

層状液晶の欠陥構造の理論

東北大学大学院理学研究科物理学専攻 物性理論研究室

小川洋人

棒状分子からなる液晶は、1分子レベルでは重心と配向の2つの自由度を持つ。分子が互いに擦れたがるキラリティを持つと、分子の重心と配向は、マクロレベルでそれぞれ層状秩序と螺旋秩序を作り出す。この2秩序の競合の結果、様々な対称性の3次元欠陥構造が選択される。

このうち、層状部分(結晶粒)が粒界を隔てて一定角だけ擦れて不連続な螺旋秩序を持つTGBA(Twist Grain Boundary A)相は、一軸性の最も単純な欠陥相である[1](図1)。“A”とは層法線と分子配向が一致する層構造を持つことを意味する。TGBA相の発見以来、その粒界は螺旋転位の列から出来ていると考えられてきた。以降ではこれを特に“TGBA構造”と言うことにする。一方、近年、粒界面で層状秩序が消えた構造の可能性も提唱されており、MGBA(Melted Grain Boundary A)構造と呼ばれる[2]。後者の粒界構造が本当に実現されているのかは実験でもはっきりとは分かっておらず、

理論による解析が必要となっている。この問題は、与えられた強さの層状秩序と螺旋秩序の競合の結果、複数の欠陥構造が選択される最も単純な例と考えることが出来る。

そこで本研究では、TGBAとMGBAの欠陥構造の安定性を比較するために、層状秩序と螺旋秩序の両方の空間変化を取り入れた理論解析をした。液晶分子の層状秩序への揃い具合を示す秩序変数 $\Psi(\mathbf{r})$ と液晶分子の平均の方向を示すベクトル $\mathbf{n}(\mathbf{r})$ によるLandau展開した自由エネルギーを出発点にする[1]。層状秩序と螺旋秩序の自由エネルギー成分を幾つかに細分化し、その物理的意味を明らかにした[3]。空間的には、粒界からの距離別に幾つかのドメインを分け、各々の空間ドメインで主要なエネルギー成分のみを考えて、 $\Psi(\mathbf{r})$ と $\mathbf{n}(\mathbf{r})$ の平衡分布を解析的に計算した[4]。これらの値はドメイン境界において連続的に繋がるものとする。

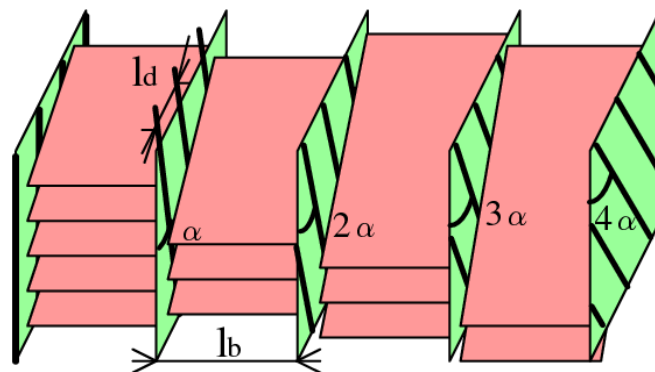


図1. TGB相の構造。ピンクで示したのが層状部分、緑で示したのが粒界。粒界内の実線は螺旋転位を表す。

このような手法により求めた相図が図 2 である。温度 $T - T_{NA}$ と分子のキラリティ k_0 を軸にとった。 k_0 は層状秩序が無いときに出来る螺旋秩序のピッチの波数でねじれの強さを表す。これを層の周期 d で規格化した。 T_{NA} はキラリティが 0 のときに、層状秩序が現れるか現れないかを分ける温度である。

相図より、TGBA から MGBA へ、**安定性が確かに移り変わる**ことを示した。これは、TGBA の粒界に存在する螺旋転位列が融合する描像で理解できる。また、MGBA 構造は、**粒界を隔てて層状構造が換れる角度の大小によって2つのタイプ**に分けられることが明らかとなった。TGBA 構造に関しては、**求められた粒界間距離(図 1 の l_b)と転位間距離(図 1 の l_d)が、実験とオーダーの範囲でよく一致している**ことも分

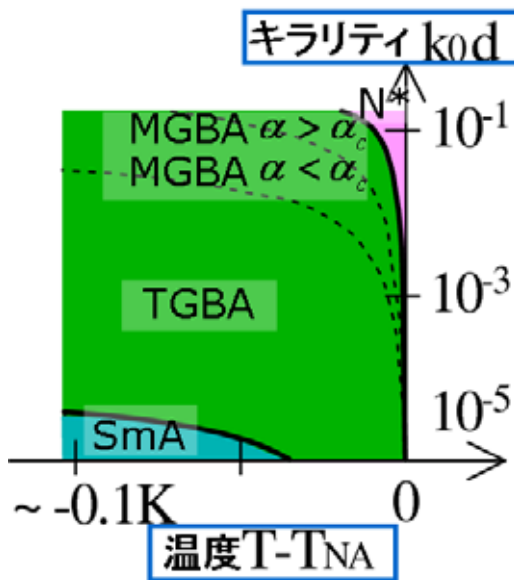


図 2. 温度と、螺旋秩序の強さを表す分子のキラリティで書いた相図。実線は 2 次相転移線、破線は単に構造安定の移り変わる境界を意味する。SmA 相は螺旋秩序が無い層状構造、N*相は層状秩序が消えて分子配向の螺旋秩序のみが存在する構造である。

かった。従来の理論では、転位間相互作用及び欠陥周りの層状秩序の緩和が取り入れられていなかったためオーダーが 1, 2 桁ほど実験と理論で違うという問題点があった。しかし、本研究では転位生成の自由エネルギーを正しく評価することが出来た。

このような粒界部分における形状の違い、或いはエネルギーの違いは、TGBA/MGBA よりも更に高次の欠陥構造の理解を大きく変える。例えば、TGBA/MGBA 構造が欠陥構造の一部に組み込まれた 2 重螺旋構造などが知られている他、対称性のみ明らかであるが具体的な空間構造が明らかになっていない欠陥構造が数多く知られている。本研究の計算結果により、これらの構造(特に 2 重螺旋構造)がより理論的に安定になる可能性がある。

参考文献

- [1] S. R. Renn, and T. C. Lubensky, *Phys. Rev. A*, **38**, 2132 (1988).
- [2] J. Fernsler, *et al.*, *Proc. Nat. Acad. Sci. U.S.A.*, **102**, 14191 (2005).
- [3] H. Ogawa, submitted, [arXiv: 0711.1659v2].
- [4] H. Ogawa, in preparation.
- [5] H. S. Kitzerow and C. Bahr, *Chirality in Liquid Crystals*, Springer-Verlag, New York (2002).

業績リスト

- (1) "Boundary conditions for equilibrating incommensurate periodic patterns", H. Ogawa and N. Uchida, *Phys. Rev. E* **72**, 056707 (2005).
- (2) "Numerical simulation of the twist-grain-boundary phase of chiral liquid crystals", H. Ogawa and N. Uchida, *Phys. Rev. E*, **73**, 060701(R).
- (3) "Effective elasticity theory of smectic-A and smectic-C liquid crystals", H. Ogawa, submitted.
- (4) "Selection of defect structure in twist-grain-boundary-A phase of chiral liquid crystals", H. Ogawa, in preparation.

他含めて計 5 編