

# 目 次

1. デルタ関数とグリーン関数 .....	1
1.1 本書の構成 .....	1
1.2 グリーン関数 .....	2
1.3 デルタ関数 .....	3
1.3.1 力 積 .....	3
1.3.2 デルタ関数の実際の定義 .....	5
1.3.3 きわめて短距離間に働く相互作用 .....	6
1.4 物理学におけるデルタ関数 .....	7
1.4.1 デルタ関数の幅——1次元デルタ関数のさまざまな定義 .....	8
1.4.2 3次元デルタ関数 .....	9
1.4.3 極限操作における $d$ と系の大きさ .....	10
1.5 ラプラス演算子とヘルムホルツ方程式 .....	11
1.5.1 試験解としてのグリーン関数 .....	12
1.5.2 ヘルムホルツ方程式 .....	13
2. グリーン関数の意味と働き .....	15
2.1 グリーン関数の意味づけ .....	15
2.1.1 調和振動子 .....	15
2.1.2 応答の反応様式 .....	18
2.2 物理学におけるヘルムホルツ方程式 .....	21
2.2.1 ヘルムホルツ方程式のグリーン関数 .....	22
2.2.2 境界条件 .....	24
2.3 クライン-ゴルドン方程式 .....	25

<b>3. グリーン関数と量子力学</b> .....	27
3.1 シュレーディンガー固有値方程式 .....	27
3.2 散乱におけるボルン近似 .....	28
3.3 グリーン関数モンテカルロ法の基礎概念 .....	30
3.4 グリーン関数量子モンテカルロ計算の具体的方法 .....	31
3.4.1 固有値方程式の解の形 .....	31
3.4.2 グリーン関数の直観的意味 .....	32
3.4.3 アルゴリズムとしての計算の手順 .....	33
3.4.4 スケーリング .....	35
<b>4. 変分法</b> .....	37
4.1 量子力学における変分法 .....	37
4.1.1 変分法の使われ方 .....	37
4.1.2 変分法の基本原理——試行関数 .....	38
4.1.3 量子力学における簡単な例 .....	40
4.1.4 半導体物理学で使われている例 .....	41
4.2 ラグランジュの未定乗数法 .....	43
4.2.1 未定乗数の導入とそれを含む形式解 .....	43
4.2.2 未定乗数の決定 .....	45
4.2.3 簡単な例題 .....	45
4.2.4 未知なものとしての関数 .....	46
<b>5. 汎関数</b> .....	47
5.1 汎関数とは何か .....	47
5.2 経路に関する積分の変分 .....	48
5.2.1 フェルマーの原理 .....	48
5.2.2 変分問題と偏微分方程式 .....	52
5.3 変分問題の直接解法 .....	53
5.3.1 基底関数による展開 .....	53
5.3.2 汎関数としての最小2乗法 .....	54

5.4 直接解法における関数の決め方 .....	55
5.4.1 適切な展開関数 .....	55
5.4.2 円筒形媒質を伝わる波の波数の下限問題 .....	55
<b>6. 有限要素法の基礎</b> .....	58
6.1 偏微分方程式の数値解法 .....	58
6.2 電磁場の波動方程式とシュレーディンガー方程式 .....	60
6.3 汎関数の変分法としての有限要素法 .....	61
6.4 領域の分割と補間関数 .....	63
6.4.1 2次元系 .....	63
6.4.2 解くべき式 .....	66
<b>7. 有限要素法を用いた量子系解析</b> .....	68
7.1 1次元散乱問題——トンネル問題 .....	68
7.2 計算結果例 .....	72
7.3 2次元固有値問題 .....	74
<b>8. 境界要素法の基礎</b> .....	79
8.1 境界要素法を理解するための1次元問題 .....	79
8.2 電気伝導度と透過係数——ランダウアー-ビュッティカーの理論 .....	82
8.2.1 ランダウアーの公式 .....	82
8.3 2次元系の境界積分方程式 .....	84
8.4 境界要素法による数値解析 .....	85
8.4.1 境界の分割と補間の仕方 .....	86
8.4.2 補間精度の問題 .....	88
8.4.3 境界要素法の持つ特徴 .....	88
<b>9. 境界要素法による量子系解析の実際</b> .....	90
9.1 電子のグリーン関数 .....	90
9.2 乱雑な形状の量子ドットの電子伝導 .....	91

9.2.1	境界条件と境界要素の取り方	91
9.2.2	計算結果	92
9.2.3	計算精度	94
9.3	現在の研究状況と今後の課題	95
9.3.1	有限ポテンシャルのある場合	95
9.3.2	3次元への拡張	95
10.	ハートリー-フォック近似	97
10.1	ハートリー-フォック近似の基本原理	98
10.2	どうして交換相互作用が引力的なのか	101
10.3	計算物理学におけるハートリー-フォック近似	102
10.3.1	未定乗数の意味づけ	103
10.3.2	多電子系のなかの一体エネルギー	105
10.4	改良の方向	105
10.4.1	強相関効果の取り込み——CIの方法	105
10.4.2	密度汎関数の方法	106
11.	密度汎関数の基礎理論	107
11.1	密度汎関数理論の成立条件	108
11.2	ハミルトニアン	109
11.3	ポテンシャル $v(r)$ と密度 $\rho(r)$ の対応関係	110
11.4	電子数の保存	111
11.5	参考原始系における交換・相関エネルギー	112
11.6	多体系の参考原始系による表現	115
12.	コーン-シャム方程式と断熱操作	116
12.1	コーン-シャム方程式	116
12.1.1	有効ポテンシャル	116
12.1.2	計算物理学としての注意と現実問題への対処	118
12.2	スピン自由度を考える場合	118

12.2.1	フェルミ孔関数	119
12.2.2	排除孔の概念	120
12.3	断熱操作	122
13.	多体効果の s 波近似と局所表現	126
13.1	交換・相関エネルギーの孔関数による表記	126
13.1.1	ヘルマン-ファインマンの定理	126
13.1.2	クーロン相互作用の立体角平均	129
13.2	局所密度汎関数近似	129
13.3	計算を行う具体的な手順	131
13.4	NH <sub>3</sub> 分子による計算例	132
13.5	密度汎関数法と分子動力学法の結合——カー-パリネロの方法	134
13.5.1	原子核の位置を決める計算	134
13.5.2	仮想的な時間変化の導入	135
13.5.3	注意すべき点	136
	付録：スケーリング則	137
	問題の解答	141
	あとがき	151
	参考文献	153
	索引	161