まえがき

本書は先端材料を含む数多くの固体無機化合物の化学結合について記述しています。これは無機物質の本質的な性質の理解のみならず、新規材料の開発、評価・解析に従事する研究者や入門者、大学院生にとって無機物質の化学結合についての包括的な知識を提供する重要な教科書となるものであり、国際的にも類書を見ないものです。また、近年注目されているマテリアルズインフォマティクス分野の中核となるデータ、そして同分野に挑戦する研究者に極めて貴重な情報を提供します。

筆者は 1965 年に京都大学理学研究科化学専攻修士課程を修了し、大阪大学工学部、兵庫教育大学学校教育学部、京都大学工学研究科で教育・研究に携わって 2004 年に定年退職しました。その間、主として物質、材料科学の研究を行い、特に京都大学では多くの研究室スタッフや学生さんたちと数多くの材料物質を先端的な材料研究の観点から研究を続けました。特に田中功教授とは長年にわたり共同研究を行うことが出来、その間に得られた材料物質の知見は本書の礎を築いています。また、1973~1974 年には、米国ノースウェスタン大学に滞在し、新しい量子化学計算法 Discrete variational (DV)-Xα法を開発しました。帰国後プログラムを整備し種々の物質の電子状態計算を簡便に行える方法として公開しました。この方法は現在でも広い分野で使われています。本書は筆者が以前に執筆した三共出版株式会社から発行されている「量子材料化学入門」や「量子材料化学の基礎」で述べてきた量子化学の理論と上述の計算手法を実際の物質に適用し、得られた結果から化学結合についての知見をまとめたものであります。

本書で扱う物質は、種々の金属化合物（炭化物、窒化物、酸化物、カルコゲナイド等）や多様な結晶構造（NaCl 型、CsCl 型、NiAs 型など）を持ち、構成元素や原子構造に起因する特徴的な化学結合について系統的に議論します。化学結合の議論に用いるデータは主に量子化学計算から得られたイオン性（正味電荷）や共有結合性（有効結合次数）であり、随所に各物質の電子構造、電子雲、共有結合構造などの定量的なデータを整理して結合の特徴を述べています。

本書の出版に当たっては、まず上で紹介した前著（「量子材料化学入門」および「量子材料化学の基礎」）との関連に関して三共出版株式会社の秀島功氏に非常に興味を持っていただき執筆を続けることが出来ました。さらに原稿のミスの訂正や不明確な点の指摘など校正、印刷の細部にわたり目を通していただきました。感謝の念に堪えません。また京都大学の田中功先生には本書の全

般にわたり深く理解をし、出版することを薦めていただきました。さらに読者の分野や販売法についての的確な助言をいただき、実際の出版が可能になりました。本書の内容は部分的にはDV-Xα研究協会の年会での発表・討論を通して理解を深めることが出来ました。そこでは名古屋大学名誉教授の森永正彦先生やDV-Xα研究協会の会長である石井知彦先生（香川大学教授）などとの討論が役に立ちました。最後に、筆者は20年以上前に定年退職してから主に自宅が研究の場です。そのため家族の協力が必要でありました。ここに感謝の意を表します。

2025年5月

足立裕彦