

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)

液晶と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と物質をいう。ネマティック相は発現する多くの液晶相の中でも、もっとも流動性が大きく構造的に最も単純な相であり、多種多様な分子が発現する相である。過去にネマティック相とスメクティック相において熱力学パラメータとして知られている Γ を圧力変化および温度変化による密度測定などから求める実験と理論が展開され、多くのネマティック液晶において物質固有の定数という認識は得られたものの、分子構造や分子間相互作用とこのパラメータとの関連性については統一的な理解はいまだ得られていない。最近、この熱力学パラメータと分子回転の緩和時間との関係について報告されている。さらにはガラス転移を起こす高分子化合物などに見られる分子回転運動の温度・圧力依存性における挙動とネマティック液晶の分子回転運動のそれには類似性があることも誘電緩和等の実験で指摘されている。本研究は、ネマティック液晶相で見いだされる分子回転運動の特性についてモデルポテンシャルを用いた分子シミュレーションによって、分子間相互作用と熱力学パラメータの関係について調べ、どのような分子間相互作用が熱力学パラメータ Γ に寄与しているかについて明らかにすることを目的としている。そこで、まずモデルポテンシャルを用いて検討した場合、熱力学パラメータに与えるポテンシャルの依存性をまず調べるのが基本になる。初年度には Simple Cylindrical モデルを用いて相図の作成と回転挙動について調べ、2年目である22年度は、Gay-Berne 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 Γ の算出と実験との比較を行った。また異なる熱力学的条件の下で1次および2次の配向自己相関関数より緩和時間を算出した。これらの緩和時間の温度および圧力依存性データが等方相領域では規則性は見られないが、ネマティック相領域では線形性を示していることが分かった。つまり単純なモデルポテンシャルを用いてもネマティック相においては分子間力とこの緩和時間との間には強い相関を見いだすことができることを示している。このことはガラス転移点を有する高分子化合物などが示すスケーリングパラメータ Γ と類似している。また同様の解析は理論式に基づいて算出した回転粘性係数についても同様の傾向が見られることも分かった。しかしながら、この類似性をより明確に示すためには他の諸条件やさらに異なるポテンシャル関数での検証が必要である。