

# 主 論 文 要 旨

報告番号	甲乙第	号	氏名	美馬 俊喜
主論文題目： ナノ空間に閉じ込められたネマティック液晶の秩序および輸送特性 古典分子動力学シミュレーションによる研究				
(内容の要旨)				
<p>近年、微細加工技術が向上し、数ナノメートルの空隙を持つデバイス、いわゆるナノ空間を製作する技術が発達してきた。ナノ空間に閉じ込められた分子はバルクと異なる性質を示す場合があり、研究が進んでいる。現在、閉じ込められる分子として液晶が目目されている。液晶は電場を印加すると整列する性質が応用され、ディスプレイに利用されている。しかし液晶は温度や圧力に応じて配向秩序が生じ、秩序の有無に応じて液晶全体の性質が変化する。この液晶全体の性質も、液晶をナノ空間に閉じ込めたときにはバルクと異なるものになると予想され、液晶はナノデバイスとして工学的に広く応用される可能性がある。</p> <p>そこで本研究では、古典分子動力学シミュレーションによってナノスリット内のネマティック液晶の輸送特性と配向秩序のシステムサイズ依存性に関して調べることを目的とした。回転に関する輸送係数は液晶ディスプレイに用いられる液晶の駆動特性の評価に用いられる重要な量である。またシステムサイズ依存性の有無を検証することはスリット内の液晶のシミュレーションにおけるシステムサイズのとり方に指針を与える。</p> <p>第1章で本研究の背景と目的を述べた。第2章では液晶分子の形状や液晶の相図について説明した。第3章では一般的な古典分子動力学シミュレーションの方法を説明した。第4章ではネマティック液晶のモデル粒子である一軸性 Gay-Berne 粒子、粒子をスリットの壁に平行にする作用のある壁と粒子の間の相互作用ポテンシャル、本研究で用いた解析方法を説明した。</p> <p>第5章では、自己拡散係数や自己回転係数を計算し、液晶の輸送特性を明らかにした。本研究では、壁に近づくほど、粒子はスリットに平行な面内で拡散および回転しやすくなり、スリットに垂直な面内で拡散および回転しにくくなることを明らかにした。この結果に対して、輸送係数に対応する速度相関関数、角速度相関関数、およびそれらをフーリエ変換して得られる振動スペクトルを解析し、壁に平行な方向と垂直な方向における輸送に関する結果を振動スペクトルと関連付けた。</p> <p>第6章では、配向秩序のシステムサイズ依存性を複数の温度について調べた。スリットの中にバルク様の領域が存在しない場合、配向秩序の度合いを表すオーダーパラメーターにはシステムサイズ依存性が存在することを示した。また、本研究で調べた範囲内で、システムサイズ依存性には閾値が存在し、閾値以上のシステムサイズでオーダーパラメーターの変化は収束した。この原因を探るために、本研究では相互配向空間相関関数を計算した。その結果として、相互配向空間相関関数の減衰が収束するほど大きなシステムサイズになると、オーダーパラメーターのシステムサイズ依存性が収束することを示した。</p> <p>最後に第7章で研究全体に関する結論を述べた。</p>				