

周期境界条件について

糸賀 響

平成 30 年 4 月 24 日

1 周期境界条件 PBC とは

単位セルを連続すると考えることで、有限大きさの 1 つセル（基本セル）の中にのみに粒子や計算対象の物体を実体化させるにも関わらず、無限サイズの系を模倣することができる条件（モデル）のことを周期境界条件という（イメージ図 1.1）。3 次元の場合、最も簡単なものは一辺の長さが L の立方体を基本セルとし、そのまわりに同じサイズをもち基本セルの内容の虚像をもつイメージセルを考えるものだろう。

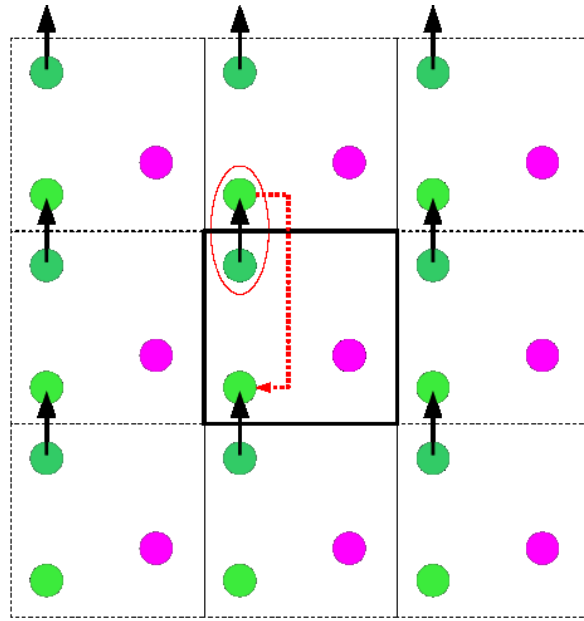


図 1.1: 周期境界条件のイメージ図

1.1 点を移動させる処理

任意次元の周期境界では、 i 番目の粒子を

$$\mathbf{p}_i = \mathbf{p}_i + \mathbf{L}_1 = \mathbf{p}_i + \mathbf{L}_2 = \dots \quad (1.1)$$

のように粒子の位置を考える。 $\{\mathbf{L}\}$ は線型独立なベクトルであり、それぞれ L の整数倍のスカラを要素にもつ。

1.2 近接点を取得する処理