

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 26 年 6 月 19 日現在

機関番号：13601

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2011～2013

課題番号：23540446

研究課題名(和文) 拡張された制限つき探索理論の電流誘起系への適用

研究課題名(英文) Application of the extended constrained-search theory to the current-induced system

研究代表者

樋口 雅彦 (HIGUCHI, Masahiko)

信州大学・理学部・教授

研究者番号：10292202

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,100,000円、(間接経費) 630,000円

研究成果の概要(和文)：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た。

(1)動的CDFTの開発：内部電磁場をあらわに含んだハミルトニアンを基礎に、動的CDFTを開発した。得られた有効一電子方程式に含まれる動的交換相関エネルギー汎関数に関しても、断熱的近似であるAVEAを提案した。(2)磁場下固体の強束縛近似法の開発：磁場下固体の電子構造を計算する相対論的な強束縛近似法を開発した。本手法を磁場下シリコン結晶に適用した。(3)磁場下超伝導体のための静的CDFT：磁場下超伝導体に適用可能な静的CDFTを開発した。様々なスピン対称性に加え重心座標依存性を持つ超伝導秩序変数を再現できる理論である。

研究成果の概要(英文)：In this study, we have mainly performed three topics of research as follows:

(1)Dynamical CDFT: On the basis of the Hamiltonian which explicitly includes the internal electromagnetic field, we developed the dynamical CDFT. Concerning the exchange-correlation energy functional that is contained in the resultant single-particle equation of the dynamical CDFT, we also proposed adiabatic approximation called AVEA. (2)Tight-binding method for solids immersed in a magnetic field: We developed the relativistic tight-binding method for solids immersed in an external magnetic field. We also applied this method to the crystalline silicon immersed in an external magnetic field. (3)Static CDFT for superconductors immersed in a magnetic field: We developed the static CDFT for superconductors immersed in a magnetic field. This theory can reproduce the superconducting order parameter which has various spin symmetry and dependence of the center of mass coordinate.

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物理学・数理物理・物性基礎

キーワード：動的CDFT 電流誘起 拡張された制限つき探索理論 相対論的強束縛近似法 超伝導 磁場印加

## 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た。研究開始当初の背景を項目ごとに述べる。

### (1) 動的電流密度汎関数理論の開発

通常密度汎関数理論(以下 DFT)では、基底状態における電子密度と全エネルギー以外の物理量の予言は保証していない。したがって、電流が誘起された系(例えばスピン軌道相互作用の強い系や外部電磁場が印加された系など)を DFT で扱おうとしても、誘起された電流の効果をあらわに取り込むことは困難である。

静的電流密度汎関数理論(以下、静的 CDFT)は、基底状態における電流の効果の取り込みが可能な理論である。われわれは最近、拡張された制限付き探索理論(以下 ECS 理論)によって静的 CDFT を「 $v$  表示可能性の問題」がない形に拡張した。一方、動的状態を扱う第一原理理論として最も広く用いられているのが Runge と Gross による時間依存密度汎関数理論である(以下 TDDFT)。この理論も、DFT の場合と同様に、誘起された電流を予言することは不可能である。静的 CDFT の開発と同様に、われわれの ECS 理論を動的な場合に拡張して、さらに基本変数として電流密度を付加すれば、動的に誘起された電流を予言する新しい理論が構築できる。本研究の主目的は、この動的電流密度汎関数理論(以下、動的 CDFT)を開発することである。

動的 CDFT による計算には、動的な交換相関エネルギー汎関数が必要不可欠である。現実的な対処法は、静的な交換相関エネルギー汎関数として開発された表式を借用する断熱的近似である。最も用いられている断熱的近似の一つに、静的な局所密度近似の表式を借用した断熱的局所密度近似(以下 ALDA)がある。しかしながら、いくつかの物質系では、ALDA を用いた TDDFT-ALDA は、量的にも質的にも実験との不一致が大きいことが知られている。ALDA を超えるためには、まずは、非一様性を動的な交換相関エネルギー汎関数に如何に取り込むのかを考えるべきである。そのためには、動的交換相関エネルギー汎関数を電流に依存した形で与えるべきだが、その具体的なかつ有効な近似形はまだない。われわれは、静的 CDFT において、電流に依存した交換相関エネルギー汎関数の開発に成功している。これを vorticity 展開近似(以下 VEA)と呼んでいる。この VEA を断熱的近似で用いた動的 CDFT-AVEA は、従来の TDDFT-ALDA を超える理論として期待できる。この開発も本研究の目的のひとつである。

### (2) 磁場下固体の強束縛近似法の開発

上記のような「電流が誘起した系を扱う一般的な第一原理理論の開発」とともに重要なものは、その理論の能力を最大限に引き出す電子構造計算手法(バンド計算手法)の開発である。電流が誘起した系の典型例の一つに、外部磁場が印加した固体がある。固体の周期

的なポテンシャルと外部磁場をともに考慮した電子構造計算は、簡単な格子系の場合を除いて、現実の三次元物質ではほとんど適用例はない。これが実現できれば、磁場下での固体(金属)で観測されるド・ハースファン・アルフェン(dHvA)効果も、第一原理の立場から再考することが可能となる。磁場下固体の電子構造計算手法を開発することも本研究の目的である。

### (3) 磁場下超伝導体のための静的 CDFT

電流が誘起した興味深い系の一つに磁場下超伝導体の渦糸状態がある。外部磁場と温度に対する渦糸状態の変化が記述できれば、超伝導臨界磁場や転移温度も見積ることができる。このような第一原理理論は今まで無かった。この研究項目は当初の研究計画には挙げていなかったが、本研究課題で扱う CDFT を用いればこの第一原理理論は開発可能であることが分かってきた。具体的には、超伝導秩序変数と電流密度を基本変数に選んだ「磁場下超伝導体のための CDFT」の開発も本研究の目的である。

## 2. 研究の目的

### 目的 1: 動的 CDFT の開発

本研究では、スピン軌道相互作用や外部電磁場などによって電流が誘起された系に対して有効な第一原理理論として、すでに開発済みの ECS 理論をもとに動的 CDFT を開発する。この開発には、動的な交換相関エネルギー汎関数の近似形の開発も含んでいる。

### 目的 2: 磁場下固体の強束縛近似法の開発

目的 1 で開発した動的 CDFT の能力を最大限に引き出すための電子構造計算手法の開発を行う。その第一ステップとして本研究では、磁場下固体の強束縛近似法の開発を行う。スピン軌道相互作用が本質的に重要な系への適用も想定して、相対論的な効果も考慮に入れた強束縛近似法の開発を目指す。

### 目的 3: 磁場下超伝導体のための静的 CDFT

外部磁場が印加した超伝導体では、超伝導秩序変数とともに電流密度も系の基底状態を決める基本的な変数である。それら基本変数を再現する第一原理理論として磁場下超伝導体のための静的 CDFT を開発する。

## 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る。

### (1) 動的 CDFT の開発

動的 CDFT を開発するために、まずスタートのハミルトニアンを設定をする。このとき注意しなければならないのは、外部から印加した電磁場によって誘起された電流や電荷が生む内部電磁場をハミルトニアンに含めなければならないことである。通常この効果は小さいとして CDFT を構築するのが一般的だが、今回の場合には適用を想定している系が、誘起された電流の効果が本質的に重要な系であるので無視するわけにはいかない。例

えば、メタマテリアルと呼ばれる人工構造物の電磁場に対する応答現象や、磁場下固体の電子構造などである。

次に、そのスタートのハミルトニアンを使って動的 CDFT の構築に必要な二つの定理を証明する。オリジナルの TDDFT における

(i)存在定理

(ii)電子密度による変分原理

を、動的 CDFT 版へ拡張するのである。その際、われわれの ECS 理論を一旦動的な理論へ拡張して、基本変数として電子密度と電流密度を選んでやるという方法をとる。

そして、この二つの基本定理を使って、電子密度と電流密度を正しく予言する有効一電子方程式を導出する。

有効一電子方程式には、動的な交換相関エネルギー汎関数が含まれる。このエネルギー汎関数の適切な近似がなければ、動的 CDFT は全く機能しない。われわれはすでに静的 CDFT において VEA による近似的交換相関エネルギー汎関数を得ている。これを直接、動的 CDFT に導入することで、従来の ALDA に対しては非一様性の補正を含んだ近似が出来上がる。動的 CDFT の交換相関エネルギー汎関数の最初の提案としては妥当なものと思われる。

#### (2) 磁場下固体の強束縛近似法の開発

通常の DFT の有効一電子方程式には磁場が含まれていないのでプロットホの定理が成り立つ。そして電子構造を計算する際には、このプロットホの定理を利用する。一方、磁場が印加された固体など、電流が誘起された系における動的 CDFT の有効一電子方程式には、原子核や電子による周期的なスカラーポテンシャルの他に、磁場に関連したベクトルポテンシャルが含まれる。この場合には通常のプロットホの定理は成り立たず、新たな並進性に関連した「磁気的プロットホの定理」が成り立つ。まずはこの磁気的プロットホの定理の確認をする。そして、それに関連して「磁気的なブリルアンゾーン」も確認して、電子構造計算の準備をする。

具体的な電子構造計算手法(バンド計算手法)には強束縛近似法を採用する。磁場無しの場合の通常のプロットホの飛び移り積分を使って、磁場下での強束縛近似法の飛び移り積分が表せるといふ特長がある。解くべき固有値問題に現れるハミルトニアン行列は、上で述べた磁気的プロットホの定理を使うことでその次元は小さくできる。解いた結果は、磁気的なブリルアンゾーン内の各点に対してプロットされる。相対論的な効果に関しては、摂動論的に取り込む方法と、ディラック方程式によって full に取り込む方法の二通りの方法が考えられる。dHvA 効果に直接関連する金属のフェルミ面の形状に関して、前者の方法ではうまくいかない物質系があることが知られているので、今回はディラック方程式を基礎にした方法を採用した。理論形式の複雑さや数値計算の負荷は大きくなるが、結果

の精度を考えてこのような方法をとることにした。

#### (3) 磁場下超伝導体のための静的 CDFT

磁場下超伝導体の第一原理理論を作るためには、(1)の場合と同様に、スタートのハミルトニアンに内部電磁場の効果を含めなければならない。マイスナー効果や渦糸状態の記述のためには必要不可欠である。さらに超伝導現象は、温度に対する振る舞いが重要なので(転移温度や臨界磁場の見積もりなど)、理論は有限温度の場合に適用できる形式にする。そのためにまず、Mermin による方法を参考にして、われわれの ECS 理論を有限温度の場合に拡張する。

磁場下超伝導体の熱平衡状態を決める物理量は、電子密度や電流密度のほかに、超伝導秩序変数がある。超伝導秩序変数はクーパ対を表す二粒子状態に比例した量であるので、スピン一重項、スピン三重項、あるいはその混合状態といったスピンの対称性のほかにも、重心座標依存性も内包している。磁場下超伝導体の渦糸状態では超伝導秩序変数の重心座標依存性は本質的に重要であるのでこの依存性も残しておく。

これらを基本変数とした有限温度 ECS 理論、すなわち磁場下超伝導体のための静的 CDFT を開発する。

## 4. 研究成果

研究成果を三つの研究項目ごとに述べる。

### (1) 動的 CDFT の開発

動的 CDFT の開発は、上の「研究の方法」で述べたように、有効一電子方程式の導出部分とそこに含まれる動的な交換相関エネルギー汎関数の近似形の開発の2つの部分から成る。前者と後者は独立に実行できる。23年度は動的な交換相関エネルギー汎関数の近似形の開発を行い、24年度以降に本格的な有効一電子方程式の導出を行った。

23年度は、動的な交換相関ポテンシャルを考察した。動的 CDFT-AVEA では、静的 CDFT-VEA における交換相関ポテンシャルを借用する。静的 CDFT-VEA では交換相関エネルギー汎関数の具体的な表式はあるが、それに対応するポテンシャル表式は無かった。電子密度および電流密度による変分を実行し、交換相関ポテンシャルの具体的な表式を導いた。この表式は動的 CDFT-AVEA の交換相関ポテンシャルとして使えるものである。

24年度は、動的 CDFT におけるスタートのハミルトニアンを考察した。外部電磁場などの影響により、ハミルトニアンには系内部で誘起された横場のエネルギーが含まれていなければならない。通常静的 CDFT ではこの効果は小さいとして無視をするが、メタマテリアルの電磁応答現象のような場合には内部の電磁場を精度良く記述しなければならないので無視するわけにはいかない。この事情は、磁場下での超伝導状態(渦糸状態、マイスナー効果)の場合も同じである。24年

度はこのような系の記述に不可欠な内部電磁場をハミルトニアンに取り込むことに成功した。

25年度は、24年度で得たハミルトニアンを基礎に動的CDFTを完成させた。具体的には以下のことを行った：(a)動的CDFTにおける存在定理の証明と、ディラック・フレネル変分原理の密度による変分原理への書き換え。(b)上記二つの基本定理を用いて電流密度と電子密度を正しく予言する有効一電子方程式の導出。動的CDFTは微視的マクスウェル方程式と連立させることによって電磁波の応答現象が記述できる。これによりメタマテリアルの新奇な物性を微視的かつ第一原理的に議論する理論的道具が整った。

### (2) 磁場下固体の強束縛近似法の開発

23年度はまず、磁気的プロッホの定理の確認を行った。外部磁場が印加された系のエネルギー固有関数は通常のプロッホの定理は成り立たず、磁場の影響を考慮に入れた磁気的プロッホの定理が成り立つ。さらに磁気的プロッホの定理を基礎とした磁気的ブリルアンゾーンも確認した。具体的な電子構造の計算には、これら磁気的プロッホの定理と磁気的ブリルアンゾーンを利用するのが有効である。テスト計算として、磁場下シリコン結晶の電子構造計算を行った。金属ではないがフェルミ準位近くのバンド構造のデータがたくさんあるためシリコン結晶を選んだ。具体的な計算手法は、強束縛近似法を採用した。磁気的プロッホ関数の影響で、エネルギー状態密度の磁場依存性にバタフライ型の周期構造が現れた。これは、磁場下二次元正方格子のエネルギー状態密度で有名なバタフライ構造と類似したものである。

24年度は、23年度考察済みの磁場下固体の並進対称性に加え、さらに相対論的效果も同時に考慮した強束縛近似法を開発した。相対論的な強束縛近似法の定式化は従来には無くさらに磁場印加の効果も同時に取り込んだ定式化はもちろん無かった。テスト計算としては、やはり磁場下シリコン結晶の電子構造計算を行った。相対論的效果によって、エネルギーバンドの縮退が解けてさらにゼーマン効果によるエネルギー分裂が確認できた。

25年度は、24年度で扱った相対論的效果をさらに精密化して計算手法に取り込んだ。24年度では、相対論的波動関数の小さい成分を適宜無視した近似的な扱いをした。すなわち24年度は一種の摂動論的な扱いをしてきた。25年度は、小さい成分の効果も取り込んだディラック方程式による磁場下強束縛近似法の定式化を行った。そして本手法を磁場下シリコン結晶に適用した。結果は24年度のもの修正する形ではあるが、近似の精度を考えれば最も信頼できる計算結果が得られたと思われる。23、24年度の結果と定性的には共通するものが多いが、以下の特徴が挙げ

られる：(a)磁場によりブリルアンゾーンが縮小(23年度の磁場下並進対称性の議論の成果)した全く新しいエネルギーバンド図が得られた。グラフの横軸として磁気的ブリルアンゾーンではなく磁場の大きさを選べば、特徴的なバタフライ構造が見られる。(b)相対論的效果によりエネルギーバンドの縮退が解けた。軌道およびスピンによるゼーマン分裂も確認できた。(c)磁場が大きくなるにつれてエネルギーバンドギャップが小さくなり、最終的には消失することが確認できた。

本手法を金属に用いれば、dHvA効果を第一原理の立場から再考することも可能となる。

### (3) 磁場下超伝導体のための静的CDFT

磁場下超伝導体は電流誘起系の典型例ではあるが、当初は研究計画に挙げていなかった。しかし、動的CDFTの開発や静的CDFTの整備を行う過程で、磁場下超伝導体も本研究課題(拡張された制限つき探索理論の電流誘起系への適用)の範囲内で十分手に届くことが分かり研究をスタートした。23年度は、最初の準備として有限温度のECS理論を開発した。

24年度は、スピン一重項そして重心座標依存性を無視した超伝導秩序変数を基本変数とする磁場下超伝導体の静的CDFTを開発した。具体的には、磁場下超伝導体の熱平衡状態を規定する二つの定理の証明の実行と、それを利用して有効一電子方程式を導出した。有効一電子方程式には交換相関エネルギー汎関数が含まれるが、その結合定数積分表示も導出した。この表式は厳密であり、常伝導状態のDFTやECS理論などの場合と同様に、近似形開発の確かな出発点を与えるものである。

24年度はスピン一重項のみの定式化であったが、25年度は、スピン三重項のみならず、一重項と三重項の混合した超伝導体や、さらには重心座標に依存したクーパー対を持つ超伝導体にも適用可能な理論を開発した。とくに後者の理論的拡張は、磁場下での超伝導状態、すなわち渦糸状態では重要である。さらに25年度の理論では、内部磁場の効果をあらわに取り込んだハミルトニアンを基礎にしている。「研究の方法」ですでに述べたように、磁場下超伝導体では渦糸状態やマイスナー効果を記述しなければならず、内部磁場の効果は決して無視できない。内部磁場も微視的なマクスウェル方程式を介してセルフコンシステントに決まる理論形式を開発した。

## 5. 主な発表論文等

[雑誌論文](計 15件)

1. K. Higuchi and M. Higuchi, Recent Development of the Pair Density Functional Theory, Quantum Matter, 査読有, 2014, in

- print. (**Review article**)
2. K. Higuchi and M. Higuchi, A Proposal of the Approximate Kinetic Energy Functional of the Pair Density Functional Theory, *J. Phys. Soc. Jpn.*, 査読有, 2014, in print.
  3. M. Higuchi and K. Higuchi, Pair Density Functional Theory, *Computational and Theoretical Chemistry* **1003**, 査読有, 2013, pp. 91-96. (**Review article**)
  4. K. Higuchi, D. B. Hamal, K. Yamamoto and M. Higuchi, Relativistic tight-binding approximation method for materials immersed in the magnetic field, *Trans. Mater. Res. Soc. Jpn.* **38**, 査読有, 2013, pp. 663-665.
  5. K. Higuchi and M. Higuchi, Checking the validity of the correlated Thomas-Fermi functional in the pair density functional theory, *J. Phys.: Conference Series.* **454**, 査読有, 2013, 012056/1-7.
  6. K. Higuchi and M. Higuchi, Scaling method of the pair density functional theory in combination with energy functionals satisfying the virial theorem: Checking the validity via atomic structure calculations, *Phys. Rev. A* **87**, 査読有, 2013, 032511/1-11.
  7. K. Higuchi, K. Koide, T. Imanishi and M. Higuchi, Current-Density Functional Theory for a Superconductor, *Int. J. Quantum Chem* **113**, 査読有, 2013, 709-714.
  8. K. Higuchi and M. Higuchi, Extension of the search region of pair densities by means of the scaling of the electron coordinates, *Journal of Physics: Conference Series* **400**, 査読有, 2012, 032019/1-4.
  9. K. Higuchi and M. Higuchi, Coupling-constant expression and exact relations for the kinetic energy functional in the pair density functional theory, *Phys. Rev. A* **85**, 査読有, 2012, 062508/1-10.
  10. M. Miyasita, K. Higuchi and M. Higuchi, An alternative scheme for calculating the unrestricted Hartree-Fock equation: application to the boron and neon atoms, *Physica B* **407**, 査読有, 2012, pp. 2758-2762.
  11. M. Miyasita, K. Higuchi and M. Higuchi, Self-consistent calculations of the atomic electron affinity and ionization energy with taking effects of the nonspherical distribution of electrons into account, *J. Mod. Phys.* **2**, 査読有, 2011, pp. 1161-165.
  12. M. Higuchi and K. Higuchi, Correction Method for obtaining the variationally best ground-state pair density, *Phys. Rev. A* **84**, 査読有, 2011, 044502/1-4.
  13. M. Miyasita, K. Higuchi and M. Higuchi, A Scheme for Calculating Atomic Structures beyond the Spherical Approximation, *J. Modern Phys.* **2**, 査読有, 2011, pp. 421-430.
  14. K. Higuchi and M. Higuchi, Exchange-Correlation Potentials of the CDFT in the Vorticity Expansion Approximation, *J. Phys. Soc. Jpn.* **80**, 査読有, 2011, SA123/1-3.
  15. M. Higuchi and K. Higuchi, Density Functional Approach for Calculating the Diagonal Elements of the Second-Order Reduced Density Matrix: Restrictive Conditions on the Kinetic Energy Functional, *J. Phys. Soc. Jpn.* **80**, 査読有, 2011, SA122/1-3.
- [学会発表](計 15件)
1. (**Invited**) M. Higuchi and K. Higuchi, Finite-Temperature Pair-Density Functional Theory, Collaborative Conference on Materials Research (CCMR) 2014, 23-27 June 2014, Seoul, South Korea.
  2. (**Invited**) K. Higuchi and M. Higuchi, Current-density functional theory for superconductors, Collaborative Conference on Materials Research (CCMR) 2014, 23-27 June 2014, Seoul, South Korea.
  3. M. Higuchi and K. Higuchi, Pair Density Functional Theory by means of the Scaling Method, 15th International Conference on Density Functional Theory and it's Applications, 9-13 September 2013, Durham, United Kingdom.
  4. K. Higuchi and M. Higuchi, Current-Density Functional Theory for Singlet Superconductors, 15th International Conference on Density Functional Theory and it's Applications, 9-13 September 2013, Durham, United Kingdom.
  5. K. Ichinose, H. Niwa, T. Imanishi, K. Higuchi and M. Higuchi, Current-Density Functional Theory for Superconductors Immersed in an External Magnetic Field, The International Conference on Strongly Correlated Electron systems (SCES) 2013, 5-9 August 2013, Tokyo, Japan.
  6. K. Higuchi, K. Ichinose and M. Higuchi, Reproduction of the Diagonal Element of the 2nd-Order Reduced Density Matrix via the Pair-Density Functional Theory, The International Conference on Strongly Correlated Electron systems (SCES) 2013, 5-9 August 2013, Tokyo, Japan.
  7. (**Invited**) M. Higuchi and K. Higuchi, Pair Density Functional Theory, Collaborative Conference on Materials Research (CCMR) 2013, 24-28 June 2013, Jeju Island, South Korea.
  8. K. Higuchi, K. Ichinose and M. Higuchi, Current-Density Functional Theory for the Singlet Superconductor Immersed in the Magnetic Field, Collaborative Conference on

Materials Research (CCMR) 2013, 24-28 June 2013, Jeju Island, South Korea.

9. K. Higuchi and M. Higuchi, Correction method of the pair density functional theory and its application to atomic structure calculations, Conference on Computational Physics (CCP2012), 15-18 Oct. 2012, Kobe, Japan.
10. M. Higuchi, K. Yamamoto and K. Higuchi, Relativistic tight-binding approximation method for materials applied by an external magnetic field and its application to silicon with vacancies, IUMRS-International Conference on Electronic Materials, 23-28 Sept. 2012, Yokohama, Japan.
11. K. Higuchi, T. Imanishi, K. Ichinose and M. Higuchi, Density functional scheme for superconductors applied by an external magnetic field, IUMRS-International Conference on Electronic Materials, 23-28 Sept. 2012, Yokohama, Japan.
12. K. Higuchi and M. Higuchi, An Effective Method to Extend the Search Region of Pair Densities in the Pair Density Functional Theory, 14th International Conference Density functional Theory in Chemistry, Physics and Biology, 29 Aug. – 2 Sept. 2011, Athens, Greece.
13. M. Higuchi and K. Higuchi, Exchange-Correlation Energy Functional of the Current-Density Functional Theory for Superconductors, 14th International Conference Density functional Theory in Chemistry, Physics and Biology, 29 Aug. – 2 Sept. 2011, Athens, Greece.
14. K. Higuchi and M. Higuchi, A proposal of the kinetic energy functional for the pair density functional theory, 26th International Conference on Low Temperature Physics, 10-17Aug. 2011, Beijing, China.
15. M. Higuchi, K. Koide, T. Imanishi and K. Higuchi, Current-Density Functional Theory for Superconductors, 26th International Conference on Low Temperature Physics, 10-17Aug. 2011, Beijing, China.

〔図書〕(計 1 件)

1. 樋口克彦、樋口雅彦他 21 名共著 (赤井久純、白井光雲編) シュプリンガー・ジャパン、密度汎関数理論の発展とマテリアルデザインへの応用、2011、27-39.

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

樋口 雅彦 (HIGUCHI, Masahiko)

信州大学・理学部・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