

## 屈曲した液晶分子ポテンシャルのモデル化

流体力学研究室

加納 翌美

### 1. 緒言

近年、エネルギー資源の減少に伴い、使用環境からエネルギーを得る技術が注目されている。例えば、圧電効果を用いた振動発電がある。液晶にも圧電効果と似た効果があり、液晶を平板間に封入し、平板に曲げ変形を加えると分極し電圧が発生する。この効果は屈曲した液晶分子で液晶が構成されている場合に起こり、屈曲した液晶分子の分子配置に依存すると考えられている。そのため、分子レベルでの解析が必要である。

現在、屈曲した液晶分子に適した分子モデルが存在せず、屈曲した液晶の性質を示す分子モデルが必要である。

そこで本研究では、屈曲した液晶分子の挙動を解析するために、屈曲した液晶分子をモデル化しその周りに働くポテンシャル分布を解析することでそのモデルの評価を行う。

### 2. モデル化および評価方法

屈曲した液晶分子の分子構造の例を図1に示す。屈曲した液晶分子のベンゼン環部分を剛直なものとし、左右の分子それぞれに回転楕円体分子を表す Gay-Berne ポテンシャルを用いてモデル化する。すなわち、図1のように角度 $\alpha$ を持つように2つの回転楕円体を重ね合わせる。角度 $\alpha$ をパラメータとし、屈曲度の影響を調べる。Gay-Berne ポテンシャルは、

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

と表される。ここで、添え字 $i, j$ は分子の番号を示し、 $\mathbf{r}_{ij}$ は分子間の相対位置ベクトル、 $\hat{u}_i, \hat{u}_j$ は配向方向を示す単位ベクトル、 $\sigma_0$ は分子形状の長さである。 $\varepsilon(\hat{u}_i, \hat{u}_j, \hat{r}_{ij})$ はポテンシャルエネルギーの大きさを示し、 $\sigma(\hat{u}_i, \hat{u}_j, \hat{r}_{ij})$ はそのときの分子間位置を示す2つのパラメータである。

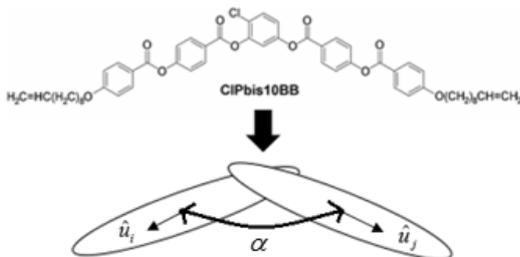


Fig.1 Model of bend-core liquid crystal

このようにモデル化した分子を図2の(a)から(f)の6つの分子の配置パターンが及ぼすポテンシャル分布を解析する。

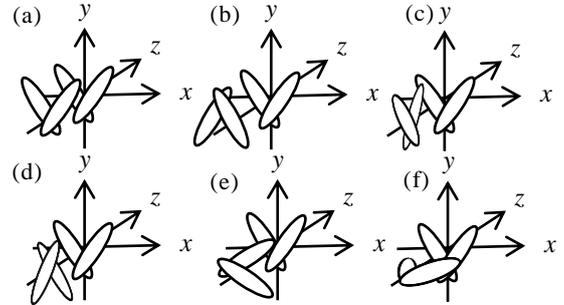


Fig.2 Six patterns of molecule's arrangement

### 3. 結果および考察

角度 $\alpha = 90^\circ$ 、 $y$ 軸上 $0 \leq y \leq 4$ の領域における無次元距離 $r^*$ と無次元ポテンシャル $U^*$ の関係を図3に示す。(a)から(f)は図2の分子の配置パターンを示す。

分子を配置するパターンによって、分子の向きのみならず固定している分子に近づく距離が変わる。距離が大きくなるとどのパターンにおいても、ポテンシャルは0に漸近している。当然のことながら分子間の距離が大きくなると、分子間の相互作用が小さくなるためである。6パターンの分子配置の中でポテンシャルが最小値をとるのは、(d)の場合である。これは2体分子のお互いの投影面積が最小になることに起因すると考えられる。そのため、分子は(d)の配置をとり易いと考えられ、分子配置が $y$ 軸( $y > 0$ )上でもっとも並びやすいことが分かる。

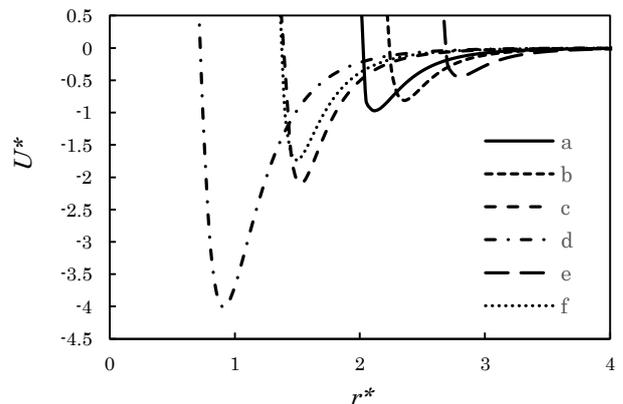


Fig.3 Patterns dependence of potential energy at  $\alpha = 90^\circ$  on the  $y$  axis

### 参考文献

- (1) J.G.Gay,B.J.Berne,J.Chem.Phys.74(1981)
- (2) S.J.Johnston,R.J.Low,M.P.Neal,Phys.65(2002)