ミニ特集　材料科学における第一原理計算の進展

企画にあたって

上　杉　徳　照*

1. はじめに

ミニ特集「第一原理計算手法による材料物性研究」が上梓されたのは16年前の1998年である．それ以降，他学会などでも第一原理計算に関する多くの特集記事が組まれている[(1)-(4)]．本特集は特に「まてりあ」の読者に関係の深い材料科学の話題について，金属学会で活躍しておられる研究者に，材料科学の観点から全体感を保ちつつ最新状況を紹介した解説を執筆して頂くべく企画した．

第一原理計算を取り巻く環境は1998年から大きく変化しており，計算機のハードと計算技術のソフトが両駆動輪となって，第一原理計算の材料科学における応用範囲は飛躍的に拡大している．**図1**は材料科学分野における第一原理計算に関連した論文数の推移を示したものである．文献データベース(Scopus)を用いて，材料科学分野で第一原理計算に関する報告が多い雑誌の順にComput. Mater. Sci., J. Alloy. Compd., Acta Mater., Mater. Trans.の4誌について題目，キーワード，抄録に*ab initio*またはfirst principle*を含む論文数の推移を調査した．外国雑誌の3誌では論文数が飛躍的に増加しており，増加傾向が現在も継続している．しかしMater. Trans.については2004年から論文数がピークアウトしている．その原因はこの分野における国内研究者が伸び悩んだためと考えられる．あるいは国内研究者が発表の場を外国雑誌あるいは物性科学や分子科学の雑誌に移したとも考えられる．いずれにせよ，材料科学における第一原理計算は国際的には隆盛期にあるのと対照的に金属学会においては停滞期にある．

このような状況にあって国内では反転攻勢のための拠点づくりが進められてきた．金属学会では「計算材料科学研究会」(2012年2月終了)が活発に活動し，そのメンバーの多くは，神戸のスーパーコンピュータ「京」設置を契機として設立された計算物質科学イニシアティブ(CMSI)やその材料科学拠点である計算材料科学研究拠点(CMRI)おいても活躍しておられる．また，CMSIなどのインフラストラクチャーやコミュニティがまとめられた拠点があるだけでなく「元素戦略プロジェクト〈研究拠点形成型〉」のように計算と実験が連携する拠点が形成され，金属学会からも多くの研究者が活躍されている．これらの拠点が上手く実効性を発揮すれば，金属学会において本研究分野が再び隆盛する日も近い．

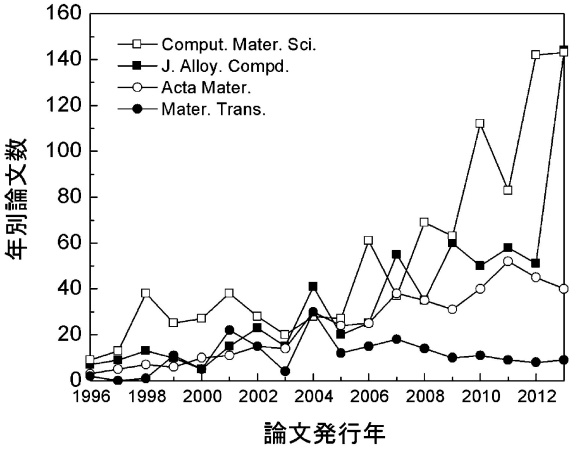

図1　材料科学分野における第一原理計算に関連した論文数の推移．

本特集は第一原理計算の研究に携わっている研究者はもちろんのこと，これから第一原理計算の研究を始めたいと考えている研究者の本研究分野への参画の一助となり，金属学会において第一原理計算を用いた材料科学研究がより発展することを期待したい．

本企画の立案に際してご協力頂いた田中功先生(京都大学)および第5分科グループ1の皆様にはこの場を借りて厚く御礼申し上げます．また，忙しい中，執筆をお引き受け下さった先生方にあらためて御礼申し上げます．

文　献

(1) 吉田　博：固体物理，**39**(2004), 705.
(2) 森川良忠：表面科学，**28**(2007), 127.
(3) 寺倉清之：日本物理学会誌，**64**(2009), 241.
(4) 小野寺秀博，阿部太一：金属，**80**(2010), 3.

上杉徳照

★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★
2005年　大阪府立大学大学院工学研究科博士後期課程修了
同年　大阪府立大学大学院工学研究科　助手，助教
2013年　現職
専門分野：計算材料科学
◎主に第一原理計算に基づいた構造材料の合金設計の研究に従事．
★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★

* 大阪府立大学大学院工学研究科；講師(〒599-8531 堺市中区学園町1-1)
Preface for Special Issue on Progress of First-principles Calculations in Materials Science; Tokuteru Uesugi (Department of Materials Science, Graduate School of Engineering, Osaka Prefecture University, Sakai)
Keywords: *first principles, ab initio, materials science, electronic structure calculations, density functional theory*
2014年7月22日受理[doi:10.2320/materia.53.393]