

## ネマティック液晶相と分子間相互作用に関する研究 —スケーリングによるダイナミクスの検証—

A study on relationship between nematic phase formation and intermolecular interaction

佐藤 克彦 (SATOH Katsuhiko)

液晶は非球形状の分子が多数集まり、それらの分子間にはたらく、異方的で比較的強い分子間相互作用による共同現象の結果として生じる複雑な性質である。その中でもネマティック相は、もっとも流動性が大きく構造的に単純な相であり、多種多様な分子によって形成される相である。それ故、これまで液晶相の中ではもっとも多くの研究が行われ、ディスプレイや温度計などに広く応用されている。しかしながら、その一方で、このネマティック相の形成に必要な分子および分子集団レベルの起源的要因を実在化合物から見いだすとすれば、分子が非球形であり、それに伴って分子間に働く相互作用も明らかな方向性を持っていることだけであり、それ以上の議論は未だにきわめて各論的にならざるを得ない。したがって液晶性と分子の骨格構造や官能基の構造と極性などの分子の微細構造を統一的に議論することはきわめて難しい。これまでは統計力学に基づいて複雑な分子構造を粗視化した分子間ポテンシャルを用いて液晶の性質が議論されてきた。計算機による分子設計支援が可能になってきた現在、微視的である分子構造と液晶という性質との関係性を計算機を用いて明らかにすることは、求める物性と分子間相互作用とをつなぐ手法の一つである。3年間で実施予定の本研究課題の1年目では、Simple Cylindrical (SC) モデルを用いた分子動力学シミュレーションによって、等方相およびネマティック相での相図( $PVT$  図)の作成と熱力学パラメータ $\gamma$ の算出と実験との比較を行った。まず始めに相図( $P$ (圧力)- $V$ (体積)- $T$ (温度))の作成では、ネマティック相の形成と分子間ポテンシャルの関係を確認した。その後、各圧力下での温度依存性のデータをもとに1次および2次の配向自己相関関数を算出した。この1次および2次の配向相関関数は、実験的には誘電緩和実験で観測されるゆっくりとした分子全体の回転運動と、ESRおよびラマン分光実験で観測される高速な回転運動にそれぞれ対応している。この2種の配向自己相関関数が単一の指数関数減衰であると仮定して、カーブフィッティングにより、それぞれの緩和時間を算出した。また、この緩和関数と同じく、シミュレーションから得られる各分子の配向の時系列データから求められる回転拡散係数を用いて、統計力学に基づく理論式によって回転粘性係数を見積もった。この理論式に用いる回転緩和時間のデータは2次の配向自己相関関数データの方が1次のものよりも妥当であることから、2次の回転緩和時間を用いて粘性係数を算出した。それらの2種の回転緩和時間および回転粘性係数に対し、関係式より、最終的に熱力学パラメータ $\gamma$ を見積もった。

Ref.) G.R.Luckhurst and K.Satoh, *J. Chem. Phys.*, Vol.132, 184903, 2010.