

### 液晶ラングミュア膜の分子動力学シミュレーション

青木 圭子<sup>1</sup>, 多辺由佳<sup>1,2</sup>, 山本貴広<sup>1</sup>, 米谷 慎<sup>1</sup>, 横山 浩<sup>1,2</sup>  
科技団ERATO 横山液晶微界面プロジェクト<sup>1</sup>, 産総研<sup>2</sup>

一般に、親水基の付いた物質を水に展開・圧縮する事によって得られる単分子膜をラングミュア膜(L膜)と呼ぶ。最近、実験により親水基などの極性基を持たない物質でも安定な膜が得られ、液晶相(SmC相)が出現する事など興味深い結果が得られている[1]。それらの実験から以下の事が解った。

- ⊖ 極性基をもたない単純な構造の低分子棒状液晶分子でもL膜に自発的に展開する。
- ⊖ SmC相(平均分子軸が層に対して傾きをもつ液晶相)を生ずることにより光学的異方性を利用した観察を行うができる。
- ⊖ 表面積を縮小することにより膜厚を一層ずつ増やし多層にする事ができる(可逆)。

これらの結果を踏まえて、2次元膜の特徴を再現するのに必要な分子的特徴および条件を明らかにするため分子動力学シミュレーションを行った。その結果、SmC相が観察される単純なモデルを構築する事に成功し、その結果以下の事が解った。

- ⊖ バルクの相転移系列にSmC相がなくても2次元膜で水平面との相互作用により上下の対称性を破ることによりSmC相が出現しうる。
- ⊖ バルクではN相の温度域でも2次元展開膜ではSmC相になりうる。

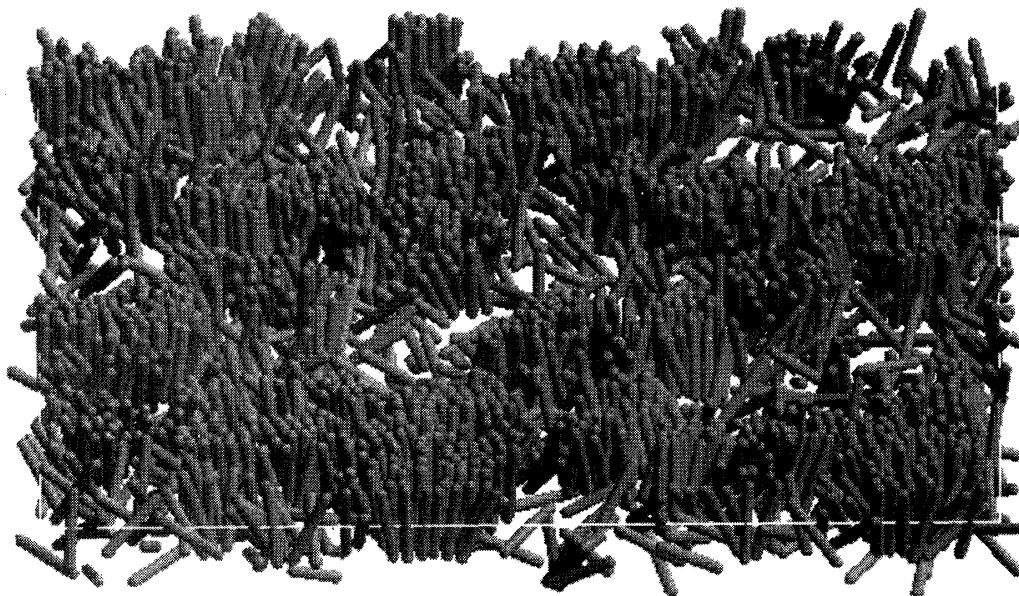


図 シミュレーションによって得られたL膜

シミュレーションからの予測通り、バルクの相転移系列にSmCがない対称な非極性分子でもSmC相が観察されるものも実験的に見つかった。ポスターでは動的な振る舞いやミクロな構造についても報告する。

#### 参考文献

- [1] 多辺由佳他: 2001年日本液晶討論会予稿集, 2E03; Y. Tabe, I. Nishiyama and H. Yokoyama, in Proc. 7th Int. Display Workshop (Kobe, Japan, 2000), p.1143; Y. Tabe, I. Nishiyama, K.M. Aoki, M.Yoneya and H. Yokoyama, in The 2nd. Anglo-Japanese seminar on liquid crystals, Invited lecture (York, U.K., 2001).