目　次

序 viii

第1章　序論 1
1.1　物理学と計算物理学 1
1.2　古典力学と統計力学 2
1.3　確率的シミュレーション 4
1.4　電気力学と流体力学 5
1.5　量子力学 6
1.6　量子力学と古典統計物理学の関係 7
1.7　量子分子動力学 8
1.8　量子場理論 8
1.9　本書について 9

第2章　球対称ポテンシャルによる量子散乱 13
2.1　序 13
2.2　断面積計算のためのプログラム 17
2.2.1　動径方向のシュレーディンガー方程式に対するヌメロフのアルゴリズム 18
2.2.2　球ベッセル関数 20
2.2.3　ルーチンの組合せ（結果） 21
2.3　散乱断面積の計算 23

第3章　シュレーディンガー方程式に対する変分法 27
3.1　変分計算 27
3.2　変分計算の例 30
3.2.1　無限に深い井戸型ポテンシャル 31
3.2.2　水素原子に対する変分計算 32
3.3　一般化された固有値問題の解法 34
3.4　摂動論と変分計算法 35

第4章　ハートリー・フォック法 41
4.1　序 41
4.2　ボルン・オッペンハイマ近似と独立粒子法 42
4.3　ヘリウム原子 44
4.3.1　自己整合性 44

4.3.2 ヘリウムの基底状態を計算するプログラム 46
4.4 多電子系とスレーター行列式 49
4.5 自己整合性と交換，ハートリー・フォック理論 51
4.5.1 ハートリー・フォック方程式（物理的描像） 51
4.5.2 ハートリー・フォック方程式の導出 54
4.5.3 クープマンの定理 57
4.6 基底関数 58
4.6.1 閉殻系および開殻系 58
4.6.2 基底関数：STO および GTO 61
4.7 ハートリー・フォック法のコンピュータプログラムの構造 66
4.7.1 2 電子積分 66
4.7.2 HF プログラムの一般的枠組 67
4.8 ガウス関数を含む積分 70
4.9 応用と結果 74
4.10 ハートリー・フォック近似の改善 76

第 5 章 密度汎関数理論 **85**
5.1 序 85
5.1.1 密度汎関数理論（物理的描像） 86
5.1.2 密度汎関数形式とコーン・シャム方程式の導出 87
5.2 局所密度近似 91
5.3 ヘリウム原子に対する密度汎関数プログラム 92
5.3.1 動径方向の方程式の解法 93
5.3.2 ハートリーポテンシャルの組込み 94
5.3.3 局所密度交換ポテンシャル 96
5.4 応用と結果 97

第 6 章 周期的な固体におけるシュレーディンガー方程式の解法 **103**
6.1 序（定義） 104
6.1.1 結晶格子 104
6.1.2 逆格子 105
6.2 バンド構造とブロッホの定理 105
6.3 近似 107
6.3.1 ほとんど自由な電子の近似 107
6.3.2 強い束縛の近似 108
6.4 バンド構造の手法と基底関数 109
6.5 補強された平面波法 111
6.5.1 平面波と補強 111
6.5.2 銅のバンド構造に対する APW プログラム 115
6.6 線形化された APW 法（LAPW） 118
6.7 擬ポテンシャル法 120
6.7.1 シリコンに対する擬ポテンシャルのバンド構造プログラム 122
6.7.2 エネルギーに依存しない正確な擬ポテンシャル 125
6.8 バンド構造からの情報抽出 126
6.9 いくつかの付加的な注意 126
6.10 他のバンド法 128

第 7 章　古典統計力学 133
7.1 基礎理論 133
7.1.1 アンサンブル 134
7.2 統計モデルの例（相転移） 140
7.2.1 分子系 140
7.2.2 格子モデル 143
7.3 相転移 147
7.3.1 1 次および連続の相転移 147
7.3.2 臨界相転移および有限サイズのスケーリング 149
7.4 シミュレーションにおける平均 155

第 8 章　分子動力学シミュレーション 159
8.1 序 159
8.2 エネルギー一定の分子動力学 162
8.3 アルゴンの分子動力学のシミュレーションプログラム 168
8.4 積分法（シンプレクティック積分子） 170
8.4.1 ベルレのアルゴリズム再考 171
8.4.2 シンプレクティック幾何（シンプレクティック積分子） 176
8.4.3 シンプレクティック積分子の導出 180
8.5 異なるアンサンブルに対する分子動力学法 183
8.5.1 一定温度 183
8.5.2 圧力一定の方法 189
8.6 分子系 190
8.6.1 分子の自由度 190
8.6.2 剛体分子 192
8.6.3 一般的な手順（部分的束縛） 197
8.7 長距離相互作用 198
8.7.1 周期的クーロン相互作用 199
8.7.2 力とポテンシャルの効率の良い計算 201
8.8 ランジュバン動力学シミュレーション 204
8.9 動力学的量（非平衡分子動力学） 208

第 9 章　量子分子動力学 217
9.1 序 217
9.2 分子動力学法 220
9.3 例：水素分子の量子分子動力学 225
9.3.1 電子構造 225
9.3.2 原子核の運動 227
9.4 規格直交化と共役勾配法 231
9.4.1 電子軌道の直交化 232
9.4.2 共役勾配法 235
9.4.3 大規模な系 237

第10章　モンテカルロ法 241
10.1 序 241
10.2 モンテカルロ積分 242
10.3 マルコフ連鎖を用いた重み付きサンプリング 244
10.3.1 イジングモデルのモンテカルロ法 249

10.3.2 単原子気体のモンテカルロ法 253
10.4 他のアンサンブル 255
10.4.1 (NPT) アンサンブル 255
10.4.2 グランドカノニカルアンサンブル 257
10.4.3 ギブスアンサンブル 259
10.5 自由エネルギーと化学ポテンシャルの評価 261
10.5.1 自由エネルギー計算 261
10.5.2 化学ポテンシャルの決定 263

第11章 転送行列法 **265**
11.1 序 265
11.2 1次元イジングモデルと転送行列 266
11.3 2次元スピンモデル 269
11.4 もっと複雑なモデル 273

第12章 量子モンテカルロ法 **277**
12.1 序 277
12.2 変分モンテカルロ法 278
12.2.1 方法の説明 278
12.2.2 サンプルプログラムと結果 280
12.2.3 試行関数 282
12.2.4 拡散方程式，グリーン関数，ランジュバン方程式 283
12.2.5 フォッカープランク方程式を使った VMC へのアプローチ 288
12.3 拡散モンテカルロ法 290
12.3.1 単純拡散モンテカルロ法 290
12.3.2 応用例 293
12.3.3 拡散モンテカルロ法のガイド関数 294
12.3.4 フェルミオンの計算の問題点 296
12.4 経路積分モンテカルロ法 300
12.4.1 経路積分の基礎 300
12.4.2 応用例 307
12.4.3 効率を上げるには 310
12.5 格子上の量子モンテカルロ法 311
12.6 モンテカルロ転送行列法 315

第13章 格子場理論の計算法 **321**
13.1 序 321
13.2 量子場の理論 322
13.3 場の相互作用と繰り込み 328
13.4 格子場の理論のアルゴリズム 331
13.4.1 モンテカルロ法 334
13.4.2 モンテカルロアルゴリズム（実装と結果） 336
13.4.3 分子動力学 339
13.5 臨界減速を小さくする手法 344
13.5.1 Swendsen–Wang 法 345
13.5.2 Wolff の単一クラスタアルゴリズム 350
13.5.3 マルチグリッドモンテカルロ法 355
13.5.4 フーリエ加速型ランジュバン法 359

13.6 スカラー場の理論に対するアルゴリズムの比較 361
13.7 ゲージ場の理論 362
13.7.1 電磁気学のラグランジアン 362
13.7.2 格子上の電磁気学（クエンチ・コンパクト QED） 365
13.7.3 格子 QED のシミュレーション 369
13.7.4 動的フェルミオンの導入 372
13.7.5 非可換ゲージ場 – 量子色力学 378

第14章 高性能計算と並列化 **389**
14.1 序 389
14.2 パイプライン化 390
14.2.1 アーキテクチャの側面 390
14.2.2 プログラミング関連事項 393
14.3 並列化 394
14.3.1 並列アーキテクチャ 394
14.3.2 プログラミング関連事項 398
14.4 分子動力学法のシストリックアルゴリズム 401

付録A 数値解法 **405**
A.1 数値解法に関して 405
A.2 特殊関数に対する反復法 406
A.3 関数の根の求め方 407
A.4 関数の極値の求め方 409
A.5 離散化 413
A.6 数値的求積法 414
A.7 微分方程式 416
A.7.1 常微分方程式 417
A.7.2 偏微分方程式 425
A.8 線形代数の問題 435
A.8.1 線形方程式の系 435
A.8.2 行列の対角化 440
A.9 高速フーリエ変換 443
A.9.1 一般的考察 443
A.9.2 FFT の概説 445

付録B 乱数の作り方 **451**
B.1 乱数と擬似乱数 451
B.2 乱数生成法 452
B.3 非一様乱数の生成 455

参考文献 **458**

訳者あとがき **477**

索 引 **479**