

令和 4 年 6 月 21 日現在

機関番号：13601

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2018～2021

課題番号：18K03510

研究課題名(和文) 第一原理計算手法による超伝導混合状態のドハース ファンアルフェン効果の研究

研究課題名(英文) A first-principles study on the de Haas van Alphen effect in the superconducting vortex state

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) 2,500,000円

研究成果の概要(和文)：本研究課題では、「超伝導渦糸状態のための電流スピン密度汎関数理論」の開発を行いました。本理論に含まれる交換相関エネルギー汎関数の近似形の開発も行いました。本理論における有効一粒子方程式を解く方法として、「磁場を含んだ相対論的強束縛近似法」の開発も行いました。そして、超伝導渦糸状態におけるdHvA効果の第一原理的描写を行う最初のステップとして、フェルミ面を持たない物質の磁化振動の可能性の検討を行いました。具体的には、エネルギーギャップのあるシリコンの磁化振動現象の計算を「磁場を含んだ相対論的強束縛近似法」を用いて行いました。

研究成果の学術的意義や社会的意義

超伝導渦糸状態のdHvA効果を第一原理的に解明することは、第一原理理論および計算手法の開発が難しく遅々として進んできませんでした。本研究で開発した理論・計算手法はこの状況を打破するものですが、これらは著者が独自に開発してきた第一原理計算手法が基礎となっています。つまり、著者が世界に先駆けて初めて着手した研究課題と言えます。今回得られた研究成果は、超伝導渦糸状態を含めた超伝導現象の第一原理的な理解のベース(基礎)になるものと期待されます。

研究成果の概要(英文)： In the present research subject, the current- and spin-density functional theory for the superconducting vortex state (SC-CSDFT) is developed. An approximate form of the exchange-correlation energy functional of SC-CSDFT is also proposed. Furthermore, the magnetic-field-containing relativistic tight-binding approximation method (MFRTB method), which was previously developed by the authors, is improved for the purpose of solving an effective single-particle equation of SC-CSDFT.

As the first step toward first-principles description of the dHvA effect of the superconducting vortex state, we discuss the possibility of the quantum oscillation of the magnetization in the material with no Fermi surface, i.e., band insulator. Specifically, we calculate the quantum oscillation of the magnetization for the crystalline silicon using the MFRTB method.

研究分野：物性理論

キーワード：超伝導電流スピン密度汎関数理論 超伝導渦糸状態 ギャップ方程式 超伝導臨界磁場 超伝導転移温度 磁場侵入長 磁場を含んだ相対論的強束縛近似法 非摂動的MFRTB法

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

1. 研究開始当初の背景

超伝導体に磁場を印加した際に、超伝導状態であるにもかかわらず、ドハース ファンアルフエン (dHvA) 効果が観測されることが多くの物質で報告されています[1]。dHvA 効果とは、磁場の大きさを変化させたときに磁化が振動する現象で、通常はリフシツ コセビッチによる半古典論 (LK 理論) で説明されます。しかし超伝導状態では超伝導ギャップが形成されるために、フェルミ面上を電子が周回することを基礎とする LK 理論では説明が困難です。超伝導渦糸状態における dHvA 効果の解析としては、半古典論を改良した手法がありますが[2]、実験事実を十分に説明できていません。また、ポゴリユボフ ドジャン方程式を近似的に解く手法も行われていますが、物質の個性を決める重要な一要素である交換相関効果が考慮されておらず[3]、適切な第一原理理論に基づく説明はなされていないのが現状です。

超伝導渦糸状態の dHvA 効果を第一原理的に解明するためには、印加した磁場の大きさに対する超伝導体の全エネルギーの変化を計算するだけでよいと言えます。この課題は簡単そうに思えますが、実際にこれを行うためには以下の2つことを解決しなければなりません。

(i) 磁場下超伝導体の電子状態を適切に記述する第一原理理論の開発

(ii) (i)の第一原理理論での有効一粒子方程式を解く計算手法の開発(バンド計算手法の開発)

(i)に関しては、上で述べたように交換相関効果を含んだ第一原理理論が必要です。またクーバー対のスピンの対称性が超伝導状態を議論する上で重要であることを考えると、スピンを考慮に入れた第一原理理論が必要です。これらのためには密度汎関数理論を基礎とした理論が考えられますが、磁場下超伝導体のための密度汎関数理論となると先行研究は極めて少なく、プロトタイプ的なもの[4,5]やスピンを考慮していないもの[6-8]を除けば、存在しません。

(ii)は、磁場と結晶場を同等に含んだハミルトニアン固有値・固有関数の計算手法の開発です。磁場と結晶場を同等に含んだハミルトニアンのもつ対称性は、通常の結晶の並進対称性ではなく、磁場によるベクトルポテンシャルも含めた新たな並進対称性となります。ゆえに、通常のバンド計算手法は役に立ちません。一様な磁場を印加した場合のバンド計算手法は、従来よりいくつかありますが[9-11]、超伝導渦糸状態の内部の磁場は非一様であり、非一様な磁場の場合のバンド計算手法は存在しません。では具体的にどのような第一原理計算手法が必要でしょうか。

もちろん(i)及び(ii)を扱った第一原理計算手法の開発をしなければなりません。(i)に関してはすでに我々は研究を着手して、「磁場下超伝導体のための電流密度汎関数理論」は開発済みです[6-8]。この理論は交換相関効果も含んでおり、スピンを含める形に拡張すれば(i)の課題に見合う理論となります。これを「超伝導渦糸状態のための電流スピン密度汎関数理論」と呼びます。(ii)に関しては、最近我々は、磁場と結晶場を同等に含んだハミルトニアンに対するバンド計算手法「磁場を含んだ相対論的強束縛近似法」を開発しました[10,11]。しかしながらこのバンド計算手法は一様磁場の場合にのみ適用可能で、課題(ii)のためには、非一様な磁場の場合に適用できるように拡張しなくてはなりません。これを「非一様磁場を含んだ相対論的強束縛近似法」と呼びます。本研究開始当初の課題は、「超伝導渦糸状態のための電流スピン密度汎関数理論」の有効一粒子方程式を「非一様磁場を含んだ相対論的強束縛近似法」で解くことでした。そして、超伝導渦糸状態における dHvA 効果の第一原理的描写を可能とすることでした。

2. 研究の目的

上の1で述べたように、最初に、すでに開発済みの「磁場下超伝導体のための電流密度汎関数理論」[6-8]を、スピンを含める形式に拡張します。すなわち研究の目的1は、「超伝導渦糸状態のための電流スピン密度汎関数理論」の開発です(目的1)。このとき交換相関エネルギー汎関数の近似形の開発も併せて行います。この新しく開発をした「超伝導渦糸状態のための電流スピン密度汎関数理論」に現れる有効一粒子方程式は、非一様な磁場と結晶場を同等に含んでいます。そこで、開発済みの「磁場を含んだ相対論的強束縛近似法」[10,11]を非一様な磁場の場合に拡張します。すなわち研究の目的2は、「非一様磁場を含んだ相対論的強束縛近似法」の開発です(目的2)。目的1で開発をした理論の有効一粒子方程式を、目的2で開発をしたバンド計算手法で解き、印加した磁場の大きさに対する超伝導体の全エネルギーの変化を計算します。すなわち、研究の目的3は、超伝導渦糸状態の dHvA 効果の解明です(目的3)。第一原理的なレベルで超伝導体の dHvA 効果が明らかとなります。

超伝導渦糸状態の dHvA 効果を第一原理的に解明することは、多くの研究者がその重要性を認識していたものの[12]、第一原理理論および計算手法の開発が難しく遅々として進んできませんでした。本研究の目的1, 2で開発予定の理論・計算手法はこの状況を打破するものですが、これらは我々が独自に開発した第一原理計算手法[5-8,10,11]が基礎となっています。つまり、超

伝導渦糸状態の dHvA 効果の第一原理的説明は (目的 3), 我々が世界に先駆けて初めて着手可能となった課題と言えます。

3. 研究の方法

(1) 「超伝導渦糸状態のための電流スピン密度汎関数理論」の開発 (目的 1)

開発済みの「磁場下超伝導体のための電流密度汎関数理論」[6-8]を, スピンを含む形に拡張するためには, 我々が近年開発した「拡張された制限つき探索理論」[13]を超伝導渦糸状態に対して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[13], 超伝導渦糸状態の場合には所望の物理量として「超伝導秩序変数, スピン密度, 電流密度および電荷密度」を選んでやれば良いわけです。本研究では「拡張された制限つき探索理論」の処方箋に従い, 「超伝導渦糸状態のための電流スピン密度汎関数理論」の有効一粒子方程式を導きます。

(2) 交換相関エネルギー汎関数の近似形開発 (目的 1)

具体的な計算を行うためには, 「超伝導渦糸状態のための電流スピン密度汎関数理論」における交換相関エネルギー汎関数の近似形が必要不可欠です。本研究では, 交換相関エネルギー汎関数の超伝導秩序変数による展開式を利用して, 近似形開発を行います。ゼロ次の項には, 既に開発済みの「常伝導の電流密度汎関数理論」の Vorticity 展開近似の表式[14]がそのまま使えます。高次の項は, 電子間に働く有効引力相互作用に矛盾しない形の近似形開発を行います。

(3) 「非一様磁場を含んだ相対論的強束縛近似法」の開発 (目的 2)

上記の有効一粒子方程式を近似的に解くために, 本研究ではドジャンによる近似[15]を用います。この近似は, 常伝導状態に対する有効一粒子方程式の解を利用して超伝導状態を構成するというものです。常伝導状態に対する有効一粒子方程式は, 非一様な磁場と結晶場を含むことが予想されます。本研究では一様磁場下の固体に対するエネルギーバンド計算手法として我々によって開発された「磁場を含んだ相対論的強束縛近似法」[10,11]を, 非一様な磁場が印加された固体を扱えるように拡張します。具体的には, 原子位置で異なる磁場下の原子軌道を基底関数に選ぶことにより「非一様磁場を含んだ相対論的強束縛近似法」の開発を行います。この計算手法により得られた常伝導状態を用いれば, ドジャンによる近似[15]を介して, 超伝導状態に対する有効一粒子方程式の近似解が得られます。

(4) 超伝導渦糸状態の dHvA 効果の説明 (目的 3)

本研究では, 実験データが豊富な NbSe₂ および CeRu₂ における超伝導渦糸状態の dHvA 効果の計算を, (i) 「非一様磁場を含んだ相対論的強束縛近似法」による常伝導状態のエネルギーバンド計算, (ii) 超伝導渦糸状態の dHvA 効果の計算の二段階で行います。(i)で得られる結果は, (ii)の準備段階という意味だけでなく, LK 理論を超えた dHvA 効果の記述という意味もあります。磁場と結晶場の効果によって生じる微細なエネルギーバンド構造に起因した新たな磁気振動現象 [11]についても議論します。(ii)では, (i)で得られた常伝導状態を用いて[15], 「超伝導渦糸状態のための電流スピン密度汎関数理論」の有効一粒子方程式を近似的に解きます。得られた超伝導秩序変数および全エネルギーの磁場依存性から, 超伝導ギャップの異方性と dHvA 効果の関係を明らかにします。また, 準粒子スペクトルは磁場と結晶場の効果によって生じる特異な構造を持つことが予想され, それによる新たな磁気振動現象が, 超伝導状態でも出現する可能性があります。これについても併せて議論します。

4. 研究成果

研究成果を研究の目的ごと (上述の目的 1~目的 3 ごと) に記述します。

4-1. 目的 1

(1)すでに開発済みの「磁場下超伝導体のための電流密度汎関数理論」[6]を, スピンを含む形に拡張して「超伝導渦糸状態のための電流スピン密度汎関数理論」の定式化を行いました。具体的には, 超伝導秩序変数, スピン密度, 電流密度および電荷密度を基本変数とした HK 定理を証明し, それを基礎として有効一粒子方程式を導出しました。この方程式を先の論文[6]で用いたドジャン近似を用いて書き下し, ギャップ方程式に相当する方程式を得ました。

(2) ギャップ方程式の数値計算を可能とするために, このギャップ方程式に含まれる交換相関エネルギー汎関数の具体的な近似形 (電子格子相互作用を起源とした電子間引力相互作用の近似形) を提案しました。そしてさらに有効性を確認するために, 磁場下アルミニウムに適用しました。外部磁場および温度に対する超伝導ギャップの変化を定量的に明らかにしました。ゼロ磁場のときの転移温度, さらに極低温での臨界磁場の値は, 過去報告されている実験値とよく合うものでした。

以上(1), (2)の研究成果は学術論文[16]に出版されました。

(3) 超伝導臨界磁場や転移温度など実験事実はおおむね説明できるものではありませんでしたが[16]、磁場侵入長が実験に比べ大きく見積られるという問題点も明らかになりました[16]。電子間に働く引力相互作用の磁場依存性を考慮に入れ、上記(1)、(2)で述べた理論の改良を行いました[17]。そして改良した理論を磁場下アルミニウム、スズ、インジウムに適用しました[17]。超伝導ギャップの磁場と温度依存性は、それぞれの場合でよく再現されることが確認されました。超伝導ギャップが磁場とともに減少する原因は、電子間に働く引力相互作用が磁場とともに減少ためであることを明らかにしました[17]。

4 - 2. 目的 2

(1) 「超伝導渦糸状態のための電流スピン密度汎関数理論」の有効一粒子方程式を近似的に解く際に必要な「磁場下常伝導状態の精度の良い計算手法」を新たに開発しました[18]。この新しい計算手法を「非摂動的な MFRTB 法」と呼びます[18]。「非摂動的な MFRTB 法」を開発した理由は、実験室レベルの磁場強度においても、従来の MFRTB 法[10][11]では、理論が摂動論に立脚しているがゆえに誤差が無視できないことが明らかになったためです。

(2) ドジャン近似の基礎となる磁場下常伝導体の電子状態計算法（非摂動的な MFRTB 法[18]）について、さらに検証を進めました。具体的には磁場下グラフェンの g 因子の計算を実行し実験と比較しました[19][20]。グラフェンの g 因子が実験では減少して観測される原因がラシュバ効果であることを解明しました[19][20]。

4 - 3. 目的 3

(1) 我々はすでに「粒子数揺らぎを预言する超伝導対密度汎関数理論」[6]を開発済みです。この理論を、磁場を含む形式に拡張することが目的 3 に対する課題です。「粒子数揺らぎを预言する超伝導対密度汎関数理論」を実際の物質へ適用するためには、運動エネルギー汎関数、エントロピー汎関数の近似形の開発が必要です。に関しては、ノーマル状態の対密度汎関数理論でわれわれが開発してきた近似形を援用できます[21]。本研究ではこの近似形の開発を行いました[22]。エントロピー表式に含まれるエネルギースペクトルに対密度依存性が含まれるという近似形です[22]。

(2) 「粒子数揺らぎを预言する超伝導対密度汎関数理論」[6]では、無限に距離を引き離れた際の物理量の相関がゼロとなる、いわゆるクラスター分解原理の成立を前提としてきました。超伝導状態でクラスター分解原理が成り立つとすると、超伝導状態は粒子数が揺らぎを得ないことが示されます。このことを検証するための第一歩として、BCS 理論でクラスター分解原理が成立していることを初めて確認しました[23]。さらにこの事実を用いて、フェルミ粒子系の BEC で定義されるクーパー対（最大 geminal）の対称性やコヒーレンス長を明らかにしました[23]。

(3) 超伝導体の電磁場応答を記述する理論の開発に着手しました。戦略としては最初に常伝導体の電磁場応答の理論を開発し、次にドジャン近似を用いて超伝導状態を記述します。最初の段階の理論、すなわち「電磁場応答のための動的電流密度汎関数理論」を開発しました[24]。これは目的 3 に関連する研究成果です。本研究成果は学術論文として出版されました[24]。

(4) ギャップのある物質における dHvA 振動現象を確認する数値計算を始めました。具体的には、既開発済みの MFRTB 法(目的 2 の研究成果)を用いて、ノーマル状態のシリコン結晶の dHvA 効果を考察しました。さらに強磁場で生じる金属絶縁体転移の性質についても議論しました[25]。本研究成果は超伝導状態の dHvA 効果の解明の予備的かつ補足的な研究になり得ます。現在、学術論文として投稿中です[25]。

[参考文献]

- [1] Y. Onuki, *et al.*, Phys. Soc. Jpn. **61**, 692 (1992); A. Maniv, *et al.*, Phys. Rev. B **83**, 104505 (2011).
- [2] K. Maki, Phys. Rev. B **44**, 2861 (1991).
- [3] K. Yasui and T. Kita, Phys. Rev. B **66**, 184516 (2002); Z. Wang, *et al.*, *ibid.* **93**, 184505 (2016).
- [4] W. Kohn, *et al.*, J. de Physique (Paris) **50**, 2601 (1989).
- [5] K. Higuchi, K. Koide, T. Imanishi and M. Higuchi, Int. J. Quantum Chem. **113**, 709 (2013).
- [6] K. Higuchi, E. Miki and M. Higuchi, J. Phys. Soc. Jpn. **86**, 064704 (2017); K. Higuchi, H. Niwa and M. Higuchi, J. Phys. Soc. Jpn. **86**, 104705 (2017).
- [7] [招待講演] M. Higuchi, EMN Meeting on Computation and Theory 2017 (Dubai, Nov. 2017).
- [8] [招待講演] M. Higuchi, CC3DMR 2016 (Seoul, South Korea, June 2016).
- [9] D. R. Hofstadter, Phys. Rev. B **14**, 2239 (1976); P. Moon and M. Koshino, *ibid.* **85**, 195458(2012); Y. Hatsugai, *et al.*, *ibid.* **74**, 205414 (2006).
- [10] K. Higuchi, D. B. Hamal, and M. Higuchi, *et al.*, Phys. Rev. B **91**, 075122 (2015); D. B. Hamal, M. Higuchi, and K. Higuchi, Phys. Rev. B **91**, 245101 (2015).
- [11] M. Higuchi, D. B. Hamal and K. Higuchi, Phys. Rev. B **95**, 195153 (2017); K. Higuchi, D. B. Hamal and M. Higuchi, Phys. Rev. B **96**, 235125 (2017).
- [12] J. Kübler, *Theory of Itinerant Electron Magnetism* (Oxford Univ. Press, Oxford, 2000), Chap. 1.
- [13] M. Higuchi and K. Higuchi, Phys. Rev. B **69**, 035113 (2004); K. Higuchi and M. Higuchi, Phys. Rev. B **69**, 165118 (2004); K. Higuchi and M. Higuchi, Phys. Rev. A **79**, 022113 (2009); M. Higuchi and K. Higuchi, Phys. Rev. A **81**, 042505 (2010), および樋口克彦, 樋口雅彦, 日本物理学会誌 **67**, 580 (2012).
- [14] K. Higuchi and M. Higuchi, Phys. Rev. B **74**, 195122 (2006); M. Higuchi and K. Higuchi, Phys.

Rev. B **75**, 195114 (2007).

[15] P. G. de Gennes, *Superconductivity of Metals and Alloys* (Addison-Wesley: New York, 1966), Chap. 5.

[16] K. Higuchi, N. Matsumoto, Y. Kamijo and M. Higuchi, Phys. Rev. B **102**, 014515 (2020).

[17] K. Higuchi, N. Matsumoto, Y. Kamijo and M. Higuchi, J. Phys.: Condens. Matter **33**, 435602 (2021).

[18] K. Higuchi, D. B. Hamal, and M. Higuchi, Phys. Rev. B **97**, 195135 (2018).

[19] M. Higuchi, D. B. Hamal, A. Shrestha and K. Higuchi, J. Phys. Soc. Jpn. **88**, 094707 (2019).

[20] A. Shrestha, K. Higuchi, S. Yoshida, and M. Higuchi, J. Appl. Phys. **130**, 124303 (2021).

[21] M. Higuchi and K. Higuchi, Phys. Rev. A **75**, 042510 (2007); M. Higuchi and K. Higuchi, Phys. Rev. B. **78** 125101 (2008), K. Higuchi and M. Higuchi, Phys. Rev. B. **82** 155135 (2010); M. Higuchi and K. Higuchi, Phys. Rev. A **84**, 044502 (2011); K. Higuchi and M. Higuchi, Phys. Rev. A. **85**, 062508 (2012); K. Higuchi and M. Higuchi, Phys. Rev. A. **87**, 032511 (2013); K. Higuchi and M. Higuchi, Phys. Rev. A. **90**, 062511 (2014); K. Higuchi and M. Higuchi, Scientific Reports **7**, 7590 (2017).

[22] K. Higuchi and M. Higuchi, JPS Conf. **30**, 011066 (2020).

[23] K. Higuchi and M. Higuchi, J. Phys. Commun. **5**, 095003 (2021).

[24] K. Higuchi, Y. Fujie, H. Shimizu and M. Higuchi, Phys. Rev. A **100**, 062503 (2019).

[25] K. Higuchi and M. Higuchi; submitted to Phys. Rev. B.

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計9件（うち査読付論文 9件/うち国際共著 3件/うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 K. Higuchi and M. Higuchi	4. 巻 5
2. 論文標題 Cluster decomposition principle and two-electron wave function of the Cooper pair in the BCS superconducting state	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 J. Phys. Commun.	6. 最初と最後の頁 095003/1-10
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1088/2399-6528/ac1e40	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 K. Higuchi, N. Matsumoto, Y. Kamijo and M. Higuchi	4. 巻 33
2. 論文標題 Superconducting gap and attractive interaction between electrons investigated by the current-density functional theory for superconductors	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 J. Phys.: Condens. Matter	6. 最初と最後の頁 435602/1-12
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1088/1361-648X/ac1967	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 A. Shrestha, K. Higuchi, S. Yoshida, and M. Higuchi	4. 巻 130
2. 論文標題 Reduction of G-factor due to Rashba Effect in Graphene	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 J. Appl. Phys.	6. 最初と最後の頁 124303/1-9
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1063/5.0057559	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 K. Higuchi and M. Higuchi	4. 巻 30
2. 論文標題 A Calculation Scheme for the Pair-Density Functional Theory for the Superconductor	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 JPS Conf.	6. 最初と最後の頁 011066/1-6
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.7566/JPSCP.30.011006	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 K. Higuchi, N. Matsumoto, Y. Kamijo and M. Higuchi	4. 巻 102
2. 論文標題 Magnetic field and temperature dependence of the superconducting gap through current-density functional theory for superconductors	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Phys. Rev. B	6. 最初と最後の頁 014515/1-10
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.102.014515	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 M. Higuchi, D. B. Hamal, A. Shrestha and K. Higuchi	4. 巻 88
2. 論文標題 Reduced effective g-factor in graphene	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 J. Phys. Soc. Jpn.	6. 最初と最後の頁 094707/1-9
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.88.094707	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 K. Higuchi, Y. Fujie, H. Shimizu and M. Higuchi	4. 巻 100
2. 論文標題 Time-Dependent Current-Density Functional Theory Taking into Consideration the Effect of the Energy Dissipation	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Phys. Rev. A	6. 最初と最後の頁 062503/1-14
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevA.100.062503	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 M. Kodera, M. Miyasita, H. Shimizu, K. Higuchi, and M. Higuchi	4. 巻 87
2. 論文標題 Renormalized Moller-Plesset Correlation Energy Functional Used in the Optimized Effective Potential Method	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 J. Phys. Soc. Jpn.	6. 最初と最後の頁 014302/1-11
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.87.014302	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 K. Higuchi, D. B. Hamal, and M. Higuchi	4. 巻 97
2. 論文標題 Nonperturbative description of the butterfly diagram of energy spectra for materials immersed in a magnetic field	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Phys. Rev. B	6. 最初と最後の頁 195135/1-10
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.97.195135	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

[学会発表] 計4件(うち招待講演 2件/うち国際学会 4件)

1. 発表者名 M. Higuchi and K. Higuchi
2. 発表標題 Density Functional Scheme for Calculating the Fluctuation of the Electron Number in the Superconductor
3. 学会等名 Asia Pacific Society for Material Research (APSMR) 2019 Annual Meeting (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 K. Higuchi and M. Higuchi
2. 発表標題 A Calculation Scheme for the Pair-Density Functional Theory for the Superconductor
3. 学会等名 International Conference on Strongly Correlated Electron Systems 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 K. Higuchi, A. Shrestha, D. B. Hamal and M. Higuchi
2. 発表標題 Magnetic properties of graphene investigated by the nonperturbative MFRTB method
3. 学会等名 Asia Pacific Society for Material Research (APSMR) 2019 Annual Meeting (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 K. Higuchi, D. B. Hamal and M. Higuchi
2. 発表標題 Nonperturbative description of the energy spectra for materials immersed in a magnetic field
3. 学会等名 The 16th International Conference on Megagauss Magnetic field generation and Related Topics (国際学会)
4. 発表年 2018年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	樋口 克彦 (Higuchi Katsuhiko) (20325145)	広島大学・先進理工系科学研究科(先)・准教授 (15401)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関		
ネパール	Kathmandu University		