

平成21年6月22日現在

研究種目：特定領域研究

研究期間：2007～2008

課題番号：19031029

研究課題名（和文） ブルー相などの3次元秩序を有する液晶系の秩序構造とダイナミクスに関する数値計算

研究課題名（英文） Numerical Calculation on the Structures and Dynamics of Liquid Crystal Systems Possessing 3-Dimensional Order, Including Blue Phases

研究代表者

福田 順一 (FUKUDA JUN-ICHI)

独立行政法人産業技術総合研究所・ナノテクノロジー研究部門・研究員

研究者番号：90392654

研究成果の概要：

連続体理論に基づく数値計算によって、液晶のコレステリックブルー相の電場による液晶配向と位相欠陥の応答、および単位格子の変形に関する知見を得た。また表面の凹凸に由来する液晶アンカリングについて、数値計算によるアンカリングエネルギーの評価、および解析的理論の結果との比較を行なった。さらにキラルスメクチック液晶相の分子シミュレーションにより、スメクチックQ相の3次元秩序構造の構造安定化要因となっている分子間相互作用の一端を明らかにした。

交付額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2007年度	2,100,000	0	2,100,000
2008年度	2,900,000	0	2,900,000
年度			
年度			
年度			
総計	5,000,000	0	5,000,000

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物理学 生物物理・化学物理

キーワード：液晶，キラリティ，コレステリックブルー相，連続体シミュレーション，アンカリング，スメクチックQ相，分子動力学シミュレーション

## 1. 研究開始当初の背景

ソフトマターの典型例の1つである液晶は、並進、回転対称性の破れの結果様々な秩序相、あるいは位相欠陥を示すことから、物理学の興味深い対象としてこれまで広く認知されている。さらに、ディスプレイなどの重要な応用手段の存在は、液晶の研究を工学分野においても極めて盛んなものにしていく。

液晶の中には自明でない3次元秩序構造を示すものが知られており、その典型例の1

つは、配向のねじれ変形と位相欠陥が規則的に配置した、コレステリックブルー相とよばれる相である。この相の研究には理論実験ともに学術的な立場からの蓄積があるが、非常に広い温度範囲でブルー相を示す液晶が発見されたこと、また工学的な応用の期待できるレーザー発振、あるいは高速な外場応答を示すことが明らかになったことなどから、新たな応用の可能性を秘めた系として近年改めて注目を集めている。また、層状の秩序が

自発的に入り組んだ3次元構造を形成する、スメクチックブルー相、あるいはスメクチック Q 相と呼ばれる相が最近相次いで発見され、その性質、形成要因に興味を持たれている。しかしながら、3次元秩序構造を持つ液晶相の理論研究は平衡構造の議論がその中心で、電場下の応答等の非平衡状態での振舞いについてはこれまであまり研究されていない。上述のような、液晶が形成する種々の3次元秩序構造への興味の深化が、本研究の背景にある。

## 2. 研究の目的

本研究の目的は、上述のような3次元的空间秩序を持つ液晶、特にコレステリックブルー相およびスメクチックブルー相の平衡、非平衡の性質を、我々の液晶系に関する数値計算の経験をもとに、連続体シミュレーション、および分子動力学シミュレーションという、異なる時空間スケールに基づく数値計算を用いて明らかにしてゆくことである。

本研究の初期の具体的なターゲットとしては、(1)コレステリックブルー相が、電場に対してなぜ高速に応答するかを解明、(2)ゲスト成分の存在による、コレステリックブルー相などの安定化のメカニズムの解明、および(3)スメクチックブルー相やスメクチック Q 相における3次元構造秩序、特に配向秩序と層状の並進秩序がどのように、またどのような条件で共存しているのかを解明、などがある。

## 3. 研究の方法

連続体シミュレーションの立場からは、コレステリックブルー相の平衡、非平衡状態を記述できる連続体モデルの数値実装を行なった。特に注力したのは、一般的な系のジオメトリに対応できるようなスキームを開発すること、および外的擾乱などによる単位格子の形状、大きさの変化に対応可能な、柔軟で汎用性の高いスキームを開発することである。その結果として、表面形状に起因する液晶のアンカリングに関する知見を得るといった、初期の目標を超える成果をも生み出すことも可能となった。またこれらのスキームを用いて、コレステリックブルー相が電場、あるいは力学的変形といった外的擾乱に対してどのように応答するかを、特に局所的な配向秩序の挙動、および大域的な3次元構造の変化に着目して調べた。

分子動力学シミュレーションの立場からは、スメクチックブルー相の局所構造に関する手がかりを得ること、およびスメクチック Q 相とコレステリックブルー相との関係、類似点を明らかにすることからスタートし、引き続き、スメクチックブルー相やスメクチック Q 相が異方的な圧力に応答してどのよ

うな構造変化をするかを調べることで、コレステリックブルー相との違い、関連性に関する新たな知見を得ることを試みた。

## 4. 研究成果

(1) コレステリックブルー相について、まず静的挙動として温度とキラリティの強さに対する相図を作り、過去の実験的、数値的研究とほぼ類似の相図を再現することに成功した。

また動的挙動の具体例として、電場に対して配向と欠陥の構造がどのように応答して変化し、単位格子がどのように変形するかに着目した研究を行なった。その結果、誘電率の異方性  $\epsilon_a$  が正の系で単位格子の1辺に平行に電場を印加した場合、 $0_2$  と呼ばれる対称性を持つ相の単位格子は電場方向に伸長するのに対し、 $0_8$  と呼ばれる対称性を持つ相は逆に圧縮されることがわかった ( $\epsilon_a$  が負の場合は逆になる)。これらの結果は、過去の実験の結果を定性的に再現するものである。

また非常に強い電場を印加した場合、ブルー相の対称性の違い、単位格子に対する電場の方向、および  $\epsilon_a$  の正負に依存して、複雑な変化を経て欠陥が消滅してゆく動的な過程を明らかにした。ただし、電場方向が単位格子の対角線に平行で  $\epsilon_a$  が負の場合は欠陥が消滅せず、直線状の欠陥が6回対称の2次元格子を形成することも明らかになった。

近年応用の可能性が注目されているコレステリックブルー相の諸性質を数値計算によって調べることが可能になったという点で、これらの成果は重要で意義のある成果であると考えている。

(2) 基板表面の凹凸を起源とする液晶のアンカリング (液晶が表面に対し特定の方向に配向する性質) に関し、理論、数値計算両方の立場から検討を行った。表面の凹凸由来のアンカリングについての解析的理論に、古くから受け入れられてきた Berreman の理論というものが存在するが、詳細な再検討の結果この理論には誤った仮定が用いられていることを明らかにし、正しいアンカリングエネルギーの表式を導出した。

また上述の解析的理論は表面凹凸が十分浅いことを仮定しているため、そうではない場合にアンカリングがどのような振る舞いをするか、および解析的理論の適用可能な範囲を調べるべく、アンカリングエネルギーの数値的な評価を試みた。その結果、解析的理論の帰結は、表面の傾きの最大値が1程度という、必ずしも凹凸が十分浅いとは言えないような状況でも比較的良く成り立つことなどを明らかにした。

Berreman の理論は液晶の標準的な教科書に載っているほどに広く受け入れられてい

ることを鑑みると、そのような理論に根本的な見直しの必要があることを明らかにしたことは極めて意義深いものである。また、微細な凹凸を表面にトップダウン的に施すことによって応用上望ましいアンカリングの性質を実現する試みが近年盛んに行なわれており、それらの研究に対して理論の側から知見を与えられるようになったという点でも、この研究の成果の意義は大きいと考えている。

(3) キラリティ起因の3次元秩序構造を有する液晶相の1つであるスメクチックQ相(SmQ相)の分子動力学(MD)シミュレーションを、ジラル液晶分子M7BBM7を具体例として行った。特にSmQ相の3次元秩序構造モデルの構造安定性の要因となっている相互作用に関して詳細に解析した。その結果、分子キラリティにより異なる不斉部位の相違に直接起因した分子間相互作用ではなく、不斉部位の違いが生み出す一分子コンフォメーションの違いに起因した分子間相互作用が決定している事を明らかとした。本成果は実験からは得られない知見として意義深いものと考えられる。

#### 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 17 件)

- (1) 福田順一, Slobodan Žumer  
“Confinement effect on the interaction between colloidal particles in a nematic liquid crystal: an analytical study”  
Phys. Rev. E **79**, 041703 (2009) 査読有り
- (2) 福田順一  
“Liquid Crystal Colloids: A Novel Composite Material Based on Liquid Crystals”  
J. Phys. Soc. Japan **78**, 041003 (2009) 査読有り
- (3) 米谷慎, 舟橋正浩, 横山浩  
“Molecular Dynamics Simulation of the Liquid Crystalline Semiconductor: 8-TTP-8”  
Proc SPIE **7232**, 72320E (2009) 査読有り
- (4) 福田順一, 米谷慎, 横山浩  
“Consistent numerical evaluation of the anchoring energy of a grooved surface”  
Physical Review E **79**, 011705 (2009) 査読有り
- (5) 福田順一  
「表面の凹凸パターンによるアンカリング: Berremanのアンカリングの理論の批判的再検討による新展開」  
日本液晶学会誌 **12**, 202 (2008) 査読有り
- (6) 米谷慎, 山本貴広, 西山伊佐, 横山浩

- “Molecular Dynamics Simulation Study of the Influence of Chirality on the Stability of the Smectic Q Liquid Crystal Phase”  
J. Phys. Chem. B **112**, 8452 (2008) 査読有り
- (7) 米谷慎, 多辺由佳, 横山浩  
“Molecular Dynamics Simulation Study of Gas Transport Through Chiral Liquid Crystal Monolayer”  
Ferroelectrics **365**, 139 (2008) 査読有り
- (8) 新妻潤一, 米谷慎, 横山浩  
“Contact Photolithographic Micropatterning for Bistable Nematic Liquid Crystal Displays”  
Appl. Phys. Lett. **92**, 241120 (2008) 査読有り
- (9) 福田順一, 米谷慎, 横山浩  
“Anchoring of a nematic liquid crystal induced by surface grooves: A numerical study”  
Physical Review E **77**, 030701 (2008) 査読有り
- (10) 福田順一, 郭進碩, 米谷慎, 横山浩  
“Theory of anchoring on a two-dimensionally grooved surface”  
Physical Review E **77**, 011702 (2008) 査読有り
- (11) 福田順一, 横山浩  
“Effect of an external field on the director profile of a nematic liquid crystal around a spherical particle”  
Molecular Crystals and Liquid Crystals **475**, 165 (2007) 査読有り
- (12) 福田順一  
“Configuration of a chiral smectic-C film with a circular inclusion: Pathological contribution of spontaneous bend?”  
物性研究 **89**, 105 (2007) 査読なし
- (13) 福田順一  
“Configuration of a chiral smectic-C film with a circular inclusion”  
European Physical Journal E **24**, 91 (2007) 査読有り
- (14) 郭進碩, 福田順一, 米谷慎, 横山浩  
“In-plane bistable nematic liquid crystal devices based on nanoimprinted surface relief”  
Applied Physics Letters **91**, 073504 (2007) 査読有り
- (15) 郭進碩, 大江昌人, 米谷慎, 横山浩, 佐藤弘幸, 伊丹節男  
“Advanced nanoimprint lithography using a graded functional imprinting material tailored for liquid crystal alignment”  
Journal of Applied Physics **102**, 063501 (2007) 査読有り
- (16) 福田順一, 米谷慎, 横山浩

“Erratum: Surface-groove-induced azimuthal anchoring of a nematic liquid crystal: Berreman’s model reexamined [Phys. Rev. Lett. 98, 187803 (2007)]”

Physical Review Letters **99**, 139902 (2007)  
査読有り

(17) 福田順一, 米谷慎, 横山浩

“Surface-groove-induced azimuthal anchoring of a nematic liquid crystal: Berreman’s model reexamined”

Physical Review Letters **98**, 187803 (2007)  
査読有り

[学会発表] (計 45 件)

(1) 福田順一, 米谷慎, 横山浩

“Continuum simulations of cholesteric blue phases: effect of an applied electric field”

The 10<sup>th</sup> European Conference on Liquid Crystals  
2009年 4月21日 コルマル (フランス)

(2) 福田順一, Slobodan Žumer

“Effect of confinement on the interaction between colloidal particles in a nematic liquid crystal: a theoretical study”

The 10<sup>th</sup> European Conference on Liquid Crystals  
2009年 4月20日 コルマル (フランス)

(3) 米谷慎, 福田順一

「液晶の自己組織化が創る 3次元ナノ構造 : 分子シミュレーションによるアプローチ」

第56回応用物理学関係連合講演会

2009年03月31日 つくば

(4) 木下隆裕, 市川正敏, 福田順一, 木村康之

「液晶中のコロイド粒子間相互作用～実験とシミュレーション～」

日本物理学会第64回年次大会

2009年 3月30日 東京

(5) 米谷慎, 福田順一

「液晶系におけるキラリティ : 分子シミュレーションによるアプローチ」

つくばソフトマター研究会2009

2009年02月24日 つくば

(6) 米谷慎, 舟橋正浩, 横山浩

“Molecular Dynamics Simulation of the Liquid Crystalline Semiconductor: 8-TTP-8”

SPIE Photonic West 2009

2009年1月25日 San Jose, USA

(7) 米谷慎, 清水洋, 福田順一, 横山浩

「イオン液晶の分子シミュレーション」

科研費特定領域「ソフトマター物理」第3回領域研究会

2009年 1月7日 福岡

(8) 福田順一, 米谷慎, 横山浩

「コレステリックブルー相の連続体シミュレーション」

科研費特定領域「ソフトマター物理」第3回領域研究会

2009年 1月7日 福岡

(9) 福田順一, 米谷慎, 横山浩

「連続体描像に基づいたコレステリックブルー相の数値計算」

日本物理学会 2008年秋季大会

2008年 9月22日 岩手

(10) 福田順一, 米谷慎, 横山浩

「表面の凹凸に起因する液晶のアンカリングの数値計算」

日本物理学会 2008年秋季大会

2008年 9月22日 岩手

(11) 高橋賢治, 木下隆裕, 市川正敏, 福田順二, 木村康之

「ネマチック液晶中のコロイド粒子間相互作用」

日本物理学会 2008年秋季大会

2008年 9月22日 岩手

(12) 福田順一, 米谷慎, 横山浩

「ランダウド・ジャン理論に基づいたコレステリックブルー相の数値計算」

2008年 日本液晶学会討論会

2008年 9月19日 京都

(13) 福田順一, 米谷慎, 横山浩

「表面の凹凸に起因するネマチック液晶のアンカリングに関する数値計算」

2008年 日本液晶学会討論会

2008年 9月19日 京都

(14) 米谷慎, 清水洋, 横山浩

「液晶性イオン液体の分子シミュレーション」

2008年 日本液晶学会討論会

2008年 9月16日 京都

(15) 米谷慎, 多辺由佳, 横山浩

「キラル液晶単分子膜の膜透過シミュレーション (2)」

2008年 日本液晶学会討論会

2008年 9月16日 京都

(16) 木村康之, 高橋賢治, 木下隆裕, 市川正敏, 福田順一

「ネマチック液晶中のコロイド粒子間相互作用」

第61回コロイドおよび界面化学討論会

2008年 9月9日 九州大学

(17) 木下隆裕, 高橋賢治, 市川正敏, 福田順二, 木村康之

「ネマチックコロイド中の特異な粒子間相互作用」

第61回コロイドおよび界面化学討論会

2008年 9月9日 九州大学

(18) 福田順一, 米谷慎, 横山浩

「コレステリックブルー相の連続体シミュレーション」

第2回ソフトマター物理若手勉強会

2008年 8月21日 東京大学

(19) 米谷慎, 横山浩

“On the Rotational Dynamics of Liquid

Crystal Molecules in Smectic Phases: Connection to Ferroelectricity and Carrier-Mobility”

CECAM workshops on "New directions in the theory and modelling of liquid crystals" 2008年7月30日 Lausanne, Swiss

(20)木村康之, 高橋賢治, 市川正敏, 福田順二

“Interparticle Force between Colloidal Particles in Nematic Liquid Crystal; Experiment & Simulation”

The 22nd International Liquid Crystal Conference

2008年7月3日 濟州島 (韓国)

(21)福田順一, 米谷慎, 横山浩

“Theory of anchoring by grooved surfaces: Reexamination and extension of Berreman’s theory”

The 22nd International Liquid Crystal Conference

2008年7月3日 濟州島 (韓国)

(22)福田順一

“Configuration of a chiral smectic-C film with a circular inclusion: Pathological contribution of an outer boundary?”

The 22nd International Liquid Crystal Conference

2008年7月3日 濟州島 (韓国)

(23)米谷慎, 舟橋正浩, 横山浩

“Molecular Dynamics Simulation of the Plastic-Crystal-like Behavior in the Smectic G Phase of a Liquid Crystalline Semiconductor: 8-TTP-8”

The 22nd International Liquid Crystal Conference

2008年7月2日 濟州島 (韓国)

(24)福田順一, 米谷慎, 横山浩

“Numerical study of anchoring induced by surface geometry”

The 22nd International Liquid Crystal Conference

2008年7月1日 濟州島 (韓国)

(25)米谷慎, 多辺由佳, 横山浩

“On the Microscopic Origin of Spontaneous Polarization in SmC\* Liquid Crystal Phase: Molecular Dynamics Simulation Study”

The 22nd International Liquid Crystal Conference

2008年6月30日 濟州島 (韓国)

(26)米谷慎, 横山浩

“Molecular dynamics simulation study of chiral interactions in liquid crystals using hybrid-molecular model”

International Symposium on Multi-scale

Simulations of Biological and Soft Materials (MSBSM2008)

2008年6月19日東京

(27)福田順一

“Study of liquid crystal colloids based on continuum simulations”

International Symposium on Multi-scale Simulations of Biological and Soft Materials (MSBSM2008)

2008年6月19日東京

(28)福田順一, 米谷慎, 横山浩

“Numerical study of cholesteric blue phases based on a Landau-de Gennes theory”

International Symposium on Non-Equilibrium Soft Matter

2008年6月3日 京都

(29)高橋賢治, 市川正敏, 福田順一, 木村康之

“Interparticle Force between Colloids in Nematic Liquid Crystal”

International Symposium on Non-Equilibrium Soft Matter

2008年6月3日 京都

(30)米谷慎, 舟橋正浩, 横山浩

“Molecular Dynamics Simulation of the Plastic-Crystal-like Behavior in the Smectic G Phase of a Liquid Crystalline Semiconductor: 8-TTP-8”

International Symposium on Non-Equilibrium Soft Matter

2008年6月2日 京都

(31)福田順一, 米谷慎

「キラリティ起源の液晶の3次元構造に関する数値計算」

科研費特定領域ソフトマター物理 A02班・班会議

2008年5月17日 お茶の水女子大学

(32)福田順一

「液晶を分散媒としたコロイド系の数値的研究」

日本物理学会第63回年次大会

2008年3月24日 近畿大学

(33)福田順一

「凹凸のある表面による液晶のアンカリング: 理論とシミュレーション」

科研費特定領域「ソフトマター物理」第2回公開シンポジウム

2008年1月8日 名古屋大学

(34)福田順一, 米谷慎, 横山浩

“Anchoring of a nematic liquid crystal by a grooved surface: Critical reexamination of Berreman’s theory”

International Soft Matter Conference 2007 2007年10月1日 アーヘン (ドイツ)

(35)福田順一, 米谷慎, 横山浩

「表面の凹凸が誘起するネマチック液晶のアンカリング: Berremanの理論の批判的再検討」

日本物理学会第62回年次大会  
2007年9月21日 北海道大学

(36) 米谷慎, 多辺由佳, 横山浩

「自己保持膜中のMHP O B C分子の長軸廻り回転ダイナミクス」

日本液晶学会討論会  
2007年9月13日 東京工業大学

(37) 福田順一

「円形粒子を含む2次元キラルスメクチックC液晶薄膜における配向構造と欠陥」

日本液晶学会討論会  
2007年9月13日 東京工業大学

(38) 福田順一, 米谷慎, 横山浩

「凹凸のある表面上のネマチック液晶のアンカリング: Berremanの理論の批判的再検討」

日本液晶学会討論会  
2007年9月12日 東京工業大学

(39) 福田順一, 米谷慎, 横山浩

「2次元的なパターンのある表面のアンカリングの理論」

日本液晶学会討論会  
2007年9月12日 東京工業大学

(40) 米谷慎, 多辺由佳, 横山浩

“Molecular dynamics simulation study of gas transport through chiral liquid crystal monolayer”

11th Ferroelectric Liquid Crystal Conference

2007年9月3日 北海道大学

(41) 福田順一

“Configuration of a chiral smectic-C film with a circular inclusion: Pathological contribution of spontaneous bend?”

YITP Workshop “New frontiers in Colloid Physics: A Bridge between Micro- and Macroscopic Concepts in Soft Matter”

2007年7月26日 京大会館

(42) 福田順一, 米谷慎, 横山浩

“Berreman’s model revisited: geometry-induced surface anchoring of a nematic liquid crystal”

The 9<sup>th</sup> European Conference on Liquid Crystals

2007年7月5日 リスボン (ポルトガル)

(43) 福田順一, 米谷慎, 横山浩

「液晶系の3次元連続体シミュレーション: アンカリングの理論の検証への適用」

科研費特定領域「ソフトマター物理」第2回領域研究会

2007年6月22日 米沢市

(44) 福田順一, 米谷慎, 横山浩

「凹凸のある表面上の液晶のアンカリング: Berremanの理論の批判的再検討」

科研費特定領域「ソフトマター物理」第2回領域研究会

2007年6月22日 米沢市

(45) 米谷慎, 福田順一, 横山浩

「三次元秩序構造を有するSmQ液晶相の分子シミュレーション」

科研費特定領域「ソフトマター物理」第2回領域研究会

2007年6月22日 米沢市

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

福田 順一 (FUKUDA JUN-ICHI)

独立行政法人産業技術総合研究所 ナノテクノロジー研究部門 研究員

研究者番号: 90392654

### (2) 研究分担者

米谷 慎 (YONEYA MAKOTO)

独立行政法人産業技術総合研究所 ナノテクノロジー研究部門 グループリーダー

研究者番号: 30443237

### (3) 連携研究者

なし