

学位論文 博士（工学）

分子シミュレーションを用いた棒状液晶分子の研究
— 相転移及び液滴核生成の解析とその高速化 —

2018年度

慶應義塾大学大学院理工学研究科

野 澤 拓 磨

主 論 文 要 旨

報告番号	○甲 乙 第	号	氏 名	野澤 拓磨
主 論 文 題 名 :				
分子シミュレーションを用いた棒状液晶分子の研究 — 相転移及び液滴核生成の解析とその高速化 —				
(内容の要旨)				
<p>液晶とは液体のような流動性と結晶のような長距離秩序を併せ持つ物質の総称である。液晶は古くから研究されているにも関わらず未だに謎の多い物質である。例えば、液晶分子に付加されたキラリティやダイポールは、液晶の物性に大きな影響を与えるが、これらの相互作用が共存した場合にどのような影響があるかは調べられていない。また、1次相転移の初期過程である核生成は、様々な物理現象と密接に関わっていることから工学的に重要であるが、液晶のような1軸性の異方性分子の核生成過程については未だに分かっていない。</p> <p>近年では、コンピュータ上で分子運動を再現出来るようになり、液晶分子の微視的な運動を直接観察出来るようになった。このような分子シミュレーションを用いた研究は、液晶の分子論的な性質の解明に有益な情報をもたらすことが期待されている。本研究では、分子シミュレーションを用いて、キラリティとダイポールが共存した液晶分子の相転移シミュレーションを行い、これらの相互作用が液晶の長距離構造に与える影響について調べた。その結果、キラリティによってスメクチック構造の形成が阻害される場合があり、そのような場合には短距離秩序を持ったコレステリック相が現れることが確認された。また、液晶分子の均一核生成シミュレーションを行い、その核生成や成長過程を調べたところ、液晶の核生成は非常に高い配向状態から始まり、一度分子配向が乱れた状態を経た後にネマチックな液滴となる事が分かった。</p> <p>Atomistic な分子モデルを用いたシミュレーションは、実験系を模擬出来るという点で工学的であるが、液晶の相転移や核生成は大規模かつ長時間スケールのシミュレーションを必要とするため、液晶分子系では分子を回転楕円体に粗視化したモデルが用いられることが多い。近年では、Isotropic Periodic Sum (IPS)法などの並列計算効率の高いCoulomb相互作用の計算手法と大規模な並列計算実行の組み合わせによって、計算精度を維持しながらも飛躍的な計算の高速化が可能になると期待されている。しかしながら、液晶分子のように分子の先端に大きな電氣的偏りがある高分子系ではIPS法の有効性が未だに不明である。そこで本研究では、IPS法を用いた分子動力学シミュレーションの結果を既存手法と比較することにより、その有効性の検証を行った。また、より高速な計算を実現するために、GROMACSへのIPS法の実装とgroup-basedカットオフ利用時の精度評価を行った。その結果、IPS法は液晶の物性を正しく見積もる事が出来ること、group-basedカットオフ利用時にはカットオフ境界におけるポテンシャルの滑らかさが特に重要になる事が明らかになった。</p>				

Thesis Abstract

No. _____

Registration Number	<input checked="" type="checkbox"/> "KOU" <input type="checkbox"/> "OTSU" No. _____ *Office use only	Name	Takuma Nozawa
Thesis Title Molecular Simulation Study on Rod-like Liquid Crystals: Analysis for Phase Transitions and Droplet Nucleation and its Acceleration			
Thesis Summary <p>Liquid crystal is a collective term for a subset of phases which are stable between those of solid and liquid. There are still many mysteries in liquid crystals although it has been studied from a long time ago. For example, chirality or dipole may strongly influence the macroscopic properties of liquid crystals, however, no theoretical or simulation studies that combine chiral and dipolar interactions. Nucleation process of uniaxial rod-like molecules such as liquid crystals have not been revealed yet.</p> <p>Molecular simulations are expected to give useful insights on molecular-level characteristic of liquid crystals. In this study, therefore, molecular simulations were performed to investigate the effect of chirality and dipole strength upon the phase behavior. I revealed that chirality may inhibit smectic formation, and induce a short-ranged layered structure in cholesteric phases. In addition, homogenous droplet nucleation simulations were performed, and I found that the nucleation of liquid crystals begins from highly ordered state, and form nematic droplet after a marked decrease in orientational order before critical nucleus is attained.</p> <p>Atomistic molecular simulations, which are performed at with experimental conditions, are important in engineering perspective. In recent years, the progressive acceleration are expected a combination of massive parallel computing and algorithms that are scalable on these environment such as isotropic periodic sum (IPS) method. However, the effectiveness for low-charge-density system with terminal dipole such as liquid crystals has not been studied. In this research, therefore, I performed molecular dynamics simulations using IPS method and compare results with de facto standard method. Moreover, IPS method was implemented into GROMACS with group-based cutoff for its further acceleration. I found that IPS method can successfully estimate liquid-crystal properties, and the potential smoothness at cutoff boundary is required with group-based cutoff.</p>			