

目 次

1. コンピュータシミュレーションとは

1.1 計算機実験の始まり	1
1.2 計算機実験とモデル	5
1.3 シミュレーションを行うには	8
1.3.1 分子動力学法とモンテカルロ法	8
1.3.2 シミュレーションの実行手順	8

2. 分子動力学法

2.1 分子動力学法の概要	10
2.1.1 レナード-ジョーンズポテンシャル	10
2.1.2 運動方程式	12
2.1.3 数 値 積 分	12
2.2 初期条件の設定	13
2.3 境 界 条 件	15
2.3.1 周期境界条件	16
2.3.2 周期境界条件下の系のポテンシャルエネルギー	18
2.3.3 自由境界条件	19
2.3.4 固相・液相共存系の場合	20
2.3.5 結晶の自由表面	21
2.4 運動方程式とその無次元化	23
2.4.1 対ポテンシャル系の運動方程式	23
2.4.2 無 次 元 化	24
2.4.3 レナード-ジョーンズ系の場合	25
2.5 運動方程式の数値積分	26
2.5.1 ベルレの方法	27
2.5.2 予測子-修正子法	29

2.5.3	ルンゲ-クッタ法	33
2.5.4	時間メッシュについて	34
2.6	プログラミングに関する注意	35
2.6.1	温度調節	35
2.6.2	モニターのための出力量	35
2.6.3	周期境界条件と座標の補正	36
2.6.4	ファイルの作成	36
2.7	数値積分の例—ソフトコア系	36
2.8	力の計算時間の短縮化	40
2.8.1	粒子登録法	40
2.8.2	基本セルの部分セル分割	42
2.8.3	ベクトル計算機向き短縮法	43
3.	剛体球系の分子動力学法	
3.1	剛体球系の由来	44
3.2	弾性球衝突の力学	45
3.3	計算のアルゴリズム	47
3.4	非可逆性, 統計性, カオス	48
4.	データ解析	
4.1	長時間平均	52
4.2	温度と内部エネルギー	53
4.3	ビリアル定理と圧力	54
4.4	動径分布関数	57
4.5	剛体球系の圧力	60
4.6	自己拡散係数と速度の自己相関関数	62
4.6.1	自己拡散係数	62
4.6.2	速度の自己相関関数	62
4.6.3	自己拡散係数の求め方	65
4.7	サンプル数	66
4.8	ソフトコア系のデータ解析	68

4.8.1 ソフトコア系のスケーリング則	68
4.8.2 次元解析	70
4.8.3 解析結果	71

5. モンテカルロ法

5.1 モンテカルロ法と乱数	75
5.2 ある分布に従う乱数の発生法	77
5.2.1 確率分布関数	77
5.2.2 棄却法	77
5.2.3 合成法	79
5.2.4 直接法	81
5.3 正規分布と正規乱数	82
5.4 定積分へのモンテカルロ法の応用	85
5.5 カノニカル分布のモンテカルロ法	87
5.5.1 カノニカル分布	87
5.5.2 アルゴリズム	88
5.5.3 マルコフ過程と遷移確率	90
5.6 ソフトコア格子系への応用	92
5.6.1 融解の秩序・無秩序モデル	92
5.6.2 格子系から連続系へ	93
5.7 スピン系のモンテカルロ法	96
5.7.1 イジングモデル	96
5.7.2 遷移確率	97
5.7.3 イジングモデルの緩和現象	98

6. クーロン力の計算法

6.1 エワルドの方法	103
6.1.1 体系の静電ポテンシャルエネルギー	103
6.1.2 計算時間の短縮	107
6.2 エワルドの公式の証明	109

7. スペクトル解析

7.1	スペクトル解析とは	113
7.2	数学の準備	115
7.2.1	フーリエ級数	115
7.2.2	デルタ関数	118
7.2.3	フーリエ変換	120
7.3	定常確率過程	122
7.4	自己相関関数とスペクトル密度	124
7.4.1	スペクトル密度	124
7.4.2	ウィーナー-ヒンチンの定理	126
7.5	静的構造因子と空間相関関数	127
7.5.1	静的構造因子	128
7.5.2	空間相関関数と動径分布関数	132
7.6	時間相関関数と輸送係数	134
7.6.1	久保の公式	134
7.6.2	多体時間相関関数の計算例	136
7.7	動的構造因子と時空相関関数	139
7.7.1	動的構造因子と時空相関関数	139
7.7.2	動的構造因子の計算例	140

8. 剛体分子の分子動力学法

8.1	分子の剛体モデル	145
8.2	剛体分子の回転運動と座標変換	146
8.3	剛体分子系の運動方程式	150
8.3.1	運動方程式	150
8.3.2	オイラーの角の4元数表示	153
8.4	運動方程式の数値積分	155

9. 新しい分子動力学法

9.1	分子動力学法の拡張	159
9.2	圧力一定の分子動力学法	160

9.2.1 拡張系の定式化	160
9.2.2 応 用 例	163
9.3 温度一定の分子動力学法	165
10. モデル物質とモデル現象	
10.1 はじめに	170
10.2 超イオン導電体	171
10.3 剛体イオンモデルと SIC のシミュレーション	172
10.4 ソフトコアイオン系と α -AgI	174
10.4.1 スケーリング則	174
10.4.2 部分格子の安定性と Γ	176
10.4.3 部分格子の安定性とイオン半径	180
10.5 モデル α -AgI の動的構造	182
10.5.1 Γ の 4 面体解析	182
10.5.2 Ag^+ の 4 面体内滞在時間と拡散の道筋	184
10.5.3 Γ の 4 面体と Ag^+ とのダイナミックな相関	187
10.5.4 多体相関と動的構造因子	188
10.5.5 Ag^+ 拡散のダイナミックな機構	194
10.5.6 CaF_2 の問題	196
10.6 ガラスを作るのになぜ冷すのか	198
10.7 ソフトコア系の結晶への緩和	200
10.8 結晶化過程のボロノイ多面体解析	203
10.8.1 ボロノイ多面体	203
10.8.2 ボロノイ多面体決定のアルゴリズム	205
10.8.3 結晶核の成長	207
参 考 文 献	210
索 引	216