

## スメクティックA相における磁場による分子スイッチング

佐藤 克彦

大阪産業大学 教養部 化学教室

(〒574-8530 大阪府大東市中垣内 3-1-1)

## 【緒言】

多様な液晶相のなかでもスメクティック相は層状構造を有し、その中で一番対称性の小さい一軸性の相がスメクティックA相である。一般に、この相は層構造をもたないネマティック相よりも粘性は高いものの、流動性は他の高次の液晶相に比べて小さい。近年、このスメクティックA相が外場によって配向変化する際のメカニズムについてNMRやX線解析による実験研究が行われている。しかしながら、複雑な構造変化であるために、実験結果も非常に複雑で、その全容を理解することは容易ではない。一方、シンプルな液晶分子モデルを用いた分子シミュレーションはそのメカニズムを解析するために定性的ではあってもきわめて有用な情報を与えてくれる。そこで、ここでは外場によって再配向する際の構造変化“分子スイッチング”の分子動力学シミュレーションを行った結果について報告する。

## 【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、等温等圧での分子動力学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) を用い、換算圧力  $P^*$  はスメクティックA相が広い温度領域で出現する 1.0 を使用し、8,788 分子からなる系でシミュレーションを行った。構造変化を考慮して、長さが自由に变化できるシミュレーション BOX を用いた。

## 【結果】

大きな構造変化を伴うシミュレーションを有限系で行うためには、まず分子の初期配置に関する諸条件が必要であることが分かった。その諸条件下で、分子の平均的向きであるディレクタに対して45度および90度の方向に磁場の方向を変化させた後の分子と相全体の構造変化を相関関数、分布関数およびスナップショットにより追跡した。45度の系では、スメクティック相は保持されままだま様な方向に向きを変え、X線の実験結果を再現した。また、90度の場合には実験同様に長い Induction period の後に急激に構造変化が起こり、再配向前と同じ配向秩序度を有する構造へと変化した。さらに、実験データとの対応づけるためにシミュレーションからNMRスペクトルを算出し、比較を行った。

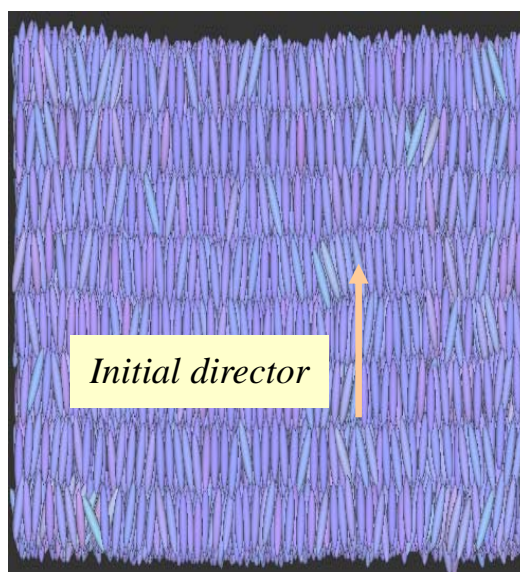


図1 初期構造のスナップショット