) \\
 E(\mathbf{k}) &= \begin{pmatrix} E_0(\mathbf{k}) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_0(\mathbf{k}) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -E_0(\mathbf{k}) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -E_0(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \\
 E_0(\mathbf{k}) &= \sqrt{x_0^0(\mathbf{k})^2 + |y^0(\mathbf{k})|^2} \\
 U(\mathbf{k}) &= \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}} & 0 & 0 & -v_{\mathbf{k}}^* \\ 0 & u_{\mathbf{k}} & v_{\mathbf{k}}^* & 0 \\ 0 & -v_{\mathbf{k}} & u_{\mathbf{k}} & 0 \\ v_{\mathbf{k}} & 0 & 0 & u_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \\
 u_{\mathbf{k}} &= \left[\frac{1}{2} \left(1 + \frac{x_0^0(\mathbf{k})}{E_0(\mathbf{k})} \right) \right]^{\frac{1}{2}} \\
 v_{\mathbf{k}} &= \frac{|y^0(\mathbf{k})|}{y^0(\mathbf{k})} \left[\frac{1}{2} \left(1 - \frac{x_0^0(\mathbf{k})}{E_0(\mathbf{k})} \right) \right]^{\frac{1}{2}} \\
 \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger &= A_{\mathbf{k}}^\dagger U(\mathbf{k}) = (\alpha_{1\mathbf{k}}^\dagger, \alpha_{2\mathbf{k}}^\dagger, \alpha_{1\mathbf{k}}, \alpha_{2\mathbf{k}}) \\
 E(\mathbf{k}) &= U(\mathbf{k})^\dagger X(\mathbf{k}) U(\mathbf{k})
 \end{aligned} \tag{9.68}$$

である。(9.67) より

$$\begin{aligned}
 \langle \alpha_{1\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{1\mathbf{k}} \rangle &= \langle \alpha_{2\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{2\mathbf{k}} \rangle = \{1 + e^{\beta E_0(\mathbf{k})}\}^{-1} \equiv f(\mathbf{k}) \\
 \langle \alpha_{1\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{2\mathbf{k}} \rangle &= \langle \alpha_{2\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{1\mathbf{k}} \rangle = 0
 \end{aligned} \tag{9.69}$$

を得る。 $x_0^0(\mathbf{k}), y^0(\mathbf{k})$ が $\mathbf{k}$ の偶関数であるので、 $E_0(\mathbf{k}), f(\mathbf{k}), u_{\mathbf{k}}, v_{\mathbf{k}}$ が $\mathbf{k}$ の偶関数であることに注意しておく。(9.68) より

$$A_{\mathbf{k}}^\dagger = \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger U^\dagger(\mathbf{k}) \tag{9.70}$$

が成り立ち、

$$U^\dagger(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}} & 0 & 0 & v_{\mathbf{k}}^* \\ 0 & u_{\mathbf{k}} & -v_{\mathbf{k}}^* & 0 \\ 0 & v_{\mathbf{k}} & u_{\mathbf{k}} & 0 \\ -v_{\mathbf{k}} & 0 & 0 & u_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \tag{9.71}$$

を考慮すると

$$\begin{aligned}
 a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger &= u_{\mathbf{k}} \alpha_{1\mathbf{k}}^\dagger - v_{\mathbf{k}} \alpha_{2\mathbf{k}}, & a_{\mathbf{k}\uparrow} &= u_{\mathbf{k}} \alpha_{1\mathbf{k}} - v_{\mathbf{k}}^* \alpha_{2\mathbf{k}}^\dagger \\
 a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger &= u_{\mathbf{k}} \alpha_{2\mathbf{k}}^\dagger + v_{\mathbf{k}} \alpha_{1\mathbf{k}}, & a_{(-\mathbf{k})\downarrow} &= u_{\mathbf{k}} \alpha_{2\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}}^* \alpha_{1\mathbf{k}}^\dagger
 \end{aligned} \tag{9.72}$$

を得る. (9.72), (9.69) より

$$\begin{aligned}
\langle a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle &= \langle a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\downarrow} \rangle = u_{\mathbf{k}}^2 f(\mathbf{k}) + |v_{\mathbf{k}}|^2 (1 - f(\mathbf{k})) \\
\langle a_{(-\mathbf{k})\downarrow} a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle &= u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* (2f(\mathbf{k}) - 1) \\
\langle a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger \rangle &= u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} (2f(\mathbf{k}) - 1)
\end{aligned} \tag{9.73}$$

を得る. $u_{\mathbf{k}}, v_{\mathbf{k}}, f(\mathbf{k})$ が $\mathbf{k}$ の偶関数であることより

$$\begin{aligned}
\langle a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle &= u_{(-\mathbf{k})}^2 f(-\mathbf{k}) + |v_{(-\mathbf{k})}|^2 (1 - f(-\mathbf{k})) = u_{(\mathbf{k})}^2 f(\mathbf{k}) + |v_{(\mathbf{k})}|^2 (1 - f(\mathbf{k})) \\
&= \langle a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle
\end{aligned} \tag{9.74}$$

$$\begin{aligned}
\langle a_{(-\mathbf{k})\uparrow} a_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle &= -\langle a_{\mathbf{k}\downarrow} a_{(-\mathbf{k})\uparrow} \rangle = -u_{(-\mathbf{k})} v_{(-\mathbf{k})}^* (2f(-\mathbf{k}) - 1) = -u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* (2f(\mathbf{k}) - 1) \\
&= -\langle a_{(-\mathbf{k})\downarrow} a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle
\end{aligned} \tag{9.75}$$

を得る. したがって

$$\begin{aligned}
\rho_0^0(\mathbf{k}) &= u_{\mathbf{k}}^2 f(\mathbf{k}) + |v_{\mathbf{k}}|^2 (1 - f(\mathbf{k})) \\
\lambda^0(\mathbf{k}) &= u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* (2f(\mathbf{k}) - 1)
\end{aligned} \tag{9.76}$$

を得る. $E_0(\mathbf{k})$ は準粒子のエネルギーである. (9.48) よりスピンシングレット超伝導状態の自由エネルギーは次式で与えられる.

$$\begin{aligned}
F_{\text{HFB}} &= 2 \sum_{\mathbf{k}} (-2t\gamma(\mathbf{k}) - \mu) \rho_0^0(\mathbf{k}) \\
&+ \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{i=1}^3 W_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^0(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}') + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{i=1}^3 Z_i(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \lambda^0(\mathbf{k}) \lambda^0(\mathbf{k}') \\
&+ \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}} \{f(\mathbf{k}) \log f(\mathbf{k}) + (1 - f(\mathbf{k})) \log (1 - f(\mathbf{k}))\}
\end{aligned} \tag{9.77}$$

以下 $\check{G}_0^{(\Gamma A_{1g}, 0, 2)}$, $\check{G}_0^{(\Gamma B_{1g}, 0, 2)}$ の場合を個別に考察する.

9.2.1 $\check{G}_0^{(\Gamma A_{1g}, 0, 2)}$

既約表現 $\check{G}_0^{(\Gamma A_{1g}, 0, 2)} = \check{\mathbf{P}}^{(\Gamma A_{1g})} \otimes \check{\mathbf{S}}^{(0)} \otimes \check{\mathbf{R}}^{(2)}$ は 2 次元表現であり, その表現空間を $W(\Gamma A_{1g}, 0, 2) = \{h_1, h_2\}_{\mathbf{R}}$ とする. $p \in L_0 D_{4h}$, $u(\mathbf{n}, \theta) \in \mathbf{S}$, $\tilde{\phi} \in \Phi$, $t\tilde{\phi} \in \mathbf{R}$ に対して

$$\begin{aligned}
p \cdot h_i &= h_i, \quad i = 1, 2 \\
u(\mathbf{n}, \theta) \cdot h_i &= h_i, \quad i = 1, 2 \\
\tilde{\phi} \cdot (h_1, h_2) &= (h_1, h_2) \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi \\ \sin \phi & \cos \phi \end{pmatrix} \\
t\tilde{\phi} \cdot (h_1, h_2) &= (h_1, h_2) \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi \\ -\sin \phi & -\cos \phi \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{9.78}$$

が成り立つ。 $W(\Gamma A_{1g}, 0, 2)$ の任意のベクトル h は実数 a, b を使って

$$\begin{aligned} h &= ah_1 + bh_2 \\ &= \sqrt{a^2 + b^2} \left\{ \frac{a}{\sqrt{a^2 + b^2}} h_1 + \frac{b}{\sqrt{a^2 + b^2}} h_2 \right\} \\ &= \sqrt{a^2 + b^2} \{ \cos \theta h_1 + \sin \theta h_2 \} \\ &= \tilde{\theta} \cdot \sqrt{a^2 + b^2} h_1 \end{aligned} \quad (9.79)$$

と表せる。ここで

$$\begin{aligned} \frac{a}{\sqrt{a^2 + b^2}} &= \cos \theta \\ \frac{b}{\sqrt{a^2 + b^2}} &= \sin \theta \end{aligned} \quad (9.80)$$

である。したがって $W(\Gamma A_{1g}, 0, 2)$ 内の任意のベクトルは h_1 の方向のベクトルに物理的に等値なベクトルになる。したがって h_1 方向の空間 $W_1 = \{h_1\}_R$ の中で考察すればよい。 h_1 は時間反転 t に対して不変であるので、(9.78) より $\check{G}_0^{(\Gamma A_{1g}, 0, 2)}$ の固定部分群と固定点部分空間として

$$\begin{aligned} G(\Gamma A_{1g}, 0, 2) &= D_{4h} L_0 ST \\ \text{Fix}(G(\Gamma A_{1g}, 0, 2)) &= \{h_1\}_R \end{aligned} \quad (9.81)$$

を得る。ここで T は時間反転の群で

$$T = (E, t) \quad (9.82)$$

で定義される。平均場ハミルトニアン H_m は $G(\Gamma A_{1g}, 0, 2) = D_{4h} L_0 ST$ に対して不変である。(9.53) と D_{4h} 不変性より $p \in D_{4h}$ に対して

$$\begin{aligned} p \cdot \rho_0^0(\mathbf{k}) &= \rho_0^0(p^{-1} \cdot \mathbf{k}) = \rho_0^0(\mathbf{k}) \\ p \cdot \lambda^0(\mathbf{k}) &= \lambda^0(p^{-1} \cdot \mathbf{k}) = \lambda^0(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (9.83)$$

を得る。したがって時間反転 t 対称性を考慮すると、 $\rho_0^0(\mathbf{k}), \lambda^0(\mathbf{k})$ は D_{4h} の既約表現 A_{1g} に属する実関数であることがわかる。 $\rho_0^0(\mathbf{k})$ と $\lambda^0(\mathbf{k})$ の対称性を考慮すると SCF 条件 (9.44) より

$$\begin{aligned} x_0^0(\mathbf{k}) &= -2t\gamma(\mathbf{k}) - \mu + \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{i=1}^2 W_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^0(\mathbf{k}') \\ &= a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu} \end{aligned} \quad (9.84)$$

$$\begin{aligned} y^0(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{i=1}^2 Z_i(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \lambda^0(\mathbf{k}') \\ &= b + c\gamma(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (9.85)$$

を得る. ここで実数 $a, b, c, \tilde{\mu}$ は

$$\begin{aligned}
 a &= -2t - (V - 2J) \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}) \\
 b &= U \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \lambda^0(\mathbf{k}) \\
 c &= (V + J) \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \lambda^0(\mathbf{k}) \\
 \tilde{\mu} &= \mu - (U + 8V - 4J) \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \rho_0^0(\mathbf{k})
 \end{aligned} \tag{9.86}$$

で与えられる. したがって平均場ハミルトニアンは

$$\begin{aligned}
 H_m &= H_m^0 + H_m^1 \\
 H_m^0 &= \sum_{\mathbf{k}s} (a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu}) a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s} \\
 H_m^1 &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} (b + c\gamma(\mathbf{k})) a_{\mathbf{k}s}^\dagger (i\sigma^0 \sigma^2)_{ss'} a_{(-\mathbf{k})s'}^\dagger + H.C
 \end{aligned} \tag{9.87}$$

となる.

$$\begin{aligned}
 x_0^0(\mathbf{k}) &= a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu} \\
 y^0(\mathbf{k}) &= b + c\gamma(\mathbf{k})
 \end{aligned} \tag{9.88}$$

と (9.68) より準粒子のエネルギーは

$$E_0(\mathbf{k}) = \sqrt{(a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu})^2 + (b + c\gamma(\mathbf{k}))^2} \tag{9.89}$$

$\Delta(\mathbf{k}) = b + c\gamma(\mathbf{k})$ はエネルギーギャップ関数といわれる. 一般的には $\Delta(\mathbf{k})$ はフェルミ面 $= \{\mathbf{k} \mid a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu} = 0\}$ でゼロにはならない. この状態は元の対称性の群 $G_0 = P \times S \times (\Phi + t\Phi)$ のうちグローバルゲージ対称性 Φ だけが破れて

$$D_{4h} L_0 S(\Phi + t\Phi) \xrightarrow{\check{G}_0^{(\Gamma A_{1g}, 0, 2)}} D_{4h} L_0 ST$$

と書くことができる. この状態は超伝導状態の中では最も対称性のよい状態であり, s-波 (s-wave) 超伝導と呼ばれ, いわゆる BCS 状態はこれに対応する.

9.2.2 $\check{G}_0^{(\Gamma B_{1g}, 0, 2)}$

既約表現 $\check{G}_0^{(\Gamma B_{1g}, 0, 2)} = \check{P}^{(\Gamma B_{1g})} \otimes \check{S}^{(0)} \otimes \check{\mathbf{R}}^{(2)}$ は 2 次元表現であり, その表現空間を $W(\Gamma B_{1g}, 0, 2) = \{h_1, h_2\}_{\mathbf{R}}$ とする. $T(\mathbf{m}) \in L_0$, $p \in D_{2h}$, $p' \in C_{4z}^+ D_{2h}$, $u(\mathbf{n}, \theta) \in S$, $\tilde{\phi} \in \Phi$, $t\tilde{\phi} \in \mathbf{R}$ に対して

$$\begin{aligned}
 T(\mathbf{m}) \cdot h_i &= h_i, \quad i = 1, 2 \\
 p \cdot h_i &= h_i, \quad i = 1, 2 \\
 p' \cdot h_i &= -h_i, \quad i = 1, 2 \\
 u(\mathbf{n}, \theta) \cdot h_i &= h_i, \quad i = 1, 2 \\
 \tilde{\phi} \cdot (h_1, h_2) &= (h_1, h_2) \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi \\ \sin \phi & \cos \phi \end{pmatrix} \\
 t\tilde{\phi} \cdot (h_1, h_2) &= (h_1, h_2) \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi \\ -\sin \phi & -\cos \phi \end{pmatrix}
 \end{aligned} \tag{9.90}$$

が成り立つ. $\check{G}_0^{(\Gamma A_{1g}, 0, 2)}$ の場合と同様に $W(\Gamma B_{1g}, 0, 2)$ の任意のベクトルは h_1 の方向のベクトルに物理的に同値なベクトルになる. したがって h_1 方向の空間 $W_1 = \{h_1\}_{\mathbb{R}}$ の中で考察すればよい. $\check{G}_0^{(\Gamma B_{1g}, 0, 2)}$ の場合, h_1 は D_{2h} に不変で C_{2a}, π の作用で符号をかえるので, $\check{G}_0^{(\Gamma B_{1g}, 0, 2)}$ の固定部分群と固定点部分空間は

$$\begin{aligned}
 G(\Gamma B_{1g}, 0, 2) &= (E + C_{2a}\pi) D_{2h} L_0 ST \\
 \text{Fix}(G(\Gamma B_{1g}, 0, 2)) &= \{h_1\}_{\mathbb{R}}
 \end{aligned} \tag{9.91}$$

となる. 対応する平均場ハミルトニアン H_m は $G(\Gamma B_{1g}, 0, 2)$ に不変である. $D_{2h}, C_{2a}\pi$ 不変性と (9.53) より $p \in D_{2h}$ に対して

$$\begin{aligned}
 p \cdot \rho_0^0(\mathbf{k}) &= \rho_0^0(p^{-1} \cdot \mathbf{k}) = \rho_0^0(\mathbf{k}), & p \cdot \lambda^0(\mathbf{k}) &= \lambda^0(p^{-1} \cdot \mathbf{k}) = \lambda^0(\mathbf{k}) \\
 C_{2a}\pi \cdot \rho_0^0(\mathbf{k}) &= \rho_0^0(C_{2a} \cdot \mathbf{k}) = \rho_0^0(\mathbf{k}) & C_{2a}\pi \cdot \lambda^0(\mathbf{k}) &= -\lambda^0(C_{2a} \cdot \mathbf{k}) = \lambda^0(\mathbf{k})
 \end{aligned} \tag{9.92}$$

を得る. したがって $\rho_0^0(\mathbf{k})$ は D_{4h} の A_{1g} に属する実関数, $\lambda^0(\mathbf{k})$ は D_{4h} の B_{1g} に属する実関数である. これより命題 8.5(その2 p.275) によって SCF 条件 (9.44) から

$$\begin{aligned}
 x_0^0(\mathbf{k}) &= -2t\gamma(\mathbf{k}) - \mu + \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{i=1}^2 W_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^0(\mathbf{k}') \\
 &= a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu}
 \end{aligned} \tag{9.93}$$

$$\begin{aligned}
 y^0(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}'} Z_3(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \lambda^0(\mathbf{k}') \\
 &= b\eta(\mathbf{k})
 \end{aligned} \tag{9.94}$$

を得る. したがって平均場ハミルトニアンは

$$\begin{aligned}
 H_m &= H_m^0 + H_m^1 \\
 H_m^0 &= \sum_{\mathbf{k}s} (a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu}) a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s} \\
 H_m^1 &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} b\eta(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}s}^\dagger (i\sigma^0 \sigma^2)_{ss'} a_{(-\mathbf{k})s'}^\dagger + H.C
 \end{aligned} \tag{9.95}$$

となる。ここで実数 a, b は

$$\begin{aligned} a &= -2t - (V - 2J) \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}) \\ b &= (V + J) \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \eta(\mathbf{k}) \lambda^0(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (9.96)$$

である。ギャップ関数は

$$\Delta(\mathbf{k}) = b\eta(\mathbf{k}) = b(\cos k_1 - \cos k_2) = -2b \sin \frac{k_1 + k_2}{2} \sin \frac{k_1 - k_2}{2} \quad (9.97)$$

となり、フェルミ面上の

$$\{\mathbf{k} \mid k_1 \pm k_2 = 0 \text{ and } a\gamma(\mathbf{k}) - \bar{\mu} = 0\} \quad (9.98)$$

なる点でギャップ関数はゼロになる。この状態は元の対称性の群 $G_0 = \mathbf{P} \times \mathbf{S} \times (\Phi + t\Phi)$ のなかでグローバルゲージ対称性 Φ と点群対称性 $D_{4h} = D_{2h} + C_{2a}D_{2h}$ のうち $C_{2a}D_{2h}$ の部分の対称性が破れ、 $C_{2a}\tilde{\pi}D_{2h}$ 対称性が保存されており

$$D_{4h}L_0S(\Phi + t\Phi) \xrightarrow{\tilde{G}_0^{(\Gamma_{B_{1g},0,2})}} (E + C_{2a}\tilde{\pi})D_{2h}L_0ST$$

と書くことができる。この状態は **d-波超伝導** (d-wave) と呼ばれている。高温超伝導体銅酸化物で実現していると考えられている超伝導状態はこれに対応している。

9.3 スピントリプレット 超伝導状態

スピントリプレット超伝導状態の一般的な平均場ハミルトニアンは次式で与えられる。

$$\begin{aligned} H_m &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} \sum_{\mu=0}^3 x_0^\mu(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}s}^\dagger \sigma_{ss'}^\mu a_{\mathbf{k}s'} \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} \sum_{\mu=1}^3 \{ y^\mu(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}s}^\dagger (i\sigma^\mu \sigma^2)_{ss'} a_{(-\mathbf{k})s'}^\dagger + (y^\mu(\mathbf{k}))^* a_{(-\mathbf{k})s'} (i\sigma^\mu \sigma^2)_{ss'}^* a_{\mathbf{k}s} \} \end{aligned} \quad (9.99)$$

命題 9.1 より $y^\mu(\mathbf{k})$ ($\mu = 1, 2, 3$) は $\mathbf{k}$ の奇関数であり SCF 条件 (9.44) より $y^\mu(\mathbf{k})$ は $Z_4(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$, $Z_5(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ より導かれる E_u 表現の対称性を持つことがわかる。したがってスピントリプレット超伝導を導く既約表現としては $\tilde{G}_0^{(\Gamma_{E_u,1,2})}$ を考察すればよい。(7.93)(その2 p.247) で定義した W_{HFB} を表現空間とする $\tilde{G}_0^{(\Gamma_{E_u,1,2})}$ の基底は表 7.4(その2 p.265) より $\mu = 1, 2, 3$ のとき

$$\begin{aligned} l_{1,\mu,1} &= h(\Gamma_{E_u,1,2})_{1,\mu,1} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} \sin k_1 a_{\mathbf{k}s}^\dagger (i\sigma^\mu \sigma^2)_{ss'} a_{(-\mathbf{k})s'}^\dagger + H.C \\ l_{1,\mu,2} &= h(\Gamma_{E_u,1,2})_{1,\mu,2} = i \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} \sin k_1 a_{\mathbf{k}s}^\dagger (i\sigma^\mu \sigma^2)_{ss'} a_{(-\mathbf{k})s'}^\dagger + H.C \\ l_{2,\mu,1} &= h(\Gamma_{E_u,1,2})_{2,\mu,1} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} \sin k_2 a_{\mathbf{k}s}^\dagger (i\sigma^\mu \sigma^2)_{ss'} a_{(-\mathbf{k})s'}^\dagger + H.C \\ l_{2,\mu,2} &= h(\Gamma_{E_u,1,2})_{2,\mu,2} = i \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} \sin k_2 a_{\mathbf{k}s}^\dagger (i\sigma^\mu \sigma^2)_{ss'} a_{(-\mathbf{k})s'}^\dagger + H.C \end{aligned} \quad (9.100)$$

で与えられる。基底 $l_{j,\mu,\nu}$ ($j = 1, 2, \mu = 1, 2, 3, \nu = 1, 2$) は $p \in D_{4h}, T(\mathbf{m}) \in L_0, u(\mathbf{n}, \theta) \in S, \tilde{\phi} \in \mathbf{R}$ に対して

$$\begin{aligned} pT(\mathbf{m})u(\mathbf{n}, \theta)\tilde{\phi} \cdot l_{j,\mu,\nu} &= \sum_{j'=1}^2 \sum_{\mu'=1}^3 \sum_{\nu'=1}^2 D_{j'j}(p) R_{\mu'\mu}(\mathbf{n}, \theta) \check{\mathbf{R}}_{\nu'\nu}^{(2)}(\phi) l_{j',\mu',\nu'} \\ tpT(\mathbf{m})u(\mathbf{n}, \theta)\tilde{\phi} \cdot l_{j,\mu,\nu} &= \sum_{j'=1}^2 \sum_{\mu'=1}^3 \sum_{\nu'=1}^2 D_{j'j}(p) R_{\mu'\mu}(\mathbf{n}, \theta) \check{\mathbf{R}}_{\nu'\nu}^{(2)}(t\phi) l_{j',\mu',\nu'} \end{aligned} \quad (9.101)$$

の変換をする。ここで $R(\mathbf{n}, \theta)$ は (7.102)(その2 p.249) で定義されている3次元回転行列であり、 $\check{\mathbf{R}}^{(2)}(\phi), \check{\mathbf{R}}^{(2)}(t\phi)$ は (7.133)(その2 p.255) で与えられる行列である。

9.3.1 $\check{G}_0^{(\Gamma E_u, 1, 2)}$ の固定部分群と固定点部分空間

既約表現 $\check{G}_0^{(\Gamma E_u, 1, 2)} = \check{P}^{\Gamma E_u} \otimes \check{S}^{(1)} \otimes \check{\mathbf{R}}^{(2)}$ は $2 \times 3 \times 2 = 12$ 次元表現である。 $\check{G}_0^{(\Gamma E_u, 1, 2)}$ の固定部分群を求めるために、その表現空間として (9.100) の基底の代わりに

$$W(\check{G}_0^{(\Gamma E_u, 1, 2)}) = \{l_m \tau_\mu \chi_\nu\}_{\mathbf{R}} \quad m = 1, 2, \mu = 1, 2, 3, \nu = 1, 2 \quad (9.102)$$

を考える。ここで (l_1, l_2) は P の既約表現 $\check{P}^{\Gamma E_u}$ の表現基底で、 $T(\mathbf{n}) \in L_0, p \in D_{4h}$ に対して次の変換性を持つ。

$$\begin{aligned} T(\mathbf{n}) \cdot l_m &= l_m, \quad m = 1, 2 \\ p \cdot l_m &= \sum_{m'=1}^2 l_{m'} D_{m'm}(p) \end{aligned} \quad (9.103)$$

ここで $D(p)$ は表 B.2(その2 p.339) にある D_{4h} の既約表現 E_u の表現行列である。 (l_1, l_2) は2次元実空間の基底ベクトル (e_1, e_2) と同様の変換をすることに注意されたい。

(τ_1, τ_2, τ_3) は S の既約表現 $\check{S}^{(1)}$ の表現基底で $u(\mathbf{n}, \theta) \in S$ に対して次の変換性を持つ。

$$u(\mathbf{n}, \theta) \cdot \tau_\lambda = \sum_{\lambda'=1}^3 \tau_{\lambda'} R_{\lambda'\lambda}(\mathbf{n}, \theta) \quad (9.104)$$

ここで $R(\mathbf{n}, \theta)$ は (7.102)(その2 p.249) で定義されている3次元実空間の回転行列である。

$(\chi_1, \chi_2) \equiv (1, i)$ は $\mathbf{R}$ の既約表現 $\check{\mathbf{R}}^{(2)}$ の表現基底であり $\tilde{\phi} \in \Phi, t \in \mathbf{R}$ の作用を

$$\begin{aligned} \tilde{\phi} \cdot 1 &= e^{i\phi} 1 = \cos \phi + i \sin \phi \\ \tilde{\phi} \cdot i &= e^{i\phi} i = -\sin \phi + i \cos \phi \\ t\tilde{\phi} \cdot 1 &= te^{i\phi} 1 = e^{-i\phi} = \cos \phi - i \sin \phi \\ t\tilde{\phi} \cdot i &= te^{i\phi} i = e^{-i\phi}(-i) = -\sin \phi - i \cos \phi \end{aligned} \quad (9.105)$$

と考える。これを行列表示すると

$$\begin{aligned} \tilde{\phi} \cdot (1, i) &= (1, i) \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi \\ \sin \phi & \cos \phi \end{pmatrix} = (1, i) \check{\mathbf{R}}^{(2)}(\tilde{\phi}) \\ t\tilde{\phi} \cdot (1, i) &= (1, i) \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi \\ -\sin \phi & -\cos \phi \end{pmatrix} = (1, i) \check{\mathbf{R}}^{(2)}(t\tilde{\phi}) \end{aligned} \quad (9.106)$$

表 9.1: $\check{G}_0^{(\Gamma E_u, 1, 2)}$ の固定部分群と固定点部分空間

固定部分群	固定点部分空間	コメント
$G_1 = (E + u_{2x}\tilde{\pi})C_{2xv}A(e_3)T$	$\{l_1\tau_3\}_R$	OSP
$G_2 = (E + u_{2x}\tilde{\pi})C_{2av}A(e_3)T$	$\{(l_1 + l_2)\tau_3\}_R$	OSP
$G_3 = (E + u_{2x}\tilde{\pi})(E + tC_{2x})C_4(\widetilde{(\frac{\pi}{2})})A(e_3)$	$\{(l_1 + il_2)\tau_3\}_R$	OSP
$G_4 = (E + u_{2x}\tilde{\pi})(E + tC_{2a})C_4(\widetilde{(\frac{\pi}{2})})A(e_3)$	$\{[(l_1 + l_2) + i(l_2 - l_1)]\tau_3\}_R$	OSP
$G_5 = (E + tu_{2x})C_{2z}(u_{2z})C_{2xv}\tilde{A}(e_3)$	$\{l_1(\tau_1 + i\tau_2)\}_R$	SSP
$G_6 = (E + tu_{2x})C_{2z}(u_{2z})C_{2av}\tilde{A}(e_3)$	$\{(l_1 + l_2)(\tau_1 + i\tau_2)\}_R$	SSP
$G_7 = (E + tC_{2x}u_{2x})C_{2z}(u_{2z})C_4(\widetilde{(\frac{\pi}{2})})\tilde{A}(e_3)$	$\{(l_1 + il_2)(\tau_1 + i\tau_2)\}_R$	SSP
$G_8 = (E + tC_{2a}u_{2x})C_{2z}(u_{2z})C_4(\widetilde{(\frac{\pi}{2})})\tilde{A}(e_3)$	$\{[(l_1 + l_2) + i(l_2 - l_1)](\tau_1 + i\tau_2)\}_R$	SSP
$G_9 = (E + IC_{2z})D_4(u_{4z}^+, u_{2x})T$	$\{l_1\tau_1 + l_2\tau_2\}_R$	ESP
$G_{10} = (E + tu_{2x})D_2(u_{2z}, u_{2x})C_4(u_{2a}\widetilde{(\frac{\pi}{2})})$	$\{l_1\tau_1 + il_2\tau_2\}_R$	ESP
$G_{11} = (E + tu_{2x})D_{2a}(u_{2z}, u_{2x})C_4(u_{2a}\widetilde{(\frac{\pi}{2})})$	$\{(l_1 + l_2)\tau_1 + i(l_2 - l_1)\tau_2\}_R$	ESP
$G_{12} = (E + tC_{2x}u_{2x})D_{2a}(u_{2z}, u_{2a})C_4(u_{2x}\widetilde{(\frac{\pi}{2})})$	$\{l_1\tau_1 + l_2\tau_2 + i(l_1\tau_2 + l_2\tau_1)\}_R$	ESP
$G_{13} = (E + tC_{2a}u_{2x})D_2(u_{2z}, u_{2b})C_4(u_{2x}\widetilde{(\frac{\pi}{2})})$	$\{(l_1 + l_2)\tau_1 + (l_2 - l_1)\tau_2 + i[(l_1 + l_2)\tau_2 + (l_2 - l_1)\tau_1]\}_R$	ESP

$(E + I\tilde{\pi})L_0$ は全ての状態に含まれるので省略した。

$l_m\tau^\mu\chi_1$ を $l_m\tau^\mu$, $l_m\tau^\mu\chi_2$ を $il_m\tau^\mu$ と記した。

OSP = oposite spin pairing. SSP = single spin pairing. ESP = equal spin pairing

$A(e_3) = \{u(e_3, \theta) \mid 0 \leq \theta \leq 2\pi\}$.

$C_{2xv} = \{E, C_{2x}, IC_{2z}, IC_{2y}\}$. $C_{2av} = \{E, C_{2a}, IC_{2z}, IC_{2b}\}$.

$C_4(\widetilde{(\frac{\pi}{2})}) = \{E, C_{4z}^+(\widetilde{(\frac{\pi}{2})}), C_{2z}\tilde{\pi}, C_{4z}^-(\widetilde{\frac{3\pi}{2}})\}$.

$C_{2z}(u_{2z}) = \{E, C_{2z}u_{2z}\}$

$\tilde{A}(e_3) = \{u(e_3, \theta)\tilde{\theta} \mid 0 \leq \theta \leq 2\pi\}$

$D_4(u_{4z}^+, u_{2x}) = \{E, C_{4z}^+u_{4z}^+, C_{2z}u_{2z}, C_{4z}^-u_{4z}^-\} + C_{2x}u_{2x}\{E, C_{4z}^+u_{4z}^+, C_{2z}u_{2z}, C_{4z}^-u_{4z}^-\}$

$D_2(u_{2z}, u_{2x}) = \{E, C_{2z}u_{2z}, C_{2x}u_{2x}, C_{2y}u_{2y}\}$

$D_{2a}(u_{2z}, u_{2x}) = \{E, C_{2z}u_{2z}, C_{2a}u_{2x}, C_{2b}u_{2y}\}$

$C_4(u_{2a}\widetilde{(\frac{\pi}{2})}) = \{E, C_{4z}^+u_{2a}(\widetilde{(\frac{\pi}{2})}), C_{2z}\tilde{\pi}, C_{4z}^-u_{2a}(\widetilde{\frac{3\pi}{2}})\}$

$D_2(u_{2z}, u_{2b}) = \{E, C_{2z}u_{2z}, C_{2x}u_{2b}, C_{2y}u_{2a}\}$

$C_4(u_{2x}\widetilde{(\frac{\pi}{2})}) = \{E, C_{4z}^+u_{2x}(\widetilde{(\frac{\pi}{2})}), C_{2z}\tilde{\pi}, C_{4z}^-u_{2x}(\widetilde{\frac{3\pi}{2}})\}$

となる。ここで $\check{\mathbf{R}}^{(2)}(\tilde{\phi}), \check{\mathbf{R}}^{(2)}(t\tilde{\phi})$ は (7.133)(その 2 p.255) の行列である。これらをまとめると

$W(\check{G}_0^{(\Gamma E_u, 1, 2)}) = \{l_m \tau_\lambda \chi_\nu\}_R$ への G_0 の作用は $T(\mathbf{n}) \in L_0, p \in D_{4h}, u(\mathbf{n}, \theta) \in S, \tilde{\phi} \in \Phi, t\tilde{\phi} \in R$ に対して

$$\begin{aligned}
 T(\mathbf{n}) \cdot l_m &= l_m \\
 p \cdot l_m &= \sum_{m'=1}^2 l_{m'} D_{m'm}(p) \\
 u(\mathbf{n}, \theta) \cdot \tau_\lambda &= \sum_{\lambda'=1}^3 \tau_{\lambda'} R_{\lambda'\lambda}(\mathbf{n}, \theta) \\
 \tilde{\phi} \cdot \chi_\nu &= \sum_{\nu'=1}^2 \chi_{\nu'} \check{R}_{\nu'\nu}^{(2)}(\tilde{\phi}) \\
 t\tilde{\phi} \cdot \chi_\nu &= \sum_{\nu'=1}^2 \chi_{\nu'} \check{R}_{\nu'\nu}^{(2)}(t\tilde{\phi})
 \end{aligned} \tag{9.107}$$

となる. (9.100) の基底と $W(\check{G}_0^{(\Gamma E_u, 1, 2)})$ の基底との対応は

$$l_m \tau^\mu \chi_\nu \longleftrightarrow l_{m, \mu, \nu} \tag{9.108}$$

である.

$W(\check{G}_0^{(\Gamma E_u, 1, 2)})$ における $G_0 = P \times S \times R$ の固定部分群 $G(\Gamma E_u, 1, 2)$ とその固定点部分空間 $\text{Fix}(G(\Gamma E_u, 1, 2))$ を求める必要がある. そのためには込み入った方法を用いる必要がある. ここでは結果だけを表 9.1 に記す. その導出は長くなるので付録 F に記した. これらの状態は大きく次の 3 種類に分けられる.

(1) 反平行スピン電子よるペアリング (**OSP**=opposite spin pairing) を持つ状態で, 固定部分群は z 軸の周りのスピン回転からなる群³ $A(e_3) = \{u(e_3, \theta) \mid 0 \leq \theta \leq 2\pi\}$ と $u_{2x}\tilde{\pi}$ を含む. $\uparrow$ 電子と $\downarrow$ 電子よるペアリングがある状態である. G_1 から G_4 がこれにあたる.

(2) 1 種類 (表 9.1 の場合は up spin) のスピンだけのペアリング (**SSP**=single spin pairing) を持つ状態で, 固定部分群は次の対称操作を含む.

$$\begin{aligned}
 \tilde{A}(e_3) &= \{u(e_3, \theta)\tilde{\theta} \mid 0 \leq \theta \leq 2\pi\} \\
 tu_{2x} &= tu(e_1, \pi)
 \end{aligned}$$

G_5 から G_8 がこれにあたる.

(3) 等しいスピン同士のペアリング (**ESP**=equal spin pairing) を持つ状態である. 固定部分群は $u_{2z}\tilde{\pi}$ を含む. G_9 から G_{13} がこれにあたる.

以上全ての状態は $I\tilde{\pi}$ に不変である. したがって

$$\begin{aligned}
 I\tilde{\pi} \cdot \rho_0^\mu(\mathbf{k}) &= \rho_0^\mu(-\mathbf{k}) = \rho_0^\mu(\mathbf{k}), \quad \mu = 0, 1, 2, 3 \\
 I\tilde{\pi} \cdot \lambda^\mu(\mathbf{k}) &= -\lambda^\mu(-\mathbf{k}) = \lambda^\mu(\mathbf{k}), \quad \mu = 1, 2, 3
 \end{aligned} \tag{9.109}$$

が成り立ち, ρ_0^μ は $\mathbf{k}$ の偶関数, $\lambda^\mu(\mathbf{k})$ は $\mathbf{k}$ の奇関数である.

³任意の方向の軸の周りのスピン回転でも物理的に等価であるが, 記述上の都合で z 軸を選んだ.

9.3.2 OSP 状態

第9.3.2節では $G_1 \sim G_4$ の状態を考察する. $u_{2z} \in A(e_3)$ 不変性と (9.59) より $\rho_0^\mu(\mathbf{k}), \lambda^\mu(\mathbf{k})$ でゼロでないのは $\rho_0^0(\mathbf{k}), \rho_0^3(\mathbf{k}), \lambda^0(\mathbf{k}), \lambda^3(\mathbf{k})$ である. $u_{2x}\tilde{\pi}$ 不変性と (9.53), (9.59) より

$$\begin{aligned} u_{2x}\tilde{\pi} \cdot \rho_0^3(\mathbf{k}) &= -\rho_0^3(\mathbf{k}) = \rho_0^3(\mathbf{k}) \\ u_{2x}\tilde{\pi} \cdot \lambda^0(\mathbf{k}) &= -\lambda^0(\mathbf{k}) = \lambda^0(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (9.110)$$

が導かれ

$$\rho_0^3(\mathbf{k}) = \lambda^0(\mathbf{k}) = 0 \quad (9.111)$$

を得る. したがって $\rho_0^0(\mathbf{k}), \lambda^3(\mathbf{k})$ だけがゼロでない. SCF 条件 (9.44)(p.488) より

$$\begin{aligned} x_0^\mu(\mathbf{k}) &= 0, \quad \mu = 1, 2, 3 \\ y^\mu(\mathbf{k}) &= 0, \quad \mu = 0, 1, 2 \end{aligned} \quad (9.112)$$

を得る. したがって平均場ハミルトニアンは (9.3) より

$$\begin{aligned} H_m &= \sum_{\mathbf{k}s} x_0^0(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s} + \left\{ \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} y^3(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}s}^\dagger (i\sigma^3 \sigma^2)_{ss'} a_{(-\mathbf{k})s'}^\dagger + H.C \right\} \\ &= \sum_{\mathbf{k}} x_0^0(\mathbf{k}) \{ a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} + a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow} \} + \left[\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} y^3(\mathbf{k}) \{ a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger + a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\uparrow}^\dagger \} + H.C \right] \end{aligned} \quad (9.113)$$

を得る. 表 9.1 の全ての固定部分群は $I\tilde{\pi}$ を含んでいる. H_m の $I\tilde{\pi}$ 不変性より

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}s} x_0^0(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s} &= (I\tilde{\pi}) \cdot \left\{ \sum_{\mathbf{k}s} x_0^0(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s} \right\} \\ &= \sum_{\mathbf{k}s} x_0^0(\mathbf{k}) (I\tilde{\pi} \cdot a_{\mathbf{k}s}^\dagger) (I\tilde{\pi} \cdot a_{\mathbf{k}s}) \\ &= \sum_{\mathbf{k}s} x_0^0(\mathbf{k}) (e^{i\frac{\pi}{2}} a_{(-\mathbf{k})s}^\dagger) (e^{-i\frac{\pi}{2}} a_{(-\mathbf{k})s}) \\ &= \sum_{\mathbf{k}s} x_0^0(-\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s} \end{aligned} \quad (9.114)$$

が成り立ち,

$$x_0^0(-\mathbf{k}) = x_0^0(\mathbf{k}) \quad (9.115)$$

を得る. また命題 9.1 より

$$\begin{aligned} y^3(-\mathbf{k}) &= -y^3(\mathbf{k}) \\ x_0^0(\mathbf{k})^* &= x_0^0(\mathbf{k}) \end{aligned}$$

が成り立つ. $x_0^0(\mathbf{k})$ が $\mathbf{k}$ の実偶関数, $y^3(\mathbf{k})$ が $\mathbf{k}$ の奇関数であることを考慮すると (9.65), (9.66) と同様にして

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}s} x_0^0(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s} &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} x_0^0(\mathbf{k}) \{ a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} + a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\downarrow} - a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\downarrow} - a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} \} \\ &\quad + \sum_{\mathbf{k}} x_0^0(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (9.116)$$

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} y^3(\mathbf{k}) (a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger + a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\uparrow}^\dagger) + H.C \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} y^3(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} y^3(-\mathbf{k}) a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger + H.C \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} y^3(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} y^3(\mathbf{k}) a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger + H.C \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} y^3(\mathbf{k}) (a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger - a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger) + H.C \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} y^3(\mathbf{k}) (a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger - a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger) \\
 &\quad + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} y^3(\mathbf{k})^* (a_{(-\mathbf{k})\downarrow} a_{\mathbf{k}\uparrow} - a_{\mathbf{k}\uparrow} a_{(-\mathbf{k})\downarrow}) \tag{9.117}
 \end{aligned}$$

となり (9.65) および (9.66) で $y^0(\mathbf{k})$ を $y^3(\mathbf{k})$ で置き換えた式を得る. したがってこの場合の H_m は (9.67) と同様につぎのようにに対角化される.

$$\begin{aligned}
 H_m &= \sum_{\mathbf{k}} x_0^0(\mathbf{k}) (a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} + a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow}) + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} y^3(\mathbf{k}) (a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger + a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\uparrow}^\dagger) \\
 &\quad + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} y^3(\mathbf{k})^* (a_{(-\mathbf{k})\downarrow} a_{\mathbf{k}\uparrow} + a_{(-\mathbf{k})\uparrow} a_{\mathbf{k}\downarrow}) \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} (a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger, a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger, a_{\mathbf{k}\uparrow}, a_{(-\mathbf{k})\downarrow}) \begin{pmatrix} x_0^0(\mathbf{k}) & 0 & 0 & y^3(\mathbf{k}) \\ 0 & x_0^0(\mathbf{k}) & -y^3(\mathbf{k}) & 0 \\ 0 & -y^3(\mathbf{k})^* & -x_0^0(\mathbf{k}) & 0 \\ y^3(\mathbf{k})^* & 0 & 0 & -x_0^0(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}\uparrow} \\ a_{(-\mathbf{k})\downarrow} \\ a_{\mathbf{k}\uparrow} \\ a_{(-\mathbf{k})\downarrow} \end{pmatrix} \\
 &\quad + \sum_{\mathbf{k}} x_0^0(\mathbf{k}) \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{A}_{\mathbf{k}}^\dagger \mathbf{X}(\mathbf{k}) \mathbf{A}_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} x_0^0(\mathbf{k}) \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{A}_{\mathbf{k}}^\dagger U(\mathbf{k}) U^\dagger(\mathbf{k}) \mathbf{X}(\mathbf{k}) U(\mathbf{k}) U^\dagger(\mathbf{k}) \mathbf{A}_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} x_0^0(\mathbf{k}) \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger E(\mathbf{k}) \alpha_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} x_0^0(\mathbf{k}) \\
 &= \sum_{\mathbf{k}} E_0(\mathbf{k}) \{ \alpha_{1\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{1\mathbf{k}} + \alpha_{2\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{2\mathbf{k}} \} + \sum_{\mathbf{k}} \{ x_0^0(\mathbf{k}) - E_0(\mathbf{k}) \} \tag{9.118}
 \end{aligned}$$

ここで

$$\begin{aligned}
 X(\mathbf{k}) &= \begin{pmatrix} x_0^0(\mathbf{k}) & 0 & 0 & y^3(\mathbf{k}) \\ 0 & x_0^0(\mathbf{k}) & -y^3(\mathbf{k}) & 0 \\ 0 & -y^3(\mathbf{k})^* & -x_0^0(\mathbf{k}) & 0 \\ y^3(\mathbf{k})^* & 0 & 0 & -x_0^0(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \\
 A_{\mathbf{k}} &= (a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger, a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger, a_{\mathbf{k}\uparrow}, a_{(-\mathbf{k})\downarrow}) \\
 E(\mathbf{k}) &= \begin{pmatrix} E_0(\mathbf{k}) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_0(\mathbf{k}) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -E_0(\mathbf{k}) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -E_0(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \\
 E_0(\mathbf{k}) &= \sqrt{x_0^0(\mathbf{k})^2 + |y^3(\mathbf{k})|^2} \\
 U(\mathbf{k}) &= \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}} & 0 & 0 & -v_{\mathbf{k}}^* \\ 0 & u_{\mathbf{k}} & v_{\mathbf{k}}^* & 0 \\ 0 & -v_{\mathbf{k}} & u_{\mathbf{k}} & 0 \\ v_{\mathbf{k}} & 0 & 0 & u_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \\
 u_{\mathbf{k}} &= \left[\frac{1}{2} \left(1 + \frac{x_0^0(\mathbf{k})}{E_0(\mathbf{k})} \right) \right]^{\frac{1}{2}} \\
 v_{\mathbf{k}} &= \frac{|y^3(\mathbf{k})|}{y^3(\mathbf{k})} \left[\frac{1}{2} \left(1 - \frac{x_0^0(\mathbf{k})}{E_0(\mathbf{k})} \right) \right]^{\frac{1}{2}} \\
 \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger &= A_{\mathbf{k}}^\dagger U(\mathbf{k}) = (\alpha_{1\mathbf{k}}^\dagger, \alpha_{2\mathbf{k}}^\dagger, \alpha_{1\mathbf{k}}, \alpha_{2\mathbf{k}}) \\
 E(\mathbf{k}) &= U(\mathbf{k})^\dagger X(\mathbf{k}) U(\mathbf{k})
 \end{aligned} \tag{9.119}$$

である. (9.118) より

$$\begin{aligned}
 \langle \alpha_{1\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{1\mathbf{k}} \rangle &= \langle \alpha_{2\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{2\mathbf{k}} \rangle = \{1 + e^{\beta E_0(\mathbf{k})}\}^{-1} \equiv f(\mathbf{k}) \\
 \langle \alpha_{1\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{2\mathbf{k}} \rangle &= \langle \alpha_{2\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{1\mathbf{k}} \rangle = 0
 \end{aligned} \tag{9.120}$$

を得る. $x_0^0(\mathbf{k})$ が $\mathbf{k}$ の偶関数であり, $y^3(\mathbf{k})$ が $\mathbf{k}$ の奇関数であるので, $E_0(\mathbf{k}), f(\mathbf{k}), u_{\mathbf{k}}$ が $\mathbf{k}$ の偶関数であり, $v_{\mathbf{k}}$ は $\mathbf{k}$ の奇関数である. (9.119) より

$$A_{\mathbf{k}}^\dagger = \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger U^\dagger(\mathbf{k}) \tag{9.121}$$

が成り立ち,

$$U^\dagger(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}} & 0 & 0 & v_{\mathbf{k}}^* \\ 0 & u_{\mathbf{k}} & -v_{\mathbf{k}}^* & 0 \\ 0 & v_{\mathbf{k}} & u_{\mathbf{k}} & 0 \\ -v_{\mathbf{k}} & 0 & 0 & u_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \tag{9.122}$$

を考慮すると

$$\begin{aligned}
 a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger &= u_{\mathbf{k}} \alpha_{1\mathbf{k}}^\dagger - v_{\mathbf{k}} \alpha_{2\mathbf{k}}, & a_{\mathbf{k}\uparrow} &= u_{\mathbf{k}} \alpha_{1\mathbf{k}} - v_{\mathbf{k}}^* \alpha_{2\mathbf{k}}^\dagger \\
 a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger &= u_{\mathbf{k}} \alpha_{2\mathbf{k}}^\dagger + v_{\mathbf{k}} \alpha_{1\mathbf{k}}, & a_{(-\mathbf{k})\downarrow} &= u_{\mathbf{k}} \alpha_{2\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}}^* \alpha_{1\mathbf{k}}^\dagger
 \end{aligned} \tag{9.123}$$

を得る. (9.123), (9.120) より

$$\begin{aligned}
 \langle a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle &= \langle a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\downarrow} \rangle = u_{\mathbf{k}}^2 f(\mathbf{k}) + |v_{\mathbf{k}}|^2 (1 - f(\mathbf{k})) \\
 \langle a_{(-\mathbf{k})\downarrow} a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle &= u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* (2f(\mathbf{k}) - 1) \\
 \langle a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger \rangle &= u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} (2f(\mathbf{k}) - 1)
 \end{aligned} \tag{9.124}$$

を得る. $u_{\mathbf{k}}, f(\mathbf{k})$ が $\mathbf{k}$ の偶関数であり, $v_{\mathbf{k}}$ が $\mathbf{k}$ の奇関数であることにより

$$\begin{aligned}
 \langle a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle &= u_{(-\mathbf{k})}^2 f(-\mathbf{k}) + |v_{(-\mathbf{k})}|^2 (1 - f(-\mathbf{k})) = u_{(\mathbf{k})}^2 f(\mathbf{k}) + |v_{(\mathbf{k})}|^2 (1 - f(\mathbf{k})) \\
 &= \langle a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle
 \end{aligned} \tag{9.125}$$

$$\begin{aligned}
 \langle a_{(-\mathbf{k})\uparrow} a_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle &= -\langle a_{\mathbf{k}\downarrow} a_{(-\mathbf{k})\uparrow} \rangle = -u_{(-\mathbf{k})} v_{(-\mathbf{k})}^* (2f(-\mathbf{k}) - 1) = u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* (2f(\mathbf{k}) - 1) \\
 &= \langle a_{(-\mathbf{k})\downarrow} a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle
 \end{aligned} \tag{9.126}$$

を得る. したがって

$$\begin{aligned}
 \rho_0^0(\mathbf{k}) &= \frac{1}{2} \{ \langle a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle + \langle a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle \} = \langle a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle \\
 &= u_{\mathbf{k}}^2 f(\mathbf{k}) + |v_{\mathbf{k}}|^2 (1 - f(\mathbf{k})) \\
 \lambda^3(\mathbf{k}) &= \frac{1}{2} \{ \langle a_{(-\mathbf{k})\downarrow} a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle + \langle a_{(-\mathbf{k})\uparrow} a_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle \} = \langle a_{(-\mathbf{k})\downarrow} a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle \\
 &= u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* (2f(\mathbf{k}) - 1)
 \end{aligned} \tag{9.127}$$

を得る. これより $\rho_0^0(\mathbf{k})$ は $\mathbf{k}$ の偶関数であり, $\lambda^3(\mathbf{k})$ は $\mathbf{k}$ の奇関数であることがわかる. (9.48) より OSP 状態の自由エネルギーは次式で与えられる.

$$\begin{aligned}
 F_{\text{HFB}} &= 2 \sum_{\mathbf{k}} (-2t\gamma(\mathbf{k}) - \mu) \rho_0^0(\mathbf{k}) \\
 &+ \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{i=1}^3 W_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^0(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}') + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{i=4}^5 Z_i(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \lambda^3(\mathbf{k}) \lambda^3(\mathbf{k}') \\
 &+ \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}} \{ f(\mathbf{k}) \log f(\mathbf{k}) + (1 - f(\mathbf{k})) \log (1 - f(\mathbf{k})) \}
 \end{aligned} \tag{9.128}$$

以下 G_1, G_2, G_3, G_4 の場合を個別に考察する.

9.3.2.1 $G_1(\text{OSP}_1)$ 状態

この状態の固定部分群は

$$G_1 = (E + I\tilde{\pi})(E + u_{2x}\tilde{\pi})C_{2xv}A(e_3)TL_0 \tag{9.129}$$

で与えられる. ここで

$$C_{2xv} = \{E, C_{2x}, IC_{2z}, IC_{2y}\} \tag{9.130}$$

である.

命題 9.7. H_m の固定部分群が G_1 であるとき, $\rho_0^0(\mathbf{k})$ は D_{2h} の A_g に属し, $\lambda^3(\mathbf{k})$ は D_{2h} の B_{3u} に属する $\mathbf{k}$ の実関数である⁴.

証明. $C_{2xv} = \{E, C_{2x}, IC_{2z}, IC_{2y}\}$ 不変性と $\rho_0^0(\mathbf{k})$ が偶関数, $\lambda^3(\mathbf{k})$ が奇関数であることを考慮すると (9.53) より

$$\begin{aligned}\rho_0^0(C_{2x}^{-1} \cdot \mathbf{k}) &= \rho_0^0(C_{2z}^{-1} \cdot \mathbf{k}) = \rho_0^0(C_{2y}^{-1} \cdot \mathbf{k}) = \rho_0^0(\mathbf{k}) \\ \lambda^3(C_{2x}^{-1} \cdot \mathbf{k}) &= -\lambda^3(C_{2z}^{-1} \cdot \mathbf{k}) = -\lambda^3(C_{2y}^{-1} \cdot \mathbf{k}) = \lambda^3(\mathbf{k})\end{aligned}\tag{9.131}$$

を得る. また $t \in T$ 不変性より $\lambda^3(\mathbf{k})$ は実数となる. したがって $\rho_0^0(\mathbf{k})$ は D_{2h} の A_g に属し, $\lambda^3(\mathbf{k})$ は D_{2h} の B_{3u} に属する実関数であることがわかる. ■

$\rho_0^0(\mathbf{k}), \lambda^3(\mathbf{k})$ の対称性と命題 8.5(その 2 p.275) より, SCF 条件 (9.44)(p.488) から

$$\begin{aligned}x_0^0(\mathbf{k}) &= -2t\gamma(\mathbf{k}) - \mu + \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{i=1}^3 W_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^0(\mathbf{k}') \\ &= a\gamma(\mathbf{k}) + c\eta(\mathbf{k}) - \tilde{\mu} \\ y^3(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}'} Z_4(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \lambda^3(\mathbf{k}') \\ &= b \sin k_1\end{aligned}\tag{9.132}$$

ここで実数 $a, b, c, \tilde{\mu}$ は

$$\begin{aligned}a &= -2t - \frac{1}{N}(V - 2J) \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}) \\ b &= \frac{2}{N}(V - J) \sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 \lambda^3(\mathbf{k}) \\ c &= -\frac{1}{N}(V - 2J) \sum_{\mathbf{k}} \eta(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k})\end{aligned}\tag{9.133}$$

で与えられる. したがって平均場ハミルトニアンは

$$\begin{aligned}H_m &= H_m^0 + H_m^1 + H_m^2 \\ H_m^0 &= \sum_{\mathbf{k}s} (a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu}) a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s} \\ H_m^1 &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} b \sin k_1 (a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger + a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\uparrow}^\dagger) + H.C \\ H_m^2 &= \sum_{\mathbf{k}s} c\eta(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s}\end{aligned}\tag{9.134}$$

で与えられる. これより準粒子のエネルギー $E_0(\mathbf{k})$ とギャップ関数 $\Delta(\mathbf{k})$ は

$$\begin{aligned}E_0(\mathbf{k}) &= \sqrt{(a\gamma(\mathbf{k}) + c\eta(\mathbf{k}) - \tilde{\mu})^2 + b^2 \sin^2 k_1} \\ \Delta(\mathbf{k}) &= y^3(\mathbf{k}) = b \sin k_1\end{aligned}\tag{9.135}$$

⁴ D_{2h} の既約表現の指標は表 8.1(その 2 p.281) を参照

で与えられる。が成り立ち、

$$y^3(\mathbf{k}) = \sin k_1 = 0 \quad (9.136)$$

が成り立つ $\mathbf{k} = (0, k_2)$ でギャップ関数 $\Delta(\mathbf{k}) = y^3(\mathbf{k})$ はゼロになる。 H_m^2 は $\check{G}^{(\Gamma E_u, 1, 2)}$ に属する主要 (dominant) 成分 H_m^1 が導入されることによって誘導される副次的 (subdominant) 成分である。一般に点群の多次元表現から導かれる状態にはこのような副次的な成分が誘導される場合がある。

9.3.2.2 $G_2(\text{OSP}_2)$ 状態

この状態の固定部分群は

$$G_2 = (E + I\tilde{\pi})(E + u_{2x}\tilde{\pi})C_{2av}A(e_3)TL_0 \quad (9.137)$$

で与えられる。ここで

$$C_{2av} = \{E, C_{2a}, IC_{2z}, IC_{2b}\} \quad (9.138)$$

である。 H_m が G_2 に不変であるとき、 $t, C_{2a}, IC_{2z}, I\tilde{\pi} \in G_2$ であるので G_1 の場合の命題 9.7 の場合と同様な手法で $\rho_0^0(\mathbf{k})$ が D_{2ah} の A_g 表現に、 $\lambda^3(\mathbf{k})$ が D_{2ah} の B_{3u} 表現に属する $\mathbf{k}$ の実関数でことが示される⁵。

$$\begin{aligned} Z_4(\mathbf{k}, \mathbf{k}') + Z_5(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= \frac{2}{N}(V - J)\{\sin k_1 \sin k'_1 + \sin k_1 \sin k'_1\} \\ &= \frac{1}{N}(V - J)(\sin k_1 + \sin k_2)(\sin k'_1 + \sin k'_2) \\ &\quad + \frac{1}{N}(V - J)(\sin k_1 - \sin k_2)(\sin k'_1 - \sin k'_2) \end{aligned} \quad (9.139)$$

で $\eta(\mathbf{k}), (\sin k_1 + \sin k_2), (\sin k_1 - \sin k_2)$ が D_{2ah} の B_{1g}, B_{3u}, B_{2u} に属することを考慮すると

$$\begin{aligned} H_m &= H_m^0 + H_m^1 \\ H_m^0 &= \sum_{\mathbf{k}s} (a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu}) a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s} \\ H_m^1 &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} b(\sin k_1 + \sin k_2) \{a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger + a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\uparrow}^\dagger\} + H.C \end{aligned} \quad (9.140)$$

を得る。ここで

$$\begin{aligned} a &= -2t - \frac{1}{N}(V - 2J) \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}) \\ b &= \frac{1}{N}(V - J) \sum_{\mathbf{k}} (\sin k_1 + \sin k_2) \lambda^3(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (9.141)$$

である。これより準粒子のエネルギーとギャップ関数 $\Delta(\mathbf{k})$ は

$$\begin{aligned} E_0(\mathbf{k}) &= \sqrt{(a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu})^2 + b^2(\sin k_1 + \sin k_2)^2} \\ \Delta(\mathbf{k}) &= b(\sin k_1 + \sin k_2) \end{aligned} \quad (9.142)$$

で与えられる。

⁵ D_{2ah} の既約表現の指標は表 8.2(その2 p.295) を参照。

9.3.2.3 $G_3(\text{OSP}_3)$ 状態

この状態の部分群は

$$G_3 = (E + I\tilde{\pi})(E + tC_{2x})(E + u_{2x}\tilde{\pi})C_4\left(\widetilde{\left(\frac{\pi}{2}\right)}\right)A(e_3)L_0 \quad (9.143)$$

で与えられる。ここで

$$C_4\left(\widetilde{\left(\frac{\pi}{2}\right)}\right) = \{E, C_{4z}^+\left(\widetilde{\frac{\pi}{2}}\right), C_{2z}\tilde{\pi}, C_{4z}^-\left(-\widetilde{\frac{\pi}{2}}\right)\} \quad (9.144)$$

である。

命題 9.8. H_m の固定部分群が G_3 であるとき, $\rho_0^0(\mathbf{k})$ は D_{4h} の A_{1g} に属する $\mathbf{k}$ の実関数であり, $\lambda^3(\mathbf{k})$ は次の関係を満たす。

$$\begin{aligned} \lambda^3(C_{4z}^+ \cdot \mathbf{k}) &= e^{i\frac{\pi}{2}} \lambda^3(\mathbf{k}) \\ \lambda^3(C_{2x} \cdot \mathbf{k}) &= \lambda^3(\mathbf{k})^* \end{aligned} \quad (9.145)$$

証明. $C_{4z}^+\left(\widetilde{\frac{\pi}{2}}\right)$ 不変性と (9.53) より

$$\begin{aligned} C_{4z}^+\left(\widetilde{\frac{\pi}{2}}\right) \cdot \rho_0^0(\mathbf{k}) &= C_{4z}^+ \cdot \rho_0^0(\mathbf{k}) = \rho_0^0(C_{4z}^- \cdot \mathbf{k}) = \rho_0^0(\mathbf{k}) \\ C_{4z}^+\left(\widetilde{\frac{\pi}{2}}\right) \cdot \lambda^3(\mathbf{k}) &= e^{i\frac{\pi}{2}} C_{4z}^+ \cdot \lambda^3(\mathbf{k}) = e^{i\frac{\pi}{2}} \lambda^3(C_{4z}^- \cdot \mathbf{k}) = \lambda^3(\mathbf{k}) \end{aligned}$$

を得る。 $C_{4z}^{-1} \cdot \mathbf{k}$ を改めて $\mathbf{k}$ と置けば

$$\begin{aligned} \rho_0^0(C_{4z}^+ \cdot \mathbf{k}) &= \rho_0^0(\mathbf{k}) \\ \lambda^3(C_{4z}^+ \cdot \mathbf{k}) &= e^{i\frac{\pi}{2}} \lambda^3(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (9.146)$$

を得る。命題 9.6 と $tC_{2x}, I\tilde{\pi}$ 不変性より

$$\begin{aligned} tC_{2x} \cdot \rho_0^0(\mathbf{k}) &= t \cdot \rho_0^0(C_{2x}^{-1} \cdot \mathbf{k}) = \rho_0^0(-C_{2x}^{-1} \cdot \mathbf{k}) = \rho_0^0(C_{2x}^{-1} \cdot \mathbf{k}) = \rho_0^0(\mathbf{k}) \\ tC_{2x} \cdot \lambda^3(\mathbf{k}) &= t \cdot \lambda^3(C_{2x}^{-1} \cdot \mathbf{k}) = (\lambda^3(C_{2x}^{-1} \cdot \mathbf{k}))^* = \lambda^3(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (9.147)$$

を得る。 $C_{-1} \cdot \mathbf{k}$ を改めて $\mathbf{k}$ とすると

$$\begin{aligned} \rho_0^0(C_{2x} \cdot \mathbf{k}) &= \rho_0^0(\mathbf{k}) \\ \lambda^3(C_{2x} \cdot \mathbf{k}) &= (\lambda^3(\mathbf{k}))^* \end{aligned} \quad (9.148)$$

(9.146), (9.148) より $\rho_0^0(\mathbf{k})$ は D_{4h} の A_{1g} に属する実関数であり, $\lambda^3(\mathbf{k})$ は (9.145) を満たすことがわかる。 ■

$\rho_0^0(\mathbf{k})$ の D_{4h} 対称性と SCF 条件から

$$\begin{aligned} x_0^0(\mathbf{k}) &= -2t\gamma(\mathbf{k}) - \mu + \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{i=1}^2 W_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^0(\mathbf{k}') \\ &= a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu} \end{aligned} \quad (9.149)$$

を得る. ここで

$$\begin{aligned} a &= -2t - \frac{1}{N}(V - 2J) \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}) \\ \tilde{\mu} &= \mu - \frac{1}{N}(U + 8V - 4J) \sum_{\mathbf{k}} \rho_0^0(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (9.150)$$

である. $\lambda^3(\mathbf{k})$ は $\mathbf{k}$ の奇関数であることを使うと SCF 条件 (9.44)(p.488) より

$$\begin{aligned} y^3(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{i=4}^5 Z_i(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \lambda^3(\mathbf{k}') \\ &= \frac{2}{N}(V - J) \left\{ \sin k_1 \sum_{\mathbf{k}'} \sin k'_1 \lambda^3(\mathbf{k}') + \sin k_2 \sum_{\mathbf{k}'} \sin k'_2 \lambda^3(\mathbf{k}') \right\} \end{aligned} \quad (9.151)$$

を得る. これよりここで (9.145) の $\lambda^3(C_{4z}^+ \cdot \mathbf{k}) = e^{i\frac{\pi}{2}} \lambda^3(\mathbf{k})$ を使うと

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 \lambda^3(\mathbf{k}) &= \sin k_1 e^{-i\frac{\pi}{2}} \lambda^3(C_{4z}^+ \cdot \mathbf{k}) \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \sin(C_{4z}^- \cdot \mathbf{k})_1 e^{-i\frac{\pi}{2}} \lambda^3(\mathbf{k}) \\ &= e^{-i\frac{\pi}{2}} \sum_{\mathbf{k}} \sin k_2 \lambda^3(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (9.152)$$

を得る. ここで第2の等号で $C_{4z}^+ \cdot \mathbf{k}$ を改めて $\mathbf{k}$ とおき, $C_{4z}^- \cdot (k_1, k_2) = (k_2, -k_1)$ を使った. したがって

$$\sum_{\mathbf{k}} \sin k_2 \lambda^3(\mathbf{k}) = e^{i\frac{\pi}{2}} \sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 \lambda^3(\mathbf{k}) \quad (9.153)$$

を得る. また (9.145) の $\lambda^3(C_{2x} \cdot \mathbf{k}) = \lambda^3(\mathbf{k})^*$ を使うと

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 \lambda^3(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 \lambda^3(C_{2x} \cdot \mathbf{k})^* \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \sin(C_{2x} \cdot \mathbf{k})_1 \lambda^3(\mathbf{k})^* \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 \lambda^3(\mathbf{k})^* \end{aligned} \quad (9.154)$$

となり $\sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 \lambda^3(\mathbf{k})$ は実数となる. (9.151) と (9.153) より

$$y^3(\mathbf{k}) = b(\sin k_1 + i \sin k_2) \quad (9.155)$$

で与えられる. ここで実数 b は

$$b = \frac{2}{N}(V - J) \sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 \lambda^3(\mathbf{k}) \quad (9.156)$$

で与えられる. 以上まとめると OSP_3 状態の平均場ハミルトニアン H_m は

$$\begin{aligned} H_m &= H_m^0 + H_m^1 \\ H_m^0 &= \sum_{ks} (a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu}) a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s} \\ H_m^1 &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} b(\sin k_1 + i \sin k_2) (a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger + a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\uparrow}^\dagger) + H.C \end{aligned} \quad (9.157)$$

で与えられる. ここで実数 a, b は (9.150), (9.156) で与えられる. これより準粒子のエネルギー $E_0(\mathbf{k})$ とギャップ関数 $\Delta(\mathbf{k})$ は

$$\begin{aligned} E_0(\mathbf{k}) &= \sqrt{(a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu})^2 + b^2(\sin^2 k_1 + \sin^2 k_2)} \\ \Delta(\mathbf{k}) &= b(\sin k_1 + i \sin k_2) \end{aligned} \quad (9.158)$$

で与えられる.

9.3.2.4 $G_4(OSP_4)$ 状態

この状態の部分群は

$$G_4 = (E + I\tilde{\pi})(E + tC_{2a})(E + u_{2x}\tilde{\pi})C_4\left(\left(\frac{\pi}{2}\right)\right)A(e_3)L_0 \quad (9.159)$$

で与えられる. 第 9.3.2.3 節との違いは $(E + tC_{2x})$ が $(E + tC_{2a})$ に変わっただけである. 第 9.3.2.3 節の場合と同様な方法で $\rho_0^0(\mathbf{k})$ は D_{4h} の A_{1g} に属する $\mathbf{k}$ の実関数であり, $\lambda^3(\mathbf{k})$ は

$$\begin{aligned} \lambda^3(C_{4z}^+ \cdot \mathbf{k}) &= e^{i\frac{\pi}{2}} \lambda^3(\mathbf{k}) \\ \lambda^3(C_{2a} \cdot \mathbf{k}) &= \lambda^3(\mathbf{k})^* \end{aligned} \quad (9.160)$$

を満たすことを示すことができる. これより (9.153) および

$$\sum_{\mathbf{k}} \sin k_2 \lambda^3(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 (\lambda^3(\mathbf{k}))^* \quad (9.161)$$

を得る. X, Y を実数として

$$\sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 \lambda^3(\mathbf{k}) = X + iY \quad (9.162)$$

と置けば (9.153), (9.161) より

$$i(X + iY) = X - iY \quad (9.163)$$

となり $Y = -X$ が得られ

$$\sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 \lambda^3(\mathbf{k}) = X(1 - i), \quad \sum_{\mathbf{k}} \sin k_2 \lambda^3(\mathbf{k}) = X(1 + i) \quad (9.164)$$

が得られる。これより実数 X は

$$X = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} (\sin k_1 + \sin k_2) \lambda^3(\mathbf{k}) \quad (9.165)$$

で与えられる。SCF 条件 (9.44) より

$$\begin{aligned} y^3(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}'} \{Z_4(\mathbf{k}, \mathbf{k}') + Z_5(\mathbf{k}, \mathbf{k}')\} \lambda^3(\mathbf{k}') \\ &= \frac{2}{N} (V - J) \{ \sin k_1 \sum_{\mathbf{k}'} \sin k'_1 \lambda^3(\mathbf{k}') + \sin k_2 \sum_{\mathbf{k}'} \sin k'_2 \lambda^3(\mathbf{k}') \} \\ &= \frac{2}{N} (V - J) \{ \sin k_1 (X - iX) + \sin k_2 (X + iX) \} \\ &= \frac{2X}{N} (V - J) \{ (\sin k_1 + \sin k_2) + i(\sin k_2 - \sin k_1) \} \\ &= b \{ (\sin k_1 + \sin k_2) + i(\sin k_2 - \sin k_1) \} \end{aligned} \quad (9.166)$$

を得る。ここで実数 b は

$$b = \frac{2X}{N} (V - J) = \frac{1}{N} (V - J) \sum_{\mathbf{k}} (\sin k_1 + \sin k_2) \lambda^3(\mathbf{k}) \quad (9.167)$$

で与えられる。これより OPS₄ 状態の平均場ハミルトニアンは

$$\begin{aligned} H_m &= H_m^0 + H_m^1 \\ H_m^0 &= \sum_{\mathbf{k}s} (a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu}) a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s} \\ H_m^1 &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} b \{ (\sin k_1 + \sin k_2) + i(\sin k_2 - \sin k_1) \} \{ a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger + a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\uparrow}^\dagger \} + H.C \end{aligned} \quad (9.168)$$

となる。ここで実数 a, b は

$$\begin{aligned} a &= -2t - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}) \\ b &= \frac{1}{N} (V - J) \sum_{\mathbf{k}} (\sin k_1 + \sin k_2) \lambda^3(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (9.169)$$

で定まる。準粒子のエネルギー $E_0(\mathbf{k})$ とギャップ関数 $\Delta(\mathbf{k})$ は

$$\begin{aligned} E_0(\mathbf{k}) &= \sqrt{(a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu})^2 + 2b^2 (\sin^2 k_1 + \sin^2 k_2)} \\ \Delta(\mathbf{k}) &= b \{ (\sin k_1 + \sin k_2) + i(\sin k_2 - \sin k_1) \} \end{aligned} \quad (9.170)$$

となる。

9.3.3 SSP 状態および ESP 状態の H_m の対角化

第 9.3.3 節では $G_5 \sim G_{13}$ の状態の H_m の対角化について述べる。まず $G_5 \sim G_{13}$ はすべて対称操作 $u_{2z}\pi$ を含んでいることに注目する。

$G_5 \sim G_8$ は $\tilde{A}(e_3)$ を含んでいる. $\tilde{A}(e_3) = \{u(e_3, \theta)\tilde{\theta} \mid 0 \leq \theta \leq 2\pi\}$ であるので, $G_5 \sim G_8$ は $\theta = \pi$ の場合の $u_{2z}\tilde{\pi}$ を含んでいる.

$G_9 \sim G_{13}$ はすべて $I\tilde{\pi}, IC_{2z}$ および $C_{2z}u_{2z}$ を含んでいるので

$$(I\tilde{\pi})(IC_{2z})(C_{2z}u_{2z}) = u_{2z}\tilde{\pi} \quad (9.171)$$

を含む. 以上より $G_5 \sim G_{12}$ は $u_{2z}\tilde{\pi}$ を含むことがわかった.

命題 9.9. H_m の固定部分群が $u_{2z}\tilde{\pi}$ を含むとき

$$\begin{aligned} \rho_0^1(\mathbf{k}) &= \rho_0^2(\mathbf{k}) = 0 \\ \lambda^0(\mathbf{k}) &= \lambda^3(\mathbf{k}) = 0 \end{aligned} \quad (9.172)$$

である.

証明. $u_{2z}\tilde{\pi}$ と (9.53), (9.59) より

$$\begin{aligned} u_{2z}\tilde{\pi}\rho_0^0(\mathbf{k}) &= \rho_0^0(\mathbf{k}) = \rho_0^0(\mathbf{k}), & u_{2z}\tilde{\pi}\lambda^0(\mathbf{k}) &= -\lambda^0(\mathbf{k}) = \lambda^0(\mathbf{k}) \\ u_{2z}\tilde{\pi}\rho_0^1(\mathbf{k}) &= -\rho_0^1(\mathbf{k}) = \rho_0^1(\mathbf{k}), & u_{2z}\tilde{\pi}\lambda^1(\mathbf{k}) &= \lambda^1(\mathbf{k}) = \lambda^1(\mathbf{k}) \\ u_{2z}\tilde{\pi}\rho_0^2(\mathbf{k}) &= -\rho_0^2(\mathbf{k}) = \rho_0^2(\mathbf{k}), & u_{2z}\tilde{\pi}\lambda^2(\mathbf{k}) &= \lambda^2(\mathbf{k}) = \lambda^2(\mathbf{k}) \\ u_{2z}\tilde{\pi}\rho_0^3(\mathbf{k}) &= \rho_0^3(\mathbf{k}) = \rho_0^3(\mathbf{k}), & u_{2z}\tilde{\pi}\lambda^3(\mathbf{k}) &= -\lambda^3(\mathbf{k}) = \lambda^3(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (9.173)$$

が成り立つ. これより (9.172) を得る. ■

ゼロでないのは $\rho_0^0(\mathbf{k}), \rho_0^3, \lambda^1(\mathbf{k}), \lambda^2(\mathbf{k})$ だけであるので, SCF 条件 (9.44)(p.488) より $x_0^0(\mathbf{k}), x_0^3(\mathbf{k}), y^1(\mathbf{k}), y^2(\mathbf{k})$ だけがゼロでない. したがって平均場ハミルトニアン H_m は

$$\begin{aligned} H_m &= \sum_{\mathbf{k}} x_0^0(\mathbf{k}) (a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} + a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow}) \\ &\quad + \sum_{\mathbf{k}} x_0^3(\mathbf{k}) (a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} - a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow}) \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} y^1(\mathbf{k}) (-a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\uparrow}^\dagger + a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger) + H.C \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} y^2(\mathbf{k}) (ia_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\uparrow}^\dagger + ia_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger) + H.C \\ &= H_m^\uparrow + H_m^\downarrow \end{aligned} \quad (9.174)$$

ここで

$$\begin{aligned} H_m^\uparrow &= \sum_{\mathbf{k}} x_0^0(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} + \left[\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} y^1(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\uparrow}^\dagger \right] + H.C \\ H_m^\downarrow &= \sum_{\mathbf{k}} x_0^3(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow} + \left[\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} y^2(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger \right] + H.C \end{aligned} \quad (9.175)$$

であり,

$$\begin{aligned}
 x_0^\uparrow(\mathbf{k}) &= x_0^0(\mathbf{k}) + x_0^3(\mathbf{k}) \\
 x_0^\downarrow(\mathbf{k}) &= x_0^0(\mathbf{k}) - x_0^3(\mathbf{k}) \\
 y^\uparrow(\mathbf{k}) &= -y^1(\mathbf{k}) + iy^2(\mathbf{k}) \\
 y^\downarrow(\mathbf{k}) &= y^1(\mathbf{k}) + iy^2(\mathbf{k})
 \end{aligned} \tag{9.176}$$

である. H_m が $I\pi$ 不変であることより, $x_0^\uparrow(\mathbf{k}), x_0^\downarrow(\mathbf{k})$ が $\mathbf{k}$ の偶関数であることがわかる. これを考慮すると $H_m^s (s=\uparrow, \downarrow)$ は次の様に変形できる.

$$\begin{aligned}
 H_m^s &= \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k}} x_0^s(\mathbf{k}) \{ a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s} + a_{(-\mathbf{k})s}^\dagger a_{(-\mathbf{k})s} + (1 - a_{\mathbf{k}s} a_{\mathbf{k}s}^\dagger) + (1 - a_{(-\mathbf{k})s} a_{(-\mathbf{k})s}^\dagger) \} \\
 &\quad + \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k}} y^s(\mathbf{k}) (a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{(-\mathbf{k})s}^\dagger - a_{(-\mathbf{k})s}^\dagger a_{\mathbf{k}s}^\dagger) \\
 &\quad + \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k}} y^s(\mathbf{k})^* (a_{(-\mathbf{k})s} a_{\mathbf{k}s} - a_{\mathbf{k}s} a_{(-\mathbf{k})s}) \\
 &= \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k}} (a_{\mathbf{k}s}^\dagger, a_{(-\mathbf{k})s}^\dagger, a_{\mathbf{k}s}, a_{(-\mathbf{k})s}) \begin{pmatrix} x_0^s(\mathbf{k}) & 0 & 0 & y^s(\mathbf{k}) \\ 0 & x^s(\mathbf{k}) & -y^s(\mathbf{k}) & 0 \\ 0 & -y^s(\mathbf{k})^* & -x_0^s(\mathbf{k}) & 0 \\ y^s(\mathbf{k})^* & 0 & 0 & -x_0^s(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}s} \\ a_{(-\mathbf{k})s} \\ a_{\mathbf{k}s}^\dagger \\ a_{(-\mathbf{k})s}^\dagger \end{pmatrix} \\
 &\quad + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} x_0^s(\mathbf{k}) \\
 &= \sum_{\mathbf{k}} A_{\mathbf{k}s}^\dagger X^s(\mathbf{k}) A_{\mathbf{k}s} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} x_0^s(\mathbf{k})
 \end{aligned} \tag{9.177}$$

ここで

$$\begin{aligned}
 A_{\mathbf{k}s}^\dagger &= (a_{\mathbf{k}s}^\dagger, a_{(-\mathbf{k})s}^\dagger, a_{\mathbf{k}s}, a_{(-\mathbf{k})s}) \\
 X^s(\mathbf{k}) &= \begin{pmatrix} x_0^s(\mathbf{k}) & 0 & 0 & y^s(\mathbf{k}) \\ 0 & x^s(\mathbf{k}) & -y^s(\mathbf{k}) & 0 \\ 0 & -y^s(\mathbf{k})^* & -x_0^s(\mathbf{k}) & 0 \\ y^s(\mathbf{k})^* & 0 & 0 & -x_0^s(\mathbf{k}) \end{pmatrix}
 \end{aligned} \tag{9.178}$$

である. $X^s(\mathbf{k})$ は (9.68)(p.495) の $X(\mathbf{k})$ の $x_0^0(\mathbf{k}), y^0(\mathbf{k})$ をそれぞれ $x_0^s(\mathbf{k}), y^s(\mathbf{k})$ で置き換えた形をしている. したがって (9.177) の H_m は (9.67), (9.68) と同様に対角化できて

$$\begin{aligned}
 H_m^s &= \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k}} A_{\mathbf{k}s}^\dagger U^s(\mathbf{k}) U^s(\mathbf{k})^\dagger X^s(\mathbf{k}) U^s(\mathbf{k}) U^s(\mathbf{k})^\dagger A_{\mathbf{k}s} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} x_0^s(\mathbf{k}) \\
 &= \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}s}^\dagger E^s(\mathbf{k}) \alpha_{\mathbf{k}s} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} x_0^s(\mathbf{k}) \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} E_0^s(\mathbf{k}) \{ \alpha_{1\mathbf{k}s}^\dagger \alpha_{1\mathbf{k}s} + \alpha_{2\mathbf{k}s}^\dagger \alpha_{2\mathbf{k}s} \} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \{ x_0^s(\mathbf{k}) - E_0^s(\mathbf{k}) \}
 \end{aligned} \tag{9.179}$$

ここで

$$\begin{aligned}
 U^s(\mathbf{k}) &= \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}}^s & 0 & 0 & -(v_{\mathbf{k}}^s)^* \\ 0 & u_{\mathbf{k}}^s & (v_{\mathbf{k}}^s)^* & 0 \\ 0 & -v_{\mathbf{k}}^s & u_{\mathbf{k}}^s & 0 \\ v_{\mathbf{k}}^s & 0 & 0 & u_{\mathbf{k}}^s \end{pmatrix} \\
 E^s(\mathbf{k}) &= \begin{pmatrix} E_0^s(\mathbf{k}) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_0^s(\mathbf{k}) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -E^s(\mathbf{k}) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -E_0^s(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \\
 E_0^s(\mathbf{k}) &= \sqrt{x_0^s(\mathbf{k})^2 + |y^s(\mathbf{k})|^2} \\
 u_{\mathbf{k}}^s &= \left[\frac{1}{2} \left(1 + \frac{x_0^s(\mathbf{k})}{E_0^s(\mathbf{k})} \right) \right]^{\frac{1}{2}} \\
 v_{\mathbf{k}}^s &= \frac{|y^s(\mathbf{k})|}{y^s(\mathbf{k})} \left[\frac{1}{2} \left(1 - \frac{x_0^s(\mathbf{k})}{E_0^s(\mathbf{k})} \right) \right]^{\frac{1}{2}} \\
 \alpha_{\mathbf{k}s}^\dagger &= A_{\mathbf{k}s}^\dagger U^s(\mathbf{k}) = (\alpha_{1\mathbf{k}s}^\dagger, \alpha_{2\mathbf{k}s}^\dagger, \alpha_{1\mathbf{k}s}, \alpha_{2\mathbf{k}s})
 \end{aligned} \tag{9.180}$$

である。これより

$$\begin{aligned}
 \alpha_{1\mathbf{k}s}^\dagger &= u_{\mathbf{k}}^s a_{\mathbf{k}s}^\dagger + v_{\mathbf{k}}^s a_{(-\mathbf{k})s} \\
 \alpha_{2\mathbf{k}s}^\dagger &= u_{\mathbf{k}}^s a_{(-\mathbf{k})s}^\dagger - v_{\mathbf{k}}^s a_{\mathbf{k}s}
 \end{aligned} \tag{9.181}$$

$x_0^s(\mathbf{k})$ は $\mathbf{k}$ の偶関数, $y^s(\mathbf{k})$ は $\mathbf{k}$ の奇関数であることを考慮すると (9.180) より

$$\begin{aligned}
 E_0^s(\mathbf{k}) &= E_0^s(-\mathbf{k}) \\
 u_{\mathbf{k}}^s &= u_{(-\mathbf{k})}^s \\
 v_{\mathbf{k}}^s &= -v_{(-\mathbf{k})}^s
 \end{aligned} \tag{9.182}$$

が成り立つ。(9.182) より

$$\begin{aligned}
 \alpha_{2(-\mathbf{k})s}^\dagger &= u_{(-\mathbf{k})}^s a_{\mathbf{k}s}^\dagger - v_{(-\mathbf{k})}^s a_{(-\mathbf{k})s} \\
 &= u_{\mathbf{k}}^s a_{\mathbf{k}s}^\dagger + v_{\mathbf{k}}^s a_{(-\mathbf{k})s} \\
 &= \alpha_{1\mathbf{k}s}^\dagger
 \end{aligned} \tag{9.183}$$

を得る。これより (9.179) の H_m^s は

$$\begin{aligned}
 H_m^s &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} E_0^0(\mathbf{k}) (\alpha_{1\mathbf{k}s}^\dagger \alpha_{1\mathbf{k}s} + \alpha_{2\mathbf{k}s}^\dagger \alpha_{2\mathbf{k}s}) + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \{x_0^s(\mathbf{k}) - E_0^s(\mathbf{k})\} \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} E_0^0(\mathbf{k}) (\alpha_{1\mathbf{k}s}^\dagger \alpha_{1\mathbf{k}s} + \alpha_{2(-\mathbf{k})s}^\dagger \alpha_{2(-\mathbf{k})s}) + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \{x_0^s(\mathbf{k}) - E_0^s(\mathbf{k})\} \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} E_0^0(\mathbf{k}) (\alpha_{1\mathbf{k}s}^\dagger \alpha_{1\mathbf{k}s} + \alpha_{1\mathbf{k}s}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}s}) + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \{x_0^s(\mathbf{k}) - E_0^s(\mathbf{k})\} \\
 &= \sum_{\mathbf{k}} E_0^0(\mathbf{k}) \alpha_{1\mathbf{k}s}^\dagger \alpha_{1\mathbf{k}s} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \{x_0^s(\mathbf{k}) - E_0^s(\mathbf{k})\}
 \end{aligned} \tag{9.184}$$

したがって

$$\langle \alpha_{1ks}^\dagger \alpha_{1ks} \rangle = \langle \alpha_{2ks}^\dagger \alpha_{2ks} \rangle = \frac{1}{1 + e^{\beta E_0^s(\mathbf{k})}} \equiv f^s(\mathbf{k}) \quad (9.185)$$

を得る. したがって

$$\begin{aligned} \langle a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s} \rangle &= \langle a_{(-\mathbf{k})s}^\dagger a_{(-\mathbf{k})s} \rangle = (u_{\mathbf{k}}^s)^2 f^s(\mathbf{k}) + |v_{\mathbf{k}}^s|^2 (1 - f^s(\mathbf{k})) \\ \langle a_{(-\mathbf{k})s} a_{\mathbf{k}s} \rangle &= u_{\mathbf{k}}^s (v_{\mathbf{k}}^s)^* (2f^s(\mathbf{k}) - 1) \end{aligned} \quad (9.186)$$

を得る. これより

$$\begin{aligned} \rho_0^0(\mathbf{k}) &= \frac{1}{2} \{ \langle a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} + a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle \\ \rho_0^3(\mathbf{k}) &= \frac{1}{2} \{ \langle a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} - a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle \\ \lambda^1(\mathbf{k}) &= \frac{1}{2} \{ -\langle a_{(-\mathbf{k})\uparrow} a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle + \langle a_{(-\mathbf{k})\downarrow} a_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle \} \\ \lambda^2(\mathbf{k}) &= \frac{1}{2} \{ -i \langle a_{(-\mathbf{k})\uparrow} a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle - i \langle a_{(-\mathbf{k})\downarrow} a_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle \} \end{aligned} \quad (9.187)$$

が得られ, 自由エネルギーは (9.48)(p.489) より次式で与えられる.

$$\begin{aligned} F_{\text{HFB}} &= 2 \sum_{\mathbf{k}} (-2t\gamma(\mathbf{k}) - \mu) \rho_0^0(\mathbf{k}) \\ &+ \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{i=1}^3 W_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^0(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}') + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{i=1}^3 Y_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^3(\mathbf{k}) \rho_0^3(\mathbf{k}') \\ &+ \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{i=4}^5 \sum_{\mu=1}^2 Z_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \lambda^\mu(\mathbf{k}) \lambda^\mu(\mathbf{k}') \\ &+ \frac{1}{\beta} \sum_s \sum_{\mathbf{k}} \{ f^s(\mathbf{k}) \log f^s(\mathbf{k}) + (1 - f^s(\mathbf{k})) \log (1 - f^s(\mathbf{k})) \} \end{aligned}$$

9.3.4 SSP 状態

第 9.3.4 節では $G_5 \sim G_8$ の状態を考察する. これらの状態の固定部分群は $\tilde{A}(e_3)$ を含む. この場合次の命題が成立する.

命題 9.10. H_m が $\tilde{A}(e_3)$ に不変なとき次式が成り立つ.

$$\begin{aligned} \rho_0^1(\mathbf{k}) &= \rho_0^2(\mathbf{k}) = \lambda^0(\mathbf{k}) = \lambda^3(\mathbf{k}) = 0 \\ \lambda^2(\mathbf{k}) &= i\lambda^1(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (9.188)$$

したがって

$$\begin{aligned} \langle a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle &= \langle a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle = 0 \\ \langle a_{(-\mathbf{k})\downarrow} a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle &= \langle a_{(-\mathbf{k})\uparrow} a_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle = \langle a_{(-\mathbf{k})\downarrow} a_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle = 0 \end{aligned} \quad (9.189)$$

が成り立つ. したがって $\uparrow$ スピンをもった電子のペアリングのみ存在する状態である.

証明. $u_{4z}^+(\frac{\pi}{2}) \in \widetilde{A}(e_3)$ 不変性を考える. $(u_{4z}^+)^{-1}$ に対応する 3 次元回転行列は

$$R((u_{4z}^+)^{-1}) = R(e_3, -\frac{\pi}{2}) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (9.190)$$

である. $u_{4z}^+(\frac{\pi}{2})$ 不変性と (9.51), (9.53) より

$$\begin{aligned} u_{4z}^+(\frac{\pi}{2}) \cdot \rho_0^1(\mathbf{k}) &= -\rho_0^2(\mathbf{k}) = \rho_0^1(\mathbf{k}) \\ u_{4z}^+(\frac{\pi}{2}) \cdot \rho_0^2(\mathbf{k}) &= \rho_0^1(\mathbf{k}) = \rho_0^2(\mathbf{k}) \\ u_{4z}^+(\frac{\pi}{2}) \cdot \lambda^0(\mathbf{k}) &= i\lambda^0(\mathbf{k}) = \lambda^0(\mathbf{k}) \\ u_{4z}^+(\frac{\pi}{2}) \cdot \lambda^3(\mathbf{k}) &= i\lambda^3(\mathbf{k}) = \lambda^3(\mathbf{k}) \\ u_{4z}^+(\frac{\pi}{2}) \cdot \lambda^2(\mathbf{k}) &= i\lambda^1(\mathbf{k}) = \lambda^2(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (9.191)$$

これより (9.188) を得る. $\lambda^2(\mathbf{k}) = i\lambda^1(\mathbf{k})$ を (9.25) の定義にもどって書くと

$$\lambda^2(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} [-i\langle a_{(-\mathbf{k})\uparrow} a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle - i\langle a_{(-\mathbf{k})\downarrow} a_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle] = i\lambda^1(\mathbf{k}) = i\frac{1}{2} [-\langle a_{(-\mathbf{k})\uparrow} a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle + \langle a_{(-\mathbf{k})\downarrow} a_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle]$$

が得られ $\langle a_{(-\mathbf{k})\downarrow} a_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle = 0$ を得る. (9.189) の他の式も同様にして (9.188) を使って示される. ■

したがって $\langle a_{(-\mathbf{k})s} a_{\mathbf{k}s'} \rangle$ でゼロでないのは $\langle a_{(-\mathbf{k})\uparrow} a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle$ だけである. $\lambda^\mu(\mathbf{k})$ は次のようになる.

$$\begin{aligned} \lambda^1(\mathbf{k}) &= -\frac{1}{2} \langle a_{(-\mathbf{k})\uparrow} a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle \\ \lambda^2(\mathbf{k}) &= i\lambda^1(\mathbf{k}) = -i\frac{1}{2} \langle a_{(-\mathbf{k})\uparrow} a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle = \\ \lambda^3(\mathbf{k}) &= 0 \end{aligned} \quad (9.192)$$

SCF 条件 (9.44)(p.488) より

$$\begin{aligned} y^1(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{i=4}^5 Z_i(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \lambda^1(\mathbf{k}') \\ y^2(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{i=4}^5 Z_i(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \lambda^2(\mathbf{k}') = iy^1(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (9.193)$$

を得る. これより (9.176) で定義した $y^\uparrow(\mathbf{k}), y^\downarrow(\mathbf{k})$ は

$$\begin{aligned} y^\uparrow(\mathbf{k}) &= -y^1(\mathbf{k}) + iy^2(\mathbf{k}) = -y^1(\mathbf{k}) + i(iy^1(\mathbf{k})) = -2y^1(\mathbf{k}) \\ y^\downarrow(\mathbf{k}) &= y^1(\mathbf{k}) + iy^2(\mathbf{k}) = 0 \end{aligned} \quad (9.194)$$

となる. (9.192), (9.193), (9.194) より

$$y^\uparrow(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{i=4}^5 Z_i(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \langle a_{(-\mathbf{k})\uparrow} a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle \quad (9.195)$$

を得る.

9.3.4.1 $G_5(\text{SSP}_1)$ 状態

この状態の固定部分群は

$$G_5 = (E + tu_{2x})(E + I\tilde{\pi})(E + C_{2z}u_{2z})C_{2xv}\tilde{A}(e_3)L_0 \quad (9.196)$$

で与えられる.

命題 9.11. H_m の固定部分群が G_5 であるとき, $\rho_0^0(\mathbf{k}), \rho_0^3(\mathbf{k})$ は D_{2h} の A_g に属し, $\lambda^1(\mathbf{k}) = -\frac{1}{2}\langle a_{(-\mathbf{k})\uparrow} a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle$ は D_{2h} の B_{3u} に属する実数値関数である.

証明. $C_{2x} \in C_{2xv}$ 不変性より

$$\begin{aligned} C_{2x} \cdot \rho_0^\nu(\mathbf{k}) &= \rho_0^\nu(C_{2x} \cdot \mathbf{k}) = \rho_0^\nu(\mathbf{k}) \quad (\nu = 0, 3) \\ C_{2x} \cdot \lambda^1(\mathbf{k}) &= \lambda^1(C_{2x} \cdot \mathbf{k}) = \lambda^1(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (9.197)$$

IC_{2z} 不変性と $\rho_0^\mu(\mathbf{k})$ が偶関数, $\lambda^1(\mathbf{k})$ が奇関数であることに注意すると⁶

$$\begin{aligned} IC_{2z} \cdot \rho_0^\nu(\mathbf{k}) &= \rho_0^\nu(-C_{2z} \cdot \mathbf{k}) = \rho_0^\nu(C_{2z} \cdot \mathbf{k}) = \rho_0^\nu(\mathbf{k}) \quad (\nu = 0, 3) \\ IC_{2z} \cdot \lambda^1(\mathbf{k}) &= \lambda^1(-C_{2z} \cdot \mathbf{k}) = -\lambda^1(C_{2z} \cdot \mathbf{k}) = -\lambda^1(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (9.198)$$

が成り立つ. tu_{2x} 不変性より

$$tu_{2x} \cdot \lambda^1(\mathbf{k}) = (\lambda^1(\mathbf{k}))^* \quad (9.199)$$

を得る. 以上より $\rho_0^0(\mathbf{k}), \rho_0^3(\mathbf{k})$ が D_{2h} の A_g 表現に属し, $\lambda^1(\mathbf{k})$ が D_{2h} の B_{3u} 表現に属する実関数であることが示された. ■

以上の対称性を考慮すると SCF 条件 (9.44)(p.488) および (9.195) より

$$\begin{aligned} x_0^0(\mathbf{k}) &= -2t\gamma(\mathbf{k}) - \mu + \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{i=1}^3 W_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^0(\mathbf{k}) \\ &= a\gamma(\mathbf{k}) + c\eta(\mathbf{k}) - \tilde{\mu} \end{aligned} \quad (9.200)$$

$$\begin{aligned} x_0^3(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{i=1}^3 Y_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^3(\mathbf{k}) \\ &= d + e\gamma(\mathbf{k}) + f\eta(\mathbf{k}) + \end{aligned} \quad (9.201)$$

$$\begin{aligned} y^\uparrow &= \sum_{\mathbf{k}'} Z_4(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \langle a_{(-\mathbf{k})\uparrow} a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle \\ &= b \sin k_1 \end{aligned} \quad (9.202)$$

⁶(9.109)(p.503) 参照

ここで実数 a, b, c, d, e, f は次の式できまる.

$$\begin{aligned}
 a &= -2t - \{(V - 2J)/N\} \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \\
 b &= \{2(N - J)/N\} \sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 \langle a_{(-\mathbf{k})\uparrow} a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle \\
 c &= -\{(V - 2J)/N\} \sum_{\mathbf{k}} \eta(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}) \\
 d &= -\{(U + 4J)/N\} \sum_{\mathbf{k}} \rho_0^3(\mathbf{k}) \\
 e &= -\{V/N\} \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \rho_0^3(\mathbf{k}) \\
 f &= -\{V/N\} \sum_{\mathbf{k}} \eta(\mathbf{k}) \rho_0^3(\mathbf{k})
 \end{aligned} \tag{9.203}$$

したがって平均場ハミルトニアンは

$$\begin{aligned}
 H_m &= H_m^0 + H_m^1 + H_m^2 + H_m^3 + H_m^4 + H_m^5 \\
 H_m^0 &= \sum_{\mathbf{k}} (a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu}) (a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} + a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow}) \\
 H_m^1 &= \frac{1}{2}b \sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\uparrow}^\dagger + H.C \\
 H_m^2 &= c \sum_{\mathbf{k}} \eta(\mathbf{k}) (a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} + a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow}) \quad \dots \quad \check{G}_0^{(\Gamma B_{1g}, 0, 0)} \\
 H_m^3 &= d \sum_{\mathbf{k}} (a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} - a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow}) \quad \dots \quad \check{G}_0^{(\Gamma A_{1g}, 1, 1)} \\
 H_m^4 &= e \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) (a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} - a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow}) \quad \dots \quad \check{G}_0^{(\Gamma A_{1g}, 1, 1)} \\
 H_m^5 &= f \sum_{\mathbf{k}} \eta(\mathbf{k}) (a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} - a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow}) \quad \dots \quad \check{G}_0^{(\Gamma B_{1g}, 1, 1)}
 \end{aligned} \tag{9.204}$$

となる. (9.204) の H_m は H_m^0 に G_0 の既約表現 $\check{G}_0^{(\Gamma E_u, 1, 2)}$ に属する**主要成分** H_m^1 が導入されたことによつて, G_0 の $\check{G}_0^{(\Gamma B_{1g}, 0, 0)}$, $\check{G}_0^{(\Gamma A_{1g}, 1, 1)}$, $\check{G}_0^{(\Gamma A_{1g}, 1, 1)}$, $\check{G}_0^{(\Gamma B_{1g}, 1, 1)}$ に属する**副次的成分** $H_m^2, H_m^3, H_m^4, H_m^5$ が誘導される⁷.

(9.204) のハミルトニアンは次のようにスピンの $\uparrow, \downarrow$ を分離して書き直すことができる.

$$\begin{aligned}
 H_m &= H_m^\uparrow + H_m^\downarrow \\
 H_m^\uparrow &= \sum_{\mathbf{k}} \{(a + e)\gamma(\mathbf{k}) + (c + f)\eta(\mathbf{k}) - (\tilde{\mu} - d)\} a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} \\
 &\quad + \frac{1}{2}b \sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 \{a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\uparrow}^\dagger + a_{(-\mathbf{k})\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow}\} \\
 H_m^\downarrow &= \sum_{\mathbf{k}} \{(a - e)\gamma(\mathbf{k}) + (c - f)\eta(\mathbf{k}) - (\tilde{\mu} + d)\} a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow}
 \end{aligned} \tag{9.205}$$

⁷ $H_m^2, (H_m^3, H_m^4), H_m^5$ が主成分となる状態の局所的秩序変数の様子は図 8.2(その 2 p.282), 図 8.7(その 2 p.302), 図 8.8(その 2 p.305) を参照

9.3.4.2 $G_6(\text{SSP}_2)$ 状態

この状態の固定部分群は

$$G_6 = (E + tu_{2x})(E + I\tilde{\pi})C_{2av}\tilde{A}(e_3)L_0 \quad (9.206)$$

で与えられる。 G_5 の場合との違いは C_{2xv} が C_{2av} に代っているだけであり、 G_5 の場合と同様の方法を使うと次の命題が成り立つ。

命題 9.12. H_m の固定部分群が G_6 であるとき、 $\rho_0^0(\mathbf{k}), \rho_0^3(\mathbf{k})$ は D_{2ah} の既約表現 A_g (表 8.2 その 2 p.295 参照) に属し、 $\lambda^1 = -\frac{1}{2}\langle a_{(-\mathbf{k})\uparrow} a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle$ は D_{2ah} の B_{3u} に属する実関数である。

証明. 略 ■

以上の対称性を考慮すると、SCF 条件 (9.44)(p.488) より

$$\begin{aligned} x_0^0(\mathbf{k}) &= -2t\gamma(\mathbf{k}) - \mu + \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{i=1}^2 W_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^0(\mathbf{k}) \\ &= a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu} \end{aligned} \quad (9.207)$$

$$\begin{aligned} x_0^3(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{i=1}^2 Y_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^3(\mathbf{k}) \\ &= c + d\gamma(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (9.208)$$

$$\begin{aligned} y^\uparrow(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{i=4}^5 Z_i(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \langle a_{(-\mathbf{k})\uparrow} a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle \\ &= b(\sin k_1 + \sin k_2) \end{aligned} \quad (9.209)$$

が成り立つ。ここで実数 a, b, c, d は次式で定まる。

$$\begin{aligned} a &= -2t - \{(V - 2J)/N\} \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}) \\ b &= \{(V - J)/N\} \sum_{\mathbf{k}} (\sin k_1 + \sin k_2) \langle a_{(-\mathbf{k})\uparrow} a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle \\ c &= -\{(U + 4J)/N\} \sum_{\mathbf{k}} \rho_0^3(\mathbf{k}) \\ d &= -\{V/N\} \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \rho_0^3(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (9.210)$$

したがって平均場ハミルトニアンは

$$\begin{aligned} H_m &= H_m^0 + H_m^1 + H_m^2 + H_m^3 \\ H_m^0 &= \sum_{\mathbf{k}} (a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu}) (a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} + a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow}) \\ H_m^1 &= \frac{1}{2}b \sum_{\mathbf{k}} (\sin k_1 + \sin k_2) a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\uparrow}^\dagger + H.C \\ H_m^2 &= c \sum_{\mathbf{k}} (a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} - a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow}) \quad \dots \quad \check{G}_0^{(\Gamma A_{1g}, 1, 1)} \\ H_m^3 &= d \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) (a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} - a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow}) \quad \dots \quad \check{G}_0^{(\Gamma A_{1g}, 1, 1)} \end{aligned} \quad (9.211)$$

で与えられる. この H_m は G_0 の既約表現 $\check{G}_0^{(\Gamma E_u, 1, 2)}$ に属する主要成分 H_m^1 が導入されたことによって, 副次的な強磁性的な $\check{G}_0^{(\Gamma A_{1g}, 1, 1)}$ に属する H_m^2, H_m^3 が誘導される.

(9.211) の H_m はスピンの $\uparrow, \downarrow$ に対応するものを分離して書き直すことが出来る.

$$\begin{aligned} H_m &= H_m^\uparrow + H_m^\downarrow \\ H_m^\uparrow &= \sum_{\mathbf{k}} \{ (a+d)\gamma(\mathbf{k}) - (\tilde{\mu} - c) \} a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} \\ &\quad + \frac{1}{2}b \sum_{\mathbf{k}} (\sin k_1 + \sin k_2) \{ a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\uparrow}^\dagger + a_{(-\mathbf{k})\uparrow} a_{\mathbf{k}\uparrow} \} \\ H_m^\downarrow &= \sum_{\mathbf{k}} \{ (a-d)\gamma(\mathbf{k}) - (\tilde{\mu} + c) \} a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow} \end{aligned} \quad (9.212)$$

9.3.4.3 $G_7(\text{SSP}_3)$ 状態

この状態の固定部分群は

$$G_7 = (E + tC_{2x}u_{2x})(E + I\tilde{\pi})(E + C_{2z}u_{2z})C_4\left(\left(\frac{\pi}{2}\right)\right)\tilde{A}(e_3)L_0 \quad (9.213)$$

である.

命題 9.13. H_m の固定部分群が G_7 であるとき, $\rho_0^0(\mathbf{k}), \rho_0^3(\mathbf{k})$ は D_{4h} の A_{1g} に属する $\mathbf{k}$ の実関数であり, $\lambda^1(\mathbf{k}) = -\frac{1}{2}\langle a_{(-\mathbf{k})\uparrow} a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle$ は次の関係を満たす.

$$\begin{aligned} \lambda^1(\mathbf{k}) &= i\lambda^1(C_{4z}^- \cdot \mathbf{k}) \\ \lambda^1(\mathbf{k}) &= (\lambda^1(C_{2x} \cdot \mathbf{k}))^* \\ \sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 \lambda^1(\mathbf{k}) &= \left\{ \sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 \lambda^1(\mathbf{k}) \right\}^* \\ \sum_{\mathbf{k}} \sin k_2 \lambda^1(\mathbf{k}) &= i \sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 \lambda^1(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (9.214)$$

証明. $C_{4z}^+\left(\frac{\pi}{2}\right) \in C_4\left(\left(\frac{\pi}{2}\right)\right)$ 不変性と (9.53) より

$$\begin{aligned} C_{4z}^+\left(\frac{\pi}{2}\right) \cdot \rho_0^\nu(\mathbf{k}) &= \rho_0^\nu(C_{4z}^{-1} \cdot \mathbf{k}) = \rho_0^\nu(\mathbf{k}) \quad (\nu = 0, 3) \\ C_{4z}^+\left(\frac{\pi}{2}\right) \cdot \lambda^1(\mathbf{k}) &= i\lambda^1(C_{4z}^{-1} \cdot \mathbf{k}) = \lambda^1(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (9.215)$$

を得る. $tC_{2x}u_{2x}$ 不変性と (9.53) より

$$\begin{aligned} tC_{2x}u_{2x} \cdot \rho_0^\nu(\mathbf{k}) &= \rho_0^\nu(C_{2x} \cdot \mathbf{k}) = \rho_0^\nu(\mathbf{k}) \quad (\nu = 0, 3) \\ tC_{2x}u_{2x} \cdot \lambda^1(\mathbf{k}) &= \{\lambda^1(C_{2x} \cdot \mathbf{k})\}^* = \lambda^1(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (9.216)$$

を得る. (9.215), (9.216) より $\rho_0^0(\mathbf{k}), \rho_0^3(\mathbf{k})$ は D_{4h} の A_{1g} 表現に属する実関数であることがわかる. また (9.216) を使うと

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 \lambda^1(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 (\lambda^1(C_{2x} \cdot \mathbf{k}))^* \\ &= \left\{ \sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 \lambda^1(\mathbf{k}) \right\}^* \end{aligned} \quad (9.217)$$

を得る. 2 番目の等号は $C_{2x} \cdot \mathbf{k}$ を改めて $\mathbf{k}$ と置き, $(C_{2x} \cdot \mathbf{k})_1 = k_1$ を使った. (9.215) を使うと

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 \lambda^1(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 (i \lambda^1(C_{4z}^- \cdot \mathbf{k})) \\ &= i \sum_{\mathbf{K}} \sin(C_{4z}^+ \cdot \mathbf{K})_1 \lambda^1(\mathbf{K}) \\ &= -i \sum_{\mathbf{K}} \sin K_2 \lambda^1(\mathbf{K}) \end{aligned} \quad (9.218)$$

を得る. 2 番目の等号は $C_{4z}^{-1} \cdot \mathbf{k} = \mathbf{K}$ と置いた. ■

$\rho_0^0(\mathbf{k}), \rho_0^3$ の D_{4h} 対称性, (9.214) と SCF 条件 (9.44)(p.488) から

$$\begin{aligned} x_0^0(\mathbf{k}) &= -2t\gamma(\mathbf{k}) - \mu + \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{i=1}^2 W_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^0(\mathbf{k}') \\ &= a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu} \end{aligned} \quad (9.219)$$

$$\begin{aligned} x_0^3(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{i=1}^2 Y_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^3(\mathbf{k}') \\ &= c + d\gamma(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (9.220)$$

$$\begin{aligned} y^\dagger(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{i=4}^5 Z_i(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \langle a_{(-\mathbf{k}')\uparrow} a_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle \\ &= \{2(V - J)/N\} \left\{ \sin k_1 \sum_{\mathbf{k}'} \sin k'_1 \langle a_{(-\mathbf{k}')\uparrow} a_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle + \sin k_2 \sum_{\mathbf{k}'} \sin k'_2 \langle a_{(-\mathbf{k}')\uparrow} a_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle \right\} \\ &= b(\sin k_1 + i \sin k_2) \end{aligned} \quad (9.221)$$

を得る. ここで a, b, c, d は実数で

$$\begin{aligned} a &= -2t - \{(V - 2J)/N\} \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}) \\ c &= -\{(U + 4J)/N\} \sum_{\mathbf{k}} \rho_0^3(\mathbf{k}) \\ d &= -\{V/N\} \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \rho_0^3(\mathbf{k}) \\ b &= \{2(V - J)/N\} \sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 \langle a_{(-\mathbf{k})\uparrow} a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle \end{aligned} \quad (9.222)$$

で定まる. したがって平均場ハミルトニアンは

$$\begin{aligned} H_m &= H_m^0 + H_m^1 + H_m^2 + H_m^3 \\ H_m^0 &= \sum_{\mathbf{k}} (a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu}) (a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} + a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow}) \quad \dots \quad \tilde{G}_0^{(\Gamma A_{1g}, 0, 0)} \\ H_m^1 &= \frac{1}{2} b (\sin k_1 + i \sin k_2) a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} + H.C \quad \dots \quad \tilde{G}_0^{(\Gamma E_u, 1, 2)} \\ H_m^2 &= c \sum_{\mathbf{k}} (a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} - a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow}) \quad \dots \quad \tilde{G}_0^{(\Gamma A_{1g}, 1, 1)} \\ H_m^3 &= d \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) (a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} - a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow}) \quad \dots \quad \tilde{G}_0^{(\Gamma A_{1g}, 1, 1)} \end{aligned} \quad (9.223)$$

で与えられる. (9.223) の H_m は H_m^0 に $\check{G}_0^{(\Gamma E_u, 1, 2)}$ に属する主要成分 H_m^1 が導入されたことによって, G_0 の $\check{G}_0^{(\Gamma A_{1g}, 1, 1)}$ に属する副次的成分 H_m^2, H_m^3 が誘導される.

(9.223) のハミルトニアンはスピンの $\uparrow, \downarrow$ を分離して書き直すことができる.

$$\begin{aligned}
H_m &= H_m^\uparrow + H_m^\downarrow \\
H_m^\uparrow &= \sum_{\mathbf{k}} \{ (a+d)\gamma(\mathbf{k}) - (\tilde{\mu} - c) \} a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} \\
&\quad + \frac{1}{2}b \sum_{\mathbf{k}} \{ (\sin k_1 + i \sin k_2) a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\uparrow}^\dagger + (\sin k_1 - i \sin k_2) a_{(-\mathbf{k})\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \} \\
H_m^\downarrow &= \sum_{\mathbf{k}} \{ (a-d)\gamma(\mathbf{k}) - (\tilde{\mu} + c) \} a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow}
\end{aligned} \tag{9.224}$$

9.3.4.4 $G_8(\text{SSP}_4)$ 状態

この状態の固定部分群は

$$G_8 = (E + tC_{2a}u_{2x})(E + I\tilde{\pi})(E + C_{2z}u_{2z})C_4\left(\left(\frac{\pi}{2}\right)\right)\tilde{A}(e_3)L_0 \tag{9.225}$$

で与えられる. この場合 G_7 の場合と同様にして次の命題が成立する.

命題 9.14. H_m の固定部分群が G_8 であるとき, $\rho_0^0(\mathbf{k}), \rho_0^3(\mathbf{k})$ は D_{4h} の A_{1g} に属する $\mathbf{k}$ の実関数であり, $\lambda^1(\mathbf{k}) = -\frac{1}{2}\langle a_{(-\mathbf{k})\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle$ は次の関係を満たす.

$$\begin{aligned}
\lambda^1(\mathbf{k}) &= i\lambda^1(C_{4z}^- \cdot \mathbf{k}) \\
\lambda^1(\mathbf{k}) &= (\lambda^1(C_{2a} \cdot \mathbf{k}))^* \\
\sum_{\mathbf{k}} (\sin k_1 + \sin k_2) \lambda^1(\mathbf{k}) &= \left\{ \sum_{\mathbf{k}} (\sin k_1 + \sin k_2) \lambda^1(\mathbf{k}) \right\}^* \\
\sum_{\mathbf{k}} (\sin k_2 - \sin k_1) \lambda^1(\mathbf{k}) &= i \sum_{\mathbf{k}} (\sin k_1 + \sin k_2) \lambda^1(\mathbf{k})
\end{aligned} \tag{9.226}$$

証明. 略 ■

命題 9.14 より前小節と同様にして次の平均場ハミルトニアンを得る.

$$\begin{aligned}
H_m &= H_m^0 + H_m^1 + H_m^2 + H_m^3 \\
H_m^0 &= \sum_{\mathbf{k}} (a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu}) (a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} + a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow}) \quad \dots \quad \check{G}_0^{(\Gamma A_{1g}, 0, 0)} \\
H_m^1 &= b \frac{1}{2} \{ (\sin k_1 + \sin k_2) \\
&\quad + i(\sin k_2 - \sin k_1) \} a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger + H.C. \quad \dots \quad \check{G}_0^{(\Gamma E_u, 1, 2)} \\
H_m^2 &= c \sum_{\mathbf{k}} (a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} - a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow}) \quad \dots \quad \check{G}_0^{(\Gamma A_{1g}, 1, 1)} \\
H_m^3 &= d \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) (a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} - a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow}) \quad \dots \quad \check{G}_0^{(\Gamma A_{1g}, 1, 1)}
\end{aligned} \tag{9.227}$$

ここで実数 a, b, c, d は次式で定まる

$$\begin{aligned}
 a &= -2t - \{(V - 2J)/N\} \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}) \\
 c &= -\{(U + 4J)/N\} \sum_{\mathbf{k}} \rho_0^3(\mathbf{k}) \\
 d &= -\{V/N\} \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \rho_0^3(\mathbf{k}) \\
 b &= \{(V - J)/N\} \sum_{\mathbf{k}} (\sin k_1 + \sin k_2) \langle a_{(-\mathbf{k})\uparrow} a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle
 \end{aligned} \tag{9.228}$$

(9.227) の H_m は H_m^0 に $\check{G}_0^{(\Gamma E_u, 1, 2)}$ に属する主要成分 H_m^1 が導入されたことによって, G_0 の $\check{G}_0^{(\Gamma A_{1g}, 1, 1)}$ に属する副次的成分 H_m^2, H_m^3 が誘導されている.

(9.227) のハミルトニアンはスピンの $\uparrow, \downarrow$ を分離して書き直すことができる.

$$\begin{aligned}
 H_m &= H_m^\uparrow + H_m^\downarrow \\
 H_m^\uparrow &= \sum_{\mathbf{k}} \{(a + d)\gamma(\mathbf{k}) - (\tilde{\mu} - c)\} a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} \\
 &\quad + \frac{1}{2}b \sum_{\mathbf{k}} [\{(\sin k_1 + \sin k_2) + i(\sin k_2 - \sin k_1)\} a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\uparrow}^\dagger \\
 &\quad + \{(\sin k_1 + \sin k_2) - i(\sin k_2 - \sin k_1)\} a_{(-\mathbf{k})\uparrow} a_{\mathbf{k}\uparrow}] \\
 H_m^\downarrow &= \sum_{\mathbf{k}} \{(a - d)\gamma(\mathbf{k}) - (\tilde{\mu} + c)\} a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow}
 \end{aligned} \tag{9.229}$$

9.3.5 ESP 状態

第 9.3.5 節では $G_9 \sim G_{13}$ の状態を考察する. $\uparrow$ スピンの電子同士のペアリングと $\downarrow$ スピン電子同士のペアリングがある状態である.

9.3.5.1 $G_9(\text{ESP}_1)$ 状態

この状態の固定部分群は

$$G_9 = (E + I\tilde{\pi})(E + IC_{2z})D_4(u_{4z}^+, u_{2x})T \tag{9.230}$$

で与えられる. ここで

$$D_4(u_{4z}^+, u_{2x}) = \{E, C_{4z}^+ u_{4z}^+, C_{2z} u_{2z}, C_{4z}^- u_{4z}^-\} + C_{2x} u_{2x} \{E, C_{4z}^+ u_{4z}^+, C_{2z} u_{2z}, C_{4z}^- u_{4z}^-\} \tag{9.231}$$

である.

命題 9.15. H_m の固定部分群が G_9 であるとき, $\rho_0^3(\mathbf{k}) = 0$ であり, $\rho_0^0(\mathbf{k})$ は D_{4h} の A_{1g} に, $(\lambda^1(\mathbf{k}), \lambda^2(\mathbf{k}))$ は D_{4h} の E_u に属する $\mathbf{k}$ の実数値関数であり, つぎの関係をみtas.

$$\begin{aligned}
 \sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 \lambda^2(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}} \sin k_2 \lambda^1(\mathbf{k}) = 0 \\
 \sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 \lambda^1(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}} \sin k_2 \lambda^2(\mathbf{k})
 \end{aligned} \tag{9.232}$$

証明. $t \in T$ 不変性および $\rho_0^3(\mathbf{k})$ が $\mathbf{k}$ の偶関数であることを考慮すると (9.53) より

$$t\rho_0^3(\mathbf{k}) = -\rho_0^3(-\mathbf{k}) = -\rho_0^3(\mathbf{k}) = \rho_0^3(\mathbf{k}) \quad (9.233)$$

より $\rho_0^3(\mathbf{k}) = 0$ となる. $C_{4z}^+ u_{4z}^+$ 不変性と (9.51), (9.53), (9.190) より

$$\begin{aligned} C_{4z}^+ u_{4z}^+ \cdot \rho_0^0(\mathbf{k}) &= \rho_0^0(C_{4z}^- \cdot \mathbf{k}) = \rho_0^0(\mathbf{k}) \\ C_{4z}^+ u_{4z}^+ \cdot \lambda^1(\mathbf{k}) &= -\lambda^2(C_{4z}^- \cdot \mathbf{k}) = \lambda^1(\mathbf{k}) \\ C_{4z}^+ u_{4z}^+ \cdot \lambda^2(\mathbf{k}) &= \lambda^1(C_{4z}^- \cdot \mathbf{k}) = \lambda^2(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (9.234)$$

を得る. $C_{2x} u_{2x}$ 不変性と (9.53), (9.59) より

$$\begin{aligned} C_{2x} u_{2x} \cdot \rho_0^0(\mathbf{k}) &= \rho_0^0(C_{2x} \cdot \mathbf{k}) = \rho_0^0(\mathbf{k}) \\ C_{2x} u_{2x} \cdot \lambda^1(\mathbf{k}) &= \lambda^1(C_{2x} \cdot \mathbf{k}) = \lambda^1(\mathbf{k}) \\ C_{2x} u_{2x} \cdot \lambda^2(\mathbf{k}) &= -\lambda^2(C_{2x} \cdot \mathbf{k}) = \lambda^2(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (9.235)$$

を得る. (9.234), (9.235) と $\rho_0^0(\mathbf{k}), \lambda^1(\mathbf{k}), \lambda^2(\mathbf{k})$ の偶奇性 (9.109), t 不変性より $\rho_0^0(\mathbf{k})$ は D_{4h} の A_{1g} , $(\lambda^1(\mathbf{k}), \lambda^2(\mathbf{k}))$ は D_{4h} の E_u 表現にことがわかる. (9.234) より

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 \lambda^1(\mathbf{k}) &= - \sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 \lambda^2(C_{4z}^- \cdot \mathbf{k}) \\ &= - \sum_{\mathbf{K}} \sin(C_{4z}^+ \cdot \mathbf{K})_1 \lambda^2(\mathbf{K}) \\ &= - \sum_{\mathbf{K}} \sin(-K_2) \lambda^2(\mathbf{K}) \\ &= \sum_{\mathbf{K}} \sin K_2 \lambda^2(\mathbf{K}) \end{aligned} \quad (9.236)$$

を得る. ここで2番目の等号は $C_{4z}^- \cdot \mathbf{k} = \mathbf{K}$ と置いた. これより (9.232) の第2式を得る. (9.235) より

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}} \sin k_2 \lambda^1(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}} \sin k_2 \lambda^1(C_{2x} \cdot \mathbf{k}) \\ &= \sum_{\mathbf{K}} \sin(C_{2x} \cdot \mathbf{K})_2 \lambda^1(\mathbf{K}) \\ &= - \sum_{\mathbf{K}} \sin K_2 \lambda^1(\mathbf{K}) \end{aligned} \quad (9.237)$$

同様にして

$$\sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 \lambda^2(\mathbf{k}) = - \sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 \lambda^2(\mathbf{k}) \quad (9.238)$$

を得る. これらより (9.232) の第1式を得る. ■

$\rho_0^0(\mathbf{k}), \lambda^1(\mathbf{k})$ の対称性と (9.232) を使うと SCF 条件 (9.44)(p.488) から

$$\begin{aligned} x_0^0(\mathbf{k}) &= -2t\gamma(\mathbf{k}) - \mu + \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{i=1}^2 W_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^0(\mathbf{k}') \\ &= a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu} \end{aligned} \quad (9.239)$$

$$\begin{aligned} y^1(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}'} Z_4(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \lambda^1(\mathbf{k}') \\ &= b \sin k_1 \end{aligned} \quad (9.240)$$

$$\begin{aligned} y^2(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}'} Z_5(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \lambda^2(\mathbf{k}') \\ &= b \sin k_2 \end{aligned} \quad (9.241)$$

$$(9.242)$$

を得る. ここで実数 a, b は次式で定まる.

$$\begin{aligned} a &= -2t\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu} \\ b &= \{2(V - J)/N\} \sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 \lambda^1(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (9.243)$$

これより平均場ハミルトニアンは

$$\begin{aligned} H_m &= H_m^0 + H_m^1 \\ H_m^0 &= \sum_{\mathbf{k}} (a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu}) (a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} + a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow}) \\ H_m^1 &= \frac{b}{2} \sum_{\mathbf{k}} \{ \sin k_1 (-a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\uparrow}^\dagger + a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger) \\ &\quad + \sin k_2 (ia_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\uparrow}^\dagger + ia_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger) \} + H.C \end{aligned} \quad (9.244)$$

(9.244) はスピンの $\uparrow, \downarrow$ を分離して書き直すことができる.

$$\begin{aligned} H_m &= H_m^\uparrow + H_m^\downarrow \\ H_m^\uparrow &= \sum_{\mathbf{k}} (a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu}) a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} \\ &\quad + \frac{b}{2} \sum_{\mathbf{k}} \{ (-\sin k_1 + i \sin k_2) a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\uparrow}^\dagger + (-\sin k_1 - i \sin k_2) a_{(-\mathbf{k})\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} \} \\ H_m^\downarrow &= \sum_{\mathbf{k}} (a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu}) a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow} \\ &\quad + \frac{b}{2} \sum_{\mathbf{k}} \{ (\sin k_1 + i \sin k_2) a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger + (\sin k_1 - i \sin k_2) a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow} \} \end{aligned} \quad (9.245)$$

準粒子のエネルギーは

$$E_0^\uparrow(\mathbf{k}) = E_0^\downarrow(\mathbf{k}) = \sqrt{(a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu})^2 + b^2(\sin^2 k_1 + \sin^2 k_2)} \quad (9.246)$$

となり $\uparrow, \downarrow$ で同じになる.

9.3.5.2 $G_{10}(\text{ESP}_2)$ 状態

この状態の固定部分群は

$$G_{10} = (E + tu_{2x})(E + I\tilde{\pi})D_2(u_{2z}, u_{2x})C_4(u_{2a}(\frac{\pi}{2}))L_0 \quad (9.247)$$

で与えられる. ここで

$$\begin{aligned} D_2(u_{2z}, u_{2x}) &= \{E, C_{2z}u_{2z}, C_{2x}u_{2x}, C_{2y}u_{2y}\} \\ C_4(u_{2a}(\frac{\pi}{2})) &= \{E, C_{4z}^+u_{2a}(\frac{\pi}{2}), C_{2z}\tilde{\pi}, C_{4z}^-u_{2a}(-\frac{\pi}{2})\} \end{aligned}$$

である.

命題 9.16. H_m の固定部分群が G_{10} のとき, $\rho_0^0(\mathbf{k})$ は D_{4h} の A_{1g} に, $\rho_0^3(\mathbf{k})$ は D_{4h} の B_{2g} に属する $\mathbf{k}$ の実数値関数である. $\lambda^1(\mathbf{k})$ は $\mathbf{k}$ の実関数で, $\lambda^2(\mathbf{k})$ は $\mathbf{k}$ の純虚数値関数で次の関係を満たす.

$$\begin{aligned} \lambda^1(C_{4z}^+ \cdot \mathbf{k}) &= i\lambda^2(\mathbf{k}), & \lambda^1(C_{2x} \cdot \mathbf{k}) &= +\lambda^1(\mathbf{k}) \\ \lambda^2(C_{4z}^+ \cdot \mathbf{k}) &= i\lambda^1(\mathbf{k}), & \lambda^2(C_{2x} \cdot \mathbf{k}) &= -\lambda^2(\mathbf{k}) \\ \sum_{\mathbf{k}} \sin k_2 \lambda^1(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 \lambda^2(\mathbf{k}) = 0 \\ \sum_{\mathbf{k}} \sin k_2 \lambda^2(\mathbf{k}) &= i \sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 \lambda^1(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (9.248)$$

証明. スピン回転 $u_{2a} = u(\frac{1}{\sqrt{2}}(e_1 + e_2), \pi)$ に対応する 3 次元回転行列は

$$R(u_{2a}) = R(\frac{1}{\sqrt{2}}(e_1 + e_2), \pi) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (9.249)$$

で与えられる. $C_{4z}^+u_{2a}(\frac{\pi}{2})$ 不変性と (9.51), (9.53) より

$$\begin{aligned} C_{4z}^+u_{2a}(\frac{\pi}{2}) \cdot \rho_0^0(\mathbf{k}) &= \rho_0^0(C_{4z}^- \cdot \mathbf{k}) = \rho_0^0(\mathbf{k}) \\ C_{4z}^+u_{2a}(\frac{\pi}{2}) \cdot \rho_0^3(\mathbf{k}) &= -\rho_0^3(C_{4z}^- \cdot \mathbf{k}) = \rho_0^3(\mathbf{k}) \\ C_{4z}^+u_{2a}(\frac{\pi}{2}) \lambda^1(\mathbf{k}) &= i\lambda^2(C_{4z}^- \cdot \mathbf{k}) = \lambda^1(\mathbf{k}) \\ C_{4z}^+u_{2a}(\frac{\pi}{2}) \lambda^2(\mathbf{k}) &= i\lambda^1(C_{4z}^- \cdot \mathbf{k}) = \lambda^2(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (9.250)$$

を得る. $C_{2x}u_{2x}$ 不変性と (9.53), (9.59) より

$$\begin{aligned} C_{2x}u_{2x} \cdot \rho_0^0(\mathbf{k}) &= \rho_0^0(C_{2x} \cdot \mathbf{k}) = \rho_0^0(\mathbf{k}) \\ C_{2x}u_{2x} \cdot \rho_0^3(\mathbf{k}) &= -\rho_0^3(C_{2x} \cdot \mathbf{k}) = \rho_0^3(\mathbf{k}) \\ C_{2x}u_{2x} \cdot \lambda^1(\mathbf{k}) &= \lambda^1(C_{2x} \cdot \mathbf{k}) = \lambda^1(\mathbf{k}) \\ C_{2x}u_{2x} \cdot \lambda^2(\mathbf{k}) &= -\lambda^2(C_{2x} \cdot \mathbf{k}) = \lambda^2(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (9.251)$$

tu_{2x} 不変性より

$$\begin{aligned} tu_{2x} \cdot \lambda^1(\mathbf{k}) &= (\lambda^1(\mathbf{k}))^* = \lambda^1(\mathbf{k}) \\ tu_{2x} \cdot \lambda^2(\mathbf{k}) &= -(\lambda^2(\mathbf{k}))^* = \lambda^2(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (9.252)$$

を得る. (9.251) を使うと

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}} \sin k_2 \lambda^1(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}} \sin k_2 \lambda^1(C_{2x} \cdot \mathbf{k}) \\ &= \sum_{\mathbf{K}} \sin(C_{2x} \cdot \mathbf{K})_2 \lambda^1(\mathbf{K}) \\ &= -\sum_{\mathbf{K}} \sin K_2 \lambda^1(\mathbf{K}) \end{aligned} \quad (9.253)$$

を得て

$$\sum_{\mathbf{k}} \sin k_2 \lambda^1(\mathbf{k}) = 0$$

を得る. 同様にして

$$\sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 \lambda^2(\mathbf{k}) = 0$$

を得が得られる. (9.250) を使うと

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}} \sin k_2 \lambda^2(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}} \sin k_2 (i \lambda^1(C_{4z}^- \cdot \mathbf{k})) \\ &= i \sum_{\mathbf{K}} \sin(C_{4z}^+ \cdot \mathbf{K})_2 \lambda^1(\mathbf{K}) \\ &= i \sum_{\mathbf{K}} \sin K_1 \lambda^1(\mathbf{K}) \end{aligned}$$

を得る. 以上より命題 9.16 は証明された. ■

命題 9.16 の性質と SCF 条件 (9.44)(p.488) を使うと,

$$\begin{aligned} x_0^0(\mathbf{k}) &= -2t\gamma(\mathbf{k}) - \mu + \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{i=1}^2 W_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^0(\mathbf{k}') \\ &= a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu} \end{aligned} \quad (9.254)$$

$$x_0^3(\mathbf{k}) = 0 \quad (9.255)$$

$$\begin{aligned} y^1(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}'} Z_4(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \lambda^1(\mathbf{k}') \\ &= b \sin k_1 \end{aligned} \quad (9.256)$$

$$\begin{aligned} y^2(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}'} Z_5(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \lambda^2(\mathbf{k}') \\ &= ib \sin k_2 \end{aligned} \quad (9.257)$$

を得る. ここで実数 a, b は次式で定まる.

$$\begin{aligned} a &= -2t\gamma(\mathbf{k}) - \{(V - 2J)/N\} \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}) \\ b &= \{2(V - J)/N\} \sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 \lambda^1(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (9.258)$$

$\rho_0^3(\mathbf{k})$ はゼロではないが SCF 条件より $x_0^3(\mathbf{k})$ がゼロになることに注意されたい.

平均場ハミルトニアンは

$$\begin{aligned} H_m &= H_m^0 + H_m^1 \\ H_m^0 &= \sum_{\mathbf{k}} (a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu}) (a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} + a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow}) \\ H_m^1 &= \frac{b}{2} \sum_{\mathbf{k}} \{ \sin k_1 (-a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\uparrow}^\dagger + a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger) \\ &\quad + i \sin k_2 (i a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\uparrow}^\dagger + i a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger) \} + H.C \end{aligned} \quad (9.259)$$

(9.259) はスピンの $\uparrow, \downarrow$ を分離して書き直すことが出来る.

$$\begin{aligned} H_m &= H_m^\uparrow + H_m^\downarrow \\ H_m^\uparrow &= \sum_{\mathbf{k}} (a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu}) a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} \\ &\quad + \frac{b}{2} \sum_{\mathbf{k}} \{ (-\sin k_1 - \sin k_2) a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\uparrow}^\dagger + (-\sin k_1 - \sin k_2) a_{(-\mathbf{k})\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} \} \\ H_m^\downarrow &= \sum_{\mathbf{k}} (a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu}) a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow} \\ &\quad + \frac{b}{2} \sum_{\mathbf{k}} \{ (\sin k_1 - \sin k_2) a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger + (\sin k_1 - \sin k_2) a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow} \} \end{aligned} \quad (9.260)$$

準粒子のエネルギーは

$$\begin{aligned} E_0^\uparrow(\mathbf{k}) &= \sqrt{(a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu})^2 + b^2(\sin k_1 + \sin k_2)^2} \\ E_0^\downarrow(\mathbf{k}) &= \sqrt{(a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu})^2 + b^2(\sin k_1 - \sin k_2)^2} \end{aligned} \quad (9.261)$$

となり

$$E_0^\uparrow(C_{4z}^+ \cdot \mathbf{k}) = E_0^\downarrow(\mathbf{k}) \quad (9.262)$$

の関係がある.

9.3.5.3 $G_{11}(\text{ESP}_3)$ 状態

この状態の固定部分群は

$$G_{11} = (E + t u_{2x})(E + I\tilde{\pi}) D_{2a}(u_{2z}, u_{2x}) C_4(u_{2a}(\frac{\pi}{2})) L_0 \quad (9.263)$$

で与えられる. ここで

$$D_{2a}(u_{2z}, u_{2x}) = \{E, C_{2z} u_{2z}, C_{2a} u_{2x}, C_{2b} u_{2y}\} \quad (9.264)$$

である。 G_{10} との違いは $D_{2a}(u_{2z}, u_{2x})$ の中の $C_{2x}u_{2x}, C_{2y}u_{2y}$ が $C_{2a}u_{2x}, C_{2b}u_{2y}$ に代っただけである。したがって G_{10} の場合と同様な手法で次の命題を証明できる。

命題 9.17. H_m の固定部分群が G_{11} のとき、 $\rho_0^0(\mathbf{k})$ は D_{4h} の A_{1g} に、 $\rho_0^3(\mathbf{k})$ は D_{4h} の B_{1g} に属する $\mathbf{k}$ の実関数である。 $\lambda^1(\mathbf{k})$ は $\mathbf{k}$ の実関数で、 $\lambda^2(\mathbf{k})$ は $\mathbf{k}$ の純虚数値関数で次の関係を満たす。

$$\begin{aligned}\lambda^1(C_{4z}^+ \cdot \mathbf{k}) &= i\lambda^2(\mathbf{k}), & \lambda^1(C_{2a} \cdot \mathbf{k}) &= +\lambda^1(\mathbf{k}) \\ \lambda^2(C_{4z}^+ \cdot \mathbf{k}) &= i\lambda^1(\mathbf{k}), & \lambda^2(C_{2a} \cdot \mathbf{k}) &= -\lambda^2(\mathbf{k}) \\ \sum_{\mathbf{k}} (\sin k_2 - \sin k_1) \lambda^1(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}} (\sin k_1 + \sin k_2) \lambda^2(\mathbf{k}) = 0 \\ \sum_{\mathbf{k}} (\sin k_2 - \sin k_1) \lambda^2(\mathbf{k}) &= i \sum_{\mathbf{k}} (\sin k_1 + \sin k_2) \lambda^1(\mathbf{k})\end{aligned}\tag{9.265}$$

証明. 命題 9.16 の証明と同様に証明可能なので省略する。 ■

命題 9.17 と SCF 条件 (9.44)(p.488) より

$$\begin{aligned}x_0^0(\mathbf{k}) &= -2t\gamma(\mathbf{k}) - \mu + \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{i=1}^2 W_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^0(\mathbf{k}') \\ &= a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu}\end{aligned}\tag{9.266}$$

$$\begin{aligned}x_0^3(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}'} Y_3^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^3(\mathbf{k}') \\ &= c\eta(\mathbf{k})\end{aligned}\tag{9.267}$$

$$\begin{aligned}y^1(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{i=4}^5 Z_i(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \lambda^1(\mathbf{k}') \\ &= b(\sin k_1 + \sin k_2)\end{aligned}\tag{9.268}$$

$$\begin{aligned}y^2(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{i=4}^5 Z_i(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \lambda^2(\mathbf{k}') \\ &= ib(\sin k_2 - \sin k_1)\end{aligned}\tag{9.269}$$

を得る。ここで実数 a, b, c は次式で定まる。

$$\begin{aligned}a &= -2t\gamma(\mathbf{k}) - \{(V - 2J)/N\} \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}) \\ b &= \{(V - J)/N\} \sum_{\mathbf{k}} (\sin k_1 + \sin k_2) \lambda^1(\mathbf{k}) \\ c &= \{(-V)/N\} \sum_{\mathbf{k}} \eta(\mathbf{k}) \rho_0^3(\mathbf{k})\end{aligned}\tag{9.270}$$

これより平均場ハミルトニアンは

$$\begin{aligned}
H_m &= H_m^0 + H_m^1 + H_m^2 \\
H_m^0 &= \sum_{\mathbf{k}} (a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu}) (a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} + a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow}) \\
H_m^1 &= \frac{b}{2} \sum_{\mathbf{k}} \{ (\sin k_1 + \sin k_2) (-a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\uparrow}^\dagger + a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger) \\
&\quad + i(\sin k_2 - \sin k_1) (ia_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\uparrow}^\dagger + ia_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger) \} + H.C \\
H_m^2 &= c \sum_{\mathbf{k}} \eta(\mathbf{k}) (a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} - a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow})
\end{aligned} \tag{9.271}$$

(9.271) はスピンの $\uparrow, \downarrow$ を分離して書き直すことが出来る.

$$\begin{aligned}
H_m &= H_m^\uparrow + H_m^\downarrow \\
H_m^\uparrow &= \sum_{\mathbf{k}} (a\gamma(\mathbf{k}) + c\eta(\mathbf{k}) - \tilde{\mu}) a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} \\
&\quad + \frac{b}{2} \sum_{\mathbf{k}} (-2\sin k_2) \{ a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\uparrow}^\dagger + a_{(-\mathbf{k})\uparrow} a_{\mathbf{k}\uparrow} \} \\
H_m^\downarrow &= \sum_{\mathbf{k}} (a\gamma(\mathbf{k}) - c\eta(\mathbf{k}) - \tilde{\mu}) a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow} \\
&\quad + \frac{b}{2} \sum_{\mathbf{k}} (2\sin k_1) \{ a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger + a_{(-\mathbf{k})\downarrow} a_{\mathbf{k}\downarrow} \}
\end{aligned} \tag{9.272}$$

準粒子のエネルギーは

$$\begin{aligned}
E_0^\uparrow(\mathbf{k}) &= \sqrt{(a\gamma(\mathbf{k}) + c\eta(\mathbf{k}) - \tilde{\mu})^2 + 4b^2 \sin^2 k_2} \\
E_0^\downarrow(\mathbf{k}) &= \sqrt{(a\gamma(\mathbf{k}) - c\eta(\mathbf{k}) - \tilde{\mu})^2 + 4b^2 \sin^2 k_1}
\end{aligned} \tag{9.273}$$

となり

$$E_0^\uparrow(C_{4z}^+ \cdot \mathbf{k}) = E_0^\downarrow(\mathbf{k}) \tag{9.274}$$

の関係がある.

9.3.5.4 $G_{12}(\text{ESP}_4)$ 状態

この状態の固定部分群は

$$G_{12} = (E + tC_{2x}u_{2x})(E + I\tilde{\pi})D_{2a}(u_{2z}, u_{2a})C_4(u_{2x}(\frac{\pi}{2}))L_0 \tag{9.275}$$

で与えられる. ここで

$$\begin{aligned}
D_{2a}(u_{2z}, u_{2a}) &= \{E, C_{2z}u_{2z}, C_{2a}u_{2a}, C_{2b}u_{2a}\} \\
C_4(u_{2x}(\frac{\pi}{2})) &= \{E, C_{4z}^+u_{2x}(\frac{\pi}{2}), C_{2z}\tilde{\pi}, C_{4z}^-u_{2x}(-\frac{\pi}{2})\}
\end{aligned}$$

である.

命題 9.18. H_m の固定部分群が G_{12} のとき, $\rho_0^3(\mathbf{k}) = 0$ であり, $\rho_0^0(\mathbf{k})$ は D_{4h} の A_{1g} に属する $\mathbf{k}$ の実関数である. $\lambda^1(\mathbf{k}), \lambda^2(\mathbf{k})$ は次の関係を満たす.

$$\begin{aligned}
 i\lambda^1(C_{4z}^- \cdot \mathbf{k}) &= \lambda^1(\mathbf{k}), & -i\lambda^2(C_{4z}^- \cdot \mathbf{k}) &= \lambda^2(\mathbf{k}) \\
 \lambda^2(C_{2a} \cdot \mathbf{k}) &= \lambda^1(\mathbf{k}), & \lambda^1(C_{2a} \cdot \mathbf{k}) &= \lambda^2(\mathbf{k}) \\
 (\lambda^1(C_{2x} \cdot \mathbf{k}))^* &= \lambda^1(\mathbf{k}), & -(\lambda^2(C_{2x} \cdot \mathbf{k}))^* &= \lambda^2(\mathbf{k}) \\
 \sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 \lambda^1(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}} \sin k_2 \lambda^2(\mathbf{k}) = \left\{ \sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 \lambda^1(\mathbf{k}) \right\}^* \\
 \sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 \lambda^2(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}} \sin k_2 \lambda^1(\mathbf{k}) = i \sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 \lambda^1(\mathbf{k})
 \end{aligned} \tag{9.276}$$

証明. $C_{4z} u_{2x} \left(\frac{\pi}{2} \right)$ 不変性と (9.53), (9.59) より

$$\begin{aligned}
 C_{4z}^+ u_{2x} \left(\frac{\pi}{2} \right) \cdot \rho_0^0(\mathbf{k}) &= \rho_0^0(C_{4z}^- \cdot \mathbf{k}) = \rho_0^0(\mathbf{k}) \\
 C_{4z}^+ u_{2x} \left(\frac{\pi}{2} \right) \cdot \rho_0^3(\mathbf{k}) &= -\rho_0^3(C_{4z}^- \cdot \mathbf{k}) = \rho_0^3(\mathbf{k}) \\
 C_{4z}^+ u_{2x} \left(\frac{\pi}{2} \right) \cdot \lambda^1(\mathbf{k}) &= i\lambda^1(C_{4z}^- \cdot \mathbf{k}) = \lambda^1(\mathbf{k}) \\
 C_{4z}^+ u_{2x} \left(\frac{\pi}{2} \right) \cdot \lambda^2(\mathbf{k}) &= -i\lambda^2(C_{4z}^- \cdot \mathbf{k}) = \lambda^2(\mathbf{k})
 \end{aligned} \tag{9.277}$$

を得る. $C_{2a} u_{2a}$ 不変性より

$$\begin{aligned}
 C_{2a} u_{2a} \cdot \rho_0^0(\mathbf{k}) &= \rho_0^0(C_{2a} \cdot \mathbf{k}) = \rho_0^0(\mathbf{k}) \\
 C_{2a} u_{2a} \cdot \rho_0^3(\mathbf{k}) &= -\rho_0^3(C_{2a} \cdot \mathbf{k}) = \rho_0^3(\mathbf{k}) \\
 C_{2a} u_{2a} \cdot \lambda^1(\mathbf{k}) &= \lambda^2(C_{2a} \cdot \mathbf{k}) = \lambda^1(\mathbf{k}) \\
 C_{2a} u_{2a} \cdot \lambda^2(\mathbf{k}) &= \lambda^1(C_{2a} \cdot \mathbf{k}) = \lambda^2(\mathbf{k})
 \end{aligned} \tag{9.278}$$

を得る. $tC_{2x} u_{2x}$ 不変性より

$$\begin{aligned}
 tC_{2x} u_{2x} \cdot \rho_0^3(\mathbf{k}) &= -\rho_0^3(C_{2x} \cdot \mathbf{k}) = \rho_0^3(\mathbf{k}) \\
 tC_{2x} u_{2x} \cdot \lambda^1(\mathbf{k}) &= (\lambda^1(C_{2x} \cdot \mathbf{k}))^* = \lambda^1(\mathbf{k}) \\
 tC_{2x} u_{2x} \cdot \lambda^2(\mathbf{k}) &= -(\lambda^2(C_{2x} \cdot \mathbf{k}))^* = \lambda^2(\mathbf{k})
 \end{aligned} \tag{9.279}$$

を得る. $C_{4z}^- = C_{2x} C_{2a}$ を考慮すると (9.277), (9.278), (9.279) より

$$\rho_0^3(\mathbf{k}) = -\rho_0^3(C_{4z}^- \cdot \mathbf{k}) = -\rho_0^3(C_{2x} C_{2a} \cdot \mathbf{k}) = \rho_0^3(C_{2a} \cdot \mathbf{k}) = -\rho_0^3(\mathbf{k}) \tag{9.280}$$

となり $\rho_0^3(\mathbf{k}) = 0$ が得られる. (9.278) を使うと

$$\sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 \lambda^1(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 \lambda^2(C_{2a} \cdot \mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{k}} \sin k_2 \lambda^2(\mathbf{k}) \tag{9.281}$$

を得る. 第2の等号は $C_{2a} \cdot \mathbf{k}$ を改めて $\mathbf{k}$ と置いた. (9.279) を使うと

$$\sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 \lambda^1(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 (\lambda^1(C_{2x} \cdot \mathbf{k}))^* = \left\{ \sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 \lambda^1(\mathbf{k}) \right\}^* \tag{9.282}$$

を得る. (9.278) と (9.277) を使うと

$$\begin{aligned}\sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 \lambda^2(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 \lambda^1(C_{2a} \cdot \mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{k}} \sin k_2 \lambda^1(\mathbf{k}) \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \sin k_2 (i \lambda^1(C_{4z}^- \cdot \mathbf{k})) = i \sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 \lambda^1(\mathbf{k})\end{aligned}\quad (9.283)$$

を得る. ■

命題 9.18 と SCF 条件 (9.44)(p.488) より

$$\begin{aligned}x_0^0(\mathbf{k}) &= -2t\gamma(\mathbf{k}) - \mu + \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{i=1}^2 W_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^0(\mathbf{k}') \\ &= a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu}\end{aligned}\quad (9.284)$$

$$\begin{aligned}y^1(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{i=4}^5 Z_i(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \lambda^1(\mathbf{k}') \\ &= b(\sin k_1 + i \sin k_2)\end{aligned}\quad (9.285)$$

$$\begin{aligned}y^2(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{i=4}^5 Z_i(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \lambda^2(\mathbf{k}') \\ &= b(\sin k_2 + i \sin k_1)\end{aligned}\quad (9.286)$$

を得る. ここで実数 a, b は次式で定まる.

$$\begin{aligned}a &= -2t\gamma(\mathbf{k}) - \{(V - 2J)/N\} \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}) \\ b &= \{2(V - J)/N\} \sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 \lambda^1(\mathbf{k})\end{aligned}\quad (9.287)$$

これより平均場ハミルトニアンは

$$\begin{aligned}H_m &= H_m^0 + H_m^1 + H_m^2 \\ H_m^0 &= \sum_{\mathbf{k}} (a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu}) (a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} + a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow}) \\ H_m^1 &= \frac{b}{2} \sum_{\mathbf{k}} \{ (\sin k_1 + i \sin k_2) (-a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\uparrow}^\dagger + a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger) \\ &\quad + (\sin k_2 + i \sin k_1) (i a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\uparrow}^\dagger + i a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger) \} + H.C\end{aligned}\quad (9.288)$$

(9.288) はスピンの $\uparrow, \downarrow$ を分離して書き直すことが出来る.

$$\begin{aligned}H_m &= H_m^\uparrow + H_m^\downarrow \\ H_m^\uparrow &= \sum_{\mathbf{k}} (a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu}) a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} \\ &\quad + \frac{b}{2} \sum_{\mathbf{k}} (-2 \sin k_1) \{ a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\uparrow}^\dagger + a_{(-\mathbf{k})\uparrow} a_{\mathbf{k}\uparrow} \} \\ H_m^\downarrow &= \sum_{\mathbf{k}} (a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu}) a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow} \\ &\quad + \frac{b}{2} \sum_{\mathbf{k}} (2i \sin k_2) \{ a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger - a_{(-\mathbf{k})\downarrow} a_{\mathbf{k}\downarrow} \}\end{aligned}\quad (9.289)$$

準粒子のエネルギーは

$$\begin{aligned} E_0^\uparrow(\mathbf{k}) &= \sqrt{(a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu})^2 + 4b^2 \sin^2 k_1} \\ E_0^\downarrow(\mathbf{k}) &= \sqrt{(a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu})^2 + 4b^2 \sin^2 k_2} \end{aligned} \quad (9.290)$$

となり

$$E_0^\uparrow(C_{4z}^+ \cdot \mathbf{k}) = E_0^\downarrow(\mathbf{k}) \quad (9.291)$$

の関係がある.

9.3.5.5 $G_{13}(\text{ESP}_5)$ 状態

この状態の固定部分群は

$$G_{13} = (E + tC_{2a}u_{2x})(E + I\tilde{\pi})D_2(u_{2z}, u_{2b})C_4(u_{2x}(\frac{\pi}{2}))L_0 \quad (9.292)$$

で与えられる. ここで

$$\begin{aligned} D_2(u_{2z}, u_{2b}) &= \{E, C_{2z}u_{2z}, C_{2x}u_{2b}, C_{2y}u_{2a}\} \\ C_4(u_{2x}(\frac{\pi}{2})) &= \{E, C_{4z}^+u_{2x}(\frac{\pi}{2}), C_{2z}\tilde{\pi}, C_{4z}^-u_{2x}(-\frac{\pi}{2})\} \end{aligned}$$

である.

命題 9.19. H_m の固定部分群が G_{13} のとき, $\rho_0^3(\mathbf{k}) = 0$ となり, $\rho_0^0(\mathbf{k})$ は D_{4h} の A_{1g} に属する $\mathbf{k}$ の実関数である. $\lambda^1(\mathbf{k}), \lambda^2(\mathbf{k})$ は次の関係を満たす.

$$\begin{aligned} i\lambda^1(C_{4z}^- \cdot \mathbf{k}) &= \lambda^1(\mathbf{k}), & -i\lambda^2(C_{4z}^- \cdot \mathbf{k}) &= \lambda^2(\mathbf{k}) \\ -\lambda^2(C_{2x} \cdot \mathbf{k}) &= \lambda^1(\mathbf{k}), & -\lambda^1(C_{2x} \cdot \mathbf{k}) &= \lambda^2(\mathbf{k}) \\ (\lambda^1(C_{2a} \cdot \mathbf{k}))^* &= \lambda^1(\mathbf{k}), & -(\lambda^2(C_{2a} \cdot \mathbf{k}))^* &= \lambda^2(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (9.293)$$

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}} (\sin k_1 + \sin k_2) \lambda^1(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}} (\sin k_2 - \sin k_1) \lambda^2(\mathbf{k}) = \left\{ \sum_{\mathbf{k}} (\sin k_1 + \sin k_2) \lambda^1(\mathbf{k}) \right\}^* \\ \sum_{\mathbf{k}} (\sin k_2 - \sin k_1) \lambda^1(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}} (\sin k_1 + \sin k_2) \lambda^2(\mathbf{k}) = i \sum_{\mathbf{k}} (\sin k_1 + \sin k_2) \lambda^1(\mathbf{k}) \end{aligned}$$

証明. $C_{4z}u_{2x}(\frac{\pi}{2})$ 不変性より (9.277) を得る. $C_{2x}u_{2b}$ 不変性より

$$\begin{aligned} C_{2x}u_{2b} \cdot \rho_0^0(\mathbf{k}) &= \rho_0^0(C_{2x} \cdot \mathbf{k}) = \rho_0^0(\mathbf{k}) \\ C_{2x}u_{2b} \cdot \rho_0^3(\mathbf{k}) &= -\rho_0^3(C_{2x} \cdot \mathbf{k}) = \rho_0^3(\mathbf{k}) \\ C_{2x}u_{2b} \cdot \lambda^1(\mathbf{k}) &= -\lambda^2(C_{2x} \cdot \mathbf{k}) = \lambda^1(\mathbf{k}) \\ C_{2x}u_{2b} \cdot \lambda^2(\mathbf{k}) &= -\lambda^1(C_{2x} \cdot \mathbf{k}) = \lambda^2(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (9.294)$$

を得る. $tC_{2a}u_{2x}$ 不変性より

$$\begin{aligned} tC_{2a}u_{2x} \cdot \rho_0^3(\mathbf{k}) &= -\rho_0^3(C_{2a} \cdot \mathbf{k}) = \rho_0^3(\mathbf{k}) \\ tC_{2a}u_{2x} \cdot \lambda^1(\mathbf{k}) &= (\lambda^1(C_{2a} \cdot \mathbf{k}))^* = \lambda^1(\mathbf{k}) \\ tC_{2a}u_{2x} \cdot \lambda^2(\mathbf{k}) &= -(\lambda^2(C_{2a} \cdot \mathbf{k}))^* = \lambda^2(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (9.295)$$

を得る. $C_{4z}^- = C_{2x}C_{2a}$ を考慮すると (9.277), (9.294), (9.295) より

$$\rho_0^3(\mathbf{k}) = -\rho_0^3(C_{4z}^- \cdot \mathbf{k}) = -\rho_0^3(C_{2x}C_{2a} \cdot \mathbf{k}) = \rho_0^3(C_{2a} \cdot \mathbf{k}) = -\rho_0^3(\mathbf{k}) \quad (9.296)$$

が得られ, $\rho_0^3(\mathbf{k}) = 0$ となる. (9.294) を使うと

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 \lambda^1(\mathbf{k}) &= -\sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 \lambda^2(C_{2x} \cdot \mathbf{k}) = -\sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 \lambda^2(\mathbf{k}) \\ \sum_{\mathbf{k}} \sin k_2 \lambda^1(\mathbf{k}) &= -\sum_{\mathbf{k}} \sin k_2 \lambda^2(C_{2x} \cdot \mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{k}} \sin k_2 \lambda^2(\mathbf{k}) \end{aligned}$$

を得る. これより

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}} (\sin k_1 + \sin k_2) \lambda^1(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}} (\sin k_2 - \sin k_1) \lambda^2(\mathbf{k}) \\ \sum_{\mathbf{k}} (\sin k_2 - \sin k_1) \lambda^1(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}} (\sin k_1 + \sin k_2) \lambda^2(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (9.297)$$

を得る. (9.295) より

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 \lambda^1(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 (\lambda^1(C_{2a} \cdot \mathbf{k}))^* = \left\{ \sum_{\mathbf{k}} \sin k_2 \lambda^1(\mathbf{k}) \right\}^* \\ \sum_{\mathbf{k}} \sin k_2 \lambda^1(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}} \sin k_2 (\lambda^1(C_{2a} \cdot \mathbf{k}))^* = \left\{ \sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 \lambda^1(\mathbf{k}) \right\}^* \end{aligned}$$

を得る. これより

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}} (\sin k_1 + \sin k_2) \lambda^1(\mathbf{k}) &= \left\{ \sum_{\mathbf{k}} (\sin k_1 + \sin k_2) \lambda^1(\mathbf{k}) \right\}^* \\ \sum_{\mathbf{k}} (\sin k_2 - \sin k_1) \lambda^1(\mathbf{k}) &= -\left\{ \sum_{\mathbf{k}} (\sin k_2 - \sin k_1) \lambda^1(\mathbf{k}) \right\}^* \end{aligned} \quad (9.298)$$

を得る. (9.277) を使うと

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}} (\sin k_1 + \sin k_2) \lambda^1(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}} (\sin k_1 + \sin k_2) (i \lambda^1(C_{4z}^- \cdot \mathbf{k})) \\ &= i \sum_{\mathbf{k}} (-\sin k_2 + \sin k_1) \lambda^1(\mathbf{k}) \\ &= -i \sum_{\mathbf{k}} (\sin k_2 - \sin k_1) \lambda^1(\mathbf{k}) \end{aligned}$$

を得る. これより

$$\sum_{\mathbf{k}} (\sin k_2 - \sin k_1) \lambda^1(\mathbf{k}) = i \sum_{\mathbf{k}} (\sin k_1 + \sin k_2) \lambda^1(\mathbf{k}) \quad (9.299)$$

を得る. 以上をまとめると命題 9.19 が得られる. ■

命題 9.19 と SCF 条件 (9.44)(p.488) より

$$\begin{aligned} x_0^0(\mathbf{k}) &= -2t\gamma(\mathbf{k}) - \mu + \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{i=1}^2 W_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^0(\mathbf{k}') \\ &= a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu} \end{aligned} \quad (9.300)$$

$$\begin{aligned} y^1(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{i=4}^5 Z_i(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \lambda^1(\mathbf{k}') \\ &= b\{(\sin k_1 + \sin k_2) + i(\sin k_2 - \sin k_1)\} \end{aligned} \quad (9.301)$$

$$\begin{aligned} y^2(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{i=4}^5 Z_i(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \lambda^2(\mathbf{k}') \\ &= b\{(\sin k_2 - \sin k_1) + i(\sin k_1 + \sin k_2)\} \end{aligned} \quad (9.302)$$

を得る. ここで実数 a, b は次式で定まる.

$$\begin{aligned} a &= -2t\gamma(\mathbf{k}) - \{ (V - 2J)/N \} \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}) \\ b &= \{ (V - J)/N \} \sum_{\mathbf{k}} (\sin k_1 + \sin k_2) \lambda^1(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (9.303)$$

これより平均場ハミルトニアンは

$$\begin{aligned} H_m &= H_m^0 + H_m^1 \\ H_m^0 &= \sum_{\mathbf{k}} (a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu}) (a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} + a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow}) \\ H_m^1 &= \frac{b}{2} \sum_{\mathbf{k}} [\{(\sin k_1 + \sin k_2) + i(\sin k_2 - \sin k_1)\} (-a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\uparrow}^\dagger + a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger) \\ &\quad + \{(\sin k_2 - \sin k_1) + i(\sin k_1 + \sin k_2)\} (i a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\uparrow}^\dagger + i a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger)] + H.C \end{aligned} \quad (9.304)$$

(9.304) はスピンの $\uparrow, \downarrow$ を分離して書き直すことが出来る.

$$\begin{aligned} H_m &= H_m^\uparrow + H_m^\downarrow \\ H_m^\uparrow &= \sum_{\mathbf{k}} (a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu}) a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} \\ &\quad + \frac{b}{2} \sum_{\mathbf{k}} \{-2(\sin k_1 + \sin k_2)\} \{a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\uparrow}^\dagger + a_{(-\mathbf{k})\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow}\} \\ H_m^\downarrow &= \sum_{\mathbf{k}} (a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu}) a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow} \\ &\quad + \frac{b}{2} \sum_{\mathbf{k}} \{2i(\sin k_2 - \sin k_1)\} \{a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger - a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow}\} \end{aligned} \quad (9.305)$$

準粒子のエネルギーは

$$\begin{aligned} E_0^\uparrow(\mathbf{k}) &= \sqrt{(a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu})^2 + 4b^2(\sin k_1 + \sin k_2)^2} \\ E_0^\downarrow(\mathbf{k}) &= \sqrt{(a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu})^2 + 4b^2(\sin k_2 - \sin k_1)^2} \end{aligned} \quad (9.306)$$

尾崎 正明

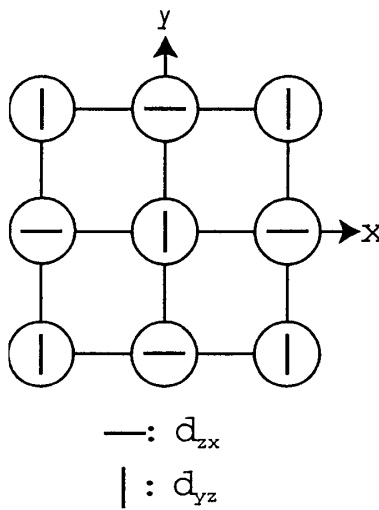
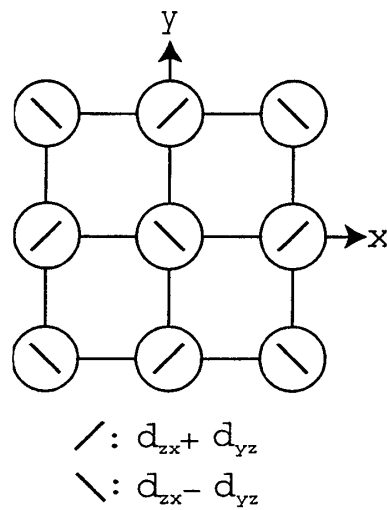
となり

$$E_0^\dagger(C_{4z}^+ \cdot \mathbf{k}) = E_0^\dagger(\mathbf{k}) \quad (9.307)$$

の関係がある.

第10章 縮退 Hubbard 模型における 非超伝導状態の群論的分類

第10章では2次元正方格子上的縮退 Hubbard 模型の状態を考察する。縮退 Hubbard 模型は近年軌道秩序状態との関係で注目されている。第7章（その2 p.232）では1サイトに1個のs軌道がある場合を考察した。ここでは $\text{Ca}_{2-x}\text{Sr}_x\text{RuO}_4$ との関連で注目されている、1サイトに d_{xy}, d_{yz}, d_{zx} の3つのd軌道が存在する場合の縮退 Hubbard 模型^{29, 30)}を考察する。この模型では色々な軌道秩序状態が考えられる。例えば図10.1, 図10.2で表される状態である¹⁾。図10.1で表される状態は

図 10.1: $G(\text{MB}_{1g}, 0, 0)$ 状態の軌道秩序図 10.2: $G(\text{MB}_{2g}, 0, 0)$ 状態の軌道秩序

回転 C_{2x}, C_{2z} , 並進 $T(e_1 + e_2), T(e_2 - e_1)$, 並進 $T(e_1)$ と回転 C_{2a} を組み合わせた $T(e_1)C_{2a}$ の操作に対して不変であることは容易に確かめられる。

同様に図10.2で表される状態は回転 C_{2a}, C_{2z} , 並進 $T(e_1 + e_2), T(e_2 - e_1)$, 並進 $T(e_1)$ と回転 C_{2x} を組み合わせた $T(e_1)C_{2x}$ の操作に対して不変であることは容易に確かめられる。

複数個の軌道がある模型では、これら以外に多様な対称性の破れた状態（軌道秩序状態を含む）があり得る。第10章ではオーダーリングベクトル $\mathbf{k}$ が Γ 点 ($\mathbf{k} = \mathbf{Q}_0 \equiv (0, 0)$), M 点 ($\mathbf{k} = \mathbf{Q}_1 \equiv (\pi, \pi)$), X 点 ($\mathbf{k} = \mathbf{Q}_2 = (\pi, 0), \mathbf{Q}_3 = (0, \pi)$) の場合の対称性の破れた状態の固定部分群を系統的に導く。その中の代表的な状態について、占有軌道とその占有数を固定部分群の構造から求める方法を解説する。それ以外の状態についてもこれらの方法を使えば占有軌道とその占有数は容易に求められる。

¹⁾ $G(\text{MB}_{1g}, 0, 0), G(\text{MB}_{2g}, 0, 0)$ の意味は第10.6節 (p.567) で説明する。

10.1 ハミルトニアンとその対称性の群 G_0

第 7.1 節 (その 2 p.232) で述べた場合と同様に x, y 方向に L 個のサイトからなる全格子点数が $N = L^2$ (格子定数 = 1) である 2 次元正方格子を考える. 正方格子上的 3-軌道 Hubbard 模型のハミルトニアンは次式で与えられる.

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & - \sum_{\mathbf{n}} \sum_{\mathbf{a}} \sum_{i,j} t_{ij}^{\mathbf{a}} a_{\mathbf{n}is}^{\dagger} a_{\mathbf{n}+\mathbf{a}js} - \mu \sum_{\mathbf{n}} \sum_i a_{\mathbf{n}is}^{\dagger} a_{\mathbf{n}is} \\ & + U \sum_{\mathbf{n}} \sum_i a_{\mathbf{n}i\uparrow}^{\dagger} a_{\mathbf{n}i\uparrow} a_{\mathbf{n}i\downarrow}^{\dagger} a_{\mathbf{n}i\downarrow} + \frac{1}{2} U' \sum_{\mathbf{n}} \sum_{i \neq j} \sum_{ss'} a_{\mathbf{n}is}^{\dagger} a_{\mathbf{n}is} a_{\mathbf{n}js'}^{\dagger} a_{\mathbf{n}js'} \\ & + \frac{1}{2} J \sum_{\mathbf{n}} \sum_{i \neq j} \sum_{ss'} a_{\mathbf{n}is}^{\dagger} a_{\mathbf{n}js'}^{\dagger} a_{\mathbf{n}is'} a_{\mathbf{n}js} + \frac{1}{2} J' \sum_{\mathbf{n}} \sum_{i \neq j} \sum_{s \neq s'} a_{\mathbf{n}is}^{\dagger} a_{\mathbf{n}is'}^{\dagger} a_{\mathbf{n}js'} a_{\mathbf{n}js} \end{aligned} \quad (10.1)$$

ここで $a_{\mathbf{n}is}^{\dagger}$ はサイト $\mathbf{n} = (n_1, n_2)$ に軌道 $i = d_{yz}, d_{zx}, d_{xy}$, スピン $s = \uparrow, \downarrow$ を持つ電子の生成演算子である. $\mathbf{a}$ は最近接つなぐベクトルで $\mathbf{a} = (1, 0), (0, 1), (-1, 0), (0, -1)$ である. $t_{ij}^{\mathbf{a}}$ は $\mathbf{a}$ 方向にそつての最近接サイトの軌道 i と j の間の飛び移り積分である. $U(U')$ は軌道内 (軌道間) クーロン相互作用, J は軌道間の交換相互作用, J' はペア飛び移り積分である. 3 個の原子軌道関数 d_{yz}, d_{zx}, d_{xy} は $\mathbf{r} = (x, y, z)$ とすると

$$\begin{aligned} \phi_1(\mathbf{r}) &= d_{yz} = f(\mathbf{r})yz \\ \phi_2(\mathbf{r}) &= -d_{zx} = -f(\mathbf{r})zx \\ \phi_3(\mathbf{r}) &= d_{xy} = f(\mathbf{r})xy \end{aligned} \quad (10.2)$$

ここで $f(\mathbf{r})$ は球対称な関数である. ここで ϕ_2 の定義で $-$ を付けたのは ϕ_1, ϕ_2 が表 10.1 にある D_{4h} の E_g 表現の基底になるようにするためである. すなわち $i = 1, 2, p \in D_{4h}$ に対して

$$p \cdot \phi_i(\mathbf{r}) \equiv \phi_i(p^{-1} \cdot \mathbf{r}) = \sum_{j=1}^2 \phi_j(\mathbf{r}) D_{ji}^{(E_g)}(p) \quad (10.3)$$

が成り立つ. ここで $D^{(E_g)}(p)$ は p に対応する D_{4h} の E_g 表現の表現行列である. また $\phi_3(\mathbf{r})$ は D_{4h} の B_{2g} 表現に属する軌道関数である.

運動量表示を得るため次のフーリエ変換を行なう.

$$\begin{aligned} a_{j\mathbf{k}s}^{\dagger} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{n}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}} a_{\mathbf{n}js}^{\dagger} \\ a_{j\mathbf{k}s} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{n}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}} a_{\mathbf{n}js} \end{aligned} \quad (10.4)$$

(10.4) の逆変換は

$$\begin{aligned} a_{\mathbf{n}js}^{\dagger} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}} a_{j\mathbf{k}s}^{\dagger} \\ a_{\mathbf{n}js} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}} a_{j\mathbf{k}s} \end{aligned} \quad (10.5)$$

表 10.1: D_{4h} の偶 (g) 既約表現行列

既約表現	A_{1g}	A_{2g}	B_{1g}	B_{2g}	E_g
E	1	1	1	1	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$
C_{4z}^+	1	1	-1	-1	$\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$
C_{4z}^-	1	1	-1	-1	$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$
C_{2z}	1	1	1	1	$\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$
C_{2x}	1	-1	1	-1	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$
C_{2y}	1	-1	1	-1	$\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$
C_{2a}	1	-1	-1	1	$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$
C_{2b}	1	-1	-1	1	$\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$
$Ip \in D_{4h} (p \in D_4)$ に対する行列は $p \in D_4$ に対する行列に等しい.					

となる. ここで $\mathbf{k}$ についての和は第1ブリュリアン域についての和である. (10.5) を (10.1) に代入すると運動量表示によるハミルトニアンを得る.

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H} = & \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ij} \sum_s (-t_{ij}(\mathbf{k}) - \mu \delta_{ij}) a_{i\mathbf{k}s}^\dagger a_{j\mathbf{k}s} \\
 & + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} \sum_{injm} \sum_{ss'} \langle i\mathbf{k} + \mathbf{q}s, n\mathbf{k}'s' | V | j\mathbf{k}s, m\mathbf{k}' + \mathbf{q}s' \rangle a_{i\mathbf{k}+\mathbf{q}s}^\dagger a_{n\mathbf{k}'s'}^\dagger a_{m\mathbf{k}'+\mathbf{q}s'} a_{j\mathbf{k}s}
 \end{aligned} \tag{10.6}$$

ここで

$$\begin{aligned}
 t_{ij}(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{a}} e^{i\mathbf{a} \cdot \mathbf{k}} t_{ij}^{\mathbf{a}} \\
 \langle i\mathbf{k} + \mathbf{q}s, i\mathbf{k}'s' | V | i\mathbf{k}s, i\mathbf{k}' + \mathbf{q}s' \rangle &= \frac{U}{N} \\
 \langle i\mathbf{k} + \mathbf{q}s, j\mathbf{k}'s' | V | i\mathbf{k}s, j\mathbf{k}' + \mathbf{q}s' \rangle &= \frac{U'}{N}, \quad i \neq j'
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \langle ik + qs, jk's' | V | jks, ik' + qs' \rangle &= \frac{J}{N}, \quad i \neq j' \\
 \langle ik + qs, ik's' | V | jks, jk' + qs' \rangle &= \frac{J'}{N}, \quad i \neq j' \\
 \langle ik + qs, nk's' | V | jks, mk' + qs' \rangle &= 0, \quad \text{上記以外の場合}
 \end{aligned} \tag{10.7}$$

である。系の対称性の群を第7章の (7.8)(その2 p.233) と同じ

$$G_0 = P \times S \times R \tag{10.8}$$

で与えられると考える。ここで P は2次元正方格子の空間群で

$$P = L(e_1, e_2)D_{4h} = L_0D_{4h} \tag{10.9}$$

で与えられる。ここで $L_0 = L(e_1, e_2)$ であり、ベクトル $\mathbf{n} = n_1\mathbf{e}_1 + e_2n_2$ に対応する並進 $T(\mathbf{n}) \in L(e_1, e_2)$ の $\{a_{mis}^\dagger, a_{mis}\}$ への作用は

$$\begin{aligned}
 T(\mathbf{n}) \cdot a_{mis}^\dagger &= a_{(\mathbf{m}+\mathbf{n})is}^\dagger \\
 T(\mathbf{n}) \cdot a_{mis} &= a_{(\mathbf{m}+\mathbf{n})is}
 \end{aligned} \tag{10.10}$$

で与えられる。

$p \in D_{4h}$ の $\{a_{mis}^\dagger, a_{mis}\}$ への作用は

$$\begin{aligned}
 p \cdot (a_{\mathbf{n}1s}^\dagger, a_{\mathbf{n}2s}^\dagger) &= (a_{(p \cdot \mathbf{n})1s}^\dagger, a_{(p \cdot \mathbf{n})2s}^\dagger) D^{E_g}(p) \\
 p \cdot a_{\mathbf{n}3,s}^\dagger &= \chi^{B_{2g}}(p) a_{(p \cdot \mathbf{n})3s}^\dagger \\
 p \cdot (a_{\mathbf{n}1s}, a_{\mathbf{n}2s}) &= (a_{(p \cdot \mathbf{n})1s}, a_{(p \cdot \mathbf{n})2s}) D^{E_g}(p) \\
 p \cdot a_{\mathbf{n}3,s} &= \chi^{B_{2g}}(p) a_{(p \cdot \mathbf{n})3s}
 \end{aligned} \tag{10.11}$$

である。ここで $D^{E_g}(p)$ は p に対応する E_g 表現の表現行列であり、 $\chi^{B_{2g}}(p)$ は p に対応する B_{2g} 表現の表現行列 (指標) である。第7章で取り上げた拡張 Hubbard 模型での D_{4h} の作用 (7.11)(その2 p.234) の場合とは異なり、原子軌道関数が d_{yz}, d_{zx}, d_{xy} であるため、 D_{4h} の作用に対して $D^{E_g}(p), \chi^{B_{2g}}(p)$ が掛かっていることに注目されたい。

単位ベクトル $\mathbf{n}$ の周りの角 θ のスピン回転 $u(\mathbf{n}, \theta) \in S$ の $\{a_{mis}^\dagger, a_{mis}\}$ への作用は²

$$\begin{aligned}
 u(\mathbf{n}, \theta) \cdot a_{mis}^\dagger &= \sum_{s'=1}^2 \{u(\mathbf{n}, \theta)\}_{s's} a_{mis'}^\dagger \\
 u(\mathbf{n}, \theta) \cdot a_{mis} &= \sum_{s'=1}^2 \{u(\mathbf{n}, \theta)\}_{s's}^* a_{mis'}
 \end{aligned} \tag{10.12}$$

で与えられる。

R は時間反転の群で

$$R = (E, t) \tag{10.13}$$

² $u(\mathbf{n}, \theta)$ の具体的な表式は (7.13)(その2 p.234) 参照

で定義される.³ 時間反転 t の $\{a_{mis}^\dagger, a_{mis}\}$ への作用は

$$\begin{aligned} t \cdot (ca_{mi\uparrow}^\dagger) &= -c^* a_{mi\downarrow}^\dagger \\ t \cdot (ca_{mi\downarrow}^\dagger) &= c^* a_{mi\uparrow}^\dagger \\ t \cdot (ca_{mi\uparrow}) &= -c^* a_{mi\downarrow} \\ t \cdot (ca_{mi\downarrow}) &= c^* a_{mi\uparrow} \end{aligned} \quad (10.14)$$

である. ここで c は複素数である.

G_0 の $\{a_{iks}^\dagger, a_{iks}\}$ への作用は, 第7.1節(その2 p.232)と同様にして, 次の表式を得る.

$T(\mathbf{n}) \in L_0, p \in D_{4h}, u(\mathbf{n}, \theta) \in S, t \in \mathbf{R}$ に対して

$$\begin{aligned} T(\mathbf{n}) \cdot a_{jks}^\dagger &= e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}} a_{jks}^\dagger & T(\mathbf{n}) \cdot a_{jks} &= e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}} a_{jks} \\ p \cdot a_{iks}^\dagger &= \sum_{j=1}^2 D_{ji}^{E_g}(p) a_{j(p \cdot \mathbf{k})s}^\dagger & p \cdot a_{iks} &= \sum_{j=1}^2 D_{ji}^{E_g}(p) a_{j(p \cdot \mathbf{k})s} \quad i=1,2 \\ p \cdot a_{3ks}^\dagger &= \chi^{B_{2g}}(p) a_{3(p \cdot \mathbf{k})s}^\dagger & p \cdot a_{3ks} &= \chi^{B_{2g}}(p) a_{3(p \cdot \mathbf{k})s} \\ u(\mathbf{n}, \theta) \cdot a_{iks}^\dagger &= \sum_{s'=1}^2 u(\mathbf{n}, \theta)_{s's} a_{iks'}^\dagger & u(\mathbf{n}, \theta) \cdot a_{iks} &= \sum_{s'=1}^2 u(\mathbf{n}, \theta)_{s's}^* a_{iks'} \\ t \cdot (ca_{i\mathbf{k}\uparrow}^\dagger) &= -c^* a_{i(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger & t \cdot (ca_{i\mathbf{k}\uparrow}) &= -c^* a_{i(-\mathbf{k})\downarrow} \\ t \cdot (ca_{i\mathbf{k}\downarrow}^\dagger) &= c^* a_{i(-\mathbf{k})\uparrow}^\dagger & t \cdot (ca_{i\mathbf{k}\downarrow}) &= c^* a_{i(-\mathbf{k})\uparrow} \end{aligned} \quad (10.15)$$

が成り立つ.

正常状態からの2次相転移は G_0 の既約表現で規定され, その転移より生じる状態は固定点部分空間が1次元となる固定部分群⁴より求められる.

G_0 の既約表現は

$$\check{G}_0 = \check{P} \otimes \check{S}^\mu \otimes \check{R}^\nu \quad (10.16)$$

で与えられる. ここで $\mu=0, 1, \nu=1, 2$ である. 第10章では P の既約表現としてオーダリングベクトル $\mathbf{k}$ が Γ 点 ($\mathbf{k} = \mathbf{Q}_0 \equiv (0, 0)$), M 点 ($\mathbf{k} = \mathbf{Q}_1 \equiv (\pi, \pi)$), X 点 ($\mathbf{k} = \mathbf{Q}_2 \equiv (\pi, 0)$), $\mathbf{Q}_3 = (0, \pi)$) を持つ既約表現のみを考える.

10.2 一般的諸公式

第10.2節ではオーダリングベクトル $\mathbf{k}$ が Γ 点, M 点, X 点の場合の対称性の破れた状態について成り立つ, SCF 条件, 自由エネルギー, 格子点 $\mathbf{n}$ における電子密度行列, スピン密度行列の一般的な表式を求める. ここで扱う最も一般的な平均場ハミルトニアンは (8.3)(その2 p.266) を拡張した

$$H_m = H_K + \sum_{l=0}^3 \sum_{ij} \sum_{\lambda=0}^3 \sum_{ss'} \sum_{\mathbf{k}} x_{ij}^{\lambda}(\mathbf{k}) a_{i(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_l)s}^\dagger \sigma_{ss'}^\lambda a_{jks'} \quad (10.17)$$

³第10章では超伝導状態を考察しないのでグローバルゲージ変換は省略した.

⁴このような固定部分群は軸性 (axial) 固定部分群と呼ばれる³¹⁾.

で与えられる. ここで

$$H_K = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ij} \sum_s (-t_{ij}(\mathbf{k}) - \mu \delta_{ij}) a_{i\mathbf{k}s}^\dagger a_{j\mathbf{k}s} \quad (10.18)$$

であり, $x_{ij}^{l\lambda}(\mathbf{k})$ は H_m のエルミート条件より

$$x_{ij}^{l\lambda}(\mathbf{k} + \mathbf{Q}_l)^* = x_{ji}^{l\lambda}(\mathbf{k}) \quad (10.19)$$

をみたす. $\rho_{ij}^{l\lambda}(\mathbf{k})$, $i, j = 1, 2, 3$, $l, \lambda = 0, 1, 2, 3$ を次式で定義する.

$$\rho_{ij}^{l\lambda}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \sum_{ss'} \langle a_{j(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_l)s}^\dagger a_{i\mathbf{k}s'} \rangle \sigma_{ss'}^\lambda \quad (10.20)$$

命題 8.1, 命題 8.2(その 2 p.268) の場合と同様にして

$$\begin{aligned} \rho_{ij}^{l\lambda}(\mathbf{k})^* &= \rho_{ji}^{l\lambda}(\mathbf{k} + \mathbf{Q}_l) \\ \langle a_{j(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_l)s}^\dagger a_{i\mathbf{k}s'} \rangle &= \sum_{\lambda=0}^3 \sigma_{s's}^\lambda \rho_{ij}^{l\lambda}(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (10.21)$$

が示される. (8.24)(その 2 p.269) を拡張してつぎの記号を導入する.

$$\begin{aligned} W_{injm}^l(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= 2 \langle i\mathbf{k} + \mathbf{Q}_l s, n\mathbf{k}' s | V | j\mathbf{k}s, m\mathbf{k}' + \mathbf{Q}_l s \rangle \\ &\quad - \langle i\mathbf{k} + \mathbf{Q}_l s, n\mathbf{k}' s | V | m\mathbf{k}' + \mathbf{Q}_l s, j\mathbf{k}s \rangle \\ Y_{injm}^l(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= - \langle i\mathbf{k} + \mathbf{Q}_l s, n\mathbf{k}' s | V | m\mathbf{k}' + \mathbf{Q}_l s, j\mathbf{k}s \rangle \end{aligned} \quad (10.22)$$

(10.7) を使うと $i \neq j$ に対して

$$\begin{aligned} W_{iii}^l(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= \frac{U}{N} & Y_{iii}^l(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= -\frac{U}{N} \\ W_{ijij}^l(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= \frac{2U' - J}{N} & Y_{ijij}^l(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= -\frac{J}{N} \\ W_{iijj}^l(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= \frac{J'}{N} & Y_{iijj}^l(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= -\frac{J'}{N} \\ W_{ijji}^l(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= \frac{2J - U'}{N} & Y_{ijji}^l(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= -\frac{U'}{N} \\ W_{injm}^l(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= 0 & Y_{injm}^l(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= 0 \quad \text{上記以外の場合} \end{aligned} \quad (10.23)$$

を得る.

命題 8.4(その 2 p.271) を拡張した次の命題が成り立つ.

命題 10.1. 次の等式が成り立つ.

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2} \sum_{ss'} \sum_{tt'} [i\mathbf{k} + \mathbf{Q}_l s, n\mathbf{k}' t | V | j\mathbf{k}s', m\mathbf{k}' + \mathbf{Q}_l t'] \sigma_{s's}^0 \sigma_{t't}^0 \\ &\quad = 2 \langle i\mathbf{k} + \mathbf{Q}_l \uparrow, n\mathbf{k}' \uparrow | V | j\mathbf{k} \uparrow, m\mathbf{k}' + \mathbf{Q}_l \uparrow \rangle - \langle i\mathbf{k} + \mathbf{Q}_l \uparrow, n\mathbf{k}' \uparrow | V | m\mathbf{k}' + \mathbf{Q}_l \uparrow, j\mathbf{k} \uparrow \rangle \\ &\frac{1}{2} \sum_{ss'} \sum_{tt'} [i\mathbf{k} + \mathbf{Q}_l s, n\mathbf{k}' t | V | j\mathbf{k}s', m\mathbf{k}' + \mathbf{Q}_l t'] \sigma_{s's}^\lambda \sigma_{t't}^\lambda \\ &\quad = - \langle i\mathbf{k} + \mathbf{Q}_l \uparrow, n\mathbf{k}' \uparrow | V | m\mathbf{k}' + \mathbf{Q}_l j \uparrow, \mathbf{k} \uparrow \rangle, \quad \lambda = 1, 2, 3 \\ &\frac{1}{2} \sum_{ss'} \sum_{tt'} [i\mathbf{k} + \mathbf{Q}_l s, n\mathbf{k}' t | V | j\mathbf{k}s', m\mathbf{k}' + \mathbf{Q}_l t'] \sigma_{s's}^\lambda \sigma_{t't}^\mu \\ &\quad = 0, \quad \mu \neq \lambda \end{aligned}$$

証明. 命題 8.4(その2 p.271) と同様に証明できるので省略する. ■

命題 10.1 を利用すると第 8.1 節と同様の方法で次の SCF 条件を得る.

$$\begin{aligned} x_{ij}^{l0}(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{mn} W_{injm}^l(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_{mn}^{l0}(\mathbf{k}'), \quad l = 0, 1, 2, 3 \\ x_{ij}^{l\mu}(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{mn} Y_{injm}^l(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_{mn}^{l\mu}(\mathbf{k}'), \quad l = 0, 1, 2, 3, \quad \mu = 1, 2, 3 \end{aligned} \quad (10.24)$$

自由エネルギー F_{HF} は (8.52)(その2 p.274) に対応して

$$\begin{aligned} F_{\text{HF}} &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ij} 2(-t_{ij}(\mathbf{k}) - \mu \delta_{ij}) \rho_{ji}^{00}(\mathbf{k}) \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{ijmn} \sum_{l=0}^3 W_{injm}^l(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_{ji}^{l0}(\mathbf{k}) \rho_{mn}^{l0}(\mathbf{k}' + \mathbf{Q}_l) \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{ijmn} \sum_{l=0}^3 \sum_{\mu=1}^3 Y_{injm}^l(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_{ji}^{l\mu}(\mathbf{k}) \rho_{mn}^{l\mu}(\mathbf{k}' + \mathbf{Q}_l) \\ &\quad + \frac{1}{\beta} \sum_j \{f_j \log f_j + (1 - f_j) \log(1 - f_j)\} \end{aligned} \quad (10.25)$$

で与えられる.

$R_{ij}^{l\mu} (l, \mu = 0, 1, 2, 3)$ をつぎのように定義する.

$$R_{ij}^{l\mu} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \rho_{ij}^{l\mu}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} \langle a_{j(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_l)s}^\dagger a_{i\mathbf{k}s'} \rangle \sigma_{ss'}^\mu \quad (10.26)$$

以後 i, j 成分を $R_{ij}^{l\mu}$ とする 3×3 行列を $\mathbf{R}^{l\mu}$ と記す.

$$\begin{aligned} R_{ij}^{l\mu} &= \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} \langle a_{j(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_l)s}^\dagger a_{i\mathbf{k}s'} \rangle \sigma_{ss'}^\mu \\ &= \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{K}} \sum_{ss'} \langle a_{j\mathbf{K}s}^\dagger a_{i(\mathbf{K}+\mathbf{Q}_l)s'} \rangle \sigma_{ss'}^\mu \\ &= \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{K}} \sum_{ss'} \langle (a_{i(\mathbf{K}+\mathbf{Q}_l)s'}^\dagger a_{j\mathbf{K}s})^\dagger \rangle \sigma_{ss'}^\mu \\ &= \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{K}} \sum_{ss'} \langle a_{i(\mathbf{K}+\mathbf{Q}_l)s'}^\dagger a_{j\mathbf{K}s} \rangle^* (\sigma_{s's}^\mu)^* \\ &= (\mathbf{R}_{ji}^{l\mu})^* \end{aligned} \quad (10.27)$$

が成り立つ. ここで2番目等号は $\mathbf{K} = \mathbf{k} + \mathbf{Q}_l$ と置いた. 従って $\mathbf{R}^{l\mu}$ はエルミート行列である.

(10.23) より $W_{injm}^l(\mathbf{k}, \mathbf{k}'), Y_{injm}^l(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ は $l, \mathbf{k}, \mathbf{k}'$ に依存しないので

$$W_{injm}^l(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = W_{injm}, \quad Y_{injm}^l(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = W_{injm} \quad (10.28)$$

と記すことにする. そのとき SCF 条件 (10.24) は

$$\begin{aligned} x_{ij}^{l0}(\mathbf{k}) &= x_{ij}^{l0} = N \sum_{mn} W_{injm} R_{mn}^{l0}, \quad l = 0, 1, 2, 3 \\ x_{ij}^{l\mu}(\mathbf{k}) &= x_{ij}^{l\mu} = N \sum_{mn} Y_{injm} R_{mn}^{l\mu}, \quad l = 0, 1, 2, 3, \mu = 1, 2, 3 \end{aligned} \quad (10.29)$$

となり $x_{ij}^{l\mu}(\mathbf{k})$ は $\mathbf{k}$ に依存しない. また自由エネルギー (10.25) は

$$\begin{aligned}
F_{HF} = & \sum_{\mathbf{k}} 2(-t_{ij}(\mathbf{k}) - \mu\delta_{ij})\rho_{ji}^{00}(\mathbf{k}) \\
& + \frac{1}{2}N^2 \sum_{ijmn} \sum_{l=0}^3 W_{ijnm} R_{ji}^{l0} R_{mn}^{l0} \\
& + \frac{1}{2}N^2 \sum_{ijmn} \sum_{l=0}^3 \sum_{\mu=1}^3 Y_{ijnm} R_{ji}^{l\mu} R_{mn}^{l\mu} \\
& + \frac{1}{\beta} \sum_j \{f_j \log f_j + (1-f_j) \log(1-f_j)\}
\end{aligned} \tag{10.30}$$

となる. サイト $\mathbf{m}$ における密度行列 $D^{ss'}(\mathbf{m}) = \{D_{jj'}^{ss'}(\mathbf{m}) (j, j' = 1, 2, 3)\}$ を次のように定義する.

$$D_{jj'}^{ss'}(\mathbf{m}) = \langle a_{\mathbf{m}j's'}^\dagger a_{\mathbf{m}js} \rangle \tag{10.31}$$

命題 8.3(その 2 p.269) と同様にしてオーダリングベクトルを Γ, M, X 点に限ると

$$\langle a_{j'\mathbf{k}'s'}^\dagger a_{j\mathbf{k}s} \rangle \neq 0 \tag{10.32}$$

が成り立つのは

$$\mathbf{k}' = \mathbf{k} \pm \mathbf{Q}_l, \quad l = 0, 1, 2, 3 \tag{10.33}$$

の場合に限られる. フーリエ逆変換 (10.5) を使い, (10.32), (10.33) (10.21) を考慮すると

$$\begin{aligned}
D_{jj'}^{ss'}(\mathbf{m}) &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{m}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{m}} \langle a_{j'\mathbf{k}'s'}^\dagger a_{j\mathbf{k}s} \rangle \\
&= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{l=0}^3 e^{-i\mathbf{Q}_l\cdot\mathbf{m}} \langle a_{j'(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_l)s'}^\dagger a_{j\mathbf{k}s} \rangle \\
&= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{l=0}^3 \sum_{\lambda=0}^3 e^{-i\mathbf{Q}_l\cdot\mathbf{m}} \sigma_{ss'}^\lambda \rho_{jj'}^{l\lambda}(\mathbf{k}) \\
&= \sum_{l=0}^3 \sum_{\lambda=0}^3 e^{-i\mathbf{Q}_l\cdot\mathbf{m}} \sigma_{ss'}^\lambda R_{jj'}^{l\lambda}
\end{aligned} \tag{10.34}$$

を得る. すなわち

$$D^{ss'}(\mathbf{m}) = \sum_{l,\lambda=0}^3 e^{-i\mathbf{Q}_l\cdot\mathbf{m}} \sigma_{ss'}^\lambda \mathbf{R}^{l\lambda} \tag{10.35}$$

これより

$$\begin{aligned}
D_{jj'}^{\uparrow\uparrow}(\mathbf{m}) &= \sum_{l=0}^3 e^{-i\mathbf{Q}_l\cdot\mathbf{m}} (R_{jj'}^{l0} + R_{jj'}^{l3}) \\
D_{jj'}^{\downarrow\downarrow}(\mathbf{m}) &= \sum_{l=0}^3 e^{-i\mathbf{Q}_l\cdot\mathbf{m}} (R_{jj'}^{l0} - R_{jj'}^{l3})
\end{aligned} \tag{10.36}$$

すなわち

$$\begin{aligned} D^{\uparrow\uparrow}(\mathbf{m}) &= \sum_{l=0}^3 e^{-i\mathbf{Q}_l \cdot \mathbf{m}} (\mathbf{R}^{l0} + \mathbf{R}^{l3}) \\ D^{\downarrow\downarrow}(\mathbf{m}) &= \sum_{l=0}^3 e^{-i\mathbf{Q}_l \cdot \mathbf{m}} (\mathbf{R}^{l0} - \mathbf{R}^{l3}) \end{aligned} \quad (10.37)$$

を得る.

$g \in G_0$ の $\mathbf{R}^{l\mu}$ への作用を次のように定義する.

$$(g \cdot \mathbf{R}^{l\mu})_{ij} = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} \langle (g^{-1} \cdot a_{j(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_l)s}^\dagger)(g^{-1} \cdot a_{i\mathbf{k}s'}) \rangle^{(*)} \sigma_{ss'}^\mu \quad (10.38)$$

ここで $X^{(*)}$ は g が時間反転 t を含む群の元であるとき, X の複素共役を取ることを意味する. 定理 6.3(その2 p.228) より g が状態の固定部分群に含まれているとき,

$$g \cdot \mathbf{R}^{l\mu} = \mathbf{R}^{l\mu} \quad (10.39)$$

が成り立つ. この g 不変性によって $\mathbf{R}^{l\mu}$ の標準型を定めることが出来る.

スピン回転 $u = u(\mathbf{n}, \theta) \in S$ の $\mathbf{R}^{l0}$ への作用は

$$\begin{aligned} (u \cdot \mathbf{R}^{l0})_{ij} &= \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} \langle (u^{-1} \cdot a_{j(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_l)s}^\dagger)(u^{-1} \cdot a_{i\mathbf{k}s'}) \rangle \sigma_{ss'}^0 \\ &= \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} \langle (\sum_t (u^{-1})_{ts} a_{j(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_l)t}^\dagger) (\sum_{t'} (u^{-1})_{t's'}^* a_{i\mathbf{k}t'}) \rangle \sigma_{ss'}^0 \\ &= \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{tt'} \langle a_{j(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_l)t}^\dagger a_{i\mathbf{k}t'} \rangle \sum_s (u^{-1})_{ts} (u^{-1})_{st'}^\dagger \\ &= \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{tt'} \langle a_{j(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_l)t}^\dagger a_{i\mathbf{k}t'} \rangle \sigma_{tt'}^0 \\ &= R_{ij}^{l0} \end{aligned} \quad (10.40)$$

すなわち

$$u(\mathbf{n}, \theta) \cdot \mathbf{R}^{l0} = \mathbf{R}^{l0} \quad (10.41)$$

を得る. $\mu = 1, 2, 3$ の場合

$$\begin{aligned} (u \cdot \mathbf{R}^{l\mu})_{ij} &= \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} \langle (u^{-1} \cdot a_{j(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_l)s}^\dagger)(u^{-1} \cdot a_{i\mathbf{k}s'}) \rangle \sigma_{ss'}^\mu \\ &= \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} \langle (\sum_t (u^{-1})_{ts} a_{j(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_l)t}^\dagger) (\sum_{t'} (u^{-1})_{t's'}^* a_{i\mathbf{k}t'}) \rangle \sigma_{ss'}^\mu \\ &= \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{tt'} \langle a_{j(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_l)t}^\dagger a_{i\mathbf{k}t'} \rangle \sum_{ss'} (u^{-1})_{ts} \sigma_{ss'}^\mu (u^{-1})_{s't'}^\dagger \\ &= \frac{1}{2N} \sum_{\mu'} R(\mathbf{n}, -\theta)_{\mu\mu'} \sum_{tt'} \langle a_{j(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_l)t}^\dagger a_{i\mathbf{k}t'} \rangle \sigma_{tt'}^{\mu'} \\ &= \sum_{\mu'} R(\mathbf{n}, -\theta)_{\mu'\mu} R_{ij}^{l\mu'} \end{aligned} \quad (10.42)$$

を得る. 4 番目の等号は (7.104)(その 2 p.250) を使った. $R(\mathbf{n}, \theta)$ は (7.102)(その 2 p.249) で与えられる 3 次元回転行列である. (10.42) より

$$u(\mathbf{n}, \theta) \cdot \mathbf{R}^{l\mu} = \sum_{\mu'} R(\mathbf{n}, -\theta)_{\mu'\mu} \mathbf{R}^{l\mu'} \quad (10.43)$$

を得る.

$p \in D_{4h}$ の $\mathbf{R}^{l\mu}$ への作用を考える.

$$D(p) = \begin{pmatrix} D_{11}^{E_g}(p) & D_{12}^{E_g}(p) & 0 \\ D_{21}^{E_g}(p) & D_{22}^{E_g}(p) & 0 \\ 0 & 0 & \chi^{B_{2g}}(p) \end{pmatrix} \quad (10.44)$$

と置くと (10.15) より

$$p^{-1} \cdot a_{j\mathbf{k}s}^\dagger = \sum_{j'} D_{j'j}(p^{-1}) a_{j'(p^{-1} \cdot \mathbf{k})s}^\dagger \quad (10.45)$$

が成り立つ. したがって $p \in D_{4h}$ にたいして

$$\begin{aligned} (p \cdot \mathbf{R}^{l\mu})_{ij} &= \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} \langle (p^{-1} \cdot a_{j(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_l)s}^\dagger) (p^{-1} \cdot a_{i\mathbf{k}s'}) \rangle \sigma_{ss'}^\mu \\ &= \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} \langle (\sum_{j'} D_{j'j}(p^{-1}) a_{j'(p^{-1} \cdot \mathbf{k}+p^{-1} \cdot \mathbf{Q}_l)s}^\dagger) (\sum_{i'} D_{i'i}(p^{-1}) a_{i'(p^{-1} \cdot \mathbf{k})s'}) \rangle \sigma_{ss'}^\mu \\ &= \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{j'i'} D_{ii'}^t(p^{-1}) \langle a_{j'(p^{-1} \cdot \mathbf{k}+p^{-1} \cdot \mathbf{Q}_l)s}^\dagger a_{i'(p^{-1} \cdot \mathbf{k})s'} \rangle \sigma_{ss'}^\mu D_{j'j}(p^{-1}) \\ &= \sum_{i'j'} D_{ii'}(p) R_{i'j'}^{(p^{-1} \cdot l)\mu} D_{j'j}^\dagger(p) \end{aligned} \quad (10.46)$$

が成り立ち

$$p \cdot \mathbf{R}^{l\mu} = D(p) \mathbf{R}^{(p^{-1} \cdot l)\mu} D^\dagger(p) \quad (10.47)$$

を得る. ここで $D(p)$ が実直交行列で

$$D_{ii'}^t(p^{-1}) = D_{ii'}^{-1}(p^{-1}) = D_{ii'}(p), \quad D_{j'j}(p^{-1}) = D_{j'j}^\dagger \quad (10.48)$$

であることを使った. また $(p^{-1} \cdot l)$ は

$$p^{-1} \cdot \mathbf{Q}_l \doteq \mathbf{Q}_{(p^{-1} \cdot l)} \quad (10.49)$$

で定義される. たとえば $p = C_{2a}$ の場合

$$p^{-1} \cdot \mathbf{Q}_0 \doteq \mathbf{Q}_0, \quad p^{-1} \cdot \mathbf{Q}_1 \doteq \mathbf{Q}_1, \quad p^{-1} \cdot \mathbf{Q}_2 \doteq \mathbf{Q}_3, \quad p^{-1} \cdot \mathbf{Q}_3 \doteq \mathbf{Q}_2 \quad (10.50)$$

となり

$$(C_{2a} \cdot 0) = 0, \quad (C_{2a} \cdot 1) = 1, \quad (C_{2a} \cdot 2) = 3, \quad (C_{2a} \cdot 3) = 2 \quad (10.51)$$

である.

$T(\mathbf{m}) \in L_0$ に対して

$$\begin{aligned}
 (T(\mathbf{m}) \cdot \mathbf{R}^{l\mu})_{ij} &= \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} \langle (T(\mathbf{m})^{-1} \cdot a_{j(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_l)s}^\dagger) (T(\mathbf{m})^{-1} \cdot a_{iks'}) \rangle \sigma_{ss'}^\mu \\
 &= e^{i\mathbf{Q}_l \cdot \mathbf{m}} \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} \langle a_{j(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_l)s}^\dagger a_{iks'} \rangle \sigma_{ss'}^\mu \\
 &= e^{i\mathbf{Q}_l \cdot \mathbf{m}} R_{ij}^{l\mu}
 \end{aligned} \tag{10.52}$$

すなわち

$$T(\mathbf{m}) \cdot \mathbf{R}^{l\mu} = e^{i\mathbf{Q}_l \cdot \mathbf{m}} \mathbf{R}^{l\mu} \tag{10.53}$$

を得る.

$t \in \mathbf{R}$ に対して $t^{-1} = -t$ を考慮すると

$$\begin{aligned}
 (t \cdot \mathbf{R}^{l0})_{ij} &= \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} \langle (-t \cdot a_{j(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_l)s}^\dagger) (-t \cdot a_{iks'}) \rangle^* \sigma_{ss'}^0 \\
 &= \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \{ \langle (t \cdot a_{j(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_l)\uparrow}^\dagger) (t \cdot a_{ik\uparrow}) \rangle^* + \langle (t \cdot a_{j(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_l)\downarrow}^\dagger) (t \cdot a_{ik\downarrow}) \rangle^* \} \\
 &= \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \{ \langle a_{j(-\mathbf{k}+\mathbf{Q}_l)\downarrow}^\dagger a_{i(-\mathbf{k})\downarrow} \rangle^* + \langle a_{j(-\mathbf{k}+\mathbf{Q}_l)\uparrow}^\dagger a_{i(-\mathbf{k})\uparrow} \rangle^* \} \\
 &= (\mathbf{R}_{ij}^{l0})^*
 \end{aligned} \tag{10.54}$$

となり

$$t \cdot \mathbf{R}^{l0} = (\mathbf{R}^{l0})^* \tag{10.55}$$

を得る. ここでオーダリングベクトルの同値性 $-\mathbf{Q}_l \doteq \mathbf{Q}_l$ を使った. 同様にして

$$t \cdot \mathbf{R}^{l\mu} = -(\mathbf{R}^{l\mu})^* \quad (\mu = 1, 2, 3) \tag{10.56}$$

を得る. 以上をまとめると $u(\mathbf{n}, \theta) \in \mathbf{S}, p \in D_{4h}, T(\mathbf{m}) \in L_0, t \in \mathbf{R}$ にたいして

$$\begin{aligned}
 u(\mathbf{n}, \theta) \cdot \mathbf{R}^{l0} &= \mathbf{R}^{l0} \\
 u(\mathbf{n}, \theta) \cdot \mathbf{R}^{l\mu} &= \sum_{\mu'=1}^3 R(\mathbf{n}, -\theta)_{\mu'\mu} \mathbf{R}^{l\mu'}, \quad (\mu = 1, 2, 3) \\
 p \cdot \mathbf{R}^{l\mu} &= D(p) \mathbf{R}^{(p^{-1} \cdot l)\mu} D^\dagger(p) \\
 T(\mathbf{m}) \cdot \mathbf{R}^{l\mu} &= e^{i\mathbf{Q}_l \cdot \mathbf{m}} \mathbf{R}^{l\mu} \\
 t \cdot \mathbf{R}^{l0} &= (\mathbf{R}^{l0})^* \\
 t \cdot \mathbf{R}^{l\mu} &= -(\mathbf{R}^{l\mu})^*, \quad (\mu = 1, 2, 3)
 \end{aligned} \tag{10.57}$$

となる.

ここで (10.57) の変換で後でよく使う場合を具体的に求めておく.

$$\begin{aligned}
 D(C_{2z}) &= \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, & D(C_{2x}) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \\
 D(C_{2y}) &= \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, & D(C_{2a}) &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}
 \end{aligned} \tag{10.58}$$

を考慮すると $D((C_{2i})^{-1}) = D(C_{2i})^\dagger = D(C_{2i})$ ($i = x, y, a$) であるので (10.57) より

$$\begin{aligned}
 C_{2z} \cdot \mathbf{R}^{l\mu} &= \begin{pmatrix} R_{11}^{(C_{2z} \cdot l)\mu} & R_{12}^{(C_{2z} \cdot l)\mu} & -R_{13}^{(C_{2z} \cdot l)\mu} \\ R_{21}^{(C_{2z} \cdot l)\mu} & R_{22}^{(C_{2z} \cdot l)\mu} & -R_{23}^{(C_{2z} \cdot l)\mu} \\ -R_{31}^{(C_{2z} \cdot l)\mu} & -R_{32}^{(C_{2z} \cdot l)\mu} & R_{33}^{(C_{2z} \cdot l)\mu} \end{pmatrix} \\
 C_{2x} \cdot \mathbf{R}^{l\mu} &= \begin{pmatrix} R_{11}^{(C_{2x} \cdot l)\mu} & -R_{12}^{(C_{2x} \cdot l)\mu} & -R_{13}^{(C_{2x} \cdot l)\mu} \\ -R_{21}^{(C_{2x} \cdot l)\mu} & R_{22}^{(C_{2x} \cdot l)\mu} & R_{23}^{(C_{2x} \cdot l)\mu} \\ -R_{31}^{(C_{2x} \cdot l)\mu} & R_{32}^{(C_{2x} \cdot l)\mu} & R_{33}^{(C_{2x} \cdot l)\mu} \end{pmatrix} \\
 C_{2y} \cdot \mathbf{R}^{l\mu} &= \begin{pmatrix} R_{11}^{(C_{2y} \cdot l)\mu} & -R_{12}^{(C_{2y} \cdot l)\mu} & R_{13}^{(C_{2y} \cdot l)\mu} \\ -R_{21}^{(C_{2y} \cdot l)\mu} & R_{22}^{(C_{2y} \cdot l)\mu} & -R_{23}^{(C_{2y} \cdot l)\mu} \\ R_{31}^{(C_{2y} \cdot l)\mu} & -R_{32}^{(C_{2y} \cdot l)\mu} & R_{33}^{(C_{2y} \cdot l)\mu} \end{pmatrix} \\
 C_{2a} \cdot \mathbf{R}^{l\mu} &= \begin{pmatrix} R_{22}^{(C_{2a} \cdot l)\mu} & R_{21}^{(C_{2a} \cdot l)\mu} & R_{23}^{(C_{2a} \cdot l)\mu} \\ R_{12}^{(C_{2a} \cdot l)\mu} & R_{11}^{(C_{2a} \cdot l)\mu} & R_{13}^{(C_{2a} \cdot l)\mu} \\ R_{32}^{(C_{2a} \cdot l)\mu} & R_{31}^{(C_{2a} \cdot l)\mu} & R_{33}^{(C_{2a} \cdot l)\mu} \end{pmatrix}
 \end{aligned} \tag{10.59}$$

を得る.

u_{2z}, u_{2x}, u_{2y} に対応する 3 次元回転行列 $R(\mathbf{e}_3, \pi), R(\mathbf{e}_1, \pi), R(\mathbf{e}_2, \pi)$ が

$$\begin{aligned}
 R(\mathbf{e}_3, \pi) &= \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\
 R(\mathbf{e}_1, \pi) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \\
 R(\mathbf{e}_2, \pi) &= \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}
 \end{aligned} \tag{10.60}$$

であり $R(e_i, -\pi) = R(e_i, \pi)$ であることを考慮すると (10.57) より

$$\begin{aligned} u_{2x} \cdot \mathbf{R}^{l0} &= \mathbf{R}^{l0}, & u_{2x} \cdot \mathbf{R}^{l1} &= \mathbf{R}^{l1}, & u_{2x} \cdot \mathbf{R}^{l2} &= -\mathbf{R}^{l2}, & u_{2x} \cdot \mathbf{R}^{l3} &= -\mathbf{R}^{l3} \\ u_{2y} \cdot \mathbf{R}^{l0} &= \mathbf{R}^{l0}, & u_{2y} \cdot \mathbf{R}^{l1} &= -\mathbf{R}^{l1}, & u_{2y} \cdot \mathbf{R}^{l2} &= \mathbf{R}^{l2}, & u_{2y} \cdot \mathbf{R}^{l3} &= -\mathbf{R}^{l3} \\ u_{2z} \cdot \mathbf{R}^{l0} &= \mathbf{R}^{l0}, & u_{2z} \cdot \mathbf{R}^{l1} &= -\mathbf{R}^{l1}, & u_{2z} \cdot \mathbf{R}^{l2} &= -\mathbf{R}^{l2}, & u_{2z} \cdot \mathbf{R}^{l3} &= \mathbf{R}^{l3} \end{aligned} \quad (10.61)$$

を得る. また次の関係も容易に示される.

$$\begin{aligned} T(\mathbf{m}) \cdot \mathbf{R}^{0,\mu} &= \mathbf{R}^{0,\mu} \\ T(e_1) \cdot \mathbf{R}^{1\mu} &= -\mathbf{R}^{1\mu}, & T(e_1) \cdot \mathbf{R}^{2\mu} &= -\mathbf{R}^{2\mu}, & T(e_1) \cdot \mathbf{R}^{3\mu} &= \mathbf{R}^{3\mu} \\ T(e_2) \cdot \mathbf{R}^{1\mu} &= -\mathbf{R}^{1\mu}, & T(e_2) \cdot \mathbf{R}^{2\mu} &= \mathbf{R}^{2\mu}, & T(e_2) \cdot \mathbf{R}^{3\mu} &= -\mathbf{R}^{3\mu} \\ T(e_1 + e_2) \cdot \mathbf{R}^{1\mu} &= \mathbf{R}^{1\mu}, & T(e_1 + e_2) \cdot \mathbf{R}^{2\mu} &= -\mathbf{R}^{2\mu}, & T(e_1 + e_2) \cdot \mathbf{R}^{3\mu} &= -\mathbf{R}^{3\mu} \\ t \cdot \mathbf{R}^{l0} &= (\mathbf{R}^{l0})^*, & t \cdot \mathbf{R}^{l\mu} &= -(\mathbf{R}^{l\mu})^* \quad (\mu = 1, 2, 3) \\ tu_{2y} \cdot \mathbf{R}^{l\nu} &= (\mathbf{R}^{l\nu})^* \quad (\nu = 0, 1, 3), & tu_{2y} \cdot \mathbf{R}^{l2} &= -(\mathbf{R}^{l2})^* \end{aligned} \quad (10.62)$$

10.3 G_0 の既約表現

(10.23) より $W_{injm}^l(\mathbf{k}, \mathbf{k}'), Y_{injm}^l(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ は $l, \mathbf{k}, \mathbf{k}'$ に依存しない. SCF 条件 (10.29) を考慮すると, $x_{ij}^{l\mu}(\mathbf{k})$ は $\mathbf{k}$ に依存しない. 従って G_0 の既約表現を考察する場合, その変分空間である表現空間 W_{HF} として

$$W_{\text{HF}} = \left\{ \sum_{\mathbf{k}} (a_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}_{lis}}^\dagger a_{\mathbf{k}js'} + a_{\mathbf{k}js'}^\dagger a_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}_{lis}}), \sum_{\mathbf{k}} (ia_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}_{lis}}^\dagger a_{\mathbf{k}js'} - ia_{\mathbf{k}js'}^\dagger a_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}_{lis}}) \right\}_{\text{R}} \quad (10.63)$$

を考えておけばよい. ここで $\{A, B, \dots\}_{\text{R}}$ は $A, B, \dots$ を基底とする実数を係数とするベクトル空間である. W_{HF} を表現空間とするオーダリングベクトルが Γ 点 $\mathbf{Q}_0 = (0, 0)$, M 点 $\mathbf{Q}_1 = (\pi, \pi)$, X 点 $\mathbf{Q}_2 = (\pi, 0)$, $\mathbf{Q}_3 = (0, \pi)$ を持つ G_0 の既約表現を考察しよう. これらは

$$\begin{aligned} \check{G}_0^{(\Gamma j, \mu, \nu)} &= \check{P}^{(\Gamma j)} \otimes \check{S}^{(\mu)} \otimes \check{R}^{(\nu)} \\ \check{G}_0^{(M j, \mu, \nu)} &= \check{P}^{(M j)} \otimes \check{S}^{(\mu)} \otimes \check{R}^{(\nu)} \\ \check{G}_0^{(X \gamma, \mu, \nu)} &= \check{P}^{(X \gamma)} \otimes \check{S}^{(\mu)} \otimes \check{R}^{(\nu)} \end{aligned} \quad (10.64)$$

と表される. ここで $\check{S}^{(\mu)}$, $\mu = 0, 1$ は第 7.4 節 (その 2 p.249) で述べたスピン回転群 S の既約表現である. $\check{R}^{(\mu)}$, $\nu = 0, 1$ は命題 7.7 (その 2 p.255) で述べた既約表現である. ここでは超伝導状態を考えないので, $\nu = 2$ の場合は考察しない.

$\check{P}^{\Gamma j}, \check{P}^{M j}$ はオーダリングベクトルが Γ 点, M 点の P の既約表現であり j は D_{4h} の既約表現 $A_{1g}, A_{2g}, \dots$, 等でラベルされる. その表現行列は (7.90) (その 2 p.246) で与えられる. すなわち $p \in D_{4h}, T(\mathbf{n}) \in L(e_1, e_2)$ に対して

$$\begin{aligned} \check{P}^{(\Gamma j)}(pT(\mathbf{n})) &\equiv D^{(\Gamma j)}(pT(\mathbf{n})) = d^{(j)}(p) \\ \check{P}^{(M j)}(pT(\mathbf{n})) &\equiv D^{(M j)}(pT(\mathbf{n})) = e^{-i\mathbf{Q}_1 \cdot \mathbf{n}} d^{(j)}(p) \end{aligned} \quad (10.65)$$

ここで $d^{(j)}(p)$ は D_{4h} の既約表現行列である.

$\check{P}^{(X j)}$ はオーダリングベクトルが X 点の P の既約表現で, 次の命題で与えられる.

命題 10.2. X 点のオーダリングベクトル $\mathbf{k} = \mathbf{Q}_2 = (\pi, 0)$ を持つ $\mathbf{P} = L(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2)D_{4h}$ の既約表現行列は次式で与えられる. $p \in D_{2h}, T(\mathbf{n}) \in L(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2)$ に対して

$$\begin{aligned} D^{(X\gamma)}(pT(\mathbf{n})) &= \begin{pmatrix} \chi^{(\gamma)}(p)e^{-i\mathbf{Q}_2 \cdot \mathbf{n}} & 0 \\ 0 & \chi^{(\gamma)}(C_{2a}pC_{2a})e^{-i\mathbf{Q}_3 \cdot \mathbf{n}} \end{pmatrix} \\ D^{(X\gamma)}(C_{2a}pT(\mathbf{n})) &= \begin{pmatrix} 0 & \chi^{(\gamma)}(C_{2a}pC_{2a})e^{-i\mathbf{Q}_3 \cdot \mathbf{n}} \\ \chi^{(\gamma)}(p)e^{-i\mathbf{Q}_2 \cdot \mathbf{n}} & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (10.66)$$

ここで $\chi^{(\gamma)}(p)$ ($p \in D_{2h}$) は D_{2h} の既約表現 (1 次元表現: $A_g, B_{1g}, B_{2g}, B_{3g}$ 等) の指標 (表 8.1(その 2 p.281) を参照) を表す.

証明. 例 7.1 の表 7.1, 定義 7.2(その 2 p.244) よりオーダリングベクトル $\mathbf{k} = \mathbf{Q}_2 = (\pi, 0)$ の小群は $P_1(\mathbf{Q}_2) = L(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2)D_{2h}$ である. 定理 7.3(その 2 p.245) より $P_1(\mathbf{Q}_2)$ の既約表現は $p \in D_{2h}, T(\mathbf{n}) \in L(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2)$ に対して

$$D^{(\mathbf{Q}_2\gamma)}(pT(\mathbf{n})) = \chi^{(\gamma)}(p)e^{-i\mathbf{Q}_2 \cdot \mathbf{n}} \quad (10.67)$$

で与えられる. 一方

$$\mathbf{P} = D_{4h}L(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2) = D_{2h}L(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2) + C_{2a}D_{2h}L(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2) \quad (10.68)$$

が成り立つので, $\mathbf{P}$ の既約表現は定理 3.7(その 1 p.541) を使って $D_{2h}L(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2)$ の既約表現より誘導表現として求めることが出来る. $p \in D_{2h}, T(\mathbf{n}) \in L(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2)$ に対して

$$\begin{aligned} (C_{2a})^{-1} &= C_{2a}, \quad (C_{2a})^{-1}pC_{2a} = C_{2a}pC_{2a} \in D_{2h} \\ C_{2a}^{-1}T(\mathbf{n})C_{2a} &= T(C_{2a} \cdot \mathbf{n}) \end{aligned} \quad (10.69)$$

に注意すると

$$C_{2a}^{-1}pT(\mathbf{n})C_{2a} = C_{2a}^{-1}pC_{2a}C_{2a}^{-1}T(\mathbf{n})C_{2a} = C_{2a}pC_{2a}T(C_{2a} \cdot \mathbf{n}) \quad (10.70)$$

を得る. これより

$$\begin{aligned} D^{(\mathbf{Q}_2\gamma)}(C_{2a}^{-1}pT(\mathbf{n})C_{2a}) &= D^{(\mathbf{Q}_2\gamma)}(C_{2a}pC_{2a}T(C_{2a} \cdot \mathbf{n})) \\ &= \chi^{(\gamma)}(C_{2a}pC_{2a})e^{-i\mathbf{Q}_2 \cdot (C_{2a} \cdot \mathbf{n})} \\ &= \chi^{(\gamma)}(C_{2a}pC_{2a})e^{-i(C_{2a} \cdot \mathbf{Q}_2) \cdot \mathbf{n}} \\ &= \chi^{(\gamma)}(C_{2a}pC_{2a})e^{-i\mathbf{Q}_3 \cdot \mathbf{n}} \end{aligned} \quad (10.71)$$

となる. ここで

$$\begin{aligned} C_{2a} \cdot \mathbf{Q}_2 &= \mathbf{Q}_3 \\ \mathbf{Q}_2 \cdot (C_{2a} \cdot \mathbf{n}) &= (C_{2a} \cdot \mathbf{Q}_2) \cdot \mathbf{n} = \mathbf{Q}_3 \cdot \mathbf{n} \end{aligned} \quad (10.72)$$

を使った. 従って $D^{(\mathbf{Q}_2\gamma)}(C_{2a}^{-1}pT(\mathbf{n})C_{2a})$ と $D^{(\mathbf{Q}_2\gamma)}(pT(\mathbf{n}))$ は同値でない表現である. したがって定理 3.7(その 1 p.541) の (a) の場合に相当し対応する G_0 の表現は (10.66) になる. ■

表 10.2: W_{HF} における P, S, R の既約表現行列

群	既約表現	備考
P	$\check{P}^{(\Gamma,j)}(pT(\mathbf{m})) = d^j(p)$	$p \in D_{4h}$
	$\check{P}^{(M,j)}(pT(\mathbf{m})) = d^{(j)}(p)e^{-i\mathbf{Q}_1 \cdot \mathbf{m}}$	$p \in D_{4h}$
	$\check{P}^{(X,\gamma)}(pT(\mathbf{m})) = \begin{pmatrix} \chi^{(\gamma)}(p)e^{-i\mathbf{Q}_2 \cdot \mathbf{m}} & 0 \\ 0 & \chi^{(\gamma)}(C_{2a}pC_{2a})e^{-i\mathbf{Q}_3 \cdot \mathbf{m}} \end{pmatrix}$	$p \in D_{2h}$
	$\check{P}^{(X,\gamma)}(C_{2a}pT(\mathbf{m})) = \begin{pmatrix} 0 & \chi^{(\gamma)}(C_{2a}pC_{2a})e^{-i\mathbf{Q}_3 \cdot \mathbf{m}} \\ \chi^{(\gamma)}(p)e^{-i\mathbf{Q}_2 \cdot \mathbf{m}} & \end{pmatrix}$	$p \in D_{2h}$
S	$\check{S}^{(0)}(u(\mathbf{n}, \theta)) = 1$	$u(\mathbf{n}, \theta) \in S$
	$\check{S}^{(1)}(u(\mathbf{n}, \theta)) = R(\mathbf{n}, \theta)$	
R	$\check{R}^{(0)}(t) = 1$	$t \in R$
	$\check{R}^{(1)}(t) = -1$	

(1) $d^{(j)}$ は D_{4h} の既約表現行列.

(2) $\chi^{(\gamma)}(p)$ は D_{2h} の既約表現の指標

(3) $\mathbf{Q}_1 = (\pi, \pi)$, $\mathbf{Q}_2 = (\pi, 0)$, $\mathbf{Q}_3 = (0, \pi)$.

(4) $T(\mathbf{m}) \in L(e_1, e_2)$

(5) $R(\mathbf{n}, \theta)$ は (7.102)(その2 p.249) で定義されている

(6) $\check{P}$ は $\mathbf{k}$ ベクトルが Γ 点: $\mathbf{k} = (0, 0)$, M 点: $\mathbf{k} = (\pi, \pi)$, X 点: $\mathbf{k} = (\pi, 0)$ の既約表現を記した.

G_0 の既約表現

$$\check{G}_0^{(\Lambda, \mu, \nu)} = \check{P}^{(\Lambda)} \otimes \check{S}^{(\mu)} \otimes \check{R}^{(\nu)} \quad (10.73)$$

の W_{HF} における表現基底を $h(\Lambda, \mu, \nu)_{m, \lambda, 1}$ とする. ここで

$$\begin{aligned} \Lambda &= \Gamma j, M j, X \gamma, & m &= 1, \dots, |\Lambda| \\ \mu &= 0, 1 & \lambda &= 1, \dots, |\mu| \\ \nu &= 0, 1 \end{aligned} \quad (10.74)$$

であり $|\Lambda|, |\mu|$ は $\check{P}^{(\Lambda)}, \check{S}^{(\mu)}$ の表現次元である. そのとき $p \in D_{4h}, T(\mathbf{m}) \in L_0, u(\mathbf{n}, \theta) \in S, t \in R$ に対して

$$\begin{aligned} & pT(\mathbf{m})u(\mathbf{n}, \theta)t \cdot h(\Lambda, \mu, \nu)_{m, \lambda, 1} \\ &= \sum_{m'=1}^{|\Lambda|} \sum_{\lambda'=1}^{|\mu|} \check{P}_{m'm}^{(\Lambda)}(pT(\mathbf{m})) \check{S}_{\lambda'\lambda}^{(\mu)}(u(\mathbf{n}, \theta)) (-1)^\nu h(\Lambda, \mu, \nu)_{m', \lambda', 1} \end{aligned} \quad (10.75)$$

が成り立つ。表 10.2 に第 10 章の議論に関連する P, S, R の既約表現行列をまとめた。

W_{HF} は空間反転 I に対して偶 (gerade) 表現に属するものだけであるので, $\check{P}^{(\Gamma j)} \otimes \check{S}^{(\mu)} \otimes \check{R}^{(\nu)}$, $\check{P}^{(Mj)} \otimes \check{S}^{(\mu)} \otimes \check{R}^{(\nu)}$, $\check{P}^{(X\gamma)} \otimes \check{S}^{(\mu)} \otimes \check{R}^{(\nu)}$ に対する j, γ は偶表現のみを扱う。すなわち j は D_{4h} の $A_{1g}, A_{2g}, B_{1g}, B_{2g}, E_g$, γ は D_{2h} の $A_g, B_{1g}, B_{2g}, B_{3g}$ のみを扱う。以下これらの各場合の W_{HF} における基底と固定部分群を求める。各既約表現の中の若干の固定部分群について詳しく考察し, 電子の占有原子軌道とその占有数を求める。

10.4 Γ 点非磁性状態

Γ 点での非磁性状態に対応する G_0 の既約表現は

$$\check{G}_0^{(\Gamma j, 0, \nu)} = \check{P}^{(\Gamma j)} \otimes \check{S}^{(0)} \otimes \check{R}^{(\nu)} \quad (10.76)$$

である。 $pT(\mathbf{m})u(\mathbf{n}, \theta), pT(\mathbf{m})u(\mathbf{n}, \theta)t$ に対して

$$\begin{aligned} \check{G}_0^{(\Gamma j, 0, \nu)}(pT(\mathbf{m})u(\mathbf{n}, \theta)) &= d^{(j)}(p) \otimes \mathbf{1}_1 \otimes \mathbf{1}_1 \\ \check{G}_0^{(\Gamma j, 0, \nu)}(pT(\mathbf{m})u(\mathbf{n}, \theta)t) &= (-1)^\nu d^{(j)}(p) \otimes \mathbf{1}_1 \otimes \mathbf{1}_1 \end{aligned} \quad (10.77)$$

となり, 表現次元は D_{4h} の既約表現 j の次元 $|j|$ になる。ここで $\mathbf{1}_1$ は 1 次元の単位行列である。これらの W_{HF} での基底は第 3.4 節 (その 1 p.546) の射影演算子の方法によって求められる。その結果を表 10.3 に示す。 $\check{G}_0^{(\Gamma j, 0, \nu)}$ の固定部分群は第 8 章 (その 2 p.266) と同様な方法で求められる。これらを表 10.4 にまとめた。 Γ 点非磁性状態の固定部分群はすべて L_0, S を含む。 $T(e_1), T(e_2) \in L_0$ と $u_{2x}, u_{2y}, u_{2z} \in S$ 不変性と (10.61), (10.62) より $R_{ij}^{l\mu}$ でゼロでないのは R_{ij}^{00} ($i, j = 1, 2, 3$) だけである。以下表 10.4 のうち, 例として固定部分群 $G(\Gamma A_{1g}, 0, 0), G(\Gamma E_g, 0, 0)_2, G(\Gamma E_g, 0, 1)_2$ の場合を取り上げる。

10.4.1 $G(\Gamma A_{1g}, 0, 0)$ 状態

この状態の固定部分群は $G(\Gamma A_{1g}, 0, 0) = D_{4h} L_0 S R = G_0$ である。 $C_{2z}, C_{2x}, C_{2a} \in D_{4h}$ 不変性と (10.59) より

$$R_{11}^{00} = R_{22}^{00}, \quad \text{および} \quad R_{ij}^{00} = 0, \quad i \neq j \text{ の場合} \quad (10.78)$$

が得られる。 R^{00} はエルミート行列であるので

$$R^{00} = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 \\ 0 & 0 & b \end{pmatrix} \quad (10.79)$$

を得る。ここで $a = R_{11}^{00} = R_{22}^{00}$, $b = R_{33}^{00}$ は実数である。 (10.37) より $T(\mathbf{m}) \in L_0$ に対して

$$D^{\uparrow\uparrow}(\mathbf{m}) = D^{\downarrow\downarrow}(\mathbf{m}) = R^{00} = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 \\ 0 & 0 & b \end{pmatrix} \quad (10.80)$$

表 10.3: W_{HF} における $\check{G}_0^{(\Gamma^j, 0, \nu)}$ の偶 (g) 既約表現の基底

G_0 の既約表現	W_{HF} における基底
$\check{G}_0^{(\Gamma A_{1g}, 0, 0)}$	$h(\Gamma A_{1g}, 0, 0)_{1,1,1}^1 = \sum_{\mathbf{k}} \sum_s (a_{1\mathbf{k}s}^\dagger a_{1\mathbf{k}s} + a_{2\mathbf{k}s}^\dagger a_{2\mathbf{k}s})$ $h(\Gamma A_{1g}, 0, 0)_{1,1,1}^2 = \sum_{\mathbf{k}} \sum_s a_{3\mathbf{k}s}^\dagger a_{3\mathbf{k}s}$
$\check{G}_0^{(\Gamma A_{2g}, 0, 1)}$	$h(\Gamma A_{2g}, 0, 1)_{1,1,1} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_s (i a_{1\mathbf{k}s}^\dagger a_{2\mathbf{k}s} - i a_{2\mathbf{k}s}^\dagger a_{1\mathbf{k}s})$
$\check{G}_0^{(\Gamma B_{1g}, 0, 0)}$	$h(\Gamma B_{1g}, 0, 0)_{1,1,1} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_s (a_{1\mathbf{k}s}^\dagger a_{1\mathbf{k}s} - a_{2\mathbf{k}s}^\dagger a_{2\mathbf{k}s})$
$\check{G}_0^{(\Gamma B_{2g}, 0, 0)}$	$h(\Gamma B_{2g}, 0, 0)_{1,1,1} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_s (a_{1\mathbf{k}s}^\dagger a_{2\mathbf{k}s} + a_{2\mathbf{k}s}^\dagger a_{1\mathbf{k}s})$
$\check{G}_0^{(\Gamma E_g, 0, 0)}$	$\begin{cases} h(\Gamma E_g, 0, 0)_{1,1,1} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_s (a_{2\mathbf{k}s}^\dagger a_{3\mathbf{k}s} + a_{3\mathbf{k}s}^\dagger a_{2\mathbf{k}s}) \\ h(\Gamma E_g, 0, 0)_{2,1,1} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_s (a_{1\mathbf{k}s}^\dagger a_{3\mathbf{k}s} + a_{3\mathbf{k}s}^\dagger a_{1\mathbf{k}s}) \end{cases}$
$\check{G}_0^{(\Gamma E_g, 0, 1)}$	$\begin{cases} h(\Gamma E_g, 0, 1)_{1,1,1} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_s (i a_{2\mathbf{k}s}^\dagger a_{3\mathbf{k}s} - i a_{3\mathbf{k}s}^\dagger a_{2\mathbf{k}s}) \\ h(\Gamma E_g, 0, 1)_{2,1,1} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_s (i a_{1\mathbf{k}s}^\dagger a_{3\mathbf{k}s} - i a_{3\mathbf{k}s}^\dagger a_{1\mathbf{k}s}) \end{cases}$

を得る. 表 10.5 に $G(\Gamma A_{1g}, 0, 0)$ 状態の占有軌道とその占有数を示す. 縮退した原子軌道 $\psi_1 = \phi_1, \psi_2 = \phi_2$ が等しい占有数 a を持つことに注目されたい. 平均場ハミルトニアン H_m は (10.17) より

$$H_m = H_K + \sum_{\mathbf{k}} \sum_s \{ \alpha (a_{1\mathbf{k}s}^\dagger a_{1\mathbf{k}s} + a_{2\mathbf{k}s}^\dagger a_{2\mathbf{k}s}) + \beta a_{3\mathbf{k}s}^\dagger a_{3\mathbf{k}s} \} \quad (10.81)$$

で与えられる. ここで α, β は SCF 条件 (10.29), (10.23) より

$$\begin{aligned} \alpha &= x_{11}^{00} = x_{22}^{00} = (U + 2U' - J)a + (2U' - J)b \\ \beta &= x_{33}^{00} = 2(2U' - J)a + Ub \end{aligned} \quad (10.82)$$

で与えられる. この状態は正常状態で対称性を全く破らない状態である.

10.4.2 $G(\Gamma E_g, 0, 0)_2$ 状態

この場合の固定部分群は

$$G(\Gamma E_g, 0, 0)_2 = C_{2ah} L_0 \mathbf{SR} \quad (10.83)$$

表 10.4: $\tilde{G}_0^{(\Gamma_j, 0, \nu)}$ の固定部分群と固定点部分空間

既約表現	固定部分群	固定点部分空間
$\tilde{G}_0^{(\Gamma A_{1g}, 0, 0)}$	$G(\Gamma A_{1g}, 0, 0) = D_{4h} L_0 \mathbf{SR}$	$\{h(\Gamma A_{1g}, 0, 0)_{1,1,1}\}_{\mathbf{R}}$
$\tilde{G}_0^{(\Gamma A_{2g}, 0, 1)}$	$G(\Gamma A_{2g}, 0, 1) = M_x C_{4h} L_0 \mathbf{S}$	$\{h(\Gamma A_{2g}, 0, 1)_{1,1,1}\}_{\mathbf{R}}$
$\tilde{G}_0^{(\Gamma B_{1g}, 0, 0)}$	$G(\Gamma B_{1g}, 0, 0) = D_{2h} L_0 \mathbf{SR}$	$\{h(\Gamma B_{1g}, 0, 0)_{1,1,1}\}_{\mathbf{R}}$
$\tilde{G}_0^{(\Gamma B_{2g}, 0, 0)}$	$G(\Gamma B_{2g}, 0, 0) = D_{2ah} L_0 \mathbf{SR}$	$\{h(\Gamma B_{2g}, 0, 0)_{1,1,1}\}_{\mathbf{R}}$
$\tilde{G}_0^{(\Gamma E_g, 0, 0)}$	$G(\Gamma E_g, 0, 0)_1 = C_{2xh} L_0 \mathbf{SR}$	$\{h(\Gamma E_g, 0, 0)_{1,1,1}\}_{\mathbf{R}}$
	$G(\Gamma E_g, 0, 0)_2 = C_{2ah} L_0 \mathbf{SR}$	$\{h(\Gamma E_g, 0, 0)_{1,1,1} + h(\Gamma E_g, 0, 0)_{2,1,1}\}_{\mathbf{R}}$
$\tilde{G}_0^{(\Gamma E_g, 0, 1)}$	$G(\Gamma E_g, 0, 1)_1 = M_z C_{2xh} L_0 \mathbf{S}$	$\{h(\Gamma E_g, 0, 1)_{1,1,1}\}_{\mathbf{R}}$
	$G(\Gamma E_g, 0, 1)_2 = M_z C_{2ah} L_0 \mathbf{S}$	$\{h(\Gamma E_g, 0, 1)_{1,1,1} + h(\Gamma E_g, 0, 1)_{2,1,1}\}_{\mathbf{R}}$
$D_{2ah} = \{E, C_{2z}, C_{2a}, C_{2b}, I, IC_{2z}, IC_{2a}, IC_{2b}\}$ $C_{2xh} = \{E, C_{2x}, I, IC_{2x}\}$ $C_{2ah} = \{E, C_{2a}, I, IC_{2a}\}$ $M_i = (E, tC_{2i})$		

表 10.5: $G(\Gamma A_{1g}, 0, 0)$ 状態の占有軌道とその占有数

サイト	スピン	軌道	占有数
m	$\uparrow\downarrow$	$\psi_1 = \phi_1$	a
m	$\uparrow\downarrow$	$\psi_2 = \phi_2$	a
m	$\uparrow\downarrow$	$\psi_3 = \phi_3$	b
$a = R_{11}^{00} = R_{22}^{00}, \quad b = R_{33}^{00}$			

である. t 不変性と (10.62) より $\mathbf{R}^{00}$ は実行列である. C_{2a} 不変性と (10.59) より

$$C_{2a} \cdot \mathbf{R}^{00} = \begin{pmatrix} R_{22}^{00} & R_{21}^{00} & R_{23}^{00} \\ R_{12}^{00} & R_{11}^{00} & R_{13}^{00} \\ R_{32}^{00} & R_{31}^{00} & R_{33}^{00} \end{pmatrix} = \mathbf{R}^{00} = \begin{pmatrix} R_{11}^{00} & R_{12}^{00} & R_{13}^{00} \\ R_{21}^{00} & R_{22}^{00} & R_{23}^{00} \\ R_{31}^{00} & R_{32}^{00} & R_{33}^{00} \end{pmatrix} \quad (10.84)$$

を得る. 実かつエルミート行列であることを考慮すると $\mathbf{R}^{00}$ はつぎのように書けることがわかる.

$$\mathbf{R}^{00} = \begin{pmatrix} a & c & d \\ c & a & d \\ d & d & b \end{pmatrix} \quad (10.85)$$

ここで a, b, c, d は実数で

$$a = R_{11}^{00} = R_{22}^{00}, \quad b = R_{33}^{00}, \quad c = R_{12}^{00} = R_{21}^{00}, \quad d = R_{13}^{00} = R_{23}^{00} = R_{31}^{00} = R_{32}^{00} \quad (10.86)$$

で定義される. (10.37) より

$$\mathbf{D} \equiv \mathbf{D}^{\uparrow\uparrow}(\mathbf{m}) = \mathbf{D}^{\downarrow\downarrow}(\mathbf{m}) = \begin{pmatrix} a & c & d \\ c & a & d \\ d & d & b \end{pmatrix} \quad (10.87)$$

を得る. サイト $\mathbf{m}$ における軌道の電子占有状況は $\mathbf{D}(\mathbf{m})$ を対角化によって理解できる. $\mathbf{D}$ は次の直交変換 U によってように対角化できる.

$$U^\dagger \mathbf{D} U = \mathbf{E} \equiv \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 \end{pmatrix} \quad (10.88)$$

ここで固有値は

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= \frac{a + c + b + \sqrt{(a + c - b)^2 + 8d^2}}{2} \\ \lambda_2 &= \frac{a + c + b - \sqrt{(a + c - b)^2 + 8d^2}}{2} \\ \lambda_3 &= a - c \end{aligned} \quad (10.89)$$

で与えられる. 直交行列 U は

$$U = \begin{pmatrix} \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}u & \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}w & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}u & \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}w & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ w & -u & 0 \end{pmatrix} \quad (10.90)$$

ここで

$$\begin{aligned} u &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 + \frac{a + c - b}{\sqrt{(a + c - b)^2 + 8d^2}} \right)^{\frac{1}{2}} \\ w &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 - \frac{a + c - b}{\sqrt{(a + c - b)^2 + 8d^2}} \right)^{\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (10.91)$$

であり, $\text{sgn}(d)$ は d の符号である.

$$\mathbf{A}_{\mathbf{m}s}^\dagger = (a_{\mathbf{m}1s}^\dagger, a_{\mathbf{m}2s}^\dagger, a_{\mathbf{m}3s}^\dagger) \quad (10.92)$$

として

$$\alpha_{ms}^\dagger = (\alpha_{m1s}^\dagger, \alpha_{m2s}^\dagger, \alpha_{m3s}^\dagger) = A_{ms}^\dagger U \quad (10.93)$$

と置く. すなわち

$$\alpha_{mjs}^\dagger = \sum_{j'} a_{mj's}^\dagger U_{j'j} \quad (10.94)$$

$$\alpha_{mis} = \sum_{i'} a_{mi's} U_{i'i}^* \quad (10.95)$$

である. $\alpha_{mjs}^\dagger$ はサイト m で軌道

$$\psi_j = \sum_{j'} \phi_{j'} U_{j'j} \quad (10.96)$$

にスピン s の電子を生成する演算子である. このとき

$$\begin{aligned} \langle \alpha_{mjs}^\dagger \alpha_{mis} \rangle &= \sum_{i'j'} U_{ii'}^\dagger \langle a_{mj's}^\dagger a_{mi's} \rangle U_{j'j} \\ &= (U^\dagger D U)_{ij} = (E)_{ij} = \delta_{ij} \lambda_i \end{aligned} \quad (10.97)$$

が成り立つ. これは原子の軌道

$$\begin{aligned} \psi_1 &= \phi_1 U_{11} + \phi_2 U_{21} + \phi_3 U_{31} \\ \psi_2 &= \phi_1 U_{12} + \phi_2 U_{22} + \phi_3 U_{32} \\ \psi_3 &= \phi_1 U_{13} + \phi_2 U_{23} + \phi_3 U_{33} \end{aligned} \quad (10.98)$$

における電子の占有数が $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ となることを示す. 表 10.6 に $G(\Gamma E_g, 0, 0)_2$ 状態の軌道とその電子占有数を示す. ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3 の原子軌道が再編成されて ψ_1, ψ_2, ψ_3 となり, 占有数もそれぞれが異なることに注意されたい. ψ_1, ψ_2, ψ_3 が $C_{2a} \in C_{2h}$ に対して次の対称性を持つことに注目されたい.

$$\begin{aligned} C_{2a} \cdot \psi_1 &= \psi_1 \\ C_{2a} \cdot \psi_2 &= \psi_2 \\ C_{2a} \cdot \psi_3 &= -\psi_3 \end{aligned} \quad (10.99)$$

10.4.3 $G(\Gamma E_g, 0, 1)_2$ 状態

この場合の固定部分群は

$$G(\Gamma E_g, 0, 1)_2 = (E + t C_{2z}) C_{2ah} L_0 S \quad (10.100)$$

である. 固定部分群が C_{2a} を含むことおよび R^{00} のエルミート性を考慮すると

$$\begin{aligned} R_{11}^{00} &= R_{22}^{00} \\ R_{12}^{00} &= R_{21}^{00} = (R_{12}^{00})^* = (R_{21}^{00})^* \\ R_{13}^{00} &= R_{23}^{00} = (R_{31}^{00})^* = (R_{32}^{00})^* \end{aligned} \quad (10.101)$$

表 10.6: $G(\Gamma E_g, 0, 0)_2$ 状態の占有軌道とその占有数

サイト	スピン	軌道	占有数
m	$\uparrow\downarrow$	$\psi_1 = \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}u\phi_1 + \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}u\phi_2 + w\phi_3$	λ_1
m	$\uparrow\downarrow$	$\psi_2 = \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}w\phi_1 + \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}w\phi_2 - u\phi_3$	λ_2
m	$\uparrow\downarrow$	$\psi_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}\phi_1 - \frac{1}{\sqrt{2}}\phi_2$	λ_3
$u = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(1 + \frac{a+c-b}{\sqrt{(a+c-b)^2+8d^2}}\right)^{\frac{1}{2}}, \quad w = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(1 - \frac{a+c-b}{\sqrt{(a+c-b)^2+8d^2}}\right)^{\frac{1}{2}}$			
$\lambda_1 = \frac{a+c+b+\sqrt{(a+c-b)^2+8d^2}}{2}, \quad \lambda_2 = \frac{a+c+b-\sqrt{(a+c-b)^2+8d^2}}{2}, \quad \lambda_3 = a - c$			
$a = R_{11}^{00} = R_{22}^{00}, \quad b = R_{33}^{00}, \quad c = R_{12}^{00} = R_{21}^{00}, \quad d = R_{13}^{00} = R_{23}^{00} = R_{31}^{00} = R_{32}^{00}$			

が示される. tC_{2z} 不変性と (10.59) と (10.62) より

$$\begin{aligned}
 tC_{2z} \cdot \mathbf{R}^{00} &= t(C_{2z} \cdot \mathbf{R}^{00}) = t \cdot \begin{pmatrix} R_{11}^{00} & R_{12}^{00} & -R_{13}^{00} \\ R_{21}^{00} & R_{22}^{00} & -R_{23}^{00} \\ -R_{31}^{00} & -R_{32}^{00} & R_{33}^{00} \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} (R_{11}^{00})^* & (R_{12}^{00})^* & -(R_{13}^{00})^* \\ (R_{21}^{00})^* & (R_{22}^{00})^* & -(R_{23}^{00})^* \\ -(R_{31}^{00})^* & -(R_{32}^{00})^* & (R_{33}^{00})^* \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} R_{11}^{00} & R_{12}^{00} & R_{13}^{00} \\ R_{21}^{00} & R_{22}^{00} & R_{23}^{00} \\ R_{31}^{00} & R_{32}^{00} & R_{33}^{00} \end{pmatrix} \tag{10.102}
 \end{aligned}$$

を得る. これより $R_{11}^{00}, R_{12}^{00}, R_{21}^{00}, R_{22}^{00}, R_{33}^{00}$ は実数で, $R_{13}^{00}, R_{23}^{00}, R_{31}^{00}, R_{32}^{00}$ は純虚数である. これと (10.101) を考慮すると

$$\mathbf{R}^{00} = \begin{pmatrix} a & c & id \\ c & a & id \\ -id & -id & b \end{pmatrix} \tag{10.103}$$

を得る. ここで実数 a, b, c, d は

$$a = R_{11}^{00} = R_{22}^{00}, \quad b = R_{33}^{00}, \quad c = R_{12}^{00} = R_{21}^{00}, \quad id = R_{13}^{00} = R_{23}^{00} \tag{10.104}$$

で定義される. (10.37) より $T(\mathbf{m}) \in L_0$ に対して

$$D \equiv D^{\uparrow\uparrow}(\mathbf{m}) = D^{\downarrow\downarrow}(\mathbf{m}) = \begin{pmatrix} a & c & id \\ c & a & id \\ -id & -id & b \end{pmatrix} \tag{10.105}$$

表 10.7: $G(\Gamma E_g, 0, 1)_2$ 状態の占有軌道とその占有数

サイト	スピン	軌道	占有数
m	$\uparrow\downarrow$	$\psi_1 = \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}u\phi_1 + \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}u\phi_2 - iw\phi_3$	λ_1
m	$\uparrow\downarrow$	$\psi_2 = \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}w\phi_1 + \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}w\phi_2 + iu\phi_3$	λ_2
m	$\uparrow\downarrow$	$\psi_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}\phi_1 - \frac{1}{\sqrt{2}}\phi_2$	λ_3
$u = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(1 + \frac{a+c-b}{\sqrt{(a+c-b)^2+8d^2}}\right)^{\frac{1}{2}}, \quad w = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(1 - \frac{a+c-b}{\sqrt{(a+c-b)^2+8d^2}}\right)^{\frac{1}{2}}$			
$\lambda_1 = \frac{a+c+b+\sqrt{(a+c-b)^2+8d^2}}{2}, \quad \lambda_2 = \frac{a+c+b-\sqrt{(a+c-b)^2+8d^2}}{2}, \quad \lambda_3 = a-c$			
$a = R_{11}^{00} = R_{22}^{00}, \quad b = R_{33}^{00}, \quad c = R_{12}^{00} = R_{21}^{00}, \quad id = R_{13}^{00} = R_{23}^{00} = -R_{31}^{00} = -R_{32}^{00}$			

を得る. D の固有値, 固有ベクトルは

$$\begin{aligned}
\lambda_1 &= \frac{a+c+b+\sqrt{(a+c-b)^2+8d^2}}{2} \\
\lambda_2 &= \frac{a+c+b-\sqrt{(a+c-b)^2+8d^2}}{2} \\
\lambda_3 &= a-c \\
U &= \begin{pmatrix} \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}u & \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}w & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}u & \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}w & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ -iw & iu & 0 \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{10.106}$$

ここで

$$\begin{aligned}
u &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(1 + \frac{a+c-b}{\sqrt{(a+c-b)^2+8d^2}}\right)^{\frac{1}{2}} \\
w &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(1 - \frac{a+c-b}{\sqrt{(a+c-b)^2+8d^2}}\right)^{\frac{1}{2}}
\end{aligned} \tag{10.107}$$

であり, $\text{sgn}(d)$ は d の符号である. 表 10.7 に $G(\Gamma E_g, 0, 1)_2$ 状態の軌道とその占有数を示す. ψ_1, ψ_2, ψ_3 が次の対称性を持つことに注目されたい.

$$\begin{aligned}
C_{2a} \cdot \psi_1 &= \psi_1, & tC_{2z} \cdot \psi_1 &= -\psi_1 \\
C_{2a} \cdot \psi_2 &= \psi_2, & tC_{2z} \cdot \psi_2 &= -\psi_2 \\
C_{2a} \cdot \psi_3 &= -\psi_3, & tC_{2z} \cdot \psi_3 &= -\psi_3
\end{aligned} \tag{10.108}$$

$G(\Gamma E_g, 0, 1)_2$ 状態は複素軌道を持つ状態である。時間反転対称性が破れた（固定部分群が t を含まない）状態は一般に複素軌道をもつ。表 10.4 の $G(\Gamma A_{2g}, 0, 1)$ 状態も時間反転対称性を破った状態で複素原子軌道を持つ。

10.5 Γ 点磁性状態

Γ 点での磁性状態に対応する G_0 の既約表現は

$$\check{G}_0^{(\Gamma j, 1, \nu)} = \check{P}^{(\Gamma j)} \otimes \check{S}^{(1)} \otimes \check{R}^{(\nu)} \quad (10.109)$$

である。 $pT(\mathbf{m})u(\mathbf{n}, \theta), pT(\mathbf{m})u(\mathbf{n}, \theta)t$ に対して

$$\begin{aligned} \check{G}_0^{(\Gamma j, 1, \nu)}(pT(\mathbf{m})u(\mathbf{n}, \theta)) &= d^{(j)} \otimes R(\mathbf{n}, \theta) \otimes \mathbf{1}_1 \\ \check{G}_0^{(\Gamma j, 1, \nu)}(pT(\mathbf{m})u(\mathbf{n}, \theta)t) &= (-1)^\nu d^{(j)} \otimes R(\mathbf{n}, \theta) \otimes \mathbf{1}_1 \end{aligned} \quad (10.110)$$

となり、表現次元は $|j| \times 3$ である。 W_{HF} における $\check{G}_0^{(\Gamma j, 1, \nu)}$ の基底を表 10.8 に示す。 $\check{G}_0^{(\Gamma j, 1, \nu)}$ に対応する固定部分群と固定点部分空間は第 8.4 節（その p.296）と同様な方法で求められる。その結果を表 10.9 に示す。表 10.9 の固定部分群のなかで $G(\Gamma E_g, 1, 1)_3, G(\Gamma E_g, 1, 0)_3$ 以外⁵のものは全て $L_0, A(e_3)$ を含んでいる。それらの場合 (10.62) によって $T(e_1), T(e_2) \in L_0$ 不変性より $R^{l\mu}, (l = 1, 2, 3)$ はゼロであり、(10.61) によって $u_{2z} \in A(e_3)$ 不変性より R^{00}, R^{03} だけがゼロでないことがわかる。以下表 10.9 のうち $G(\Gamma A_{1g}, 1, 1), G(\Gamma E_g, 1, 1)_2, G(\Gamma E_g, 1, 0)_2$ の場合を考察しよう。

10.5.1 $G(\Gamma A_{1g}, 1, 1)$ 状態

固定部分群は

$$G(\Gamma A_{1g}, 1, 1) = (E + tu_{2y})D_{4h}L_0A(e_3) \quad (10.111)$$

である。第 10.4.1 節の場合と同様に $C_{2z}, C_{2x}, C_{2a} \in D_{4h}$ 不変性より

$$\begin{aligned} R_{ij}^{00} &= R_{ij}^{03} = 0, \quad i \neq j \text{ のとき} \\ R_{11}^{00} &= R_{22}^{00} \\ R_{11}^{03} &= R_{22}^{03} \end{aligned} \quad (10.112)$$

が得られる。 tu_{2y} 不変性より R^{00}, R^{03} は実数である。したがって

$$R^{00} = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 \\ 0 & 0 & b \end{pmatrix}, \quad R^{03} = \begin{pmatrix} c & 0 & 0 \\ 0 & c & 0 \\ 0 & 0 & d \end{pmatrix} \quad (10.113)$$

⁵この解説では $G(\Gamma E_g, 1, 1)_3, G(\Gamma E_g, 1, 1)_3$ の場合の説明はページ数の関係で省略する

表 10.8: W_{HF} における $\check{G}_0^{(\Gamma j, 1, \nu)}$ の偶 (g) 既約表現基底

G_0 の既約表現	W_{HF} における基底
$\check{G}_0^{(\Gamma A_{1g}, 1, 1)}$	$h(\Gamma A_{1g}, 1, 1)_{1, \lambda, 1}^1 = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} (a_{1\mathbf{k}s}^\dagger a_{1\mathbf{k}s'} + a_{2\mathbf{k}s}^\dagger a_{2\mathbf{k}s'}) \sigma_{ss'}^\lambda$ $h(\Gamma A_{1g}, 0, 1)_{1, \lambda, 1}^2 = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} a_{3\mathbf{k}s}^\dagger \sigma_{ss'}^\lambda a_{3\mathbf{k}s'}$
$\check{G}_0^{(\Gamma A_{2g}, 1, 0)}$	$h(\Gamma A_{2g}, 1, 0)_{1, \lambda, 1} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} (i a_{1\mathbf{k}s}^\dagger \sigma_{ss'}^\lambda a_{2\mathbf{k}s'} - i a_{2\mathbf{k}s}^\dagger \sigma_{ss'}^\lambda a_{1\mathbf{k}s'})$
$\check{G}_0^{(\Gamma B_{1g}, 1, 1)}$	$h(\Gamma B_{1g}, 1, 1)_{1, \lambda, 1} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} (a_{1\mathbf{k}s}^\dagger \sigma_{ss'}^\lambda a_{1\mathbf{k}s'} - a_{2\mathbf{k}s}^\dagger \sigma_{ss'}^\lambda a_{2\mathbf{k}s'})$
$\check{G}_0^{(\Gamma B_{2g}, 1, 1)}$	$h(\Gamma B_{2g}, 1, 1)_{1, \lambda, 1} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} (a_{1\mathbf{k}s}^\dagger \sigma_{ss'}^\lambda a_{2\mathbf{k}s'} + a_{2\mathbf{k}s}^\dagger \sigma_{ss'}^\lambda a_{2\mathbf{k}s'})$
$\check{G}_0^{(\Gamma E_g, 1, 1)}$	$\left\{ \begin{array}{l} h(\Gamma E_g, 1, 1)_{1, \lambda, 1} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} (a_{2\mathbf{k}s}^\dagger \sigma_{ss'}^\lambda a_{3\mathbf{k}s'} + a_{3\mathbf{k}s}^\dagger \sigma_{ss'}^\lambda a_{2\mathbf{k}s'}) \\ h(\Gamma E_g, 1, 1)_{2, 1, 1} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} (a_{1\mathbf{k}s}^\dagger \sigma_{ss'}^\lambda a_{3\mathbf{k}s'} + a_{3\mathbf{k}s}^\dagger \sigma_{ss'}^\lambda a_{1\mathbf{k}s'}) \end{array} \right.$
$\check{G}_0^{(\Gamma E_g, 1, 0)}$	$\left\{ \begin{array}{l} h(\Gamma E_g, 1, 0)_{1, \lambda, 1} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} (i a_{2\mathbf{k}s}^\dagger \sigma_{ss'}^\lambda a_{3\mathbf{k}s'} - i a_{3\mathbf{k}s}^\dagger \sigma_{ss'}^\lambda a_{2\mathbf{k}s'}) \\ h(\Gamma E_g, 1, 0)_{2, \lambda, 1} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} (i a_{1\mathbf{k}s}^\dagger \sigma_{ss'}^\lambda a_{3\mathbf{k}s'} - i a_{3\mathbf{k}s}^\dagger \sigma_{ss'}^\lambda a_{1\mathbf{k}s'}) \end{array} \right.$
$\lambda = 1, 2, 3.$	

表 10.9: $\check{G}_0^{(\Gamma j, 1, \nu)}$ の固定部分群と固定点部分空間

既約表現	固定部分群	固定点部分空間
$\check{G}_0^{(\Gamma A_{1g}, 1, 1)}$	$G(\Gamma A_{1g}, 1, 1) = M(e_2)D_{4h}L_0A(e_3)$	$\{h_{1,3,1}\}_R$
$\check{G}_0^{(\Gamma A_{2g}, 1, 0)}$	$G(\Gamma A_{2g}, 1, 0) = D_{4h}(E, u_{2x})L_0A(e_3)R$	$\{h_{1,3,1}\}_R$
$\check{G}_0^{(\Gamma B_{1g}, 1, 1)}$	$G(\Gamma B_{1g}, 1, 1) = M(e_2)D_{4h}(u_{2x}, E)L_0A(e_3)$	$\{h_{1,3,1}\}_R$
$\check{G}_0^{(\Gamma B_{2g}, 1, 1)}$	$G(\Gamma B_{1g}, 1, 1) = M(e_2)D_{4h}(u_{2x}, u_{2x})L_0A(e_3)$	$\{h_{1,3,1}\}_R$
$\check{G}_0^{(\Gamma E_g, 1, 1)}$	$G(\Gamma E_g, 1, 1)_1 = M(e_2)D_{2h}(u_{2x}, E)L_0A(e_3)$	$\{h_{1,3,1}\}_R$
	$G(\Gamma E_g, 1, 1)_2 = M(e_2)D_{2ah}(u_{2x}, E)L_0A(e_3)$	$\{h_{1,3,1} + h_{2,3,1}\}_R$
	$G(\Gamma E_g, 1, 1)_3 = M(e_3)D_{4h}(u_{4z}^+, u_{2x})L_0$	$\{h_{1,1,1} + h_{2,2,1}\}_R$
$\check{G}_0^{(\Gamma E_g, 1, 0)}$	$G(\Gamma E_g, 1, 0)_1 = D_{2h}(u_{2x}, E)L_0A(e_3)R$	$\{h_{1,3,1}\}_R$
	$G(\Gamma E_g, 1, 0)_2 = D_{2ah}(u_{2x}, E)L_0A(e_3)R$	$\{h_{1,3,1} + h_{2,3,1}\}_R$
	$G(\Gamma E_g, 1, 0)_3 = D_{4h}(u_{4z}^+, u_{2x})L_0R$	$\{h_{1,1,1} + h_{2,2,1}\}_R$

$h(\Gamma A_{1g}, 1, 1)_{1,1,3}$ 等を $h_{1,1,3}$ 等と記した.

$$A(e_3) = \{U(e_3, \theta) \mid 0 \leq \theta \leq 2\pi\}$$

$$M(e_i) = (E, tu_{2i})$$

$$D_{4h}(\alpha, \beta) = \{(E, C_{4z}^+\alpha, C_{2z}\alpha^2, C_{4z}^-\alpha^{-1}) + C_{2x}\beta(E, C_{4z}^+\alpha, C_{2z}\alpha^2, C_{4z}^-\alpha^{-1})\} \times C_I$$

$$D_{2h}(\alpha, \beta) = \{(E, C_{2z}\alpha) + C_{2x}\beta(E, C_{2z}\alpha)\} \times C_I$$

$$D_{2ah}(\alpha, \beta) = \{(E, C_{2z}\alpha) + C_{2a}\beta(E, C_{2z}\alpha)\} \times C_I$$

表 10.10: $G(\Gamma A_{1g}, 1, 1)$ 状態の占有軌道とその占有数

サイト	スピン	軌道	占有数
m	$\uparrow$	$\psi_1^\uparrow = \phi_1$	$a + c$
m	$\downarrow$	$\psi_1^\downarrow = \phi_1$	$a - c$
m	$\uparrow$	$\psi_2^\uparrow = \phi_2$	$a + c$
m	$\downarrow$	$\psi_2^\downarrow = \phi_2$	$a - c$
m	$\uparrow$	$\psi_3^\uparrow = \phi_3$	$b + d$
m	$\downarrow$	$\psi_3^\downarrow = \phi_3$	$b - d$
$a = R_{11}^{00} = R_{22}^{00}, \quad b = R_{33}^{00}, \quad c = R_{11}^{03} = R_{22}^{03}, \quad d = R_{33}^{03} = R_{33}^{03}$			

となる. ここで a, b, c, d は実数で

$$\begin{aligned} a &= R_{11}^{00} = R_{22}^{00}, & b &= R_{33}^{00} \\ c &= R_{11}^{03} = R_{22}^{03}, & d &= R_{33}^{00} \end{aligned} \quad (10.114)$$

で定義される. (10.37) より $T(\mathbf{m}) \in L_0$ に対して

$$\begin{aligned} D^{\uparrow\uparrow}(\mathbf{m}) &= \mathbf{R}^{00} + \mathbf{R}^{03} = \begin{pmatrix} a+c & 0 & 0 \\ 0 & a+c & 0 \\ 0 & 0 & b+d \end{pmatrix} \\ D^{\downarrow\downarrow}(\mathbf{m}) &= \mathbf{R}^{00} - \mathbf{R}^{03} = \begin{pmatrix} a-c & 0 & 0 \\ 0 & a-c & 0 \\ 0 & 0 & b-d \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (10.115)$$

が得られる. 表 10.10 に $G(\Gamma A_{1g}, 1, 1)$ 状態の占有軌道とその占有数をまとめた. 電子のスピン ($\uparrow, \downarrow$) によって占有軌道は変わらないが, その占有数はスピンによって差があることに注意されたい.

10.5.2 $G(\Gamma E_g, 1, 1)_2$ 状態

固定部分群は

$$G(\Gamma E_g, 1, 1)_2 = (E + tu_{2y})(E + C_{2z}u_{2x})C_{2ah}L_0\mathbf{A}(\mathbf{e}_3) \quad (10.116)$$

である. ここで $C_{2ah} = \{E, C_{2a}, I, IC_{2a}\}$ である. tu_{2y} 不変性より $\mathbf{R}^{00}, \mathbf{R}^{03}$ は実行列で, (10.59)(p.550) によって C_{2a} 不変性より

$$\begin{aligned} R_{11}^{00} &= R_{22}^{00}, & R_{11}^{03} &= R_{22}^{03} \\ R_{12}^{00} &= R_{21}^{00}, & R_{12}^{03} &= R_{21}^{03} \\ R_{13}^{00} &= R_{23}^{00}, & R_{13}^{03} &= R_{23}^{03} \\ R_{31}^{00} &= R_{32}^{00}, & R_{31}^{03} &= R_{32}^{03} \end{aligned} \quad (10.117)$$

が成り立つ. (10.61)(p.551) を用いると, $C_{2z}u_{2x}$ 不変性より

$$\begin{aligned} (C_{2z}u_{2x}) \cdot \mathbf{R}^{00} &= C_{2z} \cdot (u_{2x} \cdot \mathbf{R}^{00}) = C_{2z} \cdot \mathbf{R}^{00} = \begin{pmatrix} R_{11}^{00} & R_{12}^{00} & -R_{13}^{00} \\ R_{21}^{00} & R_{22}^{00} & -R_{23}^{00} \\ -R_{31}^{00} & -R_{32}^{00} & R_{33}^{00} \end{pmatrix} = \mathbf{R}^{00} \\ (C_{2z}u_{2x}) \cdot \mathbf{R}^{03} &= C_{2z} \cdot (u_{2x} \cdot \mathbf{R}^{03}) = C_{2z} \cdot (-\mathbf{R}^{03}) = \begin{pmatrix} -R_{11}^{03} & -R_{12}^{03} & R_{13}^{03} \\ -R_{21}^{03} & -R_{22}^{03} & R_{23}^{03} \\ R_{31}^{03} & R_{32}^{03} & -R_{33}^{03} \end{pmatrix} = \mathbf{R}^{03} \end{aligned} \quad (10.118)$$

これらより

$$\mathbf{R}^{00} = \begin{pmatrix} a & c & 0 \\ c & a & 0 \\ 0 & 0 & b \end{pmatrix}, \quad \mathbf{R}^{03} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & d \\ 0 & 0 & d \\ d & d & 0 \end{pmatrix} \quad (10.119)$$

を得る. ここで a, b, c, d は実数で

$$\begin{aligned} a &= R_{11}^{00} = R_{22}^{00}, & b &= R_{33}^{00} \\ c &= R_{12}^{00} = R_{21}^{00} \\ d &= R_{13}^{03} = R_{23}^{03} = R_{31}^{03} = R_{32}^{03} \end{aligned} \quad (10.120)$$

で定義される. (10.37) より $T(\mathbf{m}) \in L_0$ に対して

$$\begin{aligned} D^{\uparrow\uparrow}(\mathbf{m}) &= \mathbf{R}^{00} + \mathbf{R}^{03} = \begin{pmatrix} a & c & d \\ c & a & d \\ d & d & b \end{pmatrix} \\ D^{\downarrow\downarrow}(\mathbf{m}) &= \mathbf{R}^{00} - \mathbf{R}^{03} = \begin{pmatrix} a & c & -d \\ c & a & -d \\ -d & -d & b \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (10.121)$$

$D^{\uparrow\uparrow}, D^{\downarrow\downarrow}$ は第 10.4.2 節と同様にして対角化される. $G(\Gamma E_g, 1, 1)_2$ 状態の占有軌道とその占有数を表 10.11 にをまとめた. 以上のスピン軌道関数は次の対称性を持つことに注意されたい.

表 10.11: $G(\Gamma E_g, 1, 1)_2$ 状態の占有軌道とその占有数

サイト	スピン	軌道	占有数
m	$\uparrow$	$\psi_1^\uparrow = \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}u\phi_1 + \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}u\phi_2 + w\phi_3$	λ_1
m	$\downarrow$	$\psi_1^\downarrow = \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}u\phi_1 + \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}u\phi_2 - w\phi_3$	λ_1
m	$\uparrow$	$\psi_2^\uparrow = \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}w\phi_1 + \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}w\phi_2 - u\phi_3$	λ_2
m	$\downarrow$	$\psi_2^\downarrow = \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}w\phi_1 + \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}w\phi_2 + u\phi_3$	λ_2
m	$\uparrow\downarrow$	$\psi_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}\phi_1 - \frac{1}{\sqrt{2}}\phi_2$	λ_3

$$u = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(1 + \frac{a+c-b}{\sqrt{(a+c-b)^2+8d^2}}\right)^{\frac{1}{2}}, \quad w = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(1 - \frac{a+c-b}{\sqrt{(a+c-b)^2+8d^2}}\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$\lambda_1 = \frac{a+c+b+\sqrt{(a+c-b)^2+8d^2}}{2}, \quad \lambda_2 = \frac{a+c+b-\sqrt{(a+c-b)^2+8d^2}}{2}, \quad \lambda_3 = a - c$$

$$a = R_{11}^{00} = R_{22}^{00}, \quad b = R_{33}^{00}, \quad c = R_{12}^{00} = R_{21}^{00}, \quad d = R_{13}^{00} = R_{23}^{00} = R_{31}^{00} = R_{32}^{00}$$

$$\begin{aligned}
C_{2a} \cdot \psi_1^\uparrow | \uparrow \rangle &= \psi_1^\uparrow | \uparrow \rangle, & C_{2z}u_{2x} \cdot \psi_1^\uparrow | \uparrow \rangle &= i\psi_1^\downarrow | \downarrow \rangle \\
C_{2a} \cdot \psi_1^\downarrow | \downarrow \rangle &= \psi_1^\downarrow | \downarrow \rangle, & C_{2z}u_{2x} \cdot \psi_1^\downarrow | \downarrow \rangle &= i\psi_1^\uparrow | \uparrow \rangle \\
C_{2a} \cdot \psi_2^\uparrow | \uparrow \rangle &= \psi_2^\uparrow | \uparrow \rangle, & C_{2z}u_{2x} \cdot \psi_2^\uparrow | \uparrow \rangle &= i\psi_2^\downarrow | \downarrow \rangle \\
C_{2a} \cdot \psi_2^\downarrow | \downarrow \rangle &= \psi_2^\downarrow | \downarrow \rangle, & C_{2z}u_{2x} \cdot \psi_2^\downarrow | \downarrow \rangle &= i\psi_2^\uparrow | \uparrow \rangle \\
C_{2a} \cdot \psi_3 | \uparrow \rangle &= -\psi_3 | \uparrow \rangle, & C_{2z}u_{2x} \cdot \psi_3 | \uparrow \rangle &= i\psi_3 | \downarrow \rangle \\
C_{2a} \cdot \psi_3 | \downarrow \rangle &= -\psi_3 | \downarrow \rangle, & C_{2z}u_{2x} \cdot \psi_3 | \downarrow \rangle &= i\psi_3 | \uparrow \rangle
\end{aligned} \tag{10.122}$$

および

$$tu_{2y} \cdot \psi_i^s | s \rangle = \psi_i^s | s \rangle \tag{10.123}$$

ここで $|s\rangle$, ($s = \uparrow, \downarrow$) はスピン関数である。表 10.11 で興味のある点は、占有数 λ_1, λ_2 に対応する軌道関数がスピンの向き ($\uparrow, \downarrow$) によって異なることである。これは原子内 **DODS**(Different Orbital for Different Spin) 状態と考えられる。

10.5.3 $G(\Gamma E_g, 1, 0)_2$ 状態

固定部分群は

$$G(\Gamma E_g, 1, 0)_2 = (E + C_{2z}u_{2x})C_{2ah}L_0A(e_3)R \tag{10.124}$$

である. $G(\Gamma E_g, 1, 1)_2$ 状態との違いは tu_{2y} が t になるだけである. 従って (10.62)(p.551) より $\mathbf{R}^{00}$ は実行列, $\mathbf{R}^{03}$ は純虚数値行列である. (10.119)(p.565) と少し異なる

$$\mathbf{R}^{00} = \begin{pmatrix} a & c & 0 \\ c & a & 0 \\ 0 & 0 & b \end{pmatrix}, \quad \mathbf{R}^{03} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & id \\ 0 & 0 & id \\ -id & -id & 0 \end{pmatrix} \quad (10.125)$$

を得る. ここで a, b, c, d は実数で

$$\begin{aligned} a &= R_{11}^{00} = R_{22}^{00}, \quad b = R_{33}^{00} \\ c &= R_{12}^{00} = R_{21}^{00} \\ id &= R_{13}^{03} = R_{23}^{03} = -R_{31}^{03} = -R_{32}^{03} \end{aligned} \quad (10.126)$$

で定義される. (10.37) より $T(\mathbf{m}) \in L_0$ に対して

$$\begin{aligned} D^{\uparrow\uparrow}(\mathbf{m}) &= \mathbf{R}^{00} + \mathbf{R}^{03} = \begin{pmatrix} a & c & id \\ c & a & id \\ -id & -id & b \end{pmatrix} \\ D^{\downarrow\downarrow} &= \mathbf{R}^{00} - \mathbf{R}^{03} = \begin{pmatrix} a & c & -id \\ c & a & -id \\ -id & -id & b \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (10.127)$$

を得る. これらを対角化して表 10.12 を得る. この場合のスピン軌道関数は (10.122)(p.566) を満たし

$$\begin{aligned} t \cdot \psi_i^{\uparrow} | \uparrow \rangle &= -\psi_i^{\downarrow} | \downarrow \rangle \\ t \cdot \psi_i^{\downarrow} | \downarrow \rangle &= \psi_i^{\uparrow} | \uparrow \rangle \end{aligned} \quad (10.128)$$

が成り立つ.

10.6 M 点非磁性状態

M 点での非磁性状態に対応する G_0 の既約表現は

$$\check{G}_0^{(Mj,0,\nu)} = \check{\mathbf{P}}^{(Mj)} \otimes \check{\mathbf{S}}^{(0)} \otimes \mathbf{R}^{(\nu)} \quad (10.129)$$

である. $pT(\mathbf{m})u(\mathbf{n},\theta), pT(\mathbf{m})u(\mathbf{n},\theta)t$ に対して

$$\begin{aligned} \check{G}_0^{(Mj,0,\nu)}(pT(\mathbf{m})u(\mathbf{n},\theta)) &= e^{-i\mathbf{Q}_1 \cdot \mathbf{m}} d^{(j)}(p) \otimes \mathbf{1}_1 \otimes \mathbf{1}_1 \\ \check{G}_0^{(Mj,0,\nu)}(pT(\mathbf{m})u(\mathbf{n},\theta)t) &= (-1)^\nu e^{-i\mathbf{Q}_1 \cdot \mathbf{m}} d^{(j)}(p) \otimes \mathbf{1}_1 \otimes \mathbf{1}_1 \end{aligned} \quad (10.130)$$

である. W_{HF} における $\check{G}_0^{(Mj,0,\nu)}$ の基底を表 10.13 に示す. 表 10.14 に各表現に対応する固定部分群と固定点部分空間を記した. M 点非磁性状態の固定部分群はすべて

$L_1 = (\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_2 - \mathbf{e}_1), \mathbf{S}$ を含む. (10.62)(p.551) を用いると $T(\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2) \in L_1$ 不変性より $\mathbf{R}^{20} = \mathbf{R}^{30} = 0$ がわかる. $R^{l\mu}$ でゼロでないのは $\mathbf{R}^{00}, \mathbf{R}^{10}$ の場合だけである. 以下表 10.14 に挙げた固定部分群のうち $G(\text{MA}_{2g}, 0, 1), G(\text{MB}_{1g}, 0, 0)_2, G(\text{MB}_{2g}, 0, 0)_2$ 場合を考察しよう.

表 10.12: $G(\Gamma E_g, 1, 0)_2$ 状態の占有軌道とその占有数

サイト	スピン	軌道	占有数
m	$\uparrow$	$\psi_1^\uparrow = \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}u\phi_1 + \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}u\phi_2 - iw\phi_3$	λ_1
m	$\downarrow$	$\psi_1^\downarrow = \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}u\phi_1 + \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}u\phi_2 + iw\phi_3$	λ_1
m	$\uparrow$	$\psi_2^\uparrow = \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}w\phi_1 + \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}w\phi_2 + iu\phi_3$	λ_2
m	$\downarrow$	$\psi_2^\downarrow = \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}w\phi_1 + \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}w\phi_2 - iu\phi_3$	λ_2
m	$\uparrow\downarrow$	$\psi_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}\phi_1 - \frac{1}{\sqrt{2}}\phi_2$	λ_3

$$u = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(1 + \frac{a+c-b}{\sqrt{(a+c-b)^2+8d^2}}\right)^{\frac{1}{2}}, \quad w = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(1 - \frac{a+c-b}{\sqrt{(a+c-b)^2+8d^2}}\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$\lambda_1 = \frac{a+c+b+\sqrt{(a+c-b)^2+8d^2}}{2}, \quad \lambda_2 = \frac{a+c+b-\sqrt{(a+c-b)^2+8d^2}}{2}, \quad \lambda_3 = a - c$$

$$a = R_{11}^{00} = R_{22}^{00}, \quad b = R_{33}^{00}, \quad c = R_{12}^{00} = R_{21}^{00}, \quad id = R_{13}^{03} = R_{23}^{03} = -R_{31}^{03} = -R_{32}^{03}$$

10.6.1 $G(\text{MA}_{2g}, 0, 1)$ 状態

$G(\text{MA}_{2g}, 0, 1)$ 状態の固定部分群は

$$G(\text{MA}_{2g}, 0, 1) = (E + tC_{2x})(E + T(e_1)C_{2x})C_{4h}L_1\mathbf{SR} \quad (10.131)$$

である. $C_{4z}^+ \in G(\text{MA}_{2g}, 0, 1)$ であり, (10.44)(p.548) に対応する $D(C_{4z}^+), D(C_{4z}^-)$ は表 10.1(p.541) より

$$D(C_{4z}^+) = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad D(C_{4z}^-) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (10.132)$$

となる. 従って $l = 0, 1$ に対して C_{4z}^+ 不変性と (10.57) より, $C_{4z}^- \cdot l \doteq l$ を考慮して

$$\begin{aligned} C_{4z}^+ \cdot \mathbf{R}^{l\mu} &= D((C_{4z}^+))\mathbf{R}^{l\mu}D((C_{4z}^+))^\dagger \\ &= \begin{pmatrix} R_{22}^{l\mu} & -R_{21}^{l\mu} & R_{23}^{l\mu} \\ -R_{12}^{l\mu} & R_{11}^{l\mu} & -R_{13}^{l\mu} \\ R_{32}^{l\mu} & -R_{31}^{l\mu} & R_{33}^{l\mu} \end{pmatrix} = \mathbf{R}^{l\mu} \end{aligned} \quad (10.133)$$

を得る. 従って

$$\begin{aligned} R_{11}^{l\mu} &= R_{22}^{l\mu}, \quad R_{12}^{l\mu} = -R_{21}^{l\mu}, \quad R_{13}^{l\mu} = R_{23}^{l\mu} \\ R_{23}^{l\mu} &= -R_{13}^{l\mu}, \quad R_{31}^{l\mu} = R_{32}^{l\mu}, \quad R_{32}^{l\mu} = -R_{31}^{l\mu} \end{aligned} \quad (10.134)$$

表 10.13: W_{HF} における $\check{G}_0^{(Mj,0,\nu)}$ の偶 (g) 既約表現基底

G_0 の既約表現	W_{HF} における基底
$\check{G}_0^{(MA_{1g},0,0)}$	$h(MA_{1g}, 0, 0)_{1,1,1}^1 = \sum_{\mathbf{k}} \sum_s (a_{1(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_1)s}^\dagger a_{1\mathbf{k}s} + a_{2(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_1)s}^\dagger a_{2\mathbf{k}s})$ $h(MA_{1g}, 0, 0)_{1,1,1}^2 = \sum_{\mathbf{k}} \sum_s a_{3(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_1)s}^\dagger a_{3\mathbf{k}s}$
$\check{G}_0^{(MA_{2g},0,1)}$	$h(MA_{2g}, 0, 1)_{1,1,1} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_s (ia_{1(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_1)s}^\dagger a_{2\mathbf{k}s} - ia_{2\mathbf{k}s}^\dagger a_{1(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_1)s})$
$\check{G}_0^{(MB_{1g},0,0)}$	$h(MB_{1g}, 0, 0)_{1,1,1} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_s (a_{1(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_1)s}^\dagger a_{\mathbf{k}1s} - a_{2(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_1)s}^\dagger a_{2\mathbf{k}s})$
$\check{G}_0^{(MB_{2g},0,0)}$	$h(MB_{2g}, 0, 0)_{1,1,1} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_s (a_{1(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_1)1s}^\dagger a_{2\mathbf{k}s} + a_{2\mathbf{k}s}^\dagger a_{1(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_1)s})$
$\check{G}_0^{(ME_g,0,0)}$	$\begin{cases} h(ME_g, 0, 0)_{1,1,1} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_s (a_{2(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_1)s}^\dagger a_{3\mathbf{k}s} + a_{3\mathbf{k}s}^\dagger a_{2(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_1)s}) \\ h(ME_g, 0, 0)_{2,1,1} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_s (a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_1)1s}^\dagger a_{3\mathbf{k}s} + a_{3\mathbf{k}s}^\dagger a_{1(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_1)s}) \end{cases}$
$\check{G}_0^{(ME_g,0,1)}$	$\begin{cases} h(ME_g, 0, 1)_{1,1,1} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_s (ia_{2(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_1)s}^\dagger a_{3\mathbf{k}s} - ia_{3\mathbf{k}s}^\dagger a_{2(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_1)s}) \\ h(ME_g, 0, 1)_{2,1,1} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_s (ia_{1(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_1)s}^\dagger a_{3\mathbf{k}s} - ia_{3\mathbf{k}s}^\dagger a_{1(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_1)s}) \end{cases}$

これより

$$R_{13}^{l\mu} = R_{23}^{l\mu} = R_{31}^{l\mu} = R_{32}^{l\mu} = 0 \quad (10.135)$$

を得る. $T(e_1)C_{2x}$ 不変性と (10.59), (10.62) より

$$T(e_1)C_{2x} \cdot \mathbf{R}^{00} = \begin{pmatrix} R_{11}^{00} & -R_{12}^{00} & 0 \\ -R_{21}^{00} & R_{22}^{00} & 0 \\ 0 & 0 & R_{33}^{00} \end{pmatrix} = \mathbf{R}^{00} \quad (10.136)$$

$$T(e_1)C_{2x} \cdot \mathbf{R}^{10} = \begin{pmatrix} -R_{11}^{10} & R_{12}^{10} & 0 \\ R_{21}^{10} & -R_{22}^{10} & 0 \\ 0 & 0 & -R_{33}^{10} \end{pmatrix} = \mathbf{R}^{10}$$

を得る. 以上より

$$\mathbf{R}^{00} = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 \\ 0 & 0 & b \end{pmatrix}, \quad \mathbf{R}^{10} = \begin{pmatrix} 0 & ic & 0 \\ -ic & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (10.137)$$

を得る. ここで実数 a, b, c は

$$a = R_{11}^{00} = R_{22}^{00}, \quad b = R_{33}^{00}, \quad ic = R_{12}^{10} = -R_{21}^{10} \quad (10.138)$$

表 10.14: $\check{G}_0^{(Mj,0,\nu)}$ の固定部分群と固定点部分空間

既約表現	固定部分群	固定点部分空間
$\check{G}_0^{(MA_{1g},0,0)}$	$G(MA_{1g}, 0, 0) = D_{4h}L_1SR$	$\{h_{1,1,1}\}_R$
$\check{G}_0^{(MA_{2g},0,1)}$	$G(MA_{2g}, 0, 1) = M_xT_x(e_1)C_{4h}L_1S$	$\{h_{1,1,1}\}_R$
$\check{G}_0^{(MB_{1g},0,0)}$	$G(MB_{1g}, 0, 0) = T_a(e_1)D_{2h}L_1SR$	$\{h_{1,1,1}\}_R$
$\check{G}_0^{(MB_{2g},0,0)}$	$G(MB_{2g}, 0, 0) = T_x(e_1)D_{2ah}L_1SR$	$\{h_{1,1,1}\}_R$
$\check{G}_0^{M(E_g,0,0)}$	$G(ME_g, 0, 0)_1 = T_z(e_1)C_{2xh}L_1SR$	$\{h_{1,1,1}\}_R$
	$G(ME_g, 0, 0)_2 = T_z(e_1)C_{2ah}L_1SR$	$\{h_{1,1,1} + h_{2,1,1}\}_R$
$\check{G}_0^{(ME_g,0,1)}$	$G(ME_g, 0, 1)_1 = M_zT_z(e_1)C_{2xh}L_1S$	$\{h_{1,1,1}\}_R$
	$G(ME_g, 0, 1)_2 = M_zT_z(e_1)C_{2ah}L_1S$	$\{h_{1,1,1} + h_{2,1,1}\}_R$

基底の $h(MA_{1g}, 0, 0)_{1,1,1}$ 等の $(MA_{1g}, 0, 0)$ 等は省略した.

$L_1 = L(e_1 + e_2, e_2 - e_1)$

$D_{2ah} = \{E, C_{2z}, C_{2a}, C_{2b}, I, IC_{2z}, IC_{2a}, IC_{2b}\}$

$C_{2xh} = \{E, C_{2x}, I, IC_{2x}\}$

$C_{2ah} = \{E, C_{2a}, I, IC_{2a}\}$

$M_i = (E, tC_{2i})$

$T_i(e_1) = (E, C_{2i}T(e_1))$

で定義される. (10.37) より $D(m) = D^{\uparrow\uparrow}(m) = D^{\downarrow\downarrow}(m)$ は $T(m) \in L_1$ に対して

$$\begin{aligned}
 D(0) = D(m) = R^{00} + R^{10} &= \begin{pmatrix} a & ic & 0 \\ -ic & a & 0 \\ 0 & 0 & b \end{pmatrix} \\
 D(e_1) = D(e_1 + m) = R^{00} - R^{10} &= \begin{pmatrix} a & -ic & 0 \\ ic & a & 0 \\ 0 & 0 & b \end{pmatrix}
 \end{aligned} \tag{10.139}$$

表 10.15 に $G(MA_{2g}, 0, 1)$ 状態の占有軌道とその占有数を記す. 表 10.15 は ϕ_3 軌道は一様に占有され複素軌道 $(\phi_1 - i\phi_2)$ と $(\phi_1 + i\phi_2)$ が交替して占有される軌道秩序状態を表している.

表 10.15: $G(MA_{2g}, 0, 1)$ 状態の占有軌道とその占有数

サイト	スピン	軌道	占有数
m	$\uparrow\downarrow$	$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 - i\phi_2)$	$a + c$
m	$\uparrow\downarrow$	$\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 + i\phi_2)$	$a - c$
m	$\uparrow\downarrow$	$\psi_3 = \phi_3$	b
$e_1 + m$	$\uparrow\downarrow$	$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 + i\phi_2)$	$a + c$
$e_1 + m$	$\uparrow\downarrow$	$\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 - i\phi_2)$	$a - c$
$e_1 + m$	$\uparrow\downarrow$	$\psi_3 = \phi_3$	b
$T(m) \in L_1 = L(e_1 + e_2, e_2 - e_1)$			
$a = R_{11}^{00} = R_{22}^{00}, \quad b = R_{33}^{00}, \quad ic = R_{12}^{10} = -R_{21}^{10}$			

10.6.2 $G(MB_{1g}, 0, 0)$ 状態

$G(MB_{1g}, 0, 0)$ 状態の固定部分群は

$$G(MB_{1g}, 0, 0) = (E + T(e_1)C_{2a})D_{2h}L(e_1 + e_2, e_2 - e_1)SR \quad (10.140)$$

である。 $C_{2x}, C_{2z}D_{2h}$ 不変性と (10.59) より R^{00}, R^{10} は対角行列である。 $T(e_1)C_{2a}$ 不変性と (10.62) を考慮すると

$$\begin{aligned} T(e_1)C_{2a} \cdot R^{00} &= \begin{pmatrix} R_{22}^{00} & 0 & 0 \\ 0 & R_{11}^{00} & 0 \\ 0 & 0 & R_{33}^{00} \end{pmatrix} = R^{00} \\ T(e_1)C_{2a} \cdot R^{10} &= \begin{pmatrix} -R_{22}^{00} & 0 & 0 \\ 0 & -R_{11}^{00} & 0 \\ 0 & 0 & -R_{33}^{00} \end{pmatrix} = R^{10} \end{aligned} \quad (10.141)$$

を得る。これより

$$R^{00} = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 \\ 0 & 0 & b \end{pmatrix}, \quad R^{10} = \begin{pmatrix} c & 0 & 0 \\ 0 & -c & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (10.142)$$

表 10.16: $G(MB_{1g}, 0, 0)$ 状態の占有軌道とその占有数

サイト	スピン	軌道	占有数
m	$\uparrow\downarrow$	$\psi_1 = \phi_1$	$a + c$
m	$\uparrow\downarrow$	$\psi_2 = \phi_2$	$a - c$
m	$\uparrow\downarrow$	$\psi_3 = \phi_3$	b
$e_1 + m$	$\uparrow\downarrow$	$\psi_1 = \phi_1$	$a - c$
$e_1 + m$	$\uparrow\downarrow$	$\psi_2 = \phi_2$	$a + c$
$e_1 + m$	$\uparrow\downarrow$	$\psi_3 = \phi_3$	b
$T(m) \in L_1 = L(e_1 + e_2, e_2 - e_1)$			
$a = R_{11}^{00} = R_{22}^{00}, \quad b = R_{33}^{00}, \quad c = R_{11}^{10} = -R_{22}^{10}$			

を得る. (10.37) より $D(m) = D^{\uparrow\uparrow}(m) = D^{\downarrow\downarrow}(m)$ は $T(m) \in L_1 = L(e_1, e_2)$ に対して

$$\begin{aligned}
 D(m) &= R^{00} + R^{10} = \begin{pmatrix} a+c & 0 & 0 \\ 0 & a-c & 0 \\ 0 & 0 & b \end{pmatrix} \\
 D(m) &= R^{00} - R^{10} = \begin{pmatrix} a-c & 0 & 0 \\ 0 & a+c & 0 \\ 0 & 0 & b \end{pmatrix}
 \end{aligned} \tag{10.143}$$

を得る. 表 10.16 に $G(MB_{1g}, 0, 0)$ 状態の占有軌道とその占有数を記す. 占有数 $a+c$ を持つ軌道を配列すると図 10.1(p.539) の様になる.

10.6.3 $G(MB_{2g}, 0, 0)$ 状態

$G(MB_{2g}, 0, 0)$ 状態の固定部分群は

$$G(MB_{1g}, 0, 0) = (E + T(e_1)C_{2x})D_{2ah}L(e_1 + e_2, e_2 - e_1)SR \tag{10.144}$$

である. C_{2z}, C_{2a} 不変性と (10.59) より $R^{l0}(l=0, 1)$ は

$$R^{l0} = \begin{pmatrix} R_{11}^{l0} & R_{12}^{l0} & 0 \\ R_{12}^{l0} & R_{11}^{l0} & 0 \\ 0 & 0 & R_{33}^{l0} \end{pmatrix} \tag{10.145}$$

と書ける事がわかる. $T(e_1)C_{2x}$ 不変性と (10.62) より

$$\begin{aligned} T(e_1)C_{2x} \cdot \mathbf{R}^{00} &= \begin{pmatrix} R_{11}^{00} & -R_{12}^{00} & 0 \\ -R_{12}^{00} & R_{11}^{00} & 0 \\ 0 & 0 & R_{33}^{00} \end{pmatrix} = \mathbf{R}^{00} \\ T(e_1)C_{2x} \cdot \mathbf{R}^{10} &= \begin{pmatrix} -R_{11}^{10} & R_{12}^{10} & 0 \\ R_{12}^{10} & -R_{11}^{10} & 0 \\ 0 & 0 & -R_{33}^{10} \end{pmatrix} = \mathbf{R}^{10} \end{aligned} \quad (10.146)$$

を得る. t 不変性より $\mathbf{R}^{00}, \mathbf{R}^{10}$ は実行列になり

$$\mathbf{R}^{00} = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 \\ 0 & 0 & b \end{pmatrix}, \quad \mathbf{R}^{10} = \begin{pmatrix} 0 & c & 0 \\ c & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (10.147)$$

を得る. ここで a, b, c は実数であり

$$a = R_{11}^{00} = R_{22}^{00}, \quad b = R_{33}^{00}, \quad c = R_{12}^{10} = R_{21}^{10} \quad (10.148)$$

で定義される. (10.37) より $D(\mathbf{m}) = D^{\uparrow}(\mathbf{m}) = D^{\downarrow}(\mathbf{m})$ は $T(\mathbf{m}) \in L_1 = L(e_1, e_2)$ に対して

$$\begin{aligned} D(\mathbf{m}) &= \mathbf{R}^{00} + \mathbf{R}^{10} = \begin{pmatrix} a & c & 0 \\ c & a & 0 \\ 0 & 0 & b \end{pmatrix} \\ D(\mathbf{m}) &= \mathbf{R}^{00} - \mathbf{R}^{10} = \begin{pmatrix} a & -c & 0 \\ -c & a & 0 \\ 0 & 0 & b \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (10.149)$$

を得る. 表 10.17 に $G(\text{MB}_{2g}, 0, 0)$ 状態の占有軌道とその占有数を記す. 占有数 $a + c$ を持つ軌道を配列すると図 10.2(p.539) の様になる.

10.7 M 点磁性状態

M 点での磁性状態に対応する G_0 の既約表現は

$$\check{G}_0^{(Mj, 1, \nu)} = \check{P}^{(Mj)} \otimes \check{S}^{(1)} \otimes \mathbf{R}^{(\nu)} \quad (10.150)$$

である. $pT(\mathbf{m})u(\mathbf{n}, \theta), pT(\mathbf{m})u(\mathbf{n}, \theta)t$ に対して

$$\begin{aligned} \check{G}_0^{(Mj, 1, \nu)}(pT(\mathbf{m})u(\mathbf{n}, \theta)) &= e^{-i\mathbf{Q}_1 \cdot \mathbf{m}} d^{(j)}(p) \otimes R(\mathbf{n}, \theta) \otimes \mathbf{1}_1 \\ \check{G}_0^{(Mj, 1, \nu)}(pT(\mathbf{m})u(\mathbf{n}, \theta)t) &= (-1)^\nu e^{-i\mathbf{Q}_1 \cdot \mathbf{m}} d^{(j)}(p) \otimes R(\mathbf{n}, \theta) \otimes \mathbf{1}_1 \end{aligned} \quad (10.151)$$

W_{HF} における $\check{G}_0^{(Mj, 1, \nu)}$ の基底を表 10.18 に示す. $\check{G}_0^{(Mj, 1, \nu)}$ に対応する固定部分群と固定点部分空間を表 10.19(p.576) に示す. 表 10.19 の固定部分群のなかで $G(\text{ME}_g, 1, 1)_3, G(\text{ME}_g, 1, 1)_3$ 以外のものは全て $L_1, A(e_3)$ を含んでいる. $u_{2z} \in A(e_3)$ 対称性があるので (10.61)(p.551) より, $\mathbf{R}^\mu$ でゼロでないのは $\mathbf{R}^{00}, \mathbf{R}^{10}, \mathbf{R}^{03}, \mathbf{R}^{13}$ である. 以下例として $G(\text{MB}_{1g}, 1, 1), G(\text{MB}_{2g}, 1, 1)$ の場合を考察する.

表 10.17: $G(MB_{2g}, 0, 0)$ 状態の占有軌道とその占有数

サイト	スピン	軌道	占有数
m	$\uparrow\downarrow$	$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 + \phi_2)$	$a + c$
m	$\uparrow\downarrow$	$\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 - \phi_2)$	$a - c$
m	$\uparrow\downarrow$	$\psi_3 = \phi_3$	b
$e_1 + m$	$\uparrow\downarrow$	$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 - \phi_2)$	$a + c$
$e_1 + m$	$\uparrow\downarrow$	$\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 + \phi_2)$	$a - c$
$e_1 + m$	$\uparrow\downarrow$	$\psi_3 = \phi_3$	b
$T(m) \in L_1 = L(e_1 + e_2, e_2 - e_1)$			
$a = R_{11}^{00} = R_{22}^{00}, \quad b = R_{33}^{00}, \quad c = R_{12}^{10} = R_{21}^{10}$			

10.7.1 $G(MB_{1g}, 1, 1)$ 状態

$G(MB_{1g}, 1, 1)$ 状態の固定部分群は

$$G(MB_{1g}, 1, 1)_2 = (E + tu_{2y})(E + T(e_1)C_{2a})(E + C_{2a}u_{2x})D_{2h}L_1A(e_3) \quad (10.152)$$

である. $C_{2z}, C_{2x} \in D_{2h}$ 不変性と (10.59) を使うと

$$R_{ij}^{00} = R_{ij}^{03} = R_{ij}^{10} = R_{ij}^{13} = 0, \quad i \neq j \text{ の場合} \quad (10.153)$$

を得る. $T(e_1)C_{2a}$ 不変性と

$$\begin{aligned} T(e_1)C_{2a} \cdot R^{00} &= \begin{pmatrix} R_{22}^{00} & 0 & 0 \\ 0 & R_{11}^{00} & 0 \\ 0 & 0 & R_{33}^{00} \end{pmatrix}, & T(e_1)C_{2a} \cdot R^{03} &= \begin{pmatrix} R_{22}^{03} & 0 & 0 \\ 0 & R_{11}^{03} & 0 \\ 0 & 0 & R_{33}^{03} \end{pmatrix} \\ T(e_1)C_{2a} \cdot R^{10} &= -\begin{pmatrix} R_{22}^{10} & 0 & 0 \\ 0 & R_{11}^{10} & 0 \\ 0 & 0 & R_{33}^{10} \end{pmatrix}, & T(e_1)C_{2a} \cdot R^{13} &= -\begin{pmatrix} R_{22}^{13} & 0 & 0 \\ 0 & R_{11}^{13} & 0 \\ 0 & 0 & R_{33}^{13} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (10.154)$$

を考慮すると

$$\begin{aligned} R_{11}^{00} &= R_{22}^{00}, \quad R_{11}^{03} = R_{22}^{03} \\ R_{11}^{10} &= -R_{22}^{10}, \quad R_{33}^{10} = 0, \quad R_{11}^{13} = -R_{22}^{13}, \quad R_{33}^{13} = 0 \end{aligned} \quad (10.155)$$

を得る. $C_{2a}u_{2x}$ 不変性と

$$C_{2a}u_{2x} \cdot R^{10} = \begin{pmatrix} R_{22}^{10} & 0 & 0 \\ 0 & R_{11}^{10} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad C_{2a}u_{2x} \cdot R^{03} = -\begin{pmatrix} R_{22}^{03} & 0 & 0 \\ 0 & R_{11}^{03} & 0 \\ 0 & 0 & R_{33}^{03} \end{pmatrix} \quad (10.156)$$

表 10.18: W_{HF} における $\check{G}_0^{(Mj,1,\nu)}$ の偶 (g) 既約表現基底

G_0 の既約表現	W_{HF} における基底
$\check{G}_0^{(MA_{1g},1,1)}$	$h(MA_{1g}, 1, 1)_{1,\lambda,1}^1 = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} (a_{1(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_1)s}^\dagger a_{1\mathbf{k}s'} + a_{2(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_1)s}^\dagger a_{2\mathbf{k}s'}) \sigma_{ss'}^\lambda$ $h(MA_{1g}, 0, 1)_{1,\lambda,1}^2 = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} a_{3(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_1)s}^\dagger \sigma_{ss'}^\lambda a_{3\mathbf{k}s'}$
$\check{G}_0^{(MA_{2g},1,0)}$	$h(MA_{2g}, 1, 0)_{1,\lambda,1} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} (ia_{1(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_1)s}^\dagger \sigma_{ss'}^\lambda a_{2\mathbf{k}s'} - ia_{2\mathbf{k}s}^\dagger \sigma_{ss'}^\lambda a_{1(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_1)s'})$
$\check{G}_0^{(MB_{1g},1,1)}$	$h(MB_{1g}, 1, 1)_{1,\lambda,1} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} (a_{1(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_1)s}^\dagger \sigma_{ss'}^\lambda a_{1\mathbf{k}s'} - a_{2(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_1)s}^\dagger \sigma_{ss'}^\lambda a_{2\mathbf{k}s'})$
$\check{G}_0^{(MB_{2g},1,1)}$	$h(MB_{2g}, 1, 1)_{1,\lambda,1} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} (a_{1(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_1)s}^\dagger \sigma_{ss'}^\lambda a_{2\mathbf{k}s'} + a_{2\mathbf{k}s}^\dagger \sigma_{ss'}^\lambda a_{1(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_1)s'})$
$\check{G}_0^{(ME_g,1,1)}$	$\begin{cases} h(ME_g, 1, 1)_{1,\lambda,1} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} (a_{2(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_1)s}^\dagger \sigma_{ss'}^\lambda a_{3\mathbf{k}s'} + a_{3\mathbf{k}s}^\dagger \sigma_{ss'}^\lambda a_{2(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_1)s'}) \\ h(ME_g, 1, 1)_{2,\lambda,1} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} (a_{1(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_1)s}^\dagger \sigma_{ss'}^\lambda a_{3\mathbf{k}s'} + a_{3\mathbf{k}s}^\dagger \sigma_{ss'}^\lambda a_{1(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_1)s'}) \end{cases}$
$\check{G}_0^{(ME_g,1,0)}$	$\begin{cases} h(ME_g, 1, 0)_{1,\lambda,1} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} (ia_{2(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_1)s}^\dagger \sigma_{ss'}^\lambda a_{3\mathbf{k}s'} - ia_{3\mathbf{k}s}^\dagger \sigma_{ss'}^\lambda a_{2(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_1)s'}) \\ h(ME_g, 1, 0)_{2,\lambda,1} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} (ia_{1(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_1)s}^\dagger \sigma_{ss'}^\lambda a_{3\mathbf{k}s'} - ia_{3\mathbf{k}s}^\dagger \sigma_{ss'}^\lambda a_{1(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_1)s'}) \end{cases}$

を考慮すると

$$R_{11}^{10} = R_{22}^{10}, \quad R_{11}^{03} = -R_{22}^{03} \quad (10.157)$$

を得る. (10.155) と合わせると

$$\mathbf{R}^{10} = \mathbf{R}^{03} = 0 \quad (10.158)$$

を得る. tu_{2y} 不変性と (10.62) より $\mathbf{R}^{l\mu}$ は実行列となりゼロでない $\mathbf{R}^{l\mu}$ は

$$\mathbf{R}^{00} = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 \\ 0 & 0 & b \end{pmatrix}, \quad \mathbf{R}^{13} = \begin{pmatrix} c & 0 & 0 \\ 0 & -c & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (10.159)$$

である. ここで実数 a, b, c は

$$a = R_{11}^{00} = R_{22}^{00}, \quad b = R_{33}^{00}, \quad c = R_{11}^{13} = -R_{22}^{13} \quad (10.160)$$

表 10.19: $\check{G}_0^{(Mj,1,\nu)}$ の固定部分群と固定点部分空間

既約表現	固定部分群	固定点部分空間
$\check{G}_0^{(MA_{1g},1,1)}$	$G(MA_{1g}, 1, 1) = M(e_2)D_{4h}L_1A(e_3)$	$\{h_{1,3,1}\}_{\mathbf{R}}$
$\check{G}_0^{(MA_{2g},1,0)}$	$G(MA_{2g}, 1, 0) = T_x(e_1)D_{4h}(E, u_{2x})L_1A(e_3)\mathbf{R}$	$\{h_{1,3,1}\}_{\mathbf{R}}$
$\check{G}_0^{(MB_{1g},1,1)}$	$G(MB_{1g}, 1, 1) = M(e_2)T_a(e_1)D_{4h}(u_{2x}, E)L_1A(e_3)$	$\{h_{1,3,1}\}_{\mathbf{R}}$
$\check{G}_0^{(MB_{2g},1,1)}$	$G(MB_{2g}, 1, 1) = M(e_2)T_x(e_1)D_{4h}(u_{2x}, u_{2x})L_1A(e_3)$	$\{h_{1,3,1}\}_{\mathbf{R}}$
$\check{G}_0^{M(E_g,1,1)}$	$G(ME_g, 1, 1)_1 = M(e_2)T_y(e_1)D_{2h}(u_{2x}, E)L_1A(e_3)$	$\{h_{1,3,1}\}_{\mathbf{R}}$
$\check{G}_0^{M(E_g,1,1)}$	$G(ME_g, 1, 1)_2 = M(e_2)T_b(e_1)D_{2ah}(u_{2x}, E)L_1A(e_3)$	$\{h_{1,3,1} + h_{2,3,1}\}_{\mathbf{R}}$
$\check{G}_0^{M(E_g,1,1)}$	$G(ME_g, 1, 1)_3 = M(e_3)T_z(e_1)D_{4h}(u_4^+, u_{2x})L_1$	$\{h_{1,1,1} + h_{2,2,1}\}_{\mathbf{R}}$
$\check{G}_0^{M(E_g,1,0)}$	$G(ME_g, 1, 0)_1 = T_y(e_1)D_{2h}(u_{2x}, E)L_1A(e_3)\mathbf{R}$	$\{h_{1,3,1}\}_{\mathbf{R}}$
	$G(ME_g, 1, 0)_2 = T_b(e_1)D_{2ah}(u_{2x}, E)L_1A(e_3)\mathbf{R}$	$\{h_{1,3,1} + h_{2,3,1}\}_{\mathbf{R}}$
	$G(ME_g, 1, 0)_3 = T_z(e_1)D_{4h}(u_4^+, u_{2x})L_1\mathbf{R}$	$\{h_{1,1,1} + h_{2,2,1}\}_{\mathbf{R}}$
基底の $h(MA_{1g}, 0, 0)_{1,1,1}$ 等の $(MA_{1g}, 0, 0)$ 等は省略した.		
$L_1 = L(e_1 + e_2, e_2 - e_1)$		
$M(e_i) = (E + tu_{2i}), i = 1, 2, 3$		
$T_i(e_1) = (E + C_{2i}T(e_1)), i = x, y, z, a, b$		
$D_{4h}(\alpha, \beta) = \{(E, C_{4z}^+\alpha, C_{2z}\alpha^2, C_{4z}^-\alpha^{-1}) + C_{2x}\beta(E, C_{4z}^+\alpha, C_{2z}\alpha^2, C_{4z}^-\alpha^{-1})\}$		
$D_{2ah} = \{E, C_{2z}, C_{2a}, C_{2b}, I, IC_{2z}, IC_{2a}, IC_{2b}\}$		
$D_{2h}(\alpha, \beta) = \{(E, C_{2z}\alpha) + C_{2x}\beta(E, C_{2z}\alpha)\}$		
$D_{2ah}(\alpha, \beta) = \{(E, C_{2z}\alpha) + C_{2a}\beta(E, C_{2z}\alpha)\}$		

表 10.20: $G(MB_{1g}, 1, 1)$ 状態の占有軌道とその占有数

サイト	スピン	軌道	占有数
m	$\uparrow$	$\psi_1^\uparrow = \phi_1$	$a + c$
m	$\downarrow$	$\psi_1^\downarrow = \phi_2$	$a + c$
m	$\uparrow$	$\psi_2^\uparrow = \phi_2$	$a - c$
m	$\downarrow$	$\psi_2^\downarrow = \phi_1$	$a - c$
m	$\uparrow\downarrow$	$\psi_3 = \phi_3$	b
$e_1 + m$	$\uparrow$	$\psi_1^\uparrow = \phi_2$	$a + c$
$e_1 + m$	$\downarrow$	$\psi_1^\downarrow = \phi_1$	$a + c$
$e_1 + m$	$\uparrow$	$\psi_2^\uparrow = \phi_1$	$a - c$
$e_1 + m$	$\downarrow$	$\psi_2^\downarrow = \phi_2$	$a - c$
$e_1 + m$	$\uparrow\downarrow$	$\psi_3 = \phi_3$	b
$T(m) \in L_1 = L(e_1 + e_2, e_2 - e_1)$			
$a = R_{11}^{00} = R_{22}^{00}, \quad b = R_{33}^{00}, \quad c = R_{11}^{13} = -R_{22}^{13}$			

で定義される. (10.37) より $T(m) \in L_1$ に対して

$$\begin{aligned}
 D^{\uparrow\uparrow}(m) &= R^{00} + R^{13} = \begin{pmatrix} a+c & 0 & 0 \\ 0 & a-c & 0 \\ 0 & 0 & b \end{pmatrix} \\
 D^{\downarrow\downarrow}(m) &= R^{00} - R^{13} = \begin{pmatrix} a-c & 0 & 0 \\ 0 & a+c & 0 \\ 0 & 0 & b \end{pmatrix} \\
 D^{\uparrow\uparrow}(e_1 + m) &= R^{00} - R^{13} = \begin{pmatrix} a-c & 0 & 0 \\ 0 & a+c & 0 \\ 0 & 0 & b \end{pmatrix} \\
 D^{\downarrow\downarrow}(e_1 + m) &= R^{00} + R^{13} = \begin{pmatrix} a+c & 0 & 0 \\ 0 & a-c & 0 \\ 0 & 0 & b \end{pmatrix}
 \end{aligned} \tag{10.161}$$

を得る. 表 10.20(p.577) に $G(MB_{1g}, 1, 1)$ 状態の占有軌道とその占有数を記す. 原子内で DODS(Different Orbital for Different Spin)が生じており, 隣のサイトではその軌道が交替して

いる.

10.7.2 $G(MB_{2g}, 1, 1)$ 状態

$G(MB_{2g}, 1, 1)$ 状態の固定部分群は

$$G(MB_{2g}, 1, 1) = (E + tu_{2y})(E + T(e_1)C_{2x})(E + C_{2x}u_{2x})D_{2ah}L_1A(e_3) \quad (10.162)$$

$C_{2x}, C_{2a} \in D_{2ah}$ 不変性と (10.59) より $l = 0, 1, \mu = 0, 3$ に対して

$$R_{13}^{l\mu} = R_{23}^{l\mu} = R_{31}^{l\mu} = R_{32}^{l\mu} = 0, \quad R_{11}^{l\mu} = R_{22}^{l\mu}, \quad R_{12}^{l\mu} = R_{21}^{l\mu} \quad (10.163)$$

が成り立つ. $T(e_1)C_{2x}$ 不変性と

$$\begin{aligned} T(e_1)C_{2x} \cdot R^{0\mu} &= \begin{pmatrix} R_{11}^{0\mu} & -R_{12}^{0\mu} & 0 \\ -R_{21}^{0\mu} & R_{22}^{0\mu} & 0 \\ 0 & 0 & R_{33}^{0\mu} \end{pmatrix} \\ T(e_1)C_{2x} \cdot R^{1\mu} &= \begin{pmatrix} -R_{11}^{1\mu} & R_{12}^{1\mu} & 0 \\ R_{21}^{1\mu} & -R_{22}^{1\mu} & 0 \\ 0 & 0 & -R_{33}^{1\mu} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (10.164)$$

より

$$R^{0\mu} = \begin{pmatrix} R_{11}^{0\mu} & 0 & 0 \\ 0 & R_{22}^{0\mu} & 0 \\ 0 & 0 & R_{33}^{0\mu} \end{pmatrix}, \quad R^{1\mu} = \begin{pmatrix} 0 & R_{12}^{1\mu} & 0 \\ R_{21}^{1\mu} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (10.165)$$

を得る. $C_{2x}u_{2x}$ 不変性と

$$C_{2x}u_{2x} \cdot R^{10} = \begin{pmatrix} 0 & -R_{12}^{10} & 0 \\ -R_{21}^{10} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad R^{03} = - \begin{pmatrix} R_{11}^{0\mu} & 0 & 0 \\ 0 & R_{22}^{0\mu} & 0 \\ 0 & 0 & R_{33}^{0\mu} \end{pmatrix} \quad (10.166)$$

より

$$R^{10} = R^{03} = 0 \quad (10.167)$$

を得る. これらと tu_{2y} 対称性より

$$R^{00} = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 \\ 0 & 0 & b \end{pmatrix}, \quad R^{13} = \begin{pmatrix} 0 & c & 0 \\ c & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (10.168)$$

を得る. ここで a, b, c は実数で

$$a = R_{11}^{00} = R_{22}^{00}, \quad b = R_{33}^{00}, \quad c = R_{12}^{13} = R_{21}^{13} \quad (10.169)$$

で定義される. (10.37) より $T(\mathbf{m}) \in L_1$ に対して

$$\begin{aligned}
 D^{\uparrow\uparrow}(\mathbf{m}) &= \mathbf{R}^{00} + \mathbf{R}^{13} = \begin{pmatrix} a & c & 0 \\ c & a & 0 \\ 0 & 0 & b \end{pmatrix} \\
 D^{\downarrow\downarrow}(\mathbf{m}) &= \mathbf{R}^{00} - \mathbf{R}^{13} = \begin{pmatrix} a & -c & 0 \\ -c & a & 0 \\ 0 & 0 & b \end{pmatrix} \\
 D^{\uparrow\uparrow}(\mathbf{e}_1 + \mathbf{m}) &= \mathbf{R}^{00} - \mathbf{R}^{13} = \begin{pmatrix} a & -c & 0 \\ -c & a & 0 \\ 0 & 0 & b \end{pmatrix} \\
 D^{\downarrow\downarrow}(\mathbf{e}_1 + \mathbf{m}) &= \mathbf{R}^{00} + \mathbf{R}^{13} = \begin{pmatrix} a & c & 0 \\ c & a & 0 \\ 0 & 0 & b \end{pmatrix}
 \end{aligned} \tag{10.170}$$

これらを対角化して表 10.21 を得る. 再編成された軌道 $\frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 + \phi_2), \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 - \phi_2)$ に $\uparrow, \downarrow$ 電子が入

表 10.21: $G(MB_{2g}, 1, 1)$ 状態の占有軌道とその占有数

サイト	スピン	軌道	占有数
$\mathbf{m}$	$\uparrow$	$\psi_1^{\uparrow} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 + \phi_2)$	$a + c$
$\mathbf{m}$	$\downarrow$	$\psi_1^{\downarrow} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 - \phi_2)$	$a + c$
$\mathbf{m}$	$\uparrow$	$\psi_2^{\uparrow} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 - \phi_2)$	$a - c$
$\mathbf{m}$	$\downarrow$	$\psi_2^{\downarrow} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 + \phi_2)$	$a - c$
$\mathbf{m}$	$\uparrow\downarrow$	$\psi_3 = \phi_3$	b
$\mathbf{e}_1 + \mathbf{m}$	$\uparrow$	$\psi_1^{\uparrow} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 - \phi_2)$	$a + c$
$\mathbf{e}_1 + \mathbf{m}$	$\downarrow$	$\psi_1^{\downarrow} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 + \phi_2)$	$a + c$
$\mathbf{e}_1 + \mathbf{m}$	$\uparrow$	$\psi_2^{\uparrow} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 + \phi_2)$	$a - c$
$\mathbf{e}_1 + \mathbf{m}$	$\downarrow$	$\psi_2^{\downarrow} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 - \phi_2)$	$a - c$
$\mathbf{e}_1 + \mathbf{m}$	$\uparrow\downarrow$	$\psi_3 = \phi_3$	b
$T(\mathbf{m}) \in L_1 = L(\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_2 - \mathbf{e}_1)$			
$a = R_{11}^{00} = R_{22}^{00}, \quad b = R_{33}^{00}, \quad c = R_{12}^{13} = R_{21}^{13}$			

り隣のサイトでは軌道の役割が交替している.

10.8 X 点非磁性状態

X 点での非磁性状態に対応する G_0 の既約表現は

$$\check{G}_0^{(X\gamma,0,\nu)} = \check{P}^{(X\gamma)} \otimes \check{S}^{(0)} \otimes \check{R}^{(\nu)} \quad (10.171)$$

である. $p \in D_{2h}$ としたとき $pT(\mathbf{m})u(\mathbf{n},\theta), pT(\mathbf{m})u(\mathbf{n},\theta)t$ に対して

$$\begin{aligned} & \check{G}_0^{(X\gamma,0,\nu)}(pT(\mathbf{m})u(\mathbf{n},\theta)) \\ &= \begin{pmatrix} \chi^{(\gamma)}(p)e^{-i\mathbf{Q}_2 \cdot \mathbf{m}} & 0 \\ 0 & \chi^{(\gamma)}(C_{2a}pC_{2a})e^{-i\mathbf{Q}_3 \cdot \mathbf{m}} \end{pmatrix} \otimes \mathbf{1}_1 \otimes \mathbf{1}_1 \\ & \check{G}_0^{(X\gamma,0,\nu)}(pT(\mathbf{m})u(\mathbf{n},\theta)t) \\ &= (-1)^\nu \begin{pmatrix} \chi^{(\gamma)}(p)e^{-i\mathbf{Q}_2 \cdot \mathbf{m}} & 0 \\ 0 & \chi^{(\gamma)}(C_{2a}pC_{2a})e^{-i\mathbf{Q}_3 \cdot \mathbf{m}} \end{pmatrix} \otimes \mathbf{1}_1 \otimes \mathbf{1}_1 \\ & \check{G}_0^{(X\gamma,0,\nu)}(C_{2a}pT(\mathbf{m})u(\mathbf{n},\theta)) \\ &= \begin{pmatrix} 0 & \chi^{(\gamma)}(C_{2a}pC_{2a})e^{-i\mathbf{Q}_3 \cdot \mathbf{m}} \\ \chi^{(\gamma)}(p)e^{-i\mathbf{Q}_2 \cdot \mathbf{m}} & 0 \end{pmatrix} \otimes \mathbf{1}_1 \otimes \mathbf{1}_1 \quad (10.172) \\ & \check{G}_0^{(X\gamma,0,\nu)}(C_{2a}pT(\mathbf{m})u(\mathbf{n},\theta)t) \\ &= (-1)^\nu \begin{pmatrix} 0 & \chi^{(\gamma)}(C_{2a}pC_{2a})e^{-i\mathbf{Q}_3 \cdot \mathbf{m}} \\ \chi^{(\gamma)}(p)e^{-i\mathbf{Q}_2 \cdot \mathbf{m}} & 0 \end{pmatrix} \otimes \mathbf{1}_1 \otimes \mathbf{1}_1 \end{aligned}$$

で与えられる. W_{HF} における $\check{G}_0^{(X\gamma,0,\nu)}$ の基底を表 10.22 に示す. $\check{G}_0^{(X\gamma,0,\nu)}$ に対応する固定部分群と固定点部分空間を表 10.23 に示す. S 不変性より $\mathbf{R}^{l\mu}$ でゼロないのは $\mathbf{R}^{l0}$ ($l = 0, 1, 2, 3$) の場合である. 以下表 10.23 に挙げた固定部分群のうち $G(XA_g, 0, 0)_2, G(XB_{1g}, 0, 1)_2$ の場合を考察する.

10.8.1 $G(XA_g, 0, 0)_2$ 状態

$G(XA_g, 0, 0)_2$ 状態の固定部分群は

$$G(XA_g, 0, 0)_2 = D_{4h}L(2e_1, 2e_2)SR \quad (10.173)$$

である. $C_{2z}, C_{2x} \in D_{4h}$ 不変性より $\mathbf{R}^{l0}$ は対角行列である. C_{2a} 不変性と

$$C_{2a} \cdot \mathbf{R}^{20} = \begin{pmatrix} R_{22}^{30} & 0 & 0 \\ 0 & R_{11}^{30} & 0 \\ 0 & 0 & R_{33}^{30} \end{pmatrix} \quad (10.174)$$

を考慮すると

$$R_{11}^{00} = R_{22}^{00}, \quad R_{11}^{10} = R_{22}^{10}, \quad R_{11}^{20} = R_{22}^{30}, \quad R_{22}^{20} = R_{11}^{30}, \quad R_{33}^{20} = R_{33}^{30} \quad (10.175)$$

表 10.22: W_{HF} における $\tilde{G}_0^{(X\gamma,0,\nu)}$ の偶 (g) 既約表現基底

G_0 の既約表現	W_{HF} における基底
$\tilde{G}_0^{(XA_g,0,0)}$	$\begin{cases} h(A_g, 0, 0)_{1,1,1}^\dagger = \sum_{\mathbf{k}} \sum_s a_{1(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_2)s}^\dagger a_{1\mathbf{k}s} \\ h(A_g, 0, 0)_{2,1,1}^\dagger = \sum_{\mathbf{k}} \sum_s a_{2(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_3)s}^\dagger a_{2\mathbf{k}s} \\ h(A_g, 0, 0)_{1,1,1}^2 = \sum_{\mathbf{k}} \sum_s a_{2(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_2)s}^\dagger a_{2\mathbf{k}s} \\ h(A_g, 0, 0)_{2,1,1}^2 = \sum_{\mathbf{k}} \sum_s a_{1(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_3)s}^\dagger a_{1\mathbf{k}s} \\ h(A_g, 0, 0)_{1,1,1}^3 = \sum_{\mathbf{k}} \sum_s a_{3(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_2)s}^\dagger a_{3\mathbf{k}s} \\ h(A_g, 0, 0)_{2,1,1}^3 = \sum_{\mathbf{k}} \sum_s a_{3(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_3)s}^\dagger a_{3\mathbf{k}s} \end{cases}$
$\tilde{G}_0^{(XB_{1g},0,0)}$	$\begin{cases} h(XB_{1g}, 0, 0)_{1,1,1} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_s (a_{1(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_2)s}^\dagger a_{2\mathbf{k}s} + a_{2\mathbf{k}s}^\dagger a_{1(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_2)s}) \\ h(XB_{1g}, 0, 0)_{2,1,1} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_s (a_{2(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_3)s}^\dagger a_{1\mathbf{k}s} + a_{1\mathbf{k}s}^\dagger a_{2(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_3)s}) \end{cases}$
$\tilde{G}_0^{(XB_{1g},0,1)}$	$\begin{cases} h(XB_{1g}, 0, 1)_{1,1,1} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_s (ia_{1(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_2)s}^\dagger a_{2\mathbf{k}s} - ia_{2\mathbf{k}s}^\dagger a_{1(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_2)s}) \\ h(XB_{1g}, 0, 1)_{2,1,1} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_s (ia_{2(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_3)s}^\dagger a_{1\mathbf{k}s} - ia_{1\mathbf{k}s}^\dagger a_{2(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_3)s}) \end{cases}$
$\tilde{G}_0^{(XB_{2g},0,0)}$	$\begin{cases} h(XB_{2g}, 0, 0)_{1,1,1} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_s (a_{1(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_2)s}^\dagger a_{3\mathbf{k}s} + a_{3\mathbf{k}s}^\dagger a_{1(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_2)s}) \\ h(XB_{2g}, 0, 0)_{2,1,1} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_s (a_{2(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_3)s}^\dagger a_{3\mathbf{k}s} + a_{3\mathbf{k}s}^\dagger a_{2(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_3)s}) \end{cases}$
$\tilde{G}_0^{(XB_{2g},0,1)}$	$\begin{cases} h(XB_{2g}, 0, 1)_{1,1,1} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_s (ia_{1(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_2)s}^\dagger a_{3\mathbf{k}s} - ia_{3\mathbf{k}s}^\dagger a_{1(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_2)s}) \\ h(XB_{2g}, 0, 1)_{2,1,1} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_s (ia_{2(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_3)s}^\dagger a_{3\mathbf{k}s} - ia_{3\mathbf{k}s}^\dagger a_{2(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_3)s}) \end{cases}$
$\tilde{G}_0^{(XB_{3g},0,0)}$	$\begin{cases} h(XB_{3g}, 0, 0)_{1,1,1} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_s (a_{2(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_2)s}^\dagger a_{3\mathbf{k}s} + a_{3\mathbf{k}s}^\dagger a_{2(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_2)s}) \\ h(XB_{3g}, 0, 0)_{2,1,1} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_s (a_{1(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_3)s}^\dagger a_{3\mathbf{k}s} + a_{3\mathbf{k}s}^\dagger a_{1(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_3)s}) \end{cases}$
$\tilde{G}_0^{(XB_{3g},0,1)}$	$\begin{cases} h(XB_{3g}, 0, 1)_{1,1,1} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_s (ia_{2(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_2)s}^\dagger a_{3\mathbf{k}s} - ia_{3\mathbf{k}s}^\dagger a_{2(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_2)s}) \\ h(XB_{3g}, 0, 1)_{2,1,1} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_s (ia_{1(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_3)s}^\dagger a_{3\mathbf{k}s} - ia_{3\mathbf{k}s}^\dagger a_{1(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_3)s}) \end{cases}$

表 10.23: $\check{G}_0^{(X\gamma,0,\nu)}$ の固定部分群と固定点部分空間

既約表現	固定部分群	固定点部分空間
$\check{G}_0^{(XA_g,0,0)}$	$G(XA_g, 0, 0)_1 = D_{2h}L(2e_1, e_2)SR$	$\{h_{1,1,1}\}_R$
	$G(XA_g, 0, 0)_2 = D_{4h}L(2e_1, 2e_2)SR$	$\{h_{1,1,1} + h_{2,1,1}\}_R$
$\check{G}_0^{(XB_{1g},0,0)}$	$G(XB_{1g}, 0, 0)_1 = T_x(e_1)C_{2zh}L(2e_1, e_2)SR$	$\{h_{1,1,1}\}_R$
	$G(XB_{1g}, 0, 0)_2 = T_x(e_1 + e_2)D_{2ah}L(2e_1, 2e_2)SR$	$\{h_{1,1,1} + h_{2,1,1}\}_R$
$\check{G}_0^{(XB_{1g},0,1)}$	$G(XB_{1g}, 0, 1)_1 = M_yT_x(e_1)C_{2zh}L(2e_1, e_2)S$	$\{h_{1,1,1}\}_R$
	$G(XB_{1g}, 0, 1)_2 = M_yT_x(e_1 + e_2)D_{2ah}L(2e_1, 2e_2)S$	$\{h_{1,1,1} + h_{2,1,1}\}_R$
$\check{G}_0^{(XB_{2g},0,0)}$	$G(XB_{2g}, 0, 0)_1 = T_x(e_1)C_{2yh}L(2e_1, e_2)SR$	$\{h_{1,1,1}\}_R$
	$G(XB_{2g}, 0, 0)_2 = T_x(e_1)T_y(e_2)C_{2ah}L(2e_1, 2e_2)SR$	$\{h_{1,1,1} + h_{2,1,1}\}_R$
$\check{G}_0^{(XB_{2g},0,1)}$	$G(XB_{2g}, 0, 1)_1 = M_yT_x(e_1)C_{2yh}L(2e_1, e_2)S$	$\{h_{1,1,1}\}_R$
	$G(XB_{2g}, 0, 1)_2 = M_yT_x(e_1)T_y(e_2)C_{2ah}L(2e_1, 2e_2)S$	$\{h_{1,1,1} + h_{2,1,1}\}_R$
$\check{G}_0^{(XB_{3g},0,0)}$	$G(XB_{3g}, 0, 0)_1 = T_y(e_1)C_{2xh}L(2e_1, e_2)SR$	$\{h_{1,1,1}\}_R$
	$G(XB_{3g}, 0, 0)_2 = T_x(e_2)T_y(e_1)C_{2ah}L(2e_1, 2e_2)S$	$\{h_{1,1,1} + h_{2,1,1}\}_R$
$\check{G}_0^{(XB_{3g},0,1)}$	$G(XB_{3g}, 0, 1)_1 = M_zT_y(e_1)C_{2xh}L(2e_1, e_2)S$	$\{h_{1,1,1}\}_R$
	$G(XB_{3g}, 0, 1)_2 = M_zT_x(e_2)T_y(e_1)C_{2ah}L(2e_1, 2e_2)S$	$\{h_{1,1,1} + h_{2,1,1}\}_R$
$T_i(e_1 + e_2) = (E + C_{2i}T(e_1 + e_2)), \quad i = z, x, y, a, b$ $T_i(e_m) = (E + C_{2i}T(e_1)), \quad i = z, x, y, a, b, \quad m = 1, 2$ $M_i = (E + tC_{2i}), \quad i = z, x, y, a, b$ $D_{2ah} = \{E, C_{2z}, C_{2a}, C_{2b}, I, IC_{2z}, IC_{2a}, IC_{2b}\}$ $C_{2xh} = \{E, C_{2x}, I, IC_{2x}\}$ $C_{2ah} = \{E, C_{2a}, I, IC_{2a}\}$		

を得る. これらの関係から

$$\begin{aligned} R^{00} &= \begin{pmatrix} a_0 & 0 & 0 \\ 0 & a_0 & 0 \\ 0 & 0 & b_0 \end{pmatrix}, & R^{10} &= \begin{pmatrix} a_1 & 0 & 0 \\ 0 & a_1 & 0 \\ 0 & 0 & b_1 \end{pmatrix} \\ R^{20} &= \begin{pmatrix} a_2 & 0 & 0 \\ 0 & a_3 & 0 \\ 0 & 0 & b_2 \end{pmatrix}, & R^{30} &= \begin{pmatrix} a_3 & 0 & 0 \\ 0 & a_2 & 0 \\ 0 & 0 & b_2 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (10.176)$$

を得る. ここで $a_0, b_0, a_1, b_1, a_2, b_2, a_3$ は実数で

$$\begin{aligned} a_0 &= R_{11}^{00} = R_{22}^{00}, & b_0 &= R_{33}^{00} \\ a_1 &= R_{11}^{10} = R_{22}^{10}, & b_1 &= R_{33}^{10} \\ a_2 &= R_{11}^{20} = R_{22}^{30}, & a_3 &= R_{11}^{30} = R_{22}^{20}, & b_3 &= R_{33}^{20} = R_{33}^{30} \end{aligned} \quad (10.177)$$

である. (10.37)(p.547) より $\mathbf{m} \in L_2 = L(2e_1, 2e_2)$ に対して

$$\begin{aligned} D(\mathbf{m}) &= \begin{pmatrix} a_0 + a_1 + a_2 + a_3 & 0 & 0 \\ 0 & a_0 + a_1 + a_2 + a_3 & 0 \\ 0 & 0 & b_0 + b_1 + 2b_2 \end{pmatrix} \\ D(e_1 + \mathbf{m}) &= \begin{pmatrix} a_0 - a_1 - a_2 + a_3 & 0 & 0 \\ 0 & a_0 - a_1 + a_2 - a_3 & 0 \\ 0 & 0 & b_0 - b_1 \end{pmatrix} \\ D(e_2 + \mathbf{m}) &= \begin{pmatrix} a_0 - a_1 + a_2 - a_3 & 0 & 0 \\ 0 & a_0 - a_1 - a_2 + a_3 & 0 \\ 0 & 0 & b_0 - b_1 \end{pmatrix} \\ D(e_1 + e_2 + \mathbf{m}) &= \begin{pmatrix} a_0 + a_1 - a_2 - a_3 & 0 & 0 \\ 0 & a_0 + a_1 - a_2 - a_3 & 0 \\ 0 & 0 & b_0 + b_1 - 2b_2 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (10.178)$$

を得る. 表 10.24 に $G(XA_g, 0, 0)_2$ 状態の占有軌道とその占有数を示す.

10.8.2 $G(XB_{1g}, 0, 1)_2$ 状態

$G(XB_{1g}, 0, 1)_2$ 状態の固定部分群は

$$G(XB_{1g}, 0, 1)_2 = (E + tC_{2y})(E + T(e_1 + e_2)C_{2x})D_{2ah}L(2e_1, 2e_2)S \quad (10.179)$$

である. $C_{2z}, C_{2a} \in D_{2ah}$ 不変性より

$$\begin{aligned} R^{l0} &= \begin{pmatrix} R_{11}^{l0} & R_{12}^{l0} & 0 \\ R_{12}^{l0} & R_{11}^{l0} & 0 \\ 0 & 0 & R_{33}^{l0} \end{pmatrix}, & l &= 0, 1 \\ R^{20} &= \begin{pmatrix} R_{11}^{20} & R_{12}^{20} & 0 \\ R_{21}^{20} & R_{22}^{20} & 0 \\ 0 & 0 & R_{33}^{20} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R_{22}^{30} & R_{21}^{30} & 0 \\ R_{12}^{30} & R_{11}^{30} & 0 \\ 0 & 0 & R_{33}^{30} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (10.180)$$

表 10.24: $G(XA_g, 0, 0)_2$ 状態の占有軌道とその占有数

サイト	スピン	軌道	占有数
m	$\uparrow\downarrow$	$\psi_1 = \phi_1$	$a_0 + a_1 + a_2 + a_3$
m	$\uparrow\downarrow$	$\psi_2 = \phi_2$	$a_0 + a_1 + a_2 + a_3$
m	$\uparrow\downarrow$	$\psi_3 = \phi_3$	$b_0 + b_1 + 2b_2$
$e_1 + m$	$\uparrow\downarrow$	$\psi_1 = \phi_1$	$a_0 - a_1 - a_2 + a_3$
$e_1 + m$	$\uparrow\downarrow$	$\psi_2 = \phi_2$	$a_0 - a_1 + a_2 - a_3$
$e_1 + m$	$\uparrow\downarrow$	$\psi_3 = \phi_3$	$b_0 - b_1$
$e_2 + m$	$\uparrow\downarrow$	$\psi_1 = \phi_1$	$a_0 - a_1 + a_2 - a_3$
$e_2 + m$	$\uparrow\downarrow$	$\psi_2 = \phi_2$	$a_0 - a_1 - a_2 + a_3$
$e_2 + m$	$\uparrow\downarrow$	$\psi_3 = \phi_3$	$b_0 - b_1$
$e_1 + e_2 + m$	$\uparrow\downarrow$	$\psi_1 = \phi_1$	$a_0 + a_1 - a_2 - a_3$
$e_1 + e_2 + m$	$\uparrow\downarrow$	$\psi_2 = \phi_2$	$a_0 + a_1 - a_2 - a_3$
$e_1 + e_2 + m$	$\uparrow\downarrow$	$\psi_3 = \phi_3$	$b_0 + b_1 - 2b_2$
$T(m) \in L_2 = L(2e_1, 2e_2)$			
$a_0 = R_{11}^{00} = R_{22}^{00}, \quad b_0 = R_{33}^{00}, \quad a_1 = R_{11}^{10} = R_{22}^{10}, \quad b_1 = R_{33}^{10}$			
$a_2 = R_{11}^{20} = R_{22}^{30}, \quad a_3 = R_{11}^{30} = R_{22}^{20}, \quad b_2 = R_{33}^{20} = R_{33}^{30}$			

が成り立つ. $T(e_1 + e_2)C_{2x}$ 不変性より

$$\mathbf{R}^{l0} = \begin{pmatrix} R_{11}^{l0} & 0 & 0 \\ 0 & R_{11}^{l0} & 0 \\ 0 & 0 & R_{33}^{l0} \end{pmatrix}, \quad l = 0, 1 \quad (10.181)$$

$$\mathbf{R}^{20} = \begin{pmatrix} 0 & R_{12}^{20} & 0 \\ R_{21}^{20} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & R_{21}^{30} & 0 \\ R_{12}^{30} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

を得る. tC_{2y} 不変性と

$$tC_{2y} \cdot \mathbf{R}^{l0} = \begin{pmatrix} (R_{11}^{l0})^* & -(R_{12}^{l0})^* & (R_{13}^{l0})^* \\ -(R_{21}^{l0})^* & (R_{22}^{l0})^* & -(R_{23}^{l0})^* \\ (R_{31}^{l0})^* & -(R_{32}^{l0})^* & (R_{33}^{l0})^* \end{pmatrix} \quad (10.182)$$

より

$$\begin{aligned}
 \mathbf{R}^{00} &= \begin{pmatrix} a_0 & 0 & 0 \\ 0 & a_0 & 0 \\ 0 & 0 & b_0 \end{pmatrix}, & \mathbf{R}^{10} &= \begin{pmatrix} a_1 & 0 & 0 \\ 0 & a_1 & 0 \\ 0 & 0 & b_1 \end{pmatrix} \\
 \mathbf{R}^{20} &= \begin{pmatrix} 0 & ic & 0 \\ -ic & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & \mathbf{R}^{30} &= \begin{pmatrix} 0 & -ic & 0 \\ ic & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},
 \end{aligned} \tag{10.183}$$

ここで a_0, b_0, a_1, b_1, c は実数であり

$$a_0 = R_{11}^{00} = R_{22}^{00}, \quad b_0 = R_{33}^{00}, \quad a_1 = R_{11}^{10} = R_{22}^{10}, \quad b_1 = R_{33}^{10}, \quad ic = R_{12}^{20} = R_{21}^{30} \tag{10.184}$$

で定義される. (10.37)(p.547) より $T(\mathbf{m}) \in L(2e_1, 2e_2)$ に対して

$$\begin{aligned}
 D(\mathbf{m}) &= \begin{pmatrix} a_0 + a_1 & 0 & 0 \\ 0 & a_0 + a_1 & 0 \\ 0 & 0 & b_0 + b_1 \end{pmatrix} \\
 D(e_1 + \mathbf{m}) &= \begin{pmatrix} a_0 - a_1 & -2ic & 0 \\ 2ic & a_0 - a_1 & 0 \\ 0 & 0 & b_0 - b_1 \end{pmatrix} \\
 D(e_2 + \mathbf{m}) &= \begin{pmatrix} a_0 - a_1 & 2ic & 0 \\ -2ic & a_0 - a_1 & 0 \\ 0 & 0 & b_0 - b_1 \end{pmatrix} \\
 D(e_1 + e_2 + \mathbf{m}) &= \begin{pmatrix} a_0 + a_1 & 0 & 0 \\ 0 & a_0 + a_1 & 0 \\ 0 & 0 & b_0 + b_1 \end{pmatrix}
 \end{aligned} \tag{10.185}$$

を得る. 表 10.25(p.586) に $G(XB_{1g}, 0, 1)_2$ 状態の占有軌道と占有数を記す.

10.9 X 点磁性状態

X 点での磁性状態に対応する G_0 の既約表現は

$$\check{G}_0^{(X\gamma, 1, \nu)} = \check{P}^{(X\gamma)} \otimes \check{S}^{(1)} \otimes \check{R}^{(\nu)} \tag{10.186}$$

表 10.25: $G(XB_{1g}, 0, 1)_2$ 状態の占有軌道とその占有数

サイト	スピン	軌道	占有数
m	$\uparrow\downarrow$	$\psi_1 = \phi_1$	$a_0 + a_1$
m	$\uparrow\downarrow$	$\psi_2 = \phi_2$	$a_0 + a_1$
m	$\uparrow\downarrow$	$\psi_3 = \phi_3$	$b_0 + b_1$
$e_1 + m$	$\uparrow\downarrow$	$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 + i\phi_2)$	$a_0 - a_1 + 2c$
$e_1 + m$	$\uparrow\downarrow$	$\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 - i\phi_2)$	$a_0 - a_1 - 2c$
$e_1 + m$	$\uparrow\downarrow$	$\psi_3 = \phi_3$	$b_0 - b_1$
$e_2 + m$	$\uparrow\downarrow$	$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 - i\phi_2)$	$a_0 - a_1 + 2c$
$e_2 + m$	$\uparrow\downarrow$	$\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 + i\phi_2)$	$a_0 - a_1 - 2c$
$e_2 + m$	$\uparrow\downarrow$	$\psi_3 = \phi_3$	$b_0 - b_1$
$e_1 + e_2 + m$	$\uparrow\downarrow$	$\psi_1 = \phi_1$	$a_0 + a_1$
$e_1 + e_2 + m$	$\uparrow\downarrow$	$\psi_2 = \phi_2$	$a_0 + a_1$
$e_1 + e_2 + m$	$\uparrow\downarrow$	$\psi_3 = \phi_3$	$b_0 + b_1$
$T(m) \in L_1 = L(2e_1, 2e_2)$			
$a_0 = R_{11}^{00} = R_{22}^{00}, \quad b_0 = R_{33}^{00}, \quad a_1 = R_{11}^{10} = R_{22}^{10}, \quad b_1 = R_{33}^{10}$			
$ic = R_{12}^{20} = R_{21}^{30}$			

である. $p \in D_{2h}$ としたとき $pT(m)u(n, \theta), pT(m)u(n, \theta)t$ に対して

$$\begin{aligned}
& \tilde{G}_0^{(X\gamma, 1, \nu)}(pT(m)u(n, \theta)) \\
&= \begin{pmatrix} \chi^{(\gamma)}(p)e^{-iQ_2 \cdot m} & 0 \\ 0 & \chi^{(\gamma)}(C_{2a}pC_{2a})e^{-iQ_3 \cdot m} \end{pmatrix} \otimes R(n, \theta) \otimes 1_1 \\
& \tilde{G}_0^{(X\gamma, 1, \nu)}(pT(m)u(n, \theta)t) \\
&= (-1)^\nu \begin{pmatrix} \chi^{(\gamma)}(p)e^{-iQ_2 \cdot m} & 0 \\ 0 & \chi^{(\gamma)}(C_{2a}pC_{2a})e^{-iQ_3 \cdot m} \end{pmatrix} \otimes R(n, \theta) \otimes 1_1 \\
& \tilde{G}_0^{(X\gamma, 1, \nu)}(C_{2a}pT(m)u(n, \theta)) \\
&= \begin{pmatrix} 0 & \chi^{(\gamma)}(C_{2a}pC_{2a})e^{-iQ_3 \cdot m} \\ \chi^{(\gamma)}(p)e^{-iQ_2 \cdot m} & 0 \end{pmatrix} \otimes R(n, \theta) \otimes 1_1 \quad (10.187)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \check{G}_0^{(X\gamma,1,\nu)}(C_{2a}pT(\mathbf{m})u(\mathbf{n},\theta)t) \\ &= (-1)^\nu \begin{pmatrix} 0 & \chi^{(\gamma)}(C_{2a}pC_{2a})e^{-i\mathbf{Q}_3\cdot\mathbf{m}} \\ \chi^{(\gamma)}(p)e^{-i\mathbf{Q}_2\cdot\mathbf{m}} & 0 \end{pmatrix} \otimes R(\mathbf{n},\theta) \otimes \mathbf{1}_1 \end{aligned}$$

で与えられる。\$W_{\text{HF}}\$ における \$\check{G}_0^{(Xj,1,\nu)}\$ の基底を表 10.26 に示す。

表 10.27, 表 10.28 に各表現に対応する固定部分群と固定点部分空間を記した。例として \$G(XB_{2g}, 1, 1)_2\$ 状態を考察しよう。

10.9.1 \$G(XB_{2g}, 1, 1)_2\$ 状態

\$G(XB_{2g}, 1, 1)_2\$ 状態の固定部分群は

$$G(XB_{2g}, 1, 1)_2 = (E + tu_{2y})(E + T(e_1)C_{2x})(E + T(e_2)C_{2y})(E + C_{2z}u_{2x})C_{2ah}L_2A(e_3) \quad (10.188)$$

である。\$A(e_3)\$ 対称性より \$\mathbf{R}^{l0}, \mathbf{R}^{l3}\$ がゼロでない可能性がある。(10.59), (10.62) より

$$\begin{aligned} T(e_1)C_{2x} \cdot \mathbf{R}^{l\mu} &= \begin{pmatrix} R_{11}^{l\mu} & -R_{12}^{l\mu} & -R_{13}^{l\mu} \\ -R_{21}^{l\mu} & R_{22}^{l\mu} & R_{23}^{l\mu} \\ -R_{31}^{l\mu} & R_{32}^{l\mu} & R_{33}^{l\mu} \end{pmatrix}, \quad l = 0, 3 \\ T(e_1)C_{2x} \cdot \mathbf{R}^{l\mu} &= \begin{pmatrix} -R_{11}^{l\mu} & R_{12}^{l\mu} & R_{13}^{l\mu} \\ R_{21}^{l\mu} & -R_{22}^{l\mu} & -R_{23}^{l\mu} \\ R_{31}^{l\mu} & -R_{32}^{l\mu} & -R_{33}^{l\mu} \end{pmatrix}, \quad l = 1, 2 \end{aligned} \quad (10.189)$$

を得る。\$T(e_1)C_{2x}\$ 不変性より

$$\begin{aligned} \mathbf{R}^{l\mu} &= \begin{pmatrix} R_{11}^{l\mu} & 0 & 0 \\ 0 & R_{22}^{l\mu} & R_{23}^{l\mu} \\ 0 & R_{32}^{l\mu} & R_{33}^{l\mu} \end{pmatrix}, \quad l = 0, 3 \\ \mathbf{R}^{l\mu} &= \begin{pmatrix} 0 & R_{12}^{l\mu} & R_{13}^{l\mu} \\ R_{21}^{l\mu} & 0 & 0 \\ R_{31}^{l\mu} & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad l = 1, 2 \end{aligned} \quad (10.190)$$

を得る。同様に \$T(e_2)C_{2y}\$ 不変性より

$$\begin{aligned} \mathbf{R}^{l\mu} &= \begin{pmatrix} R_{11}^{l\mu} & 0 & R_{13}^{l\mu} \\ 0 & R_{22}^{l\mu} & 0 \\ R_{31}^{l\mu} & 0 & R_{33}^{l\mu} \end{pmatrix}, \quad l = 0, 2 \\ \mathbf{R}^{l\mu} &= \begin{pmatrix} 0 & R_{12}^{l\mu} & 0 \\ R_{21}^{l\mu} & 0 & R_{23}^{l\mu} \\ 0 & R_{32}^{l\mu} & 0 \end{pmatrix}, \quad l = 1, 3 \end{aligned} \quad (10.191)$$

表 10.26: W_{HF} における $\check{G}_0^{(X\gamma,1,\nu)}$ の偶 (g) 既約表現基底

G_0 の既約表現	W_{HF} における基底
$\check{G}_0^{(XA_g,1,1)}$	$\left\{ \begin{aligned} h(A_g, 1, 1)_{1,\lambda,1}^1 &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} a_{1(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_2)s}^\dagger \sigma_{ss'}^\lambda a_{1\mathbf{k}s'} \\ h(A_g, 1, 1)_{2,\lambda,1}^1 &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} a_{2(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_3)s}^\dagger \sigma_{ss'}^\lambda a_{2\mathbf{k}s'} \\ h(A_g, 1, 1)_{1,\lambda,1}^2 &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} a_{2(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_2)s}^\dagger \sigma_{ss'}^\lambda a_{2\mathbf{k}s'} \\ h(A_g, 1, 1)_{2,\lambda,1}^2 &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} a_{1(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_3)s}^\dagger \sigma_{ss'}^\lambda a_{1\mathbf{k}s'} \\ h(A_g, 1, 1)_{1,\lambda,1}^3 &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} a_{3(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_2)s}^\dagger \sigma_{ss'}^\lambda a_{3\mathbf{k}s'} \\ h(A_g, 1, 1)_{2,\lambda,1}^3 &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} a_{3(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_3)s}^\dagger \sigma_{ss'}^\lambda a_{3\mathbf{k}s'} \end{aligned} \right.$
$\check{G}_0^{(XB_{1g},1,1)}$	$\left\{ \begin{aligned} h(XB_{1g}, 1, 1)_{1,\lambda,1} &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} (a_{1(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_2)s}^\dagger a_{2\mathbf{k}s'} + a_{2\mathbf{k}s}^\dagger a_{1(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_2)s'}) \sigma_{ss'}^\lambda \\ h(XB_{1g}, 1, 1)_{2,\lambda,1} &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} (a_{2(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_3)s}^\dagger a_{1\mathbf{k}s'} + a_{1\mathbf{k}s}^\dagger a_{2(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_3)s'}) \sigma_{ss'}' \end{aligned} \right.$
$\check{G}_0^{(XB_{1g},1,0)}$	$\left\{ \begin{aligned} h(XB_{1g}, 1, 0)_{1,\lambda,1} &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} (ia_{1(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_2)s}^\dagger a_{2\mathbf{k}s'} - ia_{2\mathbf{k}s}^\dagger a_{1(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_2)s'}) \sigma_{ss'}^\lambda \\ h(XB_{1g}, 1, 0)_{2,\lambda,1} &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} (ia_{2(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_3)s}^\dagger a_{1\mathbf{k}s'} - ia_{1\mathbf{k}s}^\dagger a_{2(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_3)s'}) \sigma_{ss'}' \end{aligned} \right.$
$\check{G}_0^{(XB_{2g},1,1)}$	$\left\{ \begin{aligned} h(XB_{2g}, 1, 1)_{1,\lambda,1} &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} (a_{1(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_2)s}^\dagger a_{3\mathbf{k}s'} + a_{3\mathbf{k}s}^\dagger a_{1(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_2)s'}) \sigma_{ss'}^\lambda \\ h(XB_{2g}, 1, 1)_{2,\lambda,1} &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} (a_{2(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_3)s}^\dagger a_{3\mathbf{k}s'} + a_{3\mathbf{k}s}^\dagger a_{2(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_3)s'}) \sigma_{ss'}' \end{aligned} \right.$
$\check{G}_0^{(XB_{2g},1,0)}$	$\left\{ \begin{aligned} h(XB_{2g}, 1, 0)_{1,\lambda,1} &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} (ia_{1(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_2)s}^\dagger a_{3\mathbf{k}s'} - ia_{3\mathbf{k}s}^\dagger a_{1(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_2)s'}) \sigma_{ss'}^\lambda \\ h(XB_{2g}, 1, 0)_{2,\lambda,1} &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} (ia_{2(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_3)s}^\dagger a_{3\mathbf{k}s'} - ia_{3\mathbf{k}s}^\dagger a_{2(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_3)s'}) \sigma_{ss'}' \end{aligned} \right.$
$\check{G}_0^{(XB_{3g},1,1)}$	$\left\{ \begin{aligned} h(XB_{3g}, 1, 1)_{1,\lambda,1} &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} (a_{2(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_2)s}^\dagger a_{3\mathbf{k}s'} + a_{3\mathbf{k}s}^\dagger a_{2(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_2)s'}) \sigma_{ss'}^\lambda \\ h(XB_{3g}, 1, 1)_{2,\lambda,1} &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} (a_{1(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_3)s}^\dagger a_{3\mathbf{k}s'} + a_{3\mathbf{k}s}^\dagger a_{1(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_3)s'}) \sigma_{ss'}' \end{aligned} \right.$
$\check{G}_0^{(XB_{3g},1,0)}$	$\left\{ \begin{aligned} h(XB_{3g}, 1, 0)_{1,\lambda,1} &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} (ia_{2(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_2)s}^\dagger a_{3\mathbf{k}s'} - ia_{3\mathbf{k}s}^\dagger a_{2(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_2)s'}) \sigma_{ss'}^\lambda \\ h(XB_{3g}, 1, 0)_{2,\lambda,1} &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} (ia_{1(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_3)s}^\dagger a_{3\mathbf{k}s'} - ia_{3\mathbf{k}s}^\dagger a_{1(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_3)s'}) \sigma_{ss'}' \end{aligned} \right.$
$\lambda = 1, 2, 3$	

表 10.27: $\tilde{G}_0^{(X\gamma,1,1)}$ の固定部分群と固定点部分空間

固定部分群	固定点部分空間
$G(XA_g, 1, 1)_1 = M(e_2)T^x(e_1)D_{2h}L(2e_1, e_2)A(e_3)$	$\{h_{1,3,1}\}_R$
$G(XA_g, 1, 1)_2 = M(e_2)T^x(e_1 + e_2)D_{4h}L(2e_1, 2e_2)A(e_3)$	$\{h_{1,3,1} + h_{2,3,1}\}_R$
$G(XA_g, 1, 1)_3 = M(e_3)T^x(e_2)T^y(e_1)D_{4h}(u_{2a}, E)L(2e_1, 2e_2)$	$\{h_{1,1,1} + h_{2,2,1}\}_R$
$G(XB_{1g}, 1, 1)_1 = M(e_2)T_x(e_1)D_{2h}(E, u_{2x})L(2e_1, e_2)A(e_3)$	$\{h_{1,3,1}\}_R$
$G(XB_{1g}, 1, 1)_2 = M(e_2)T_x(e_1 + e_2)D_{4h}(u_{2x}, u_{2x})L(2e_1, 2e_2)A(e_3)$	$\{h_{1,3,1} + h_{2,3,1}\}_R$
$G(XB_{1g}, 1, 1)_3 = M(e_3)T^x(e_2)T^y(e_1)D_{4h}(u_{2b}, u_{2z})L(2e_1, 2e_2)$	$\{h_{1,1,1} + h_{2,2,1}\}_R$
$G(XB_{2g}, 1, 1)_1 = M(e_2)T_x(e_1)D_{2h}(u_{2x}, u_{2x})L(2e_1, e_2)A(e_3)$	$\{h_{1,3,1}\}_R$
$G(XB_{2g}, 1, 1)_2 = M(e_2)T_x(e_1)T_y(e_2)D_{2ah}(u_{2x}, E)L(2e_1, 2e_2)A(e_3)$	$\{h_{1,3,1} + h_{2,3,1}\}_R$
$G(XB_{2g}, 1, 1)_3 = M(e_3)T_x(e_1)T_y(e_2)D_{4h}(u_{4z}^+, u_{2x})L(2e_1, 2e_2)$	$\{h_{1,2,1} + h_{2,1,1}\}_R$
$G(XB_{3g}, 1, 1)_1 = M(e_2)T_y(e_1)D_{2h}(u_{2x}, E)L(2e_1, e_2)A(e_3)$	$\{h_{1,3,1}\}_R$
$G(XB_{3g}, 1, 1)_2 = M(e_2)T_x(e_2)T_y(e_1)D_{2ah}(u_{2x}, E)L(2e_1, 2e_2)A(e_3)$	$\{h_{1,3,1} + h_{2,3,1}\}_R$
$G(XB_{3g}, 1, 1)_3 = M(e_3)T_x(e_2)T_y(e_1)D_{4h}(u_{4z}^+, u_{2x})L(2e_1, 2e_2)$	$\{h_{1,1,1} + h_{2,2,1}\}_R$
$T_i(e_1 + e_2) = (E + T(e_1 + e_2)C_{2i}), \quad i = z, x, y, a, b$ $T^i(e_1 + e_2) = (E + u_{2i}T(e_1 + e_2)), \quad i = z, x, y, a, b$ $T^i(e_m) = (E + u_{2i}T(e_m)), \quad i = z, x, y, a, b, \quad m = 1, 2$ $T_i(e_m) = (E + T(e_m)C_{2i}), \quad i = z, x, y, a, b, \quad m = 1, 2$ $D_{4h}(\alpha, \beta) = \{(E, C_{4z}\alpha, C_z\alpha^2, C_{4z}^-\alpha^{-1}) + C_{2x}\beta(E, C_{4z}^+\alpha, C_z\alpha^2, C_{4z}^-\alpha^{-1})\} \times C_I$ $M(e_i) = (E + tu_{2i})$ $D_{2h}(\alpha, \beta) = \{(E, C_{2z}\alpha) + C_{2x}\beta(E, C_{2z}\alpha)\} \times C_I$ $D_{2ah}(\alpha, \beta) = \{(E, C_{2z}\alpha) + C_{2a}\beta(E, C_{2z}\alpha)\} \times C_I$	

表 10.28: $\check{G}_0^{(X\gamma, 1, 0)}$ の固定部分群と固定点部分空間

固定部分群	固定点部分空間
$G(XB_{1g}, 1, 0)_1 = T_x(e_1)D_{2h}(E, u_{2x})L(2e_1, e_2)A(e_3)R$	$\{h_{1,3,1}\}_R$
$G(XB_{1g}, 1, 0)_2 = T_x(e_1 + e_2)D_{4h}(u_{2x}, u_{2x})L(2e_1, 2e_2)A(e_3)R$	$\{h_{1,3,1} + h_{2,3,1}\}_R$
$G(XB_{1g}, 1, 0)_3 = T_x(e_1 + e_2)D_{4h}(E, u_{2x})L(2e_1, 2e_2)A(e_3)R$	$\{h_{1,3,1} - h_{2,3,1}\}_R$
$G(XB_{1g}, 1, 0)_4 = T^x(e_2)T^y(e_1)D_{4h}(u_{2b}, u_{2z})L(2e_1, 2e_2)R$	$\{h_{1,1,1} + h_{2,2,1}\}_R$
$G(XB_{2g}, 1, 0)_1 = T_x(e_1)D_{2h}(u_{2x}, u_{2x})L(2e_1, e_2)A(e_3)R$	$\{h_{1,3,1}\}_R$
$G(XB_{2g}, 1, 0)_2 = T_x(e_1)T_y(e_2)D_{2ah}(u_{2x}, E)L(2e_1, 2e_2)A(e_3)R$	$\{h_{1,3,1} + h_{2,3,1}\}_R$
$G(XB_{2g}, 1, 0)_3 = T_x(e_1)T_y(e_2)D_{4h}(u_{4z}^+, u_{2x})L(2e_1, 2e_2)R$	$\{h_{1,2,1} + h_{2,1,1}\}_R$
$G(XB_{3g}, 1, 0)_1 = T_y(e_1)D_{2h}(u_{2x}, E)L(2e_1, e_2)A(e_3)R$	$\{h_{1,3,1}\}_R$
$G(XB_{3g}, 1, 0)_2 = T_x(e_2)T_y(e_1)D_{2ah}(u_{2x}, E)L(2e_1, 2e_2)A(e_3)R$	$\{h_{1,3,1} + h_{2,3,1}\}_R$
$G(XB_{3g}, 1, 0)_3 = T_x(e_2)T_y(e_1)D_{4h}(u_{4z}^+, u_{2x})L(2e_1, 2e_2)R$	$\{h_{1,1,1} + h_{2,2,1}\}_R$
$T_i(e_1 + e_2) = (E + T(e_1 + e_2)C_{2i}), \quad i = z, x, y, a, b$	
$T^i(e_1 + e_2) = (E + u_{2i}T(e_1 + e_2)), \quad i = z, x, y, a, b$	
$T^i(e_m) = (E + u_{2i}T(e_m)), \quad i = z, x, y, a, b, \quad m = 1, 2$	
$T_i(e_m) = (E + T(e_m)C_{2i}), \quad i = z, x, y, a, b, \quad m = 1, 2$	
$D_{4h}(\alpha, \beta) = \{(E, C_{4z}\alpha, C_z\alpha^2, C_{4z}^-\alpha^{-1}) + C_{2x}\beta(E, C_{4z}^+\alpha, C_z\alpha^2, C_{4z}^-\alpha^{-1})\} \times C_I$	
$D_{2h}(\alpha, \beta) = \{(E, C_{2z}\alpha) + C_{2x}\beta(E, C_{2z}\alpha)\} \times C_I$	
$D_{2ah}(\alpha, \beta) = \{(E, C_{2z}\alpha) + C_{2a}\beta(E, C_{2z}\alpha)\} \times C_I$	

$C_{2z}u_{2x}$ 不変性と (10.59), (10.61) より

$$\begin{aligned} \mathbf{R}^{l0} &= \begin{pmatrix} R_{11}^{l0} & R_{12}^{l0} & 0 \\ R_{21}^{l0} & R_{22}^{l0} & 0 \\ 0 & 0 & R_{33}^{l0} \end{pmatrix}, \quad l = 0, 1, 2, 3 \\ \mathbf{R}^{l3} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & R_{13}^{l3} \\ 0 & 0 & R_{23}^{l3} \\ R_{31}^{l3} & R_{32}^{l3} & 0 \end{pmatrix}, \quad l = 0, 1, 2, 3 \end{aligned} \quad (10.192)$$

(10.190), (10.191), (10.192) より

$$\begin{aligned} \mathbf{R}^{03} &= \mathbf{R}^{13} = \mathbf{R}^{20} = \mathbf{R}^{30} = 0 \\ \mathbf{R}^{00} &= \begin{pmatrix} R_{11}^{00} & 0 & 0 \\ 0 & R_{22}^{00} & 0 \\ 0 & 0 & R_{33}^{00} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{R}^{10} = \begin{pmatrix} 0 & R_{12}^{10} & 0 \\ R_{12}^{10} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \mathbf{R}^{23} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & R_{13}^{23} \\ 0 & 0 & 0 \\ R_{31}^{23} & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{R}^{33} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & R_{23}^{33} \\ 0 & R_{32}^{33} & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (10.193)$$

を得る. tu_{2y} よりこれらの行列は全て実行列であり, $C_{2a} \in C_{2ah}$ 対称性を考慮すると

$$\begin{aligned} \mathbf{R}^{00} &= \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 \\ 0 & 0 & b \end{pmatrix}, \quad \mathbf{R}^{10} = \begin{pmatrix} 0 & c & 0 \\ c & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \mathbf{R}^{23} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & d \\ 0 & 0 & 0 \\ d & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{R}^{33} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & d \\ 0 & d & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (10.194)$$

を得る. ここで a, b, c, d は実数で

$$a = R_{11}^{00} = R_{22}^{00}, \quad b = R_{33}^{00}, \quad c = R_{12}^{10} = R_{21}^{10}, \quad d = R_{13}^{23} = R_{31}^{23} = R_{23}^{33} = R_{32}^{33} \quad (10.195)$$

で定義される. (10.37)(p.547) より $T(\mathbf{m}) \in L_2 = L(2e_1, 2e_2)$ に対して

$$\begin{aligned} \mathbf{D}^{\uparrow\uparrow}(\mathbf{m}) &= \begin{pmatrix} a & c & d \\ c & a & d \\ d & d & b \end{pmatrix}, & \mathbf{D}^{\downarrow\downarrow}(\mathbf{m}) &= \begin{pmatrix} a & c & -d \\ c & a & -d \\ -d & -d & b \end{pmatrix} \\ \mathbf{D}^{\uparrow\uparrow}(\mathbf{e}_1 + \mathbf{m}) &= \begin{pmatrix} a & -c & -d \\ -c & a & d \\ -d & d & b \end{pmatrix}, & \mathbf{D}^{\downarrow\downarrow}(\mathbf{e}_1 + \mathbf{m}) &= \begin{pmatrix} a & -c & d \\ -c & a & -d \\ d & -d & b \end{pmatrix} \\ \mathbf{D}^{\uparrow\uparrow}(\mathbf{e}_2 + \mathbf{m}) &= \begin{pmatrix} a & -c & d \\ -c & a & -d \\ d & -d & b \end{pmatrix}, & \mathbf{D}^{\downarrow\downarrow}(\mathbf{e}_2 + \mathbf{m}) &= \begin{pmatrix} a & -c & -d \\ -c & a & d \\ -d & d & b \end{pmatrix} \\ \mathbf{D}^{\uparrow\uparrow}(\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2 + \mathbf{m}) &= \begin{pmatrix} a & c & -d \\ c & a & -d \\ -d & -d & b \end{pmatrix}, & \mathbf{D}^{\downarrow\downarrow}(\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2 + \mathbf{m}) &= \begin{pmatrix} a & c & d \\ c & a & d \\ d & d & b \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (10.196)$$

を得る. これらの行列を対角化して $G(XB_{2g}, 1, 1)_2$ 状態の占有軌道とその占有数を得る. それらを表 10.29 に記す.

表 10.29: $G(XB_{2g}, 1, 1)_2$ 状態の占有軌道とその占有数

サイト	スピン	軌道	占拠数
m	$\uparrow$	$\psi_1^\uparrow = \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}u\phi_1 + \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}u\phi_2 + w\phi_3$	λ_1
m	$\downarrow$	$\psi_1^\downarrow = \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}u\phi_1 + \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}u\phi_2 - w\phi_3$	λ_1
m	$\uparrow$	$\psi_2^\uparrow = \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}w\phi_1 + \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}w\phi_2 - u\phi_3$	λ_2
m	$\downarrow$	$\psi_2^\downarrow = \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}w\phi_1 + \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}w\phi_2 + u\phi_3$	λ_2
m	$\uparrow\downarrow$	$\psi_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}\phi_1 - \frac{1}{\sqrt{2}}\phi_2$	λ_3
$e_1 + m$	$\uparrow$	$\psi_1^\uparrow = \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}u\phi_1 - \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}u\phi_2 - w\phi_3$	λ_1
$e_1 + m$	$\downarrow$	$\psi_1^\downarrow = \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}u\phi_1 - \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}u\phi_2 + w\phi_3$	λ_1
$e_1 + m$	$\uparrow$	$\psi_2^\uparrow = \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}w\phi_1 - \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}w\phi_2 + u\phi_3$	λ_2
$e_1 + m$	$\downarrow$	$\psi_2^\downarrow = \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}w\phi_1 - \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}w\phi_2 - u\phi_3$	λ_2
$e_1 + m$	$\uparrow\downarrow$	$\psi_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}\phi_1 + \frac{1}{\sqrt{2}}\phi_2$	λ_3
$e_2 + m$	$\uparrow$	$\psi_1^\uparrow = \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}u\phi_1 - \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}u\phi_2 + w\phi_3$	λ_1
$e_2 + m$	$\downarrow$	$\psi_1^\downarrow = \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}u\phi_1 - \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}u\phi_2 - w\phi_3$	λ_1
$e_2 + m$	$\uparrow$	$\psi_2^\uparrow = \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}w\phi_1 - \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}w\phi_2 - u\phi_3$	λ_2
$e_2 + m$	$\downarrow$	$\psi_2^\downarrow = \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}w\phi_1 - \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}w\phi_2 + u\phi_3$	λ_2
$e_2 + m$	$\uparrow\downarrow$	$\psi_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}\phi_1 + \frac{1}{\sqrt{2}}\phi_2$	λ_3
次ページに続く			

続き			
$e_1 + e_2 + m$	$\uparrow$	$\psi_1^\uparrow = \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}u\phi_1 + \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}u\phi_2 - w\phi_3$	λ_1
$e_1 + e_2 + m$	$\downarrow$	$\psi_1^\downarrow = \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}u\phi_1 + \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}u\phi_2 + w\phi_3$	λ_1
$e_1 + e_2 + m$	$\uparrow$	$\psi_2^\uparrow = \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}w\phi_1 + \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}w\phi_2 + u\phi_3$	λ_2
$e_1 + e_2 + m$	$\downarrow$	$\psi_2^\downarrow = \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}w\phi_1 + \frac{\text{sgn}(d)}{\sqrt{2}}w\phi_2 - u\phi_3$	λ_2
$e_1 + e_2 + m$	$\uparrow\downarrow$	$\psi_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}\phi_1 - \frac{1}{\sqrt{2}}\phi_2$	λ_3

$$T(\mathbf{m}) \in L_1 = L(2e_1, 2e_2)$$

$$u = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(1 + \frac{a+c-b}{\sqrt{(a+c-b)^2+8d^2}}\right)^{\frac{1}{2}}, \quad w = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(1 - \frac{a+c-b}{\sqrt{(a+c-b)^2+8d^2}}\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$\lambda_1 = \frac{a+c+b+\sqrt{(a+c-b)^2+8d^2}}{2}, \quad \lambda_2 = \frac{a+c+b-\sqrt{(a+c-b)^2+8d^2}}{2}, \quad \lambda_3 = a - c$$

$$a = R_{11}^{00} = R_{22}^{00}, \quad b = R_{33}^{00}, \quad c = R_{12}^{00} = R_{21}^{00}, \quad d = R_{13}^{23} = R_{23}^{33} = R_{31}^{23} = R_{32}^{33}$$

10.10 2段階相転移で起こりえる状態

前節までの議論では G_0 の既約表現の固定部分群を求めることによって得られる状態を考察してきた。これは正常状態からの1回の2次相転移によって得られる状態を考察していたことになる。実際に観測されるのは正常状態からの多段階の2次相転移で発生する状態も考えられる。ここでは2段階の相転移の例として第10.6.2節(p.571)で取り上げた $G(MB_{1g}, 0, 0)$ 状態からの2次相転移によって得られる2つの状態を考察しよう。 $G(MB_{1g}, 0, 0)$ 状態の固定部分群は

$$\begin{aligned} G_{B1} &\equiv G(MB_{1g}, 0, 0) = (E + T(e_1)C_{2a})D_{2h}L(e_1 + e_2, e_2 - e_1)SR \\ &= P_{B1} \times S \times R \end{aligned} \quad (10.197)$$

である。ここで

$$P_{B1} = (E + T(e_1)C_{2a})D_{2h}L(e_1 + e_2, e_2 - e_1) \quad (10.198)$$

である。 $G_{B1} = G(MB_{1g}, 0, 0)$ 状態からの2次相転移はいままでの議論で G_0 のかわりに G_{B1} 状態の固定部分群 G_{B1} をとり G_{B1} の既約表現を求めて類似の議論を進めていけばよい。 G_{B1} の既約表現は

$$\check{G}_{B1} = \check{P}_{B1}^{(j)} \otimes \check{S}^{(\mu)} \times \check{R}^{(\nu)} \quad (10.199)$$

で与えられる。

ここでは P_{B1} の既約表現 $\check{P}_{B1}$ としては $D_{2h}L(e_1 + e_2, e_2 - e_1)$ の恒等表現から誘導される既約表現のみを考える。そのとき得られる既約表現は $T(e_1)C_{2a}$ に対して $(+1)$ か (-1) の 2 種類である。すなわち $p \in D_{2h}, T(m) \in L(e_1 + e_2, e_2 - e_1)$ に対して

$$\begin{aligned}\check{P}^{(0)}(pT(m)) &= 1 \\ \check{P}^{(0)}(T(e_1)C_{2a}pT(m)) &= 1 \\ \check{P}^{(1)}(pT(m)) &= 1 \\ \check{P}^{(1)}(T(e_1)C_{2a}pT(m)) &= -1\end{aligned}\tag{10.200}$$

である。

S の既約表現は $\check{S}^{(1)}$, R の既約表現として $\check{R}^{(1)}$ を考えよう。したがって考察する G_{B1} の表現はつぎの 2 つである。

$$\begin{aligned}\check{G}_{B1}^{(0,1,1)} &= \check{P}_{B1}^{(0)} \otimes \check{S}^{(1)} \otimes \check{R}^{(1)} \\ \check{G}_{B1}^{(1,1,1)} &= \check{P}_{B1}^{(1)} \otimes \check{S}^{(1)} \otimes \check{R}^{(1)}\end{aligned}\tag{10.201}$$

表現行列をあらわに書くと $p \in D_{2h}, T(m) \in L(e_1 + e_2, e_2 - e_1), u(n, \theta) \in S$ に対して

$$\begin{aligned}\check{G}_{B1}^{(0,1,1)}(pT(m)u(n, \theta)) &= R(n, \theta) \\ \check{G}_{B1}^{(0,1,1)}(pT(m)u(n, \theta)t) &= -R(n, \theta) \\ \check{G}_{B1}^{(0,1,1)}(T(e_1)C_{2a}pT(m)u(n, \theta)) &= R(n, \theta) \\ \check{G}_{B1}^{(0,1,1)}(T(e_1)C_{2a}pT(m)u(n, \theta)t) &= -R(n, \theta)\end{aligned}\tag{10.202}$$

$$\begin{aligned}\check{G}_{B1}^{(1,1,1)}(pT(m)u(n, \theta)) &= R(n, \theta) \\ \check{G}_{B1}^{(1,1,1)}(pT(m)u(n, \theta)t) &= -R(n, \theta) \\ \check{G}_{B1}^{(1,1,1)}(T(e_1)C_{2a}pT(m)u(n, \theta)) &= -R(n, \theta) \\ \check{G}_{B1}^{(1,1,1)}(T(e_1)C_{2a}pT(m)u(n, \theta)t) &= R(n, \theta)\end{aligned}\tag{10.203}$$

となる。 $\check{G}_{B1}^{(0,1,1)}, \check{G}_{B1}^{(1,1,1)}$ から得られる固定部分群は

$$\begin{aligned}G_{B1}(0, 1, 1) &= (E + tu_{2y})(E + T(e_1)C_{2a})D_{2h}L(e_1 + e_2, e_2 - e_1)A(e_3) \\ G_{B1}(1, 1, 1) &= (E + tu_{2y})(E + T(e_1)C_{2a}u_{2x})D_{2h}L(e_1 + e_2, e_2 - e_1)A(e_3)\end{aligned}\tag{10.204}$$

である。両状態とも $L(e_1 + e_2, e_2 - e_1)A(e_3)$ 対称性を持つので第 10.7 節の議論と同様にして $R^{l\mu}$ でゼロでないのは $R^{00}, R^{10}, R^{03}, R^{13}$ である。以下 $G_{B1}(0, 1, 1), G_{B1}(1, 1, 1)$ の場合を個別に考える。

10.10.1 $G_{B1}(0, 1, 1)$ 状態

$G_{B1}(0, 1, 1)$ 状態の固定部分群は (10.204) で与えられる。 D_{2h} 対称性より $R^{00}, R^{10}, R^{03}, R^{13}$ は対角行列である。 $T(e_1)C_{2a}$ 対称性を考慮すると

$$\begin{aligned}
 R^{00} &= \begin{pmatrix} a_0 & 0 & 0 \\ 0 & a_0 & 0 \\ 0 & 0 & b_0 \end{pmatrix} & R^{10} &= \begin{pmatrix} a_1 & 0 & 0 \\ 0 & -a_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
 R^{03} &= \begin{pmatrix} a_2 & 0 & 0 \\ 0 & a_2 & 0 \\ 0 & 0 & b_2 \end{pmatrix} & R^{13} &= \begin{pmatrix} a_3 & 0 & 0 \\ 0 & -a_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}
 \end{aligned} \tag{10.205}$$

を得る. (10.37)(p.547) より $T(\mathbf{m}) \in L(\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_2 - \mathbf{e}_1)$ に対して

$$\begin{aligned}
 D^{\uparrow\uparrow}(\mathbf{m}) &= \begin{pmatrix} a_0 + a_1 + a_2 + a_3 & 0 & 0 \\ 0 & a_0 - a_1 + a_2 - a_3 & 0 \\ 0 & 0 & b_0 + b_2 \end{pmatrix} \\
 D^{\downarrow\downarrow}(\mathbf{m}) &= \begin{pmatrix} a_0 + a_1 - a_2 - a_3 & 0 & 0 \\ 0 & a_0 - a_1 - a_2 + a_3 & 0 \\ 0 & 0 & b_0 - b_2 \end{pmatrix} \\
 D^{\uparrow\uparrow}(\mathbf{e}_1 + \mathbf{m}) &= \begin{pmatrix} a_0 - a_1 + a_2 - a_3 & 0 & 0 \\ 0 & a_0 + a_1 + a_2 + a_3 & 0 \\ 0 & 0 & b_0 + b_2 \end{pmatrix} \\
 D^{\downarrow\downarrow}(\mathbf{e}_1 + \mathbf{m}) &= \begin{pmatrix} a_0 - a_1 - a_2 + a_3 & 0 & 0 \\ 0 & a_0 + a_1 - a_2 - a_3 & 0 \\ 0 & 0 & b_0 - b_2 \end{pmatrix}
 \end{aligned} \tag{10.206}$$

表 10.30 に $G_{B1}(0, 1, 1)$ 状態の占有軌道とその占有数を記す. 占有数 $a_0 + a_1 + a_2 + a_3$ を持つ軌道の配置を図示すると図 10.3 のようになる. d_{yz}, d_{zx} 軌道が交替する軌道秩序の上にスピンの強磁性的に配列している状態である.

10.10.2 $G_{B1}(1, 1, 1)$ 状態

$G_{B1}(1, 1, 1)$ 状態の固定部分群は

$$G_{B1}(1, 1, 1) = (E + tu_{2y})(E + T(\mathbf{e}_1)C_{2a}u_{2x})D_{2h}L(\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_2 - \mathbf{e}_1)A(\mathbf{e}_3) \tag{10.207}$$

である. 10.10.1 節との違いは $T(\mathbf{e}_1)C_{2a}$ が $T(\mathbf{e}_1)C_{2a}u_{2x}$ に変わっているだけである. その違いは R^{03}, R^{13} にのみ現れて次の $R^{l\mu}$ を得る.

$$\begin{aligned}
 R^{00} &= \begin{pmatrix} a_0 & 0 & 0 \\ 0 & a_0 & 0 \\ 0 & 0 & b_0 \end{pmatrix} & R^{10} &= \begin{pmatrix} a_1 & 0 & 0 \\ 0 & -a_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
 R^{03} &= \begin{pmatrix} a_2 & 0 & 0 \\ 0 & -a_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} & R^{13} &= \begin{pmatrix} a_3 & 0 & 0 \\ 0 & a_3 & 0 \\ 0 & 0 & b_3 \end{pmatrix}
 \end{aligned} \tag{10.208}$$

表 10.30: $G_{B1}(0, 1, 1)$ 状態の占有軌道とその占有数

サイト	スピン	軌道	占有数
m	$\uparrow$	$\psi_1^\uparrow = \phi_1$	$a_0 + a_1 + a_2 + a_3$
m	$\downarrow$	$\psi_1^\downarrow = \phi_1$	$a_0 + a_1 - a_2 - a_3$
m	$\uparrow$	$\psi_2^\uparrow = \phi_2$	$a_0 - a_1 + a_2 - a_3$
m	$\downarrow$	$\psi_2^\downarrow = \phi_1$	$a_0 - a_1 - a_2 + a_3$
m	$\uparrow$	$\psi_3^\uparrow = \phi_3$	$b_0 + b_2$
m	$\downarrow$	$\psi_3^\downarrow = \phi_3$	$b_0 - b_2$
$e_1 + m$	$\uparrow$	$\psi_1^\uparrow = \phi_1$	$a_0 - a_1 + a_2 + a_3$
$e_1 + m$	$\downarrow$	$\psi_1^\downarrow = \phi_1$	$a_0 - a_1 - a_2 + a_3$
$e_1 + m$	$\uparrow$	$\psi_2^\uparrow = \phi_2$	$a_0 + a_1 + a_2 + a_3$
$e_1 + m$	$\downarrow$	$\psi_2^\downarrow = \phi_1$	$a_0 + a_1 - a_2 - a_3$
$e_1 + m$	$\uparrow$	$\psi_3^\uparrow = \phi_3$	$b_0 + b_2$
$e_1 + m$	$\downarrow$	$\psi_3^\downarrow = \phi_3$	$b_0 - b_2$
$T(m) \in L_1 = L(e_1 + e_2, e_2 - e_1)$			
$a_0 = R_{11}^{00} = R_{22}^{00}, \quad b_0 = R_{33}^{00}, \quad a_1 = R_{11}^{10} = -R_{22}^{10}$			
$a_2 = R_{11}^{03} = R_{22}^{03}, \quad b_2 = R_{33}^{03}, \quad a_3 = R_{11}^{13} = -R_{22}^{13}$			

を得る. (10.37)(p.547) より $T(m) \in L(e_1 + e_2, e_2 - e_1)$ に対して

$$\begin{aligned}
D^{\uparrow\uparrow}(m) &= \begin{pmatrix} a_0 + a_1 + a_2 + a_3 & 0 & 0 \\ 0 & a_0 - a_1 - a_2 + a_3 & 0 \\ 0 & 0 & b_0 + b_2 \end{pmatrix} \\
D^{\downarrow\downarrow}(m) &= \begin{pmatrix} a_0 + a_1 - a_2 - a_3 & 0 & 0 \\ 0 & a_0 - a_1 + a_2 - a_3 & 0 \\ 0 & 0 & b_0 - b_2 \end{pmatrix} \\
D^{\uparrow\uparrow}(e_1 + m) &= \begin{pmatrix} a_0 - a_1 + a_2 - a_3 & 0 & 0 \\ 0 & a_0 + a_1 - a_2 - a_3 & 0 \\ 0 & 0 & b_0 - b_2 \end{pmatrix} \\
D^{\downarrow\downarrow}(e_1 + m) &= \begin{pmatrix} a_0 - a_1 - a_2 + a_3 & 0 & 0 \\ 0 & a_0 + a_1 + a_2 + a_3 & 0 \\ 0 & 0 & b_0 + b_2 \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{10.209}$$

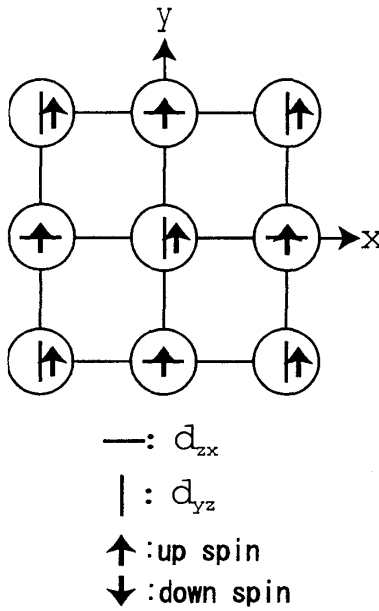


図 10.3: $G_{B1}(0, 1, 1)$ 状態のスピン軌道秩序

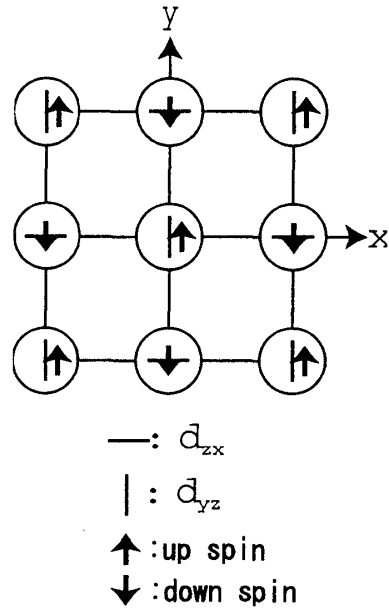


図 10.4: $G_{B1}(1, 1, 1)$ 状態のスピン軌道秩序

表 10.31 に $G_{B1}(1, 1, 1)$ 状態の占有軌道とその占有数を記す. 占有数 $a_0 + a_1 + a_2 + a_3$ を持つ軌道の配置を図示すると図 10.4 のようになる. d_{yz}, d_{zx} 軌道が交替する軌道秩序の上にスピンの反磁性的に配列している状態である.

10.10.3 まとめ

以上を正常状態からの2段階の転移としてとらえて, 模式的にまとめると

$$\begin{aligned}
 G_0 &= D_{4h} L(e_1, e_2) SR \\
 &\downarrow \check{G}_0^{(MB_{1g}, 0, 0)} \\
 G_{B1} &= (E + T(e_1)C_{2a}) L(e_1 + e_2, e_2 - e_1) SR \\
 \check{G}_{B1}^{(0, 1, 1)} &\swarrow \searrow \check{G}_{B1}^{(1, 1, 1)} \\
 G_{B1}(0, 1, 1) &\quad G_{B1}(1, 1, 1)
 \end{aligned}$$

と表すことが出来る.

G_0 からの転移で得られる第 10.4~10.8 節で考察した状態に対して, 上記と同様な手法で2番目の転移と, それに伴う状態を求めることが出来る.

表 10.31: $G_{B1}(1, 1, 1)$ 状態の占有軌道とその占有数

サイト	スピン	軌道	占有数
m	$\uparrow$	$\psi_1^\uparrow = \phi_1$	$a_0 + a_1 + a_2 + a_3$
m	$\downarrow$	$\psi_1^\downarrow = \phi_1$	$a_0 + a_1 - a_2 - a_3$
m	$\uparrow$	$\psi_2^\uparrow = \phi_2$	$a_0 - a_1 - a_2 + a_3$
m	$\downarrow$	$\psi_2^\downarrow = \phi_1$	$a_0 - a_1 + a_2 - a_3$
m	$\uparrow$	$\psi_3^\uparrow = \phi_3$	$b_0 + b_3$
m	$\downarrow$	$\psi_3^\downarrow = \phi_3$	$b_0 - b_3$
$e_1 + m$	$\uparrow$	$\psi_1^\uparrow = \phi_1$	$a_0 - a_1 + a_2 + a_3$
$e_1 + m$	$\downarrow$	$\psi_1^\downarrow = \phi_1$	$a_0 - a_1 - a_2 + a_3$
$e_1 + m$	$\uparrow$	$\psi_2^\uparrow = \phi_2$	$a_0 + a_1 - a_2 - a_3$
$e_1 + m$	$\downarrow$	$\psi_2^\downarrow = \phi_1$	$a_0 + a_1 + a_2 + a_3$
$e_1 + m$	$\uparrow$	$\psi_3^\uparrow = \phi_3$	$b_0 - b_3$
$e_1 + m$	$\downarrow$	$\psi_3^\downarrow = \phi_3$	$b_0 + b_3$
$T(m) \in L_1 = L(e_1 + e_2, e_2 - e_1)$			
$a_0 = R_{11}^{00} = R_{22}^{00}, \quad b_0 = R_{33}^{00}, \quad a_1 = R_{11}^{10} = -R_{22}^{10}$			
$a_2 = R_{11}^{03} = -R_{22}^{03}, \quad a_3 = R_{11}^{13} = R_{22}^{13}, \quad b_3 = R_{33}^{13}$			

付録F $\check{G}_0^{(\Gamma E_u, 1, 3)}$ の固定部分群の導出

既約表現 $\check{G}_0^{(\Gamma E_u, 1, 3)}$ の表現空間 $W(\check{G}_0^{(\Gamma E_u, 1, 3)}) = \{l_m \tau_\mu, il_m \tau_\mu\}_{\mathbf{R}} (m = 1, 2, \mu = 1, 2, 3)$ における 1 次元の固定点部分空間を持つ固定部分群 $G(\Gamma E_u, 1, 3)$ が表 9.1(p.502) の様になることを示そう。
 $T(\mathbf{m}) \in L_0, p \in D_{4h}, u(\mathbf{n}, \theta) \in S, \tilde{\phi}, t\tilde{\phi} \in \mathbf{R}$ に対して $l_m, \tau_\mu, (1, i)$ は次の変換をする。

$$\begin{aligned} T(\mathbf{m}) \cdot l_m &= l_m \\ p \cdot l_m &= \sum_{m'=1}^2 l_{m'} D_{m'm}(p) \\ u(\mathbf{n}, \theta) \cdot \tau_\mu &= \sum_{\mu'=1}^3 \tau_{\mu'} R_{\mu'\mu}(\mathbf{n}, \theta) \\ \tilde{\phi} \cdot (1, i) &= (e^{i\phi}, e^{i\phi}i) = (1, i) \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi \\ \sin \phi & \cos \phi \end{pmatrix} \\ t\tilde{\phi} \cdot (1, i) &= t \cdot (e^{i\phi}, e^{i\phi}i) = (e^{-i\phi}, e^{-i\phi}(-i)) = (1, i) \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi \\ -\sin \phi & -\cos \phi \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{F.1})$$

ここで $D(p)$ は表 B.2(その2 p.340) にある D_{4h} の既約表現 E_u の表現行列であり、 $R(\mathbf{n}, \theta)$ は (7.102)(その2 p.249) で定義されている 3 次元空間の回転行列である。並進群 $L_0 = L(e_1, e_2)$ に対して不変な表現を考えているので、以下の固定部分群は全て L_0 を含むので省略する。

F.1 OSP 状態: z 軸周りのスピン回転群を含む固定部分群を持つ状態

まず固定部分群 $G(\Gamma E_u, 1, 2)$ が純粋なスピン回転、例えば z 軸の周りの θ 回転 $u(e_3, \theta)$ を含むとする。その場合 $G(\Gamma E_u, 1, 2)$ の固定点部分空間は

$$W_{\text{axial}} = \{l_1 \tau_3, l_2 \tau_3, il_1 \tau_3, il_2 \tau_3\}_{\mathbf{R}} \quad (\text{F.2})$$

の部分空間でなければならない。一方 W_{axial} は z 軸周りのスピン回転からなる群

$$A(e_3) = \{u(e_3, \theta) \mid 0 \leq \theta \leq 2\pi\} \quad (\text{F.3})$$

に対して不変である。 $G(\Gamma E_u, 1, 2)$ は並進群 L_0 を必ず含み、スピン回転の部分は定まったので、残りは W_{axial} における $D_{4h} \times \mathbf{R}$ の固定部分群を求めればよい。 $D_{4h} \times \mathbf{R}$ の部分群は定理 2.4(その1 p.530) を使って求めることができる。そのためにまず $D_{4h} = D_4 \times C_I$ の部分群を求める。

命題 F.1. $D_{4h} = D_4 \times C_I$ の部分群は表 F.1 および表 F.2 に記載されているものからなる..

表 F.1: D_{4h} の直積型の部分群

H_a	コメント	$H_a \times C_I$	コメント
$D_4 = C_4 + C_{2x}C_4$	*	$D_4 \times C_I = D_{4h}$	*
$C_4 = \{E, C_{4z}^+, C_{2z}, C_{4z}^-\}$	*	$C_4 \times C_I = C_{4h}$	*
$D_2 = \{E, C_{2z}, C_{2x}, C_{2y}\}$	*	$D_2 \times C_I = D_{2h}$	*
$D_{2a} = C_{2z} + C_{2a}C_{2z}$	*	$D_{2a} \times C_I = D_{2ah}$	*
$C_{2z} = \{E, C_{2z}\}$	*	$C_{2z} \times C_I = C_{2h}$	*
$C_{2x} = \{E, C_{2x}\}$		$C_{2x} \times C_I = C_{2xh}$	
$C_{2y} = \{E, C_{2y}\}$		$C_{2y} \times C_I = C_{2yh}$	
$C_{2a} = \{E, C_{2a}\}$		$C_{2a} \times C_I = C_{2ah}$	
$C_{2b} = \{E, C_{2b}\}$		$C_{2b} \times C_I = C_{2bh}$	
$C_1 = E$	*	$C_1 \times C_I = C_I,$	*

*印は D_{4h} の正規部分群を表す

表 F.2: D_{4h} の非直積型の部分群

H_a	H_a の正規部分群 H_{a0}	D_{4h} の部分群: $(H_a/H_{a0}; C_I/C_1)$	コメント
D_4	C_4	$(D_4/C_4; C_I/C_1) = C_4 + C_{2x}IC_4 = C_{4v}$	*
	D_2	$(D_4/D_2; C_I/C_1) = D_2 + C_{2a}ID_2 = D_{2d}$	*
	D_{2a}	$(D_4/D_{2a}; C_I/C_1) = D_{2a} + C_{2x}ID_{2a} = D_{2ad}$	*
C_4	C_{2z}	$(C_4/C_{2z}; C_I/C_1) = C_{2z} + IC_{2z} = S_4$	*
D_2	C_{2z}	$(D_2/C_{2z}; C_I/C_1) = C_{2z} + C_{2x}IC_{2z} = C_{2xv}$	*
	C_{2x}	$(D_2/C_{2x}; C_I/C_1) = C_{2x} + C_{2z}IC_{2x} = C_{2xv}$	
	C_{2y}	$(D_2/C_{2y}; C_I/C_1) = C_{2y} + C_{2z}IC_{2y} = C_{2yv}$	
D_{2a}	C_{2z}	$(D_{2a}/C_{2z}; C_I/C_1) = C_{2z} + C_{2a}IC_{2z} = C_{2va}$	*
	C_{2a}	$(D_{2a}/C_{2a}; C_I/C_1) = C_{2a} + C_{2z}IC_{2a} = C_{2av}$	
	C_{2b}	$(D_{2a}/C_{2b}; C_I/C_1) = C_{2b} + C_{2z}IC_{2b} = C_{2bv}$	
C_{2z}	C_1	$(C_{2z}/C_1; C_I/C_1) = E + C_{2z}I = C_{1h}$	*
C_{2x}	C_1	$(C_{2x}/C_1; C_I/C_1) = E + C_{2x}I = C_{1hx}$	
C_{2y}	C_1	$(C_{2y}/C_1; C_I/C_1) = E + C_{2y}I = C_{1hy}$	
C_{2a}	C_1	$(C_{2a}/C_1; C_I/C_1) = E + C_{2a}I = C_{1ha}$	
C_{2b}	C_1	$(C_{2b}/C_1; C_I/C_1) = E + C_{2b}I = C_{1hb}$	

*印は D_{4h} の正規部分群であることを示す。

証明. $H = D_4, K = C_I = (E, I)$ に対して定理 2.4(その 1 p.530) を適用する. $H = D_4$ の部分群 H_a とその正規部分群 $H_{a0} \triangleleft H_a$, $K = C_I$ の部分群 K_a とその正規部分群 $K_{a0} \triangleleft K_a$ で H_a/H_{a0} と K_a/K_{a0} の間に同型写像

$$\theta: H_a/H_{a0} \Longrightarrow K_a/K_{a0} \quad (\text{F.4})$$

あるとき, $H \times K$ の部分群は $(H_a/H_{a0}; K_a/K_{a0}; \theta)$ として構成される¹. (K_a, K_{a0}) の組は $(C_I, C_I), (C_1, C_1), (C_I, C_1)$ の3種類である. 各場合に分けて考察する.

(1) $K_a = C_I, K_{a0} = C_I$ の場合.

同値関係 $H_a/H_{a0} \cong K_a/K_{a0}$ を満たす H_{a0} は $H_{a0} = H_a$ の場合だけである. 従ってこの場合の $D_4 \times C_I$ の部分群は

$$(H_a/H_{a0}; K_a/K_{a0}) = (H_a/H_a; C_I/C_I) = H_a C_I = H_a \times C_I \quad (\text{F.5})$$

となる. すなわち表 2.4(その1 p.523) にリストされている D_4 の部分群 H_a と C_I の直積 $H_a \times C_I$ である. すなわち表 F.1 の第2列にある部分群である. $I \in C_I$ は D_4 のすべての元と交換可能であるので, $(D_4 \text{ の正規部分群}) \times C_I$ は D_{4h} の正規部分群となる.

(2) $K_a = C_1, K_{a0} = C_1$ の場合.

同型関係 $H_a/H_0 \cong K_a/K_0$ を満たす H_{a0} は $H_{a0} = H_a$ となる. 従ってこの場合の $D_4 \times C_I$ の部分群は

$$(H_a/H_0; K_a/K_0) = (H_a/H_a; C_1/C_1) = H_a C_1 = H_a \quad (\text{F.6})$$

で D_4 の部分群そのものである. D_4 の部分群 H_a は表 2.4(その1 p.523) に記されている. これらを表 F.1 の第1列に記した.

(1),(2) の場合のように $(H \text{ の部分群}) \times (K \text{ の部分群})$ の型の $H \times K$ の部分群を直積型の部分群と呼ぶことにする.

(3) $K_a = C_I, K_{a0} = C_1$ の場合.

$K_a/K_{a0} \cong C_I$ である. 従って D_4 の部分群 H_a と H_a の指数2の正規部分群 H_{a0} をとって $(H_a/H_{a0}; K_a/K_{a0}) = (H_a/H_{a0}; C_I/C_1)$ を構成していけばよい.

まず H の部分群 H_a として $H_a = D_4$ の場合を考える. D_4 の指数2の正規部分群は表 2.4(その1 p.523) より C_4, D_2, D_{2a} である.

$$\begin{aligned} D_4/C_4 &\cong C_I/C_1 \\ D_4/D_2 &\cong C_I/C_1 \\ D_4/D_{2a} &\cong C_I/C_1 \end{aligned} \quad (\text{F.7})$$

と剰余類分解

$$\begin{aligned} D_4 &= C_4 + C_{2x} C_4 \\ D_4 &= D_2 + C_{2a} D_2 \\ D_4 &= D_{2a} + C_{2x} D_{2a} \\ C_I &= C_1 + I C_1 \end{aligned} \quad (\text{F.8})$$

¹ $(H_a/H_{a0}; K_a/K_{a0}; \theta)$ で同型写像 $\theta: H_a/H_{a0} \longrightarrow K_a/K_{a0}$ が1種類のとき $(H_a/H_{a0}; K_a/K_{a0})$ と記す.

より次の $D_4 \times C_I$ の部分群を得る.

$$\begin{aligned}
 (D_4/C_4; C_I/C_I) &= C_4 C_1 + C_{2x} I C_4 C_1 = C_4 + C_{2x} I C_4 = C_{4v} \\
 (D_4/D_2; C_I/C_I) &= D_2 C_1 + C_{2a} I D_2 C_1 = D_2 + C_{2a} I D_2 = D_{2d} \\
 (D_4/D_{2a}; C_I/C_I) &= D_{2a} C_1 + C_{2x} I D_{2a} C_1 = D_{2a} + C_{2x} I D_{2a} = D_{2ad}
 \end{aligned} \tag{F.9}$$

$H_a = D_2$ の場合 H_{a0} として C_{2z}, C_{2x}, C_{2y} がある. 剰余類分解

$$\begin{aligned}
 D_2 &= C_{2z} + C_{2x} C_{2z} \\
 D_2 &= C_{2x} + C_{2z} C_{2x} \\
 D_2 &= C_{2y} + C_{2z} C_{2y}
 \end{aligned} \tag{F.10}$$

より

$$\begin{aligned}
 (D_2/C_{2z}; C_I/C_1) &= C_{2z} + C_{2x} I C_{2z} = C_{2vx} \\
 (D_2/C_{2x}; C_I/C_1) &= C_{2x} + C_{2z} I C_{2x} = C_{2xv} \\
 (D_2/C_{2y}; C_I/C_1) &= C_{2y} + C_{2z} I C_{2y} = C_{2yv}
 \end{aligned} \tag{F.11}$$

を得る. H_a として他の部分群の場合も, 同様な方法で部分群を求めることが出来る.

$(H_a/H_{a0}; C_I/C_1)$ のような, それぞれの部分群の直積で表せないないタイプの部分群を非直積型の部分群ということにする. $D_4 \times C_I$ の非直積型の部分群を表 F.2 に記す. ■

W_{axial} における $D_{4h} \times \mathbf{R}$ の固定部分群を求めよう. 定理 2.4(その 1 p.530) より $D_{4h}, \mathbf{R}$ の部分群 $H_a \in D_{4h}, K_a \in \mathbf{R}$ とそれらの正規部分群 $H_{a0} \triangleleft H_a, K_{a0} \triangleleft K_a$ で $H_a/H_{a0} \cong K_a/K_{a0}$ なる関係があるとき, $D_{4h} \times \mathbf{R}$ の部分群は $(H_a/H_{a0}; K_a/K_{a0}; \theta_i)$ として求められる. ここで θ_i は H_a/H_{a0} から K_a/K_{a0} への同型写像である. $(H_a/H_{a0}; K_a/K_{a0}; \theta_i)$ は必ず $H_{a0} K_{a0}$ を含んでいることに注目されたい. W_{axial} の基底はすべて C_{2z}, I の作用に対して符号を変え, IC_{2z} に対して不変であるので, 固定部分群を構成する H_{a0} は C_{2z}, I を含まず, IC_{2z} を含まねばならない. したがって H_{a0} の候補となる D_{4h} の部分群は命題 F.1 より

$$\begin{aligned}
 C_{2xv} &= \{E, C_{2x}, IC_{2z}, IC_{2y}\} \\
 C_{2yv} &= \{E, C_{2y}, IC_{2z}, IC_{2x}\} \\
 C_{2av} &= \{E, C_{2a}, IC_{2z}, IC_{2b}\} \\
 C_{2bv} &= \{E, C_{2b}, IC_{2z}, IC_{2a}\} \\
 C_{1h} &= \{E, IC_{2z}\}
 \end{aligned} \tag{F.12}$$

となる. C_{2xv} と C_{2yv}, C_{2av} と C_{2bv} には

$$\begin{aligned}
 C_{2yv} &= C_{2a}^+ C_{2xv} C_{2a}^- \\
 C_{2bv} &= C_{2x}^+ C_{2av} C_{2x}^-
 \end{aligned} \tag{F.13}$$

なる共役関係があるので H_{a0} として C_{2xv}, C_{2av}, C_{1h} だけを考ればよい.

一方 $\tilde{\phi} \in \Phi (\phi \neq 0)$ は W_{axial} の任意のベクトルを変化させる. 従って K_0 は純粋なゲージ変換 $\tilde{\phi}$ を含んではならない. K_{a0} として可能な $\mathbf{R}$ の部分群は $T_\phi = (E, t\tilde{\phi})$ と C_1 である. ここで $\tilde{\phi}$ はある定まった Φ の一つ元である. $T = (E, t)$ とすると

$$T_\phi = \left(\frac{\tilde{\phi}}{2}\right) T \left(\frac{\tilde{\phi}}{2}\right)^{-1} \quad (\text{F.14})$$

なる共役関係があるので K_{a0} の候補として $T = (E, t)$ と C_1 とを考えればよい. 従って H_{a0}, K_{a0} の候補となるのはつぎの6通りである.

$$\begin{array}{llll} (1) H_{a0} = C_{2xv} & K_{a0} = T & (2) H_{a0} = C_{2av} & K_{a0} = T \\ (3) H_{a0} = C_{1h} & K_{a0} = T & (4) H_{a0} = C_{2xv} & K_{a0} = C_1 \\ (5) H_{a0} = C_{2av} & K_{a0} = C_1 & (6) H_{a0} = C_{1h} & K_{a0} = C_1 \end{array}$$

各場合につき分けて考察する.

(1) $H_{a0} = C_{2xv}, K_{a0} = T$ の場合を考える. $\mathbf{R}$ の部分群 K_a で T をその正規部分群とするものは $K_a = T$ と $K_a = D_2^R = T + \tilde{\pi}T = (E, \tilde{\pi}) + t(E, \tilde{\pi})$ だけである. $K_a = T$ の場合 $H_a/H_{a0} \cong K_a/K_{a0} \cong C_1$ となる H_a は $H_a = H_{a0} = C_{2xv}$ となる. したがって

$$(C_{2xv}/C_{2xv}; T/T) = C_{2xv}T \quad (\text{F.15})$$

を得る. W_{axial} における $(C_{2xv}/C_{2xv}; T/T)$ の固定点部分空間は

$$\text{Fix}((C_{2xv}/C_{2xv}; T/T)) = \{l_1\tau_3\}_{\mathbf{R}} \quad (\text{F.16})$$

となる.

$K_a = D_2^R = T + \tilde{\pi}T$ の場合

$$H_a/C_{2xv} \cong D_2^R/T \cong (E, \tilde{\pi}) \quad (\text{F.17})$$

なる H_a を見出せばよい. そのような $H_a \in D_{4h}$ は

$$H_a = C_{2xv} + IC_{2xv} = \{E, C_{2x}, IC_{2z}, IC_{2y}\} + I\{E, C_{2x}, IC_{2z}, IC_{2y}\} = D_{2h} \quad (\text{F.18})$$

であることは容易にわかる. 剰余類分解

$$\begin{aligned} H_a &= D_{2h} = C_{2xv} + IC_{2xv} \\ D_2^R &= T + \tilde{\pi}T \end{aligned} \quad (\text{F.19})$$

より $D_{4h} \times \mathbf{R}$ の部分群

$$(D_{2h}/C_{2xv}; D_2^R/T) = C_{2xv}T + I\tilde{\pi}C_{2xv}T = (E + I\tilde{\pi})C_{2xv}T \quad (\text{F.20})$$

を得る. W_{axial} における $(D_{2h}/C_{2xv}; D_2^R/T)$ の固定点部分空間は

$$\text{Fix}((D_{2h}/C_{2xv}; D_2^R/T)) = \{l_1\tau_3\}_{\mathbf{R}} \quad (\text{F.21})$$

となり, (F.16) で求めた固定点部分空間と同じになる. W_{axial} の部分空間 $\{l_1\tau_3\}$ の固定部分群としては最大のものを取ると, $(D_{2h}/C_{2xv}; D_2^R/T)$ を固定部分群と考える. さらにスピン回転部分も考慮すると $l_1\tau_3$ は $A(e_3)$ に不変であり l_1 は C_{2z} の作用で符号を変え, τ_3 は u_{2x} の作用で符号を変えるので $l_1\tau_3$ は $C_{2z}u_{2x}$ に対して不変である. 従って G_0 全体で考察すると次の固定部分群と固定点部分空間を得る.

$$\begin{aligned} G_1 &= (E + C_{2z}u_{2x})(E + I\tilde{\pi})C_{2xv}L_0A(e_3)T \\ \text{Fix}(G_1) &= \{l_1\tau_3\}_{\mathbf{R}} \end{aligned} \quad (\text{F.22})$$

(2) $H_{a0} = C_{2av}$, $K_{a0} = T$ の場合. (1) の場合と同様にして

$$H_a = C_{2av} + IC_{2av} = \{E, C_{2a}, IC_{2z}, IC_{2b}\} + I\{E, C_{2a}, IC_{2z}, IC_{2b}\} = D_{2a} \quad (\text{F.23})$$

として $D_{4h} \times \mathbf{R}$ の部分群

$$(D_{2a}/C_{2av}; D_2^R/T) = (E + I\tilde{\pi})C_{2av}T \quad (\text{F.24})$$

を得る. G_0 の中で考察すると, 次の固定部分群と固定点部分空間を得る.

$$\begin{aligned} G_2 &= (E + C_{2z}u_{2x})(E + I\tilde{\pi})C_{2av}L_0A(e_3)T \\ \text{Fix}(G_2) &= \{(l_1 + l_2)\tau_3\}_{\mathbf{R}} \end{aligned} \quad (\text{F.25})$$

(3) $H_{a0} = C_{1h}$, $K_{a0} = T$ の場合. $H_a/H_{a0} \cong K_a/K_{a0}$ となる可能な $H_a \subset D_{4h}, K_a \subset \mathbf{R}$ とそれに対応する $D_{4h} \times \mathbf{R}$ の部分群 $(H_a/H_{a0}; K_a/K_{a0})$, $\text{Fix}((H_a/H_{a0}; K_a/K_{a0}))$ を表 F.3 に示す.

表 F.3: $H_0 = C_{1h}, K_0 = T$ の場合の固定部分群と固定点部分空間

H_a	H_{a0}	K_a	K_{a0}	$(H_a/H_{a0}; K_a/K_{a0})$	$\text{Fix}((H_a/H_{a0}; K_a/K_{a0}))$
C_{1h}	C_{1h}	T	T	$C_{1h}T$	$\{l_1\tau_3, l_2\tau_3\}_{\mathbf{R}}$
C_{2xv}	C_{1h}	D_2^R	T	$(E + C_{2x}\tilde{\pi})C_{1h}T$	$\{l_2\tau_3\}_{\mathbf{R}}$
C_{2av}	C_{1h}	D_2^R	T	$(E + C_{2a}\tilde{\pi})C_{1h}T$	$\{(l_2 - l_1)\tau_3\}_{\mathbf{R}}$
C_{2h}	C_{1h}	D_2^R	T	$(E + I\tilde{\pi})C_{1h}T$	$\{l_1\tau_3, l_2\tau_3\}_{\mathbf{R}}$

$$\begin{aligned} l_2\tau_3 &= C_{4z}^+ l_1\tau_3 \\ (l_2 - l_1)\tau_3 &= C_{4z}^+ (l_1 + l_2)\tau_3 \end{aligned} \quad (\text{F.26})$$

が成立するので表 F.3 の固定点部分空間は 2 次元のものか, $\text{Fix}(G_1)$ または $\text{Fix}(G_2)$ に同値であり, 新たなものは得られない.

(4) $H_{a0} = C_{2xv}$, $K_{a0} = C_1$ の場合. $H_a/H_{a0} \cong K_a/K_{a0}$ となる可能な $H_a \subset D_{4h}, K_a \subset \mathbf{R}$ とそれに対応する $D_{4h} \times \mathbf{R}$ の部分群 $(H_a/H_{a0}; K_a/K_{a0})$, $\text{Fix}((H_a/H_{a0}; K_a/K_{a0}))$ を表 F.4 に示す.

$il_1\tau_3 = (\frac{2\pi}{4})(l_1\tau_3)$ が成立するので, 表 F.4 の固定点部分空間は 2 次元のものか $\text{Fix}(G_1)$ に同値になり, 新たな固定部分群は得られない.

表 F.4: $H_{a0} = C_{2xv}$, $K_{a0} = C_1$ の場合の固定部分群と固定点部分空間

H_a	H_{a0}	K_a	K_{a0}	$(H_a/H_{a0}; K_a/K_{a0})$	$\text{Fix}((H_a/H_{a0}; K_a/K_{a0}))$
D_{2h}	C_{2xv}	C_2^R	C_1	$C_{2xv} + I\tilde{\pi}C_{2xv}$	$\{l_1\tau_3, il_1\tau_3\}_R$
D_{2h}	C_{2xv}	T	C_1	$C_{2xv} + ItC_{2xv}$	$\{il_1\tau_3\}_R$
C_{2xv}	C_{2xv}	C_1	C_1	C_{2xv}	$\{l_1\tau_3, il_1\tau_3\}_R$
$C_2^R = \{E, \tilde{\pi}\}$					

(5) $H_a = C_{2av}$, $K_{a0} = C_1$ の場合. (4) の場合と同様な考察で G_1, G_2 以外に新しい固定部分群は得られない.

(6) $H_a = C_{1h}$, $K_{a0} = C_1$ の場合. $H_{a0} = C_{1h} = (E, IC_{2z})$ をその正規部分群とする D_{4h} の部分群 H_a は表 F.1, 表 F.2 の中から IC_{2z} を含むものを探すと,

$$D_{4h}, C_{4h}, D_{2h}, D_{2ah}, C_{2h}, S_4, C_{2xv}, C_{2yv}, C_{2av}, C_{2bv}, C_{1h} \quad (\text{F.27})$$

である. $H_a = D_{4h}$ の場合以外の場合は (3), (4) の場合と同様に得られる固定点部分空間は 2 次元以上になるか, $\text{Fix}(G_1)$ または $\text{Fix}(G_2)$ に同値になることを示すことが出来る.

例えば $H_a = D_{2h}$ の場合を考える. 剰余類分解

$$D_{2h} = (E, IC_{2z}) + C_{2z}(E, IC_{2z}) + C_{2x}(E, IC_{2z}) + C_{2y}(E, IC_{2z}) \quad (\text{F.28})$$

より $D_{2h}/C_{1h} \cong D_2$ となるので $H_a/H_{a0} \cong K_a/K_{a0} = D_{2h}/C_{1h} \cong K_a/C_1$ となる K_a は

$$K_a = D_2^R = E + \tilde{\pi} + t + t\tilde{\pi} \quad (\text{F.29})$$

となる. したがって得られる固定部分群とその固定点部分空間は

$$\begin{aligned}
 (D_{2h}/C_{1h}; D_2^R/C_1; \theta_1) &= C_{1h} + C_{2z}\tilde{\pi}C_{1h} + C_{2x}tC_{1h} + C_{2y}t\tilde{\pi}C_{1h} \\
 \text{Fix}((D_{2h}/C_{1h}; D_2^R/C_1; \theta_1)) &= \{l_1\tau_3, il_2\tau_3\}_R \\
 (D_{2h}/C_{1h}; D_2^R/C_1; \theta_2) &= C_{1h} + C_{2z}\tilde{\pi}C_{1h} + C_{2x}t\tilde{\pi}C_{1h} + C_{2y}tC_{1h} \\
 \text{Fix}((D_{2h}/C_{1h}; D_2^R/C_1; \theta_2)) &= \{il_1\tau_3, l_2\tau_3\}_R = C_{4z}^+ \cdot \{l_1\tau_3, il_2\tau_3\}_R \\
 (D_{2h}/C_{1h}; D_2^R/C_1; \theta_3) &= C_{1h} + C_{2z}tC_{1h} + C_{2x}\tilde{\pi}C_{1h} + C_{2y}t\tilde{\pi}C_{1h} \\
 \text{Fix}((D_{2h}/C_{1h}; D_2^R/C_1; \theta_3)) &= \{il_2\tau_3\}_R = (C_{4z}^+(\frac{\pi}{2})) \cdot \{l_1\tau_3\}_R \\
 (D_{2h}/C_{1h}; D_2^R/C_1; \theta_4) &= C_{1h} + C_{2z}tC_{1h} + C_{2x}t\tilde{\pi}C_{1h} + C_{2y}\tilde{\pi}C_{1h} \\
 \text{Fix}((D_{2h}/C_{1h}; D_2^R/C_1; \theta_4)) &= \{il_1\tau_3\}_R = (\frac{\pi}{2}) \cdot \{l_1\tau_3\}_R
 \end{aligned} \quad (\text{F.30})$$

$$\begin{aligned}
 (D_{2h}/C_{1h}; D_2^R/C_1; \theta_5) &= C_{1h} + C_{2z}t\tilde{\pi}C_{1h} + C_{2x}\tilde{\pi}C_{1h} + C_{2y}tC_{1h} \\
 \text{Fix}((D_{2h}/C_{1h}; D_2^R/C_1; \theta_5)) &= \{l_2\tau_3\}_R = C_{4z}^+ \cdot \{l_1\tau_3\}_R \\
 (D_{2h}/C_{1h}; D_2^R/C_1; \theta_6) &= C_{1h} + C_{2z}t\tilde{\pi}C_{1h} + C_{2x}tC_{1h} + C_{2y}\tilde{\pi}C_{1h} \\
 \text{Fix}((D_{2h}/C_{1h}; D_2^R/C_1; \theta_6)) &= \{l_1\tau_3\}_R
 \end{aligned}$$

となり, 固定点部分空間は 2 次元か $\text{Fix}(G(\Gamma Eu, 1, 2)_1)$ に同値なものしか得られない. ここで θ_j ($j = 1, \dots, 6$) はつぎの D_{2h}/C_{1h} から D_2^R/C_1 への同型写像である.

$$\begin{aligned}
 \theta_1(C_{2z}C_{1h}) &= \tilde{\pi}, & \theta_1(C_{2x}C_{1h}) &= t \\
 \theta_2(C_{2z}C_{1h}) &= \tilde{\pi}, & \theta_2(C_{2x}C_{1h}) &= t\tilde{\pi} \\
 \theta_3(C_{2z}C_{1h}) &= t, & \theta_3(C_{2x}C_{1h}) &= \tilde{\pi} \\
 \theta_4(C_{2z}C_{1h}) &= t, & \theta_4(C_{2x}C_{1h}) &= t\tilde{\pi} \\
 \theta_5(C_{2z}C_{1h}) &= t\tilde{\pi}, & \theta_5(C_{2x}C_{1h}) &= \tilde{\pi} \\
 \theta_6(C_{2z}C_{1h}) &= t\tilde{\pi}, & \theta_6(C_{2x}C_{1h}) &= t
 \end{aligned}$$

H_a が D_{4h} 以外の他の (F.27) の部分群の場合も, 固定点部分空間がその次元が 2 次元以上となるか, $\text{Fix}(G_1)$, $\text{Fix}(G_2)$ に同値であることが示される.

$H_a = D_{4h}$ の場合を考える. 剰余類分解

$$\begin{aligned}
 D_{4h} &= C_{1h} + C_{4z}^+C_{1h} + C_{2z}C_{1h} + C_{4z}^-C_{1h} \\
 &\quad + C_{2x}\{C_{1h} + C_{4z}^+C_{1h} + C_{2z}C_{1h} + C_{4z}^-C_{1h}\}
 \end{aligned} \tag{F.31}$$

より $D_{4h}/C_{1h} \cong D_4$ となる. したがって $H_a/H_{a0} \cong K_a/K_{a0}$ すなわち

$$D_{4h}/C_{1h} \cong K_a/C_1 \tag{F.32}$$

となる K_a は

$$K_a = D_4^R = \{E, \widetilde{(\frac{\pi}{2})}, \tilde{\pi}, \widetilde{(\frac{3\pi}{2})}\} + t\{E, \widetilde{(\frac{\pi}{2})}, \tilde{\pi}, \widetilde{(\frac{3\pi}{2})}\} \tag{F.33}$$

となる. (F.31), (F.33) より D_{4h}/C_{1h} から D_4^R/C_1 への同型写像はつぎの 8 個がある.

$$\begin{aligned}
 \theta_1(C_{4z}^+C_{1h}) &= \widetilde{(\frac{\pi}{2})}, & \theta_1(C_{2x}C_{1h}) &= t \\
 \theta_2(C_{4z}^+C_{1h}) &= \widetilde{(\frac{\pi}{2})}, & \theta_2(C_{2x}C_{1h}) &= t\tilde{\pi} \\
 \theta_3(C_{4z}^+C_{1h}) &= \widetilde{(\frac{\pi}{2})}, & \theta_3(C_{2x}C_{1h}) &= t\widetilde{(\frac{\pi}{2})} \\
 \theta_4(C_{4z}^+C_{1h}) &= \widetilde{(\frac{\pi}{2})}, & \theta_4(C_{2x}C_{1h}) &= t\widetilde{(\frac{3\pi}{2})}
 \end{aligned} \tag{F.34}$$

$$\begin{aligned}
 \theta_5(C_{4z}^+ C_{1h}) &= \widetilde{\left(\frac{3\pi}{2}\right)}, & \theta_5(C_{2x} C_{1h}) &= t \\
 \theta_6(C_{4z}^+ C_{1h}) &= \widetilde{\left(\frac{3\pi}{2}\right)}, & \theta_6(C_{2x} C_{1h}) &= t\tilde{\pi} \\
 \theta_7(C_{4z}^+ C_{1h}) &= \widetilde{\left(\frac{3\pi}{2}\right)}, & \theta_7(C_{2x} C_{1h}) &= t\widetilde{\left(\frac{\pi}{2}\right)} \\
 \theta_8(C_{4z}^+ C_{1h}) &= \widetilde{\left(\frac{3\pi}{2}\right)}, & \theta_8(C_{2x} C_{1h}) &= t\widetilde{\left(\frac{3\pi}{2}\right)}
 \end{aligned}$$

同型写像 θ_1 の場合を考えると、次の固定部分群を得る。

$$\begin{aligned}
 (D_{4h}/C_{1h}; D_4^R/C_1; \theta_1) &= [\{E, C_{4z}^+(\widetilde{\frac{\pi}{2}}), C_{2z}\tilde{\pi}, C_{4z}^-(\widetilde{\frac{3\pi}{2}})\} \\
 &\quad + tC_{2x}\{E, C_{4z}^+(\widetilde{\frac{\pi}{2}}), C_{2z}(\tilde{\pi}), C_{4z}^-(\widetilde{\frac{3\pi}{2}})\}]C_{1h} \\
 &= D_4((\widetilde{\frac{\pi}{2}}), t)C_{1h}
 \end{aligned} \tag{F.35}$$

を得る。ここで

$$\begin{aligned}
 D_4((\widetilde{\frac{\pi}{2}}), t) &= [\{E, C_{4z}^+(\widetilde{\frac{\pi}{2}}), C_{2z}\tilde{\pi}, C_{4z}^-(\widetilde{\frac{3\pi}{2}})\} \\
 &\quad + C_{2x}t\{E, C_{4z}^+(\widetilde{\frac{\pi}{2}}), C_{2z}(\tilde{\pi}), C_{4z}^-(\widetilde{\frac{3\pi}{2}})\}]
 \end{aligned} \tag{F.36}$$

である。これより W_{axial} における $(D_{4h}/C_{1h}; D_4^R/C_1; \theta_1)$ の固定点部分空間

$$\text{Fix}((D_{4h}/C_{1h}; D_4^R/C_1; \theta_1)) = \{(l_1 + il_2)\tau_3\}_{\text{R}} \tag{F.37}$$

を得る。

同型写像 θ_3 を考えると次の固定部分群を得る。

$$\begin{aligned}
 (D_{4h}/C_{1h}; D_4^R/C_1; \theta_3) &= [\{E, C_{4z}^+(\widetilde{\frac{\pi}{2}}), C_{2z}\tilde{\pi}, C_{4z}^-(\widetilde{\frac{3\pi}{2}})\} \\
 &\quad + C_{2x}t(\widetilde{\frac{\pi}{2}})\{E, C_{4z}^+(\widetilde{\frac{\pi}{2}}), C_{2z}\tilde{\pi}, C_{4z}^-(\widetilde{\frac{3\pi}{2}})\}]C_{1h} \\
 &= [\{E, C_{4z}^+(\widetilde{\frac{\pi}{2}}), C_{2z}\tilde{\pi}, C_{4z}^-(\widetilde{\frac{3\pi}{2}})\} \\
 &\quad + C_{2a}t\{E, C_{4z}^+(\widetilde{\frac{\pi}{2}}), C_{2z}\tilde{\pi}, C_{4z}^-(\widetilde{\frac{3\pi}{2}})\}]C_{1h} \\
 &= D_4((\widetilde{\frac{\pi}{2}}), t(\widetilde{\frac{\pi}{2}}))C_{1h}
 \end{aligned} \tag{F.38}$$

を得る。ここで

$$\begin{aligned}
 D_4((\widetilde{\frac{\pi}{2}}), t(\widetilde{\frac{\pi}{2}})) &= \{E, C_{4z}^+(\widetilde{\frac{\pi}{2}}), C_{2z}\tilde{\pi}, C_{4z}^-(\widetilde{\frac{3\pi}{2}})\} \\
 &\quad + C_{2a}t\{E, C_{4z}^+(\widetilde{\frac{\pi}{2}}), C_{2z}\tilde{\pi}, C_{4z}^-(\widetilde{\frac{3\pi}{2}})\}
 \end{aligned} \tag{F.39}$$

である。これより W_{axial} における $(D_{4h}/C_{1h}; D_4^R/C_1; \theta_3)$ の固定点部分空間は

$$\text{Fix}((D_{4h}/C_{1h}; D_4^R/C_1; \theta_3)) = \{[(l_1 + l_2) + i(l_2 - l_1)]\tau_3\}_{\text{R}} \tag{F.40}$$

を得る.

θ_1, θ_3 以外の同型写像 ($\theta_j, j \neq 1, 3$) を使っても上の $(D_{4h}/C_{1h}; D_4^R/C_1; \theta_1)$ または $(D_{4h}/C_{1h}; D_4^R/C_1; \theta_3)$ に同値な部分群が得られる. したがって G_0 全体で考察すると次の固定部分群と固定点部分空間を得る.

$$\begin{aligned} G_3 &= (E + C_{2z}u_{2x})D_4\left(\left(\frac{\pi}{2}\right), t\right)C_{1h}L_0A(e_3) \\ \text{Fix}(G_3) &= \{(l_1 + il_2)\tau_3\}_R \\ G_4 &= (E + C_{2z}u_{2x})D_4\left(\left(\frac{\pi}{2}\right), t\left(\frac{\pi}{2}\right)\right)C_{1h}L_0A(e_3) \\ \text{Fix}(G_4) &= \{[(l_1 + l_2) + i(l_2 - l_1)]\tau_3\}_R \end{aligned} \quad (\text{F.41})$$

以上固定部分群 $G(\Gamma E_u, 1, 2)$ として純粋なスピン回転を含む場合として表 9.1 G_1, G_2, G_3, G_4 の 4 個の固定部分群を得る.

F.2 SSP 状態: ↑ スピン電子のみによるペアリング状態

F.2 節では純粋なスピン回転を含まず, スピン回転 $u \in S$ を R の元とカップルした $ur(u)$ ($u \in S, r(u) (\neq E) \in R$) の形でだけ含む固定部分群を考察しよう. その目的で $\check{S}^{(1)} \otimes \check{R}^{(2)}$ の表現空間

$$W(\check{S}^{(1)} \otimes \check{R}^{(2)}) = \{\tau_1, \tau_2, \tau_3, i\tau_1, i\tau_2, i\tau_3\}_R \quad (\text{F.42})$$

における群 $S \times R$ の純粋なスピン回転を含まない固定部分群を求めよう.

$S \times R$ の部分群は S, R の部分群 $S_a \in S, R_a \in R$ とそれらの正規部分群 $S_{a0} \triangleleft S_a, R_{a0} \triangleleft R_a$ で $S_a/S_{a0} \cong R_a/R_{a0}$ となるとき

$$(S_a/S_{a0}; R_a/R_{a0} : \theta) \quad (\text{F.43})$$

として与えられる. ここで θ は S_a/S_{a0} から R_a/R_{a0} への同型写像である. $W(\check{S}^{(1)} \otimes \check{R}^{(2)})$ の任意のベクトルは $\check{\phi} \in \Phi$ の作用で変化するので R_{a0} の候補となるのは $T = (E, t)$ と C_1 だけである². 純粋なスピン回転を含まない部分群を考えているので S_{a0} の候補は C_1 だけである. これらの $S_{a0} = C_1, R_a = T, C_1$ の場合に対応する $S_a/S_{a0} \cong R_a/R_{a0}$ となる S_a, S_{a0}, R_a, R_{a0} の組み合わせは表 F.5 のようになる.

まず (5) $S_a = C_n^S, S_{a0} = C_1, R_a = C_n^R, R_{a0} = C_1$ ($n \geq 3$) の場合を考える. C_n^S/C_1 から C_n^R/C_1 への同型写像として次のものがある.

$$\theta_m(u(e_3, \frac{2\pi}{n})) = \widetilde{(m\frac{2\pi}{n})} \quad (\text{F.44})$$

ここで m は n と互いに素な n 以下の自然数である. これらの同型写像から得られる $S \times R$ の部分群は

$$(C_n^S/C_1; C_n^R/C_1; \theta_m) \equiv \tilde{C}_{n,m}^S = \{u(e_3, \frac{j \cdot 2\pi}{n}) (\widetilde{mj \cdot 2\pi}) \mid 0 \leq j \leq (n-1)\} \quad (\text{F.45})$$

² $T_\phi = (E, t\phi) = (\frac{\phi}{2})(E, t)(-\frac{\phi}{2}) = (\frac{\phi}{2})T(-\frac{\phi}{2})$ は T に共役なので考える必要がない.

表 F.5: S_a/C_1 と R_a/R_{a0} が同型になる S_a, S_{a0}, R_a, S_{a0} の組あわせ

	S_a	S_{a0}	R_a	R_{a0}	コメント
(1)	C_1	C_1	T	T	
(2)	C_2^S	C_1	D_2^R	T	
(3)	C_2^S	C_1	C_2^R	C_1	
(4)	D_2^S	C_1	D_2^R	C_1	
(5)	C_n^S	C_1	C_n^R	C_1	$n \geq 3$
(6)	D_n^S	C_1	D_n^R	C_1	$n \geq 3$
(7)	C_∞^S	C_1	C_∞^R	C_1	
(8)	D_∞^S	C_1	D_∞^R	C_1	
$C_2^S = \{E, u_{2z}\},$					$C_2^R = \{E, \tilde{\pi}\}$
$D_2^S = \{E, u_{2z}, u_{2x}, u_{2y}\},$					$D_2^R = \{E, \tilde{\pi}, t, t\tilde{\pi}\}$
$C_n^S = \{u(e_3, \frac{2\pi j}{n}) \mid 0 \leq j \leq (n-1)\},$					$C_n^R = \{\widetilde{(\frac{2\pi j}{n})} \mid 0 \leq j \leq (n-1)\}$
$D_n^S = C_n^S + u_{2x} C_n^S,$					$D_n^R = C_n^R + t C_n^R$
$C_\infty^S = A(e_3) = \{u(e_3, \theta) \mid 0 \leq \theta \leq 2\pi\},$					$C_\infty^R = \{\tilde{\phi} \mid 0 \leq \phi \leq 2\pi\}$
$D_\infty^S = C_\infty^S + u_{2x} C_\infty^S,$					$D_\infty^R = C_\infty^R + t C_\infty^R$

で与えられる.

$\tilde{C}_{n,m}^S$ の $W(\tilde{S}^{(1)} \otimes \tilde{R}^{(2)})$ における固定点部分空間を求めよう. $\tilde{C}_{m,n}^S$ に不変な $W(\tilde{S}^{(1)} \otimes \tilde{R}^{(2)})$ におけるベクトルを

$$v = a\tau_1 + b\tau_2 + c\tau_3 \quad (\text{F.46})$$

とする. ここで a, b, c は複素数である. τ_3 は $u(e_3, \frac{i2\pi}{n})$ ($j = 0, \dots, n-1$) に対して不変であるので $c = 0$ である. $v = a\tau_1 + b\tau_2$ の $(u(e_3, \frac{2\pi}{n}) \widetilde{(\frac{2\pi m}{n})}) \in \tilde{C}_{n,m}^S$ に対する不変性より

$$\begin{aligned} (u(e_3, \frac{2\pi}{n}) \widetilde{(\frac{2\pi m}{n})}) \cdot v &= a(\tau_1 \cos \frac{2\pi}{n} + \tau_2 \sin \frac{2\pi}{n}) e^{i\frac{2\pi m}{n}} + b(-\tau_1 \sin \frac{2\pi}{n} + \tau_2 \cos \frac{2\pi}{n}) e^{i\frac{2\pi m}{n}} \\ &= (a \cos \frac{2\pi}{n} - b \sin \frac{2\pi}{n}) e^{i\frac{2\pi m}{n}} \tau_1 + (a \sin \frac{2\pi}{n} + b \cos \frac{2\pi}{n}) e^{i\frac{2\pi m}{n}} \tau_2 \\ &= a\tau_1 + b\tau_2 \end{aligned} \quad (\text{F.47})$$

を得る. これより

$$\begin{aligned} (a \cos \frac{2\pi}{n} - b \sin \frac{2\pi}{n}) e^{i\frac{2\pi m}{n}} &= a \\ (a \sin \frac{2\pi}{n} + b \cos \frac{2\pi}{n}) e^{i\frac{2\pi m}{n}} &= b \end{aligned} \quad (\text{F.48})$$

が得られる. (F.48) が $(a, b) = (0, 0)$ でない解をもつためには

$$\begin{aligned} \begin{vmatrix} \cos \frac{2\pi}{n} e^{i\frac{2\pi m}{n}} - 1 & -\sin \frac{2\pi}{n} e^{i\frac{2\pi m}{n}} \\ \sin \frac{2\pi}{n} e^{i\frac{2\pi m}{n}} & \cos \frac{2\pi}{n} e^{i\frac{2\pi m}{n}} - 1 \end{vmatrix} &= e^{i\frac{4\pi m}{n}} - 2 \cos \frac{2\pi}{n} e^{i\frac{2\pi m}{n}} + 1 \\ &= (e^{i\frac{2\pi m}{n}} - e^{i\frac{2\pi}{n}})(e^{i\frac{2\pi m}{n}} - e^{-i\frac{2\pi}{n}}) = 0 \end{aligned} \quad (\text{F.49})$$

を満たさねばならない。従って

$$m = \pm 1 \quad (\text{F.50})$$

を得る。 $m = \pm 1$ に対応して (F.48) は

$$b = \begin{cases} ia & \text{if } m = 1 \\ -ia & \text{if } m = -1 \equiv n-1 \end{cases} \quad (\text{F.51})$$

の解を持つ。このようにして可能な固定部分群として $\tilde{C}_{n,1}^S$ と $\tilde{C}_{n,n-1}^S$ を得るが

$$\tilde{C}_{n,n-1}^S = u_{2x} \tilde{C}_{n,1}^S u_{2x} \quad (\text{F.52})$$

となって $\tilde{C}_{n,n-1}^S$ は $\tilde{C}_{n,1}^S$ に同値になり、 $\tilde{C}_{n,1}^S$ だけを考察し、今後 $\tilde{C}_{n,1}^S$ を $\tilde{C}_n^S$ と記すことにする。このようにして $S_a = C_n^S, S_{a0} = C_1, R_a = C_n^R, R_{a0} = C_1$ より $W(\check{S}^{(1)} \otimes \check{R}^{(2)})$ における固定部分群と固定点部分空間を得る。

$$(C_n^S/C_1; C_n^R/C_1; \theta_1) = \tilde{C}_n^S = \{u(e_3, \frac{j \cdot 2\pi}{n}) (\widetilde{\frac{j \cdot 2\pi}{n}}) \mid 0 \leq j \leq n-1\} \quad (\text{F.53})$$

$$\text{Fix}(\tilde{C}_n^S) = \{(\tau_1 + i\tau_2), i(\tau_1 + i\tau_2)\}_R$$

つぎに 6) $S_a = D_n^S, S_{a0} = C_1, R_a = D_n^R, R_{a0} = C_1$ の場合を考える。以上のことを考慮すると D_n^S から D_n^R への同型写像として

$$\theta_{1m}(u(e_3, \frac{2\pi}{n})) = (\widetilde{\frac{2\pi}{n}}) \quad (\text{F.54})$$

$$\theta_{1m}(u_{2x}) = t(\frac{2\pi m}{n})$$

がある。ここで $m = 0, \dots, n-1$ である。対応する部分群は

$$(D_n^S/C_1; D_n^R/C_1; \theta_{1m}) = \tilde{D}_{nm}^S = \{u(e_3, \frac{2\pi j}{n}) (\widetilde{\frac{2\pi j}{n}}) \mid 0 \leq j \leq n-1\} \\ + u_{2x} t(\frac{2\pi m}{n}) \{u(e_3, \frac{2\pi j}{n}) (\widetilde{\frac{2\pi j}{n}}) \mid 0 \leq j \leq n-1\} \quad (\text{F.55})$$

となる。ここで同値関係

$$\tilde{D}_n^S \equiv \tilde{D}_{n0}^S = (\widetilde{\frac{\pi m}{n}}) \tilde{D}_{nm}^S (\widetilde{-\frac{\pi m}{n}}) \quad (\text{F.56})$$

に注意すると $\tilde{D}_n^S$ だけを考慮すればよいことが分かる。このようにして $S_a = D_n^S, S_{a0} = C_1, R_a = D_n^R, R_{a0} = C_1$ より $W(\check{S}^{(1)} \otimes \check{R}^{(2)})$ における固定部分群と固定点部分空間を得る。

$$\tilde{D}_n^S = \{u(e_3, \frac{j \cdot 2\pi}{n}) (\widetilde{\frac{j \cdot 2\pi}{n}}) \mid 0 \leq j \leq n-1\} \\ + u_{2x} t \{u(e_3, \frac{j \cdot 2\pi}{n}) (\widetilde{\frac{j \cdot 2\pi}{n}}) \mid 0 \leq j \leq n-1\} \quad (\text{F.57})$$

$$\text{Fix}(\tilde{D}_n^S) = \{(\tau_1 + i\tau_2)\}_R$$

固定点部分空間 $\{(\tau_1 + i\tau_2)\}_{\mathbf{R}}$ は n にはよらない. 従って $n \rightarrow \infty$ の場合も成り立ち, $W(\check{S}^{(1)} \otimes \check{\mathbf{R}}^{(2)})$ における固定部分群と固定点部分空間として

$$\begin{aligned}\tilde{D}_{\infty}^S &= \{u(e_3, \theta)\tilde{\theta} \mid 0 \leq \theta \leq 2\pi\} + u_{2x}t\{u(e_3, \theta)\tilde{\theta} \mid 0 \leq \theta \leq 2\pi\} \\ &= \tilde{A}(e_3) + u_{2x}t\tilde{A}(e_3)\end{aligned}\quad (\text{F.58})$$

$$\text{Fix}(\tilde{D}_{\infty}^S) = \{(\tau_1 + i\tau_2)\}_{\mathbf{R}}$$

を取ればよいことが分かる. ここで

$$\tilde{A}(e_3) = \{u(e_3, \theta)\tilde{\theta} \mid 0 \leq \theta \leq 2\pi\} \quad (\text{F.59})$$

である.

表 F.5 の他の組み合わせからは, 2次元以上の固定点部分空間が得られるので除外できる. このようにして $S \times \mathbf{R}$ の純粋なスピン回転を含まない固定部分群と固定点部分空間として (F.58) のものを取ればよい. $D_{4h} \times \mathbf{R}$ の $W(\check{D}^{E_u} \otimes \check{\mathbf{R}}^{(2)})$ における固定部分群と固定点部分空間をあわせると G_0 全体で $W(\Gamma E_u, 1, 2)$ のなかでは次の固定部分群と固定点部分空間を得る.

$$\begin{aligned}G_5 &= (E + I\tilde{\pi})(E + C_{2z}u_{2z})(E + tu_{2x})C_{2xv}L_0\tilde{A}(e_3) \\ \text{Fix}(G_5) &= \{l_1(\tau_1 + i\tau_2)\}_{\mathbf{R}} \\ G_6 &= (E + I\tilde{\pi})(E + C_{2z}u_{2z})(E + tu_{2x})C_{2av}L_0\tilde{A}(e_3) \\ \text{Fix}(G_6) &= \{(l_1 + l_2)(\tau_1 + i\tau_2)\}_{\mathbf{R}} \\ G_7 &= (E + I\tilde{\pi})(E + C_{2z}u_{2z})(E + tC_{2x}u_{2x})C_4(\widetilde{(\frac{\pi}{2})})L_0\tilde{A}(e_3) \\ \text{Fix}(G_7) &= \{(l_1 + il_2)(\tau_1 + i\tau_2)\}_{\mathbf{R}} \\ G_8 &= (E + I\tilde{\pi})(E + C_{2z}u_{2z})(E + tC_{2a}u_{2x})C_4(\widetilde{(\frac{\pi}{2})})L_0\tilde{A}(e_3) \\ \text{Fix}(G_8) &= \{[(l_1 + l_2) + i(l_2 - l_1)](\tau_1 + i\tau_2)\}_{\mathbf{R}}\end{aligned}\quad (\text{F.60})$$

ここで

$$\begin{aligned}C_4(\widetilde{(\frac{\pi}{2})}) &= \{E, C_{4z}^+(\widetilde{(\frac{\pi}{2})}), C_{2z}u_{2z}, C_{4z}^-(\widetilde{(-\frac{\pi}{2})})\} \\ \tilde{A}(e_3) &= \{u(e_3, \theta)\tilde{\theta} \mid 0 \leq \theta \leq 2\pi\}\end{aligned}\quad (\text{F.61})$$

$G_1 \sim G_8$ の固定部分群は $D_{4h} \times \mathbf{R}$ または $S \times \mathbf{R}$ の空間 $W(\check{D}^{E_u} \otimes \check{\mathbf{R}}^{(2)})$ または $W(\check{S}^{(1)} \otimes \check{\mathbf{R}}^{(2)})$ における固定部分群を求めることによって得られた. $G_1 \sim G_4$ は連続群 $A(e_3)$ を $G_5 \sim G_8$ は連続群 $\tilde{A}(e_3)$ を含んでいる. 次節で $D_{4h} \times S \times \mathbf{R}$ の連続群を含まない離散的な固定部分群を求める.

F.3 ESP 状態：離散的固定部分群を持つ状態

まず $D_{4h} \times S \times \Phi$ の $W(\check{G}_0^{(\Gamma E_u, 1, 2)})$ における離散的固定部分群を求めよう. これは次のように書くことが出来る.²⁸⁾

$$G_d = \{p_i u_i \tilde{\phi}_i \mid i = 1, \dots, N_d\} \quad (\text{F.62})$$

ここで $p_i \in D_{4h}$, $u_i \in S$, $\tilde{\phi}_i \in \Phi$ である. 任意の $\phi \in \Phi$ は空間 $W(\Gamma E_u, 1, 2)$ のベクトルを変えるので純粋な ϕ は固定部分群には含まれない. したがって $P_i = u_i = E$ のとき, $\phi_i = 0$ でなければならない. G_d が群であるためには $p_i u_i \tilde{\phi}_i, p_j u_j \tilde{\phi}_j \in G_d$ としたとき

$$\begin{aligned} (p_i u_i \tilde{\phi}_i)(p_j u_j \tilde{\phi}_j) &= p_i p_j u_i u_j \tilde{\phi}_i \tilde{\phi}_j \\ &= p_k u_k \tilde{\phi}_k \in G_d \end{aligned} \quad (\text{F.63})$$

でなければならない. ここで

$$\begin{aligned} p_i p_j &= p_k \\ u_i u_j &= u_k \\ \tilde{\phi}_i \tilde{\phi}_j &= \tilde{\phi}_k = \widetilde{(\phi_i + \phi_j)} \end{aligned} \quad (\text{F.64})$$

従って (F.62) の定義でゲージ変換部分 $\tilde{\phi}_i$ を除いた部分

$$G_d^{DS} = \{p_i u_i \mid i = 1, \dots, N_d\} \quad (\text{F.65})$$

は $D_{4h} \times S$ の部分群になる. $D_{4h} \times S \times \Phi$ の部分群は $D_{4h} \times S$ の部分群 G_d^{DS} の各元に適当なゲージ変換 (位相因子 $e^{i\phi}$ を掛ける) を行なって構成することが出来る.

l_1, l_2 の C_{2z}, I に対する変換性

$$\begin{aligned} C_{2z} \cdot l_1 &= -l_1, & C_{2z} \cdot l_2 &= -l_2 \\ I \cdot l_1 &= -l_1, & I \cdot l_2 &= -l_2 \end{aligned}$$

より C_{2z}, I に位相因子 $e^{i\pi}$ が掛かった $C_{2z}\tilde{\pi}, I\tilde{\pi}$ が $\tilde{G}_0^{(\Gamma E_u, 1, 2)}$ の固定部分群に必ず含まれる. また u_{2z} に付随するゲージ変換を $e^{i\phi_u}$ とすると

$$(u_{2z} e^{i\phi_u})^2 = e^{2i\phi_u} = 1 \quad (\text{F.66})$$

となり $\phi_u = 0, \pi$ が得られる. $\phi_u = 0$ の場合は純粋な u_{2z} があることになり, 第 F.1 で述べた $G_1 \sim G_4$ に帰着する. したがってこの節では u_{2z} が関与する場合は $u_{2z} e^{i\pi}$ の形のみを考慮すればよい.

G_d^{DS} の候補となる $D_{4h} \times S$ の部分群を求めよう. 定理 2.4(その 1 p.530) より, $D_{4h} \times S$ の部分群は D_{4h} の部分群 H_a とその正規部分群 $H_{a0} \triangleleft H_a$, S の部分群 K_a とその正規部分群 $K_{a0} \triangleleft K_a$ が存在して $H_a/H_{a0} \cong K_a/K_{a0}$ が成り立つとき $(H_a/H_{a0}; K_a/K_{a0}; \theta)$ として求められる. $I e^{i\pi}, C_{2z} e^{i\pi}$ は必ず G_d に含まれるので H_a, H_{a0} は必ず I, C_{2z} を含む. すなわち (F.65) の G_d^{DS} は $C_{2h} = (E+I)(E+C_{2z})$ を含む. C_{2h} を含む H_a, H_{a0} を表 F.6 に記す. ここで H_a, H_{a0} として

$$H_a = D_{4h}, \quad H_{a0} = C_{2h} \quad (\text{F.67})$$

の場合を考察しよう.

$$H_a/H_{a0} = D_{4h}/C_{2h} \cong K_a/K_{a0} \quad (\text{F.68})$$

表 F.6: C_{2h} を含む H_a, H_{a0} の組

H_a	H_{a0}
D_{4h}	$D_{4h}, D_{2h}, D_{2a}, C_{4h}, C_{2h}$
D_{2h}	D_{2h}, C_{2h}
D_{2ah}	D_{2ah}, C_{2h}
C_{4h}	C_{4h}, C_{2h}
C_{2h}	C_{2h}

を満たす K_a, K_{a0} として

$$\begin{aligned} K_a &= D_4^S = \{E, u_{4z}^+, u_{2z}, u_{4z}^-\} + u_{2x}\{E, u_{4z}^+, u_{2z}, u_{4z}^-\} \\ K_{a0} &= C_2^S = \{E, u_{2z}\} \end{aligned} \quad (\text{F.69})$$

を取る. 同型関係

$$D_{4h}/C_{2h} \cong D_4^S/C_2^S \cong D_2 \quad (\text{F.70})$$

と剰余類分解

$$\begin{aligned} D_{4h} &= C_{2h} + C_{4z}^+ C_{2h} + C_{2x} C_{2h} + C_{2b} C_{2h} \\ D_4^S &= C_2^S + u_{4z}^+ C_2^S + u_{2x} C_2^S + u_{2b} C_2^S \end{aligned} \quad (\text{F.71})$$

を考える. D_{4h}/C_{2h} から D_4^S/C_2^S への同型写像には次の6種類が存在する.

$$\begin{aligned} \theta_1(C_{4z}^+ C_{2h}) &= u_{4z}^+ C_2^S, & \theta_1(C_{2x} C_{2h}) &= u_{2x} C_2^S \\ \theta_2(C_{4z}^+ C_{2h}) &= u_{4z}^+ C_2^S, & \theta_2(C_{2x} C_{2h}) &= u_{2b} C_2^S \\ \theta_3(C_{4z}^+ C_{2h}) &= u_{2b} C_2^S, & \theta_3(C_{2x} C_{2h}) &= u_{2x} C_2^S \\ \theta_4(C_{4z}^+ C_{2h}) &= u_{2b} C_2^S, & \theta_4(C_{2x} C_{2h}) &= u_{4z}^+ C_2^S \\ \theta_5(C_{4z}^+ C_{2h}) &= u_{2x} C_2^S, & \theta_5(C_{2x} C_{2h}) &= u_{4z}^+ C_2^S \\ \theta_6(C_{4z}^+ C_{2h}) &= u_{2x} C_2^S, & \theta_6(C_{2x} C_{2h}) &= u_{2b} C_2^S \end{aligned} \quad (\text{F.72})$$

各場合に分けて考察する.

(1) θ_1

構成される部分群は

$$\begin{aligned} G_{d1}^{DS} &= (D_{4h}/C_{2h}; D_4^S; \theta_1) = C_{2h} C_2^S + C_{4z}^+ u_{4z}^+ C_{2h} C_2^S + C_{2x} u_{2x} C_{2h} C_2^S + C_{2b} u_{2b} C_{2h} C_2^S \\ &= (E + C_{2z})(E + I)(E + u_{2z}) \\ &\quad + C_{4z}^+ u_{4z}^+ (E + C_{2z})(E + I)(E + u_{2z}) \\ &\quad + C_{2x} u_{2x} (E + C_{2z})(E + I)(E + u_{2z}) \\ &\quad + C_{2b} u_{2b} (E + C_{2z})(E + I)(E + u_{2z}) \end{aligned} \quad (\text{F.73})$$

で与えられる. この群の生成元は

$$g_1 = C_{4z}^+ u_{4z}^+, \quad g_2 = C_{2x} u_{2x}, \quad g_I = I, \quad g_z = C_{2z} \quad (\text{F.74})$$

であり, 次の関係を満たす.

$$g_1^4 = E, \quad g_2^2 = E, \quad g_I^2 = E, \quad g_z^2 = E, \quad g_2 g_1 g_2 g_1 = E, \quad u_{2z} = g_1^2 g_z \quad (\text{F.75})$$

G_{d1}^{SD} の各元に適当なゲージ変換を付加して G_{d1}^{DS} に対応する $D_{4h} \times S \times \Phi$ の部分群 $\tilde{G}_{d1}$ を構成しよう. これは (F.74) の生成元にゲージ変換を施すことによって構成できる. すなわち $\tilde{G}_{d1}$ の生成元は

$$\tilde{g}_1 = C_{4z}^+ u_{4z}^+ e^{i\phi_1}, \quad \tilde{g}_2 = C_{2x} u_{2x} e^{i\phi_2}, \quad \tilde{g}_I = I e^{i\phi_I}, \quad \tilde{g}_z = C_{2z} e^{i\phi_z} \quad (\text{F.76})$$

となる. g_i の満たす関係 (F.75) より

$$e^{4i\phi_1} = e^{2i\phi_2} = e^{2i\phi_I} = e^{2i\phi_z} = e^{2i\phi_1+2i\phi_2} = 1 \quad (\text{F.77})$$

を得る. (F.77) より

$$e^{2i\phi_1} = 1 \quad (\text{F.78})$$

を得る. $W^{(\Gamma E_u, 1, 2)}$ の全てのベクトルは I, C_{2z} の作用で符号を変えるので,

$$\phi_I = \phi_z = \pi \quad (\text{F.79})$$

でなければならない. $u_{2z} = g_1^2 g_z$ を考慮すると u_{2z} に付随するゲージ変換 $e^{i\phi_u}$ は

$$e^{i\phi_u} = e^{2i\phi_1+i\phi_z} = e^{2i\phi_1+i\pi} = e^{i\pi} \quad (\text{F.80})$$

となり,

$$\phi_u = \pi \quad (\text{F.81})$$

を得る. (F.77), (F.78) より ϕ_1, ϕ_2 の可能な組み合わせは $(\phi_1, \phi_2) = (0, 0), (\pi, 0), (0, \pi), (\pi, \pi)$ の 4 通りである.

$(\phi_1, \phi_2) = (0, 0)$ の場合, 生成元は

$$\tilde{g}_1 = C_{4z}^+ u_{4z}^+, \quad \tilde{g}_2 = C_{2x} u_{2x}, \quad \tilde{g}_I = I e^{i\pi}, \quad \tilde{g}_z = C_{2z} e^{i\pi} \quad (\text{F.82})$$

となり, u_{2z} には $e^{i\pi}$ が付随することを考慮すると, 得られる部分群は

$$\begin{aligned} \tilde{G}_{d1}(0, 0) &= (D_{4h}/C_{2h}; D_4^S/C_2^S; \theta_1)_{(0,0)} = (E + C_{2z}\tilde{\pi})(E + I\tilde{\pi})(E + u_{2z}\tilde{\pi}) \\ &\quad + C_{4z}^+ u_{4z}^+ (E + C_{2z}\tilde{\pi})(E + I\tilde{\pi})(E + u_{2z}\tilde{\pi}) \\ &\quad + C_{2x} u_{2x} (E + C_{2z}\tilde{\pi})(E + I\tilde{\pi})(E + u_{2z}\tilde{\pi}) \\ &\quad + C_{2b} u_{2b} (E + C_{2z}\tilde{\pi})(E + I\tilde{\pi})(E + u_{2z}\tilde{\pi}) \\ &= (E + C_{2z}I)(E + I\tilde{\pi})D_4(u_{4z}^+, u_{2x}) \end{aligned} \quad (\text{F.83})$$

となる。ここで $D_4(u_{4z}^+, u_{2x})$ は

$$D_4(u_{4z}^+, u_{2x}) = \{E, C_{4z}^+ u_{4z}^+, C_{2z} u_{2z}, C_{4z}^- u_{4z}^-\} + C_{2x} u_{2x} \{E, C_{4z}^+ u_{4z}^+, C_{2z} u_{2z}, C_{4z}^- u_{4z}^-\} \quad (\text{F.84})$$

であり、 D_4 の空間回転とそれに対応するスピン回転との同時回転からなる群である。 $\tilde{G}_{d1}(0, 0)$ の $W(\Gamma E_u, 1, 2)$ における固定点部分空間 $\text{Fix}(\tilde{G}_{d1}(0, 0))$ は

$$\text{Fix}(\tilde{G}_{d1}(0, 0)) = \{(l_1 \tau_1 + l_2 \tau_2), i(l_1 \tau_1 + l_2 \tau_2)\}_{\mathbb{R}} \quad (\text{F.85})$$

となる。

時間反転 t を加えた $G_0 = D_{4h} \times S \times (\Phi + t\Phi)$ のなかで考えると

$$\begin{aligned} G_9 &= (E + C_{2z} I)(E + I\pi) D_4(u_{4z}^+, u_{2x}) T \\ \text{Fix}(G_9) &= \{(l_1 \tau_1 + l_1 \tau_2)\}_{\mathbb{R}} \end{aligned} \quad (\text{F.86})$$

を得る。 $(\phi_1, \phi_2) = (0, \pi), (\pi, 0), (\pi, \pi)$ の場合も上と同様な方法で求めると G_9 に同値な部分群が得られる。

(2) θ_2

構成される部分群は G_9 と同値である。

(3) θ_3

得られる $D_{4h} \times S$ の部分群は

$$\begin{aligned} G_{d3}^{DS} &= (D_{4h}/C_{2h}; D_4^S/C_2^S; \theta_3) = C_{2h} C_2^S + C_{4z}^+ u_{2b} C_{2h} C_2^S + C_{2x} u_{2x} C_{2h} C_2^S + C_{2b} u_{4z}^+ C_{2h} C_2^S \\ &= (E + C_{2z})(E + I)(E + u_{2z}) + C_{4z}^+ u_{2b}(E + C_{2z})(E + I)(E + u_{2z}) \\ &\quad + C_{2x} u_{2x}(E + C_{2z})(E + I)(E + u_{2z}) + C_{2b} u_{4z}^+(E + C_{2z})(E + I)(E + u_{2z}) \end{aligned} \quad (\text{F.87})$$

となる。 G_{d3}^{DS} の生成元は

$$g_1 = C_{4z}^+ u_{2b}, \quad g_2 = C_{2b} u_{4z}^+, \quad g_I = I \quad (\text{F.88})$$

であり、次の関係を満たす。

$$g_1^4 = E, \quad g_2^4 = E, \quad g_I^2 = E, \quad C_{2z} = g_1^2, \quad u_{2z} = g_2^2 \quad (\text{F.89})$$

G_{d3}^{DS} に対応した $\tilde{G}_{d3}$ はつぎの生成元を持つ。

$$\tilde{g}_1 = g_1 e^{i\phi_1}, \quad \tilde{g}_2 = g_2 e^{i\phi_2}, \quad \tilde{g}_I = g_I e^{i\phi_I} \quad (\text{F.90})$$

(F.89) より

$$e^{4i\phi_1} = e^{4i\phi_2} = e^{2i\phi_I} = 1 \quad (\text{F.91})$$

を得る。 I, C_{2z}, u_{2z} に付随するゲージ変換は $e^{i\pi}$ でなければならないので、(F.89) より

$$e^{i\phi_I} = e^{2i\phi_1} = e^{2i\phi_2} = e^{i\pi} \quad (\text{F.92})$$

を得る。これより

$$\begin{aligned}\phi_I &= \pi \\ \phi_1 &= \pm \frac{\pi}{2} \\ \phi_2 &= \pm \frac{\pi}{2}\end{aligned}\tag{F.93}$$

ここで複号 $\pm$ は順不同である。 $(\phi_1, \phi_2) = (-\frac{\pi}{2}, -\frac{\pi}{2})$ の場合、得られる部分群は

$$\begin{aligned}\tilde{G}_{d3}(-\frac{\pi}{2}, -\frac{\pi}{2}) &= (D_{4h}/C_{2h}; D_4^S/C_2^S; \theta_3)_{(-\frac{\pi}{2}, -\frac{\pi}{2})} = (E + C_{2z}\tilde{\pi})(E + I\tilde{\pi})(E + u_{2z}\tilde{\pi}) \\ &\quad + C_{4z}^+ u_{2b} e^{-i\frac{\pi}{2}} (E + C_{2z}\tilde{\pi})(E + I\tilde{\pi})(E + u_{2z}\tilde{\pi}) \\ &\quad + C_{2x} u_{2x} (E + C_{2z}\tilde{\pi})(E + I\tilde{\pi})(E + u_{2z}\tilde{\pi}) \\ &\quad + C_{2b} u_{4z}^+ e^{-i\frac{\pi}{2}} (E + C_{2z}\tilde{\pi})(E + I\tilde{\pi})(E + u_{2z}\tilde{\pi}) \\ &= (E + I\tilde{\pi}) D_2(u_{2z}, u_{2x}) C_4(u_{2a}(\frac{\pi}{2}))\end{aligned}\tag{F.94}$$

となる。ここで

$$\begin{aligned}D_2(u_{2z}, u_{2x}) &= \{E, C_{2z}u_{2z}, C_{2x}u_{2x}, C_{2y}u_{2y}\} \\ C_4(u_{2a}(\frac{\pi}{2})) &= \{E, C_{4z}^+ u_{2a}(\frac{\pi}{2}), C_{2z}\tilde{\pi}, C_{4z}^- u_{2a}(-\frac{\pi}{2})\}\end{aligned}\tag{F.95}$$

である。 $\tilde{G}_{d3}(-\frac{\pi}{2}, -\frac{\pi}{2})$ の $W(\check{G}_0^{(\Gamma E_u, 1, 3)})$ における固定点部分空間は

$$\text{Fix}(\tilde{G}_{d3}(-\frac{\pi}{2}, -\frac{\pi}{2})) = \{(l_1\tau_1 + il_2\tau_2), i(l_1\tau_1 + il_2\tau_2)\}_{\mathbb{R}}\tag{F.96}$$

となる。 G_0 の中で考察すると

$$\begin{aligned}G_{10} &= (E + tu_{2x})(E + I\tilde{\pi}) D_2(u_{2z}, u_{2x}) C_4(u_{2a}(\frac{\pi}{2})) \\ \text{Fix}(G_{10}) &= \{(l_1\tau_1 + il_2\tau_2)\}_{\mathbb{R}}\end{aligned}\tag{F.97}$$

を得る。 (ϕ_1, ϕ_2) の他の可能な組み合わせの場合でも、 G_{10} と同値な部分群が得られる。

(4) θ_4

得られる $D_{4h} \times S$ の部分群は

$$\begin{aligned}G_{d4}^{DS} &= (D_{4h}/C_{2h}; D_4^S/C_2^S; \theta_4) \\ &= C_{2h}C_2^S + C_{4z}^+ u_{2b} C_{2h}C_2^S + C_{2x} u_{4z}^+ C_{2h}C_2^S + C_{2b} u_{2x} C_{2h}C_2^S \\ &= (E + C_{2z})(E + I)(E + u_{2z}) + C_{4z}^+ u_{2b} (E + C_{2z})(E + I)(E + u_{2z}) \\ &\quad + C_{2x} u_{4z}^+ (E + C_{2z})(E + I)(E + u_{2z}) + C_{2b} u_{2x} (E + C_{2z})(E + I)(E + u_{2z})\end{aligned}\tag{F.98}$$

で与えられる。この群の生成元は

$$g_1 = C_{4z}^+ u_{2b}, \quad g_2 = C_{2x} u_{4z}^+, \quad g_I = I\tag{F.99}$$

であり、つぎの関係を満たす.

$$\begin{aligned} g_1^4 &= g_4^2 = g_I^2 = E \\ C_{2z} &= g_1^2, \quad u_{2z} = g_2^2 \end{aligned} \quad (\text{F.100})$$

G_{d4}^{DS} に対応する $D_{4h} \times S \times \Phi$ の部分群はつぎの生成元により構成される.

$$\begin{aligned} \tilde{g}_1 &= g_1 e^{i\phi_1} = C_{4z}^+ u_{2b} e^{i\phi_1} \\ \tilde{g}_2 &= g_2 e^{i\phi_2} = C_{2x} u_{4z}^+ e^{i\phi_2} \\ \tilde{g}_I &= g_I e^{i\phi_I} = C_I e^{i\phi_I} \end{aligned} \quad (\text{F.101})$$

(F.100) より (3) の場合と同様にして $\phi_I = \pi$ で (ϕ_1, ϕ_2) の組み合わせは $(\pm\frac{\pi}{2}, \pm\frac{\pi}{2})$ (順不同) の 4 通りである. $(\phi_1, \phi_2) = (-\frac{\pi}{2}, -\frac{\pi}{2})$ の場合を取ると得られる部分群は

$$\begin{aligned} \tilde{G}_{d4}(-\frac{\pi}{2}, -\frac{\pi}{2}) &= (D_{4h}/C_{2h}; D_2^S/C_2^S; \theta_4)(-\frac{\pi}{2}, -\frac{\pi}{2}) \\ &= (E + C_{2z}\tilde{\pi})(E + I\tilde{\pi})(E + u_{2z}\tilde{\pi}) \\ &\quad + C_{4z}^+ u_{2b} e^{-i\frac{\pi}{2}} (E + C_{2z}\tilde{\pi})(E + I\tilde{\pi})(E + u_{2z}\tilde{\pi}) \\ &\quad + C_{2x} u_{4z}^+ e^{-i\frac{\pi}{2}} (E + C_{2z}\tilde{\pi})(E + I\tilde{\pi})(E + u_{2z}\tilde{\pi}) \\ &\quad + C_{2b} u_{2x} e^{i\pi} (E + C_{2z}\tilde{\pi})(E + I\tilde{\pi})(E + u_{2z}\tilde{\pi}) \\ &= (E + I\tilde{\pi}) D_{2a}(u_{2z}, u_{2x}) C_4(u_{2a}(\frac{\pi}{2})) \end{aligned} \quad (\text{F.102})$$

となる. ここで $C_4(u_{2a}(\frac{\pi}{2}))$ は (F.95) で定義されたものであり,

$$D_{2a}(u_{2z}, u_{2x}) = \{E, C_{2z}u_{2z}, C_{2a}u_{2x}, C_{2b}u_{2y}\} \quad (\text{F.103})$$

である. $\tilde{G}_{d4}(-\frac{\pi}{2}, -\frac{\pi}{2})$ の $W(\check{G}_0^{(\Gamma E_u, 1, 3)})$ における固定点部分空間は

$$\text{Fix}(\tilde{G}_{d4}(-\frac{\pi}{2}, -\frac{\pi}{2})) = \{[(l_1 + l_2)\tau_1 + i(l_2 - l_1)\tau_2], i[(l_1 + l_2)\tau_1 + i(l_2 - l_1)\tau_2]\}_{\mathbb{R}} \quad (\text{F.104})$$

となる. G_0 の中で考察すると

$$\begin{aligned} G_{11} &= (E + tu_{2x})(E + I\tilde{\pi}) D_{2a}(u_{2z}, u_{2x}) C_4(u_{2a}(\frac{\pi}{2})) \\ \text{Fix}(G_{11}) &= \{[(l_1 + l_2)\tau_1 + i(l_2 - l_1)\tau_2]\}_{\mathbb{R}} \end{aligned} \quad (\text{F.105})$$

を得る. (ϕ_1, ϕ_2) の他の可能な組み合わせの場合でも, G_{11} と同値な部分群が得られる. (5) θ_5 得られる $D_{4h} \times S$ の部分群は

$$\begin{aligned} G_{d5}^{DS} &= (D_{4h}/C_{2h}; D_4^S/C_2^S; \theta_5) \\ &= C_{2h} C_2^S + C_{4z}^+ u_{2x} C_{2h} C_2^S + C_{2x} u_{4z}^+ C_{2h} C_2^S + C_{2b} u_{2a} C_{2h} C_2^S \\ &= (E + C_{2z})(E + I)(E + u_{2z}) + C_{4z}^+ u_{2x} (E + C_{2z})(E + I)(E + u_{2z}) \\ &\quad + C_{2x} u_{4z}^+ (E + C_{2z})(E + I)(E + u_{2z}) + C_{2b} u_{2a} (E + C_{2z})(E + I)(E + u_{2z}) \end{aligned} \quad (\text{F.106})$$

で与えられる. この群の生成元は

$$g_1 = C_{4z}^+ u_{2x}, \quad g_2 = C_{2x} u_{4z}^+, \quad g_I = I \quad (\text{F.107})$$

であり, つぎの関係を満たす.

$$\begin{aligned} g_1^4 &= g_4^2 = g_I^2 = E \\ C_{2z} &= g_1^2, \quad u_{2z} = g_2^2 \end{aligned} \quad (\text{F.108})$$

G_{d5}^{DS} に対応する $D_{4h} \times S \times \Phi$ の部分群はつぎの生成元により構成される.

$$\begin{aligned} \tilde{g}_1 &= g_1 e^{i\phi_1} = C_{4z}^+ u_{2x} e^{i\phi_1} \\ \tilde{g}_2 &= g_2 e^{i\phi_2} = C_{2x} u_{4z}^+ e^{i\phi_2} \\ \tilde{g}_I &= g_I e^{i\phi_I} = C_I e^{i\phi_I} \end{aligned} \quad (\text{F.109})$$

(F.108) より (3) の場合と同様にして $\phi_I = \pi$ で (ϕ_1, ϕ_2) の組み合わせは $(\pm\frac{\pi}{2}, \pm\frac{\pi}{2})$ (順不同) の 4 通りである. $(\phi_1, \phi_2) = (\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$ の場合を取ると得られる部分群は

$$\begin{aligned} \tilde{G}_{d5}(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}) &= (D_{4h}/C_{2h}; D_2^S/C_2^S; \theta_4)(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}) = (E + C_{2z}\tilde{\pi})(E + I\tilde{\pi})(E + u_{2z}\tilde{\pi}) \\ &\quad + C_{4z}^+ u_{2x} e^{i\frac{\pi}{2}} (E + C_{2z}\tilde{\pi})(E + I\tilde{\pi})(E + u_{2z}\tilde{\pi}) \\ &\quad + C_{2x} u_{4z}^+ e^{i\frac{\pi}{2}} (E + C_{2z}\tilde{\pi})(E + C_I\tilde{\pi})(E + u_{2z}\tilde{\pi}) \\ &\quad + C_{2b} u_{2a} e^{i\pi} (E + C_{2z}\tilde{\pi})(E + I\tilde{\pi})(E + u_{2z}\tilde{\pi}) \\ &= (E + I\tilde{\pi}) D_{2a}(u_{2z}, u_{2a}) C_4(u_{2x}(\frac{\pi}{2})) \end{aligned} \quad (\text{F.110})$$

となる. ここで

$$\begin{aligned} D_{2a}(u_{2z}, u_{2a}) &= \{E, C_{2z}u_{2z}, C_{2a}u_{2a}, C_{2b}u_{2b}\} \\ C_4(u_{2x}(\frac{\pi}{2})) &= \{E, C_{4z}^+ u_{2x}(\frac{\pi}{2}), C_{2z}\tilde{\pi}, C_{4z}^- u_{2x}(\frac{\pi}{2})\} \end{aligned} \quad (\text{F.111})$$

である. $\tilde{G}_{d5}(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$ の $W(\tilde{G}_0^{(\Gamma E_u, 1, 3)})$ における固定点部分空間は

$$\text{Fix}(\tilde{G}_{d5}(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})) = \{[(l_1\tau_1 + l_2\tau_2) + i(l_1\tau_2 + l_2\tau_1)], i[(l_1\tau_1 + l_2\tau_2) + i(l_1\tau_2 + l_2\tau_1)]\}_{\mathbb{R}} \quad (\text{F.112})$$

となる. G_0 の中で考察すると

$$\begin{aligned} G_{12} &= (E + tC_{2x}u_{2x})(E + I\tilde{\pi}) D_{2a}(u_{2z}, u_{2a}) C_4(u_{2x}(\frac{\pi}{2})) \\ \text{Fix}(G_{12}) &= \{[(l_1\tau_1 + l_2\tau_2) + i(l_1\tau_2 + l_2\tau_1)]\}_{\mathbb{R}} \end{aligned} \quad (\text{F.113})$$

を得る. (ϕ_1, ϕ_2) の他の可能な組み合わせの場合でも, G_{11} と同値な部分群が得られる.

(6) θ_6

(5) の場合と同様にして G_0 のなかで

$$\begin{aligned} G_1 &= (E + tC_{2a}u_{2x})(E + I\tilde{\pi}) D_2(u_{2z}, u_{2b}) C_4(u_{2x}(\frac{\pi}{2})) \\ \text{Fix}(G_{13}) &= \{[(l_1 + l_2)\tau_1 + (l_2 - l_1)\tau_2) + i((l_1 + l_2)\tau_2 + (l_2 - l_1)\tau_1)]\}_{\mathbb{R}} \end{aligned} \quad (\text{F.114})$$

を得る.

$H_a = D_{4h}, H_0 = C_{2h}, K_a = D_4^S, K_0 = C_2^S$ 以外の組み合わせから得られる部分群の固定点部分空間は $G_1 \sim G_{13}$ に同値なものか, 2次元以上のものになる. 従って $\check{G}_0^{(\Gamma_{Eu}, 1, 2)}$ の $W(\check{G}_0^{(\Gamma_{Eu}, 1, 2)})$ における固定部分群とその固定点部分群は表 9.1 の様になる.

謝辞

京大物理教室の山田耕作, 池田浩章, 藤本聡の各氏より「物性研究」に本解説を執筆するように薦めて頂き, 私に本解説を執筆する機会が与えられました. 本解説の内容は私の研究生生活のなかで, 京都大学での福留秀雄先生始めとして町田一成, 大見哲臣, 山本昌司, 高知大学での西山精哉, 岩崎正春, 国府俊一郎, 高知高専の後藤章, 堀佳城の各氏, 高知大学での卒論生, 大学院生の花房馨, 小西智明, 宮井英次, 真砂啓, 馬場敏行, 山崎才弘, 濱田正則の各氏との研究・議論によるものである. また新居浜高専の西谷郁夫, 柳井忠の両氏には M. Golubitsky and D. G. Schaeffer の「Singularities and Groups in Bifurcation Theory, Volume I」のゼミに参加して頂き, 数学的議論の多くを学びました. 最後になりましたが「物性研究」事務担当の野坂京子氏には原稿の遅れや Latex の不慣れのため多大のご苦勞をおかけしました. 以上の諸氏に心から感謝します.

付 録 G その 1, その 2 正誤表

物性理論における群論的分岐理論入門
 —対称性の破れのための群論入門—

表 1: その 1 正誤表

ページ	行	誤	正
513	下から 2 行目	失われてて	失われて
516	下から 5 行目	$(G_0 \text{ invariant functiomn})$	$(G_0 \text{ invariant function})$
519	上から 8 行目	間回転	空間回転
536	上から 2 行目	$\sum_{n=1}^n$	$\sum_{i=1}^n$
536	上から 6 行目	$\sum_{i=1}^d$	$\sum_{i=1}^n$
543	下から 10 行目	$B 1 \quad + \quad -1$	$B 1 \quad 1 \quad -1$
551	上から 8 行目	$\sum_{i=1}^n$	$\sum_{i=1}^n$
553	上から 1 行目	不変部分群	固定部分群
556	下から 2 行目	$= 0$	$= 0 \quad (4.42)$
557	下から 14 行	方程式 (4.46)	方程式 (4.48)
565	上から 11 行目	不動点部分空間	固定点部分空間
567	上から 10 行目	(genrric)	(generic)
570	上から 2 行目	例 5.3	例 4.4

表 2: その2 正誤表

ページ	行	誤	正
209	上から 6 行目	$\sum_i (W_0)_{ii} (\log W_0)_{ii} = \sum_i (W_0)_{ii} (\log W_0)_{ii}$	$\sum_i (W_0)_{ii} (\log W_0)_{ii}$
210	下から 3 行目	$\langle f B^\dagger f \rangle^*$	$\langle h B^\dagger f \rangle^*$
211	下から 9 行目	$= -\lambda_{ji}$	$= -\lambda(Z)_{ji}$
216	下から 13 行目	f_1	f_1
234	下から 2 行目	$\{u(e, \theta)\}_{ss'}^*$	$\{u(n, \theta)\}_{ss'}^*$
235	上から 16 行目	$\frac{1}{\sqrt{L}} \sum_n$	$\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_m$
235	下から 5 行目	$\frac{1}{\sqrt{L}}$	$\frac{1}{\sqrt{N}}$
237	下から 9 行目	$u(e, \theta)$	$u(n, \theta)$
244	上から 3 行目	$\mathbf{k}_M = (\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$	$\mathbf{k}_M = (\pi, \pi)$
244	上から 4 行目	$\mathbf{k}_X = (\frac{\pi}{a}, 0)$	$\mathbf{k}_X = (\pi, 0)$
247	上から 1 行目	B.1(p.340), B2(p.341)	B.1(p.339), B2(p.340)
249	上から 15 行目	(3, 2, 1) の場合	(3, 1, 2) の場合
251	下から 3 行目	$S^{(0)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$	$S^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$
251	下から 2 行目	$T^{(0)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$	$T^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$
252	上から 6 行目	エルミート性	ユニタリー性
252	下から 8 行目	$S^{(0)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$	$S^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$
252	下から 7 行目	$T^{(0)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$	$T^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$
254	上から 2 行目	$(\mathbf{k}s) \neq (\mathbf{k}'s)$	$(\mathbf{k}s) \neq (\mathbf{k}'s')$
254	上から 3 行目	$(\mathbf{k}s) \neq (\mathbf{k}'s)$	$(\mathbf{k}s) \neq (\mathbf{k}'s')$
258	上から 2 行目	$p \in D_4$	$p \in D_{4h}$
259	上から 11 行目	$y(\mathbf{k})$ 偶関数, $\lambda = 2, 3$	$y(\mathbf{k})$ は偶関数, $\lambda = 1, 2, 3$
次ページに続く			

続き			
267	上から 1 行目	$= z^0(\mathbf{k})$	$= z^0(\mathbf{k})_{ss'}$
267	上から 2 行目	$= z^1(\mathbf{k})$	$= z^1(\mathbf{k})_{ss'}$
269	下から 13 行目	$= 2\pi n_1$	$= 2\pi n_2$
270	下から 7 行目	$= (2/N)(V - 2J)$	$= -(2/N)(V - 2J)$
271	下から 7 行目	$= (2/N)(V - 2J)$	$= -(2/N)(V - 2J)$
279	下から 10 行目	実数 a, b は	実数 a, μ は
281	下から 12 行目	るように様に	るように
288	下から 2 行目	$\check{G}_0^{(MB_{1g}, 0, 0)}$	$\check{G}_0^{(MB_{1g}, 0, 1)}$
289	上から 11 行目	$\check{G}_0^{(MB_{1g}, 0, 0)}$	$\check{G}_0^{(MB_{1g}, 0, 1)}$
289	上から 13 行目	$G(MB_{1g}, 0, 0)$	$G(MB_{1g}, 0, 1)$
289	上から 14 行目	$\text{Fix}(G(MB_{1g}, 0, 0))$	$\text{Fix}(G(MB_{1g}, 0, 1))$
291	下から 1 行目	図 8.4: $G(MB_{1g}, 0, 0)$	図 8.4: $G(MB_{1g}, 0, 1)$
296	下から 9 行目	$H_m^0 + H_m^1 + H_m^2$	$H_m^0 + H_m^1$
298	下から 11 行目	$C(\mathbf{e}_3)R_n\}$	$C(\mathbf{e}_3)R_n\}$
298	下から 2 行目	$0 \leq \theta \leq 2\pi\}_R$	$0 \leq \theta \leq 2\pi\}$
327	上から 3 行目	図 8.13: $G(MB_{1g}1, 1)$	図 8.13: $G(MB_{1g}1, 0)$
334	下から 8 行目	$(6) \check{P} \otimes \check{S}^{(0)} \otimes \check{R}^{(2)}$	$(6) \check{P} \otimes \check{S}^{(1)} \otimes \check{R}^{(2)}$

参考文献

- [1] D. H. Sattinger, Group Theoretical Methods in Bifurcation Theory, Lecture Notes in Mathematics **762** (Springer-Verlag, Berlin, 1979).
- [2] A. Vanderbauwhede, Local Bifurcation and Symmetry, Res. Notes Math. **75** (Pit Man, Boston, 1982).
- [3] G. Cicogna, Symmetry breakdown from bifurcations, Lettere al Nuovo Cimento **31** (1981), 600.
- [4] M. Golubitsky and D. G. Schaeffer, Singularities and Groups in Bifurcation Theory, Volume I (Springer-Verlag, 1984).
- [5] M. Golubitsky, I. Stewart and D. G. Schaeffer, Singularities and Groups in Bifurcation Theory, Volume II (Springer-Verlag, 1985).
- [6] 高木貞治：解析概論 (岩波書店, 1938)
- [7] 松島与三：多様体入門 (裳華房, 1965)
- [8] 鈴木通夫：群論 上 (岩波書店, 1977)
- [9] 彌永昌吉, 小平邦彦：現代数学概説 I (岩波書店, 1961)
- [10] 犬井鉄郎, 田辺行人, 小野寺嘉孝：応用群論 (裳華房, 1976)
- [11] 吉川圭二：群と表現 (岩波書店, 1996)
- [12] G. E. Volovik and L. P. Gorkov, Sov. Phys. JETP **61** (1985), 843.
- [13] H. Fukutome, Prog. Theor. Phys. **60** (1974), 115.
H. Fukutome, Int. J. Quantum Chem. **20** (1981), 995.
- [14] M. Ozaki, J. Math. Phys. **26** (1985), 1524, 1521.
- [15] 高野文彦：多体問題 (培風館, 1975)
- [16] 阿部龍蔵：統計力学 (東京大学出版会, 1966)
- [17] P. Ring and P. Schuck, The Nuclear Many Body Problem (Springer-Verlag, 1980).

- [18] 斯波弘行：電子相関の物理 (岩波書店, 2001)
- [19] M. Ozaki, Int. J. Quantum Chem. **42** (1992), 55.
- [20] G. バーンズ：物性物理学のための群論入門 (培風館, 1983)
- [21] C. J. Bradley and A. P. Cracknell, The Mathematical Theory of Symmetry in Solids (Clarendon Press, Oxford, 1972).
- [22] D. Vollhardt and P. Wölfle, The Superfluid Phases of Helium 3 (Taylor & Francis, 1990).
- [23] J. F. Cornwell, Group Theory in Physics Volume I, p.434 (Academic Press, 1984).
- [24] S. Yamamoto and M. Ozaki, Int. J. Quantum Chem. **44** (1992), 949.
- [25] A. Affleck and J. Marston, Phys. Rev. **B 37** (1988), 3774.
- [26] X. Yang and C. Nayak, Phys. Rev. **B 65** (2002), 064523.
- [27] M. Ozaki, E. Miyai, T. Konishi and K. Hanafusa, Int. J. Mod. Phys. **10** (1996), 1397.
- [28] C. Bruder and D. Vollhardt, Phys. Rev. **B 34** (1986), 131.
- [29] T. Hotta and E. Dagotto, Phys. Rev. Lett. **88** (2002), 017201.
- [30] J. S. Lee et al., Phys. Rev. Lett. **89** (2002), 257402.
- [31] M. Golubitsky and I. Stewart, The Symmetry Perspective (Birkhäuser Verlag, 2002).
訳書：対称性の破れとパターン形成の数理 (丸善株式会社, 2003)