

学 位 論 文 題 名

曲面型ネマチック液晶薄膜における点欠陥のトラップ効果

学位論文内容の要旨

液晶とは、液体の流動性と固体の結晶性を併せ持つ物質である。液晶相を示す系の構成分子は構造異方性(棒状、円盤状など)を有するため、この異方性に起因する排除体積効果と異方的分子間力を通して、分子は互いの向きを揃える傾向を示す。その結果、分子の重心の空間的秩序が失われた後でも、分子の向きに関する秩序(配向秩序)を分子サイズよりもずっと大きな空間スケールで保持できる。この配向秩序と重心位置の乱れを同時に兼ね備えている点が、液晶相の大きな特徴である。多種多様な液晶相の存在が知られる中、本論文では最も典型的な例であるネマチック相を対象を絞る。

液晶の研究は、1888年に生体物質の観測中に発見されるにその端を発する。その後しばらくは構造に関する基礎的研究がなされた程度で、工学の研究対象としてはあまり重視されなかった。しかし、1960年代に再び顕微鏡観察を通じてその特異な振る舞いが再確認されると、学術的な関心が寄せられるとともに、その特異性の積極的な応用が検討され始めた。液晶を応用する上で最も重要なのが分子配向の制御である。例えば、液晶の主たる応用であるディスプレイ開発においては、分子配向の均一性と外場に対する高応答性が製品の品質向上に欠かせない。一般に分子配向の理論解析においては、配向ベクトル(=微小体積が含む分子集団の平均的方向を指す単位ベクトル)という概念を導入する。この配向ベクトルが液晶内部に一様連続分布すると仮定し、その配向の微分変化量を用いて弾性エネルギーを定義することで、分子配向の安定性を解析することができる。この理論手法に従えば、渦欠陥(=回位)や転位などの配向欠陥が液晶内に存在すると、欠陥周辺の配向が乱されるため系の弾性エネルギーが増加する。よって、液晶薄膜の平衡状態には欠陥が含まれないというのが通常理解であった。ところが、球面などの閉曲面に液晶薄膜が張り付いた系では、閉曲面上のベクトル場に対するトポロジー的要請から、欠陥が不可避免的に生じる。その上、液晶膜の厚みや配向ベクトル間相互作用力の強さに応じて、含まれる欠陥の数や欠陥強度が変化する。この特徴を利用すると、液晶コロイド系(多数のコロイド粒子を液晶内部に埋め込んだ系)のコロイド表面に生じる配向欠陥同士の相互作用を通して、コロイド粒子の結晶構造体を作成できる。この結晶構造体は特定波長の光のみを透過させることから、光ファイバーなどへの応用が期待される。このように、従来は「排除すべき」対象であった配向欠陥を積極的に利用する、新しい液晶技術が開拓され始めている。

曲面基盤に液晶薄膜を張り付けた場合、基盤曲率の空間変調を通して、曲面上の恣意的な領域に欠陥をトラップすることができる。先行研究によれば、ガウス関数型に隆起した曲面(以下、バンブと称する)では、強度+2(コアの周りで配向ベクトルが2回転する)以下の配向欠陥はバンブの頂点にトラップされる。また、複数のバンブを周期的に配列させた基盤を用いると、正(負)符号の欠陥強度をもつ配向欠陥をバンブの頂点(鞍点部)に選択的にトラップできる。こうした曲面状液晶

薄膜で起こるトラップ効果は、先に述べた液晶コロイド表面の欠陥位置を自由に操作できる可能性を示しており、工学的観点からも興味深い現象である。

ただし上記の先行研究においては、現実の液晶薄膜に生じる配向秩序の空間的ゆらぎが考慮されていない。すなわち、実際の系では熱擾乱などが原因で配向パターンに乱れが生じる。特に、配向欠陥の中心から十分に離れた点では、配向パターンの乱れによって生じる弾性エネルギーの増加分が熱擾乱によるエントロピーで相殺されるため、この点における分子配向は欠陥中心近傍の分子配向とは相関を持たない。よって、トラップ効果の解析においては、分子配向が相関を保つ有限領域内の曲率分布のみを考察するのが妥当である。そこで重要となる量が、配向ベクトル同士の相関が保たれる距離、すなわち、配向秩序の相関長 ξ である。配向秩序の相関長と曲率の空間変調スケールの比を徐々に増減し、その結果生じる配向欠陥のトラップ位置の変化を調べることにより、熱擾乱の寄与を考慮したトラップ効果の解析が可能となる。その成果は、曲面状基盤の形状制御（または液晶コロイドの粒径制御）を介した欠陥位置操作技術の開発に有意な知見を与えると考える。

そこで本論文では、配向欠陥と相互作用する曲率を含む領域 A のバンプ上での面積に対し、トラップ位置がどのように変化するかを解明した。具体的には、領域 A を欠陥中心から半径 ξ の円領域に限定し、欠陥中心の位置 $r = r_c$ を変えながら、弾性エネルギー極小となる位置（トラップ位置）を解析した。また、相関長とバンプ幅のスケール比により領域 A のバンプ上での面積を変え、トラップ位置の移動を追跡した。弾性定数など物質に依存するパラメータには、典型的なネマチック液晶である N-(4-メトキシベンジリデン)-4-ブチルアニリン (MBBA) の物性値を用いた。強度 +1 の配向欠陥に対する解析の結果、相関長よりも幅の大きいバンプ上では配向欠陥はバンプの変曲点にトラップされることが明らかになった。また、バンプ幅を相関長に近づけるとトラップ位置は頂点に移動する。この二つのトラップ位置の移り変わりには閾値が存在し、連続転移に似た振る舞いであることを明らかにした。これらの結果は、現実の系に存在する熱擾乱の影響が欠陥のトラップ位置に強く作用することを示しており、応用上でも液晶コロイドのサイズ制御に指針を与える。本論文は全 8 章で構成され、各章の概要は次の通りである。

第 1 章は序論である。液晶研究の歴史を俯瞰した後、配向欠陥のトラップ効果に関する研究の背景と問題点について概説する。

第 2 章では液晶に関する基礎的な事項を整理する。液晶相の分類と各相の性質を掴んだ後、分子を配向させる分子間力に関する分子論的アプローチを説明する。続いて液晶分子の配向安定性を記述する連続体理論の概要と、それに基づく弾性エネルギーの導出を行う。最後に配向欠陥の定義と昨今における配向欠陥研究について述べ、本論文の目的を明らかにする。

第 3 章では、本論文の基礎となる幾何曲率ポテンシャルの導出過程を詳述する。尚、その過程で用いるリーマン幾何学の基礎的な項目は巻末資料 1 にまとめた。

第 4 章では、現実の配向パターンが示すゆらぎの相関長について説明する。その後、相関長よりも十分に大きなバンプにおけるトラップ効果の解析結果を述べる。

第 5 章では、バンプ幅の変化に伴って起こるトラップ位置の連続転移を示す。この転移に関する知見は、基盤形状操作を通じた配向欠陥の位置制御を図る上で重要である。

第 6 章は結論である。配向欠陥のトラップ効果に関して本研究で得られた知見をまとめ、今後の展望について述べる。

巻末資料 1 ではトラップ効果を論ずるのに必要なリーマン幾何学に関する基礎項目、続く巻末資料 2 では第 4 章での冗長化を避けるために省いた saddle-splay 変形項の詳細について述べる。

学位論文審査の要旨

主 査 教 授 矢久保 考 介

副 査 教 授 石 政 勉

副 査 教 授 折 原 宏

学 位 論 文 題 名

曲面型ネマチック液晶薄膜における点欠陥のトラップ効果

液晶とは、構成分子の重心位置の乱れと配向秩序を同時に兼ね備えた物質である。多種多様な液晶相の存在が知られる中、本論文では最も典型的な例であるネマチック相を対象を絞り、その分子配向に関する理論考察を行っている。

分子配向の制御は、液晶を応用する上で最も重要な技術である。例えば、液晶の主たる応用であるディスプレイ開発においては、分子配向の均一性と外場に対する高応答性が製品の品質向上に不可欠である。一般に、転傾や転位などの配向欠陥が液晶内に存在すると、欠陥周辺の分子配向が乱されるため、系のエネルギーが増加する。よって、液晶薄膜の平衡状態には欠陥が含まれないというのが通常の理解であった。ところが、球面などの閉曲面に液晶薄膜が張り付いた系では、閉曲面上のベクトル場に対するトポロジ的要請から、欠陥が不可避免的に生じる。その上、液晶膜の厚みや配向ベクトル間相互作用力の強さに応じて、含まれる欠陥の数や強度が変化する。この特徴を利用すると、液晶コロイド系のコロイド表面に生じる配向欠陥同士の相互作用を通して、コロイド粒子の結晶構造体を作成できる。この結晶構造体は特定の周波数領域にフォトリックバンドギャップを形成するため、フォトリック結晶としての応用が期待されている。このように近年では、配向欠陥を積極的に利用した新しい液晶技術が開拓され始めている。

上に述べた液晶コロイド表面を含め、曲面状基盤に液晶薄膜が張り付いた系では、配向欠陥のエネルギーが欠陥位置の局所曲率に依存する。よって基盤の曲率分布を変調することで、曲面上の恣意的な領域に欠陥をトラップできる。こうした曲面状液晶薄膜で起こるトラップ効果は、先に述べた液晶コロイド表面に生じる欠陥の安定位置を自由に操作できる可能性を示しており、結晶構造制御技術などの工学的観点からも興味深い現象である。ただし先行するトラップ効果の理論研究においては、現実の液晶薄膜に生じる熱擾乱の効果、すなわち配向秩序の空間的ゆらぎが考慮されていない。配向欠陥の中心から十分に離れた点では、配向パターンの乱れによって生じるエネルギーの増加分が熱擾乱によるエントロピーで相殺される。このため、この点における分子配向は欠陥中心近傍の分子配向とは相関を持たない。よって現実の液晶系におけるトラップ効果を定量的に解析するには、熱擾乱の寄与を考慮し、分子配向が相関を保つ有限領域内の曲率分布のみを考察する必要がある。

本論文において著者の長谷川氏は、ガウス関数型曲面 (バンプ) 形状を有するネマチック液晶薄膜に対し、配向欠陥のトラップ位置が熱擾乱の度合いと曲面曲率の空間分布にどう依存するかを系統的に精査している。解析・考察の結果、以下の事実が明らかとなった。(1) 分子配向の相関長よ

りも幅の大きいバンプ上では、配向欠陥がバンプの変曲点にトラップされる。(2) バンプ幅を相関長に近づけるとトラップ位置は頂点に移動する。(3) この二つのトラップ位置の移り変わりには閾値が存在し、連続転移に似た振る舞いが観測される。

本論文は以下のように構成されている。1 章は序論である。液晶研究の歴史を俯瞰し、配向欠陥のトラップ効果に関する研究の背景と問題点について概説している。2 章では液晶に関する基礎的な事項が整理され、液晶相の分類と各相の性質および分子配向を引き起こす分子間力に関する分子論的アプローチと分子配向安定性を記述する連続体理論の要点が説明されている。続いて配向欠陥の定義と昨今における配向欠陥研究について触れ、本論文の目的を明示している。3 章では、本論文の基礎となる幾何曲率ポテンシャルの導出過程が詳述されている。4 章では、現実の配向パターンが示すゆらぎの相関長について説明され、相関長よりも十分に大きな幅を持つバンプ上でのトラップ効果の解析結果が述べられている。5 章では、バンプ幅の変化に伴って起こるトラップ位置の連続転移に係る検証を行っている。6 章では本論文の結論と今後の展望が述べられている。巻末資料 1、2 ではそれぞれトラップ効果を論ずるのに必要なリーマン幾何学に関する基礎項目および冗長化回避のため本文中で省略された saddle-splay 変形項の詳細が示されている。

これを要する著者は、曲面状液晶薄膜における配向欠陥のトラップ効果に対する新しい知見を得たものであり、液晶材料の秩序形成メカニズムの理解に貢献したことはもとより、液晶コロイドを利用した機能性結晶開発に新しい指針を与える重要な役割を果たしている。これらの新たな知見と理解は、応用物理学に対して貢献するところ大なるものがある。

よって著者は、北海道大学博士 (工学) の学位を授与される資格あるものと認める。