

木村初男

を仮定し、Vlasov 方程式を用いて、液晶内での translational な collective mode を求め、smectic A という 1 次元的な結晶ができるときに付随して現れるであろう緩和型の soft mode について議論した。

一方、Orsay の Brochand や Jähig⁶⁾ らによる半現象論的な揺ぎの理論もあるが、ともあれ、液晶の dynamics の分子論はこれからの問題と言える。

参 考 文 献

- 1) 例えば K. Miyakawa, N. Hijikuro and H. Mori; J. Phys. Soc. Japan. 36 (1974) 944.
- 2) K. K. Kobayashi; J. Phys. Soc. Japan. 29 (1970) 101; W. L. McMillan; Phys. Rev. A6 (1972) 936.
- 3) F. T. Lee, H. T. Tan, Y. M. Shich and C. W. Woo : Phys. Rev. Lett. 31 (1973) 1117 and Phys. Lett. A. (June, 1974)
- 4) R. J. Meyer and W. L. McMillan : Phys. Rev. A9 (1974) 899.
- 5) K. K. Kobayashi, W. M. Franklin and D. S. Mori : Phys. Rev. A7 (1973) 1781 : Phys. Rev. A8 (1973) 2178; A8 2763.
- 6) F. Brochard and Jähning, J. de Physique (1974) および R. Blinc たちの仕事 : Phys. Rev. A (April, 1974)

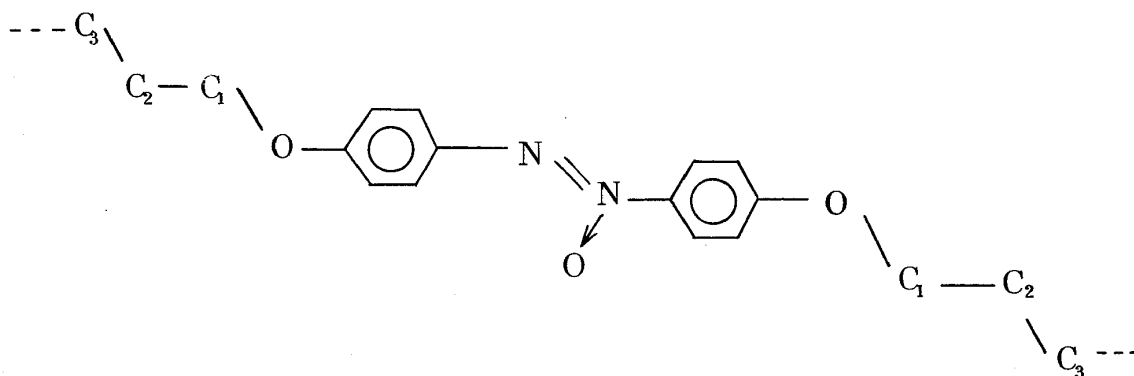
nematic 液 晶 の 分 子 論

名大・工 木 村 初 男

nematic 液晶に限り、且つ、その static な性質に限っても、分子論が答えねばならない問題は沢山ある。

様々な同族列液晶についての実験データが集積されつつある。ここで同族列というのは、一例を第 1 図に示したように分子の両端に炭化水素 CH_2 の鎖をつなげたものである場合が多い。図の $\text{C}_1, \text{C}_2 \dots$ は炭素原子をあらわしている。この炭化水素鎖の長さ、すなわち鎖の中の炭素原子数 N の関数として、液晶としての種々の性質の変化が調べられている。第 1 図の同族列では $N=1$ のものが、有名な nematic 液晶として古くから

研究されて来た *p*-azoxyanisole (PAA) である。測定結果を要約すると¹⁾

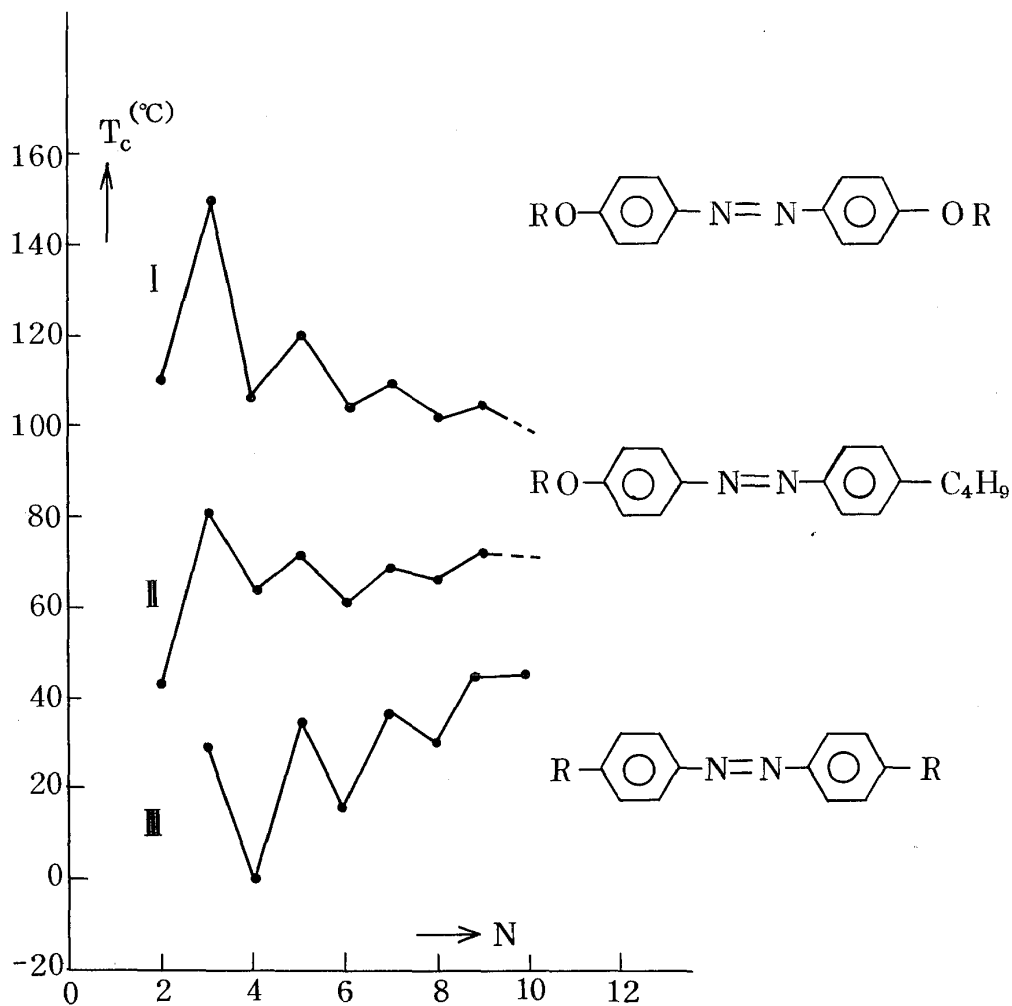


第1図 *p, p'*-di-*n*-alkoxy-azobenzene

- (1) 同族列の中では nematic-isotropic 転移温度 T_c は、 N が偶数の場合と奇数の場合で交互に上昇・下降を繰り返す。(even-odd alteration of T_c)
- (2) 比較的 T_c の低い同族列では、 N の増加と共に T_c も全体として上昇する。
- (3) T_c のより高い同族列では、 N の増加と共に T_c は全体的に下降していく。
- (4) 同族列の中では T_c における転移エントロピー $\Delta\Sigma$ は N と共に増加して行く。 $\Delta\Sigma$ についても、even-odd alteration が見られる。
- (5) 同族列の中では、 T_c における nematic order parameter の値 S_c にも、even-odd alteration が見られる。

などとなる。(1)~(3)については、その実例を第2図に示す。図で R はアルキル基をあらわす。

このような傾向を分子論的に、どう説明したら良いだろうか。筆者は、有名な Maier-Saupe 理論で考えられた分散力のほかに、分子間の剛体斥力もとり入れたモデル理論を提案した。その詳細は文献²⁾を参照されたいが、ここでは分子を剛体棒と見なし、且つ自由エネルギーに関する cluster 展開の最低次の近似で問題が扱われた。そして、同族列で、炭化水素鎖が延びると、それだけ剛体棒としての長さが延びるのだと解釈すると、上の(2)、(3)の傾向は説明がつく。(1)の T_c の even-odd alteration に関しても、第1図のような形で炭化水素鎖がジグザグに延びるとすれば定性的に解釈出来る。しか

第2図 同族列の T_c の例

し、(4)、(5)については筆者の理論ではまだ説明が出来ない。転移エントロピーに関してはわれわれは

$$\Delta\Sigma = Nk \frac{1}{2} S_c^2 (4.54 - v_1 n)$$

という表式を得る。ここで、 v_1 は分子の長さを L 幅を D とすると DL_2 に比例する量、 n は分子数密度であり、 S_c は T_c における order parameter の値である。Maier-Saupe の理論では () 内の第二項がなく、エントロピーの飛びとしては物によらない一定値を与えるが、われわれの場合には第二項によって物質の特殊性があらわれる。たとえば同族列での転移エントロピーが N の関数としてジグザグに変化することは、すぐ言えるのだが、残念なことに、 N の増加と共に $\Delta\Sigma$ は減少することになり実験と傾向が

液体金属模型の3体分布関数 $g^{(3)}(r_{12}, r_{23}, r_{31})$ のシミュレーション
反対に出てしまう。また、われわれの理論での S_c の値は一定値 0.43 となり、(5)のよ
うな物質による変化が出ない。

われわれの理論で問題となることとして、

- (a) 剛体棒というモデルの妥当性、
- (b) cluster 展開の最低次という近似の制約が挙げられよう。

Marčelja は、分子をベンゼン環からなる中心の剛体部分と、両端についた炭化水素
鎖の部分とに区別し、flexible な鎖部分の秩序状態も同時に考慮するモデルで、上の
(1)から(4)までを説明している。³⁾ (しかし、彼は分子間の斥力は無視している。)

われわれのモデルでも、cluster 展開の高次まで計算を進めれば、 S_c の値が物によ
って違ふことが当然出て来る。⁴⁾ それに伴って(4),(5)にも説明を与えるかもしれない。
とにかく、nematic 相分子論は、分子と分子間力に対する、よりリアルなモデルの提
案と、より近似を進めた統計力学的取扱いが要求される段階に来ているといえよう。

参 考 文 献

- 1) W. H. de Jeu, J. van der Veen and W. J. A. Goossens : Solid State Commun.
12 (1973) 405.
- 2) H. Kimura : J. Phys. Soc. Japan 36 (1974) 1280, 木村：物性研究 19 (1973) H 4.
- 3) S. Marčelja : J. Chem. Phys. 60 (1974) 3599.
- 4) H. Kimura : J. Phys. Soc. Japan 37 (1974) No. 5.

液体金属模型の3体分布関数 $g^{(3)}(r_{12}, r_{23}, r_{31})$ のシミュレーション

東北大・工 田 中 実

1. まえがき

古典液体の熱力学的性質のいくつかは、対相互作用を仮定する範囲では、2体分布関
数 $g(r_{12})$ と対相互作用とで表わされる。ただし $g(r_{12})$ の統計力学的計算手法は、本
来は閉じておらず、3体分布関数 $g^{(3)}(r_{12}, r_{23}, r_{31})$ 、さらに順次高次の分布関数の知識