

Molecular Theory on Liquid Crystalline Mixture

(山形大・工) 松田浩充、 (福井工大・工) 木村初男

1. 概要

液晶の混合物は実験的に色々研究されているが、その中でも形の異方性が極端に異なる棒状分子と円板状分子の混合系については理論だけでなく実験についてもあまりなされていない。一成分系における液晶の分子論本研究ではこれらを拡張し、分子間に剛体斥力と引力ポテンシャルを仮定し、対称破りポテンシャルの方法を用いて研究し、ネマティック-等方相転移における転移温度、転移エントロピー、配向の order parameter の組成比依存性について検討した。

2. 分子モデル

系は N_R 個の長さ L_R 、直径 D_R の円柱である棒状分子 ($L_R > D_R$) と N_D 個の長さ L_D 、直径 D_D の円板である円板状分子 ($L_D < D_D$) の全分子数 $N (=N_R+N_D)$ の混合物とする。また、order parameter、対称破りポテンシャル、配向ベクトルをそれぞれの分子毎に区別をした。このことから自由エネルギーは

$$F_{total} = F_{nem} + F_{mix} + F_{iso}$$

と表される。 F_{nem} はネマティック相の自由エネルギー、 F_{mix} は混合の自由エネルギー、 F_{iso} は等方相の自由エネルギーである。

3. 結果

棒-円板状分子混合系において考えられるネマティック(N)液晶状態は Fig.1(a)(b)(c)の一軸性 N 相と Fig.1(d)の二軸性 N 相の四種がある。

Fig.2 にそれぞれの分子の異方性が 5 の場合の相図を示す。このことから棒-円板状分子混合系において実現しうるネマティック液晶状態は一軸性 N 相である Fig.1(a)の円板状分子液晶と同種な光学的に負の N^- 相と Fig.1(c)の棒状分子液晶と同種な光学的に正の N^+ 相の二種があり、これらの相は二相共存状態を経て一次相転移する。また、この図より低温になるにつれ二相共存状態が広まるということがわかる。

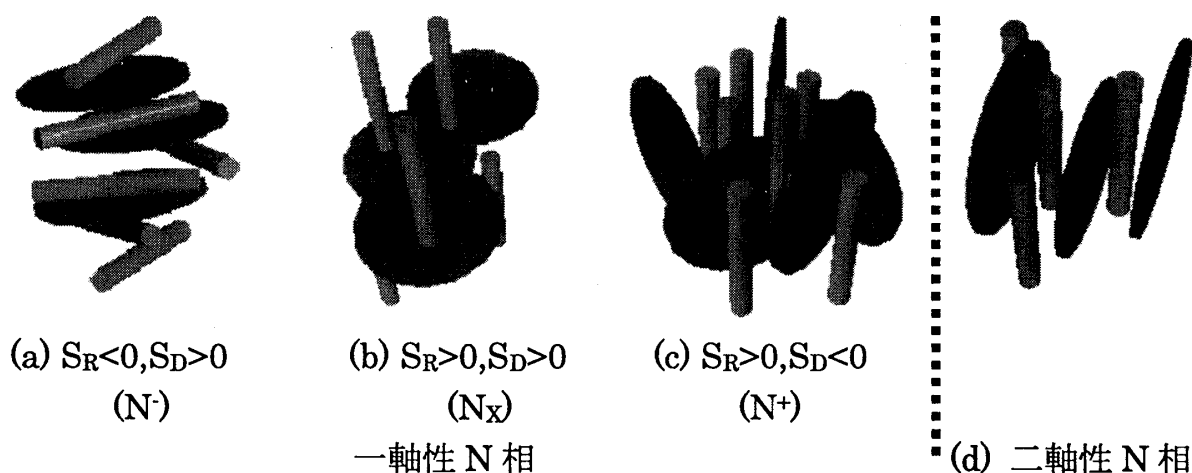


Fig.1 棒-円板状分子混合系において考えられるネマティック液晶状態

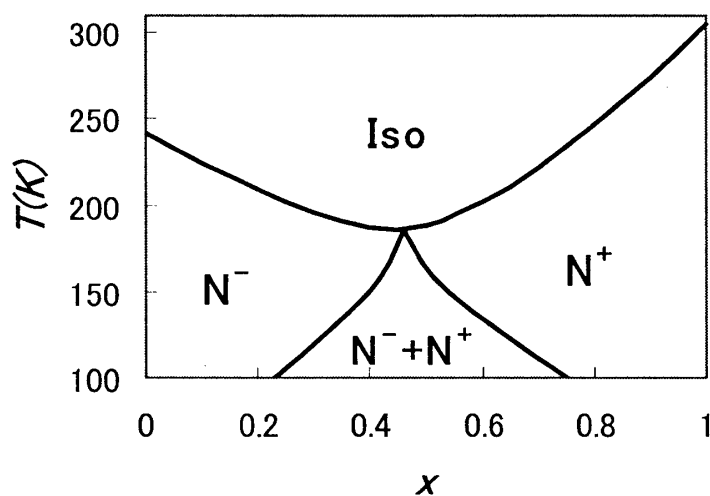


Fig.2 相図

4. 検討及び考察

今回使用した系について①二軸性 N 相は安定に存在しない。②濃度または温度によって等方相及び光学的に正と負二つのタイプの一軸性 N 相間で二相共存状態を挟んで一次相転移が起こりうるという結論を得た。

混合系の挙動は異分子間相互作用や分子の大きさに大きく依存する複雑なものであるといえるが、今回使用したモデルと方法は混合状態の液晶挙動を簡明に説明できる可能性がある。