

# カイラル液晶単分子膜の非平衡ダイナミクス

科学技術振興機構 ERATO 横山液晶微界面プロジェクト

奥菌 透<sup>1</sup>

科学技術振興機構 ERATO 横山液晶微界面プロジェクト

産総研 ナノテクノロジー研究部門

多辺 由佳, 横山 浩

## 1 はじめに

カイラル液晶分子から構成される水面上の単分子膜において、水の蒸発/凝縮に伴う液晶分子の集団的な回転による、分子軸の方位に関する進行波（配向波）の形成が実験的に観察されている [1]。これは、分子のもつカイラリティーにより、分子の回転運動と水蒸気の流束との間の動的結合が生じることを示唆している。カイラリティーをもたない分子では回転は起こらず、カイラリティー（右手系と左手系）を逆にすると回転の向きが反転すること、回転の速度は水蒸气流束の速度に比例し、逆向きの流束に対しては逆向きの回転が起こること、などの実験事実は上の描像を支持している。また、実験では、発生した配向波は容器の壁などの強く配向した場所の付近に‘集積’する現象が見られる。すなわち、分子の回転運動は液晶の弾性エネルギーとして蓄積される。

実は、熱力学的力による分子の回転運動は、温度勾配下のコレステリック液晶において 1900 年にレーマンによって観察されており（レーマン効果）、その理論的説明はレスリーによってなされた [2, 3]。上記の現象はこのレーマン効果の 2 次元アナログとみることもできる。液晶単分子膜においてこのようなアナロジーが妥当かどうかについては議論の余地はあるが、ここではひとまず、それが成立するものと仮定して、現象のモデル化を行い、実験結果の説明を試みる。

## 2 モデル

ここでは、最も簡単なモデルとして以下のようなものを考える。単分子膜は分子の光学軸が膜の法線から一様に傾いた 2 次元的液晶相 (smectic-C) を形成するので、カイラリティーの分布は時間・空間的に一様であるとすれば、系を記述する変数は、液晶の director 場の膜面 ( $xy$  平面) への射影に対応する c-director 場  $\mathbf{c} = \mathbf{c}(\mathbf{r}, t)$  のみである。ここで、 $\mathbf{r} = (x, y)$  は膜面内の位置、 $t$  は時刻を表す。質量に関する流体力学的な流れがないとすれば、レーマン効果のアナロジーから、

---

<sup>1</sup>E-mail: okuzono@nanolc.jst.go.jp

次の式が導かれる。

$$\gamma_1 \frac{\partial \mathbf{c}}{\partial t} = -\frac{\delta F}{\delta \mathbf{c}} - \nu \mathbf{c} \times \mathbf{E} \quad (1)$$

ここで、 $\gamma_1$ 、 $\nu$  は正の定数、 $F$  は自由エネルギーで、ここでは Ginzburg-Landau 型の汎関数

$$F = \int d\mathbf{r} \left[ \frac{K}{2} \sum_{i=x,y} |\nabla c_i|^2 - \frac{\tau}{2} |\mathbf{c}|^2 + \frac{u}{4} |\mathbf{c}|^4 \right] \quad (2)$$

を採用する。ここで、正定数  $K$  を含む項は Frank の弾性エネルギーに対応する ( $\tau$ 、 $u$  は正定数)。また、本来、 $\mathbf{c}$  は単位ベクトルであるが、ここでは長さも変化するベクトルに拡張した。式 (1) の中の  $\mathbf{E}$  は水蒸气流束に共役な場で水の化学ポテンシャルの勾配である。ここでは、膜面に垂直な定数ベクトルとする。

### 3 シミュレーション結果

モデル方程式 (1) による数値シミュレーションの結果を示す。形成されるパターンは境界条件に強く影響される。図 1 に Dirichlet 境界条件の下での系の時間発展の様子を示す。図 1(a)、(b)、(c) はそれぞれ  $t = 100$ 、 $1000$ 、 $2000$  での方位角  $\phi$  [ $\mathbf{c} = |\mathbf{c}|(\cos \phi, \sin \phi)$  で定義される] の空間分布をカラープロットしたものである。中央で生成された配向波が境界付近に集積していく過程がみられ、実験での観察と整合している。

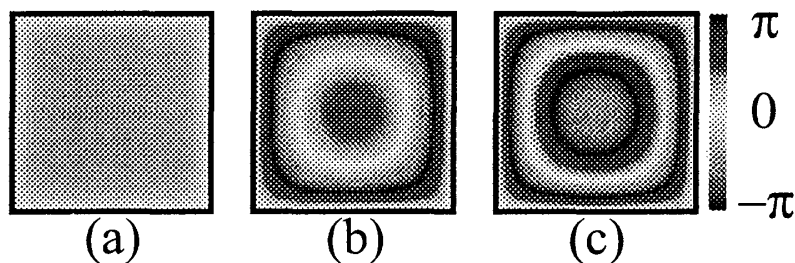


図 1: 方位角  $\phi(\mathbf{r}, t)$  の  $t = 100$  (a),  $1000$  (b),  $2000$  (c) でのスナップショット。

### 参考文献

- [1] Y. Tabe and H. Yokoyama, *Nature Mater.* **2**, 806 (2003).
- [2] P. G. de Gennes and J. Prost, *The Physics of Liquid Crystals*, second edition (Clarendon Press, Oxford, 1993).
- [3] S. Chandrasekhar, 『液晶の物理学』原書第 2 版, 木村初男, 山下護 共訳, (吉岡書店, 1995).