

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 29 年 6 月 19 日現在

機関番号：15401

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2014～2016

課題番号：26400397

研究課題名(和文) 超伝導臨界磁場と転移温度を予測する電流密度汎関数理論の開発

研究課題名(英文) Development of the current-density functional theory for superconductors that predicts the critical temperature and critical magnetic field

研究代表者

樋口 克彦 (Katsuhiko, Higuchi)

広島大学・先端物質科学研究科・准教授

研究者番号：20325145

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,300,000円

研究成果の概要(和文)：超伝導転移温度と臨界磁場を予測するために、磁場下超伝導体に対する「超伝導の電流密度汎関数理論」を構築した。磁場下超伝導体の熱平衡状態を特徴づける基本変数として、超伝導秩序変数、常磁性電流密度の横成分、電子密度が本理論では選ばれている。本理論に基づいて具体的に数値計算を実行するために必要不可欠な交換相関エネルギー汎関数の開発も行った。交換相関エネルギー汎関数の結合定数積分表示を与えた。さらに、オリジナルの密度汎関数理論における局所密度近似の考え方を参考に、BCS理論が良い近似になっている極限において正しくBCS理論におけるギャップが再現されるような交換相関エネルギー汎関数の近似形を開発した。

研究成果の概要(英文)：We construct the current-density functional theory for superconductors immersed in a magnetic field in order to predict both the critical magnetic field and critical temperature. The order parameter of the superconducting state, transverse component of the paramagnetic current-density, and electron density are chosen as basic variables that uniquely determine the equilibrium properties of the system. We also develop the approximate form of the exchange-correlation (xc) energy functional that is indispensable to perform actual calculations on the basis of the present theory. The rigorous expression of the xc-energy functional is derived using the technique of the coupling-constant integration. Furthermore, the approximate form of the xc energy functional is developed by requiring that the energy gap coincides with the BCS one in the limiting system where the results of the BCS theory are sufficiently satisfactory.

研究分野：物性理論

キーワード：超伝導 密度汎関数理論 臨界磁場 転移温度

1. 研究開始当初の背景

カマリング・オネスによる超伝導の発見以来、超伝導の性質を理解することは、物性物理学の主要な研究テーマの一つとなってきた。近年においても、さまざまな材料系での超伝導の発見や、さらにはさまざまなタイプの非BCS超伝導体の出現により、研究の裾野はますます広がってきている。超伝導の理論的研究は、超伝導の発現機構や現象を強調して表したモデルハミルトニアンによるものが主流となっている。しかしながら、超伝導の性質の定量的な理解のためにも、また、モデルハミルトニアンの裏づけという意味からも、第一原理的なアプローチは必要不可欠と考えられる。とくに、超伝導臨界磁場と転移温度の定量的な予測は、上述の第一原理理論の意義というだけでなく、工学的応用にも直結した極めて重要な研究事項である。

従来、超伝導に対する第一原理理論としては、オリベラらによる密度汎関数理論が代表的である。この理論は、さらに最近、電子格子相互作用も第一原理的に扱う方向に発展している。しかしながら、これらの理論は磁場を印加した超伝導体を扱っておらず、超伝導状態に対する磁場の効果（臨界磁場や渦糸状態など）を予測できるものではない。その他、エリアシュベルグ理論を基にした第一原理理論もあるが、こちらも磁場下の超伝導体に対する理論ではない。つまり、研究開始当初においては、外部磁場の効果を考慮した第一原理的な超伝導理論はなく、超伝導臨界磁場の計算例などももちろんない現状であった。

2. 研究の目的

上記の背景に基づき、本研究の目的を「超伝導臨界磁場と転移温度を定量的に予測する第一原理的な理論の開発を行うこと」とした。より具体的な目的として、

- (A) 磁場下超伝導体に対する超伝導オーダーパラメータを厳密な形で扱うことのできる第一原理的な理論の開発
 - (B) 臨界磁場と転移温度を定量的に計算するために必要不可欠な、磁場下超伝導体に対する交換相関エネルギー汎関数の近似形開発
 - (C) 磁場下超伝導状態を計算するための計算手法の開発とその適用
- として、研究を進めた。

3. 研究の方法

3.1 超伝導オーダーパラメータ

目的(A)を行うために、本研究ではまず磁場下超伝導体に対する超伝導オーダーパラメータについて議論した。ヤンによるフェルミ粒子のポーズ・アインシュタイン凝縮の定義(C. N. Yang, Rev. Mod. Phys. **34**, 694 (1962))は、それが起こったときにはマイスナー効果が生じることを示せるため、一般的な超伝導状態の定義と見なせる。本研究では

この定義に従って、スピン座標依存性と重心座標依存性を考慮した「超伝導オーダーパラメータ」を扱うことにした。従来、第一原理理論で扱われる超伝導オーダーパラメータは、スピン一重項を仮定したり、重心座標依存性を無視したりすることが多かったが、磁場下超伝導体のクーパ対の多様性(例えばFFLO超伝導や磁束の一部が超伝導体を貫く渦糸状態)を考慮して、さらには理論の今後の発展を考慮して、厳密な形の超伝導オーダーパラメータを基本変数とする理論の構築を行った。

3.2 超伝導の電流密度汎関数理論の定式化

磁場が印加された超伝導体には、マイスナー効果に伴う「電流密度」が存在する。さらに、上述のように超伝導オーダーパラメータが非一様であるという特徴がある。このような磁場下超伝導体の特徴づける「電流密度と超伝導オーダーパラメータ」を求める第一原理理論として、本研究では、近年我々が開発をした「拡張された制限つき探索理論」を磁場下超伝導体の場合に具体化させ、「超伝導の電流密度汎関数理論」を構築した。具体的には以下の二段階で構築した。

(1) 理論の拡張のための基本定理の証明
超伝導オーダーパラメータを含んだ基本変数と統計演算子が一対一対応するという定理と、基本変数に関する変分原理を証明する。

(2) 有効方程式の導出

「拡張された制限つき探索理論」や「常伝導の電流密度汎関数理論」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、超伝導オーダーパラメータを予言する有効方程式を導く。

3.3 磁場下超伝導体に対する交換相関エネルギー汎関数の近似形の開発

「超伝導の電流密度汎関数理論」に基づいて転移温度や臨界磁場を計算するためには、通常密度汎関数理論と同様に交換相関エネルギー汎関数の近似形が必要不可欠である。近似形開発には、一般的に、二つの戦略がある。一つは、交換相関エネルギー汎関数の結合定数積分表示を基礎にした近似形の開発である。超伝導の発現機構に関連した効果を明示的に取り込むことも可能であり、有効な近似形を開発できると期待できる。

もう一つの戦略は、交換相関エネルギー汎関数の満たすべき関係式を、近似形の制限条件として利用する方法である。こちらの戦略では、超伝導オーダーパラメータによる展開式が有効だと思われる。ゼロ次の項には、これも我々が開発した「常伝導の電流密度汎関数理論」のVEA表式がそのまま使える。

本研究では、高次の項を交換相関エネルギー汎関数の満たすべき関係式ではなく、オリジナルの密度汎関数理論における局所密度近似の考え方に沿って開発を行った。局所密度近似の考え方とは、一様な極限で正しく一

様電子液体の交換相関エネルギーを再現するような近似を開発しようというものである。この考え方を参考に、本研究では、BCS理論が良い近似になっている極限において、正しくBCS理論におけるギャップが再現されるような交換相関エネルギー汎関数の近似形の開発を行った。

3.4 磁場下超伝導状態を計算するための計算手法の開発とその適用

構築した「超伝導の電流密度汎関数理論」の有効性を確認するために、よく知られた金属（スピン一重項のBCS型）の超伝導臨界磁場と転移温度の数値計算を目指した。磁場を含んだ計算は複雑であるため、まず、磁場下常伝導物質の電子状態の計算方法を確立した後、それを利用して磁場下超伝導状態の計算を行うという二段階のステップで研究を遂行した。この常伝導状態を利用した「超伝導の電流密度汎関数理論」の有効方程式を解くという戦略は、ドジャンの近似法の応用と言えるものである。

4. 研究成果

4.1 超伝導オーダーパラメータ

超伝導状態は、ヤンによるフェルミ粒子のボーズ・アインシュタイン凝縮が生じた状態とみなせる。本研究では、このフェルミ粒子のボーズ・アインシュタイン凝縮の定義を用いて、

$$\Delta(\mathbf{r}_2\zeta_2, \mathbf{r}_1\zeta_1) = \langle \psi(\mathbf{r}_1\zeta_1)\psi(\mathbf{r}_2\zeta_2) \rangle \quad (1)$$

を超伝導オーダーパラメータとした。ここで、 $\psi(\mathbf{r}\zeta)$ は電子の場の演算子で、 \mathbf{r} は空間座標、 ζ はスピン座標である。また、 $\langle \dots \rangle$ は統計平均を表す。(1)式は、スピン分極した状態 $\varphi_{k_i\sigma_i}(\mathbf{r})\chi_{\sigma_i}(\zeta)$ 、およびその生成、消滅演算子を $C_{k_i\sigma_i}^\dagger, C_{k_i\sigma_i}$ とすると、

$$\begin{aligned} & \Delta(\mathbf{r}_2\zeta_2, \mathbf{r}_1\zeta_1) \\ &= \sum_{k_i} \sum_{k_j} \frac{\langle C_{k_i\uparrow} C_{k_j\uparrow} \rangle}{2} \begin{vmatrix} \varphi_{k_i\uparrow}(\mathbf{r}_1) & \varphi_{k_j\uparrow}(\mathbf{r}_1) \\ \varphi_{k_i\uparrow}(\mathbf{r}_2) & \varphi_{k_j\uparrow}(\mathbf{r}_2) \end{vmatrix} \chi_{\uparrow}(\zeta_1)\chi_{\uparrow}(\zeta_2) \\ &+ \sum_{k_i} \sum_{k_j} \frac{\langle C_{k_i\downarrow} C_{k_j\downarrow} \rangle}{2} \begin{vmatrix} \varphi_{k_i\downarrow}(\mathbf{r}_1) & \varphi_{k_j\downarrow}(\mathbf{r}_1) \\ \varphi_{k_i\downarrow}(\mathbf{r}_2) & \varphi_{k_j\downarrow}(\mathbf{r}_2) \end{vmatrix} \chi_{\downarrow}(\zeta_1)\chi_{\downarrow}(\zeta_2) \\ &+ \sum_{k_i} \sum_{k_j} \frac{\langle C_{k_i\uparrow} C_{k_j\downarrow} \rangle}{2} \begin{vmatrix} \varphi_{k_i\uparrow}(\mathbf{r}_1) & \varphi_{k_j\downarrow}(\mathbf{r}_1) \\ \varphi_{k_i\uparrow}(\mathbf{r}_2) & \varphi_{k_j\downarrow}(\mathbf{r}_2) \end{vmatrix} \\ & \quad \times \{ \chi_{\uparrow}(\zeta_1)\chi_{\downarrow}(\zeta_2) + \chi_{\downarrow}(\zeta_1)\chi_{\uparrow}(\zeta_2) \} \\ &+ \sum_{k_i} \sum_{k_j} \frac{\langle C_{k_i\uparrow} C_{k_j\downarrow} \rangle}{2} \{ \varphi_{k_i\uparrow}(\mathbf{r}_1)\varphi_{k_j\downarrow}(\mathbf{r}_2) + \varphi_{k_j\downarrow}(\mathbf{r}_1)\varphi_{k_i\uparrow}(\mathbf{r}_2) \} \\ & \quad \times \begin{vmatrix} \chi_{\uparrow}(\zeta_1) & \chi_{\downarrow}(\zeta_1) \\ \chi_{\uparrow}(\zeta_2) & \chi_{\downarrow}(\zeta_2) \end{vmatrix} \end{aligned} \quad (2)$$

と表すこともできる。ここで $\chi_{\sigma_i}(\zeta)$ はスピン

関数である。(2)式の第一項目から第三項目はスピン三重項成分、第四項目がスピン一重項成分である。このように本研究における超伝導オーダーパラメータは、超伝導状態をフェルミ粒子系のボーズ・アインシュタイン凝縮と見なしたときの凝縮した二粒子状態をその中に含んでいる。ゆえに、本研究で開発した「超伝導の電流密度汎関数理論」では超伝導転移温度や臨界磁場のみならず、ペアのスピン対称性や空間的な広がり・対称性も予言できるものになっている。

4.2 超伝導の電流密度汎関数理論の定式化

磁場下超伝導体の特徴づける「電流密度」と「超伝導オーダーパラメータ」を求める第一原理理論として、本研究では「拡張された制限つき探索理論」を用いて、「超伝導の電流密度汎関数理論」を構築した。系の熱平衡状態を記述する基本変数としては、電子密度 $n(\mathbf{r})$ 、常磁性電流密度の横成分 $\mathbf{j}_p^{(T)}(\mathbf{r})$ 、および上述の超伝導オーダーパラメータ $\Delta(\mathbf{r}_2\zeta_2, \mathbf{r}_1\zeta_1)$ とその複素共役 $\Delta(\mathbf{r}_2\zeta_2, \mathbf{r}_1\zeta_1)^*$ を選んだ。「拡張された制限つき探索理論」における普遍汎関数としては、有限温度に拡張された

$$\begin{aligned} & F[n, \mathbf{j}_p^{(T)}, \Delta, \Delta^*] \\ &= \text{Min}_{\hat{\rho} \rightarrow n, \mathbf{j}_p^{(T)}, \Delta, \Delta^*} \text{Tr} \left\{ \hat{\rho} (\hat{T} + \hat{W}_1 + \hat{W}_2) + \frac{1}{\beta} \hat{\rho} \ln \hat{\rho} \right\}, \end{aligned}$$

を新たに定義して、以下の基本定理を証明した。

- (1) 基本変数 $(n, \mathbf{j}_p^{(T)}, \Delta, \Delta^*)$ と統計演算子の間には一対一の対応関係が存在する。
 - (2) ギブスの変分原理は、基本変数に関する変分原理に書き換えることができる。
- これらの定理は、オリジナルの密度汎関数理論におけるホーヘンベルグ・コーンの定理の拡張になっている。

熱平衡状態における基本変数 $(n_0, \mathbf{j}_{p0}^{(T)}, \Delta_0, \Delta_0^*)$ を再現する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、を予言する有効方程式を導いた。以下に結果だけ記す。

$$\begin{aligned} & (h_s^i - \mu)u_i(\mathbf{r}\zeta) + \int \tilde{D}_s(\mathbf{r}\zeta, \mathbf{r}'\zeta')v_i^*(\mathbf{r}'\zeta')d^3r'd\zeta' \\ & \quad = E_i u_i(\mathbf{r}\zeta), \\ & -(h_s^i - \mu)v_i(\mathbf{r}\zeta) - \int \tilde{D}_s(\mathbf{r}\zeta, \mathbf{r}'\zeta')u_i^*(\mathbf{r}'\zeta')d^3r'd\zeta' \\ & \quad = E_i v_i(\mathbf{r}\zeta). \end{aligned} \quad (3)$$

ここで、

$$h_s^i = \frac{1}{2m} \{ \mathbf{p} + e\mathbf{A}_s(\mathbf{r}) \}^2 + V_s(\mathbf{r}),$$

$$\tilde{D}_s(\mathbf{r}\zeta, \mathbf{r}'\zeta') = D_s(\mathbf{r}\zeta, \mathbf{r}'\zeta') - D_s(\mathbf{r}'\zeta', \mathbf{r}\zeta),$$

$$V_s(\mathbf{r}) = v_{\text{given}}(\mathbf{r}) + e^2 \int \frac{n_0(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3 r' + \frac{e^2}{2m} \left\{ A_{\text{given}}^2(\mathbf{r}) - A_s^2(\mathbf{r}) \right\} + \frac{\delta F_{xc}[n, \mathbf{j}_p^{(T)}, \Delta, \Delta^*]}{\delta n(\mathbf{r})} \Bigg|_{\substack{n=n_0 \\ j_p^{(T)}=j_{p0}^{(T)} \\ \Delta=A_0 \\ \Delta^*=A_0^*}}$$

$$A_s(\mathbf{r}) = A_{\text{given}}(\mathbf{r}) + \frac{1}{e} \frac{\delta F_{xc}[n, \mathbf{j}_p^{(T)}, \Delta, \Delta^*]}{\delta \mathbf{j}_p^{(T)}(\mathbf{r})} \Bigg|_{\substack{n=n_0 \\ j_p^{(T)}=j_{p0}^{(T)} \\ \Delta=A_0 \\ \Delta^*=A_0^*}}$$

$$D_s^*(\mathbf{r}\zeta, \mathbf{r}'\zeta') = \frac{\delta F_{xc}[n, \mathbf{j}_p^{(T)}, \Delta, \Delta^*]}{\delta \Delta(\mathbf{r}\zeta, \mathbf{r}'\zeta')} \Bigg|_{\substack{n=n_0 \\ j_p^{(T)}=j_{p0}^{(T)} \\ \Delta=A_0 \\ \Delta^*=A_0^*}}$$

$$D_s(\mathbf{r}\zeta, \mathbf{r}'\zeta') = \frac{\delta F_{xc}[n, \mathbf{j}_p^{(T)}, \Delta, \Delta^*]}{\delta \Delta^*(\mathbf{r}\zeta, \mathbf{r}'\zeta')} \Bigg|_{\substack{n=n_0 \\ j_p^{(T)}=j_{p0}^{(T)} \\ \Delta=A_0 \\ \Delta^*=A_0^*}}$$

である。上式中に現れる $F_{xc}[n, \mathbf{j}_p^{(T)}, \Delta, \Delta^*]$ が本理論における交換相関エネルギー汎関数である。これについては、次節で素の近似形開発について述べる。

熱平衡状態における基本変数 $(n_0, \mathbf{j}_{p0}^{(T)}, \Delta_0, \Delta_0^*)$ は、有効方程式(3)式の解を用いて、

$$n_0(\mathbf{r}) = \sum_i f(E_i) \int |u_i(\mathbf{r}\zeta)|^2 d\zeta + \sum_i \{1 - f(E_i)\} \int |v_i(\mathbf{r}\zeta)|^2 d\zeta,$$

$$\mathbf{j}_{p0}^{(T)}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{i4\pi m} \sum_i [f(E_i) \times \int \{ \nabla_r u_i^*(\mathbf{r}'\zeta') \times \nabla_r u_i(\mathbf{r}'\zeta') \} \times \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} d^3 r' d\zeta + \{1 - f(E_i)\} \times \int \{ \nabla_r v_i^*(\mathbf{r}'\zeta') \times \nabla_r v_i(\mathbf{r}'\zeta') \} \times \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} d^3 r' d\zeta]$$

$$A_0(\mathbf{r}\zeta, \mathbf{r}'\zeta') = \sum_i [u_i(\mathbf{r}'\zeta') v_i(\mathbf{r}\zeta) \{1 - f(E_i)\} + v_i(\mathbf{r}'\zeta') u_i(\mathbf{r}\zeta) f(E_i)],$$

$$A_0^*(\mathbf{r}\zeta, \mathbf{r}'\zeta') = \sum_i [u_i^*(\mathbf{r}'\zeta') v_i^*(\mathbf{r}\zeta) \{1 - f(E_i)\} + v_i^*(\mathbf{r}'\zeta') u_i^*(\mathbf{r}\zeta) f(E_i)],$$

で再現される。ここで $f(E_i)$ はフェルミ・ディラックの分布関数である。

以下に本理論の特徴を列挙する。

- (1) Δ_0 (または Δ_0^*) が消失する温度および外部磁場の大きさから、転移温度と臨界磁場、および消失するときの電流密度から臨界電流の予言も可能となる。
- (2) 電流密度を予言することができるため、

マイスナー効果の直接的記述が可能となる。

- (3) 臨界磁場と臨界電流の関係 (Silsbee の法則) を議論できる。
- (4) Δ_0 の空間分布から、ペアのスピン対称性や空間的分布を解析できる。
- (5) Δ_0 の重心座標依存性から、渦糸状態を解析できる。

4.3 交換相関エネルギー汎関数の近似形の開発

本研究では、「超伝導の電流密度汎関数理論」による具体的な数値計算に必要な不可欠な交換相関エネルギー汎関数の近似形についても開発を進めた。本研究では、交換相関エネルギー汎関数の結合定数積分表示を与えた。この結合定数積分表示は、常伝導の電流密度汎関数理論の場合の近似形開発と同様に、様々な近似形の良い出発点を与えると期待される。

また、本研究では交換相関エネルギー汎関数の近似形を、超伝導オーダーパラメータで展開した形で開発した。ゼロ次の項には、我々のグループで開発した「常伝導の電流密度汎関数理論」の VEA 表式をそのまま用いた。高次の項については、BCS 理論が良い近似になっている極限において、正しく BCS 理論におけるギャップが再現されるような交換相関エネルギー汎関数の近似形を開発した。例えば、本研究で開発したスピン-重項の超伝導の場合に対する高次の項は、結果だけ記すと、

$$E_{xc}^S[n, \mathbf{j}_p^{(T)}, \Delta, \Delta^*] = \frac{1}{2} \int \langle \zeta | \sigma_y | \zeta' \rangle D_{s_2, \tau_4}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \Delta^*(\mathbf{r}\zeta, \mathbf{r}'\zeta') d^3 r d\zeta d^3 r' d\zeta' + \frac{1}{2} \int \langle \zeta | \sigma_y | \zeta' \rangle D_{s_2, \tau_4}^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \Delta(\mathbf{r}\zeta, \mathbf{r}'\zeta') d^3 r d\zeta d^3 r' d\zeta',$$

$$D_{s_2, \tau_4}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = w_i(\mathbf{r}) w_i(\mathbf{r}') \left\{ 2\hbar \omega_D e^{-\frac{1}{v_0 N(0)}} \right\},$$

である。ここで、 ω_D と $N(0)$ はデバイ周波数とフェルミエネルギーにおける状態密度、また $w_i(\mathbf{r})$ は磁場下常伝導状態の電子状態である。このような近似形はこれまでに例がなく、本研究が初めてである。

4.4 磁場下超伝導状態を計算するための計算手法の開発とその適用

本研究では、常伝導状態を利用して「超伝導の電流密度汎関数理論」の有効方程式 ((3) 式) を解くという戦略 (ドジャンの近似法の応用) で理論の検証を目指した。本研究では、磁場下金属の常伝導状態における電子状態計算手法 (磁場を含んだ相対論的強束縛近似法、いか MFRTB 法) の開発を行った。本手法は一樣磁場下固体中の電子に対する一粒子方程式を近似的に解く手法であり、様々な物

質に適用可能である。

本手法の有用性を確認するために、磁場下結晶シリコンに MFRTB 法を適用した。その結果、磁場下結晶シリコンの電子構造は、磁場によって収縮した磁氣的ブリルアンゾーン内の特徴的な構造 (図 1) を有することが明らかとなった。また、磁場と垂直な平面内の波数ベクトルに対するエネルギーの磁場依存性は、いわゆるバタフライダイアグラムと呼ばれる繰り返し構造を有することも明らかにした。

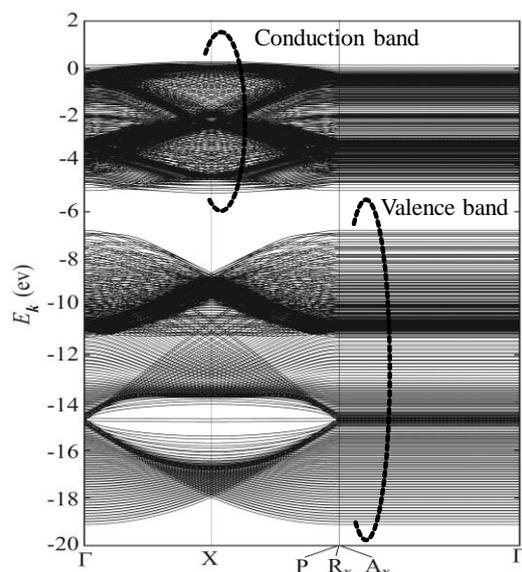


図 1. 磁場下シリコンの電子構造。横軸は磁氣的ブリルアンゾーン内の点。

さらに、単純立方格子に s 電子が 1 つ配置された磁場下金属のドハース・ファンアルフェン効果を、MFRTB 法を用いて再考した。常伝導状態の金属で観測されるドハース・ファンアルフェン効果が再現できることを数値計算により実証し、本手法の有効性を確認した。また、従来のリフシツ・コセビッチ理論 (LK 理論) と MFRTB 法の結果を比較することで、LK 理論は実験室レベルの磁場強度 (9.8T-45.7T) では良い近似になっていることが示された。さらに、MFRTB 法により、LK 理論では予見できない振動が超強磁場領域で生じる可能性があることがわかった。この振動は、MFRTB 法で明らかにされたエネルギーバンドの微細構造が原因である。

このように、ドジャンの近似法を応用して有効方程式 (3) を解くために必要な常伝導状態の計算手法として MFRTB 法を開発し、その有効性を確認できた。

4.5 「粒子数ゆらぎ」を基本変数に選んだ第一原理超伝導理論

当初の計画にはなかったが、「粒子数ゆらぎ」を上述の超伝導の秩序変数の代わりに使用する超伝導理論の検討も行った (J. Phys.

Soc. Jpn. **86**, 064704/1-11 (2017))。「粒子数ゆらぎ」は、既に開発済の「有限温度の対密度汎関数理論」で扱うことが可能であるため、これまでに対密度汎関数理論で開発した様々な計算方法や近似形が利用できるメリットがある。

5. 主な発表論文等

[雑誌論文] (計 7 件)

1. 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.

2. 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

3. 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

4. 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

5. 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

6. 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

7. 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

[学会発表] (計 10 件)

1. (招待講演) M. Higuchi, A density functional approach for the superconductor, EMN Meeting

on Computation and Theory 2017 (Dubai, United Arab Emirates, Nov.7-9, 2017). 発表確定

2. (招待講演) K. Higuchi, Energy-band calculations of materials immersed in the magnetic field, EMN Meeting on Computation and Theory 2017 (Dubai, United Arab Emirates, Nov.7-9, 2017). 発表確定

3. (招待講演) 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 (Seoul, South Korea, June 20-24 2016).

4. (招待講演) K. Higuchi and M. Higuchi, Pair-Density Functional Theory for Superconductors, Collaborative Conference on 3D and Materials Research (CC3DMR) 2016 (Seoul, South Korea, June 20-24 2016).

5. 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) (Boston, USA, August 9-15, 2014).

6. K. Higuchi, D. B. Hamal and M. Higuchi, Electronic structure calculations for materials immersed in a uniform magnetic field via the relativistic tight-binding approximation method, Conference on Computational Physics (CCP2014) (Boston, USA, August 9-15, 2014).

7. D. B. Hamal, M. Higuchi and K. Higuchi, Relativistic tight-binding approximation method for Bloch electrons in the uniform magnetic field and its application to silicon with vacancies, The 15th IUMRS-International Conference in Asia (Fukuoka, Japan, August 24-30, 2014).

8. 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 (Fukuoka, Japan, August 24-30, 2014).

9. M. Higuchi and K. Higuchi, Finite temperature pair-density functional theory, 招待講演, Collaborative Conference on Materials Research (CCMR) 2014 (Seoul, South Korea, 6/23-6/27 2014).

10. K. Higuchi and M. Higuchi, Current-density functional theory for superconductors, 招待講演, Collaborative Conference on Materials Research

(CCMR) 2014 (Seoul, South Korea, 6/23-6/27 2014).

〔図書〕 (計 0 件)
なし

〔産業財産権〕

○出願状況 (計 0 件)
なし

○取得状況 (計 0 件)
なし

〔その他〕
ホームページ等

<http://home.hiroshima-u.ac.jp/khiguchi/>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

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

(2) 研究分担者

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

(3) 連携研究者

なし

(4) 研究協力者

なし