

# 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  $\delta_{12}$  と Levi-Civita の  $\epsilon^{123}$  である。 $\delta_{12}$  は対称極性 2 階テンソル ( $P_2$ )、 $\epsilon^{123}$  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 ( $P$ ) × 極性 ( $P$ ) = 極性 ( $P$ )、軸性 ( $A$ ) × 軸性 ( $A$ ) = 極性 ( $P$ )、極性 ( $P$ ) × 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

$\delta_{12}$  と  $\epsilon^{123}$  を組み合った縮約公式は以下のようになる。対称なラベルを下添字、反対称なラベルを上添字とした。

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

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

$$\delta_{12;34} = \delta_{13}\delta_{24} + \delta_{14}\delta_{23} = \delta_{21;34} = \delta_{12;43} = \delta_{34;12}$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$\delta_{12;34;56}^7 = \frac{1}{2}[\epsilon^{137}\delta_{24;56} + \epsilon^{237}\delta_{14;56} + \epsilon^{247}\delta_{13;56} + \epsilon^{147}\delta_{23;56}]$$

$$= \delta_{21;34;56}^7 = \delta_{12;43;56}^7 = -\delta_{34;12;56}^7 = \delta_{12;34;65}^7 \quad (6)$$

## 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 $\sigma_{12}$	$j_1$	$E_2$	2	( $Q,-$ )	12

### 2.1. 0 階

極性单極子  $Q$  (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、極性单極子  $Q$  (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  $\delta_{12}$ ,  $\delta_{12:34}$ ,  $\gamma_{12;5}^{34}$  と反対称な  $\epsilon^{123}$ ,  $\epsilon^{12:34}$  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  $Q_{xxxx}^{(1)} + Q_{xxyy}^{(1)} + Q_{xxzz}^{(1)} = 0, Q_{xxyy}^{(1)} + Q_{yyyy}^{(1)} + Q_{yyzz}^{(1)} = 0, Q_{xxzz}^{(1)} + Q_{yyzz}^{(1)} + Q_{zzzz}^{(1)} = 0, Q_{xxyz}^{(1)} + Q_{yyyz}^{(1)} + Q_{yzzz}^{(1)} = 0, Q_{xxxx}^{(1)} + Q_{xxyz}^{(1)} + Q_{xzzz}^{(1)} = 0, Q_{xxyy}^{(1)} + Q_{yyyz}^{(1)} + Q_{xyzz}^{(1)} = 0$ 。

$P_{1234}$  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

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

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

$$x = \mathbf{px}, \quad y = \mathbf{py}, \quad z = \mathbf{pz}$$

$$xx = -\mathbf{du} + \mathbf{dv}, \quad yy = -\mathbf{du} - \mathbf{dv}, \quad zz = 2\mathbf{du}$$

$$yz = \mathbf{dyz}, \quad xz = \mathbf{dxz}, \quad xy = \mathbf{dxy}$$

$$xxx = 2\mathbf{fax}, \quad yyy = 2\mathbf{fay}, \quad zzz = 2\mathbf{faz}$$

$$xzz = -\mathbf{fax} - \mathbf{fbx}, \quad xxy = -\mathbf{fay} - \mathbf{fby}, \quad yyz = -\mathbf{faz} - \mathbf{fbz}$$

$$xyy = -\mathbf{fax} + \mathbf{fbx}, \quad yzz = -\mathbf{fay} + \mathbf{fby}, \quad xxz = -\mathbf{faz} + \mathbf{fbz}$$

$$xyz = \mathbf{f3}$$

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	$P_{123;4}^t = P_{132;4}^t = P_{213;4}^t$ $= P_{231;4}^t = P_{312;4}^t = P_{321;4}^t$

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

### 3.2. 六方晶系

Cartesian 座標系と多極子の関係

$$\begin{aligned}
 xxx &= -3f3x + f2, \quad xxy = -f3y + f1, \quad xyy = -f3x - f2, \quad yyx = -3f3y - f1 \\
 xzz &= 4f3x, \quad yzz = 4f3y \\
 xxxx &= 3g0 + gc + gv, \quad yyyy = 3g0 + gc - gv, \\
 xxzz &= -4g0 - gv, \quad yyzz = -4g0 + gv, \quad xxyy = g0 - gc \\
 xxyz &= -gau + gb, \quad yyyz = -3gau - gb \\
 xxxx &= ga - 3gav \quad xyyz = -ga - gav \\
 zzzz &= 8g0 \quad xzzz = 4gav \quad yzzz = 4gau
 \end{aligned} \tag{23}$$

以下の成分は立方晶系と共通である。

$$x, \quad y, \quad z, \quad xx, \quad yy, \quad zz, \quad yz, \quad xz, \quad xy, \quad xxz, \quad yyz, \quad xyz, \quad zzz, \quad xxxx, \quad xyyy, \quad xyzz \tag{24}$$

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

$$(px, py), (dv, dxy), (dyz, dxz), (f3, fbz), (f3x, f3y), (gau, gav), (gc, gaz), (gv, gbz) \tag{25}$$

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。<sup>\*</sup>は不活性。 $Q_{4v}^{\beta 1} = Q_{4z}^{\alpha}$ ,  $Q_{4u}^{\beta 2} = Q_{4v}$ ,  $Q_{4v}^{\beta 2} = Q_{4z}^{\beta}$ 。

$l$	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*			
	$Q_{xz}$	$\frac{1}{\sqrt{3}}$	dzx	$zx$	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	$\rightarrow \frac{x^4-y^4}{2}, -\frac{(x^2-y^2)z^2}{2}$	$Q_{4u}^{\beta 2}* \quad Q_{4u}^{\alpha} *$	同左		
	$Q_{4x}^{\alpha}$	$\frac{1}{\sqrt{35}}$	gax	$\frac{yz(y^2-z^2)}{2}$	$Q_{4v}^{\alpha} \quad Q_{4v}^{\beta 1} *$	$-\frac{1}{7\sqrt{10}} \quad \frac{1}{7\sqrt{10}}$	gav	$\rightarrow \frac{xz^3}{4}, -\frac{xz(x^2+y^2)}{4}$
	$Q_{4y}^{\alpha}$	$\frac{1}{\sqrt{35}}$	gay	$\frac{zx(z^2-x^2)}{2}$			gau	$\rightarrow \frac{yz^3}{4}, -\frac{yz(x^2+y^2)}{4}$
	$Q_{4z}^{\alpha}$	$\frac{1}{\sqrt{35}}$	gaz	$\frac{xy(x^2-y^2)}{2}$				
	$Q_{4x}^{\beta}$	$\frac{1}{7\sqrt{5}}$	gbx	$\rightarrow \frac{yzx^2}{2}, -\frac{yz(y^2+z^2)}{2}$	$Q_{4u}^{\beta 1} \quad Q_{4u}^{\beta 2} *$	$\frac{1}{\sqrt{35}} \quad \frac{1}{\sqrt{70}}$	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	$\rightarrow \frac{zxy^2}{2}, -\frac{zx(z^2+x^2)}{2}$			ga	$\frac{xz(x^2-3y^2)}{4}$
	$Q_{4z}^{\beta}$	$\frac{1}{7\sqrt{5}}$	gbz	$\rightarrow \frac{xyz^2}{2}, -\frac{xy(x^2+y^2)}{2}$				

## 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

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

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

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

### A.3. 4階テンソル

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

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

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

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

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

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

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

$$\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_{xxxx}^{(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_{xxyy}^{(1)} + Q_{xx}^{(2)} + Q_{yy}^{(2)} - Q_{xx}^{(5)} + Q_{yy}^{(5)} \\
W_{9y} &= Q_{xxyy}^{(1)} + Q_{xy}^{(1)} + 2Q_{xy}^{(2)} - Q_{xy}^{(3)} \\
W_{9z} &= Q_{xxyz}^{(1)} + Q_{xz}^{(2)} - Q_{xz}^{(5)} \\
W_{10x} &= Q_{xxyz}^{(1)} + Q_{yz}^{(2)} + Q_{yz}^{(5)} \\
W_{10y} &= Q_{xxyz}^{(1)} + Q_{xz}^{(2)} + Q_{xz}^{(5)} \\
W_{10z} &= Q_{xyzz}^{(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_{xxxx}^{(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_{xxxz}^{(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_{xxxx}^{(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_{xxxz}^{(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_{yyz}^{(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_{xzy}^{(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_{xzz}^{(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_{xxy}^{(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_{xxyz}^{(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_{xxxz}^{(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_{xyy}^{(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_{xyzz}^{(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}$$

$$\begin{aligned}
U_{67} &= G_{xxy}^{(1)} - G_{yyy}^{(1)} + G_{yzz}^{(1)} - G_y^{(1)} - G_{xxz}^{(2)} - G_y^{(4)} + Q_{xyyz}^{(1)} + Q_{xz}^{(2)} + Q_{xz}^{(5)} \\
U_{68} &= G_{xxx}^{(1)} - G_{xyy}^{(1)} - G_{xzz}^{(1)} + G_x^{(1)} - G_{xyy}^{(2)} - G_x^{(4)} + Q_{xxyz}^{(1)} + Q_{yz}^{(2)} - Q_{yz}^{(5)} \\
U_{69} &= -G_{xyz}^{(2)} + Q_{xxyy}^{(1)} + Q^{(2)} + Q_{xx}^{(2)} + Q_{yy}^{(2)} - Q_{xx}^{(5)} + Q_{yy}^{(5)}
\end{aligned} \tag{37}$$

$$V_{41} = G_{xxx}^{(3)} + G_x^{(5)} + 2G_x^{(6)}$$

$$V_{42} = G_{xyy}^{(3)} + G_x^{(5)} - 2Q_{yz}^{(6)}$$

$$V_{43} = G_{xzz}^{(3)} + G_x^{(5)} + 2Q_{yz}^{(6)}$$

$$V_{44} = G_{xyz}^{(3)} + Q^{(3)} + 2Q_{xx}^{(4)} + Q_{yy}^{(6)} - Q_{zz}^{(6)}$$

$$V_{45} = -G_z^{(2)} + G_{xxz}^{(3)} + G_z^{(6)} + 2Q_{xy}^{(4)} + Q_{xy}^{(6)}$$

$$V_{46} = G_y^{(2)} + G_{xxy}^{(3)} + G_y^{(6)} + 2Q_{xz}^{(4)} - Q_{xz}^{(6)}$$

$$V_{47} = G_{xyz}^{(3)} - Q^{(3)} - 2Q_{xx}^{(4)} + Q_{yy}^{(6)} - Q_{zz}^{(6)}$$

$$V_{48} = G_z^{(2)} + G_{xxz}^{(3)} + G_z^{(6)} - 2Q_{xy}^{(4)} + Q_{xy}^{(6)}$$

$$V_{49} = -G_y^{(2)} + G_{xxy}^{(3)} + G_y^{(6)} - 2Q_{xz}^{(4)} - Q_{xz}^{(6)}$$

$$V_{51} = G_{xxy}^{(3)} + G_y^{(5)} + 2Q_{xz}^{(6)}$$

$$V_{52} = G_{yyy}^{(3)} + G_y^{(5)} + 2G_y^{(6)}$$

$$V_{53} = G_{yzz}^{(3)} + G_y^{(5)} - 2Q_{xz}^{(6)}$$

$$V_{54} = G_z^{(2)} + G_{yyz}^{(3)} + G_z^{(6)} + 2Q_{xy}^{(4)} - Q_{xy}^{(6)}$$

$$V_{55} = G_{xyz}^{(3)} + Q^{(3)} + 2Q_{yy}^{(4)} - Q_{xx}^{(6)} + Q_{zz}^{(6)}$$

$$V_{56} = -G_x^{(2)} + G_{xyy}^{(3)} + G_x^{(6)} + 2Q_{yz}^{(4)} + Q_{yz}^{(6)}$$

$$V_{57} = -G_z^{(2)} + G_{yyz}^{(3)} + G_z^{(6)} - 2Q_{xy}^{(4)} - Q_{xy}^{(6)}$$

$$V_{58} = G_{xyz}^{(3)} - Q^{(3)} - 2Q_{yy}^{(4)} - Q_{xx}^{(6)} + Q_{zz}^{(6)}$$

$$V_{59} = G_x^{(2)} + G_{xyy}^{(3)} + G_x^{(6)} - 2Q_{yz}^{(4)} + Q_{yz}^{(6)}$$

$$V_{61} = G_{xxx}^{(3)} + G_z^{(5)} - 2Q_{xy}^{(6)}$$

$$V_{62} = G_{yyz}^{(3)} + G_z^{(5)} + 2Q_{xy}^{(6)}$$

$$V_{63} = G_{zzz}^{(3)} + G_z^{(5)} + 2G_z^{(6)}$$

$$V_{64} = -G_y^{(2)} + G_{yyz}^{(3)} + G_y^{(6)} + 2Q_{xz}^{(4)} + Q_{xz}^{(6)}$$

$$V_{65} = G_x^{(2)} + G_{xzz}^{(3)} + G_x^{(6)} + 2Q_{yz}^{(4)} - Q_{yz}^{(6)}$$

$$V_{66} = G_{xyz}^{(3)} + Q^{(3)} + 2Q_{zz}^{(4)} + Q_{xx}^{(6)} - Q_{yy}^{(6)}$$

$$V_{67} = G_y^{(2)} + G_{yzz}^{(3)} + G_y^{(6)} - 2Q_{xz}^{(4)} + Q_{xz}^{(6)}$$

$$V_{68} = -G_x^{(2)} + G_{xzz}^{(3)} + G_x^{(6)} - 2Q_{yz}^{(4)} - Q_{yz}^{(6)}$$

$$V_{69} = G_{xyz}^{(3)} - Q^{(3)} - 2Q_{zz}^{(4)} + Q_{xx}^{(6)} - Q_{yy}^{(6)}$$

(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).