



図4.16 (a) カットオフ法 中央の原子（黒色）から距離 r_c 以内にある原子（暗灰色）との相互作用を計算する。(b) ペアリストの作成 中央の原子（黒色）から距離 r_l 以内にある原子（明灰色と暗灰色）とのペアリストを作成し、その中で、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。