

# まえがき

本書は2015年に出版された、物質・材料テキストシリーズ中の「固体電子構造論」(藤原毅夫著)の姉妹刊として執筆されたものである。執筆の依頼を受けたのは2013年のことであつたが、物質の「多体電子構造」を議論するにあつてどのような話題を取り上げるべきか、内容を検討している間にだいぶ時間がたってしまった。第一原理計算に関係する内容、とテーマを絞ってみたものの、物質の多体効果の研究は今日様々な方向で発展を見せており、それらをすべて網羅することは難しい。あれこれ悩んだ結果、著者によって内容の選定に偏りが出てしまうことはやむを得ないとして、多体现象の中でも磁性と超伝導に軸足を置きつつ、以下の構成で執筆することにした。

第1章では、密度汎関数理論の基礎を議論した。密度汎関数理論については和書、洋書ともに詳しい専門書が多く出版されているが、本書で議論する内容のほとんどが密度汎関数理論に基づく計算を出発点とするものであることから、第2章以下を読み進める上で必要な、最も基本的な内容をまとめた。

第2章では、電子状態に対する相対論の効果を取り上げることにした。スピン-軌道相互作用に代表される相対論効果は、トポロジカル物質の電子状態を理解する際に重要であるし、第3章で議論するように磁性体で複雑な磁気構造が現れる上でも決定的な役割を果たす。そこで第2章では相対論効果を第一原理計算でどのように扱うかという問題と、相対論効果が電子状態にどのように現れるかについて代表的な具体例を取り上げた。

第3章では、スピン密度汎関数理論に基づく磁性体の計算を解説した。第2章に続いて前半で磁性に対する相対論効果を議論した後、後半で磁気励起や磁気相転移の転移温度の第一原理評価法について議論した。また、近年盛んに研究が行われている、金属磁性体における異常ホール効果などの異常横伝導の計算例を紹介した。

物質の電子状態を実験的に調べるには、必ず外部から摂動を加え、系を励起させて応答を観測する必要がある。第4章では、一体の電子励起、二体の電子

励起を取り扱う手法として、多体摂動論に基づくアプローチと時間依存密度汎関数理論に基づくアプローチを紹介する。

格子振動、格子変形は、密度汎関数理論が最も得意とする問題の一つである。第5章では、密度汎関数摂動論に焦点をあて、フォノンの分散や電子格子相互作用、格子変形をどのように計算するか、という問題を議論した。

第6章では、フォノン媒介の超伝導の第一原理計算について議論した。フォノン媒介の超伝導は今日最もよく理解された多体効果の一つである。近年、第5章で取り扱う格子振動の第一原理計算など様々な計算手法が発展したこともあり、経験的なパラメータを導入せずにフォノン媒介の超伝導について第一原理的な計算ができるようになった。第6章では計算手法の詳細とその応用例を紹介する。

低エネルギー物性を議論する際、フェルミ面近傍の電子状態が少数自由度の低エネルギー有効ハミルトニアンで記述されていると精密な議論が展開できる。第7章では、与えられた物質について、電子模型、電子-格子模型、あるいは、スピン模型といった有効ハミルトニアンの第一原理的導出について解説する。

低エネルギー有効模型の導出がなされたあと、それを精密に解析する手法については、今日様々な発展がある。その中で、密度汎関数理論との融合という点で最も研究が進んでいる手法に動的平均場近似がある。第8章ではその動的平均場近似とその拡張、密度汎関数理論との融合について議論した。

以上のように、本書では、密度汎関数理論による計算を基礎において物質の多体効果をどのように第一原理的に計算するか、という問題を解説した。

執筆の依頼から現在に至るまで、数年ごとに3回の異動があったこと、さらにコロナ禍が始まって急速に深刻化した時期に専攻長、学科長の業務が重なったことなどもあって原稿の執筆にはかなり苦戦してしまった。この間、内田老鶴圃の内田学氏は何度も著者の研究室に足を運んで辛抱強く励ましの言葉を下さった。同氏の温かい叱咤激励に心より感謝したい。また本書を通読し、有益なコメントを下さった、井口純太、越智正之、酒井志朗、坂部圭哉、佐藤真武、野村悠祐、野本拓也、平山元昭、増木亮太、見波将、村上雄太、渡部友太の各氏に感謝する。物質・材料テキストシリーズを監修されている藤原毅夫先生からも原稿全体にわたって貴重なアドバイスをいただいた。本書が多体電子構造

の非経験的計算に興味を持つ読者のお役に立つことがあれば著者にとって望外の幸せである.

2022 年 7 月

有田 亮太郎