

等方相における異方性分子の普遍的な高速回転 ダイナミクスに関する理論的研究

Theoretical study of characteristic rotational motion for anisotropic particles
in an isotropic phase

佐藤 克彦 (SATOH Katsuhiko)

等方相におけるネマティック液晶の回転運動の特異性に関しては、これまでの研究はほとんど全てLandau - de Gennes 理論が予測している比較的長い時間 (>100ns) に関するものに限られていた。一方、本研究課題では、さらに短い時間 (~10ns) で起こる分子回転運動の特異な現象に注目し、いろいろな分子形状やポテンシャルを用いた分子シミュレーションにより、これらの違いによる分子回転運動への影響、特に等方相における転移点近傍での液晶分子の運動性について検証を行っている。初年度においては、定温定圧での分子動力学法による分子モデルを用いたシミュレーションの手法を用いて、分子形状および圧力が回転運動緩和に与える影響を検討した。特に分子の形状の違いが作り出す自由体積と運動性の相関について詳細に調べた。また、圧力依存性を調べることで、分子の回転運動だけでなく他の運動性や熱力学量に関しても、スケーリング則が成立することが明らかになった。これらの結果の一部は以下の研究論文および学会発表にて公表した。さらに、転移点近傍での1次および2次の回転緩和時間を検討し、この結果をまとめるために現在、詳細な分析を行っている。

現在まで学会および論文発表を行った本研究成果に関するものは以下のとおりである。

論文発表

Influence of dipolar interaction on the molecular dynamics for the dipolar Gay-Berne model GB(3, 5, 1, 2), K. Satoh, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, 480, 202-218 (2008).

学会発表

1. Influence of dipolar interaction on the rotational dynamics for the dipolar Gay-Berne model, K. Satoh, 9th European Conference on Liquid Crystals (July 2007, Lisbon, Portugal)
2. Characteristic behavior of short-term dynamics in reorientation for Gay-Berne particles near the nematic-isotropic phase transition temperature, K. Satoh, 2nd International Symposium on the Manipulation of Advanced Smart Materials (May 2008, Hyogo, Japan)