

”Class2 力場モデル” の数式解説 (“force_class2.f”)

Open DEM Japan

2025 年 10 月 12 日

本プログラムは Class2 型力場に基づく分子ポテンシャルを評価する。結合伸縮 r , 結合角 θ , 二面角 ϕ に対し、エネルギーは

$$U = \sum_b k_{2,b}(r_b - r_b^0)^2 + \sum_a k_a(\theta_a - \theta_a^0)^2 + \sum_d \sum_{n=1}^3 V_{n,d} \cos(n\phi_d) \quad (1)$$

として構築される。相互依存項は交差項

$$U_{\text{cross}} = \sum_{b,a} k_{ba}(r_b - r_b^0)(\theta_a - \theta_a^0) \quad (2)$$

で補正され、高階の結合性質を再現する。計算された力は分子動力学計算における高精度な材料モデルに寄与する。