

## 1. 緒言

液晶の製品の製造及び改良に際し液晶を連続体として用いたシミュレーションが行われている。しかし連続体シミュレーションでは分子個々の挙動が分からない。個々の分子の挙動を調べることで、新しい液晶製品の製造方法や改良につながる可能性がある。さらに近年のコンピュータの発達により、大規模な分子シミュレーションが可能になってきており、今後液晶の分子シミュレーションがより活発に行われることが予想される。

本研究では液晶の分子シミュレーションの第一段階として液晶分子が等方相から液晶相への相転移シミュレーションを行う。

## 2. 理論及び計算式

液晶分子は棒状形状をしており、並進運動と回転運動を行う。運動方程式、角運動方程式はそれぞれ

$$m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = -\sum_j \frac{\partial U_{ij}}{\partial \mathbf{r}_i} \quad (1)$$

$$I_i \frac{d\boldsymbol{\omega}_i}{dt} = -\sum_j \hat{\mathbf{u}}_i \times \frac{\partial U_{ij}}{\partial \hat{\mathbf{u}}_i} \quad (2)$$

と表される。ここで添え字  $i, j$  は分子の番号を示している。 $m$  は質量,  $\mathbf{v}$  は速度ベクトル,  $\mathbf{r}$  は位置ベクトル,  $\boldsymbol{\omega}$  は角速度ベクトル,  $\hat{\mathbf{u}}$  は方向の単位ベクトル,  $U$  はポテンシャルエネルギーを表している。ポテンシャルエネルギーには Gay-Berne ポテンシャル

$$U = 4\varepsilon(\hat{\mathbf{r}}_{ij}, \hat{\mathbf{u}}_i, \hat{\mathbf{u}}_j) \left\{ \left( \frac{\sigma_0}{r_{ij} - \sigma(\hat{\mathbf{r}}_{ij}, \hat{\mathbf{u}}_i, \hat{\mathbf{u}}_j) + \sigma_0} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma_0}{r_{ij} - \sigma(\hat{\mathbf{r}}_{ij}, \hat{\mathbf{u}}_i, \hat{\mathbf{u}}_j) + \sigma_0} \right)^6 \right\} \quad (3)$$

を用いる。Gay-Berne ポテンシャルは液晶を回転楕円体として近似したものである。 $\varepsilon(\hat{\mathbf{r}}_{ij}, \hat{\mathbf{u}}_i, \hat{\mathbf{u}}_j)$  はポテンシャルエネルギーの大きさを表すパラメータで、 $\sigma(\hat{\mathbf{r}}_{ij}, \hat{\mathbf{u}}_i, \hat{\mathbf{u}}_j)$  は分子間距離を表すパラメータである。

式(1),(2)を長さ  $\sigma_0$ , エネルギー  $\varepsilon_0$ , 質量  $m$ , 時間  $\tau = \sigma_0(m/\varepsilon_0)^{1/2}$  で無次元化し計算を行う。

分子数を  $N$  個とすると式(1)(2)はそれぞれ  $3N$  個の連立常微分方程式を解いていく。計算方法は Euler 法を用いる。分子数は  $N=256$  個, 時間ステップは無次元時間を用いて  $\Delta t^*=0.0001$ , 境界条件には周期境界条件を用いる。初期条件には分子の方向がそろっていない等方相であてる。

## 3. 計算結果および考察

図.1 は  $t^*=10.0$  のときの分子の状態である。分子が同じ方向を向き、液晶状態になっていることがわかる。

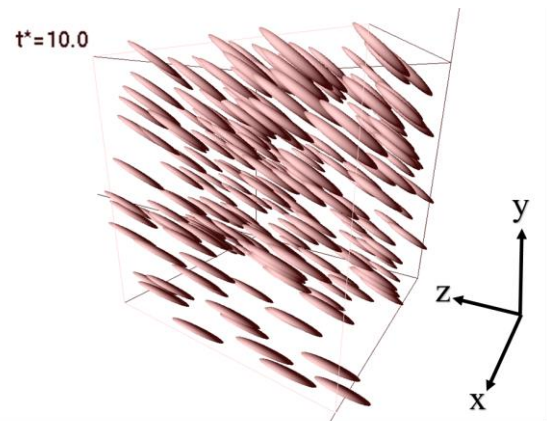


Fig.1 Liquid crystal phase at  $t^*=10.0$

次に、秩序度  $S$  を用いて分子配向状態が時間によってどのように変化したか調べる。秩序度とは系の配向の揃い具合を表すものである。分子の方向が完全にランダムなとき  $S=0$ , 分子の向きが完全に揃っているとき  $S=1$  となる

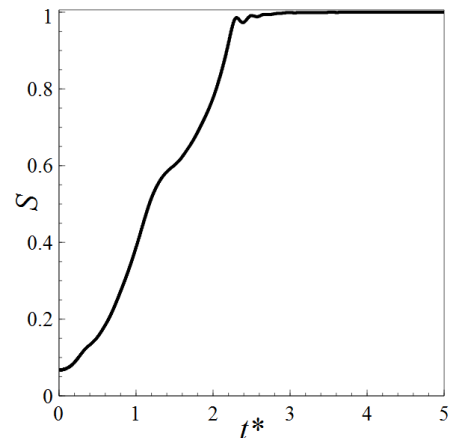


Fig.2 Order parameter

図2より時間とともに秩序度が大きくなり液晶状態になり液晶状態に至ることが分かる。

## 文献

- (1) 小竹 進, "熱流体の分子動力学", 丸善(1998)
- (2) Sten Sarman, Denis J. Evans, J. Chem. Phys. 99(1993)
- (3) J.G. Gay, B.J. Berne, J. Chem. Phys. 74(1981)