

## スメクチック液晶単分子膜のマイクロダイナミクス解析

(北里大 理<sup>1</sup>, 早大 先進理工<sup>2</sup>) 渡辺 豪<sup>1</sup>・多辺 由佳<sup>2</sup>

## Microscopic dynamics of smectic liquid crystalline monolayers

(Kitasato Univ.<sup>1</sup>, Waseda Univ.<sup>2</sup>) Go Watanabe<sup>1</sup> and Yuka Tabe<sup>2</sup>

## 【序論】

疎水性のスメクチック液晶を水面上に展開することで容易に作製できる液晶性単分子膜は、安定した一層構造を有しており、理想的な二次元系として古くから研究の対象とされている。スメクチック単分子膜については、これまでに多くの特徴的な物性や非線形現象が実験・理論の両面から確かめられている<sup>1-3</sup>。しかしながら、重要な基礎物性である膜面内拡散については、未だ完全には解明されていない。類似した構造である生体膜における脂質分子やスメクチック液晶にドーピングされた異方性粒子は、平均二乗変位が異常的な拡散をする ( $\langle r^2(t) \rangle \propto t^\alpha, \alpha < 1$ ) という報告があるが、これらの性質は系の複雑性に起因しており、シンプルな二次元系においても同様の傾向を示すとは限らない。そこで本研究では、分子動力学 (MD) 計算を用いて、二次元スメクチック液晶の面内拡散についてマイクロな観点から解析を行った。

## 【研究概要】

MD 計算は、汎用プログラム Gromacs 4.5 を用いて行った。計算対象とした棒状液晶分子はアキラル液晶 4'-hexyloxy-phenyl-2-(5-octyl)pyrimidine (略称 P-608) であり、その分子構造と相系列を Fig. 1 に示した。

系は P-608 液晶 256 分子から構成されている。下部に固定層を置かずに安定的な単分子膜を実現させるために、液晶分子の末端原子には、層法線方向に対してのみ働く拘束力を付与している。本計算のモデルでは、分子占有面積を一定にし、温度変化のみで、単分子膜のティルト相転移を実現することが可能である。

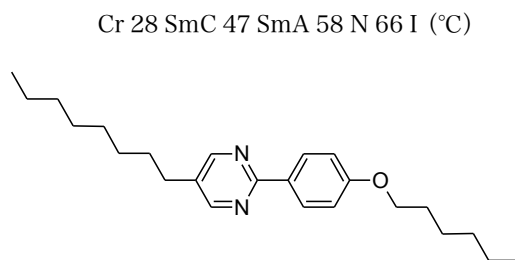


Fig. 1 計算対象とした棒状液晶 P-608 の分子構造と相系列

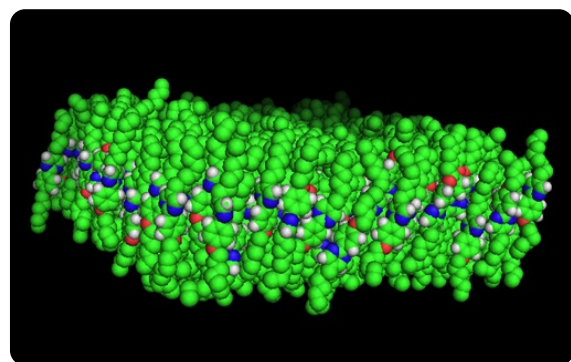


Fig. 2 スメクチック C 単分子膜の MD シミュレーション図

## 【結果】

まず、分子が層法線から傾いたスメクチック C 単分子膜について MD 計算を行い、平衡状態における液晶分子の平均二乗変位 (MSD) を解析した (Fig. 3)。この結果から、初期の短時間 (~1 ns) では液晶分子はブラウン運動と比較して速い拡散をしていることが分かる。しかしながら、その後は時間に対して線形に変位は増加していることから、系は粘性が支配的な通常の流体のように振る舞っていると確認できた。

通常拡散時における膜面内拡散係数は、二次元の Einstein の関係式より  $\sim 10^{-13} \text{ m}^2/\text{s}$  と求められる。そして、この値から算出した粘性係数は  $\sim 10^{-8} \text{ kg/s}$  で、光学実験で得られているスメクチック液晶自己保持膜の粘性係数  $\eta_0$  と良い一致を示している。

さらに、面内拡散と分子配向との相関を調べるために、配向ベクトルと平行な方向と垂直な方向の MSD を計算し、Fig. 3 に示した。これらの MSD を比較すると、膜を構成している液晶分子は配向ベクトルに平行な方向に対してより拡散しやすいことが分かる。本結果から、膜面内対称性が破れた二次元スメクチックでは、分子の面内拡散が異方的であるという知見が新たに得られた。

次に、分子長軸が層方向に平行に配列したスメクチック A 単分子膜についても同様に MSD の解析を行い (Fig. 4)、面内拡散係数を求めた。得られた拡散係数はリン脂質二分子膜と同程度であり、スメクチック C 単分子膜よりも大きい値であった。また、拡散係数より算出した粘性係数は、前述のスメクチック C 単分子膜と比較して明らかに小さい値であり、定性的にバルクのスメクチック相と同様の傾向を示している。

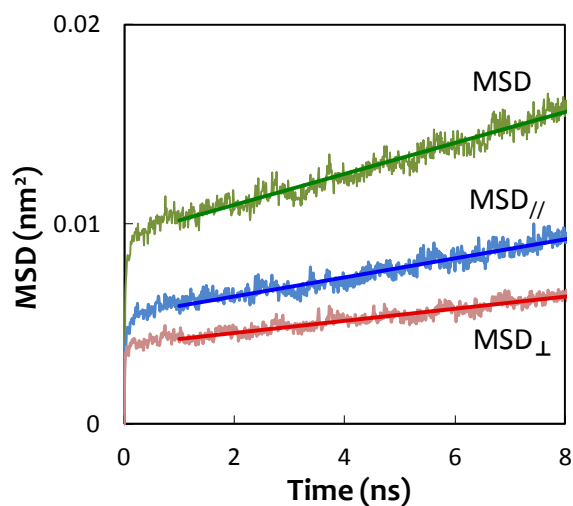


Fig. 3 スメクチック C 単分子膜における分子の平均二乗変位 (MSD: 通常的面内、MSD<sub>//</sub>: 配向ベクトルに平行方向、MSD<sub>⊥</sub>: 配向ベクトルに垂直方向)

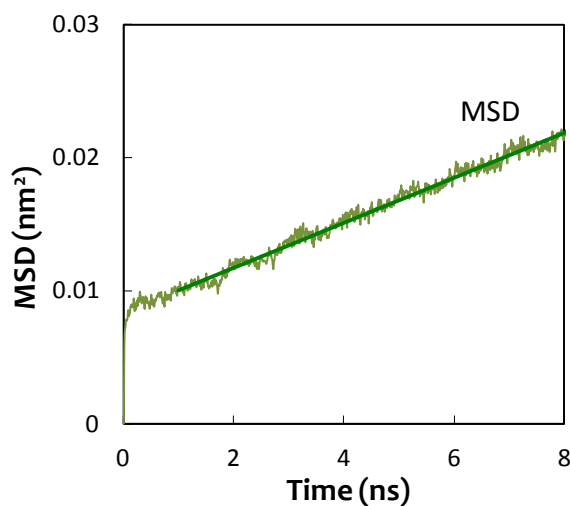


Fig. 4 スメクチック A 単分子膜における分子の平均二乗変位

## 【参考文献】

1. M. N. G. de Mul and J. A. Mann, *Langmuir* **10**, 2311-2316 (1994)
2. V. M. Kagner, H. Möhwald, and P. Dutta, *Rev. Mod. Phys.* **71**, 779-819 (1999).
3. R. Reigada, F. Sagués, and A. S. Mikhailov, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 038301 (2002)