

(続紙 1)

京都大学	博 士（理 学）	氏名	内田 隆之
論文題目	非一様な静電場によって誘起される局所的なネマチック秩序に関する理論的・数値的研究		
(論文内容の要旨)			
液晶とは液体と結晶の中間相であり、棒状分子といった異方的な形状を持つ分子からなっている。液晶相の一つであるネマチック相は、最も高い対称性を持ち、分子位置は液体と同じく秩序を持たないが、分子の向きは一様に揃った状態となっている。その分子配向の秩序に由来して、単純な液体と異なり、マクロには液体であるにも関わらず、弾性を持つ、電場・磁場に対して分子が揃う、複屈折を示すなどの性質を持ち、その性質を利用して薄型ディスプレイなど身の周りの多くの製品に用いられている。 液晶の電場応答性や相転移温度などのマクロな性質を向上させるべく、古くから多くの研究がなされてきた。例えば、自発分極を持つ強誘電体からなる微粒子を添加することにより、電場に対する感受性が増大することや、金属ナノコロイドを添加することで応答時間が短くなることが知られている。しかしながら、その詳しい機構については未だ分かっていないことも多い。本論文では、液晶のマクロな物性に対する微粒子添加の影響を明らかにすることを動機とし、最も基本的な添加物として誘電体からなる球状粒子を選び、数値シミュレーションによる研究を行った。 液晶性液体を二枚の電極板で挟み、その中心に液晶性液体よりも大きな誘電率を持つ誘電体球を一つ置いた状態を考える。系の温度は液晶の相転移温度より高く設定し、電極間に電位差を与え、その相転移に関わる振る舞いを数値的に調べた。液晶に対する電場の影響を調べる際、しばしば空間的に一様な電場を仮定して研究がなされることが多い。しかしながら、実際の液晶では誘電率も液晶秩序に依存するため、この仮定は正確ではなく、正しくは液晶秩序を考慮した静電エネルギーを評価し電場を求めなければならない。そこで、液晶の相転移を記述するLandau-de Gennes自由エネルギーと液晶秩序を考慮した静電エネルギーからなる全自由エネルギーを最小にすることで、電場下における平衡状態を数値的に求めた。 電位差が十分小さいとき、電極に挟まれた液体全体は等方相のままである。電位差を徐々に大きくしていくと、ある電位差以上で、粒子の両極付近にネマチック相が局在して現れることが分かった。局在した液晶領域は、電位差変化に対し不連続な体積のとびを伴い出現するが、解析の結果、この不連続性は等方相とネマチック相の間の界面エネルギーに由来するものであることが分かった。粒子を大きくしていくと相対的に界面エネルギーが全自由エネルギーに占める割合が小さくなり、ネマチック相が現れるしきい値電位差や、不連続なとびは小さくなっていく。またそのとびは粒子表面と液晶場の境界に働くアンカリング効果にも依存する。特に表面に対し垂直にアンカリング配向するホメオトロピック配向の場合には、不連続なとびはなくなり、連続的にネマチック領域が出現する。 この局在したネマチック相の領域の体積は電位差を大きくしていくと次第に増大していく。こうした局所的なネマチック領域の出現と成長を、マクロな実験によって、どのように観測するか、また液晶のマクロな物性にどのように影響するか、理論・数値的な立場から検討を行った。考えている系は			

(続紙 2)

マクロに見ると等方相であり単純液体と大差はない。系全体をコンデンサと見なして実効的な誘電率を求めると、局所的なネマチック相の出現により、実効的な誘電率は電位差とともに急激に増大することが分かった。これは大きな非線形誘電率を示す新しい液晶コンポジット材料としての可能性を示している。また、偏光解消光散乱による検出も可能であると考ええる。通常の液晶性液体では電場下において偏光解消光散乱の強度は電場を強くするにつれて配向場の熱揺らぎが抑制されて減少するはずであるが、粒子を含む系では偏光解消光散乱の強度は増大することが分かった。これは電場制御による光学デバイスの新しい可能性を与えている。

(論文審査の結果の要旨)

本論文では、電場下における液晶・コロイド混合系の振る舞いを解析的・数値的に調べている。第一章で述べてあるよう、液晶・コロイド混合系は広く研究されており、これまでにはない光学材料、力学材料の候補として注目を集めてきた。しかしながら電氣的性質に関してはほとんど研究例がなく、その振る舞いについては分かっていないことが多い。その理由の一つは電場が液晶の秩序変数に依存し空間的に非一様になるため、解析的な取り扱いが困難になることである。第二章で、電場下における液晶系の振る舞いを記述する理論的枠組みを与え、第三章で、その手法を用いて誘電体からなる球状コロイドを添加したときの挙動を数値的に調べている。二枚の平板電極に挟んだ液晶性液体を相転移温度より高い温度に保ち、徐々に電位差を強くしていくと、液晶相がコロイドの周りに不連続に出現し成長していく。この局所的な液晶領域の出現・成長はコロイド表面に働くアンカリング効果や粒子の大きさに依存することも示された。第4章では、局所的な液晶相がどのようにして実際に観測しうるか、またそれが系のマクロな物性にどのように影響するかについて述べられている。

内田氏は、液晶・コロイド混合系の電気物性という、これまで研究があまりなされていなかった問題に正面から取り組んできた。本論文では、その成果が、背景、手法、結果とそれぞれ丁寧に述べられている。しかしながら、混合系と述べつつも、主に扱っているのは希薄極限の一粒子系であり、多粒子系についてはわずかに述べられているだけである。多粒子系では粒子間相互作用も無視できず、多粒子系特有の物性を示すかもしれず、今後の課題として取り組んでもらいたい。また、実験による観測、マクロな物性に対する影響について述べられているが、実際に観測を行ってもらった協力者の興味を惹くには、アピールが弱く感じられた。液晶・コロイド混合系の電気・光学物性について興味深い実験結果の報告がいくつかあるが、そうした問題について、明確な答えを与えることは出来ていない。本論文で述べられた研究成果の重要性を認識してもらうためにも、引き続き研究を行う必要があるであろう。しかしながら、こうした問題に対し、理論的な枠組みを与え、真摯に取り組んだことは大いに評価できる。

このような観点から本申請論文は、総合的に学位論文として優れた内容を持つものとして、博士(理学)の学位論文として価値あるものとして認める。なお、本論文に報告された研究業績を中心に平成27年3月26日に論文内容に関する口頭試問を行った結果、合格と判断した。

要旨公表可能日： 年 月 日以降