

ソフトマターの相転移ダイナミクス

Phase transition dynamics in soft matters

京都大学 理学研究科 物理学・宇宙物理学専攻 荒木 武昭

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、ソフトマターの相転移ダイナミクスに関する研究、特に液晶の秩序化に対する不純物の効果について研究を行った。一般に不純物を添加すると、ネマチック液晶相の配向秩序度は低下することが知られている。低温でネマチック相を示す、4-Cyano-4'-pentylbiphenyl(5CB)に、不純物として、azobenzene を添加する。azobenzene には、*cis* 体、*trans* 体があるが、この間の異性化によって、液晶秩序化がどのように変化するか調べたい。分子系が異なるが、類似の実験では、*trans* 体のときに比べ、*cis* 体のときに、液晶秩序度が下がることが報告されており、これは分子形状の違い、すなわち、液晶相と相性のいい棒状形状であるか否かに、起因するものと考えられている。全原子の分子動力学シミュレーションを行うために、5CB と azobenzene の分子形状、分子力場を知らなければならない。しかしながら、本研究に適したものがなかったため、スパコンシステムの gaussian を用いて、分子構造を最適化し、電荷分布を得た。

図 1 は、gaussian を用いて得られた分子力場に基づいて行った分子動力学計算のスナップショットである。分子動力学計算には、GROMACS を用いて計算を行った。左図は 5CB のみの場合、中央と右図は、それぞれ *cis* 体、*trans* 体の azobenzene を重量分率 10.7%含む混合系である。温度は、300K とした。数値計算の結果、ネマチック秩序度は、0.814(5CB のみ)、0.588(5CB+ azobenzene-*cis*)、0.692(5CB+azobenzene-*trans*) となり、実験と同じく、azobenzene-*cis* を添加した場合に、液晶秩序が大きく下がる傾向があることが分かった。特に分子の凝集などは見られていない(下段図)。また、秩序度の減少が小さかった *trans* 体の場合も、5CB 分子とともに揃っているわけではないという予備的な結果を得られた。今後は、詳細な温度・濃度依存性を調べるとともに、その物理的機構について明らかにしていきたい。



図 1 液晶秩序度に対する不純物の効果に関する分子動力学シミュレーションのスナップショット。左：液晶分子 (5CB) のみ、中央：*cis* 体の azobenzene 添加。右：*trans* 体の azobenzene を添加。下段は不純物の分布のみを取り出したもの。

発表論文 (研究終了後、投稿予定)