

物性テンソルの多極子表現

明大理工 楠瀬博明

1. 基本事項

1.1. 基本要素

極性および軸性のテンソルを分解するために基本となる要素は Kronecker の δ_{12} と Levi-Civita の ϵ^{123} である。 δ_{12} は対称極性 2 階テンソル (P_2)、 ϵ^{123} は完全反対称軸性 3 階テンソル (A_3) である。また、テンソル積の組み合わせにより、極性 (P) \times 極性 (P) = 極性 (P)、軸性 (A) \times 軸性 (A) = 極性 (P)、極性 (P) \times 軸性 (A) = 軸性 (A) のように性質が変換される。

1.2. 完全対称・反対称テンソルの縮約公式

δ_{12} と ϵ^{123} を組み合わせた縮約公式は以下ようになる。対称なラベルを下添字、反対称なラベルを上添字とした。

$$\delta_{12} = \delta_{21} \quad (1)$$

$$\epsilon^{123} = -\epsilon^{213} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \delta_{12;34} &= \delta_{13}\delta_{24} + \delta_{14}\delta_{23} = \delta_{21;34} = \delta_{12;43} = \delta_{34;12} \\ \epsilon^{12;34} &= \epsilon^{125}\epsilon^{345} = \delta_{13}\delta_{24} - \delta_{14}\delta_{23} = -\epsilon^{21;34} = -\epsilon^{12;43} = \epsilon^{34;12} \end{aligned} \quad (3)$$

$$\delta_{12;34}^5 = \delta_{13}\epsilon^{245} + \delta_{23}\epsilon^{145} + \delta_{14}\epsilon^{235} + \delta_{24}\epsilon^{135} = \delta_{21;34}^5 = \delta_{12;43}^5 = -\delta_{34;12}^5$$

$$\gamma_{12;5}^{34} = \delta_{15}\epsilon^{234} + \delta_{25}\epsilon^{134} = \gamma_{21;5}^{34} = -\gamma_{12;5}^{43}$$

$$\epsilon_5^{12;34} = \frac{1}{2}[\delta_{15}\epsilon^{234} - \delta_{25}\epsilon^{134} - \delta_{35}\epsilon^{124} + \delta_{45}\epsilon^{123}] = -\epsilon_5^{21;34} = -\epsilon_5^{12;43} = -\epsilon_5^{34;12} \quad (4)$$

$$\delta_{12;34;56} = \frac{1}{2}[\delta_{12}\delta_{34;56} + \delta_{34}\delta_{12;56}] = \delta_{21;34;56} = \delta_{12;43;56} = \delta_{12;34;65} = \delta_{34;12;56}$$

$$\delta'_{12;34;56} = \frac{1}{2}[\delta_{13}\delta_{24;56} + \delta_{23}\delta_{14;56} + \delta_{14}\delta_{23;56} + \delta_{24}\delta_{13;56}] = \delta'_{21;34;56} = \delta'_{12;43;56} = \delta'_{12;34;65} = \delta'_{34;12;56}$$

$$\delta''_{12;34;56} = \frac{1}{2}[\delta_{12}\delta_{34;56} - \delta_{34}\delta_{12;56}] = \delta''_{21;34;56} = \delta''_{12;43;56} = \delta''_{12;34;65} = -\delta''_{34;12;56}$$

$$\gamma_{12;56}^{34} = \frac{1}{2}[\delta_{35}\delta_{12;46} + \delta_{36}\delta_{12;45} - \delta_{45}\delta_{12;36} - \delta_{46}\delta_{12;35}] = \gamma_{21;56}^{34} = \gamma_{12;65}^{34} = -\gamma_{12;56}^{43}$$

$$\epsilon_{56}^{12;34} = \frac{1}{2}[\epsilon^{125}\epsilon^{346} + \epsilon^{126}\epsilon^{345}] = -\epsilon_{56}^{21;34} = -\epsilon_{56}^{12;43} = \epsilon_{56}^{34;12} = \epsilon_{65}^{12;34} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \delta_{12;34;56}^7 &= \frac{1}{2}[\epsilon^{137}\delta_{24;56} + \epsilon^{237}\delta_{14;56} + \epsilon^{247}\delta_{13;56} + \epsilon^{147}\delta_{23;56}] \\ &= \delta_{21;34;56}^7 = \delta_{12;43;56}^7 = -\delta_{34;12;56}^7 = \delta_{12;34;65}^7 \end{aligned} \quad (6)$$

2. テンソル分解

極性 (P) テンソルの分解のみを示す。軸性 (A) テンソルの分解は、極性 (P) テンソルの分解式において、極性 (P) と軸性 (A) の役割を入れ替えればよい。

電気的な i テンソルでは、 P テンソルの分解式に現れる Q, G を G, Q に置き換えれば A テンソルの分解式が得られる。一方、磁気的な c テンソルでは、 P テンソルの分解式に現れる T, M を M, T に置き換えれば A テンソルの分解式が得られる。

ランク 4 までの分解式は、以下の (7), (8), (9), (11), (13) である。物性テンソルは、($P/A, i/c$) とランクの組み合わせ、つまり $X = Q/G/T/M$ とランクによって指定できる。また、対称テンソル、非線形テンソルなどの情報はテンソルのタイプ ($s/a/sss$ など) と添字の並び (例えば、入力 234, 出力 1 なら $P_{234;1}^t$ など) を指定すればよい。代表的な物性テンソルと分解式との関係を表 1 にまとめておく。

表 1 代表的な物性テンソル。(調べて埋める)

名称	出力	入力	ランク	タイプ	添字の順序
伝導率 σ_{12}	j_1	E_2	2	($Q,-$)	12

2.1. 0 階

極性単極子 Q (1 成分) を用いて

$$P = Q^{(1)} \quad (7)$$

2.2. 1 階

極性双極子 Q_1 (3 成分) を用いて

$$P_1 = Q_1^{(1)} \quad (8)$$

2.3. 2 階

2 階テンソル P_{12} は $3^2 = 9$ 成分ある。このうち、(1, 2) の入れ替えに対して対称な成分 P_{12}^s は 6、反対称な成分 P_{12}^a は 3 である。したがって、極性単極子 Q (1 成分)、軸性双極子 G_1 (3 成分) および極性四極子 Q_{12} (5 成分) を用いて

$$\begin{aligned}
 P_{12} &= P_{12}^s + P_{12}^a \\
 P_{12}^s &= \delta_{12} Q^{(1)} + Q_{12}^{(1)} = P_{21}^s \\
 P_{12}^a &= \epsilon^{123} G_3^{(1)} = -P_{21}^a
 \end{aligned} \quad (9)$$

のように分解することができる。ここで、 Q_{12} は $(1, 2)$ の入れ替えに対して対称 (6 成分) であり、対称和 (トレース) は $Q_{11} = 0$ 。この拘束条件 (1 個) により $6 - 1 = 5$ 成分となる。 $(1, 2)$ の入れ替えについて対称なら $G_1^{(1)} = 0$ 、反対称なら $Q^{(1)} = Q_{12}^{(1)} = 0$ である。 P_{12} を表すための独立なパラメータ数は $Q^{(1)}$, $G_3^{(1)}$, $Q_{12}^{(1)}$ の $1 + 3 + 5 = 9$ 個で、全成分数と一致している。拘束条件を具体的に書くと $Q_{xx}^{(1)} + Q_{yy}^{(1)} + Q_{zz}^{(1)} = 0$ 。

行列形式 $(x, y, z) \times (x, y, z)$ で書くと、対称成分と反対称成分は

$$\hat{P}^s = \begin{pmatrix} S_{xx} & S_{xy} & S_{xz} \\ * & S_{yy} & S_{yz} \\ * & * & S_{zz} \end{pmatrix}, \quad \hat{P}^a = \begin{pmatrix} 0 & A_{xy} & -A_{zx} \\ ** & 0 & A_{yz} \\ ** & ** & 0 \end{pmatrix} \quad (10)$$

ここで * は上三角の対応する要素と同じ符号、** は反対符号を表す。成分の内容は付録 A にまとめた。

2.4. 3 階

3 階テンソル $P_{12;3}$ は $3^3 = 27$ 成分ある。このうち、 $(1, 2)$ の入れ替えに対して対称な成分 $P_{12;3}^s$ は $6 \times 3 = 18$ 、反対称な成分 $P_{12;3}^a$ は $3 \times 3 = 9$ である。 $(1, 2)$ の入れ替えに対して対称な δ_{12} , $\delta_{12;34}$, $\gamma_{12;5}^{34}$ と反対称な ϵ^{123} , $\epsilon^{12;34}$ および軸性単極子 G (1 成分), 極性双極子 Q_1 (3 成分), 軸性四極子 G_{12} (5 成分), 極性八極子 Q_{123} (7 成分) を用いて

$$\begin{aligned} P_{123} &= P_{12;3}^s + P_{12;3}^a \\ P_{12;3}^s &= \delta_{12} Q_3^{(1)} + \delta_{12;34} Q_4^{(2)} + \gamma_{12;5}^{34} G_{45}^{(1)} + Q_{123}^{(1)} = P_{21;3}^s \\ P_{12;3}^a &= \epsilon^{123} G^{(1)} + \epsilon^{12;34} Q_4^{(3)} + \epsilon^{124} G_{34}^{(2)} = -P_{21;3}^a \end{aligned} \quad (11)$$

ここで、 Q_{123} は $(1, 2, 3)$ の入れ替えに対して完全対称 (10 成分) であり、 $Q_{122} = 0$ 。この拘束条件 (3 個) により $10 - 3 = 7$ 成分となる。 $(1, 2)$ の入れ替えについて対称であれば $G^{(1)} = Q_1^{(3)} = G_{12}^{(2)} = 0$ 。反対称なら $Q_1^{(1)} = Q_1^{(2)} = G_{12}^{(1)} = Q_{123}^{(1)} = 0$ 。 P_{123} を表すための独立なパラメータ数は $G^{(1)}$, $Q_1^{(1,2,3)}$, $G_{12}^{(1,2)}$, $Q_{123}^{(1)}$ の $1 + 3 \cdot 3 + 2 \cdot 5 + 7 = 27$ 個で、全成分数と一致している。拘束条件を具体的に書くと $Q_{xxx}^{(1)} + Q_{xyy}^{(1)} + Q_{xzz}^{(1)} = 0$, $Q_{xxy}^{(1)} + Q_{yyy}^{(1)} + Q_{yzz}^{(1)} = 0$, $Q_{xxz}^{(1)} + Q_{yyz}^{(1)} + Q_{zzz}^{(1)} = 0$ 。

Voigt 表記 ($1 = xx$, $2 = yy$, $3 = zz$, $4 = yz$, $5 = zx$, $6 = xy$) を用いて、行列形式 $(1, 2, 3, 4, 5, 6) \times (x, y, z)$ および $(4, 5, 6) \times (x, y, z)$ で書くと、対称成分と反対称成分は

$$\hat{P}^s = \begin{pmatrix} S_{1x} & S_{1y} & S_{1z} \\ S_{2x} & S_{2y} & S_{2z} \\ S_{3x} & S_{3y} & S_{3z} \\ S_{4x} & S_{4y} & S_{4z} \\ S_{5x} & S_{5y} & S_{5z} \\ S_{6x} & S_{6y} & S_{6z} \end{pmatrix}, \quad \hat{P}^a = \begin{pmatrix} A_{4x} & A_{4y} & A_{4z} \\ A_{5x} & A_{5y} & A_{5z} \\ A_{6x} & A_{6y} & A_{6z} \end{pmatrix} \quad (12)$$

2.5. 4 階

4 階テンソル $P_{12;34}$ は $3^4 = 81$ 成分ある。(1, 2), (3, 4), ((1, 2), (3, 4)) の入れ替えについて、対称・対称・対称な成分 $P_{12;34}^{sss}$ は 21、対称・対称・反対称な成分 $P_{12;34}^{ssa}$ は 15、反対称・反対称・対称な成分 $P_{12;34}^{aas}$ は 6、反対称・反対称・反対称な成分 $P_{12;34}^{aaa}$ は 3、対称・反対称な成分 $P_{12;34}^{sa}$ は 18、反対称・対称な成分 $P_{12;34}^{as}$ は 18 である。それぞれ

$$\begin{aligned}
P_{1234} &= P_{12;34}^{sss} + P_{12;34}^{ssa} + P_{12;34}^{aas} + P_{12;34}^{aaa} + P_{12;34}^{sa} + P_{12;34}^{as} \\
P_{12;34}^{sss} &= \delta_{12}\delta_{34}Q^{(1)} + \delta_{12;34}Q^{(2)} + \delta_{12;34;56}Q_{56}^{(1)} + \delta'_{12;34;56}Q_{56}^{(2)} + Q_{1234}^{(1)} \\
P_{12;34}^{ssa} &= \delta_{12;34}^5 G_5^{(1)} + \delta''_{12;34;56}Q_{56}^{(3)} + \delta_{12;34;56}^7 G_{567}^{(1)} \\
P_{12;34}^{aas} &= \epsilon^{12;34}Q^{(3)} + \epsilon_{56}^{12;34}Q_{56}^{(4)} \\
P_{12;34}^{aaa} &= \epsilon_5^{12;34}G_5^{(2)} \\
P_{12;34}^{sa} &= \delta_{12}\epsilon^{345}G_5^{(3)} + \gamma_{12;5}^{34}G_5^{(4)} + \gamma_{12;56}^{34}Q_{56}^{(5)} + \epsilon^{345}G_{125}^{(2)} \\
P_{12;34}^{as} &= \delta_{34}\epsilon^{125}G_5^{(5)} + \gamma_{34;5}^{12}G_5^{(6)} + \gamma_{34;56}^{12}Q_{56}^{(6)} + \epsilon^{125}G_{345}^{(3)}
\end{aligned} \tag{13}$$

である。ここで、 Q_{1234} は (1, 2, 3, 4) の入れ替えに対して完全対称 (15 成分) であり、 $Q_{1233} = 0$ 。この拘束条件 (6 個) により $15 - 6 = 9$ 成分となる。 P_{1234} を表すための独立なパラメータ数は $Q^{(1,2,3)}$, $G_1^{(1,2,3,4,5,6)}$, $Q_{12}^{(1,2,3,4,5,6)}$, $G_{123}^{(1,2,3)}$, $Q_{1234}^{(1)}$ の $3 \cdot 1 + 6 \cdot 3 + 6 \cdot 5 + 3 \cdot 7 + 9 = 81$ 個で、全成分数と一致している。拘束条件を具体的に書くと $Q_{xxxx}^{(1)} + Q_{xyxy}^{(1)} + Q_{xxzz}^{(1)} = 0$, $Q_{xyyy}^{(1)} + Q_{yyyy}^{(1)} + Q_{yyzz}^{(1)} = 0$, $Q_{xxzz}^{(1)} + Q_{yyzz}^{(1)} + Q_{zzzz}^{(1)} = 0$, $Q_{xxyz}^{(1)} + Q_{yyyz}^{(1)} + Q_{yzzz}^{(1)} = 0$, $Q_{xxzx}^{(1)} + Q_{xyyz}^{(1)} + Q_{xzzz}^{(1)} = 0$, $Q_{xxxy}^{(1)} + Q_{xyyy}^{(1)} + Q_{xyzz}^{(1)} = 0$ 。

P_{1234} のうち、 $P_{12;3;4} = P_{21;3;4}$ を満たすものを $P_{12;3;4}^s$, $P_{12;3;4} = -P_{21;3;4}$ を満たすものを $P_{12;3;4}^a$ と表すと

$$\begin{aligned}
P_{12;3;4}^s &= P_{12;34}^{sss} + P_{12;34}^{ssa} + P_{12;34}^{sa} \\
P_{12;3;4}^a &= P_{12;34}^{aas} + P_{12;34}^{aaa} + P_{12;34}^{as}
\end{aligned} \tag{14}$$

である。

また、 P_{1234} のうち (1, 2, 3) の入れ替えに関して完全対称なものを $P_{123;4}^t$ と表すと

$$\begin{aligned}
P_{123;4}^t &= (\delta_{12}\delta_{34} + \delta_{12;34})Q^{(1)} + \delta_{12;34;56}Q_{56}^{(1)} + \delta'_{12;34;56}Q_{56}^{(2)} + \delta''_{12;34;56}Q_{56}^{(3)} + \gamma_{12;56}^{34}Q_{56}^{(5)} + Q_{1234}^{(1)} \\
&= (\delta_{12}\delta_{34} + \delta_{13}\delta_{24} + \delta_{14}\delta_{23})Q^{(1)} + \delta_{12;34;56}Q_{56}^{(1)} + \delta'_{12;34;56}Q_{56}^{(2)} + \delta''_{12;34;56}Q_{56}^{(3)} + \gamma_{12;56}^{34}Q_{56}^{(5)} \\
&\quad + Q_{1234}^{(1)}
\end{aligned} \tag{15}$$

である。(1, 2, 3) に関して完全対称なものは sss, ssa, sa に含まれる計 54 個のパラメータで表されるが、反対称成分が消える条件から $Q^{(2)} = Q^{(1)}$, $G_1^{(1)} = G_1^{(3)} = G_1^{(4)} = 0$, $G_{123}^{(1)} = G_{123}^{(2)} = 0$ が成り立つので、独立なものはそのうちの 30 個である。

行列形式 $(1, 2, 3, 4, 5, 6) \times (1, 2, 3, 4, 5, 6)$ で書くと、sss 成分と ssa 成分は

$$\hat{P}^{sss} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} & S_{14} & S_{15} & S_{16} \\ * & S_{22} & S_{23} & S_{24} & S_{25} & S_{26} \\ * & * & S_{33} & S_{34} & S_{35} & S_{36} \\ * & * & * & S_{44} & S_{45} & S_{46} \\ * & * & * & * & S_{55} & S_{56} \\ * & * & * & * & * & S_{66} \end{pmatrix}, \quad \hat{P}^{ssa} = \begin{pmatrix} 0 & \bar{S}_{12} & \bar{S}_{13} & \bar{S}_{14} & \bar{S}_{15} & \bar{S}_{16} \\ ** & 0 & \bar{S}_{23} & \bar{S}_{24} & \bar{S}_{25} & \bar{S}_{26} \\ ** & ** & 0 & \bar{S}_{34} & \bar{S}_{35} & \bar{S}_{36} \\ ** & ** & ** & 0 & \bar{S}_{45} & \bar{S}_{46} \\ ** & ** & ** & ** & 0 & \bar{S}_{56} \\ ** & ** & ** & ** & ** & 0 \end{pmatrix} \quad (16)$$

aas 成分と aaa 成分は、行列形式 $(4, 5, 6) \times (4, 5, 6)$ で書くと

$$\hat{P}^{aas} = \begin{pmatrix} A_{44} & A_{45} & A_{46} \\ * & A_{55} & A_{56} \\ * & * & A_{66} \end{pmatrix}, \quad \hat{P}^{aaa} = \begin{pmatrix} 0 & \bar{A}_{45} & \bar{A}_{46} \\ ** & 0 & \bar{A}_{56} \\ ** & ** & 0 \end{pmatrix} \quad (17)$$

行列形式 $(1, 2, 3, 4, 5, 6) \times (4, 5, 6)$ または $(4, 5, 6) \times (1, 2, 3, 4, 5, 6)$ で書くと、sa 成分と as 成分は

$$\hat{P}^{sa} = \begin{pmatrix} M_{14} & M_{15} & M_{16} \\ M_{24} & M_{25} & M_{26} \\ M_{34} & M_{35} & M_{36} \\ M_{44} & M_{45} & M_{46} \\ M_{54} & M_{55} & M_{56} \\ M_{64} & M_{65} & M_{66} \end{pmatrix}, \quad \hat{P}^{as} = \begin{pmatrix} \bar{M}_{41} & \bar{M}_{42} & \bar{M}_{43} & \bar{M}_{44} & \bar{M}_{45} & \bar{M}_{46} \\ \bar{M}_{51} & \bar{M}_{52} & \bar{M}_{53} & \bar{M}_{54} & \bar{M}_{55} & \bar{M}_{56} \\ \bar{M}_{61} & \bar{M}_{62} & \bar{M}_{63} & \bar{M}_{64} & \bar{M}_{65} & \bar{M}_{66} \end{pmatrix} \quad (18)$$

同様に s, a は、行列形式 $(1, 2, 3, 4, 5, 6) \times (1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9)$, $(4, 5, 6) \times (1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9)$ [$7 = zy, 8 = xz, 9 = yx$] で書くと

$$P_{12;3;4}^s = \begin{pmatrix} U_{11} & U_{12} & U_{13} & U_{14} & U_{15} & U_{16} & U_{17} & U_{18} & U_{19} \\ U_{21} & U_{22} & U_{23} & U_{24} & U_{25} & U_{26} & U_{27} & U_{28} & U_{29} \\ U_{31} & U_{32} & U_{33} & U_{34} & U_{35} & U_{36} & U_{37} & U_{38} & U_{39} \\ U_{41} & U_{42} & U_{43} & U_{44} & U_{45} & U_{46} & U_{47} & U_{48} & U_{49} \\ U_{51} & U_{52} & U_{53} & U_{54} & U_{55} & U_{56} & U_{57} & U_{58} & U_{59} \\ U_{61} & U_{62} & U_{63} & U_{64} & U_{65} & U_{66} & U_{67} & U_{68} & U_{69} \end{pmatrix} \quad (19)$$

$$P_{12;3;4}^a = \begin{pmatrix} V_{41} & V_{42} & V_{43} & V_{44} & V_{45} & V_{46} & V_{47} & V_{48} & V_{49} \\ V_{51} & V_{52} & V_{53} & V_{54} & V_{55} & V_{56} & V_{57} & V_{58} & V_{59} \\ V_{61} & V_{62} & V_{63} & V_{64} & V_{65} & V_{66} & V_{67} & V_{68} & V_{69} \end{pmatrix} \quad (20)$$

また t は、行列形式 $\mathbf{1} = (xxx), \mathbf{2} = (yyy), \mathbf{3} = (zzz), \mathbf{4} = (yyz), \mathbf{5} = (zzx), \mathbf{6} = (xxy), \mathbf{7} = (yzz), \mathbf{8} =$

$(zxx), \mathbf{9} = (xyy), \mathbf{10} = (xyz)) \times (x, y, z)$ で書くと

$$P_{123;4}^t = \begin{pmatrix} W_{1x} & W_{1y} & W_{1z} \\ W_{2x} & W_{2y} & W_{2z} \\ W_{3x} & W_{3y} & W_{3z} \\ W_{4x} & W_{4y} & W_{4z} \\ W_{5x} & W_{5y} & W_{5z} \\ W_{6x} & W_{6y} & W_{6z} \\ W_{7x} & W_{7y} & W_{7z} \\ W_{8x} & W_{8y} & W_{8z} \\ W_{9x} & W_{9y} & W_{9z} \\ W_{10x} & W_{10y} & W_{10z} \end{pmatrix} \quad (21)$$

以上の分解に現れる独立な多極子の自由度数を表 2 にまとめておく。

3. 各成分の多極子表示

テンソルの成分は Cartesian 座標系で表されている。各 (磁気) 点群は、活性化した多極子の成分で特徴づけられるので、テンソル成分を極座標表示の多極子と関係づけておくと、有限なテンソル成分や成分間の関係が見通し良くなる。

テンソル成分の多極子表示においては、1 次元の恒等表現に落ちる多極子成分を用いるので、より高対称な点群での E, T 表現の成分間の相対符号や係数は重要でない。そこで、以下の関係式 (22), (23) のように係数がシンプルになるように多極子の定義における全体の係数を調整した (表 3)。また、 $r^2 \rightarrow 0, (x, y, z)r^2 \rightarrow 0, (x^2, y^2, z^2, xy, xz, yz)r^2 \rightarrow 0$ の関係が成り立つことに注意する。

3.1. 立方晶系

Cartesian 座標系と多極子の関係

$$\begin{aligned} x &= \text{px}, & y &= \text{py}, & z &= \text{pz} \\ xx &= -\text{du} + \text{dv}, & yy &= -\text{du} - \text{dv}, & zz &= 2\text{du} \\ yz &= \text{dyz}, & xz &= \text{dxz}, & xy &= \text{dxy} \\ xxx &= 2\text{fax}, & yyy &= 2\text{fay}, & zzz &= 2\text{faz} \\ xzz &= -\text{fax} - \text{fbx}, & xxy &= -\text{fay} - \text{fby}, & yyz &= -\text{faz} - \text{fbz} \\ xyy &= -\text{fax} + \text{fbx}, & yzz &= -\text{fay} + \text{fby}, & xxz &= -\text{faz} + \text{fbz} \\ xyz &= \text{f3} \end{aligned}$$

表2 極性iテンソルにおける独立な自由度数。 c テンソルなら $(Q, G) \rightarrow (T, M)$ に置き換える。軸性テンソルなら $Q \leftrightarrow G, T \leftrightarrow M$ に置き換える。

ランク	タイプ	多極子	個数	対称性
0	-	$Q^{(1)}$	1	-
1	-	$Q_1^{(1)}$	3	-
2	s	$Q^{(1)}, Q_{12}^{(1)}$	6	$P_{12}^s = P_{21}^s$
	a	$G_1^{(1)}$	3	$P_{12}^a = -P_{21}^a$
3	s	$Q_1^{(1)}, Q_1^{(2)}, G_{12}^{(1)}, Q_{123}^{(1)}$	18	$P_{12;3}^s = P_{21;3}^s$
	a	$G^{(1)}, Q_1^{(3)}, G_{12}^{(2)}$	9	$P_{12;3}^a = -P_{21;3}^a$
4	sss	$Q^{(1)}, Q^{(2)}, Q_{12}^{(1)}, Q_{12}^{(2)}, Q_{1234}^{(1)}$	21	$P_{12;34}^{sss} = P_{21;34}^{sss} = P_{12;43}^{sss} = P_{34;12}^{sss}$
	ssa	$G_1^{(1)}, Q_{12}^{(3)}, G_{123}^{(1)}$	15	$P_{12;34}^{ssa} = P_{21;34}^{ssa} = P_{12;43}^{ssa} = -P_{34;12}^{ssa}$
	aas	$Q^{(3)}, Q_{12}^{(4)}$	6	$P_{12;34}^{aas} = -P_{21;34}^{aas} = -P_{12;43}^{aas} = P_{34;12}^{aas}$
	aaa	$G_1^{(2)}$	3	$P_{12;34}^{aaa} = -P_{21;34}^{aaa} = -P_{12;43}^{aaa} = -P_{34;12}^{aaa}$
	sa	$G_1^{(3)}, G_1^{(4)}, Q_{12}^{(5)}, G_{123}^{(2)}$	18	$P_{12;34}^{sa} = P_{21;34}^{sa} = -P_{12;43}^{sa}$
	as	$G_1^{(5)}, G_1^{(6)}, Q_{12}^{(6)}, G_{123}^{(3)}$	18	$P_{12;34}^{as} = -P_{21;34}^{as} = P_{12;43}^{as}$
	s	$Q^{(1)}, Q^{(2)}, Q_{12}^{(1)}, Q_{12}^{(2)}, Q_{1234}^{(1)},$ $G_1^{(1)}, Q_{12}^{(3)}, G_{123}^{(1)}$ $G_1^{(3)}, G_1^{(4)}, Q_{12}^{(5)}, G_{123}^{(2)}$	54	$P_{12;3;4}^s = P_{21;3;4}^s$
	a	$Q^{(3)}, Q_{12}^{(4)}, G_1^{(2)},$ $G_1^{(5)}, G_1^{(6)}, Q_{12}^{(6)}, G_{123}^{(3)}$	27	$P_{12;3;4}^a = -P_{21;3;4}^a$
	t	$Q^{(1)}, Q_{12}^{(1)}, Q_{12}^{(2)}, Q_{12}^{(3)}, Q_{12}^{(5)},$ $Q_{1234}^{(1)}$	30	$P_{123;4}^t = P_{132;4}^t = P_{213;4}^t$ $= P_{231;4}^t = P_{312;4}^t = P_{321;4}^t$

$$\begin{aligned}
xxxx &= 2g - gu + gv, & yyyy &= 2g - gu - gv, & zzzz &= 2g + 2gu \\
yyzz &= -g - gu + gv, & xzzz &= -g - gu - gv, & xxyy &= -g + 2gu \\
xxyz &= 2gbx, & xyyz &= 2gby, & xyzx &= 2gbz \\
yyyz &= gax - gbx, & xzzz &= gay - gby, & xxyy &= gaz - gbz \\
yzzz &= -gax - gbx, & xxxz &= -gay - gby, & yyyy &= -gaz - gbz
\end{aligned} \tag{22}$$

3.2. 六方晶系

Cartesian 座標系と多極子の関係

$$\begin{aligned}
xxx &= -3f_3x + f_2, & xxy &= -f_3y + f_1, & xyy &= -f_3x - f_2, & yyy &= -3f_3y - f_1 \\
xzz &= 4f_3x, & yzz &= 4f_3y \\
xxxx &= 3g_0 + g_c + g_v, & yyyy &= 3g_0 + g_c - g_v, \\
xxzz &= -4g_0 - g_v, & yyzz &= -4g_0 + g_v, & xxyy &= g_0 - g_c \\
xxyz &= -g_{au} + g_b, & yyyz &= -3g_{au} - g_b \\
xxxz &= g_a - 3g_{av} & xyyz &= -g_a - g_{av} \\
zzzz &= 8g_0 & xzzz &= 4g_{av} & yzzz &= 4g_{au}
\end{aligned} \tag{23}$$

以下の成分は立方晶系と共通である。

$$x, \quad y, \quad z, \quad xx, \quad yy, \quad zz, \quad yz, \quad xz, \quad xy, \quad xxz, \quad yyz, \quad xyz, \quad zzz, \quad xxy, \quad xyy, \quad xzz \tag{24}$$

また、六方晶系のすべての磁気点群で 2 次元表現に属する

$$(px, py), (dv, dxy), (dyz, dxz), (f_3, fbz), (f_3x, f_3y), (g_{au}, g_{av}), (g_c, g_{az}), (g_v, g_{bz}) \tag{25}$$

は常に不活性であり、考慮しなくてよい。

表3 立方晶系 (C) と六方晶系 (H) の多極子の定義。略称は [1,2] の表記に従った。記号は、MultiPie に登録されている基底調和関数を表し、係数 × 記号が略称の定義に等しい。*は不活性。\$Q_{4u}^{\beta 1} = Q_{4z}^{\alpha}\$, \$Q_{4u}^{\beta 2} = Q_{4v}\$, \$Q_{4v}^{\beta 2} = Q_{4z}^{\beta}\$。

\$l\$	略称 (C)	係数	記号	定義	略称 (H)	係数	記号	定義
0	\$Q\$	1	s	1	同左			
1	\$Q_x\$	1	px	\$x\$	同左*			
	\$Q_y\$	1	py	\$y\$	同左*			
	\$Q_z\$	1	pz	\$z\$	同左			
2	\$Q_u\$	\$\frac{1}{3}\$	du	\$\rightarrow \frac{z^2}{2}, -\frac{x^2+y^2}{2}\$	同左			
	\$Q_v\$	\$\frac{1}{\sqrt{3}}\$	dv	\$\frac{x^2-y^2}{2}\$	同左*			
	\$Q_{yz}\$	\$\frac{1}{\sqrt{3}}\$	dyz	\$yz\$	同左*			
	\$Q_{xz}\$	\$\frac{1}{\sqrt{3}}\$	dxz	\$zx\$	同左*			
	\$Q_{xy}\$	\$\frac{1}{\sqrt{3}}\$	dxy	\$xy\$	同左*			
3	\$Q_{xyz}\$	\$\frac{1}{\sqrt{15}}\$	f3	\$xyz\$	同左*			
	\$Q_x^{\alpha}\$	\$\frac{1}{5}\$	fax	\$\rightarrow \frac{x^3}{2}, -\frac{x(y^2+z^2)}{2}\$	\$Q_{3a}\$	\$\frac{1}{\sqrt{10}}\$	f2	\$\frac{x(x^2-3y^2)}{4}\$
	\$Q_y^{\alpha}\$	\$\frac{1}{5}\$	fay	\$\rightarrow \frac{y^3}{2}, -\frac{y(z^2+x^2)}{2}\$	\$Q_{3b}\$	\$\frac{1}{\sqrt{10}}\$	f1	\$\frac{y(3x^2-y^2)}{4}\$
	\$Q_z^{\alpha}\$	\$\frac{1}{5}\$	faz	\$\rightarrow \frac{z^3}{2}, -\frac{z(x^2+y^2)}{2}\$	同左			
	\$Q_x^{\beta}\$	\$\frac{1}{\sqrt{15}}\$	fbx	\$\frac{x(y^2-z^2)}{2}\$	\$Q_{3u}^*\$	\$\frac{1}{5\sqrt{6}}\$	f3x	\$\rightarrow \frac{xz^2}{4}, -\frac{x(x^2+y^2)}{4}\$
	\$Q_y^{\beta}\$	\$\frac{1}{\sqrt{15}}\$	fby	\$\frac{y(z^2-x^2)}{2}\$	\$Q_{3v}^*\$	\$\frac{1}{5\sqrt{6}}\$	f3y	\$\rightarrow \frac{yz^2}{4}, -\frac{y(x^2+y^2)}{4}\$
	\$Q_z^{\beta}\$	\$\frac{1}{\sqrt{15}}\$	fbz	\$\frac{z(x^2-y^2)}{2}\$	同左*			
4	\$Q_4\$	\$\frac{2}{5\sqrt{21}}\$	g	\$\rightarrow \frac{x^4+y^4+z^4}{6}, -\frac{y^2z^2+z^2x^2+x^2y^2}{3}\$	\$Q_{40}\$	\$\frac{1}{35}\$	g0	\$\rightarrow \frac{z^4}{8}, -\frac{(x^2+y^2)z^2}{8}\$
	\$Q_{4u}\$	\$\frac{2}{7\sqrt{15}}\$	gu	\$\rightarrow \frac{2z^4-x^4-y^4}{6}, \frac{2x^2y^2-y^2z^2-z^2x^2}{6}\$	\$Q_{4a}\$	\$\frac{1}{\sqrt{70}}\$	gb	\$\frac{yz(3x^2-y^2)}{4}\$
	\$Q_{4v}\$	\$-\frac{2}{7\sqrt{5}}\$	gv	\$\rightarrow \frac{x^4-y^4}{2}, -\frac{(x^2-y^2)z^2}{2}\$	\$Q_{4u}^{\beta 2*}\$	同左		
	\$Q_{4x}^{\alpha}\$	\$\frac{1}{\sqrt{35}}\$	gax	\$\frac{yz(y^2-z^2)}{2}\$	\$Q_{4u}^{\alpha*}\$	\$-\frac{1}{7\sqrt{10}}\$	gav	\$\rightarrow \frac{xz^3}{4}, -\frac{xz(x^2+y^2)}{4}\$
	\$Q_{4y}^{\alpha}\$	\$\frac{1}{\sqrt{35}}\$	gay	\$\frac{zx(z^2-x^2)}{2}\$	\$Q_{4v}^{\alpha*}\$	\$\frac{1}{7\sqrt{10}}\$	gau	\$\rightarrow \frac{yz^3}{4}, -\frac{yz(x^2+y^2)}{4}\$
	\$Q_{4z}^{\alpha}\$	\$\frac{1}{\sqrt{35}}\$	gaz	\$\frac{xy(x^2-y^2)}{2}\$	\$Q_{4v}^{\beta 1*}\$	同左		
	\$Q_{4x}^{\beta}\$	\$\frac{1}{7\sqrt{5}}\$	gbx	\$\rightarrow \frac{yzx^2}{2}, -\frac{yz(y^2+z^2)}{2}\$	\$Q_{4u}^{\beta 1*}\$	\$\frac{1}{\sqrt{35}}\$	gc	\$\frac{4(x^4+y^4)-3z^4}{8}, -\frac{(x^2+y^2)z^2+8x^2y^2}{8}\$
	\$Q_{4y}^{\beta}\$	\$\frac{1}{7\sqrt{5}}\$	gby	\$\rightarrow \frac{zxy^2}{2}, -\frac{zx(z^2+x^2)}{2}\$	\$Q_{4b}\$	\$\frac{1}{\sqrt{70}}\$	ga	\$\frac{xz(x^2-3y^2)}{4}\$
	\$Q_{4z}^{\beta}\$	\$\frac{1}{7\sqrt{5}}\$	gbz	\$\rightarrow \frac{xyz^2}{2}, -\frac{xy(x^2+y^2)}{2}\$	\$Q_{4v}^{\beta 2*}\$	同左		

A. テンソル成分

A.1. 2 階テンソル

$$S_{xx} = Q^{(1)} + Q_{xx}^{(1)}, \quad S_{yy} = Q^{(1)} + Q_{yy}^{(1)}, \quad S_{zz} = Q^{(1)} + Q_{zz}^{(1)}$$

$$S_{xy} = Q_{xy}^{(1)}, \quad S_{xz} = Q_{xz}^{(1)}, \quad S_{yz} = Q_{yz}^{(1)} \quad (26)$$

$$A_{yz} = G_x^{(1)}, \quad A_{zx} = G_y^{(1)}, \quad A_{xy} = G_z^{(1)} \quad (27)$$

A.2. 3 階テンソル

$$S_{1x} = Q_{xxx}^{(1)} + Q_x^{(1)} + 2Q_x^{(2)}, \quad S_{1y} = 2G_{xz}^{(1)} + Q_{xxy}^{(1)} + Q_y^{(1)}, \quad S_{1z} = -2G_{xy}^{(1)} + Q_{xxz}^{(1)} + Q_z^{(1)}$$

$$\begin{aligned}
S_{2x} &= -2G_{yz}^{(1)} + Q_{xyy}^{(1)} + Q_x^{(1)}, & S_{2y} &= Q_{yyy}^{(1)} + Q_y^{(1)} + 2Q_y^{(2)}, & S_{2z} &= 2G_{xy}^{(1)} + Q_{yyz}^{(1)} + Q_z^{(1)} \\
S_{3x} &= 2G_{yz}^{(1)} + Q_{xzz}^{(1)} + Q_x^{(1)}, & S_{3y} &= -2G_{xz}^{(1)} + Q_{yzz}^{(1)} + Q_y^{(1)}, & S_{3z} &= Q_{zzz}^{(1)} + Q_z^{(1)} + 2Q_z^{(2)} \\
S_{4x} &= G_{yy}^{(1)} - G_{zz}^{(1)} + Q_{xyz}^{(1)}, & S_{4y} &= -G_{xy}^{(1)} + Q_{yyz}^{(1)} + Q_z^{(2)}, & S_{4z} &= G_{xz}^{(1)} + Q_{yzz}^{(1)} + Q_y^{(2)} \\
S_{5x} &= G_{xy}^{(1)} + Q_{xxz}^{(1)} + Q_z^{(2)}, & S_{5y} &= -G_{xx}^{(1)} + G_{zz}^{(1)} + Q_{xyz}^{(1)}, & S_{5z} &= -G_{yz}^{(1)} + Q_{xzz}^{(1)} + Q_x^{(2)} \\
S_{6x} &= -G_{xz}^{(1)} + Q_{xxy}^{(1)} + Q_y^{(2)}, & S_{6y} &= G_{yz}^{(1)} + Q_{xyy}^{(1)} + Q_x^{(2)}, & S_{6z} &= G_{xx}^{(1)} - G_{yy}^{(1)} + Q_{xyz}^{(1)}
\end{aligned} \tag{28}$$

$$\begin{aligned}
A_{4x} &= G^{(1)} + G_{xx}^{(2)}, & A_{4y} &= G_{xy}^{(2)} + Q_z^{(3)}, & A_{4z} &= G_{xz}^{(2)} - Q_y^{(3)} \\
A_{5x} &= G_{xy}^{(2)} - Q_z^{(3)}, & A_{5y} &= G^{(1)} + G_{yy}^{(2)}, & A_{5z} &= G_{yz}^{(2)} + Q_x^{(3)} \\
A_{6x} &= G_{xz}^{(2)} + Q_y^{(3)}, & A_{6y} &= G_{yz}^{(2)} - Q_x^{(3)}, & A_{6z} &= G^{(1)} + G_{zz}^{(2)}
\end{aligned} \tag{29}$$

A.3. 4 階テンソル

$$\begin{aligned}
S_{11} &= Q^{(1)} + Q_{xxxx}^{(1)} + 2Q_{xx}^{(1)} + 2Q^{(2)} + 4Q_{xx}^{(2)}, & S_{12} &= Q^{(1)} + Q_{xxyy}^{(1)} + Q_{xx}^{(1)} + Q_{yy}^{(1)} \\
S_{13} &= Q^{(1)} + Q_{xxzz}^{(1)} + Q_{xx}^{(1)} + Q_{zz}^{(1)}, & S_{14} &= Q_{xxyz}^{(1)} + Q_{yz}^{(1)} \\
S_{15} &= Q_{xxxz}^{(1)} + Q_{xz}^{(1)} + 2Q_{xz}^{(2)}, & S_{16} &= Q_{xxxy}^{(1)} + Q_{xy}^{(1)} + 2Q_{xy}^{(2)} \\
S_{22} &= Q^{(1)} + Q_{yyyy}^{(1)} + 2Q_{yy}^{(1)} + 2Q^{(2)} + 4Q_{yy}^{(2)}, & S_{23} &= Q^{(1)} + Q_{yyzz}^{(1)} + Q_{yy}^{(1)} + Q_{zz}^{(1)} \\
S_{24} &= Q_{yyyz}^{(1)} + Q_{yz}^{(1)} + 2Q_{yz}^{(2)}, & S_{25} &= Q_{xyyz}^{(1)} + Q_{xz}^{(1)}, & S_{26} &= Q_{xyyy}^{(1)} + Q_{xy}^{(1)} + 2Q_{xy}^{(2)} \\
S_{33} &= Q^{(1)} + Q_{zzzz}^{(1)} + 2Q_{zz}^{(1)} + 2Q^{(2)} + 4Q_{zz}^{(2)}, & S_{34} &= Q_{yzzz}^{(1)} + Q_{yz}^{(1)} + 2Q_{yz}^{(2)} \\
S_{35} &= Q_{xzzz}^{(1)} + Q_{xz}^{(1)} + 2Q_{xz}^{(2)}, & S_{36} &= Q_{xyzz}^{(1)} + Q_{xy}^{(1)} \\
S_{44} &= Q_{eyes}^{(1)} + Q^{(2)} + Q_{yy}^{(2)} + Q_{zz}^{(2)}, & S_{45} &= Q_{xyzz}^{(1)} + Q_{xy}^{(2)}, & S_{46} &= Q_{xyyz}^{(1)} + Q_{xz}^{(2)} \\
S_{55} &= Q_{xxzz}^{(1)} + Q^{(2)} + Q_{xx}^{(2)} + Q_{zz}^{(2)}, & S_{56} &= Q_{xxyz}^{(1)} + Q_{yz}^{(2)} \\
S_{66} &= Q_{xxyy}^{(1)} + Q^{(2)} + Q_{xx}^{(2)} + Q_{yy}^{(2)}
\end{aligned} \tag{30}$$

$$\begin{aligned}
\bar{S}_{12} &= 4G_{xyz}^{(1)} - Q_{xx}^{(3)} + Q_{yy}^{(3)}, & \bar{S}_{13} &= -4G_{xyz}^{(1)} - Q_{xx}^{(3)} + Q_{zz}^{(3)}, & \bar{S}_{14} &= -2G_{xyy}^{(1)} + 2G_{xzz}^{(1)} + Q_{yz}^{(3)} \\
\bar{S}_{15} &= -2G_{xxy}^{(1)} - 2G_y^{(1)} + Q_{xz}^{(3)}, & \bar{S}_{16} &= 2G_{xxz}^{(1)} + 2G_z^{(1)} + Q_{xy}^{(3)} \\
\bar{S}_{23} &= 4G_{xyz}^{(1)} - Q_{yy}^{(3)} + Q_{zz}^{(3)}, & \bar{S}_{24} &= 2G_{xyy}^{(1)} + 2G_x^{(1)} + Q_{yz}^{(3)} \\
\bar{S}_{25} &= 2G_{xxy}^{(1)} - 2G_{yzz}^{(1)} + Q_{xz}^{(3)}, & \bar{S}_{26} &= -2G_{yyz}^{(1)} - 2G_z^{(1)} + Q_{xy}^{(3)} \\
\bar{S}_{34} &= -2G_{xzz}^{(1)} - 2G_x^{(1)} + Q_{yz}^{(3)}, & \bar{S}_{35} &= 2G_{yzz}^{(1)} + 2G_y^{(1)} + Q_{xz}^{(3)}, & \bar{S}_{36} &= -2G_{xxz}^{(1)} + 2G_{yyz}^{(1)} + Q_{xy}^{(3)} \\
\bar{S}_{45} &= G_{xxz}^{(1)} + G_{yyz}^{(1)} - G_{zzz}^{(1)} - G_z^{(1)}, & \bar{S}_{46} &= -G_{xxy}^{(1)} + G_{yyy}^{(1)} - G_{yzz}^{(1)} + G_y^{(1)} \\
\bar{S}_{56} &= -G_{xxx}^{(1)} + G_{xyy}^{(1)} + G_{xzz}^{(1)} - G_x^{(1)}
\end{aligned} \tag{31}$$

$$\begin{aligned}
A_{44} &= Q^{(3)} + 2Q_{xx}^{(4)}, & A_{45} &= 2Q_{xy}^{(4)}, & A_{46} &= 2Q_{xz}^{(4)} \\
A_{55} &= Q^{(3)} + 2Q_{yy}^{(4)}, & A_{56} &= 2Q_{yz}^{(4)} \\
A_{66} &= Q^{(3)} + 2Q_{zz}^{(4)}
\end{aligned} \tag{32}$$

$$\bar{A}_{45} = -G_z^{(2)}, \quad \bar{A}_{46} = G_y^{(2)}, \quad \bar{A}_{56} = -G_x^{(2)} \tag{33}$$

$$\begin{aligned}
M_{14} &= G_{xx}^{(2)} + G_x^{(3)} + 2G_x^{(4)}, & M_{15} &= G_{xy}^{(2)} + G_y^{(3)} + 2Q_{xz}^{(5)}, & M_{16} &= G_{xxz}^{(2)} + G_z^{(3)} - 2Q_{xy}^{(5)} \\
M_{24} &= G_{xyy}^{(2)} + G_x^{(3)} - 2Q_{yz}^{(5)}, & M_{25} &= G_{yyy}^{(2)} + G_y^{(3)} + 2G_y^{(4)}, & M_{26} &= G_{yyz}^{(2)} + G_z^{(3)} + 2Q_{xy}^{(5)} \\
M_{34} &= G_{xzz}^{(2)} + G_x^{(3)} + 2Q_{yz}^{(5)}, & M_{35} &= G_{yzz}^{(2)} + G_y^{(3)} - 2Q_{xz}^{(5)}, & M_{36} &= G_{zzz}^{(2)} + G_z^{(3)} + 2G_z^{(4)} \\
M_{44} &= G_{xyz}^{(2)} + Q_{yy}^{(5)} - Q_{zz}^{(5)}, & M_{45} &= G_{yyz}^{(2)} + G_z^{(4)} - Q_{xy}^{(5)}, & M_{46} &= G_{yzz}^{(2)} + G_y^{(4)} + Q_{xz}^{(5)} \\
M_{54} &= G_{xxz}^{(2)} + G_z^{(4)} + Q_{xy}^{(5)}, & M_{55} &= G_{xyz}^{(2)} - Q_{xx}^{(5)} + Q_{zz}^{(5)}, & M_{56} &= G_{xzz}^{(2)} + G_x^{(4)} - Q_{yz}^{(5)} \\
M_{64} &= G_{xxy}^{(2)} + G_y^{(4)} - Q_{xz}^{(5)}, & M_{65} &= G_{xyy}^{(2)} + G_x^{(4)} + Q_{yz}^{(5)}, & M_{66} &= G_{xyz}^{(2)} + Q_{xx}^{(5)} - Q_{yy}^{(5)} \tag{34}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\bar{M}_{41} &= G_{xxx}^{(3)} + G_x^{(5)} + 2G_x^{(6)}, & \bar{M}_{42} &= G_{xyy}^{(3)} + G_x^{(5)} - 2Q_{yz}^{(6)}, & \bar{M}_{43} &= G_{xzz}^{(3)} + G_x^{(5)} + 2Q_{yz}^{(6)} \\
\bar{M}_{44} &= G_{xyz}^{(3)} + Q_{yy}^{(6)} - Q_{zz}^{(6)}, & \bar{M}_{45} &= G_{xxz}^{(3)} + G_z^{(6)} + Q_{xy}^{(6)}, & \bar{M}_{46} &= G_{xxy}^{(3)} + G_y^{(6)} - Q_{xz}^{(6)} \\
\bar{M}_{51} &= G_{xxy}^{(3)} + G_y^{(5)} + 2Q_{xz}^{(6)}, & \bar{M}_{52} &= G_{yyy}^{(3)} + G_y^{(5)} + 2G_y^{(6)}, & \bar{M}_{53} &= G_{yzz}^{(3)} + G_y^{(5)} - 2Q_{xz}^{(6)} \\
\bar{M}_{54} &= G_{yyz}^{(3)} + G_z^{(6)} - Q_{xy}^{(6)}, & \bar{M}_{55} &= G_{xyz}^{(3)} - Q_{xx}^{(6)} + Q_{zz}^{(6)}, & \bar{M}_{56} &= G_{xyy}^{(3)} + G_x^{(6)} + Q_{yz}^{(6)} \\
\bar{M}_{61} &= G_{xxz}^{(3)} + G_z^{(5)} - 2Q_{xy}^{(6)}, & \bar{M}_{62} &= G_{yyz}^{(3)} + G_z^{(5)} + 2Q_{xy}^{(6)}, & \bar{M}_{63} &= G_{zzz}^{(3)} + G_z^{(5)} + 2G_z^{(6)} \\
\bar{M}_{64} &= G_{yzz}^{(3)} + G_y^{(6)} + Q_{xz}^{(6)}, & \bar{M}_{65} &= G_{xzz}^{(3)} + G_x^{(6)} - Q_{yz}^{(6)}, & \bar{M}_{66} &= G_{xyz}^{(3)} + Q_{xx}^{(6)} - Q_{yy}^{(6)} \tag{35}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
W_{1x} &= 3Q^{(1)} + Q_{xxxx}^{(1)} + 2Q_{xx}^{(1)} + 4Q_{xx}^{(2)} \\
W_{1y} &= Q_{xxxy}^{(1)} + Q_{xy}^{(1)} + 2Q_{xy}^{(2)} + Q_{xy}^{(3)} - 2Q_{xy}^{(5)} \\
W_{1z} &= Q_{xxxz}^{(1)} + Q_{xz}^{(1)} + 2Q_{xz}^{(2)} + Q_{xz}^{(3)} - 2Q_{xz}^{(5)} \\
W_{2x} &= Q_{xyyy}^{(1)} + Q_{xy}^{(1)} + 2Q_{xy}^{(2)} + Q_{xy}^{(3)} - 2Q_{xy}^{(5)} \\
W_{2y} &= 3Q^{(1)} + Q_{yyyy}^{(1)} + 2Q_{yy}^{(1)} + 4Q_{yy}^{(2)} \\
W_{2z} &= Q_{yyyz}^{(1)} + Q_{yz}^{(1)} + 2Q_{yz}^{(2)} + Q_{yz}^{(3)} - 2Q_{yz}^{(5)} \\
W_{3x} &= Q_{xzzz}^{(1)} + Q_{xz}^{(1)} + 2Q_{xz}^{(2)} + Q_{xz}^{(3)} - 2Q_{xz}^{(5)} \\
W_{3y} &= Q_{yzzz}^{(1)} + Q_{yz}^{(1)} + 2Q_{yz}^{(2)} + Q_{yz}^{(3)} - 2Q_{yz}^{(5)} \\
W_{3z} &= 3Q^{(1)} + Q_{zzzz}^{(1)} + 2Q_{zz}^{(1)} + 4Q_{zz}^{(2)} \\
W_{4x} &= Q_{xyyz}^{(1)} + Q_{xz}^{(1)} + Q_{xz}^{(3)} \\
W_{4y} &= Q_{yyyz}^{(1)} + Q_{yz}^{(1)} + 2Q_{yz}^{(2)} + Q_{yz}^{(3)} + 2Q_{yz}^{(5)} \\
W_{4z} &= Q^{(1)} + Q_{yyzz}^{(1)} + Q_{yy}^{(1)} + Q_{zz}^{(1)} - Q_{yy}^{(3)} + Q_{zz}^{(3)} \\
W_{5x} &= Q^{(1)} + Q_{xxzz}^{(1)} + Q_{xx}^{(1)} + Q_{zz}^{(1)} + Q_{xx}^{(3)} - Q_{zz}^{(3)} \\
W_{5y} &= Q_{xyzz}^{(1)} + Q_{xy}^{(1)} + Q_{xy}^{(3)} \\
W_{5z} &= Q_{xzzz}^{(1)} + Q_{xz}^{(1)} + 2Q_{xz}^{(2)} + Q_{xz}^{(3)} + 2Q_{xz}^{(5)} \\
W_{6x} &= Q_{xxxy}^{(1)} + Q_{xy}^{(1)} + 2Q_{xy}^{(2)} + Q_{xy}^{(3)} + 2Q_{xy}^{(5)} \\
W_{6y} &= Q^{(1)} + Q_{xxyy}^{(1)} + Q_{xx}^{(1)} + Q_{yy}^{(1)} - Q_{xx}^{(3)} + Q_{yy}^{(3)} \\
W_{6z} &= Q_{xxyz}^{(1)} + Q_{yz}^{(1)} + Q_{yz}^{(3)} \\
W_{7x} &= Q_{xyyz}^{(1)} + Q_{xy}^{(2)} - Q_{xy}^{(5)}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
W_{7y} &= Q^{(1)} + Q_{yyzz}^{(1)} + Q_{yy}^{(2)} + Q_{zz}^{(2)} - Q_{yy}^{(5)} + Q_{zz}^{(5)} \\
W_{7z} &= Q_{yzzz}^{(1)} + Q_{yz}^{(1)} + 2Q_{yz}^{(2)} - Q_{yz}^{(3)} \\
W_{8x} &= Q_{xxxz}^{(1)} + Q_{xz}^{(1)} + 2Q_{xz}^{(2)} - Q_{xz}^{(3)} \\
W_{8y} &= Q_{xxyz}^{(1)} + Q_{yz}^{(2)} - Q_{yz}^{(5)} \\
W_{8z} &= Q^{(1)} + Q_{xxzz}^{(1)} + Q_{xx}^{(2)} + Q_{zz}^{(2)} + Q_{xx}^{(5)} - Q_{zz}^{(5)} \\
W_{9x} &= Q^{(1)} + Q_{xyyy}^{(1)} + Q_{xx}^{(2)} + Q_{yy}^{(2)} - Q_{xx}^{(5)} + Q_{yy}^{(5)} \\
W_{9y} &= Q_{xyyy}^{(1)} + Q_{xy}^{(1)} + 2Q_{xy}^{(2)} - Q_{xy}^{(3)} \\
W_{9z} &= Q_{xyyz}^{(1)} + Q_{xz}^{(2)} - Q_{xz}^{(5)} \\
W_{10x} &= Q_{xxyz}^{(1)} + Q_{yz}^{(2)} + Q_{yz}^{(5)} \\
W_{10y} &= Q_{xyyz}^{(1)} + Q_{xz}^{(2)} + Q_{xz}^{(5)} \\
W_{10z} &= Q_{xyzx}^{(1)} + Q_{xy}^{(1)} - Q_{xy}^{(3)} \\
U_{11} &= Q^{(1)} + Q_{xxxx}^{(1)} + 2Q_{xx}^{(1)} + 2Q^{(2)} + 4Q_{xx}^{(2)} \\
U_{12} &= 4G_{xyz}^{(1)} + Q^{(1)} + Q_{xxyy}^{(1)} + Q_{xx}^{(1)} + Q_{yy}^{(1)} - Q_{xx}^{(3)} + Q_{yy}^{(3)} \\
U_{13} &= -4G_{xyz}^{(1)} + Q^{(1)} + Q_{xxzz}^{(1)} + Q_{xx}^{(1)} + Q_{zz}^{(1)} - Q_{xx}^{(3)} + Q_{zz}^{(3)} \\
U_{14} &= -2G_{xyy}^{(1)} + 2G_{xzz}^{(1)} + G_{xxx}^{(2)} + G_x^{(3)} + 2G_x^{(4)} + Q_{xxyz}^{(1)} + Q_{yz}^{(1)} + Q_{yz}^{(3)} \\
U_{15} &= -2G_{xxy}^{(1)} - 2G_y^{(1)} + G_{xxy}^{(2)} + G_y^{(3)} + Q_{xxxz}^{(1)} + Q_{xz}^{(1)} + 2Q_{xz}^{(2)} + Q_{xz}^{(3)} + 2Q_{xz}^{(5)} \\
U_{16} &= 2G_{xxz}^{(1)} + 2G_z^{(1)} + G_{xxz}^{(2)} + G_z^{(3)} + Q_{xxxy}^{(1)} + Q_{xy}^{(1)} + 2Q_{xy}^{(2)} + Q_{xy}^{(3)} - 2Q_{xy}^{(5)} \\
U_{17} &= -2G_{xyy}^{(1)} + 2G_{xzz}^{(1)} - G_{xxx}^{(2)} - G_x^{(3)} - 2G_x^{(4)} + Q_{xxyz}^{(1)} + Q_{yz}^{(1)} + Q_{yz}^{(3)} \\
U_{18} &= -2G_{xxy}^{(1)} - 2G_y^{(1)} - G_{xxy}^{(2)} - G_y^{(3)} + Q_{xxxz}^{(1)} + Q_{xz}^{(1)} + 2Q_{xz}^{(2)} + Q_{xz}^{(3)} - 2Q_{xz}^{(5)} \\
U_{19} &= 2G_{xxz}^{(1)} + 2G_z^{(1)} - G_{xxz}^{(2)} - G_z^{(3)} + Q_{xxxy}^{(1)} + Q_{xy}^{(1)} + 2Q_{xy}^{(2)} + Q_{xy}^{(3)} + 2Q_{xy}^{(5)} \\
U_{21} &= -4G_{xyz}^{(1)} + Q^{(1)} + Q_{xxyy}^{(1)} + Q_{xx}^{(1)} + Q_{yy}^{(1)} + Q_{xx}^{(3)} - Q_{yy}^{(3)} \\
U_{22} &= Q^{(1)} + Q_{yyyy}^{(1)} + 2Q_{yy}^{(1)} + 2Q^{(2)} + 4Q_{yy}^{(2)} \\
U_{23} &= 4G_{xyz}^{(1)} + Q^{(1)} + Q_{yyzz}^{(1)} + Q_{yy}^{(1)} + Q_{zz}^{(1)} - Q_{yy}^{(3)} + Q_{zz}^{(3)} \\
U_{24} &= 2G_{xyy}^{(1)} + 2G_x^{(1)} + G_{xyy}^{(2)} + G_x^{(3)} + Q_{yyyz}^{(1)} + Q_{yz}^{(1)} + 2Q_{yz}^{(2)} + Q_{yz}^{(3)} - 2Q_{yz}^{(5)} \\
U_{25} &= 2G_{xxy}^{(1)} - 2G_{yzz}^{(1)} + G_{yyy}^{(2)} + G_y^{(3)} + 2G_y^{(4)} + Q_{xxyz}^{(1)} + Q_{xz}^{(1)} + Q_{xz}^{(3)} \\
U_{26} &= -2G_{yyz}^{(1)} - 2G_z^{(1)} + G_{yyz}^{(2)} + G_z^{(3)} + Q_{xyyy}^{(1)} + Q_{xy}^{(1)} + 2Q_{xy}^{(2)} + Q_{xy}^{(3)} + 2Q_{xy}^{(5)} \\
U_{27} &= 2G_{xyy}^{(1)} + 2G_x^{(1)} - G_{xyy}^{(2)} - G_x^{(3)} + Q_{yyyz}^{(1)} + Q_{yz}^{(1)} + 2Q_{yz}^{(2)} + Q_{yz}^{(3)} + 2Q_{yz}^{(5)} \\
U_{28} &= 2G_{xxy}^{(1)} - 2G_{yzz}^{(1)} - G_{yyy}^{(2)} - G_y^{(3)} - 2G_y^{(4)} + Q_{xxyz}^{(1)} + Q_{xz}^{(1)} + Q_{xz}^{(3)} \\
U_{29} &= -2G_{yyz}^{(1)} - 2G_z^{(1)} - G_{yyz}^{(2)} - G_z^{(3)} + Q_{xyyy}^{(1)} + Q_{xy}^{(1)} + 2Q_{xy}^{(2)} + Q_{xy}^{(3)} - 2Q_{xy}^{(5)} \\
U_{31} &= 4G_{xyz}^{(1)} + Q^{(1)} + Q_{xxzz}^{(1)} + Q_{xx}^{(1)} + Q_{zz}^{(1)} + Q_{xx}^{(3)} - Q_{zz}^{(3)} \\
U_{32} &= -4G_{xyz}^{(1)} + Q^{(1)} + Q_{yyzz}^{(1)} + Q_{yy}^{(1)} + Q_{zz}^{(1)} + Q_{yy}^{(3)} - Q_{zz}^{(3)}
\end{aligned} \tag{36}$$

$$\begin{aligned}
U_{33} &= Q^{(1)} + Q_{zzzz}^{(1)} + 2Q_{zz}^{(1)} + 2Q^{(2)} + 4Q_{zz}^{(2)} \\
U_{34} &= -2G_{xzz}^{(1)} - 2G_x^{(1)} + G_{yzz}^{(2)} + G_x^{(3)} + Q_{yzzz}^{(1)} + Q_{yz}^{(1)} + 2Q_{yz}^{(2)} + Q_{yz}^{(3)} + 2Q_{yz}^{(5)} \\
U_{35} &= 2G_{yzz}^{(1)} + 2G_y^{(1)} + G_{yzz}^{(2)} + G_y^{(3)} + Q_{xzzz}^{(1)} + Q_{xz}^{(1)} + 2Q_{xz}^{(2)} + Q_{xz}^{(3)} - 2Q_{xz}^{(5)} \\
U_{36} &= -2G_{xxz}^{(1)} + 2G_{yyz}^{(1)} + G_{zzz}^{(2)} + G_z^{(3)} + 2G_z^{(4)} + Q_{xyzz}^{(1)} + Q_{xy}^{(1)} + Q_{xy}^{(3)} \\
U_{37} &= -2G_{xzz}^{(1)} - 2G_x^{(1)} - G_{xzz}^{(2)} - G_x^{(3)} + Q_{yzzz}^{(1)} + Q_{yz}^{(1)} + 2Q_{yz}^{(2)} + Q_{yz}^{(3)} - 2Q_{yz}^{(5)} \\
U_{38} &= 2G_{yzz}^{(1)} + 2G_y^{(1)} - G_{yzz}^{(2)} - G_y^{(3)} + Q_{xzzz}^{(1)} + Q_{xz}^{(1)} + 2Q_{xz}^{(2)} + Q_{xz}^{(3)} + 2Q_{xz}^{(5)} \\
U_{39} &= -2G_{xxz}^{(1)} + 2G_{yyz}^{(1)} - G_{zzz}^{(2)} - G_z^{(3)} - 2G_z^{(4)} + Q_{xyzz}^{(1)} + Q_{xy}^{(1)} + Q_{xy}^{(3)} \\
U_{41} &= 2G_{xyy}^{(1)} - 2G_{xzz}^{(1)} + Q_{xxyz}^{(1)} + Q_{yz}^{(1)} - Q_{yz}^{(3)} \\
U_{42} &= -2G_{xyy}^{(1)} - 2G_x^{(1)} + Q_{yyyz}^{(1)} + Q_{yz}^{(1)} + 2Q_{yz}^{(2)} - Q_{yz}^{(3)} \\
U_{43} &= 2G_{xzz}^{(1)} + 2G_x^{(1)} + Q_{yzzz}^{(1)} + Q_{yz}^{(1)} + 2Q_{yz}^{(2)} - Q_{yz}^{(3)} \\
U_{44} &= G_{xyz}^{(2)} + Q_{yyzz}^{(1)} + Q^{(2)} + Q_{yy}^{(2)} + Q_{zz}^{(2)} + Q_{yy}^{(5)} - Q_{zz}^{(5)} \\
U_{45} &= G_{xxz}^{(1)} + G_{yyz}^{(1)} - G_{zzz}^{(1)} - G_z^{(1)} + G_{yyz}^{(2)} + G_z^{(4)} + Q_{xyzz}^{(1)} + Q_{xy}^{(2)} - Q_{xy}^{(5)} \\
U_{46} &= -G_{xxy}^{(1)} + G_{yyy}^{(1)} - G_{yzz}^{(1)} + G_y^{(1)} + G_{yzz}^{(2)} + G_y^{(4)} + Q_{xyyz}^{(1)} + Q_{xz}^{(2)} + Q_{xz}^{(5)} \\
U_{47} &= -G_{xyz}^{(2)} + Q_{yyzz}^{(1)} + Q^{(2)} + Q_{yy}^{(2)} + Q_{zz}^{(2)} - Q_{yy}^{(5)} + Q_{zz}^{(5)} \\
U_{48} &= G_{xxz}^{(1)} + G_{yyz}^{(1)} - G_{zzz}^{(1)} - G_z^{(1)} - G_{yyz}^{(2)} - G_z^{(4)} + Q_{xyzz}^{(1)} + Q_{xy}^{(2)} + Q_{xy}^{(5)} \\
U_{49} &= -G_{xxy}^{(1)} + G_{yyy}^{(1)} - G_{yzz}^{(1)} + G_y^{(1)} - G_{yzz}^{(2)} - G_y^{(4)} + Q_{xyyz}^{(1)} + Q_{xz}^{(2)} - Q_{xz}^{(5)} \\
U_{51} &= 2G_{xy}^{(1)} + 2G_y^{(1)} + Q_{xxxz}^{(1)} + Q_{xz}^{(1)} + 2Q_{xz}^{(2)} - Q_{xz}^{(3)} \\
U_{52} &= -2G_{xxy}^{(1)} + 2G_{yzz}^{(1)} + Q_{xyyz}^{(1)} + Q_{xz}^{(1)} - Q_{xz}^{(3)} \\
U_{53} &= -2G_{yzz}^{(1)} - 2G_y^{(1)} + Q_{xzzz}^{(1)} + Q_{xz}^{(1)} + 2Q_{xz}^{(2)} - Q_{xz}^{(3)} \\
U_{54} &= -G_{xxz}^{(1)} - G_{yyz}^{(1)} + G_{zzz}^{(1)} + G_z^{(1)} + G_{xxz}^{(2)} + G_z^{(4)} + Q_{xyzz}^{(1)} + Q_{xy}^{(2)} + Q_{xy}^{(5)} \\
U_{55} &= G_{xyz}^{(2)} + Q_{xxzz}^{(1)} + Q^{(2)} + Q_{xx}^{(2)} + Q_{zz}^{(2)} - Q_{xx}^{(5)} + Q_{zz}^{(5)} \\
U_{56} &= -G_{xxx}^{(1)} + G_{xyy}^{(1)} + G_{xzz}^{(1)} - G_x^{(1)} + G_{xzz}^{(2)} + G_x^{(4)} + Q_{xxyz}^{(1)} + Q_{yz}^{(2)} - Q_{yz}^{(5)} \\
U_{57} &= -G_{xxz}^{(1)} - G_{yyz}^{(1)} + G_{zzz}^{(1)} + G_z^{(1)} - G_{xxz}^{(2)} - G_z^{(4)} + Q_{xyzz}^{(1)} + Q_{xy}^{(2)} - Q_{xy}^{(5)} \\
U_{58} &= -G_{xyz}^{(2)} + Q_{xxzz}^{(1)} + Q^{(2)} + Q_{xx}^{(2)} + Q_{zz}^{(2)} + Q_{xx}^{(5)} - Q_{zz}^{(5)} \\
U_{59} &= -G_{xxx}^{(1)} + G_{xyy}^{(1)} + G_{xzz}^{(1)} - G_x^{(1)} - G_{xzz}^{(2)} - G_x^{(4)} + Q_{xxyz}^{(1)} + Q_{yz}^{(2)} + Q_{yz}^{(5)} \\
U_{61} &= -2G_{xxz}^{(1)} - 2G_z^{(1)} + Q_{xxxy}^{(1)} + Q_{xy}^{(1)} + 2Q_{xy}^{(2)} - Q_{xy}^{(3)} \\
U_{62} &= 2G_{yyz}^{(1)} + 2G_z^{(1)} + Q_{xyyy}^{(1)} + Q_{xy}^{(1)} + 2Q_{xy}^{(2)} - Q_{xy}^{(3)} \\
U_{63} &= 2G_{xxz}^{(1)} - 2G_{yyz}^{(1)} + Q_{xyzz}^{(1)} + Q_{xy}^{(1)} - Q_{xy}^{(3)} \\
U_{64} &= G_{xxy}^{(1)} - G_{yyy}^{(1)} + G_{yzz}^{(1)} - G_y^{(1)} + G_{xxy}^{(2)} + G_y^{(4)} + Q_{xyyz}^{(1)} + Q_{xz}^{(2)} - Q_{xz}^{(5)} \\
U_{65} &= G_{xxx}^{(1)} - G_{xyy}^{(1)} - G_{xzz}^{(1)} + G_x^{(1)} + G_{xyy}^{(2)} + G_x^{(4)} + Q_{xxyz}^{(1)} + Q_{yz}^{(2)} + Q_{yz}^{(5)} \\
U_{66} &= G_{xyz}^{(2)} + Q_{xxyy}^{(1)} + Q^{(2)} + Q_{xx}^{(2)} + Q_{yy}^{(2)} + Q_{xx}^{(5)} - Q_{yy}^{(5)}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
U_{67} &= G_{xxy}^{(1)} - G_{yyy}^{(1)} + G_{yzz}^{(1)} - G_y^{(1)} - G_{xxy}^{(2)} - G_y^{(4)} + Q_{xyyz}^{(1)} + Q_{xz}^{(2)} + Q_{xz}^{(5)} \\
U_{68} &= G_{xxx}^{(1)} - G_{xyy}^{(1)} - G_{xzz}^{(1)} + G_x^{(1)} - G_{xyy}^{(2)} - G_x^{(4)} + Q_{xxyz}^{(1)} + Q_{yz}^{(2)} - Q_{yz}^{(5)} \\
U_{69} &= -G_{xyz}^{(2)} + Q_{xxyy}^{(1)} + Q^{(2)} + Q_{xx}^{(2)} + Q_{yy}^{(2)} - Q_{xx}^{(5)} + Q_{yy}^{(5)} \\
V_{41} &= G_{xxx}^{(3)} + G_x^{(5)} + 2G_x^{(6)} \\
V_{42} &= G_{xyy}^{(3)} + G_x^{(5)} - 2Q_{yz}^{(6)} \\
V_{43} &= G_{xzz}^{(3)} + G_x^{(5)} + 2Q_{yz}^{(6)} \\
V_{44} &= G_{xyz}^{(3)} + Q^{(3)} + 2Q_{xx}^{(4)} + Q_{yy}^{(6)} - Q_{zz}^{(6)} \\
V_{45} &= -G_z^{(2)} + G_{xxz}^{(3)} + G_z^{(6)} + 2Q_{xy}^{(4)} + Q_{xy}^{(6)} \\
V_{46} &= G_y^{(2)} + G_{xxy}^{(3)} + G_y^{(6)} + 2Q_{xz}^{(4)} - Q_{xz}^{(6)} \\
V_{47} &= G_{xyz}^{(3)} - Q^{(3)} - 2Q_{xx}^{(4)} + Q_{yy}^{(6)} - Q_{zz}^{(6)} \\
V_{48} &= G_z^{(2)} + G_{xxz}^{(3)} + G_z^{(6)} - 2Q_{xy}^{(4)} + Q_{xy}^{(6)} \\
V_{49} &= -G_y^{(2)} + G_{xxy}^{(3)} + G_y^{(6)} - 2Q_{xz}^{(4)} - Q_{xz}^{(6)} \\
V_{51} &= G_{xxy}^{(3)} + G_y^{(5)} + 2Q_{xz}^{(6)} \\
V_{52} &= G_{yyy}^{(3)} + G_y^{(5)} + 2G_y^{(6)} \\
V_{53} &= G_{yzz}^{(3)} + G_y^{(5)} - 2Q_{xz}^{(6)} \\
V_{54} &= G_z^{(2)} + G_{yyz}^{(3)} + G_z^{(6)} + 2Q_{xy}^{(4)} - Q_{xy}^{(6)} \\
V_{55} &= G_{xyz}^{(3)} + Q^{(3)} + 2Q_{yy}^{(4)} - Q_{xx}^{(6)} + Q_{zz}^{(6)} \\
V_{56} &= -G_x^{(2)} + G_{xyy}^{(3)} + G_x^{(6)} + 2Q_{yz}^{(4)} + Q_{yz}^{(6)} \\
V_{57} &= -G_z^{(2)} + G_{yyz}^{(3)} + G_z^{(6)} - 2Q_{xy}^{(4)} - Q_{xy}^{(6)} \\
V_{58} &= G_{xyz}^{(3)} - Q^{(3)} - 2Q_{yy}^{(4)} - Q_{xx}^{(6)} + Q_{zz}^{(6)} \\
V_{59} &= G_x^{(2)} + G_{xyy}^{(3)} + G_x^{(6)} - 2Q_{yz}^{(4)} + Q_{yz}^{(6)} \\
V_{61} &= G_{xxz}^{(3)} + G_z^{(5)} - 2Q_{xy}^{(6)} \\
V_{62} &= G_{yyz}^{(3)} + G_z^{(5)} + 2Q_{xy}^{(6)} \\
V_{63} &= G_{zzz}^{(3)} + G_z^{(5)} + 2G_z^{(6)} \\
V_{64} &= -G_y^{(2)} + G_{yzz}^{(3)} + G_y^{(6)} + 2Q_{xz}^{(4)} + Q_{xz}^{(6)} \\
V_{65} &= G_x^{(2)} + G_{xzz}^{(3)} + G_x^{(6)} + 2Q_{yz}^{(4)} - Q_{yz}^{(6)} \\
V_{66} &= G_{xyz}^{(3)} + Q^{(3)} + 2Q_{zz}^{(4)} + Q_{xx}^{(6)} - Q_{yy}^{(6)} \\
V_{67} &= G_y^{(2)} + G_{yzz}^{(3)} + G_y^{(6)} - 2Q_{xz}^{(4)} + Q_{xz}^{(6)} \\
V_{68} &= -G_x^{(2)} + G_{xzz}^{(3)} + G_x^{(6)} - 2Q_{yz}^{(4)} - Q_{yz}^{(6)} \\
V_{69} &= G_{xyz}^{(3)} - Q^{(3)} - 2Q_{zz}^{(4)} + Q_{xx}^{(6)} - Q_{yy}^{(6)}
\end{aligned}
\tag{37}$$

$$\tag{38}$$

参考文献

- [1] S. Hayami, M. Yatsushiro, Y. Yanagi, and H. Kusunose, Phys. Rev. B **98** 165110 (2018). 表 XV, XVI
- [2] M. Yatsushiro, *Classification of Multipole in Magnetic Point Group and Exploration of Augmented Odd-Parity Multipole Physics*, Ph.D thesis (Hokkaido University, 2022.3).