

機関番号：13601

研究種目：基盤研究（C）

研究期間：2007～2010

課題番号：19540399

研究課題名（和文） 拡張された制限つき探索理論を用いた新しいバンド計算手法の研究

研究課題名（英文） Development of a new scheme of energy-band calculation on the basis of the extended constrained-search theory

研究代表者

樋口 雅彦 (HIGUCHI MASAHIKO)

信州大学・理学部・准教授

研究者番号：10292202

研究成果の概要（和文）：

本研究では、我々が提唱をした「拡張された制限つき探索理論（以下 ECS 理論）」を強相関電子系など多様な系に適用できる形に発展拡充させた。具体的には、まず、電子相関を記述する二次簡約化密度行列の対角要素（対密度）を再現する「対密度汎関数理論」の提案をし、その有効性を数値計算により確認した。また、ECS 理論を有限温度の事象へ適用できる形に一般化した。その有効性は超伝導現象に適用することで確認された。さらに本研究では ECS 理論を時間に依存する事象へ適用できる形にも拡張した。

研究成果の概要（英文）：

In this study, we have advanced the development of our extended constrained-search theory (ECS theory) toward a new scheme of the energy-band calculation that is applicable to various systems including strongly-correlated electron systems. More specifically, we first have proposed the pair density functional theory that can reproduce the diagonal elements of the second-order reduced density matrix (pair density), and confirmed its validity successfully through numerical calculations. We also have generalized the ECS theory so that one can apply the ECS theory to finite-temperature systems. The validity of the generalization has been confirmed by applying it to superconducting systems. Furthermore, the ECS theory has been extended so as to describe the time-dependent phenomena.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2007年度	400,000	120,000	520,000
2008年度	700,000	210,000	910,000
2009年度	700,000	210,000	910,000
2010年度	700,000	210,000	910,000
年度			
総計	2,500,000	750,000	3,250,000

研究分野：物性理論

科研費の分科・細目：物理学、数理物理・物性基礎

キーワード：拡張された制限つき探索理論、ECS 理論、対密度、電子相関、  
交換相関エネルギー汎関数、有限温度 ECS 理論、超伝導、時間依存 ECS 理論

## 1. 研究開始当初の背景

密度汎関数理論（以下 DFT）は、多電子問題を一体描像に還元するエネルギーバンド

理論の一つであり、コーン・シャム軌道と呼ばれる一電子方程式の解を用いて基底状態の電子密度を正しく予言する理論です。しか

しながら、電子密度以外の物理量に関しては、コーン・シャム軌道を用いて予言できることを保証しておらず、その処方箋も与えられていません。本研究を開始する3年前に我々は、電子密度以外の物理量をもコーン・シャム軌道で直接的に予言できる理論的枠組みを提唱しました。これを「**拡張された制限つき探索理論(以下 ECS 理論)**」と呼んでいます。本理論により、絶対零度・基底状態における任意の静的物理量が予言可能となりました。

これまでDFTの拡張は、ほとんど海外とくに米国、ドイツの研究者が主に行ってきました。しかし、「ECS理論」のような、任意の物理量を予言しようとする試みは、これまで国内・国外ともに見当たりません。研究開始当初、我々の「ECS理論」は、ハンガリー、米国、ドイツの研究グループが使い始め、その有効性が認識されつつあるという状況でした。それらの研究では、我々の「ECS理論」を「一般化密度汎関数理論」あるいは「樋口-樋口理論」と呼び、縮退のある系、またスピントロニクス材料のマテリアルデザインを目指して磁場が印加された系に実際に応用され始めていました。本研究は、日本発の新しいバンド理論である「ECS理論」をさらに充実させ、バンド理論(第一原理理論)の適用範囲のフロンティアを広げるものと位置づけられます。

## 2. 研究の目的

本研究では、この「ECS理論」を、強相関電子系など多様な系に適用できる形に発展拡充することを目的としました。具体的には、  
目的1. バンド理論による電子相関の描写範囲の拡大(ECS理論)

目的2. 時間に依存した物理現象の予言のための理論構築(時間依存ECS理論)

目的3. 有限温度における物理量の予言のための理論構築(有限温度ECS理論)

目的4. 実際の物質群に適用しその有効性も検証

を目的としました。

## 3. 研究の方法

(1) 対密度を基本変数に選んだECS理論(目的1, 4)

二次簡約化密度行列の対角要素(対密度)は静的な電子相関の情報をすべて含んでいます。本研究では、目的1の電子相関の描写範囲の拡大を目指して、「対密度を基本変数に選んだECS理論」の構築を行いました。

構築した理論の有効性を確認するために、原子構造計算を実行しました。原子構造に関しては、すでに大規模な量子化学計算によって正確な相関エネルギーなどのデータが蓄積されています。われわれの「対密度を基本変数に選んだECS理論」がどの程度、電子相

関を再現するかを検証しました。数値計算手法に関しても、本理論自身が新しいものであるために、計算アルゴリズムからプログラム開発まで従来のものは使えず、これらすべて最初から開発しました。

(2) ECS理論における交換相関エネルギー汎関数の開発(目的1, 2, 3)

オリジナルの密度汎関数理論の発展の歴史を見ればわかるように、われわれの「ECS理論」の発展に不可欠かつ第一の要素は「適用可能な交換相関エネルギー汎関数の開発」です。つまり、「ECS理論」のように新しい密度汎関数理論を開発するとは、単に基本定理の証明とそれを利用した一粒子方程式の導出だけでなく、交換相関エネルギー汎関数の近似形を開発することがセットになっています。そこで本研究では、「ECS理論」の交換相関エネルギー汎関数が満たす総和則を導出し、それらを制限条件に交換相関エネルギー汎関数の近似形の開発を進めました。

(3) 常磁性電流密度を基本変数に選んだECS理論(目的1, 2, 3)

「常磁性電流密度を基本変数に選んだECS理論」は、電流が誘起された系の基底状態を記述するのに有用であるだけでなく、磁場下超伝導物質の基底状態を第一原理的に扱う理論(目的3の有限温度ECS理論の一適用例)や時間に依存した外部磁場が印加された系を扱う理論(目的2の時間依存ECS理論の一適用例)を構築する第一段階としても重要です。

「常磁性電流密度を基本変数に選んだECS理論」で鍵となる交換相関エネルギー汎関数の開発は、従来、局所密度近似やOEP法の適用などにとどまり、決して満足のいくものではありませんでした。われわれは研究期間以前に、交換相関エネルギー汎関数のvorticity展開近似式(以下、VEA)を開発してきました(Phys. Rev. B **74**, 195122 (2006), Phys. Rev. B **75**, 159902(E) (2007))。本研究では、VEAの評価およびVEAにおける有効ポテンシャルの開発を行いました。

(4) ECS理論の超伝導への適用(目的3, 4)

通常のDFTの有限温度への拡張は、マーミンにより開発されています。これらの方法を「ECS理論」に拡張しました。まず、基本定理の証明を行い、有限温度における電子密度と任意物理量の両者を予言する有効一電子方程式を導きました。次に、この有限温度ECS理論において、非対角長距離秩序に対応する超伝導の秩序パラメータを基本変数に選んで、超伝導現象に適用する理論を議論しました。特に力を注いだ点は、構築した理論を実際に適用する際に必要不可欠な交換相関エネルギー汎関数の近似形の開発です。これを

Sn に適用し、本理論の有効性も確認しました。

#### (5) 時間依存 ECS 理論の構築(目的 2)

通常の DFT の時間依存する場合への拡張は、初期の数多くの研究はありますが最終的にはルンゲ-グロスにより決定版が出されたとされています。しかしながら、ルンゲ-グロスの理論はいわゆる「 $v$  表示可能性」を仮定したものでした。静的な場合と同様に、 $v$  表示可能性の仮定は仮想的な外場の導入など、理論的に不完全な点があります。本研究では、まずこの仮定を解除することからはじめ、次に時間に依存した電子密度と任意物理量を基本変数に選んだ「時間依存 ECS 理論」の構築を行いました。

### 4. 研究成果

#### (1) 対密度を基本変数に選んだ ECS 理論 (目的 1, 4)

##### ①有効初期理論の提案

電子相関の描写範囲の拡大を目指して、「対密度を基本変数に選んだ ECS 理論」を構築しました。本理論では、単一スレーター行列式による対密度の再現を目指しました。得られた一粒子方程式は、ハートリー・フォック方程式に相関ポテンシャルが付加された簡素で分かりやすい方程式です。また、本理論における全エネルギーがハートリー・フォック近似のものに比べ厳密に低くなることも証明しました。以上より、本理論では、対密度の探索範囲の制限があるものの、相関効果を明確に含んだ  $N$  表示可能な対密度を得ることができます。その意味で、この理論は波動関数理論のハートリー・フォック近似に相当する「有効初期理論」(Physica B **387**, 117 (2007), Phys. Rev. B **78**, 125101 (2008)) と見なせるものです。

##### ②有効初期理論によるテスト計算

「有効初期理論」の有効性を確認するために、ネオン原子によるテスト計算を行いました。探索範囲を広げる必要性は明確になったものの、相関エネルギーの約 2 割をカバーすることがわかりました (目的 4: 実際の物質群に適用しその有効性も検証)。(Phys. Rev. B **78**, 125101 (2008), J. Phys. Condens. Matter **21**, 064206 (2009))。

##### ③有効初期理論を超える試み 1

波動関数理論がハートリー・フォック近似を基礎にさまざまと拡張したように、対密度汎関数理論もわれわれの「有効初期理論」をもとに発展させることができます。本研究では、相関をあらわに取り込んだジャストロウ波動関数による再現を目指した理論を開発しました (Phys. Rev. A **75**, 042510 (2007))。

##### ④有効初期理論を超える試み 2

有効初期理論を超えた新しい試みである「素朴展開・対密度理論」を開発しました。

本理論は「有効初期理論」から得られる複数のスレーター行列式によって対密度の再現を目指すもので、対密度の探索範囲が  $N$  表示可能でかつ広範囲になるという特長があります。本研究では定式化のみならず、原子系に適用してその有効性を検証しました。その結果、「有効初期理論」を超えて相関を取り込むことは確認できましたが、その一方で、運動エネルギー汎関数の近似形の限界が如実に現れることが判明しました (Phys. Rev. B. **82**, 155135 (2010), Int. J. Quantum Chem. **110**, 2286 (2010))。

##### ⑤運動エネルギー汎関数の近似形の提案

運動エネルギー汎関数の近似形を改善する目的で、運動エネルギー汎関数に対する新しい総和則を発見しました。これら総和則は近似形の精度を上げるために利用可能です (J. Phys. Soc. Jpn. **80**, SA122 (2011))。

##### ⑥対密度の探索範囲拡大

本研究では、対密度の探索範囲拡大の試みとして、電子座標のスケーリングを利用した手法を開発しました。原子系に適用してその有効性を検証した結果、大規模な計算をすることなく大幅に対密度の誤差が縮小されることが確認できました。本手法は、対密度の探索範囲を拡大する斬新かつ有効な方法であり、今後の発展が期待できます。(本成果は、2011 年 8 月に開催に開催される 26th International Conference on Low Temperature Physics (LT26) および 14th International Conference Density functional Theory in Chemistry, Physics and Biology (DFT11)にて樋口克彦が発表予定です。さらに論文も投稿中です。)

#### (2) ECS 理論における交換相関エネルギー汎関数の開発(目的 1, 2, 3)

##### ①「ECS 理論」の相関エネルギー汎関数に対する漸近的境界条件

本研究では「ECS 理論」の交換相関エネルギー汎関数が満たす総和則を電子座標のスケーリングと漸近接続の手法により発見しました (Phys. Rev. B **75**, 195114 (2007), Phys. Rev. A **81**, 042505 (2010))。これらのうち一つは、DFT の交換相関エネルギー汎関数の近似形である PBE 汎関数の開発において重要な役割を果たしたレヴィーの漸近的境界条件を「ECS 理論」に拡張したものです。また、本研究で得られた他の総和則のうち 4 つの総和則は、相関エネルギー汎関数に対する漸近的境界条件を与えるもので、「ECS 理論」のみならず、DFT のレベルでも新しいものです。本研究で得られた総和則は全て、「ECS 理論」の交換相関エネルギー汎関数の近似形を構築する際に用いることができます。また、次の(3)で述べるように、開発済の近似形の評価にも使用できる有用な総和

則です。

## ②「ECS 理論」の相関運動エネルギー汎関数とその総和則

本研究では、「ECS 理論」の交換相関エネルギー汎関数に含まれる運動エネルギー部分（相関運動エネルギー汎関数）に関する新しい総和則を発見しました (Phys. Rev. A, **79**, 022113 (2009))。相関運動エネルギー汎関数は、「ECS 理論」における参照系と現実の多体系の運動エネルギーの差に相当する量で、研究期間以前に報告したヴィリアル関係 (Phys. Rev. B **71**, 035116 (2005)) にもあらわれた量です。今回得られた結果とヴィリアル関係をあわせることで、交換相関エネルギー汎関数に関する新しい総和則も発見しました。この交換相関エネルギー汎関数に関する新しい総和則は、ヴィリアル法にも適用できる有用な関係式です (J. Phys. Soc. Jpn. **76**, 054302 (2007), Phys. Rev. A **78**, 012501 (2008).)。

## (3) 常磁性電流密度を基本変数に選んだ ECS 理論 (目的 1, 2, 3)

### ①VEA の評価

本研究では、(2)①で得られた新しい総和則 (5 種類) を用いて開発済の交換相関エネルギー汎関数の近似形である VEA の有効性を評価しました。従来の局所密度近似 (CDFT-LDA) は 2 種類の総和則を満足しないが、VEA は 5 種類の総和則を全て満たすことが明らかとなりました。 (Phys. Rev. B **75**, 195114 (2007), Phys. Rev. A **81**, 042505 (2010))。さらに、これまでに知られている 60 種類の総和則で VEA の評価した結果、VEA は 77% の総和則を満たすのに対し、CDFT-LDA は、わずか 12% であることがわかりました。このことから、VEA は CDFT-LDA に比べより多くの総和則を満たす振る舞いの良い近似式であることがわかりました (Phys. Rev. A **81**, 042505 (2010))。

### ②VEA における有効ポテンシャルの開発

さらに本研究では、VEA による有効ポテンシャルの導出も行いました。これにより、「常磁性電流密度を基本変数に選んだ ECS 理論」による電子構造計算を実行可能となりました (J. Phys. Soc. Jpn. **80**, SA123 (2011))。また、ここで得られた有効ポテンシャルは (4)④で述べる超伝導現象を扱う「有限温度 ECS 理論」でも用いられました。さらに「時間依存の ECS」理論において電磁場が印加された系を扱う際にも断熱近似として用いることが可能と考えられます。

## (4) 有限温度 ECS 理論の超伝導への適用

### ①電子密度と異常密度を基本変数に選んだ有限温度 ECS 理論の構築 (目的 3, 4)

有限温度における物理量を予言できる形

へ「ECS 理論」を拡張しました。さらに、超伝導現象に適用すべく、基本変数として電子密度と非対角長距離秩序に相当する異常密度を選んだ「ECS 理論」を開発しました。この「電子密度と異常密度を基本変数に選んだ有限温度 ECS 理論」のボゴリューボフ-ドジャン型方程式も導出しました。

### ②交換相関ポテンシャルの開発および有効性の実証

①で開発した新しいタイプの方方程式でカギとなるのは、通常の DFT 同様に、交換相関ポテンシャルの近似形の開発です。これまでに、この近似形の開発に必要な交換相関エネルギー汎関数の総和則を導きました。それをもとにわれわれは、交換エネルギーの近似形を提案し、Sn に適用しました。その結果、BCS からのずれを補正する結果が得られました。相関エネルギーに関しても、われわれはノーマル状態での近似形の開発には経験があり ((2)および(3))、これを応用すれば超伝導状態での相関エネルギーの近似形の開発は十分に可能であると考えています (以上の成果は論文準備中です)。

### ③有限温度 ECS 理論の磁場下超伝導体への適用

ECS 理論を有限温度へ拡張した「有限温度 ECS 理論」の適用例として、本研究ではさらに「磁場下超伝導体に対する有限温度 ECS 理論」の構築を行いました。本理論の基本変数は、電子密度と異常密度に加え常磁性電流密度です。本理論を用いることにより、臨界温度のみならず臨界磁場も予言可能になると期待できます。(本成果は、2011年8月に開催に開催される 26th International Conference on Low Temperature Physics (LT26) および 14th International Conference Density functional Theory in Chemistry, Physics and Biology (DFT11) にて樋口雅彦が発表予定です。)

### ④磁場下超伝導体に対する有限温度 ECS 理論の交換相関ポテンシャルの開発

③で開発した理論に基づいて数値計算を行うためには、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、この交換相関エネルギー汎関数の近似形の開発にも着手しました。具体的には、ノーマル状態における「常磁性電流密度を基本変数に選んだ ECS 理論」の交換相関エネルギー汎関数として開発した VEA を利用した近似形の提案です。(本成果も、2011年8月に開催に開催される 26th International Conference on Low Temperature Physics (LT26) および 14th International Conference Density functional Theory in Chemistry, Physics and Biology (DFT11) にて樋口雅彦が発表予定です。)

(5) 時間依存 ECS 理論の構築(目的 2)

①時間依存 DFT における  $v$  表示可能性の仮定の解除

時間依存の制限つき探索を用いることで、基本定理である「存在定理」と「変分原理(ディラック・フレンケル)」の証明に成功しました。これにより、時間依存 DFT が持っていた理論的な不完全性を取り除くことができたと同時に、「時間依存 ECS 理論」の構築へ向けての準備が整いました。

②時間依存 ECS 理論の基本定理と一粒子方程式の導出

時間に依存した電子密度と任意物理量が基本変数として選択可能であることを示しました。つまり、これらの物理量に対する「存在定理」と「変分原理」を証明しました。さらに、これらの基本定理を使って、ある時刻における電子密度と任意物理量の両者を予言する有効一電子方程式を導きました。

このように計画通り理論的な整備は完了しました。次の段階は、有効理論を構築ためにどのような物理量を基本変数に選ぶかです。また、電磁場が印加された系に対する時間依存 ECS 理論も本研究の成果を基礎に構築できます。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 2 2 件)

- ① 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**, SA122 (2011). 査読有
- ② K. Higuchi and M. Higuchi, “Exchange-Correlation Potentials of the CDFT in the Vorticity Expansion Approximation”, *J. Phys. Soc. Jpn.* **80**, SA123 (2011). 査読有
- ③ M. Higuchi and K. Higuchi, “Sum rules for the exchange-correlation energy functional of the extended constrained-search theory: application to checking the validity of the vorticity expansion approximation of the current-density functional theory”, *Phys. Rev. A.* **81**, 042505 (2010). 査読有
- ④ K. Higuchi and M. Higuchi, “Computational pair density functional theory: a proposal of the kinetic energy functional”, *Phys. Rev. B.* **82**, 155135 (2010). 査読有
- ⑤ M. Higuchi and K. Higuchi, “A constraint on the approximate form of the kinetic energy functional of the pair density functional theory”, *Int. J. Quantum Chem.* **110**, 2286 (2010). 査読有

- ⑥ K. Higuchi and M. Higuchi, “Checking the validity of the Vorticity expansion approximation of the current-density functional theory”, *Int. J. Quantum Chem.* **110**, 2283 (2010). 査読有
- ⑦ M. Higuchi and K. Higuchi, “A pair density functional theory utilizing the correlated wave function”, *J. Phys.: Conference Series* **150**, 042056 (2009). 査読有
- ⑧ K. Higuchi and M. Higuchi, “Kinetic energy contribution to the exchange-correlation energy functional of the extended-constrained search theory”, *Phys. Rev. A.* **79**, 022113 (2009). 査読有
- ⑨ K. Higuchi and M. Higuchi, “Computational scheme for the ground-state pair density”, *J. Phys.: Condens. Matter.* **21**, 064206 (2009). 査読有
- ⑩ M. Higuchi and K. Higuchi, “A pair density functional theory utilizing the noninteracting reference system: an effective initial theory”, *Phys. Rev. B.* **78** 125101 (2008). 査読有
- ⑪ M. Kodera, K. Higuchi, A. Narita and M. Higuchi, “A scheme for calculating the orbital-dependent exchange-correlation potential using the virial theorem: Application to atomic systems”, *Phys. Rev. A* **78**, 012501 (2008). 査読有
- ⑫ M. Higuchi and K. Higuchi, “Pair density functional theory by means of the correlated wave function”, *Phys. Rev. A* **75**, 042510 (2007). 査読有
- ⑬ M. Higuchi and K. Higuchi, “Evaluation of the vorticity expansion approximation of the CDFT by means of Levy’s asymptotic bound”, *Phys. Rev. B* **75**, 195114 (2007). 査読有
- ⑭ M. Higuchi and K. Higuchi, “A proposal of the approximate scheme for calculating the pair density”, *Physica B* **387**, 117 (2007). 査読有
- ⑮ M. Higuchi, M. Miyasita, M. Kodera and K. Higuchi, “Density functional scheme for calculating the ground-state pair density”, *J. Magn. Magn. Mater.* **310**, 990 (2007). 査読有
- ⑯ M. Higuchi, M. Miyasita, M. Kodera and K. Higuchi, “Simultaneous equations for calculating the ground-state pair density”, *J. Phys.: Condens. Matter* **19**, 365219 (2007). 査読有
- ⑰ K. Higuchi, M. Miyasita, M. Kodera and M. Higuchi, “New practicable forms for exchange and correlation energy functionals of the CDFT”, *J. Magn. Magn. Mater.* **310**, 1065 (2007). 査読有
- ⑱ K. Higuchi and M. Higuchi, “Comparison between the vorticity expansion approximation and the local density approximation of the CDFT from the viewpoint of sum rules”, *J. Phys.: Condens. Matter* **19**, 365216 (2007). 査読有

〔学会発表〕(計 23 件)

- ① M. Higuchi, K. Koide, T. Imanishi, and K. Higuchi, “Current-Density Functional Theory for Superconductors”, 26th International Conference on Low Temperature Physics, 2011/8/, Beijing, China. (発表決定)
- ② 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, 2011/8/, Athens, Greece. (発表決定)
- ③ 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, 2011/8/, Beijing, China. (発表決定)
- ④ 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, 2011/8/, Athens, Greece. (発表決定)
- ⑤ M. Higuchi and K. Higuchi, “A computational pair density functional theory using multiple Slater determinants”,  $\Psi_k$  conference 2010, 2010/9/14, Berlin, Germany.
- ⑥ M. Higuchi and K. Higuchi, “Density Functional Approach to Calculate the Diagonal Elements of the Second-Order Reduced Density Matrix”, International Conference on Heavy Electrons 2010, 2010/9/19, Tokyo, Japan.
- ⑦ K. Higuchi and M. Higuchi, “New restrictive conditions on the exchange-correlation energy functional of the extended constrained-search theory and their applications to the evaluation of the vorticity expansion approximation”,  $\Psi_k$  conference 2010, 2010/9/14, Berlin, Germany.
- ⑧ K. Higuchi and M. Higuchi, “Exchange-Correlation Potentials of the CDFT in the Vorticity Expansion Approximation”, International Conference on Heavy Electrons 2010, 2010/9/19, Tokyo, Japan.
- ⑨ (招待講演) M. Higuchi and K. Higuchi, “Computational pair density functional theory”, The 2nd International Symposium and Workshop on Correlated Electrons in Matter, 2009/4/2, Gatlinburg, USA.
- ⑩ (招待講演) K. Higuchi and M. Higuchi, “Calculation of the ground-state pair density on the basis of the computational pair density functional theory”, International Workshop on Frontiers in Density Functional Theory, 2009/9/15, New York, USA.
- ⑪ M. Higuchi and K. Higuchi, “Computational scheme for calculating the pair density”, The

13th International Conference on Application of Density Functional Theory in Chemistry and Physics, 2009/9/2, Lyon, France.

- ⑫ (招待講演) M. Higuchi and K. Higuchi, “Computational pair density functional theory”, The 11th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations, 2008/11/3, Kaohsiung, Taiwan.
- ⑬ M. Higuchi and K. Higuchi, “A pair density functional theory utilizing the correlated wave function”, 25th international conference on Low Temperature Physics, 2008/8/10, Amsterdam, Netherland.
- ⑭ K. Higuchi and M. Higuchi, “Computational scheme for the ground-state pair density”, International Conference on Quantum Simulators and Design 2008, 2008/6/1/, Tokyo, Japan.
- ⑮ (招待講演) M. Higuchi and K. Higuchi, “Extended Constrained Search Theory and its applications”, ISSP International Workshop and Symposium on Foundations and Applications of the Density Functional Theory, 2007/8/2, Tokyo, Japan.
- ⑯ M. Higuchi and K. Higuchi, “Pair Density Functional Theory by means of the Jastrow Wave Function”, 12th international Conference on the Applications of Density Functional Theory in Chemistry and Physics, 2007/8/28, Amsterdam, The Netherlands.
- ⑰ K. Higuchi and M. Higuchi, “Vorticity Expansion Approximation of the Exchange-Correlation Energy Functional in Current-Density Functional Theory”, 12th international Conference on the Applications of Density Functional Theory in Chemistry and Physics, 2007/8/28, Amsterdam, The Netherlands.

〔図書〕(計 1 件)

樋口雅彦、樋口克彦他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、発刊予定。

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

樋口 雅彦 (HIGUCHI MASAHIKO)  
信州大学・理学部・准教授  
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