

# 目 次

<b>1 序論</b>	<b>1</b>
1.1 物質科学の道具としてのコンピュータ・シミュレーション	1
1.2 自然現象のモデル化	3
第1章の参考文献	7
<b>2 古典分子動力学法</b>	<b>9</b>
2.1 はじめに	9
2.2 分子動力学法のアルゴリズム	11
2.2.1 分子動力学法の要素技術	14
2.2.2 質点系の基礎方程式 (NTP アンサンブル)	17
2.2.3 質点系の基礎方程式 ( $\mu$ VT アンサンブル)	22
2.2.4 拘束系の基礎方程式 (NEV アンサンブル)	24
2.2.5 境界条件	27
2.2.6 力の計算方法	31
2.2.7 数値積分法	40
2.2.8 シミュレーション結果の解析方法	44
2.3 物質のポテンシャル関数	55
2.3.1 ポテンシャル関数の分類	55
2.3.2 ペアポテンシャル	58
2.3.3 ペアポテンシャルのパラメータの決定方法	61
2.3.4 ペア汎関数ポテンシャル	65
2.3.5 クラスタ・ポテンシャル	70
2.3.6 クラスタ汎関数ポテンシャル	73
2.3.7 分子間モデル・ポテンシャル	77
第2章の参考文献	80

<b>3 第一原理分子動力学法</b>	<b>83</b>
3.1 はじめに	83
3.2 多電子系の電子状態	84
3.2.1 同種粒子多体系の量子力学	84
3.2.2 ハートリー-フォック近似	87
3.2.3 密度汎関数法	90
3.2.4 バンド構造計算法	95
3.3 多原子系の動力学	103
3.3.1 カー-パリネロ法	103
3.3.2 基底系の選択	106
3.4 応用例	109
3.4.1 フラーレン系への応用	109
3.4.2 その他への応用	117
3.5 補 節	117
3.5.1 タイトバインディング・モデル	117
3.5.2 電子相関の取扱い	119
第3章の参考文献	122
<b>4 モンテカルロ・シミュレーション</b>	<b>127</b>
4.1 はじめに	127
4.2 モンテカルロ法の基礎	128
4.2.1 確率過程	129
4.2.2 マルコフ過程	131
4.2.3 エルゴード性	135
4.3 モンテカルロ法のアルゴリズム	140
4.3.1 乱数発生	140
4.3.2 シンプル・サンプリング	144
4.3.3 インポートランス・サンプリング	146
4.3.4 緩和過程のアルゴリズム	148
4.4 応用例	151
4.4.1 古典粒子系	151
4.4.2 パーコレーション	155
4.4.3 高分子系	157

4.4.4	古典スピン系 . . . . .	161
4.4.5	量子モンテカルロ法 . . . . .	171
4.4.6	核形成 . . . . .	177
4.4.7	結晶成長 . . . . .	181
4.4.8	フラクタル系 . . . . .	185
第4章の参考文献 . . . . .		193