

異方性液体のための静水圧分子動力学シミュレーション

青木 圭子¹, 米谷 慎¹, 横山 浩^{1,2}

科技団 ERATO 横山液晶微界面プロジェクト¹, 産総研²

スメクティック液晶および生体膜などは、層そのものは液体的であるため層と垂直方向にしか弾性的でない。層の圧縮率および厚みは温度に依存し、相転移近傍では激しく変化する [1]。また、ゆらぎの時間スケールも層と垂直方向と水平方向とは大きく異なる。ネマティック相でもダイレクターに平行な方向か否かによって粘弾性が大きくことなる。こうした特徴を持つがゆえに、静水圧下での異方性液体の振る舞いを正しくシミュレーションするのは困難である。

分子シミュレーションは従来、体積一定の下で行われてきた。しかし実験との比較する上で圧力一定の下でのシミュレーションが望まれる。それを実現するため Andersen は与えられた外圧と内部圧力が釣り合うように立方体のシミュレーション箱の体積を変化させる方法を開発した [2]。分子シミュレーションでは通常、周期境界条件を使うため、シミュレーションする相の周期性とシミュレーション箱の周期性が整合性を持たなければならない。そのため Andersen の方法は等方性液体には適していたが結晶相のシミュレーションには向かない。Parinello & Rahman 法 (P & R 法) は、結晶相の周期性を考慮してシミュレーション箱の体積だけでなく形も変化させることによって結晶構造転移の再現をも可能にした [3]。しかし P & R 法は全ての方向に弾性をもつ結晶の場合に適応する箱の動力学になっており、方向によって極端に粘弾性が異なる異方性液体をシミュレーションするには、スメクティック層が一層につぶれてしまうなど問題が起こる [4]。

静水圧下での異方性液体を正しくシミュレートするには、体積と形が変化することおよび異方的なソフトマターを支えるだけの適度な剛直性があることがシミュレーション箱の動力学に要求される。この一見、矛盾した要求を満たすためシミュレーション箱の動力学を形状の異方性を受け持つ因子 α と等方的な体積変化を表現する因子 (体積弾性を受け持つ因子) Q で記述する方法を提案する。この方法を用いれば自動的なアルゴリズムで静水圧下の液晶相が導かれ過去に提案された方法 [5] より遙かに効率よくシミュレーションができる。また、この方法を用いれば液晶相だけでなく、結晶相から等方性液体に至るまでの一連の相転移を再現できる。

参考文献

- [1] J. Yamamoto and K. Okano, Jpn. J. Appl. Phys. **30** 754 (1991)
- [2] H.C. Andersen, J. Chem. Phys. **72**, 2384 (1980)
- [3] M. Parrinello and A. Rahman, Phys. Rev. Lett. **45**, 1196 (1980)
- [4] 青木圭子、博士論文 (1993年 慶應義塾大学)
- [5] K.M. Aoki and F. Yonezawa, Phys. Rev. A **46** 6541 (1992)