

# 液晶場に分散した棒状コロイド粒子の秩序化とダイナミクス

九州工業大学 情報工学部・准教授 松山明彦

## 成果概要

液晶分子と長い棒状高分子の混合系で起こる相分離を記述するための統計力学的理論を構築した。液晶分子と棒状分子が、互いに平行に配向する場合と垂直に配向する場合について、どのような相分離が可能であるかを調べた。本研究によって、液晶分子と棒状高分子の混合系には、様々な液晶構造を持った相分離が可能であることを明らかにした。

### 1. はじめに

カーボンナノチューブ (CNT) のような長い棒状コロイド粒子は、ユニークな構造や力学的電気的特徴のため、ナノセンサーやディスプレイなど様々な応用分野の新しい材料として注目されている。この材料設計において重要なことは、長い棒状コロイド粒子を並べることである。その方法の一つとして低分子液晶がつくる配向場を利用することが考えられているが、このような液晶分子と棒状分子の混合系の物性はまだまだあまり明らかにされていない。

本研究は、平衡・非平衡の統計力学的理論と計算機シミュレーションを用いて、長い棒状高分子と低分子液晶の混合系でおこる、相構造や相分離、電場や磁場などの外場による配向秩序と相秩序の制御と、そのダイナミクスを明らかにすることを目的とする。ここでの棒状高分子は、CNTやタバコモザイクウイルスやPBLGなどの棒状高分子液晶を念頭に置いている。

本年度は、液晶分子と球状コロイド粒子の混合系の自由エネルギー[1-2]を拡張して、液晶分子と棒状コロイド粒子の混合系の自由エネルギーを構築し、ネマチック相—等方相転移や相分離について調べた。

### 2. 液晶分子と棒状高分子の混合系のネマチック相

液晶分子の配向と棒状分子の配向によって図1に示す様に3つの異なるネマチック相が可能である。ネマチック  $N_0$  相は2つの分子が互いに平行に配向した状態を示す。ネマチック  $N_1$  相は液晶分子の配向方向が配向軸を決め、それに垂直に棒状分子が配向している状態を示す。ネマチック  $N_2$  相は棒状分子の配向方向が配向軸を決め、それに垂直に液晶分子が配向している状態を示す。この3つのネマチック相は液晶分子と棒状分子の配向秩序パラメーターの正負で定義することが出来る。このようなネマチック

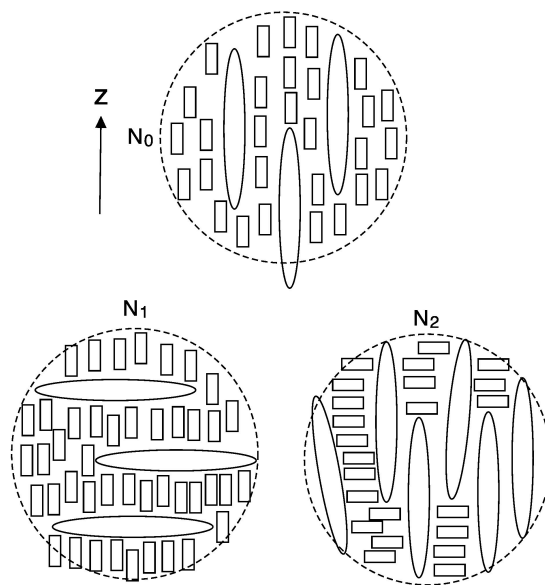


図1. 様々なネマチック相

相の出現は棒状分子の濃度に強く依存することが期待できる。さらに、棒状分子の表面を化学修飾することで、液晶分子と棒状分子の間の配向を変えることも可能である[3]。この系では、2軸性ネマチック相の可能性もあるが、これについては今後の検討課題として、まずはどのような相分離が可能であるかに注目した。

### 3. 相分離

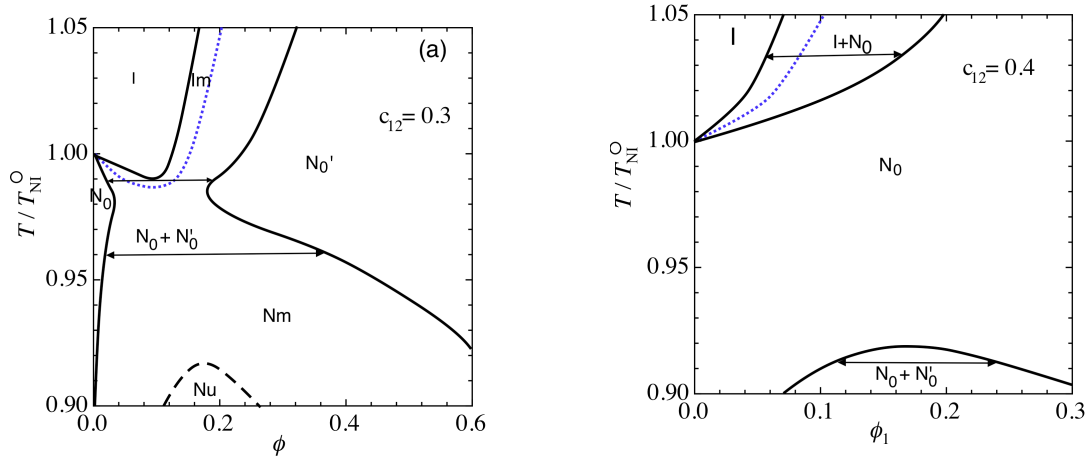


図 2. (a)  $c_{12}=0.3$  (b)  $c_{12}=0.4$  の場合の相図。平行配向(N0)の場合の相分離を示す。

図 2 は構築した理論から計算した相図の一例を示す。縦軸が温度、横軸が棒状分子の体積分率を示す。実線が共存曲線、点線がネマチック相-等方相の相転移曲線を示す。低温側にある破線はスピノダル曲線を示す。図 2 は液晶分子と棒状分子が互いに平行に配向する場合の結果である。異なる分子間の引力の強さが、0.3と0.4に変えてある。引力が働かない場合は、Flory らによって予測された煙突型の相図になるが、引力の効果で相分離が劇的に変わることが解る。

図 3 は液晶分子と棒状分子が垂直に配向する場合の相図を示す。本来 1 次相転移(1<sup>st</sup>)であるネマチック-等方相転移が 2 次相転移(2<sup>nd</sup>)になる領域が現れる。高濃度側では、2つのネマチック相である N1 相と N2 相の 2 相分離領域(N1+N2)が現れる。

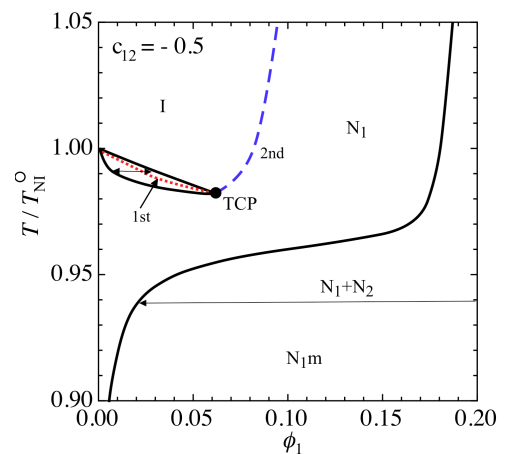


図 3. 垂直配向の場合の相図

本研究で得られた結果は、棒状分子と液晶分子の混合系がいかにか多様な相分離挙動を持つかということを示したものであり、この分野のさらなる実験的、理論的展開への基礎になるものである。

### <参考文献>

1. A. Matsuyama, *J. Chem. Phys.* **131**, 204904 (2009).
2. A. Matsuyama and R. Hirashima, *J. Chem. Phys.* **128**, 044907 (2008).
3. S. Zhang and S. Kumar, *small*, **4**, 1270 (2008).