

# 計算機マテリアルデザイン入門

笠井 秀明・赤井 久純・吉田 博 編

A5判・400頁・2,625円(本体価格2,500円+税)

量子力学に基づいた信頼性の高いシミュレーションによる、「**第一原理計算とそれに基づく物質・デバイス・プロセス・デザイン**」の基礎と応用を完全解説。この分野で、我が国初の待望の書。21世紀の新分野を切り開く学生・研究者、企業内の研究者・技術者必携の手引書。

## ◆ 基礎編 & 応用編 ◆

- 1 第一原理計算
- 2 計算機ナノマテリアルデザイン  
(応用編：計算機マテリアルデザイン)
- 3 MACHIKANEYAMA2002
- 4 STATE-Senri
- 5 第一原理分子動力学法「Osaka2002」
- 6 結晶の対称性と電子状態  
(応用編：TSPACE)
- 7 ABCAP
- 8 HiLAPW
- 9 NANIWA2001
- 10 RSPACE-04
- 11 新しい密度汎関数法の基礎  
(応用編：相関電子系設計への指針)

赤井久純  
吉田 博・佐藤和則

赤井久純・小倉昌子  
森川良忠  
白井光雲  
柳瀬 章

浜田典昭  
小口多美夫  
笠井秀明・Diño Wilson Agerico Tan  
広瀬喜久治・小野倫也  
草部浩一

\* (応用編) は基礎編とタイトルが異なるもの



## はじめに

21世紀に入り科学技術の進歩はめざましく、以前は絵物語の中にしか存在しなかったような新物質や新デバイスが続々と開発されている。が、一方で旧来の手法では解決できないような問題も浮上してきている。たとえば、ナノテクノロジーの発展は目を見張るばかりであるが、デバイス開発がナノメートルオーダーやそれ以下の微細領域に及ぶにつれ、量子力学的効果を考慮にいれなければならない、さらに、物質とデバイスが渾然一体となる局面が増えつつある。また、効率よく新機能物質を発見するためには、計算機上でシミュレーションを行って予測してから実験を行う必要がある。このような状況の中で、今、量子力学に基づいた実験に頼らない信頼性の高いシミュレーションが求められている。

第一原理計算はこれらの要請にこたえる計算手法である。この計算手法は量子力学から導かれる密度汎関数理論に基盤を置いており、実験値や経験的パラメータに頼らない物性予測が可能である。第一原理計算手法の開発と、最近の計算機性能の飛躍的な発展により、量子力学に基づいたコンピューショナル・マテリアルズ・デザイン (Computational Materials Design : CMD) が現実性を増しており、このCMDを用いた知的設計手法の産業への応用展開が期待されている。

本書ではこの第一原理計算の基礎、第一原理計算に基づいた計算コードの解説と使用方法、そして、それらの計算コードを用いた新物質や新デバイス、新プロセスへの研究例を紹介する。

読者諸君が本書を手引きとして第一原理計算とそれに基づく物質・デバイス・プロセスデザインに親しまれ、その知識が研究や新分野の開発・実用化の助けとなれば著者一同まことに幸いとすところである。

最後に本書の編集に当たりご助力いただいた大阪大学出版会の岩谷美也子氏、大阪大学大学院工学研究科中西寛氏、南谷英美氏に厚く御礼申し上げます。