

物質透過による二次元キラル液晶の非平衡構造のミクロ機構解明

(早大 先進理工) ○渡辺 豪・藤田 悠介・多辺 由佳

【序論】

水面上に展開されたキラル液晶スメクチック C 単分子膜に気体分子を透過させると、液晶分子が集団で一方向歳差運動する現象が実験的に確かめられており¹、我々はその詳細の解明に取り組んでいる。この集団歳差はキラリティと流れとの線形結合に因るものと考えられ、幾つかの現象論で説明されている^{2,3}。しかしながら、完全にそのメカニズムが明らかにされているわけではなく、特に分子ティルトが歳差現象において本質的な役割を果たしているかどうかについては未だ議論がある。そこで本研究では、キラル液晶単分子膜の集団歳差運動のメカニズムについて新しい知見を得る為、スメクチック A*、スメクチック C* 単分子膜に物質を透過させた際のミクロダイナミクスについて分子動力学 (MD) 計算による解析を行った。

【研究概要と結果】

MD 計算は、Materials Explorer 5.0 (Fujitsu Ltd.) を用いて行った。

計算対象とした液晶分子は、Fig. 1 に示した分子構造のキラル液晶(2R)-2-[4-(5-octylpyrimidine-2-yl)phenyl-oxymethyl]-3-butyloxiran (略称 OPOB) であり、相系列は

$$\text{Cr } 5 \text{ SmC}^* \text{ } 63 \text{ SmA}^* \text{ } 74 \text{ N}^* \text{ } 80 \text{ I } \text{ (}^\circ\text{C)}$$

となっている。

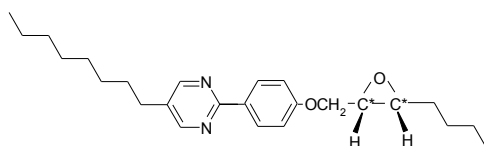


Fig. 1 計算対象としたキラル液晶 OPOB の分子構造

まず、64 分子のキラル液晶 OPOB をスメクチック C* 単分子膜、スメクチック A* 単分子膜となるように水層上に配置し (Fig. 2)、水面上単分子膜の MD シミュレーション (NTV) を実行した。得られた緩和状態の膜にメタノール分子を透過させ、メタノール分子が膜を透過している間に液晶分子に与えた回転トルクを求めた。

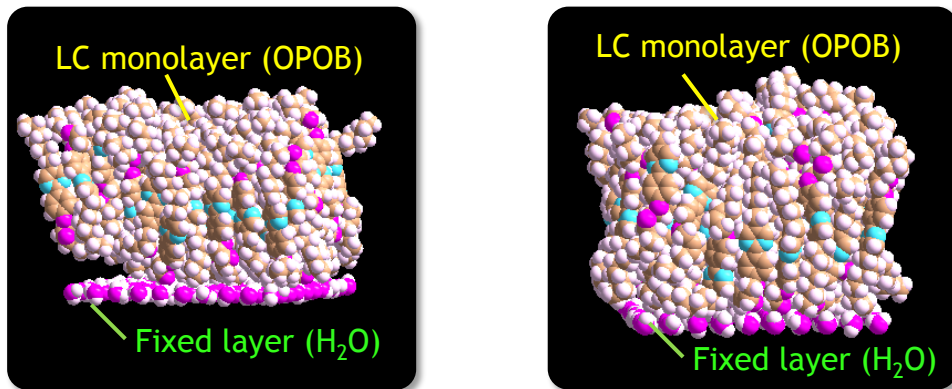


Fig. 2 スメクチック C*単分子膜 (左図)、スメクチック A*単分子膜 (右図) の MD シミュレーション図

スメクチック C*単分子膜において、透過したメタノール 1 分子によって各液晶分子に与えられた分子長軸周りの回転トルクを解析すると、透過分子により有意な一方向の回転が誘起されている事が確認された。更に、得られた各液晶分子の回転トルクを、透過分子からの距離に対してプロットしたものを Fig. 3 に示す。この結果より、透過分子から近距離にある液晶分子ほど大きな一方向回転トルクを受けている事が分かる。またこの一方向のトルクは、メタノール分子に直接衝突された液晶分子から 20Å程度離れた分子にも、値は小さくなるが伝わっている。このように直接衝突を受けていない分子にも一方向トルクが伝播する事は、集団運動の起源を考える上で重要なポイントと考えられる。

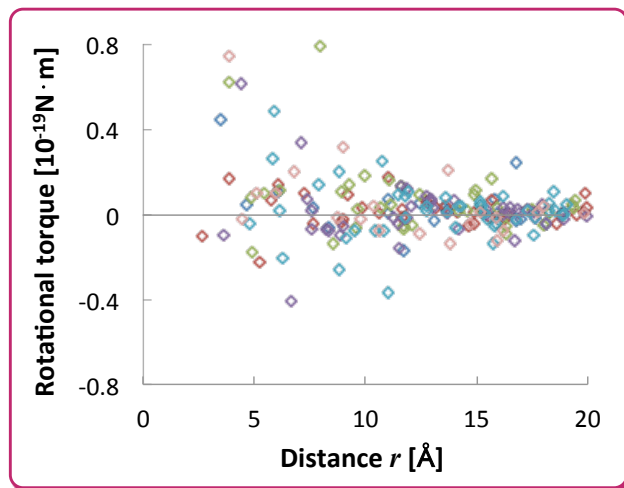


Fig. 3 透過分子からの距離に対する液晶分子が与えられる分子長軸周りの回転トルクの変化

現在、スメクチック A*単分子膜についてのシミュレーションを進めており、スメクチック C*単分子膜の結果と比較検討する予定である。

¹ Y. Tabe and H. Yokoyama, *Nature Materials* **2**, 806 (2003)
² Y. Tsori and P. G. de Gennes, *Euro. Phys. J. E*, **14**, 91 (2004)
³ T. Shibata and A. S. Mikhailov, *Europhys. Lett.*, **73**, 436 (2006)