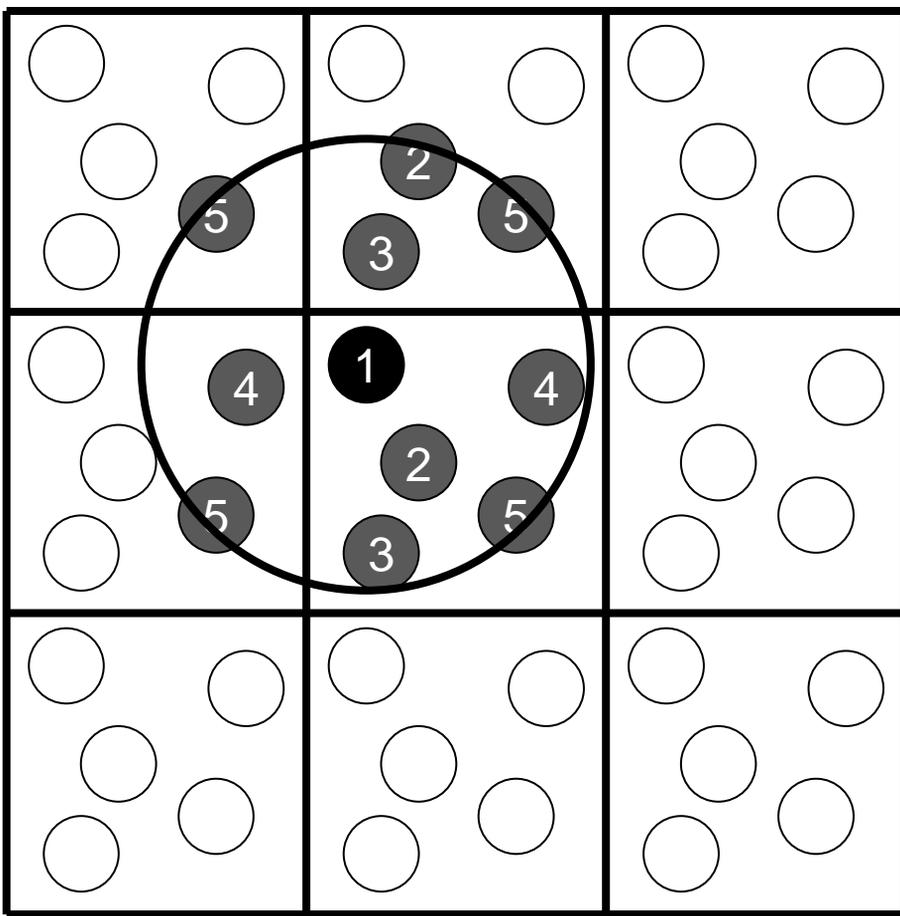


(a)



(b)

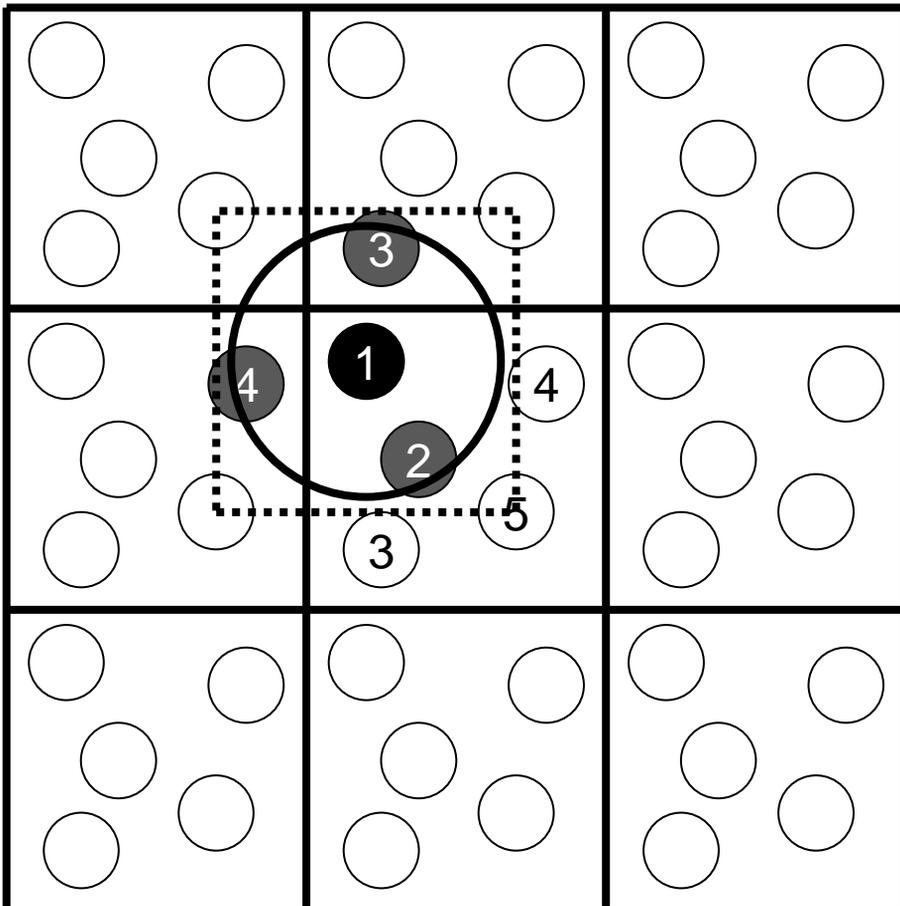


図4.17 (a) 周期境界条件におけるカットオフ法 原子1 (黒色) から実線の円で示した距離 $r_c$ 以内にある原子 (暗灰色) との相互作用を計算する。  
 (b)  $r_c$  をセルの最も短い辺の長さの半分以下に設定 原子1を中心としたセルの範囲を破線で表示。