

分子シミュレーションによる外場中の ネマティック液晶のダイナミクス

Study of molecular dynamics in a nematic phase under external field by
molecular computer simulation

佐藤 克彦
(Katsuhiko SATOH)

液晶は現在、表示デバイスとして応用され広く知られている。この表示デバイスへの応用は、液晶性を示す分子が作り出す強い分子間相互作用の異方性に基いている。この分子間相互作用の異方性は分子の運動性に顕著に表れる。そこで、液晶分子およびそのモデル分子を用いてコンピュータ・シミュレーションを行い、ミクロな分子間に働く相互作用と実験的に得られるマクロな物性を結びつけて考察した。特に本研究では、ネマティック相での外場の作用による液晶の分子挙動を中心に以下の内容について考察した。

- (i) 棒状液晶の並進および回転の拡散係数などの分子運動への磁場強度依存性
- (ii) 磁場中での分子形状、圧力および温度の液晶分子のダイナミクスへの影響
- (iii) 原子・原子モデルのシミュレーションによる液晶相の再現と、分子内および分子間の相互作用が分子配向に与える効果

(i) きわめて強い磁場下のネマティック相での液晶分子は、並進の拡散運動では分子の平均的方向であるディレクタに関して垂直な成分の拡散係数が、外場が働かない場合と同様に配向秩序度に応じて変化するものの、ディレクタに平行な成分の拡散係数は磁場の影響を受け、配向秩序度の依存性がないことが明らかとなった。また回転運動については、ゆっくりとした分子の回転運動と小刻みな振動運動は磁場の影響を受けない。さらに、今回のシミュレーションで実験的に知られている回転緩和の磁場強度依存性を再現することができた。これらのことより、強い外場下におけるシミュレーションによっても液晶状態の分子のスイッチング挙動を検討することが可能であることが示された。

(ii) 幾つかの異なる形状のモデル液晶分子でのシミュレーションを行った結果、形状の違いによる液晶相(ネマティック相)の転移挙動、特に転移温度、に明確な相違が見られた。しかしながら、外場による再配向挙動に関しては顕著な違いは見られず、見積もった粘性係数にもほとんど差はなかった。

(iii) 液晶に限らず材料に高機能をもたらすフッ素原子を有し、かつ液晶相を形成することが知られている化合物の液晶形成能と分子間相互作用の関係を調べた。実験で観測されている分子の鎖長による相転移の変化が今回の分子シミュレーションでも再現された。液晶状態での一連の分子の配向には、フルオロカーボン部の静電相互作用と hidrocarbon の鎖長、つまりフレキシビリティが重要な役割を担っていることが示唆され、実験で知ることの出来ない分子間相互作用の定量的議論が可能であることが明らかになった。さらに、精密測定した密度と比較し、定性的な一致を確認した。

本研究成果の一部は「Liquid Crystalline Formation of Semifluorinated n-alkanes FnHm; Molecular dynamics simulation study Using Atomistic model」と題し、専門誌 Mol.Cryst.Liq.Cryst., 441, 295-305 (2005) にまとめた。