

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 27 年 6 月 8 日現在

機関番号：12601

研究種目：新学術領域研究(研究領域提案型)

研究期間：2010～2014

課題番号：22104011

研究課題名(和文) 第一原理系励起状態の多体論と高転移温度超伝導物質デザイン

研究課題名(英文) Many-Body Theory for Excited States in First-Principles Systems and Materials Design for High-Tc Superconductors

研究代表者

高田 康民 (TAKADA, Yasutami)

東京大学・物性研究所・教授

研究者番号：00126103

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 45,100,000円

研究成果の概要(和文)：グリーン関数法と拡散モンテカルロ法を用いて、物性物理、その中でも主に第一原理系での量子多体問題を、物質よりも新概念や新現象の発見、密度汎関数理論における新近似手法の開発に重点を置きながら研究した。特に、電子ガス中の1陽子問題を重点テーマとして研究し、この系が中間金属密度領域で近藤温度が1,000Kを超える近藤シングレット状態を形成することを見出した。これから、当該密度領域の水素合金は高温超伝導体になり得ることを示唆した。また、ごく低密度の金属は有効質量がごく小さくなる相に普遍的に転移する可能性を見出した。

研究成果の概要(英文)：By employing the Green's-function method and diffusion Monte Carlo simulations, we have studied quantum many-body problems in condensed matter physics, based primarily on the first-principles Hamiltonian from a perspective of pursuing new concepts, new phenomena, and new methodologies in the density functional theory rather than investigating materials properties. Special attention is paid to the system of a single proton embedded in the electron gas to reveal that a Kondo spin-singlet resonance state emerges in the intermediate densities with the Kondo temperature well beyond 1,000K, indicating that a room temperature superconductor might be obtained, if protons are introduced into a metal with an appropriate density in a regular array to form a Kondo lattice system. We also find a possibility of the universal transition into a phase with a very small effective mass at very low densities.

研究分野：数物系科学

キーワード：物性理論 計算物理 超伝導材料・素子 強相関電子系 金属物性 第一原理計算 超伝導 転移温度

## 1. 研究開始当初の背景

一般に、第一原理計算といえば、第一原理のハミルトニアン  $H_{FP}$  を出発点にして密度汎関数理論(DFT) やその時間依存版(TDDFT) に対する既存近似手法 (あるいは、それらを漸次改良した手法) を用いて、スパコンを駆使しながら、個々の物質 (あるいは、物質群) の物性を微視的に研究するものである。しかし、欧米では、このような数値計算に頼る応用研究だけでなく、DFT や TDDFT の基礎理論を、解析的研究も深化させつつ、開発・発展させる努力が地道に続いていた。

一方、多体理論の分野では、各物理現象を適切に記述するモデル・ハミルトニアン  $H_{model}$  から出発し、それを通して多体相関の物性を論じることが長らく国内外ともに主流であった。しかし、 $H_{model}$  に含まれる現象論的なパラメータを DFT で第一原理的に決定して、より現実物質に即して強相関の多体理論を展開する試みが漸次広まっていた。

## 2. 研究の目的

以上の状況を鑑みて、「第一原理からの多体問題」というテーマを掲げて、強力な多体理論手法であるグリーン関数法、および、量子モンテカルロ法を  $H_{model}$  を介さずに直接的に  $H_{FP}$  に適用して第一原理系の多電子問題を、基底状態・励起状態を問わず、忠実に解くこと、そして、それを通して DFT や TDDFT の発展にも資することを目指す。

その際、 $H_{FP}$  を出発点にするものの、第一原理系の多体問題を物質よりも概念や現象、手法に重点を置く次の観点から研究する。

(1) $H_{model}$  を通して確立された物理概念、例えば、不純物アンダーソン模型における近藤問題の物理や朝永・ラッティンジャー流体でのスピン・電荷分離、を  $H_{FP}$  から出発して再検証し、概念の深化と新概念の発見を目指す。(2)DFT の立場では、物質の多様性は電子系に働く一体ポテンシャルの違いに起因し、多電子効果の根源は全て電子ガス系のハミルトニアン  $H_{EG}$  中に普遍的に存在することになる。そこで、 $H_{EG}$  に含まれる物理現象を基底状態や励起状態の別なく調べあげ、新現象の発見を目指す。同時に、DFT における交換相関エネルギー汎関数  $E_{xc}[n(\mathbf{r})]$  の改良・発展を行う。(3)上で挙げたような基礎理論上の問題だけに終始せず、新概念・新手法を追求する研究を通して、高い超伝導転移温度  $T_c$  を持つ新規物質 (群) の具体的な提案も目的とする。

## 3. 研究の方法

研究の遂行上、具体的な重点研究テーマとして、次の2つを掲げた。

(1)電子ガスに埋め込まれた1原子系:これは

近藤問題における物理の第一原理的解明、局所密度近似(LDA)を超える  $E_{xc}[n(\mathbf{r})]$  の改良、室温超伝導体の提案という前項目的(1)-(3)の全てに関わる重要で興味深いテーマである。ちなみに、もし 1,000K を超える高い近藤温度  $T_K$  を持つ新規近藤系が発見されれば、それを基に作られる近藤格子系では (重い電子系における実験を参照すれば、) スピン揺らぎ機構で  $T_c \sim T_K/10$  の超伝導が期待されることになる。なお、このテーマで主に用いられる理論手法は拡散モンテカルロ法(DMC)である。

(2)GWT法の発展とそれを駆使した新概念の発見:GWT法は場の量子論における非摂動的アプローチで、電子の自己エネルギーを自己無撞着に計算する手法であり、原理的には厳密解を、実際には十分精度の高い近似解を与えるものである。しかも、これは同一の枠組みでフェルミ流体にもラッティンジャー流体を含む非フェルミ流体にも適用できるものである。これを1次元電子系や3次元低密度電子系に適用して多体問題における新概念の発見を目指すとともに、いわゆるGW近似に対する上位互換手法とも考えられるGWT法自体の普及をはかることを目指す。

この他、軽元素、特に、炭素やホウ素、が主役になっている超伝導体について、実験と深く関わりながら、物質に即してその超伝導機構の解明や  $T_c$  上昇のための提案を行うことを目指す。ここで、 $T_c$  の定量的評価はエリアシュバーク理論における  $G_0W_0$  近似以下のギャップ方程式を数値的に解いてなされる。

## 4. 研究成果

(1)電子ガス中の一陽子系:超高近藤温度系の発見 (高田・前園・吉澤)

不純物点電荷  $+Ze$  に対する金属遮蔽においてデバイ・ヒュッケル理論以来の誘電電荷共鳴という概念が一般的であるが、 $Z$  が奇の正整数では近藤スピン共鳴と電荷共鳴の競合が問題になることを初めて指摘し、具体的に  $Z=1$  の陽子を電子ガス系に挿入した場合の近藤スピン共鳴状態の出現条件 (図 1) と出現時の近藤温度  $T_K$  を LDA 計算と DMC 計算を組み合わせ定量的に決定した。

この結果は金属遮蔽におけるパラダイムシフトの発見といえるが、同時に、重い電子系の物理において近藤格子系では約  $T_K/10$  の温度での超伝導出現が周知の事実であることから、陽子が最も安定的に挿入され、 $T_K \sim 2,000K$  である電子密度径数  $r_s \sim 4$  の状態でマクロな数の陽子が規則的に挿入されると室温超伝導が望みうる。これは超高压下で  $r_s < 4$  である固体水素や  $H_2S$  と違って、常圧下の水素合金での高温超伝導発見への期待につながるものである。

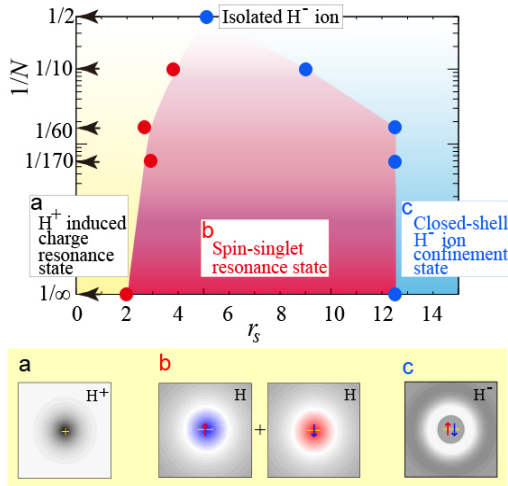


図 1. 1 陽子挿入電子ガス系の基底状態相図。横軸は電子密度径数  $r_s$ 、縦軸は全電子数  $N$ 。高密度領域 **a** では裸の陽子  $H^+$  が誘電遮蔽された状態、低密度領域 **c** では負水素イオン  $H^-$  が閉じ込められた状態、中間密度領域 **b** では近藤シングレット共鳴状態が現れる。各領域間の転移はシャープである。

#### (2) 電子正孔対称二層膜系での励起子相と励起子分子相 (前園)

半導体二層膜における電子正孔系の励起子モット転移の問題に関連して、密度行列を通した対凝縮密度や対分布関数を DMC 計算することによって、電子正孔対称系における大域的な相図の  $T=0$  での様相が明らかにされた。特に、層間距離  $d$  が小さい場合、電荷密度が小さくなる（密度径数  $r_s$  が大きくなる）につれて、電子正孔プラズマ相から励起子気体相、そして、励起子分子気体相への逐次連続転移がみられたが、 $d$  が大きくなるにつれて励起子分子気体相や励起子気体相がみられなくなり、最終的に 2 次元極限で期待されている電子あるいは正孔それぞれの気体相からウィグナー固体相への直接的な転移となる。

#### (3) スピン電荷分離から自由電子描像への変遷：1 次元電子系での擬電子概念の発見 (前橋・高田)

1 次元電子系では、高励起状態で成り立つ自由電子描像とそれが全く破綻する低励起状態での電荷スピン分離描像の相互関係・相互変遷の詳細が興味深い。これは一電子スペクトル関数  $A(\mathbf{p}, \omega)$  を波数  $\mathbf{p}$  やエネルギー  $\omega$  を広範囲に変化させて調べればよいが、今回、1 次元電子系でペーテ仮説法と GWF 法を組み合わせ  $A(\mathbf{p}, \omega)$  を初めて定量的に計算した。その結果、低励起状態では電荷とスピンの自由度が分離することに伴うスピノンとホロ

ンというボゾン励起が  $A(\mathbf{p}, \omega)$  に主ピーク構造を与えるが、同時に、この系の本質的な素励起としてスピノンとホロンの衣をまとった擬電子励起の副構造を発見した。この擬電子概念に対応する構造は高励起状態では主ピークに成長していくこと (図 2) から、この新概念を通して、スピン電荷分離から自由電子へという定性的に異なる 2 つの描像間の変遷の全容が明らかにされた。

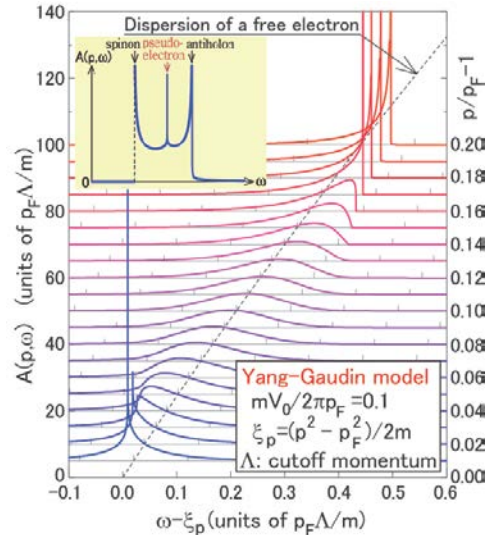


図 2. ラッティンジャー流体 (Yang-Gaudin 模型) での一次元スペクトル関数  $A(\mathbf{p}, \omega)$ 。擬電子に対応するピークの変遷を描いている。挿入図はフェルミ点近傍のスペクトル関数の全体像を示す。

#### (4) ホウ素、硬い半導体における高 $T_c$ 超伝導物質の探索 (白井)

軽い半導体は固いものも多く、十分なドーピングが達成され金属化されるならば、フォノン媒介機構によっても  $T_c$  が 50K を上回る超伝導出現の可能性はある。そのような硬い半導体であるホウ素を用いた新たな超伝導体の物質探索を行ってきた。その際の基本的な方策は 3 つあって、それらは、高圧、ドーピング、化合物化である。まず、第 1 の方策では、 $\alpha$  相のホウ素に対して温度・圧力相図を第一原理計算で作成して、それに基づいて高圧下での超伝導出現を予言した。その後、実際に 160GPa で  $T_c \sim 6K$  の超伝導出現が実験的に確かめられた。第 2 の方策としては、常圧  $\alpha$  相のホウ素に対してもドーピングで同じような  $T_c$  の超伝導出現を予言していたが、最近、実際に Li をドーピングすることで実験的に  $T_c \sim 5K$  の超伝導が得られた。第 3 の方策では、以前、 $B_{13}C_2$  で金属化と同時に  $T_c \sim 40K$  が出現するとの期待があったが、実際の実験ではうまくいかなかった。この実験と理論の違いは  $B_{13}C_2$  の中に  $B_4$  の構造ユニットが生成されて

絶縁化するためであることを明確にした。そして、このような困難を乗り越えた上で金属化とその先になる超伝導出現を可能にする方法の考察を行っている。

#### (5) 低密度電子ガス系における「軽いフェルミオン」問題 (高田・前橋)

金属中の多電子系の本質を捉えて簡単化したものとして電子ガス模型がある。これは金属電子の性質を大まかに捉える際に有益であるが、同時に、 $a_0 p_F \ll 1$  ( $a_0$ : 格子定数、 $p_F$ : フェルミ波数) の低密度極限では、第一原理のハミルトニアンがこの模型のそれに収束するという意味で低密度金属全般を普遍的に記述する重要な模型でもある。今回、運動量分布関数  $n(\mathbf{p})$  に関して、全電子数や全運動エネルギーなどの総和則に加えて、新たに全運動エネルギーの揺らぎの総和則を発見すると同時に、これら3つの総和則すべてを満たす高精度の  $n(\mathbf{p})$  を密度径数  $r_s$  が20を超える領域まで求めることが出来た (図3)。そして、 $r_s \approx 20$  近傍で  $n(\mathbf{p})$  の定性的な振る舞いの変化を見出し、新規相転移の示唆を得た。なお、同じ密度近傍では、フェルミ面での有効質量  $m^*$  がゼロに近づくこと (軽いフェルミオンの出現) も見出され、これが新規相の特徴である。ちなみに、 $m^* \approx 0$  の出現は電子正孔励起がほぼゼロの励起エネルギーで生成されて長距離クーロン斥力の誘電遮蔽が有効でなくなったためと考えられる。

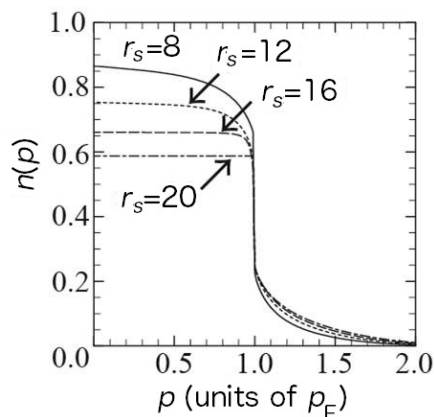


図3: 低密度電子ガスでの運動量分布関数  $n(\mathbf{p})$ 。  $r_s \approx 20$  では  $p < p_F$  で  $n(\mathbf{p})$  は平坦になり、新規相転移の出現を示唆する。

#### (6) 黒鉛層間化合物での超伝導: BaC<sub>6</sub> の場合 (高田・櫻井)

最近、東北大の谷垣グループが BaC<sub>6</sub> において  $T_c \approx 65\text{mK}$  の超伝導を発見した。これはエリアシュバーク理論や超伝導密度汎関数理論で以前に予言されていた  $T_c \approx 0.23\text{K}$  よりもずっと低いものであったが、高田が提出している「黒鉛層間化合物での超伝導における標準模型」では自然に説明できるものである。

特に、超伝導を担うグラファイト層間バンドのフェルミ面の形状が重要で、CaC<sub>6</sub>での球面形に比べて、グラファイトの層間距離  $d$  が大きくなってブリルアン帯が小さくなる BaC<sub>6</sub> では  $c$  軸方向でフェルミ面が切断されて標準模型からの解離が生じていて、そのため、 $T_c$  が理想的な値から低下している。また、標準模型の立場からは Ba のコア分極効果が大変大きいことも  $T_c$  低下の一因となっている。

#### (7) 強誘電量子相転移近傍の超伝導: $n$ 型 SrTiO<sub>3</sub> の場合 (櫻井・高田)

STO は強誘電量子相転移近傍の超伝導が見られるものとして長い研究の歴史があるが、最近、ESPCI パリテクの Behnia のグループは  $5 \times 10^{17}\text{cm}^{-3}$  という極度に低い電子密度  $n$  (フェルミエネルギーは 10K 程度) の試料を作成し、それが予想以上に高い  $T_c$  を持つことを示した。そして、これは酸素欠損型のドーピングによる STO であり、その  $T_c$  と  $n$  の関係はより高濃度の Nb 置換型ドーピングのそれとは違うことを見出した。これらの違いは以前に高田が提出していた模型で超伝導電子の有効質量  $m^*$  と媒介となる強誘電変位フォノンのエネルギー分散の違いを考慮すれば、定量的に説明できることが分かった。

#### (8) 関連のある $E^*e$ ヤーンテラー系での超伝導 (堀・前橋・高田)

まず、結晶全体で  $E^*e$  の軌道対称性が保たれる系を理想  $E^*e$  ヤーンテラー結晶と定義し、それを記述するモデル・ハミルトニアンを導入した。それは軌道対称性を保ったままでホッピングする運動エネルギー項、軌道内・軌道間、及び、フロント結合や対ホッピングを含む局所的なクーロン斥力項、そして、ヤーンテラー結合する電子フォノン相互作用項で構成される。このハミルトニアンを解くと、電荷揺らぎ、スピンゆらぎ、軌道揺らぎなどの電子機構と共にフォノンを交換する引力機構が働く複雑な様相を示す。しかし、軌道対称性が保たれる場合、群論的な考察からギャップ関数やギャップ方程式をきれいに整理できて、見通しがよくなる。その結果、フォノン機構とスピン揺らぎ機構、そして、多バンド系の特徴である軌道揺らぎ機構が協奏して新規のエキゾチックな超伝導 ( $E$  表現のカイラル  $p$  波対) が形成されることが分かった。ところで、現実物質はこのような理想ヤーンテラー結晶ではないので、次に、この理想ヤーンテラー結晶からのずれの超伝導への影響を調べたところ、鉄系の場合は超伝導に有利に働くが、バナジウム系では不利になることが示唆されたが、これは多くの実験が教えるところと一致するように見える。

#### 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 (計 58 件)

- ① K. Shirai, K. Sakuma, and N. Uemura, “Theoretical study of the structure of boron carbide  $B_{12}C_2$ ”, Phys. Rev. B、査読有、90 巻、2014、064109:1-10  
DOI:10.1103/PhysRevB.90.064109
- ② H. Maebashi and Y. Takada, “Structural evolution of the one-dimensional spectral function from the low- to the high-energy limit”, Phys. Rev. B、査読有、89 巻、2014、201109(R):1-4  
DOI:10.1103/PhysRevB.89.201109
- ③ A.J. Misquitta, R. Maezono, N.D. Drummond, A.J. Stone, and R.J. Needs, “Anomalous non-additive dispersion interactions in systems of three one-dimensional wires”, Phys. Rev. B、査読有、89 巻、2014、045140:1-9  
DOI:10.1103/PhysRevB.89.045140
- ④ K. Shirai, “Prediction of Phase Diagrams for Hard Materials - application to boron crystals -”, Int. J. Thermophysics、査読有、35 巻、2014、1888-1899  
DOI 10.1007/s10765-013-1406-2
- ⑤ R. Maezono, P. L. Rios, T. Ogawa, and R.J. Needs, “Excitons and biexcitons in symmetric electron-hole bilayers”, Phys. Rev. Lett.、査読有、110 巻、2013、216407:1-5  
DOI: PhysRevLett.110.216407
- ⑥ C. Hori, H. Maebashi, and Y. Takada, “Superconductivity in a Correlated  $E\otimes e$  Jahn-Teller System”, J. Superconductivity and Novel Magnetism、査読有、25 巻、2012、1369-1373  
DOI:10.1007/s10948-012-1518-0
- ⑦ M. Abbasnejad, E. Shojaei, M. R. Mohammadzadeh, M. Alaei, and R. Maezono, “Quantum Monte Carlo Study of High-Pressure Cubic  $TiO_2$ ”, Appl. Phys. Lett.、査読有、100 巻、2012、261902:1-4  
DOI: 10.1063/1.4730608
- ⑧ K. Shirai and N. Uemura, “Why does a metal get an insulator? -- Consequences of unfilled bands on boron crystals --”, Solid State Sciences、査読有、14 巻、2012、1609-1616  
DOI:10.1016/j.solidstatesciences.2012.03.008
- ⑨ H. Zheng and Y. Takada, “Importance of counter-rotating coupling in the superfluid-to-Mott-insulator quantum phase transition of light in the Jaynes-Cummings lattice”, Phys. Rev. A、査読有、84 巻、2011、043819: 1-8  
DOI:10.1103/PhysRevA.84.043819
- ⑩ H. Maebashi and Y. Takada, “Analysis of exact vertex function for improving on the GW scheme for first-principles calculation of electron self-energy”, Phys. Rev. B、査読有、84 巻、

2011、245134: 1-13

DOI:10.1103/PhysRevB.84.245134

- ⑪ Y. Kita, R. Maezono, M. Tachikawa, M. Towler, and R.J. Needs, “Ab initio quantum Monte Carlo study of the binding of a positron to alkali-metal hydrides”, J. Chem. Phys.、査読有、135 巻、2011、054108:1-5  
DOI: 10.1063/1.3620151
- ⑫ K. Shirai, H. Dekura, Y. Mori, Y. Fujii, H. Hyodo and K. Kimura, “Structural study of  $\alpha$ -boron at high pressure”, J. Phys. Soc. Jpn.、査読有、80 巻、2011、084601: 1-13  
DOI: 10.1143/JPSJ.80.084601
- ⑬ H. Dekura, K. Shirai, and A. Yanase, “Efficient method for Li doping of  $\alpha$ -rhombohedral boron”, Phys. Rev. B、査読有、84 巻、2011、094117: 1-13  
DOI:10.1103/PhysRevB.84.094117
- ⑭ H. Maebashi and Y. Takada, “Inclusion of vertex corrections for superconductivity in gauge-invariant self-consistent approximations”, Physica C: Superconductivity、査読有、470 巻、2010、S975-S977  
DOI:10.1016/j.physc.2009.10.153
- ⑮ R. Maezono, N.D. Drummond, A. Ma, and R.J. Needs, “Diamond to beta-tin phase transition in Si within quantum Monte Carlo”, Phys. Rev. B、査読有、82 巻、2010、184108:1-7  
DOI:10.1103/PhysRevB.82.184108

〔学会発表〕 (招待講演のみ : 計 41 件)

- ① Y. Takada, “Spin-singlet resonance state in proton-embedded metals: Discovery of novel high- $T_K$  system leading to high- $T_c$  superconductivity”, Condensed Matter Physics 2015、2015 年 6 月 22 日、Boston (USA)
- ② Y. Takada, “Light fermion problem in the low-density electron gas”, Superstripes 2015、2015 年 6 月 17 日、Ischia (Italy)
- ③ Y. Takada, “New paradigm for metallic screening to a point charge: Sharp transition from charge to spin-singlet resonance state”, EMN Phuket Meeting、2015 年 5 月 5 日、Phuket (Thailand)
- ④ K. Shirai, “Defect states of boron carbide  $B_{13}C_2$ ”, 18<sup>th</sup> Int. symposium on boron, borides and related materials、2014 年 9 月 5 日、Honolulu (USA)
- ⑤ H. Maebashi and Y. Takada, “Generic Features of an Electron Injected into the Luttinger Liquid”, Superstripes 2014、2014 年 7 月 30 日、Erice (Italy)
- ⑥ Y. Takada, “Superconductivity in Carbon-Based Materials”, Superstripes 2013、2013 年 5 月 29 日、Ischia (Italy)
- ⑦ Y. Takada, “Standard model for superconductivity in graphite intercalation compounds: Prediction of optimum  $T_c$ ”, AIMR



workshop on superconductivity and magnetism associated with geometry and dimensionality from organics to inorganics, 2013年5月17日、東北大学原子分子材料科学高等研究機関（宮城県・仙台市）

⑧ Y. Takada, “On the First-Principles Determination of the Superconducting Transition Temperature”, Japan-France Joint Seminar 2012 on Physics and Control of Clustering Solids, 2012年11月6日、淡路夢舞台（兵庫県・淡路市）

⑨ Y. Takada, “Nonperturbative Self-Consistent Calculation of the Self-Energy: Electron-Hole Asymmetric Excitations and Possibility of a Self-Induced Excitonic State in Low-Density Electron Liquids”, Superstripes 2012, 2012年7月12日、Erice (Italy)

⑩ Y. Takada, “Many-Body Nonperturbative Approach to the Electron Self-Energy”, MASP2012, 2012年6月25日、東京大学物性研究所（千葉県・柏市）

⑪ K. Shirai and H. Dekura, “Phase stability and superconductivity of boron at high pressures”, 17<sup>th</sup> Int. Symp. Boron, Borides and Related Materials, 2011年9月15日、Istanbul (Turkey)

⑫ Y. Takada, “Superconductivity in a Correlated E $\otimes$ e Jahn-Teller System”, Superstripes 2011, 2011年7月15日、Rome (Italy)

⑬ R. Maezono, “Electronic structure calculation using Quantum Monte Carlo technique”, JAIST-CNSI Workshop 2011, 2011年1月13日、Los Angeles (USA)

⑭ Y. Takada, “Theory for reliable first-principles prediction of the superconducting  $T_c$ ”, 13<sup>th</sup> Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations, 2010年11月1日、Pohang (Korea)

⑮ K. Shirai and H. Dekura, “Superconductivity research on semiconducting boron”, 14<sup>th</sup> Int. Conf. on High Pressure Semiconductor Physics, 2010年8月4日、Jilin (China)

⑯ Y. Takada, “On the first-principles determination of  $T_c$ ”, Superstripes 2010, 2010年7月23日、Erice (Italy)

⑰ 高田康民, “低密度電子ガス系での負の誘電関数：その物理的起源と帰結”, 2010年5月27日、京都大学大学院理学研究科談話会（京都府・京都市）

〔図書〕（計5件）

① Y. Takada, “Theory for reliable first-principles prediction of the superconducting transition temperature”, in Carbon-Based Superconductors: Toward High- $T_c$  Superconductivity (Pan Stanford Publishing, Singapore), edited by J. Haruyama, Chap. 8, 2015, 193-230.

② 高田康民, 「第一原理からの超伝導理論」、

「物性研究・電子版」、3巻、2014, 031203:1-29.  
<http://hdl.handle.net/2433/182058>

③ 高田康民, 岩波書店、岩波講座：計算科学第2巻「計算と物質」第8章、2012、221-267.

④ Y. Takada, “Theory of Superconductivity in Graphite Intercalation Compounds”, Comprehensive Semiconductor Science and Technology, 1巻、2011、410-426.

ISBN: 0444531432

⑤ 高田康民, シュプリンガー・ジャパン（後に丸善に移行）、「密度汎関数理論の発展とマテリアルデザインへの応用」（赤井久純、白井光雲編）2.4.1節「相補的研究としての多体論—多体摂動論」、2011、66-82.

ISBN: 978-4-431-10254-0

〔その他〕

ホームページ等

<http://takada.issp.u-tokyo.ac.jp/>

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

高田 康民 (TAKADA, Yasutami)

東京大学・物性研究所・教授

研究者番号：00126103

### (2) 研究分担者

白井 光雲 (SHIRAI, Koun)

大阪大学・産業科学研究所・准教授

研究者番号：60178647

前園 涼 (MAEZONO, Ryo)

北陸先端科学技術大学院大学・情報科学研究科・准教授

研究者番号：40354146

### (3) 連携研究者

齋藤 晋 (SAITO, Susumu)

東京工業大学・理工学研究科・教授

研究者番号：00262254

春山 純志 (HARUYAMA, Junji)

青山学院大学・理工学部・准教授

研究者番号：70296383

### (4) 研究協力者

前橋 英明 (MAEBASHI, Hideaki)

東京大学・物性研究所・特任研究員

研究者番号：30361661

吉澤 香奈子 (YOSHIZAWA, Kanako)

東京大学・物性研究所・特任研究員

研究者番号：70439339

櫻井 誠大 (SAKURAI, Masahiro)

東京大学・物性研究所・特任研究員