

”液晶 PPPMNPT モデル”の数式解説 (“in.lc.big.pppm”)

Open DEM Japan

2025 年 10 月 12 日

本入力ファイルは LIGGGHTS 離散要素法で液晶分子集合の PPPM NPT ダイナミクスを実施し, 粒子-メッシュ法で長距離電場を解く。系のポテンシャルエネルギーは

$$U = U_{\text{bond}} + U_{\text{angle}} + U_{\text{dihedral}} + U_{\text{improper}} + U_{\text{nb}}. \quad (1)$$

非結合項は

$$U_{\text{nb}}(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] + U_{\text{coul}}, \quad (2)$$

で表される。

$$U_{\text{coul}} = U_{\text{short}} + U_{\text{mesh}}. \quad (3)$$

温度制御は

$$\dot{\zeta}_T = \frac{1}{Q_T} \left(\frac{2K}{fk_B} - T_{\text{target}} \right), \quad \dot{\mathbf{v}}_i = \frac{\mathbf{F}_i}{m_i} - \zeta_T \mathbf{v}_i, \quad (4)$$

に従い、圧力制御は

$$\dot{\eta} = \frac{1}{Q_P} (P - P_{\text{target}}) \quad (5)$$

でセル体積を調整する。

$$\nabla^2 \phi = -\frac{\rho}{\epsilon_0}, \quad T_{\text{target}}(t) = 300 + 20 \frac{t}{t_{\text{ramp}}}. \quad (6)$$

メッシュ解法と温度ランプが組み合わさり、秩序化過程に伴う比容変化が解析できる。