

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

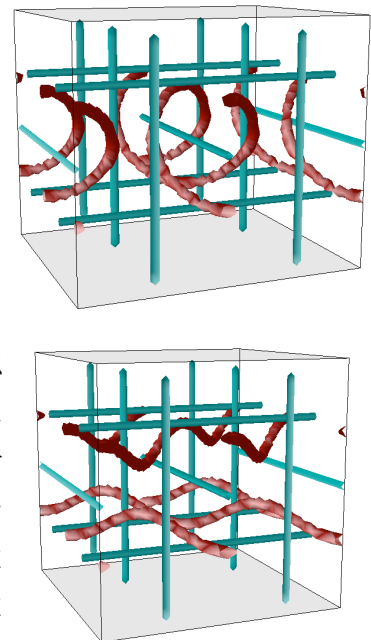
1. 初期の研究目標と実際の研究推進

本研究は、液晶の3次元秩序を記述できる連続体理論に基づく数値計算を行うことで、特にキラリティを有した液晶の秩序形成のメカニズムや、構造変化のダイナミクスを明らかにすることを目標とする。研究の結果、強く閉じ込められたキラル液晶がバルクの構造とは全く異なる構造を取りうることを、あるいは電場の印加により線欠陥のチャージが連続的に変化する構造転移が起こりうることを明らかにした。さらに高分子によるコレステリックブルー相の安定化について、ある程度定量的な考察を与えることに成功した。

2. 研究成果

2-1. 強く閉じ込められたキラル液晶の欠陥構造[1]

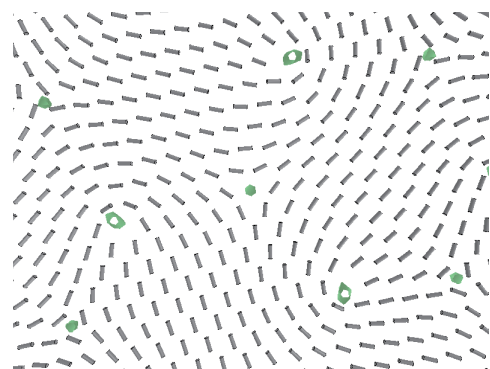
強いキラリティを有する液晶は、一般にバルクでコレステリックブルー相（線欠陥が3次元構造を形成した配向秩序相）を示す。そのような液晶を薄いセル（セル厚がブルー相の単位格子の大きさ程度）に閉じ込めた際にどのような欠陥構造が生じるかを、配向秩序を2階のテンソルで記述する Landau-de Gennes 理論に基づいた数値計算によって調べた。その結果、セル厚、温度、キラリティの強さ、セル表面での配向の様子（アンカリング）などに依存して、バルクのブルー相の構造からは想像できない多様な欠陥構造が安定に存在しうることが明らかになった。その例として、2重らせんを形成した線欠陥の対が平行に並ぶ構造（右図上）や、平行に並んだ波打った欠陥2組からなる構造（右図下）、あるいは6回対称性を有する構造や環状の欠陥が規則的に配置した構造などを見出した（図の曲がった線が欠陥、直線は double-twist cylinder と呼ばれる構造の存在位置）。



この結果は、液晶が形成する秩序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唆している。

2-2. 液晶の線欠陥のチャージの連続的な変化[2]

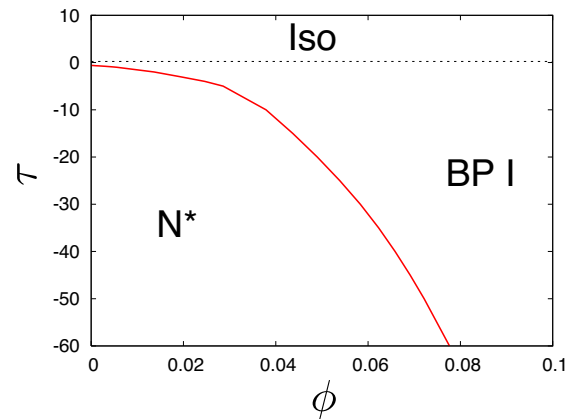
液晶配向が形成する線欠陥(disclination)では、欠陥を囲むパスを1周することで配向ベクトルが何回転するかというチャージが定義できる。このチャージは配向ベクトルが2次元に制限されているときは明確に定義できるが、3次元の場合は必ずしもそうではなく、たとえば $-1/2$ のチャージの線欠陥が $+1/2$ のチャージの線欠陥に連続的に変化するということがあり得る。この事実自体は良く知られてい



るものの、実際どうすればそのような連続的な構造転移が起こるのかは、これまで議論されてこなかった。07/08年度の公募研究で調べた、電場印加によるコレステリックブルー相の欠陥構造の変化の様子[3]を詳細に解析した結果、そのような構造転移が実際に起こっていることが明らかになった。より具体的に述べると、 $-1/2$ の欠陥が規則的に配置しているブルー相 I の構造に、1本の欠陥に平行に電場を印加すると、誘電率の異方性が負の場合には欠陥が完全に消滅せず、電場に平行な線欠陥が六角形の2次元格子を形成する[3]。その際の線欠陥の構造変化の様子を調べると、もとの $-1/2$ の欠陥のうちの半数が twist disclination と呼ばれる状態を経て、 $+1/2$ の線欠陥に連続的に変化していることが確かめられた。図は六角形の2次元格子の様子を表したもので、 $-1/2$ の欠陥と $+1/2$ の欠陥の両方が存在していることが明らかである。欠陥の構造転移自体非常に興味深いですが、このような構造転移をより単純なジオメトリの液晶で実現することができれば、新しい液晶配向制御、デバイスの機構を提案できる可能性もあると考えている。

2-3. コレステリックブルー相の高分子による安定化に関する理論的考察[4]

コレステリックブルー相は通常、安定な温度範囲が 1K 程度と非常に狭いが、高分子の導入によって、安定な温度範囲が著しく広がることが知られている[5]。安定化によってブルー相の応用の可能性が広がり一気に研究が広がったが、肝心の「なぜ安定化するのか」に関する理論的理解は十分とは言えない。そこで、「液晶の欠陥が高分子で置き換わることによってブルー相の自由エネルギーが減ることが安定化の原因である」という広く信じられている仮説の妥当性を、いくつかの仮定に基づく数値計算によって調べた。高分子の体積分率 (ϕ) と温度 ($\tau \approx T - T^*$, T^* は等方相が不安定になる温度) について相図を計算した結果、10%以下の高分子の添加によってブルー相が安定な温度範囲が 60K 以上に広がることが示された(相図において、Iso は等方相, N^* はキラルネマチック(コレステリック)相, BP I がブルー相 I と呼ばれる相)。相図の線が上に凸なことも含め、この結果は実験事実[5]を極めてよく説明でき、上記の仮説の妥当性を示しているものと言える。



<参考文献>

- [1] J. Fukuda and S. Žumer, Phys. Rev. Lett. **104**, 017801 (2010); Liq. Cryst. **37**, 875 (2010); Phys. Rev. Lett. (to be published), 投稿中の論文 1 報
- [2] J. Fukuda, Phys. Rev. E **81**, 040701(R) (2010).
- [3] J. Fukuda, M. Yoneya and H. Yokoyama, Phys. Rev. E. **80**, 031706 (2009).
- [4] J. Fukuda, Phys. Rev. E **82**, 061702 (2010).
- [5] H. Kikuchi *et al.*, Nat. Mater. **1**, 64 (2002).