

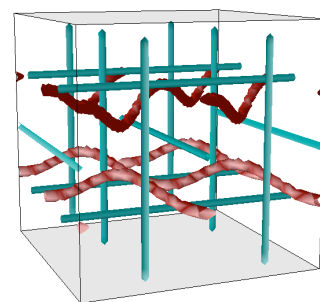
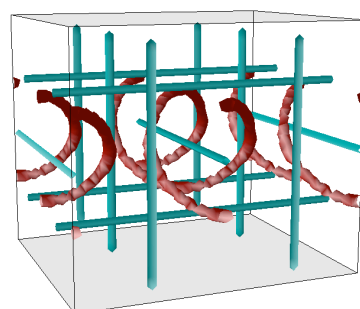
液晶系の3次元秩序構造に関する連続体シミュレーションによる研究

産業技術総合研究所・主任研究員 福田順一

強いキラリティを持つ液晶が薄いセルに閉じ込められた場合にどのような秩序構造を取るかを、連続体理論に基づく数値計算によって調べ、これまでの液晶研究では見出されなかった欠陥構造が生じることを明らかにした。また、コレステリックブルー相の電場応答について、配向と欠陥の構造変化、および単位格子の変形に関する知見を得た。さらに、薄いネマチック液晶セル中でコロイド粒子が液晶の配向変形を媒介としてどのような相互作用をするかを解析計算によって調べ、実験を半定量的に説明できることを示した。

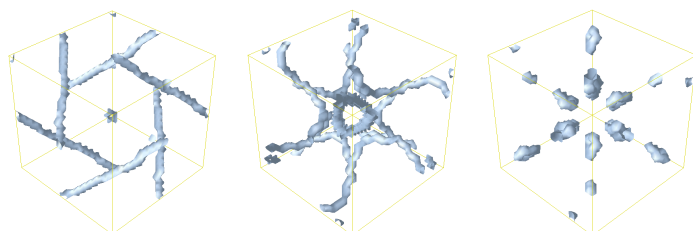
1. 強く閉じ込められたキラル液晶の欠陥構造[1]

バルクでコレステリックブルー相(強いキラリティを持つ液晶が示す、線欠陥が3次元構造を形成した秩序相)を示す液晶を、セル厚がブルー相の単位格子の大きさ程度の薄いセルに閉じ込めた際に、どのような欠陥構造が生じるかを、配向秩序を2階のテンソルで記述する Landau-de Gennes 理論に基づいた数値計算によって調べた。その結果、2重らせんを形成した線欠陥の対が平行に並ぶ構造(右図上)や、平行に並んだ波打った欠陥2組からなる構造(右図下)など、これまで液晶の実験、理論研究では議論されなかったことがないタイプの構造が、エネルギー的に安定な状態として生成しうることを明らかにした。この結果は、液晶が形成する欠陥構造にはこれまで知られている以上に豊かなバラエティが存在しうることを示している。またセルの厚さが薄くなると、前者の構造が後者の構造より安定になることもわかった。これは後者の構造の方が、薄いセルで欠陥間の斥力の影響がより強くなることに起因する。



2. コレステリックブルー相の電場応答[2]

昨年度に引き続き、コレステリックブルー相が印加電場に応答してどのような構造変化を液晶配向、および欠陥が示すかを調べた。特に、強い電場下でどのような動的過程を経るかに着目した。右図に示すのは、ブルー相Iと呼ばれる構造に、ある1本の線欠陥に平行な強い電場を印加した場合に見られる欠陥の構造変化である(誘電率の異方性は正)。欠陥の波打ち、分裂、環状の欠陥への変化といった複雑な過程を経て、最後には液晶は電場方向に一様に配向し、欠陥は消滅する。また電場に平行な欠陥が分裂する際には、twist disclination と呼ばれる3本の欠陥が、もとの1本の欠陥から生成することがわかった。

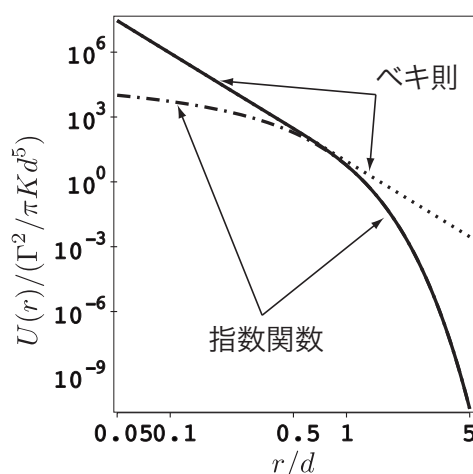


また誘電率の異方性が負の場合に、同じ構造に同じ方向の電場を加えると、六角形からなる2次元格子に欠陥が規則的に配置することも明らかになった。

3. ネマチック液晶セルにおけるコロイド粒子間相互作用[3]

薄い液晶セル中において、液晶配向の変形に由来するコロイド粒子間相互作用のポテンシャルが指数関数的に振る舞うという実験結果[4]に基づいて、相互作用ポテンシャル U の解析的評価を試みた。

粒子がセル厚 d に比べ十分小さく、配向の変形が小さいと見なせる場合には U の厳密な表式が導出可能であることを示した。右図は U を粒子間距離 r に対してプロットしたもので、実線が解析計算の結果である。この結果から、 r/d が 0.8 程度より小さい場合は $U \sim r^{-5}$ のベキ則、大きい場合は $U \sim \exp(-2\pi r/d)$ という指数関数に従うことが明らかになった。



指数関数的な減衰は、セル表面の存在による液晶変形モードの制限が、実効的な質量を変形モードに付与していることに由来すると理解できる。また、 $r/d \approx 0.8$ という閾値、ベキ則の指数、指数関数の減衰長 $d/2\pi \approx 0.16d$ という理論の結果は、全て実験と非常によく一致を示している。このように、解析計算の結果は、実験におけるコロイド粒子の振る舞いを非常によく説明できることが明らかとなった。

4. その他特記事項

(1) A02 班の木村康之教授のグループが行なっている、液晶コロイド系の粒子間相互作用に関する研究を、数値計算の立場から支援した。大きさの異なるコロイド粒子間の相互作用の実験結果が定量的に説明できることを明らかにした[5]。

(2) 「物性研究」の依頼により、液晶コロイド系に関する理論的研究のレビューを執筆した（2010年5月以降掲載予定）。

(3) 液晶コロイド系に関するレビュー論文が、J. Phys. Soc. Jpn. の Soft Condensed Matter 特集号に掲載された[6]。

(4) 第3回若手勉強会（2009年9月、筑波大）において、液晶の基礎に関する講義を行なった。

<参考文献>

[1] J. Fukuda and S. Žumer, Phys. Rev. Lett. **104**, 017801 (2010); Liq. Cryst. (submitted).

[2] J. Fukuda, M. Yoneya and H. Yokoyama, Phys. Rev. E. **80**, 031706 (2009).

[3] J. Fukuda and S. Žumer, Phys. Rev. E **79**, 041703 (2009).

[4] M. Vilfan *et al.*, Phys. Rev. Lett. **101**, 237801 (2008).

[5] T. Kishita, K. Takahashi, M. Ichikawa, J. Fukuda and Y. Kimura, Phys. Rev. E **81**, 010701(R) (2010).

[6] J. Fukuda, J. Phys. Soc. Jpn. **78**, 041003 (2009).