

高配向分子クラスター間相互作用と熱力学・動力学的性質との関連性

A relationship between thermodynamic and dynamic properties
for the highly oriented small clusters

佐藤 克彦 (Katsuhiko SATOH)

物質の分子構造と性質との関係性は非常に複雑である。しかし、構造と静的な性質や運動性を何らかの指標を使って同時に知ることができれば、数多くの物質をこれまでとは違った分類に分けることができる。さらにはその根底に隠された法則の発見につながるかもしれない。また、応用面でみれば、先端技術に欠かせない材料としての物質をいち早く探することができる方法論を確立することに繋がる。

本研究は、スケーリングという手法を用いて、新たな側面から物質の性質と構造、運動性、そして分子間相互作用の相互の関連性を見出そうとするものである。ここでは自己組織性をもつ液晶を用いて物質の一元的理解をするための共通指標となり得るスケーリングパラメータの検証を行っている。はじめに古典力学的分子動力学シミュレーションによって2種類のモデルポテンシャルを用いて粒子の軌跡情報を使い、両モデルで相図を作成した。次に全体の静的性質を幾つかの相関関数および分布関数を用いて確認したのち、知りたい状態である液晶相でのダイナミクスに対し、スケーリングの適応可能性を検証した。その結果、前年の研究で明らかになった2次の配向秩序度、回転緩和時間、回転拡散係数、Leslie 粘性係数に加え、並進拡散係数とMiesovicz 粘性係数にもスケーリングが適応できることが分かった。

またスケーリングに与える分子間相互作用の影響を検証するため、分子形状の異なるパラメータセットでのシミュレーションの結果を用いてスケーリングを行ったところ、パラメータ値は分子形状に関して線形変化がみられた。球状から縦長にずれるに従いパラメータの値は大きくなった。一方、球形から横方向にずれる、つまり扁円状では小さくなる傾向が見られた。このことからスケーリングパラメータと分子形状、または分子間相互作用との間には強い相関関係が存在することが明らかになった。さらにスケーリングパラメータと熱力学パラメータとの関係性を検証するため、いくつかの動的量を一定にした条件での熱力学パラメータを調べたところ、いずれの量においても直線的变化を示した。この勾配から熱力学パラメータを求め、スケーリングパラメータとの比較をしたところ、完全な一致は見られなかったものの、同等の値が得られた。このことから2つのパラメータの同値性は近似的に成立していることも分かった。このことは動的量の測定をせずともスケーリングパラメータを推定することが出来、このパラメータの値から動的量を見積もることができることを意味している。

今後はスケーリングとマイクロ構造との相関について詳細に調べ、さらには静的量と動的量との関連性について検証を行う予定である。

K.Satoh, *Mole. Cryst. Liq. Cryst.*, **615**, 78-88 (2015).