

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 26 年 6 月 18 日現在

機関番号：17104

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2011～2013

課題番号：23540477

研究課題名(和文) 棒状分子混合系の2軸液晶相の理論的研究

研究課題名(英文) Theoretical studies of biaxial liquid crystalline phases in mixtures of rodlike molecules

研究代表者

松山 明彦 (Akihiko, Matsuyama)

九州工業大学・大学院情報工学研究院・教授

研究者番号：60252342

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,800,000円、(間接経費) 1,140,000円

研究成果の概要(和文)：これまでの二軸ネマチック液晶相の研究は、板状分子やバナナ型分子のように分子形状自身に二軸性を有している分子が注目されてきた。本研究では、分子自身は一軸対称性しか持たないが、これらの分子が構造的に組合わさることで、新規な二軸ネマチック相が現れることを理論的に予測した。このような系として、ナノチューブのような長い棒状分子と低分子液晶の混合系における二軸ネマチック相の分散安定性について調べた。棒状分子の配向方向と液晶分子の配向方向が垂直になることで、二軸ネマチック相が現れることを示した。関連する系として、液晶ゲルや液晶高分子鎖における、新規な二軸ネマチック相についても調べた。

研究成果の概要(英文)：The study of biaxial nematic phases has been focused on the anisotropic particles such as board-shaped molecules and banana type molecules. In this project, we theoretically study biaxial nematic phases in mixtures of a liquid crystal and a rodlike polymer, such as nanotubes and rigid-rodlike particles. We predict novel biaxial nematic phases in liquid crystal/rod mixtures where the two components favour a mutually perpendicular orientation. We also theoretically study biaxiality in liquid crystalline elastomers and liquid crystalline polymers.

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物理学・生物化学・化学物理

キーワード：二軸液晶 ネマチック相 スメクチック相 液晶高分子 液晶ゲル ソフトマターの物理

1. 研究開始当初の背景

二軸性液晶に関する研究は、分子自体に二軸性をもった、板状やバナナ型の分子に関して(図1左)、理論的にも実験的にも広く行われていた。これらの研究は、純粋な液晶分子に関するものであり、液晶分子と他の分子の混合系・複合系の二軸液晶に関する研究は少ない状況にあった。このような中、液晶場を利用した材料設計は様々な分野で注目を集め始めるようになってきている。

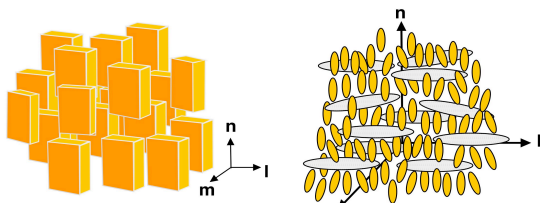


図1 二軸ネマチック相

2. 研究の目的

本研究では、長い棒状分子と液晶分子の混合系における二軸ネマチック相について理論的に研究する。分子自体は一軸対称性しか持たないが、それらが垂直に構造的に組み合わせることで新規な二軸ネマチック相(図1右)が現れる可能性について調べることが目的である。このような新規な二軸ネマチック相が可能な系として、長い棒状分子と液晶分子の混合系や、側鎖型液晶エラストマーや、側鎖型高分子液晶などの液晶複合系における二軸ネマチック相について、平均場理論の観点から調べることが目的である。このような新規な二軸性の概念は、工学的にも基礎的にも今後重要になる。

3. 研究の方法

応募者はこれまで、液晶分子と高分子の混合系などの、液晶複合系における相分離について理論的に研究を行ってきた。これまでは、主に、一軸ネマチック相やスメクチック相を中心とした研究であった。

本研究では、長い棒状分子と液晶分子の、それぞれの二軸の配向秩序パラメーターを考慮した自由エネルギーを構築する。秩序パラメーターの正と負を同時に議論することで二軸ネマチック相の安定性について調べることができる。安定な二軸ネマチック相や、相分離を伴う二軸ネマチック相転移について、温度や濃度に依存した相図を計算することで理論的に調べる。

4. 研究成果

主な成果は以下の通りである。

- (1) 液晶分子とナノチューブのような長い棒状分子の混合系における、新規な二軸ネマチック相について調べた。この二軸

性は2つの異なる分子が垂直に配向することで現れることができる。ネマチック液晶相に分散した、長い棒状分子が第二の配向方向を誘起し、温度や濃度に依存して、安定な二軸ネマチック相が現れることを明らかにした。さらに、二軸ネマチック相や二軸スメクチック相をともなった、相分離についても理論的に予測した。図2は相図の計算結果の一例を示す。縦軸は温度、横軸は棒状分子の濃度である。等方相(I)、ネマチック相(N1)と二軸ネマチック相(N1b)が温度と濃度の平面上に示されている。点線が1次相転移、破線が2次相転移、実線は共存曲線を示しその内側では相分離がおこる。黒丸は臨界点を示す。棒状分子の濃度が増加するにつれて、安定な二軸ネマチック相の領域が現れることがわかる。さらに、液晶分子混合系におけるツイスト弾性に関する連続対理論を構築した。外場によって長い棒状分子と液晶分子の回転緩和の遅延現象を見つけた。

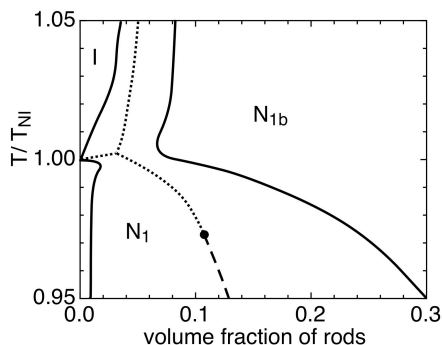


図2 棒状分子と液晶の混合系の相図

- (2) 等方性溶媒に溶けた側鎖型液晶高分子ゲルの二軸性を議論するための理論を構築した。側鎖と主鎖にある固い棒状のメソゲン基が互いに垂直に配向することで、新規な二軸ネマチック相が現れることを予測した。一軸と二軸の配向秩序パラメーターとゲルの変形や膨潤を計算することで、安定な二軸ネマチック相が存在することを明らかにした。さらに、一軸ネマチック-二軸ネマチック相転移が1次相転移であること、その相転移温度で液晶ゲルの体積が不連続に変化することを見つけた。
- (3) 側鎖と主鎖に固い分子を持つ側鎖型液晶高分子の二軸ネマチック相を議論するための理論を構築した。棒状分子間の排除体積相互作用と引力相互作用を考慮に入れ、新規な二軸ネマチック相が現れることを予測した。一軸と二軸ネマチックの配向秩序パラメーターを、温度や主鎖の長さの関数として計算した。主鎖や側鎖の長さに依存して、一軸ネマチック-二軸ネマチック相転移が1次相転移にも2次相転移にもなることを見つけた。さらに、

二軸ネマチック相間の相転移の可能性も明らかにした。このような、側鎖型液晶高分子には、まだ観測されていない、多くの二軸ネマチック相が存在することを明らかにした。

以上のように、本研究では、ナノチューブのような長い棒状分子と液晶分子の混合系や、側鎖型液晶エラストマー、側鎖型高分子液晶などの様々な系における新規な二軸ネマチック相を、平均場理論を基礎として予測した。これらの結果は、全く新しい二軸性の概念を提出するものであり、今後の実験的・理論的研究の基礎となる。さらに液晶場を利用した、新しい電気工学材料への展開なども期待できる。

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 14 件)

以下はすべて査読あり:

- (1) A. Matsuyama, "Theory of polymer-dispersed cholesteric liquid crystals", *J. Chem. Phys.* 139, 174906-1-10 (2013).
<http://dx.doi.org/10.1063/1.4828940>
- (2) A. Matsuyama, "Theory of liquid crystalline micelles", *J. Chem. Phys.* 138, 034902-1-8, (2013).
<http://dx.doi.org/10.1063/1.4774386>
- (3) A. Matsuyama, K. Oono, and M. Nishiono, "Translocation of copolymers through a nanopore" *J. Phys. Soc. Jpn.* 82, 024801-1-5, (2013).
<http://dx.doi.org/10.7566/JPSJ.82.024801>
- (4) A. Matsuyama, "Nobel biaxial nematic phases of side-chain liquid crystalline polymers", *J. Chem. Phys.* 137, 224906-1-6, (2012).
<http://dx.doi.org/10.1063/1.4771592>
- (5) A. Matsuyama, "Volume phase transitions of biaxial nematic elastomers", *Phys. Rev. E* 85, 011707-1-9, (2012).
<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.85.011707>
- (6) A. Matsuyama and T. Ueda, "Phase diagrams of liquid crystals and rodlike polymers in the presence of an external field", *J. Chem. Phys.* 136, 224904-1-8, (2012).
<http://dx.doi.org/10.1063/1.4728337>
- (7) A. Matsuyama and M. Yano, "Ejection dynamics of a semiflexible DNA polymer from a capsid", *J. Phys. Soc. Jpn.* 81, 034802-1-5, (2012).
[http://dx.doi.org/10.1143/JPSJ.81.03](http://dx.doi.org/10.1143/JPSJ.81.034802)

4802

- (8) A. Matsuyama, "Twist distortion in rod/liquid crystal mixtures", *Liq. Cryst.* 38, 885-891 (2011).
DOI:10.1080/02678292.2011.585249
- (9) A. Matsuyama, "Biaxial nematic phase in rod/liquid crystal mixtures", *Liq. Cryst.* 38, 729-736 (2011).
DOI:10.1080/02678292.2011.570795
- (10) A. Matsuyama, "Biaxial nematic phase in mixtures of a liquid crystal and a rodlike polymer", *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* 540, 42-49 (2011).
DOI:10.1080/15421406.2011.568325

[学会発表] (計 18 件)

- (1) 松山明彦, "液晶複合系における二軸ネマチック相の理論的予測", 液晶学会フォーラム講演会, 2013年11月26日, 大阪産業大学
- (2) A. Matsuyama, "Theory of liquid crystalline micelles", International soft matter conference, 2013年9月16日, Sapienza Univ., Roma
- (3) 松山明彦, "棒状分子溶液の液晶層の平均場理論", 液体化学夏の学校, 2013年9月2日, 福岡県立社会教育総合センター
- (4) 松山明彦, "液晶ミセルの理論", 日本物理学会第68回年次大会, 2013年3月26日, 広島大学
- (5) 松山明彦, "側鎖型高分子液晶の二軸ネマチック相", 第2回ソフトマター研究会, 2012年9月24日, 九州大学
- (6) 松山明彦, "高分子と液晶系の相分離", 高分子討論会, 2012年9月20日, 名古屋工業大学
- (7) A. Matsuyama, "Novel biaxial nematic phase in side-chain liquid crystalline polymers", International liquid crystal conference, 2012年8月21日, マインツ、ドイツ
- (8) 松山明彦, "液晶複合系の新規な二軸ネマチック相", 情報科学用有機材料第142委員会, 2012年2月28日, 東京理科大学
- (9) 松山明彦, "二軸性液晶エラストマーの理論", 物理学会秋季大会, 2011年9月22日, 富山大学
- (10) 松山明彦, "二軸液晶エラストマーの体積相転移", 液晶討論会, 2011年9月11日, 都市大学
- (11) A. Matsuyama, "Volume phase transitions of biaxial nematic elastomers", International liquid crystal elastomer conference 2011, 2011年9月5日, リスボン(ポルトガル)
- (12) 松山明彦, "棒状分子と液晶分子混合系の相転移", 第1回ソフトマター研

研究会, 2011年7月3日, 京都キャンパス
プラザ

〔図書〕 (計2件)

- (1) A. Matsuyama, Phase separations in mixtures of a nanoparticle and a liquid crystal, Chapter 11, p. 241-p. 268, in Smart Nanoparticles Technology, (総ページ 313) ed. A. Hashim (In Tech, 2012).
- (2) 松山明彦, ”液晶複合系の相分離” 第2部第2章 P. 383-P. 394, 液晶ディスプレイ物語 (総ページ 513) 日本学術振興会 第142委員会編 (エース出版, 2013) .

〔産業財産権〕

○出願状況 (計0件)

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
出願年月日：
国内外の別：

○取得状況 (計0件)

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
取得年月日：
国内外の別：

〔その他〕

ホームページ等

<http://iona.bio.kyutech.ac.jp/~aki/>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

松山 明彦 (Matsuyama Akihiko)

九州工業大学・大学院情報工学研究院・教授

研究者番号：60252342

(2) 研究分担者

なし ()

研究者番号：

(3) 連携研究者

なし ()

研究者番号：