

ネマティック液晶の外場配向における分子動力学

○ 佐藤 克彦, G. R. Luckhurst

Department of Chemistry, University of Southampton
(Highfield, Southampton SO17 1BJ, United Kingdom)

【緒言】

分子シミュレーションは、固体のような異方性と液体のような流動性を併せ持つ液晶の特異で興味深い性質を分子レベルで研究できる有用な手法である。外部場の応答による液晶分子の挙動は基礎、応用領域を問わずとても興味深いだけでなく重要であるが、それらの構造および運動性はいまだ明らかになっていない。そこで、本研究ではネマティック液晶の磁場による再配向過程の分子動力学シミュレーションを行い、再配向時における分子の運動をモニターしてその詳細を解析し、さらに連続体理論および実験研究による結果との比較検討を行う。

【方法】

液晶の複雑な分子構造を単純にモデル化した Gay-Berne モデルを用いて、定温定圧分子動力学法による分子シミュレーションを行った。Gay-Berne モデルのパラメータセットは、相図と構造に関して詳細に調べられている GB(4.4,20.0,1,1) を使用し、換算圧力 P^* はネマティック相が広い温度領域で出現する 2.0 を使用した。また、このシミュレーションでは 4,000 および 8,788 粒子（分子）から構成される系の磁場配向時の再配向過程を解析した。

【結果】

磁場配向時のディレクターの緩和プロセスを、Ericksen-Leslie 連続体理論と比較したところ、きわめて良い一致が見られた。また、緩和時間と磁場強度との関係においても、本シミュレーションの結果はこの理論を満たすことが解った。さらに、この関係から回転粘度係数を見積もったところ、モデル分子の単純な形状のために実験値よりも過小評価するものの、定性的には理論および実験による研究結果に一致することが解った。このシミュレーションから算出した回転粘度係数がシミュレーションの他の算出方法から得られた値との大きな違いは見られなかった。さらに、このモデル液晶分子によるシミュレーション結果を実在のネマティック液晶にマッピングし、このモデルの有用性に関しても調べた。再配向時の局所的な構造については、このネマティック相においては磁場による変化は見られず、再配向時も平衡時のネマティック相と同様な局所構造を保ったまま再配向している結果が得られた。また、一次および二次の配向の時間相関関数を用いて、再配向時の分子の動力学について議論した。ここでは、Maier-Saupe 理論を用いることによって、この緩和過程に関する平均場理論との比較が可能となり、一次および二次の時間相関関数の緩和時間におけるネマティック秩序パラメータ依存性に関して、緩和時間の遅延因子およびスペクトル形状の理論研究との比較も行った。さらに、分子の緩和時間はディレクターの緩和時間に比べて約 90 倍速く、この結果も実験値を定性的に再現していることが解った。