

「固体無機化合物の化学結合 — 量子材料化学の観点から —」

幾原 雄一（東京大学，特別教授）

近年、透過型電子顕微鏡により材料内部の結晶粒界や欠陥周囲の原子配列や元素分布が定量的に観察可能となったが、これらの現象の本質理解には化学結合の視点に立脚した電子論的考察が不可欠である。

本書『固体無機化合物の化学結合』は、無機化合物における多様な化学結合の本質を定量的かつ体系的に論じたユニークな著作であり、材料科学に携わる全ての研究者にとって有用な知的基盤を提供する教科書として強く推薦する。

田中 勝久（京都大学 大学院工学研究科，教授）

著者は量子材料化学が専門であり、本書では量子化学計算の一手法である DV- $X\alpha$ 法を用いて多くの無機固体物質の化学結合と電子構造を明らかにし、その情報を化合物あるいは結晶構造の種類に基づいて整理している。有効結合次数や電子雲半径など化学結合や電子の分布状態を合理的に説明する新たな概念も提示され、前者は金属単体の融点との相関性が示されるなど、物性とのかかわりの言及もある。また、状態密度と各バンドに寄与する具体的な原子軌道と電子の占有状態が随所に示されており、電気伝導などと関係する重要なデータとなっている。本書は、多くの無機固体物質の化学結合と電子構造に関する知見だけでなく、物性を考える上でも多くのヒントを与えてくれる専門書である。

細野 秀雄（東京科学大学，総合研究院 元素戦略 MDX 研究センター，名誉教授）

無機固体物質は、結晶構造が多様で殆どの元素を取り込むことができ、半導体、磁性、超伝導、イオン伝導など機能を発現させる大きな舞台だ。しかし、これらの特徴は学習者にとって物質の統一的理解を難しくしている。この本は化学結合と電子状態を軸にして、広範な物質のイメージを把握できるように工夫されており、類書には見られない特徴を有する。固体化学のみならず物性物理に携わる研究者、大学院生などに参考書として薦めたい意欲作である。

松永 克志（名古屋大学 大学院工学研究科，教授）

最近の量子論計算によって、専門家でなくても、物質材料の電子状態に関する精度良い情報を得ることができる時代となった。それに対し、計算結果を適切に理解するための、研究者側の知的基盤が整っていないことが多い。本書は、量子化学計算の開発者である著者が、長年の研究で得たデータに基づき、化学結合論の立場から多種多様な物質の電子状態を体系的にまとめた大作である。物質材料の構造や物性に関する系統的理解やインスピレーションを与えてくれる良書として、すべての材料研究者にお薦めしたい。

横山 智康（パナソニック ホールディングス株式会社 GX 本部，リードリサーチャー）

「固体無機化合物の化学結合 — 量子材料化学の観点から —」は、無機材料の化学結合を元素・化合物・結晶構造ごとに体系的に解説し、量子化学計算データに基づく電子状態の特徴を明快に示しています。マテリアルズ・インフォマティクス発展により、計算データを訓練に用いた機械学習モデルの活用が進む中、その結果を化学結合の観点から適切に解釈する重要性が一層高まっています。本書は、その基礎を学ぶ上で極めて有用な一冊です。