

平成 30 年 6 月 16 日現在

機関番号：13601

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2014～2017

課題番号：26400354

研究課題名(和文)強相関電子系のための対密度汎関数理論の開発

研究課題名(英文)Development of the pair-density functional theory that is suitable for the strongly correlated electron systems

研究代表者

樋口 雅彦(Higuchi, Masahiko)

信州大学・学術研究院理学系・教授

研究者番号：10292202

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,000,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では以下の三つの研究項目を実行した。

(1)「有限温度対密度汎関数理論」の開発：電子相関の情報を正確に含んだ「対密度」を基本変数に選んだ「有限温度対密度汎関数理論」を開発した。(2)「有限温度対密度汎関数理論」の計算スキームの開発：「有限温度対密度汎関数理論」の計算スキームに必要な、(A)対密度の探索範囲の拡張、(B)運動エネルギーの近似形の開発、(C)エントロピーの近似形の開発、を行った。(3)「有限温度対密度汎関数理論」を利用した超伝導理論の開発：対密度は「粒子数揺らぎ」を介して超伝導秩序変数に関係している。このことを利用して「粒子数揺らぎを予言する対密度汎関数理論」を開発した。

研究成果の概要(英文)：In this study, we have performed the following three topics of research.

(1) Development of the finite-temperature pair-density functional theory (FT-PDFT): The pair-density essentially contains the accurate information on the electron correlation. We have developed the FT-PDFT, in which the pair-density is chosen as one of basic variables. (2) Development of the calculation scheme of the FT-PDFT: In order to develop the calculation scheme, we have performed the issues such as (A) extension of the searching region of the pair-density, (B) development of the approximate kinetic energy functional, (C) development of the entropy functional. (3) Development of the first-principles theory for the superconductor: The pair-density is related to the order parameter of the superconductivity via the fluctuation of the particle numbers. Using this fact, we have developed the FT-PDFT for the superconductor, in which the fluctuation of the particle numbers can be reproduced correctly.

研究分野：物性理論

キーワード：対密度 有限温度対密度汎関数理論 電子相関 運動エネルギー汎関数 エントロピー 超伝導 粒子数揺らぎ ジャストロウ波動関数

1. 研究開始当初の背景

本研究では、大きく分けて三つの互いに関連した研究項目を実行しました。研究開始当初の背景を項目ごとに述べます。

(1) 「有限温度対密度汎関数理論」の開発

強相関電子系とは電子同士の絡みあい(電子相関)の強い物質系を表し、磁性、超伝導、重い電子状態など多様な物性が、多くの研究者の興味を引きつけています。強相関電子系の物性の解明には、電子相関を強調したモデルハミルトニアンによる方法が主流となってきました。しかしながら、物性の定量的な理解のためには、さらにはモデルハミルトニアンを裏付けという意味からも第一原理的な理論は必要不可欠です。

第一原理的な理論の代表的なものに密度汎関数理論があります。密度汎関数理論は、電子相関のそれほど強くない系では一定の成功は収めてはいるものの、電子相関が物性の主役となるような強相関電子系においては、フェルミ面の形状などを除けば、あまりうまく機能しているとは言えないのが現状です。強相関電子系においては、電子間相互作用をいかに適切に取り扱うかが重要なカギですが、従来の密度汎関数理論ではそれが理論上大変難しい課題となっています。具体的には、電子間相互作用を電子密度のみの汎関数として書き表さなければならないという課題が密度汎関数理論にはあるのですが、これが極めて困難ということです。では強相関電子系の第一原理理論としてどのような理論を構築したらよいのでしょうか？

強相関電子系では電子間相互作用の適切な記述が不可欠です。電子間相互作用は、電子密度のみでは表しきれませんが、二次簡約化密度行列の対角成分を用いれば正確に記述できることが知られています。この二次簡約化密度行列の対角成分を「対密度」と呼びます。対密度が正しく予言できたならば、電子間相互作用のエネルギーのみならず、電子相関、たとえば相関エネルギーや対相関関数なども正しく再現できます。

対密度のこのような強力な性質を再現する第一原理理論としては、我々が近年開発をした**拡張された制限つき探索理論**を強相関電子系用に具体化させるのが最も適しています。**拡張された制限つき探索理論**の特長は、**所望の物理量の再現を保障する**というもので、強相関電子系の場合には**所望の物理量として「対密度」を選んでやれば良い**わけです。これを「**対密度汎関数理論**」と呼びます。すでに我々は「**絶対ゼロ度の対密度汎関数理論**」は開発済みであり、それを基礎に、本研究では「**有限温度の対密度汎関数理論**」の構築を行います。

(2) 「有限温度対密度汎関数理論」の計算スキームの開発

「有限温度の対密度汎関数理論」の計算スキーム開発上の課題は、「**絶対ゼロ度の対密度汎関数理論**」と共通部分もあります。具体

的には、(A)対密度の探索範囲の適切な拡張と、(B)運動エネルギー汎関数の近似形の開発です。(A)については、対密度が物理的に合理的かどうか(これを対密度の N 表示可能性と言います)の必要十分条件が知られていないために生じる課題です。従来、対密度の探索範囲を十分に確保する手法は確立されていませんでした。(B)については、運動エネルギーが対密度で厳密には書き表すことができないことに起因する課題です。対密度汎関数理論の計算スキームの開発には、運動エネルギー汎関数の近似形、すなわち対密度の汎関数の形で書かれた運動エネルギーの開発が必要です。

さらに「有限温度の対密度汎関数理論」の計算スキームにおいては、(C)エントロピーの近似形の開発、が必要です。運動エネルギーの場合と同様に、対密度の汎関数の形でエントロピーは厳密には表せません。計算スキームとしては、エントロピーの適切な近似形の開発も必要です。

(3) 「有限温度対密度汎関数理論」を利用した超伝導理論の開発

1979年のF. SteglichによるCeCu₂Si₂の超伝導の発見以来、強相関電子系に属するいくつかの物質では超伝導相が発見されています。従来の超伝導第一原理理論はすべて、基本変数として電子密度と超伝導秩序変数を採用しています。ゆえに、オリジナルの密度汎関数理論と同様に、電子密度で電子相関を書き表すという難題が常に付きまっています。超伝導状態における電子相関の適切な記述という課題を乗り越えることが、強相関電子系の超伝導第一原理理論には必要です。

電子相関を正確に表すことのできる対密度を基本変数に選んだ超伝導理論が開発できれば、強相関電子系の超伝導現象の解明の一助となることは間違いありません。具体的には「有限温度対密度汎関数理論」で再現される対密度と超伝導秩序変数との関係が明らかになれば、強相関電子系のための超伝導理論開発の糸口が見つかります。

2. 研究の目的

本研究で行った三つの研究項目ごとに研究の目的を述べます。

(1) 「有限温度対密度汎関数理論」の開発

強相関電子系の示す新奇な物理現象の多くは、超伝導や磁性をはじめ、有限温度で扱うべき現象です。近年我々が開発してきた「**絶対ゼロ度の対密度汎関数理論**」は、転移温度など熱的性質は予言できません。本研究では、まず「**絶対ゼロ度の対密度汎関数理論**」を有限温度の理論に拡張します。さらに、電子間相互作用のなかでもスピンに依存した効果(とくに sd 交換相互作用)をあらわに表すために、スピンに依存した対密度を基本変数に選んだ理論を開発します。

(2) 「有限温度対密度汎関数理論」の計算スキ

一ムの開発

(1)で開発した「有限温度対密度汎関数理論」が機能するためには、(A)対密度の探索範囲の適切な拡張、(B)運動エネルギー汎関数の近似形の開発、(C)エントロピーの近似形の開発が必要です。「絶対ゼロ度の対密度汎関数理論」ですでに得ている知見を参考に、上記3つの課題を解決し、数値計算が実行できる形式を完成させます。

(3)「有限温度対密度汎関数理論」を利用した超伝導理論の開発

「有限温度対密度汎関数理論」で再現される対密度と超伝導秩序変数との関係を明らかにします。具体的には、対密度が超伝導状態の「粒子数揺らぎ」を介して超伝導秩序変数に関係していることを示します。そして、超伝導状態を記述する「有限温度対密度汎関数理論」を開発します。

3. 研究の方法

本研究で行った三つの研究項目ごとに研究の具体的な方法を述べます。

(1)「有限温度対密度汎関数理論」の開発

本研究では強相関電子系への適用を念頭に置いているので、対密度としてはスピン依存性をあらわに取り込んだ形のものを採用します。その対密度を再現する理論として、すでに開発済みの「絶対ゼロ度の対密度汎関数理論」を、有限温度の場合に拡張します。具体的には以下の二段階で実行します。

Step1: 拡張のための基本定理の証明

熱平衡状態の対密度と統計演算子(密度行列)との一対一対応の定理と、ギブス変分原理(レイリー・シュレディンガー変分原理の有限温度版)に由来する対密度の変分原理を証明します。

Step2: 有効一粒子方程式の導出

すでに開発済みの「拡張された制限つき探索理論」や「絶対ゼロ度の対密度汎関数理論」と同様に、相互作用のない参照系を導入し、上記の基本定理を使って、有限温度の対密度を予言する有効一電子方程式を導きます。

上記の方法は、 v 表示可能性を仮定しない「有限温度の拡張された制限つき探索理論」の開発とも見なすことができ、その点でも新しい手法による理論開発と言えます。

(2)「有限温度対密度汎関数理論」の計算スキームの開発

(A) 対密度の探索範囲の適切な拡張:

対密度が N 表示可能かどうかを判定する必要十分条件は知られていません。ゆえに、対密度の変分原理を実行する際には、対密度を N 表示可能な範囲で変化させるための工夫が必要です。我々はすでに、「絶対ゼロ度の対密度汎関数理論」の開発時に、この工夫をいくつか提案してきました。その中でも有望なものが電子座標のスケーリング法です。この電子座標のスケーリング法を「有限温度の対密度汎関数理論」にも組み入れます。

さらに、電子相関を有した波動関数を直接

使って対密度を構成する新しい方法の開発にも取り組みます。この方法で得られた対密度は必ず N 表示可能であることは明らかです。具体的には、ジャストロウ波動関数を用いた対密度の構成方法を開発します。

(B) 運動エネルギー汎関数の近似形の開発:

一般に、運動エネルギーは一次簡約化密度行列で正確に記述できますが、それを対密度の汎関数で表そうとすると何がしかの近似が必要となります。すでに我々は「絶対ゼロ度の対密度汎関数理論」において、いくつかの運動エネルギー汎関数の近似形を提案してきました。これらを有限温度の場合に一般化することは可能です。導出した有限温度の近似形を「有限温度対密度汎関数理論」に組み込みます。

(C) エントロピーの近似形の開発:

現実系のエントロピーを対密度の汎関数の形で取り込むことは不可能です。しかしながら相互作用のない参照系のエントロピーならば、フェルミ分布関数を介して、一粒子エネルギーを使って書き表せます。一粒子エネルギーは対密度の汎関数です。現実系と参照系のエントロピーの差は、交換相関エネルギーに押し込めます。超伝導状態に応用する場合には、この交換相関部分のエントロピーに、超伝導ギャップ構造を取り込む近似を行います。

(3)「有限温度対密度汎関数理論」を利用した超伝導理論の開発

まずは、「有限温度対密度汎関数理論」で再現される対密度が、超伝導状態の「粒子数揺らぎ」に直接関係していることを示します。次に「粒子数揺らぎ」が、超伝導秩序変数がゼロでないときに生じていることを示します。これらが完了した段階で、「有限温度対密度汎関数理論」が超伝導第一原理理論にも利用できることが示されたこととなります。

(1)で開発した「有限温度対密度汎関数理論」における対密度の探索範囲を、粒子数一定でない状態から構成される対密度も含むように拡張します。このとき電子密度は対密度から決められないので、基本変数として対密度のほかに電子密度も加えます。さらにエントロピー汎関数として、一粒子エネルギーに超伝導ギャップ構造を取り込んだ近似形を開発し、それを用います。

以上のような改良を「有限温度対密度汎関数理論」に施せば、「粒子数揺らぎ」を計算するための対密度汎関数理論が出来上がります。

4. 研究成果

本研究で得られた研究成果を三つの研究項目ごとに述べます。

(1)「有限温度対密度汎関数理論」の開発

26年度に、「有限温度対密度汎関数理論」の定式化を行いました。最初に、有限温度のホーエンベルグ・コーンの定理の証明を行いました。具体的には、熱平衡状態の対密度と

統計演算子の一対一対応(第一定理)と、ギブス変分原理の対密度に関する変分原理への書き換え(第二定理)の証明を行いました。

次に、熱平衡状態の対密度を構成するための参照系を導入しました。今回は相互作用のない参照系を選びました。その理由は、運動エネルギーとエントロピーの対密度を用いた汎関数表式は明らかではありませんが、相互作用のない参照系を導入することで、それらの主要な部分は取り込めるものと期待できるからです。そのような参照系における有効一粒子方程式(コーン・シャム方程式)を導出しました。有効一粒子方程式に含まれる有効ポテンシャルは、ホーヘンベルグ・コーンの定理を用いて導きますが、それが積分方程式の解として与えられることを示しました。これらコーン・シャム方程式の解を用いれば、系の熱平衡状態における(有限温度における)対密度が得られることになります。

(2)「有限温度対密度汎関数理論」の計算スキームの開発

(A) 対密度の探索範囲の適切な拡張:

すでに開発済みの「絶対ゼロ度の対密度汎関数理論」で得た知見は、大部分「有限温度対密度汎関数理論」に生かされます。そのうちのひとつが、対密度の探索範囲の適切な拡張です。ポイントは、対密度の変分原理を実行する際に、対密度を N 表示可能な範囲で変化させる工夫であり、すでに開発済みの電子座標のスケーリングを利用した変分法が有効です。26年度に、この電子座標のスケーリング法を「有限温度の対密度汎関数理論」に適用しました。その際、運動エネルギー汎関数としては(B)で述べる近似形を用いました。

数値計算は具体的にはゼロ度の孤立原子系で行いました。有限温度においてもスケーリング法と(B)で述べる運動エネルギー汎関数は利用可能ですので、テスト計算としてはこれで十分です。数値計算によって、精度の高い対密度が得られることが確認されました。対密度を空間積分した相関エネルギーの再現性だけでなく、対密度の空間変化の様子として交換相関ホールの再現性についても適切であることが実証されました。これらの実証結果は、「有限温度対密度汎関数理論」においても電子座標のスケーリング法と、(B)で述べる運動エネルギー汎関数の近似形の併用が有効であることを意味しています。

さらに対密度の探索範囲の拡張に関しては、29年度に新しい試みを行いました。従来より我々は、電子座標によるスケーリング法を提案してきましたが、29年度はこの方法とは異なるジャストロウ対密度(ジャストロウ波動関数より構成される対密度)を用いる方法を提案しました。具体的には、 N 表示可能なジャストロウ対密度の構成方法を今回新たに発見しました。数学的帰納法に基づく構成方法なので、電子数の比較的少ない系ですぐに実行できる方法です。

(B) 運動エネルギー汎関数の近似形の開発:

運動エネルギー汎関数については、まず、結合定数積分を用いた厳密な表式を導出しました。この厳密な表式を基礎に、近似形を開発しました。この方法は、オリジナルの密度汎関数理論の交換相関エネルギー汎関数の近似形でも用いられている手堅い方法です。実際に、26年度に行った数値計算の結果では(上の(A)で既述)、我々が開発した汎関数は有効であることが示されました。

(C) エントロピーの近似形の開発:

相互作用のない参照系を導入することで、参照系のエントロピーは、フェルミ分布関数を介して、一粒子エネルギーを用いて表されます。超伝導状態のエントロピー汎関数に関しては、29年度に新しい近似形を見出しました。具体的には、エントロピー表式に含まれるエネルギースペクトルにギャップ構造を持たせ、さらにその具体的な形が対密度の汎関数で近似的に書けることを見出しました。

(3)「有限温度対密度汎関数理論」を利用した超伝導理論の開発

27年度は、「有限温度対密度汎関数理論」を利用した超伝導第一原理理論の開発に着手しました。具体的には次の3ステップで行いました。

Step1: 対密度が、超伝導状態の「粒子数揺らぎ」に直接関係していることを証明しました。

Step2: 超伝導状態においては超伝導特有の秩序変数が発現することが知られています。この超伝導秩序変数が発現した時、粒子数(電子数)に揺らぎが生じ、その大きさが粒子数程度になることを証明しました。この種の証明はBCS理論ではよく知られているものの、超伝導秩序変数と結び付けて(一般的な場合で)証明したものは今までありませんでした。

以上の知見を利用すれば、超伝導状態の発現を議論する基本的な物理量として、超伝導秩序変数の代わりに粒子数揺らぎを選ぶことができます。超伝導秩序変数と粒子数揺らぎは二次簡約化密度行列のそれぞれ非対角項と対角項(対密度)に相当しており、これらの量が超伝導状態では深く関連しているということも興味深いと思われます。

Step3: 26年度に開発済みの「有限温度の対密度汎関数理論」を参考に、上述した粒子数揺らぎを预言する理論を開発しました。超伝導状態の粒子数揺らぎを表すためには、対密度だけではなく電子密度も基本変数に加えなければなりません。この点が「有限温度の対密度汎関数理論」と異なる点です。熱平衡状態を決める基本変数として対密度と電子密度を選び、密度汎関数理論(より厳密に言えば「拡張された制限つき探索理論」)の流儀に従って、ホーヘンベルグ・コーンの定理の証明を与えました。

28年度は、27年度に開発した「有限温度対密度汎関数理論」を利用した超伝導第一原理理論(今後これを「粒子数揺らぎを预言す

る対密度汎関数理論」と呼ぶ)の有効性を確認するために、数値計算可能なスキームにまで具体化をしました。具体化された計算スキームは次の2つの特徴を有しています：

(ア) 粒子数揺らぎを预言するためには、対密度と電子密度を粒子数が一定でない状態から構成しなければなりません。対密度汎関数理論におけるこれら物理量の探索には、常伝導状態での探索とは異なる工夫が必要となります。我々は、常伝導状態を変形することで超伝導状態を近似する「ド・ジャンによる近似法」を採用し、対密度と電子密度の探索範囲の工夫を行いました。含まれる変分パラメータは一つで、BCS理論におけるギャップに相当する物理量です。

(イ) 「粒子数揺らぎを预言する対密度汎関数理論」の数値計算を実行するために克服すべきもう一つの課題は、グラッドポテンシャル汎関数に含まれる運動エネルギー汎関数とエントロピー汎関数の具体的な表式です。運動エネルギー汎関数については、上述のように我々は開発済みであり[Phys. Rev. A. 90, pp. 062511/1-12 (2014)], これを利用できます。エントロピー汎関数に関しては、そこに含まれるエネルギースペクトルにギャップ構造を持たせ、さらにその具体的な形が対密度の汎関数で近似的に書けることを利用しました(上の(2)(C)で既述)。

29年度は、28年度までに完成した「粒子数揺らぎを预言する対密度汎関数理論」の有効性の確認作業を行いました。具体的には、28年度に引き続き、計算スキームによる有効性の実証を行うために、「ド・ジャンによる近似法」で必要な磁場下常伝導状態の電子構造計算を実施しました。磁場下固体のための強束縛近似法を新たに提案し、その数値計算プログラムを開発しました。従来から知られている磁場下常伝導状態の物理現象(例えばドハースファンアルフェン効果など)を今回の計算スキームで再現することに成功しました。ド・ジャンによる近似法による粒子数揺らぎの数値計算の準備が整いました。

その他の研究成果

上で述べてきた研究項目(1),(2),(3)は当初の研究計画に挙げていたものですが、本研究期間に(1),(2),(3)以外の(しかし関連する)研究成果も上げることができました。それについても以下報告します。

28年度-29年度は、「有限温度対密度汎関数理論」とは異なる第一原理理論「磁場下超伝導のための電流密度汎関数理論」の開発も行いました。具体的には、「磁場下超伝導のための電流密度汎関数理論」の定式化と、交換相関エネルギー汎関数の具体的な提案です。後者の交換相関エネルギー汎関数に関しては、オリジナルの密度汎関数理論の局所密度近似の精神を取り入れた近似形で、具体的にはBCS理論の結果を汎関数の中に一部借用した近似形です。

5. 主な発表論文等

(雑誌論文)(計12件)

1. K. Higuchi, D. B. Hamal, and M. Higuchi, Nonperturbative description of the butterfly diagram of energy spectra for materials immersed in a magnetic field, Phys. Rev. B vol. 97, 査読有, 2018, 195135/1-10.

DOI: 10.1103/PhysRevB.97.195135

2. M. Kodera, M. Miyasita, K. Higuchi and M. Higuchi, Renormalized Møller-Plesset Correlation Energy Functional Used in the Optimized Effective Potential Method, J. Phys. Soc. Jpn. vol. 87, 査読有, 2018, 014302/1-7.

DOI: 10.7566/JPSJ.87.014302

3. K. Higuchi, D. B. Hamal, and M. Higuchi, Magnetic breakdown investigated by means of the magnetic-field-containing relativistic tight-binding approximation method, Phys. Rev. B, vol. 96, 査読有, 2017, 235125/1-9.

DOI: 10.1103/PhysRevB.96.235125

4. K. Higuchi, H. Niwa and M. Higuchi, Current-Density Functional Theory for the superconductor and Its Exchange Correlation Energy Functional, J. Phys. Soc. Jpn. vol. 86, 査読有, 2017, 104705/1-16.

DOI: 10.7566/JPSJ.86.104705

5. K. Higuchi and M. Higuchi, N -representability of the Jastrow wave function pair density of the lowest-order, Scientific Reports, 査読有, vol. 7, 2017, 7590/1-7.

DOI: 10.1038/s41598-017-07454-8

6. M. Higuchi, D. B. Hamal, and K. Higuchi, Calculations of magnetic properties of metals through the magnetic-field-containing relativistic tight-binding approximation method, Phys. Rev. B, 査読有, vol. 95, 2017, 195153/1-11.

DOI: 10.1103/PhysRevB.95.195153

7. K. Higuchi, E. Miki and M. Higuchi, Basic variables to be reproduced in the first-principles theory for superconductors: Fluctuation of the particle number, J. Phys. Soc. Jpn., 査読有, 86, 2017, 064704/1-11.

DOI: 10.7566/JPSJ.86.064704

8. K. Higuchi and M. Higuchi, Recent Development of the Pair Density Functional Theory, Quantum Matter, 査読有, vol. 4, 2015, 63-68.

DOI: 10.1166/qm.2015.1171

9. D. B. Hamal, M. Higuchi, and K. Higuchi, Calculation of Magnetic oscillations via the

magnetic-field-containing relativistic tight-binding approximation method: Revisit of the de Haas-van Alphen effect, Phys. Rev. B, 査読有, 2015, vol. 91, 245101/1-9.
DOI: 10.1103/PhysRevB.91.245101

10. K. Higuchi, D. B. Hamal, and M. Higuchi, Relativistic tight-binding approximation method for materials immersed in a uniform magnetic field: Application to the crystalline silicon, Phys. Rev. B, 査読有, vol. 91, 2015, 075122/1-22.
DOI: 10.1103/PhysRevB.91.075122

11. K. Higuchi and M. Higuchi, A Proposal of the Approximate Kinetic Energy Functional of the Pair Density Functional Theory, JPS Conference Proceedings, 査読有, vol. 3, 2014, 017009/1-6.
DOI: 10.7566/JPSCP.3.017009

12. K. Higuchi and M. Higuchi, Approximate forms of the pair-density-functional kinetic energy on the basis of a rigorous expression with coupling-constant integration, Phys. Rev. A, 査読有, vol. 90, 2014, 062511/1-12.
DOI: 10.1103/PhysRevA.90.062511

〔学会発表〕(計8件)

1. K. Higuchi, Energy-band calculations of materials immersed in the magnetic field, EMN Meeting on Computation and Theory 2017 (国際学会), 招待講演 (2017).

2. M. Higuchi, A density functional approach for the superconductor, EMN Meeting on Computation and Theory 2017 (国際学会), 招待講演 (2017).

3. K. Higuchi and M. Higuchi, Pair-Density Functional Theory for Superconductors, Collaborative Conference on 3D and Materials Research (CC3DMR) 2016 (国際学会), 招待講演 (2016).

4. M. Higuchi and K. Higuchi, Energy band structures of the crystalline silicon immersed in the magnetic field, Collaborative Conference on 3D and Materials Research (CC3DMR) 2016 (国際学会), 招待講演 (2016).

5. M. Higuchi, H. Niwa and K. Higuchi, Current-Density Functional Theory for Spin-Singlet, Spin-Triplet and their Mixed Superconductors immersed in the Magnetic Field, The 15th IUMRS- International Conference in Asia (国際学会), (2014).

6. M. Higuchi and K. Higuchi, Validity of the kinetic energy functional based on the coupling-constant expression in the pair-density functional theory, Conference on Computational

Physics (CCP2014) (国際学会), (2014).

7. K. Higuchi and M. Higuchi, Current-density functional theory for superconductors, Collaborative Conference on Materials Research (CCMR) 2014 (国際学会), 招待講演 (2014).

8. M. Higuchi and K. Higuchi, Finite temperature pair-density functional theory, Collaborative Conference on Materials Research (CCMR) 2014 (国際学会), 招待講演 (2014).

〔その他〕

ホームページ等

<http://soar-rd.shinshu-u.ac.jp/profile/ja.gVfUPeSe.html>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

樋口 雅彦 (HIGUCHI Masahiko)
信州大学・学術研究院理学系・教授
研究者番号：10292202

(2) 研究分担者

樋口 克彦 (HIGUCHI Katsuhiko)
広島大学・大学院先端物質科学研究科・准教授
研究者番号：20325145