

## 高配向分子クラスタ間相互作用と熱力学・動力的性質との関連性

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

佐藤 克彦 (Katsuhiko SATOH)

スケーリングは複雑で多様な性質を統一的に捉え、対象とするものの普遍性を調べる上で重要な手法である。特に物質科学においては、物質の持つ分子構造と動的・静的性質との複雑な関係性を何らかの指標を使って同時に知ることができれば、構造と静的な性質や運動性を互いに関連付けることが出来る。さらにはその根底に隠された物質の基本的な法則の発見につながる可能性を持っている。応用的側面で見れば、例え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を確立することに繋がる。

本研究は、このスケーリングを用いて、配向性を持った流体を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。この研究を行う発端となった Urban らの圧力変化による誘電緩和実験で得られた結果を理論的に、かつ系統的にその普遍的性質を検証するところから開始した。

モデルポテンシャルを用いた古典力学的分子動力学シミュレーションによって粒子の軌跡情報を使い、まず解析の基本となる相図を作成した。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、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、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 Miesovitz 粘性係数にもスケーリングが適応できることが明らかになった。また、液晶の相転移現象を定性的に説明するために用いられた熱力学パラメータ $\Gamma$  とスケーリングパラメータ $\gamma$  は、ある条件のもとで同値であることが分かった。

分子サイズや形状のスケーリングへの影響では、回転運動を並進運動に関するスケーリングパラメータは多くの場合一致しない。しかしながら、形状異方性が大きくなるほど、つまり、分子が細長くなるに従い、これらのずれは大きくなる。逆に分子が球形に近づくほど、回転と並進のスケーリングパラメータが一致することから、スケーリングパラメータと分子形状との明確な相関があることが分かった。これらのことから、拡散係数と粘性係数との関係づけるストークス・アインシュタイン(SE)関係と強く関連していることが示唆される。今後これを明らかにするために、SE関係とスケーリングとの関係についても調べる必要性があることも明らかとなった。

更にスケーリングとマイクロ構造との相関について調べた結果、マスターカーブ上の同一点上にある複数の状態点では、動径分布関数や角度相関関数などの構造を表す関数が同一であることが分かった。つまり、異なる状態点で同じ構造を持つ条件を熱力学的スケーリングのマスターカーブから知ることが出来る。このことは動力学量を構造の関数で表現できることも示唆している。

最後に、今後の課題として動的量を表す関係について明らかに出来れば、さらに物質の普遍性について理解することが出来ると予想している。