

# 論文内容要旨 (英文)

平成22年度入学 博士後期課程

専攻名 有機材料工学

氏 名 野村 仁美



論文題目 Probing the liquid crystalline phase transitions of hard platelet systems

The broad objective of this thesis is to identify the phase behavior of a system of platelet-like liquid crystal molecules modeled on a hard repulsion potential. Based on the molecular theory of liquid crystals, we examined the phase transition of the system by computer simulation.

In theory, platelet-like liquid crystal molecules have been predicted to exhibit a biaxial phase. Recently, those molecules are considered to be a novel liquid crystal material since a pre-existing experiment showed that their switching speed between on and off states becomes 10 to 100 times faster than traditional rod-like liquid crystal molecules. Nevertheless, the basic research using a hard infinitely thin platelet model has not been investigated fully.

We proposed a new method called the Phase Space Multi-histogram (PSMH) method to compute free energy and chemical potential. This is a kind of a generalized ensemble method and is used to calculate free energy of hard repulsive particles by interpolating from a non-interacting ideal gas state. Using the PSMH method, we can study the phase transitions of the hard platelet system.

The organization of the thesis is as follows. In Chapter 1, after briefly reviewing a historical background of Monte Carlo computer simulations of liquid crystals, we stated a scope and goal of this study. In Chapter 2, we explained the PSMH method and gave a concrete example of 120 infinitely thin hard platelet system. In Chapter 3, we tested the method to a system of 108 hard spheres and found that it was applicable except at the higher pressure. In Chapter 4, we introduced a non-biaxial test for hard platelet molecules of  $D_{2h}$  symmetry and defined a rocking parameter. We applied the test to systems of 480 and 1200 infinitely thin hard platelets of various aspect ratios and found that they did not show biaxiality. In Chapter 5, we tested the PSMH method to a system of thin platelets as an intermediate case between infinitely thin platelets and spheres and found that the method worked. We also computed rocking parameters and discussed the prospect of this work as a guide for applying to laboratory experiments. Finally, in Chapter 6, we gave a summary.

学位論文の審査及び最終試験の結果の要旨

平成25年 8月 6日

理工学研究科長 殿

課程博士論文審査委員会

主査 ..... 香田智則 .....

副査 ..... 小山清人 .....

副査 ..... 西岡昭博 .....

副査 ..... 村澤 剛 .....

副査 ..... .....

副査 ..... .....



学位論文の審査及び最終試験の結果を下記のとおり報告します。

記

1. 論文申請者

専攻名 ..... 有機材料工学専攻 .....

氏 名 ..... 野村仁美 .....

2. 論文題目（外国語の場合は、その和訳を併記する。）

..... Probing the liquid crystalline phase transitions of hard platelet systems .....

..... (剛体プレート分子の液晶相転移の解明) .....

3. 審査年月日

論文審査 ..... 平成25年 7月24日 ~ 平成25年 8月 6日

論文公聴会 ..... 平成25年 8月 6日

場所 ..... 工学部4号館114号室 .....

最終試験 ..... 平成25年 8月 6日

4. 学位論文の審査及び最終試験の結果（「合格」・「不合格」で記入する。）

(1) 学位論文審査 ..... 合格 .....

(2) 最終試験 ..... 合格 .....

5. 学位論文の審査結果の要旨（1,200字程度）

別紙のとおり

6. 最終試験の結果の要旨

別紙のとおり

## 別 紙

専 攻 名	有機材料工学専攻	氏 名	野村仁美
学位論文の審査結果の要旨			
<p>液晶相を示す分子は、棒状か円板状である。本論文は、円板状の液晶分子のモデルとして剛体プレートを用いた、一連の研究に関するものである。本論文の目的は、円板状の分子によって作り出される液晶相の構造を明らかにすることである。本論文のキーワードを挙げると、液晶、分子シミュレーション、モンテカルロ法、2軸性ネマチック液晶である。</p> <p>本論文は6章の構成になっており、第1章では、液晶相に関しての一般論の中で、論文で取り扱う2軸性ネマチック相という液晶構造を説明している。本論文で液晶相の安定性を検討するための手法の一つとして Phase Space Multi-Histogram (PSMH) 法を提案しているが、位相空間や統計集団など、この手法を理解するための基礎的な事柄についても説明している。</p> <p>第2章と第3章はPSMH法に関するものである。第2章では、PSMH法を提案し、正方形形状の剛体プレートモデル分子に適用してその有用性を評価している。PSMH法を用いて自由エネルギーを求め、その値から、剛体プレートモデル分子が集合した系の相転移点の密度を評価した。すなわち、第2章では、剛体プレートモデル分子系で、PSMH法が有効であることを示している。</p> <p>第3章では、PSMH法が適用できない場合があることが述べられている。第2章で示されたように、PSMH法は、剛体プレートモデル分子系では有効である。第3章では、剛体球モデル分子系で高密度の場合には、PSMH法が適用できないことが述べられている。</p> <p>第4章では、剛体プレートモデル分子系のネマチック相における2軸性を議論している。2軸性の詳細な判定のための方法として Non-Biaxial Test (NB テスト) を提案している。NB テストの結果、検討した系では、2軸性ネマチック液晶が現れないことを確認している。その他に第4章で、剛体プレートモデル分子の配向の主軸は常に平板の法線に平行となることを示し、また、分子の運動様式を評価するパラメーターとしてロッキングパラメーターというものを提案している。</p> <p>第5章では、PSMH法を厚みのある剛体プレートモデル分子系に適用した場合を議論し、また、第6章では論文全体の総括を行っている。</p> <p>本論文の内容の一部は、査読付きの英文の学術論文誌から3報の論文: Journal of the Physical Society of Japan, <b>81</b>(1), (2012)014001、Molecular Crystals and Liquid Crystals, <b>558</b>(1), (2012)140-147、Journal of the Physical Society of Japan, <b>81</b>(11), (2012)114003 として公表されている。また、本論文については、PSMH法を提案したこと、NB テストを提案したこと、ロッキングパラメーターを提案したことなどに独自性が認められる。PSMH法については、その問題点も指摘し、今後の発展に必要なものを示唆する内容となっている。以上のことから、本論文の内容、独自性、発展性は学位論文として十分なものであり、学位論文の審査結果を合格とする。</p>			
最終試験の結果の要旨			
<p>博士論文公聴会における口頭発表と発表内容に関連する科目についての口頭試問により審査を行った。発表は英語で行われ、発表内容と口頭試問から総合して判断した結果、博士論文の内容、また、申請者の学力が、工学博士として相応しいものであることが確認できた。以上のことから、最終試験を合格と判定する。</p>			

※ (     ) 内の説明は、削除の上、記載願います。