

分子動力学法による遷移金属錯体が有するらせん誘起力の構造的要因の検証

(北里大 理¹) 渡辺 豪¹・吉田 純¹・米田 茂隆¹

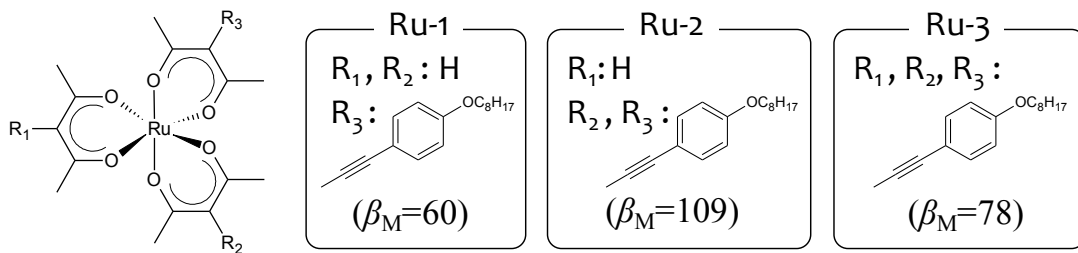
Understanding the effect of molecular structure on helical twisting power of transition metal complex by molecular dynamics simulation

(Kitasato Univ.¹) Go Watanabe¹, Jun Yoshida, and Shigetaka Yoneda

【序論】

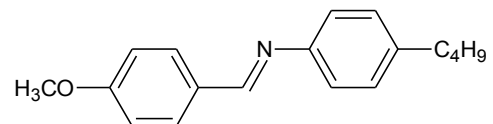
キラルな分子をアキラルなネマチック液晶へ添加すると、そのキラリティが系全体に誘起され、左巻き、或いは右巻きのらせん構造を有するコレステリック（キラルネマチック）液晶相が発現する。コレステリック液晶のらせん構造の向きや一周期のピッチ長はキラルドーパントの種類によって変わる。誘起コレステリック液晶の物性を予測可能なキラルドーパントの分子設計には、キラルドーパントの分子構造とマクロなキラリティの相関関係の解明が不可欠であるが、未だ詳細は明らかではない。

キラルドーパント 1 分子のらせん誘起力 β_M は、らせん一周期のピッチ長 p とドーパント濃度 x を用いて、 $\beta_M = 1 / (p \cdot x)$ と表される。 β_M 値の正負はらせんが右巻きか左巻きであるかに対応している。多くのキラルドーパントと比較して大きな β_M 値を持つ Ru 錯体について、置換基の種類や数によって系統的に β_M 値が変わることが実験的に確かめられている (図 1)^{1,2} が、その理論的な解釈はなされていない。そこで本研究では、分子動力学 (MD) 計算を用いて、ネマチック液晶中に Ru 錯体をドーブした際に発現するコレステリック液晶のミクロスコピックな描像について考察した。

図 1. Ru 錯体の分子構造と β_M 値

【研究概要】

MD 計算には汎用プログラム Gromacs4.5.5 を用いた。室温でネマチック相を取る MBBA 液晶 (図 2) 256 分子中に、図 1 に示した構造の Ru 錯体をそれぞれ 1 分子ドーブした系において常温常圧下で MD シミュレーションを行い (図 3)、Ru 錯体の構造の違いが系全体の配向構造にもたらす影響を調べた。



相系列 Cr-(290K)-N-(318K)-I

図 2. MBBA 液晶の分子構造と相系列

比較対象として、MBBA 液晶分子のみの系についてもシミュレーションを行っている。

各系においてホスト液晶 MBBA のネマチック秩序パラメータを解析した (図 4)。Ru 錯体をドーブした系と MBBA 分子の単成分系とで平衡状態 (最後の 20ns) における平均秩序パラメータを比較すると、Ru 錯体導入により明確な配向秩序の低下が引き起こされたことが確認された。

また、ドーブした Ru 錯体の構造の違いによって、周囲の MBBA 液晶の配向構造に与える影響を考察する為に、配向相関関数を調べた (図 5)。距離 r でフィッティングを行い、配向相関のべき指数を求めると、その大きさは『Ru-2 > Ru-3 > Ru-1』となった。これは実験で得られた β_M 値の大小関係と一致している。つまり、Ru 錯体による誘起コレステリック液晶において、局所的な配向乱れの大きさは、マクロなキラリティの強さに依存することが確認できた。詳細な考察については当日報告する。

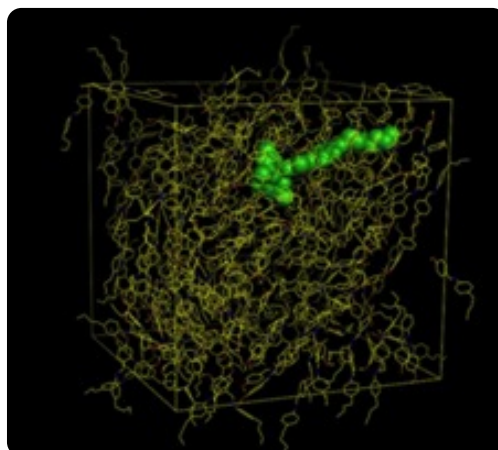


図 3. MD シミュレーションのスナップショット

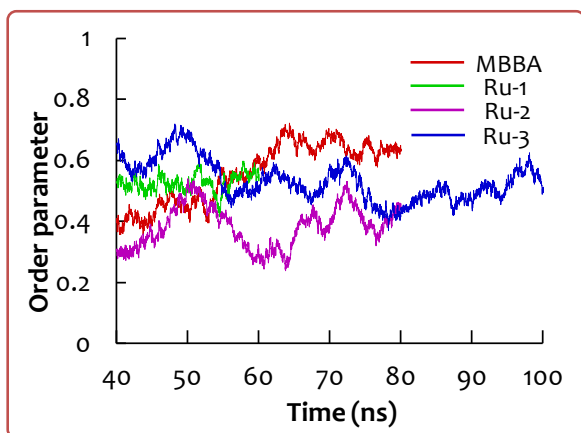


図 4. ネマチック秩序パラメータ (MBBA 分子) の時間変化

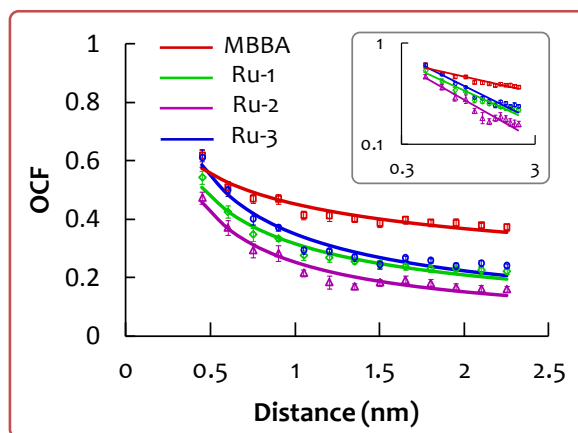


図 5. 平衡状態における配向相関関数

【参考文献】

- 1) J. Yoshida, H. Sato, N. Hoshino, and A. Yamagishi, *J. Phys. Chem. B*, **112**, 9677 (2008).
- 2) J. Yoshida, G. Watanabe, K. Kakizawa, Y. Kawabata, and H. Yuge, *Inorg. Chem.* (submitted).