



A03高田班

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

- 代表：高田康民（東大物性研）
 分担：白井光雲（阪大産研）
 前園涼（北陸先端大情報科学）
 前橋英明（東大物性研）
 吉澤香奈子（上智大理工）
 連携：斎藤晋（東工大理工）
 大野かおる（横国大工）
 是常隆（東工大理工）
 秋光純（青学大理工）
 春山純志（青学大理工）
 上田寛（東大物性研）
 廣井善二（東大物性研）

2010年9月18日16:00-16:30 於東大工6号館63号講義室



電子サイドから見た第一原理のハミルトニアン

→ (フォノンとの相互作用も含めて) **不均一密度の電子ガス系**

物質の多様性 ← 多彩な不均一性

基本認識

- ◎ 多彩な不均一性を統一的に取り扱う手法 → **密度汎関数法**
- ◎ 特定の物理量 ($n(\mathbf{r})$ や T_c) を (他の物理量の精度とは関係なく) 形式上厳密に決定できる。 (→ **物理量ごとのスキーム構成**)
 ← (実験と似た側面で) **他の手法とは際だって違う特徴**

たとえば、DFTでは基底状態エネルギー E_0 や対応する電子密度 $n(\mathbf{r})$ は密度相関関数 $g_n(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n)$ を全く知らなくても厳密に決められる。(たとえばLDAでも原子間結合長は1%程度の精度で決まる。)一方、グリーン関数法では $n(\mathbf{r})$ と $g_n(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n)$ はお互いに密接な関連がある (いわゆる **BBGKY階層構造の存在**) 故に、 $g_n(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n)$ のよい近似解が求まらない限り、精度のよい (それでも近似に過ぎない) $n(\mathbf{r})$ は求められない。



基本戦略

- ◎ DFTで鍵となる物理量 (V_{xc} や f_{xc} など) の汎関数形が必要
 → 主として **均一密度系** での種々の物理量を **グリーン関数法** や **量子モンテカルロ計算** などの多様な多体理論で研究
 → **適切な汎関数形の考案**
- ◎ 考案された汎関数形を“典型的な”(モデル化した)不均一系に適用する。そして、他の手法で計算された結果と比較して、その汎関数形の評価・改良を行う。
- ◎ 適切と判断された汎関数形を **多彩な不均一系** に適用して、得られた結果を関連する実験と比較・検討する。
 → **高 T_c 物質開発へのヒントを得る**



具体的な目標

- ◎ V_{xc} に関連して、**電子ガス中の1原子系の物理** (精度のよい $n(\mathbf{r})$ の決定と逆KS法による精度の高い V_{xc} の構成):
DMC(前園)、STLS(吉澤)、EPX(高田)
- ◎ f_{xc} に関連して、**ラッティンジャー流体を含む均一密度電子系** や **弱非均一密度電子系** での1電子スペクトルや動的相関関数:
GWI(前橋)、GWなどの関連する研究(斎藤、大野)
- ◎ T_c に関連して、**均一密度電子系での弱結合超伝導機構**:
 G_0W_0 近似(吉澤、高田)
- ◎ T_c に関連して、**短コヒーレンス長強結合超伝導機構**:
クラスター計算(高田)、エリアシュバーク理論計算の関連する研究(是常)、関連する理論予測(白井)、および、関連する実験研究(秋光、春山、上田、廣井)