

機関番号：14301

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2009 ～ 2010

課題番号：21740310

研究課題名(和文) 多孔質に閉じ込めたネマチック液晶の示すガラス的挙動の解明

研究課題名(英文) Glassy behaviors of nematic liquid crystals confined in porous media

研究代表者

荒木 武昭 (ARAKI TAKEAKI)

京都大学・理学研究科・准教授

研究者番号：20332596

研究成果の概要(和文)：

ディスプレイなどに用いられるネマチック液晶を多孔質に閉じ込めると、ガラス的な遅い緩和が現れる。我々はこの現象の物理的起源を明らかにするために、多孔質の構造をあらわに扱ったモンテカルロシミュレーションを行った。その結果、緩和には液晶の弾性に由来する早い緩和と、欠陥の組み換えによる遅い緩和が現れることを明らかにした。また、多孔質の構造を制御することで、その遅い緩和を抑えることができることを見出した。

研究成果の概要(英文)：

We investigated slow glassy behaviors of nematic liquid crystals confined in porous media by means of Monte Carlo simulation. In particular, we focused on the topology of the porous matrix. We found two relaxation modes in the glassy behaviors. The slow mode is attributed to the reconfiguration of the topological defects. We also found that the slow mode can be suppressed in regular shaped porous media, in which only the fast viscoelastic mode is observed.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2009年度	1,600,000	480,000	2,080,000
2010年度	1,500,000	450,000	1,950,000
年度			
年度			
年度			
総計	3,100,000	930,000	4,030,000

研究分野：統計物理学、ソフトマター物理

科研費の分科・細目：生物物理・化学物理 ソフトマターの物理

キーワード：ネマチック液晶、多孔質、ガラス的緩和、アンカリング効果、配向欠陥

1. 研究開始当初の背景

ディスプレイに用いられるように、二枚の平板間にネマチック液晶を封入すると、その液晶の持つ弾性とアンカリング効果により、あるユニークな配向状態を示すようになる。ここに、電場による外場などを掛け、異なる状態に変化させたとしても、その外場を取り除くと元の状態に戻ってしまう。このことは、元のある一つの状態を「記憶」していると言

ってもよい。多孔質中の液晶は、その複雑な空間拘束により、非常に多くの配向状態を「記憶」することができることが知られている。このことは、相転移に伴うフラストレーションの効果という基礎物理的な面白さだけではなく、電子ペーパー等といった新しい光学デバイスの材料としての可能性も持ち、近年、イタリア・ミラノ大 Bellini 教授らやスロベニア・ルブリアナ大 Zumer 教授らによ

って、実験、数値シミュレーションを用いた精力的な研究がなされてきた。しかしながら、これまでの研究では、閉じ込めの効果は格子モデルにおいてランダムに選ばれた孤立したスピンを固定することなどによって導入されるだけであった。

2. 研究の目的

本研究では、多孔質の構造をあらわに取り入れたモデルを構築し、多孔質中のネマチック液晶の示す挙動をより詳細に調べたいと考えている。このことは、単により現実的な系を扱うということだけではなく、このモデルによって初めて導入することのできる多孔質による閉じ込め効果の二つの点に着目している。一つは、多孔質の孔のトポロジーによる拘束効果である。閉じ込められたネマチック液晶は配向欠陥を伴うことが予想されるが、この欠陥のトポロジーと多孔質のトポロジーの関係について明らかにしたい。二つめの効果は、多孔質の壁を導入することによるアンカリング効果である。局所的には壁付近で液晶はある特定の角度に配向しようとするが、このアンカリング効果がどのように系全体の挙動に影響するか明らかにしたい。

3. 研究の方法

まず空間を格子状に分割し、各点で濃度場に相当する秩序変数を導入する。この濃度場に関する保存型 TDGL 方程式、つまり Cahn-Hilliard 方程式を数値的に解くことにより、等方的な双連結構造を得ることができる。次に、この濃度場の値に依って空間を三つの領域に分割する。ある値未満は多孔質サイトとし、それ以上を液晶サイト、その二つの領域の境界を界面サイトと定義する。液晶サイトに、あらゆる方向を取りうる等方的なスピンを導入し、隣り合うスピン間は Lebwohl-Lasher ポテンシャルによって相互作用するものとする。また多孔質の濃度場の空間微分を用いて、界面サイトにおいて界面の法線ベクトルを導入する。この法線ベクトルとスピンに対し係数の異なる Lebwohl-Lasher ポテンシャルを与える。これは界面におけるアンカリング効果を表現する。最後に、外場の影響を考慮した項を導入する。このモデルを用いて Monte Carlo シミュレーションを行い、多孔質中のネマチック液晶の振る舞いを検証する。

4. 研究成果

図 1 は、多孔質の構造 (左)、その中で外場を印加せず、等方状態からクエンチしたときの液晶配向欠陥の構造 (中央)、その構造に外場パルスを与えた後、外場なしの状態ではばらく放置した後の構造 (右) を示したも

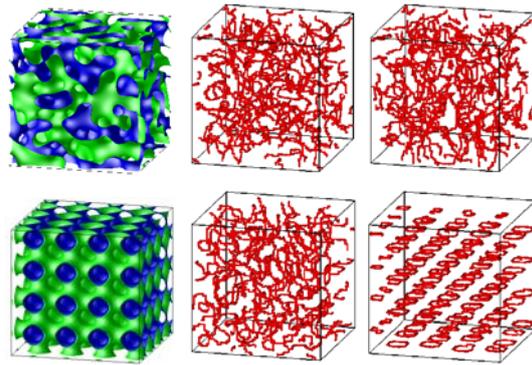


図 1 多孔質の構造 (左) とその中に閉じ込められたネマチック液晶の配向欠陥 (中央: 外場下, 右: 残留欠陥)。上: ランダムな多孔質 (RPM), 下: 立方対称の秩序を持つ多孔質 (BC)。

のである。ディスプレイなどで用いられるような液晶を二枚の平板に挟んだ場合には、外場を切った後、すぐに一樣な状態へと緩和し配向欠陥は残らない。この一樣状態は、セルの構造に応じてユニークに決まっており、この意味において系は一つの状態を記憶していることができる。しかしながら多孔質中においては、図 1 に示すよう、配向場は一樣にはならず十分アニーリングした後も配向欠陥が残ったままであった。この残留欠陥は、液晶中のコロイドの周りで見られる Hedgehog や Saturn-ring と呼ぶ配向欠陥と同様に、アンカリング効果と液晶の弾性変形の競合に由来するものである。それぞれの配向欠陥は、多孔質の孔の中を徘徊しながら、つながったループを形成している。その欠陥構造は、多孔質が大きくなるにつれ無数の配置をとることができ、それぞれは配向欠陥の組み換えなくしては、他の配置に変化することはできない。しかしながら、十分に強い外場を印加すると、配向欠陥の配置を変えることができるようになる。図 2 は、欠陥の組み換えが起こるほど十分に大きな外場パルスを印加した後の、外場に沿った配向秩序の緩和の様子である。ランダムな多孔質中 (RPM)

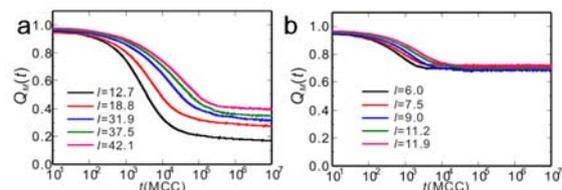


図 2 異なる孔径を持つ多孔質中における外場を除いた後の、外場に沿った配向秩序の緩和の様子。左: ランダムな多孔質 (RPM), 右: 立方秩序を持つ多孔質 (BC)。

と、立方秩序を持つ多孔質(BC)中の様子を图示した。また、それぞれにおいて平均的な孔の大きさを変えた場合の緩和曲線を示している。BC中では、孔の大きさに依存した早い緩和の後に、孔の大きさに依らない一定の値に漸近することが示されている。一方、RPMにおいては、同様の早い緩和の後、遅い緩和が現れることが分かった。両方の系に見られる早い緩和の緩和時間は、孔の大きさの二乗にほぼ比例している。この過程において、配向欠陥のトポロジーは、外場を印加している最中の状態と大きな違いはない。つまり、この早い緩和は、欠陥のトポロジーを保った状態で、外場によって歪められた弾性場を緩和させる過程に対応していると考えられる。図1右下で示すよう、BC中の欠陥は多孔質のトポロジーを反映して、秩序化していることが分かる。これらは、 $\pm 1/2$ の線欠陥からなるring状の構造が、立方格子状に配列したものであり、孔の大きさを変えても同じ構造が形成される。また、この構造のトポロジーは外場下における欠陥のトポロジーと同じものであった。この構造は、最もエネルギーの低い状態の一つと考えられ、低温においてはこの構造から別の状態に構造変化することは見られない。このため系は、少なくともxyz方向に沿った3つの状態を記憶することができる。一方、RPM中で見られる遅い緩和を調べた結果、これは配向欠陥の組み換えを伴う熱的な緩和であること、さらに、この組み換えには、平均的な孔の径が大きくなるほど増加するおよそ数 $100k_B T$ の活性化エネルギーを必要とすることが分かった。RPMにおいて最もエネルギーの低い状態は、残留秩序のない状態だと推測されるが、系はその状態に向かってゆっくりと緩和していくようである。詳細にデータを解析した結果、その緩和は経過時間の対数に比例していることが分かった。この対数的な緩和は、超伝導などにおいて観測されたものと同じもので、活性化エネルギーが時間とともに減少していることに由来するものであると考えている。

図3は、RPMとBCにおいて見られた外場による誘起秩序と、残留秩序の外場強度依存性を示したものである。外場が小さい場合には、組み換えを起こすことができないため、ほぼ元の状態に緩和する。外場を強くしていくと、配向欠陥構造は変化できるようになるが、前述の通り、配向の組み換えは非常に高い活性化エネルギーを要するため、外場を取り除いた後、系は容易に平衡に達することはできず、ガラス的な遅い緩和を示すようになる。ランダムネスが支配するスピングラスの場合と異なり、多孔質のトポロジーを制御することで、遅い緩和を消去することが可能であることが分かった。これにより、ここで示したBC

のような高いメモリー効果を示す液晶複合材料の設計が可能になると期待している。

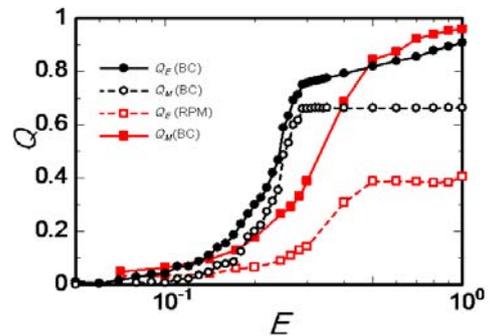


図3 ランダムな多孔質異なる (RPM) と立方秩序を持つ多孔質中の、外場下における誘起秩序と、外場を切った後の残留秩序の外場強度依存性。

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6件)

- ① Shunsuke Yabunaka and Takeaki Araki, Domain growth and defect motion in isotropic-nematic transition in liquid crystalline polymers, 査読有, Phys. Rev. E 83, 061711/1-10 (2011). DOI: 10.1103/PhysRevE.83.061711
- ② Akira Onuki, Ryuichi Okamoto and Takeaki Araki, Phase transition in soft matter induced by selective solvation, 査読有, Bull. Chem. Soc. Jpn. 84, 569-587 (2011). DOI: 10.1246/bcsj.20110012
- ③ Takeaki Araki, Macro Buscaglia, Tommaso Bellini and Hajime Tanaka, Memory effects from topological connectivity of nematic liquid crystals confined in porous materials, 査読有, Nature Materials 10, 303-309 (2011). DOI: 10.1038/NMAT2982
- ④ Takeaki Araki and Akira Onuki, Dynamics of binary mixtures with ions: Dynamic structure factor and mesophase formation, 査読有, J. Phys.: Condens. Matter 21, 424116/1-6 (2009). DOI: 10.1088/0953-8984/21/42/424116

⑤ Keisuke Tojo, Akira Furukawa, Takeaki Araki and Akira Onuki, Defect structures in nematic liquid crystals around charged particles, 査読有, Euro. Phys. J. E 30, 55-64 (2009). DOI: 10.1140/epje/2009-10506-7

⑥ Hayato Shiba, Akira Onuki and Takeaki Araki, Structural and dynamics heterogeneities in two-dimensional melting, 査読有, Eurphysics Letters 86, 66004 (2009). DOI: 10.1209/0295-5075/86/66004

[学会発表] (計 24 件)

① Takeaki Araki, Ryuichi Okamoto and Akira Onuki, Wetting of charged particles in binary fluids containing ions, International Symposium on Non-Equilibrium Soft Matter 2010 (Nara), 2010. 8. 17-20

② Takeaki Araki, Ryuichi Okamoto and Akira Onuki, Dynamics of Binary Mixtures Containing Antagonistic Salt, The ISSP International Workshop on Soft Matter Physics (ISSP/SOFT2010) (Chiba), 2010. 8. 9-13

③ Takeaki Araki, Marco Buscaglia, Tommaso Bellini and Hajime Tanaka, Memory Effects from Topological Connectivity of Nematic Liquid Crystals Confined in Porous Materials, The ISSP International Workshop on Soft Matter Physics (ISSP/SOFT2010) (Chiba), 2010. 8. 9-13

④ Takeaki Araki and Hajime Tanaka, Fluid particle dynamics simulation for colloidal systems, CECAM Workshop: Mesoscale methods for colloidal hydrodynamics (Lausanne, Switherland), 2010. 7. 19-21

⑤ Takeaki Araki and Akira Onuki, Mesophase formation in binary fluid mixtures containing antagonistic salt, International Soft Matter Conference 2010 (Granada, Spain), 2010. 7. 5-8

⑥ Takeaki Araki and Akira Onuki, Dynamics of phase separation of binary fluid mixtures with ions, Gordon Research Conference: Liquids, Chemistry & Physics Of (Holderness, USA), 2009. 8. 2-7

[その他]

ホームページ等

<http://statphys.scphys.kyoto-u.ac.jp/~araki/>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

荒木 武昭 (ARAKI TAKEAKI)
京都大学・理学研究科・准教授
研究者番号：20332596

(2) 研究分担者

()

研究者番号：

(3) 連携研究者

()

研究者番号：

