

まえがき

近年、凝縮系電子構造論の発展は著しい。1998年のノーベル化学賞の対象となった密度汎関数理論の構築と発展が1960年代の半ば以降引き続き行われその成果があがったことが第一の理由である。第二には、酸化物高温超伝導体の発見により固体物理学がますます面白くなり電子相関の重要性が再認識されたこと、それらが密度汎関数理論を補う方法の発展を促し、1電子問題と多電子問題の溝が埋められつつあることが重要である。第三の理由は(第四の理由と深く関係するが)、第一原理分子動力学法といわれる新しい方法が発明されたことである。今まで古典系に限って原子系のダイナミクスを計算機の中で見ることができたが、この新しい方法により原子配置と電子構造を同時に動的に見ることができるようになった。これにより新しく有用な物質を計算機のうで設計しようという応用上の期待が急速に高まった。第四の理由は、電子計算機のハードおよびソフト両面の著しい進歩、特に超並列計算の導入により今まで実行不可能であった大きな計算が実行可能となってきたことである。

本書は、量子力学と統計力学の学部課程の修了および物質の構造に関する初歩的知識を前提として、物質の電子構造を自分で考えあるいは計算できるようになることを目的としている。特に近年、電子構造に関する理解と方法論の進展はさらに著しい。幸いにして「物質・材料テキストシリーズ」の企画・編集に参加する機会を与えられ、加えてそのうちの1巻として本書を加えることを許された。そこで、旧著「固体電子構造-物質設計の基礎-(朝倉書店, 1999)」を全面的に改定し、また新たにいくつかの章を書き下したりして、体裁を一新することを得た。本書が我が国の若い研究者や学生諸君の方法論開発への意欲を刺激し、そして電子状態計算理論全体を俯瞰的に眺めることにお役に立てれば、著者にとってこれに勝る喜びはない。

「物質・材料テキストシリーズ」編纂委員会の藤森淳東京大学教授、勝藤拓郎早稲田大学教授および内田老鶴圃の内田学社長からは、種々の意見を交換す

iv まえがき

るなかで、本書の構成に対しても有用なご意見をいただいた。大変楽しい作業でもあった。内田老鶴圃の故内田悟会長には、いろいろお世話になりまた暖かい励ましをいただいた。内外の研究仲間からはいろいろと学ぶ機会も多かった。それらは本書にでき得る限り生かすよう心掛けたつもりである。その他にも多くの方々のお世話になった。お一人おひとりのお名前を挙げることはしないが、心から感謝する。

2015年1月

藤原 毅夫