

目次

まえがき

I 固体の電子状態

1	電子状態の基礎知識	3
1-1	概説	3
1-2	バンド理論の初歩	5
1-3	ほとんど自由な電子の近似	10
1-4	強束縛近似	22
1-5	仮想束縛状態	32
2	非経験的バンド計算の理論	36
2-1	Hartree-Fock 近似	37
2-2	密度汎関数法	45
2-3	具体的計算手法	59
3	物質の構造安定性	69
3-1	ビリアル定理	69
3-2	局所力の定理	74

3-3	遷移金属の凝集性質	77
3-4	典型元素単体の結晶構造	86
3-5	Car-Parrinello の方法	96
4	典型的な物質のバンド構造と物性	102
4-1	3d 遷移金属の磁性	102
4-2	炭素が作る多彩な物質	122
5	電子相関	142
5-1	遷移金属酸化物の基礎的性質 — Bloch 状態対局在状態	142
5-2	金属-絶縁体転移を示す 1 例—NiS	151
5-3	電子状態計算における LDA, LSDA をこえる 試み	156
 II 固体の構造		
6	完全結晶	173
6-1	固体の構造	173
6-2	完全結晶のケーススタディ	174
6-3	Miller 指数	181
6-4	結晶面の例	185
6-5	最密充填構造と積層欠陥	190
6-6	逆格子空間	193
6-7	酸化物超伝導体	199
7	表面・超微粒子	203
7-1	結晶の表面構造	203
7-2	表面再構成	206
7-3	Si 表面の (7×7) 構造	210
7-4	半導体電子状態のモデル	214

7-5	超微粒子の結晶構造	217
8	結晶でない物質の構造と物性	225
8-1	凝縮系の分類	225
8-2	乱れの程度	228
8-3	乱れを測る実験手段	230
8-4	粒子線回折	231
8-5	共有結合で凝集したアモルファス物質	235
8-6	アモルファス金属	238
8-7	その他の実験手段と中距離構造	241
9	アモルファス構造のモデル I — 共有結合系	243
9-1	構造モデル作りの基本的方針	243
9-2	共有結合系に対する構造モデル	245
9-3	連続ランダムネットワーク	247
9-4	コンピューターを使ったモデル作り	249
10	アモルファス構造のモデル II — 結合力に方向性のない系	260
10-1	構造モデル作りの基本的方針	260
10-2	稠密ランダム充填	261
10-3	アモルファス固体の作成法とガラス転移	264
10-4	分子動力学シミュレーションの方法	267
11	長距離秩序のある非結晶物質 — 準結晶	278
11-1	5 回対称性をもつ Laue 図形の出現	278
11-2	準結晶の定義	280
11-3	2次元の準結晶	281

xii 目 次

11-4 準周期性の本質 284

11-5 3次元の準結晶 286

参考書・文献 289

索 引 293

