

# 光照射などによる液晶の分子配向制御に関する計算機シミュレーションによる研究

(産総研・人間系) 清原健司、清水洋、物部浩達、寺澤直弘  
(産総研・光部門) 太田浩二

液晶のアイソトロピック-ネマティック (I-N) 転移は、分子の配向ベクトルの巨視的な秩序の変化を伴う一次相転移で特徴づけられ、古くから熱力学的な観点から実験的・理論的に研究されてきた [1]。一方、I-N 転移に伴う動力学の変化については、比較的最近になってから光カー効果の実験などにより、調べられてきている [2, 3]。しかし動力学の観点からの理論的研究はあまりない。我々は、ネマティック相を示す典型的なモデルである Gay-Berne モデル [4] の分子動力学シミュレーションを行い、I-N 転移に伴う動力学の変化を調べた。特に、実験との対照を行うために、光カー効果の実験で得られる物理量である光応答関数を計算した。

Gay-Berne モデルとしては、相図がよく調べられている  $(\kappa, \kappa', \mu, \nu) = (3, 5, 2, 1)$  [5] を用い、粒子数は 216 および 1000 で周期境界条件で分子動力学シミュレーションを行った。光応答関数の解析には、Frenkel&McTague の方法 [6] を改良したのを用い、光応答の機構を分子の回転に伴う分極率の変化と分子の衝突に伴う誘起分極率の変化とに分離して、それぞれの機構の相対的な寄与についても調べた。

アイソトロピック相においては、光応答関数は典型的な液体と同じくゼロに緩和するのに対し、ネマティック相においては、長時間にわたって緩和しない成分が観測された。光応答の機構としては、分子の回転に伴う成分が支配的であることもわかった [7]。一方実験では、I-N 転移に近いアイソトロピック相では長い緩和時間が見られるが、ネマティック相では速く緩和することがわかっている。この違いは、実験ではネマティック相の配向ベクトルを特定の方向にそろえるために磁場などの外力を加えているためと考えられる。分子動力学シミュレーションによる液晶の光応答関数の計算は、外力を加えない自然な状態での系の動力学を計算できる点で大変有用である。

## 参考文献

- [1] P. G. de Gennes and J. Prost, *The Physics of Liquid Crystal*, Oxford, (1993).
- [2] G. K. L. Wong and Y. R. Shen, *Phys. Rev. Lett.*, **30**, 895 (1973).
- [3] G. Eyring and M. D. Fayer, *J. Chem. Phys.*, **81**, 4314 (1981).
- [4] J. G. Gay and B. J. Berne, *J. Chem. Phys.*, **74**, 3316 (1981).
- [5] E. de Miguel, L. F. Rull, M. K. Chalam, and K. E. Gubbins, *Mol. Phys.*, **61**, 1223 (1990).
- [6] D. Frenkel and J. P. McTague, *J. Chem. Phys.*, **72**, 2801 (1980).
- [7] K. Kiyohara, K. Ohta, and Y. Shimizu, *Mol. Phys.*, Vol.100, 2423 (2002).