

” エwald和モデル” の数式解説 (“ewald.f”)

Open DEM Japan

2025 年 10 月 12 日

本プログラムは遠距離クーロン相互作用をエwald和によって評価する。実空間項は

$$E_{\text{real}} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} q_i q_j \frac{\text{erfc}(\alpha r_{ij})}{r_{ij}} \quad (1)$$

と計算され、逆格子空間項は

$$E_{\text{recip}} = \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \frac{4\pi}{k^2} e^{-k^2/4\alpha^2} \left| \sum_j q_j e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j} \right|^2 \quad (2)$$

で与えられる。自己エネルギー補正を差し引くことで完全な電荷相互作用が得られ、高精度な静電ポテンシャルが再構成される。