

# まえがき

*“You can not understand it,  
until you know how to calculate it.” J.C. Slater*

前著「バンド理論—物質科学の基礎として—」が発刊されたのが1999年である。その後、バンド理論の重要性は、第一原理計算のより広範な物質系への応用が活発化する中で益々高まり、拙著は物質科学はもとより、物性物理学、固体化学等々の分野の固体電子論を学ぶ多くの方々にご愛読、ご活用いただいている。その一方で、具体的な物質系へのバンド理論の応用に際して、その電子状態や物性発現の電子論的機構に関して理解の助けとなる参考書を求める声も機会あるたびにうかがってきた。しかしながら、現在注目を集めている物質系だけでも多岐にわたり、その電子状態や関連する物性に関しては個々の研究報告や解説記事が多数存在している。そこで、本書では物質系としてもその電子状態としても多くのケースに対する基本となり、その物性にもいくつかの興味のある遷移金属系に話題を絞り、バンド理論の応用の一面を記すことにした。

遷移金属の電子状態は  $d$  軌道の存在によって特徴付けられる。これが  $d$  金属とも呼ばれる理由である。本書において読者にはまず、 $d$  軌道のもつ特殊性を理解していただく。“仮想束縛状態 (virtual bound state)” という局在と非局在の中間的状态を表現する概念がその特殊性を端的に表している。 $d$  軌道の五重の軌道縮退度も重要である。その角度依存性に基づいて、遷移金属サイト周りの配位構造や対称性によって結晶場や軌道混成が大きく変わる。同じ軌道エネルギー領域に自身の  $sp$  軌道が存在することも特徴的である。これらの要因がいくつも重なって、遷移金属系に多様性が生まれる。

本書では、具体的な遷移金属系へのバンド理論の応用として、遷移金属の凝集と磁性を取り上げる。現在、遷移金属酸化物を代表とする遷移金属化合物系の電子状態と物性により多くの注目が集まっていることから、その基礎となる

## ii まえがき

単体遷移金属そのものの電子状態を理解していただくことがまず重要であろう。

電子状態計算には、その基礎となる固体電子論に関する基礎的な事項や数学的概念が多く含まれる。実際の定式化や結果の解釈には必要不可欠なことが日常茶飯事である。前著「バンド理論—物質科学の基礎として—」で取り上げることができなかった基礎的項目について、いくつかを付録として載せた。また、多くの事項は、前著との関係も重要であり、“バンド理論 I”として本文内でしばしば引用している。しかしながら、説明の流れから一部本文内で前著と重複して記述されている事項もあることをご了解いただきたい。

最後に内田老鶴圃編集部、特に内田学氏には本書の企画・立案から脱稿、校正にわたり激励・アドバイスを含め継続的にサポートをいただいた。深く感謝したい。

2012年5月、大阪

小口 多美夫