

剛体円盤分子系における局所的な構造

山形大学 工学部 香田 智則¹, 西岡 明博, 池田 進

球状でない、異方的な形状の剛体分子としては、冠球円柱、カットスフェア、回転楕円体などが、計算機シミュレーションで研究されている。冠球円柱は棒状の、カットスフェアは円盤状のモデルであり、回転楕円体は軸比によって、棒状にも円盤状にもなり得る。

冠球円柱は、図 1 (a) で示すように、直径 D 、長さ L の円柱の両端に半球を被せた形をしたものである。その形は、長さ L の線分の上を、直径 D の球を走査することで得られる。本研究では、この走査を、直径 D の厚みのない円盤上で、直径 L の球により行うことで得られる分子モデルを用いた。これを冠球円盤と呼び、その外観を図 1(b) に示す。

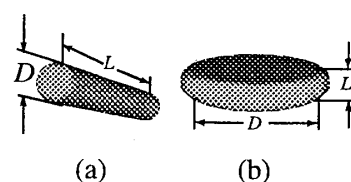


図 1: (a) 冠球円柱と (b) 冠球円盤。

図 2 に、等圧モンテカルロ法を用いて得られた、分子数 480、 $D/L = 5$ の系の平衡状態におけるスナップショットを示す。図

は、密度が高い順に (a), (b), (c) と並べてある。六方晶的な柱状の構造を持つ (a) の状態から、明らかに等方相と考えられる (c) の状態に移行する間に、局所的には高い配向秩序をもつ (b) の構造を通ることが示唆されている。この構造は、欠陥を多数含むネマチック相の可能性もあるが、(b) と (c) の間に ネマチック-等方相転移に特徴的な密度の飛びが見られないことから、ネマチック相とは別の相であると考えている。

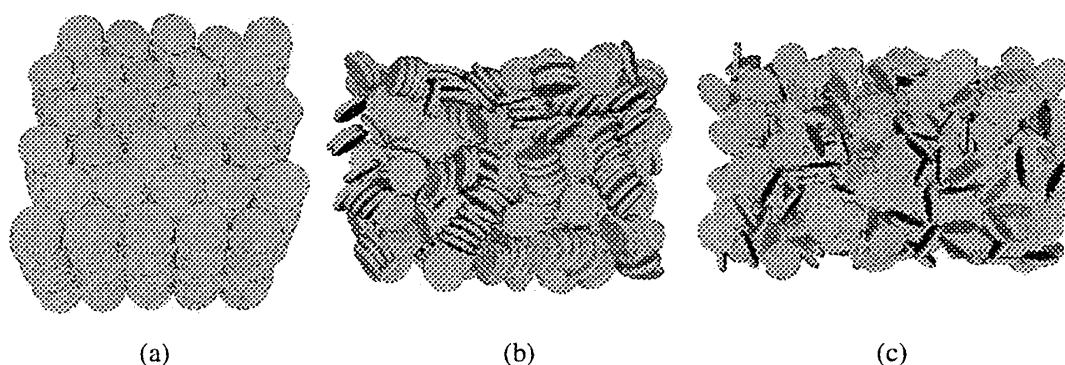


図 2: シミュレーションで得られたスナップショット。

¹ E-mail: koda@yz.yamagata-u.ac.jp