

スケーリングによるダイナミクスと構造・熱力学量・分子間力の関係

— 液晶相を中心に —

○佐藤 克彦

大阪産業大学教養部(〒574-8537 大阪府大東市中垣内 3-1-1)

E-mail: ksatoh@las.osaka-sandai.ac.jp

【緒言】

液晶は液体のような流動性と結晶のような配向性を併せ持つ物質である。これは応用的側面だけでなく、基礎科学においても流動性と配向性という特性を使って様々な理論的な展開が期待できる興味深い物質である。その1つとして液晶相、おもにネマティック相において、熱力学的パラメータとして知られている Γ ($\equiv -\log(T)/\log(V)$, T, V は温度と体積) [1] と誘電緩和スペクトルから得られる分子の回転緩和時間 τ_1 を温度と体積でスケールした際に導入するパラメータ γ (スケールパラメータ) との間には強い相関がみられることが実験的に知られている。[2] このスケールパラメータは物質および相に依存するものの、この相関は過冷却液体や単純液体でもみられ、多くの物質の共通性を示す指標の1つではないかと考えている。本研究ではこの実験事実をシミュレーションで再現し、その中に潜んでいる関係性を紐解くことによってこれらの物質の普遍的性質について調べている。最終的には静的諸量と動的諸量、分子間力、そしてマイクロ構造との関係性について考察し、それらの間に成立する単純な法則の存在とスケールパラメータの物理的意味について明らかにすることを目指している。

【方法】

粗視化した2つのモデル分子(粒子)を使用した古典的分子動力学シミュレーションによってこれまでの実験事実を検証するため、スケールパラメータの一般的性質への拡張の可能性やポテンシャル依存性について調べた。1つ目のモデルは配向する数分子から構成される小さなクラスタをイメージしたモデルであり、このモデルは配向の秩序-無秩序相転移挙動をよく再現し、液晶相形成に関する基本的理解に貢献したモデルである。2つ目は液晶分子として典型的な非球形分子を回転楕円形粒子で表現したモデルである。これらのモデルを使った MD シミュレーションで広範囲な相図を作成し、いくつかの状態点での時間相関関数から回転緩和時間や自己拡散係数などの動的諸量を求めスケールパラメータを試みた。

【結果】

右上の2つのグラフは分子モデルの系の分子回転緩和時間の温度および体積依存性を示している。下のグラフはそれらのある値でスケールするとマスターラインが得られることを示している。[3] このほか回転拡散係数や粘性係数、配向秩序度でも同様にマスターラインが得られた。これらの詳細は当日発表する予定である。

参考文献

- [1] J.R. McColl, Phys. Lett. A, 38, 55 (1972); J.R. McColl & C.S. Shih, Phys. Rev. Lett. 29, 85 (1972).
 [2] For example; S. Urban & A. Würflinger, Phys. Rev. E 72, 021707 (2005); S. Urban, C.M. Roland, J. Czub, & K. Skrzypek, J. Chem. Phys. 127, 094901 (2007); C.M. Roland, R.B. Bogoslovov, R. Casalini, A.R. Ellis, S. Bair, S.J. Rzoska, K. Czuprynski & S. Urban, J. Chem. Phys. 128, 224506 (2008).
 [3] K. Satoh, J. Chem. Phys. 138, 094903 (2013); 139, 084901 (2013).

