

”液晶 3x3 データ” の数式解説 (“data_lc.big”)

Open DEM Japan

2025 年 10 月 12 日

本データファイルは液晶分子集合の初期構造を定義し,27 個の液晶分子集合を 3 times 3 配列で含む。計算セルは

$$\Omega = [x_{\min}, x_{\max}] \times [y_{\min}, y_{\max}] \times [z_{\min}, z_{\max}], \quad (1)$$

$$V = 81 \times 34.5 \times 49.5^3 \quad (2)$$

全原子数は

$$N = 6750 \quad (3)$$

であり、種類別質量は

$$m_\alpha \in \{28.0855, 15.9994, 12.011, 1.008\} \text{ amu} \quad (4)$$

として与えられる。非結合係数は

$$\varepsilon_{\alpha\beta} = \sqrt{\varepsilon_\alpha \varepsilon_\beta}, \quad \sigma_{\alpha\beta} = \frac{\sigma_\alpha + \sigma_\beta}{2}, \quad (5)$$

に従い、DEM 計算の接触評価を支援する。

$$\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} = 0 \quad (6)$$