

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—

Verification of thermodynamic scaling in nematic liquid crystalline phase

佐藤 克彦 (SATO Katsuhiko)

液体状態におけるガラス転移点近傍やイオン液体のような比較的粘性の高い状態、そして無極性のファンデアワールス液体では回転緩和時間や粘性率などの動的諸量が1つのパラメータを用いた熱力学量(温度と密度またはモル体積)の関数として表現できることが報告されている。これは一般に熱力学的スケーリングまたは密度スケーリングと呼ばれている。液晶においてはこのスケーリングが17の化合物についてのみ検証されているが、液晶が持つ単純液体よりも複雑な分子間ポテンシャルのために、このスケーリングの理論的な検証が行われていなかった。そこで本研究では、液晶相を形成するもっとシンプルなモデルポテンシャルを用いて、実験同様に異なる熱力学状態(定圧、定温、定容)の条件で分子動力学シミュレーションを用いて詳細な相図を作成した。それぞれの軌跡データから実験と比較できる回転緩和時間とネマティック液晶で実証されている統計理論による式から回転拡散定数および Leslie 回転粘性係数を算出した。これらの量の熱力学的スケーリングを行いスケーリングパラメータの最適値を求めたところ、どの動的量のスケーリングパラメータも同じ値を示した。また熱力学ポテンシャルパラメータを相図から求めたところ、スケーリングの最適値と一致し、実験で得られている同値性が検証された。さらに、実験では得られていない回転緩和時間以外の動的量についても、同じ値でスケーリングが成立することを予測した。

将来展望としてさらに詳細な検証を行うには、ポテンシャル依存性の確認と単純液体との比較を行うことにより、その相違点と共通性を明らかにすることができると期待できる。

K.Satoh, *J. Chem. Phys.* **138**, 094903: 1-9, 2013.