

横山液晶微界面プロジェクトの研究成果

目次

1. トップダウンアプローチ	2
1-1 表面マイクロパターンに誘起されるメモリー性液晶表示素子	
1-2 光誘起スイッチング液晶素子	
1-3 複合界面構造化強誘電性液晶	
1-4 無しきい値液晶デバイス	
1-5 液晶コロイド超構造の光マニピュレーション	
1-6 液晶と粒子から成る規則欠陥配列	
2. 理論・シミュレーション	12
2-1 微粒子分散系の数値計算	
2-2 液晶のシミュレーション：実験との定量的比較をめざして	
2-3 液晶単分子膜における光誘起進行波の理論	
2-4 キュービック液晶相の分子シミュレーション	
3. 液晶ダイナミクスと物性測定	19
3-1 二次元液晶単分子膜の非平衡ダイナミクス	
3-2 液晶配向表面の構造と液晶性高分子のカイラル信号の検出	
3-3 液晶アンカリング強度の新しい測定法	
3-4 液晶リターダーの駆動方法とその応用	
4. ボトムアップアプローチ	25
4-1 フォトニック液晶	
4-2 カイラリティに由来するスメクティック超構造液晶	
4-3 紫外光域で有用な液晶材料	
4-4 分子の立体構造とバナナ液晶	
4-5 全フッ素置換鎖を持つ液晶性ポカテナー化合物	

1. トップダウンアプローチ

1-1 表面マイクロパターンに誘起されるメモリー性液晶表示素子

研究成果の概略

高分子膜表面に配向パターンを形成し表面の対称性を高めることにより、ネマティック液晶の配向の多重安定状態を作り出し、メモリー性を発現しました。この表面の配向パターンは、場所により異なる方向に走査(ナノラビング)することにより、全体として図1のような4回対称性を持つ市松模様として形成されています。当プロジェクトでは、ネマティック液晶を用いて双安定ネマティック液晶素子を実現し、安定なメモリー性と、電場印加による2状態間のスイッチングを確認しています(図2)。

さらに、配向パターンの対称性を高めることで、双安定性をさらに高次の多重安定性に展開できることを実証しました。6回対称の配向パターンにより、これまで液晶では例のない三安定性を実現することに成功しました(図3)。本成果の最大のインパクトは、微小な表面配向のパターンによって、これまで困難とされてきた多重安定メモリー性のあるネマティック液晶デバイスを可能とする汎用性の高い方法を提案したことです。液晶本来の強みである低消費電力用途応用の新たな可能性を拓きました。

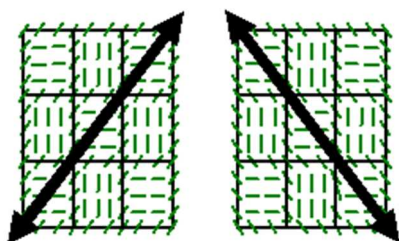


図1

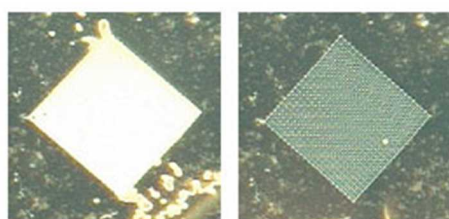


図2

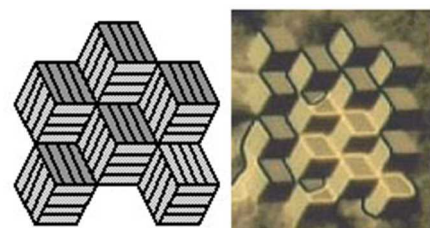


図3

成果展開可能なシーズ、用途等

液晶デバイスの配向膜(ポリイミド膜)に微細な対称性パターンを形成することで、多重安定(メモリー性)液晶デバイスを作成できる。低消費電力・高精細液晶表示素子の開発が可能となる。原理実験では微細表面パターンを作成するのに原子間力顕微鏡(AFM)の探針を用いたが、作成時間が膨大となり、このままでは実用化は困難である。SORST 継続研究課題「液晶ナノシステム」では、この課題を解決するため、これまでの機械的ラビングによる配向膜作成に代わり、半導体リソグラフィ技術に類似した方法を活用して、一つには紫外光を用いた光配向技術を用いること、二つにはナノインプリント技術を応用し、2次元微細パターンの一括短時間作成を検討する。これらの展開で、ネマティック液晶によるメモリー性液晶デバイスの実用化を目指す。

特許出願

- 1) 金鐘賢、横山浩、米谷慎、山本潤：液晶表示素子およびその製造方法、特願 2000-213040 （出願 2000/7/13）
- 2) 米谷慎、金鐘賢、横山浩：液晶表示素子、特願 2001-66435 （出願 2001/3/9）
- 3) 米谷慎、金鐘賢、横山浩、山本 潤：液晶表示素子、特願 2002-512736 （出願 2002/3/18）特許 3525139（H16.2.27） PCT 出願：米国、EU、韓国、台湾、日本
- 4) 米谷慎、金鐘賢、横山浩：液晶表示素子、特願 2003-337800 （出願 2003/9/29）PCT 出願：米国、EU、韓国、中国、日本

報告書他

- 1) Kim J-H., Yoneya M., Yamamoto J. and Yokoyama, H.: Surface alignment bistability of nematic liquid crystals by orientationally frustrated surface patterns, Appl. Phys. Lett., 78(20), pp3055-3057, (2001).
- 2) Kim J-H., Yoneya M., Yamamoto J. and Yokoyama, H.: Nano-rubbing of liquid crystal alignment layer by atomic force microscope: A detailed characterization, Nanotechnology, 13, pp133-137 (2002)
- 3) Yoneya M., Kim J-H. and Yokoyama H.: Simple model for patterned bidirectional anchoring of nematic liquid crystal and its bistability, Appl. Phys. Lett., 80(3), pp374-376, (2002).
- 4) Yoneya M., Kim J-H. and Yokoyama H.: Simple model for patterned bidirectional anchoring of nematic liquid crystal and its bistability, Appl. Phys. Lett., 80(3), pp374-376, (2002).
- 5) Kim, J.-H., Yoneya, M. and Yokoyama, H. : High resolution bistable nematic liquid crystal device realized on orientational surface patterns, Appl.Phys.Lett., 83, pp3602-3604 (2003).
- 6) 横山浩、J.-H. Kim、新居輝樹、山本潤、米谷慎：液晶のナノ構造と機能発現, 機能材料 24, 5-13 (2004)

1-2 光誘起スイッチング液晶素子

研究成果の概略

これからの液晶デバイス応用に関連して重要な技術となる光誘起光スイッチングにおいて、新しいスイッチング法の基礎的な原理とプロトタイプを発明しました。本発明は、その光配向変化の大きさとスピードの速さに特徴があります。斜方蒸着した SiO_2 の配向膜の持つ2軸性のアンカリング特性と、液晶中に混合されたゲストーアゾ液晶分子の短波長光照射による光異性化に伴う基板吸着性の変化を、競合させることにより、光照射によってホスト液晶の配向方向を、制御することを可能としました。本発明により、光照射により90度近い配向変化を高速にスイッチングする液晶デバイスが作成できます。

成果展開可能なシーズ、用途等

- 1) 光制御液晶デバイスの開発。プロジェクタ型液晶ディスプレイ、光情報処理、光メモリ、光通信、ロボット分野などへの適用が期待される。

特許出願

- 1) Lachezar Komitov、横山浩、山本潤：光誘起スイッチング液晶デバイス、特願 2001-111049（出願日 2001/4/10） 特許 3401500（2003/2/21） PCT 出願 米国、日本

1-3 複合界面構造化強誘電性液晶

研究成果の概略

複合化された界面構造をデザインして、強誘電性液晶の表面配向を最適化する方法を考案しました。強誘電性液晶をディスプレイ等に応用する際、最大の課題は、スメクティック層構造起源の配向欠陥の発生です。特徴的な欠陥にジグザグ欠陥があり、ジグザグ欠陥の発生機構を検討した結果、基板表面のアンカリング起因の C1-C2 シェブロン層構造転移がジグザグ欠陥発生の原因であることがわかりました（図1）。

この構造転移を抑制するために SA-SC 相の相転移温度が、ガラス表面からの濃度勾配に比例して変化するようにデザインした表面層を、能動的に導入しました（図2）。その結果、構造転移の抑制されることが確認され、無欠陥の一様媒質を得ることが可能になりました。

欠陥を発生させない別の手法として、反強誘電性液晶に光重合性高分子を導入し、UV 光照射で光重合させる方法も考案しました。できた光重合高分子が液晶の配向構造を安定化するので、等方相ーネマティック相ースメクティック相の安定な相系列が得られました。

他の液晶を用いて高分子テンプレートを作成し、液晶を除去、その後、反強誘電性液晶をテンプレート中に注入します。こうして作成した液晶セルは一様で均一な分子配向構造となります。

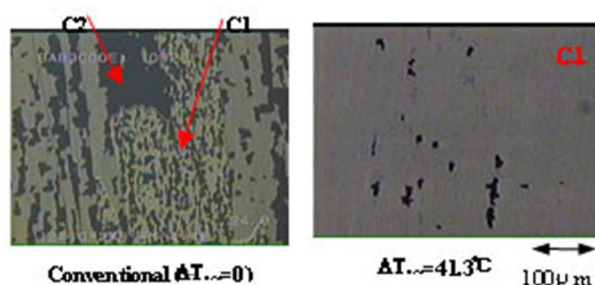


図1

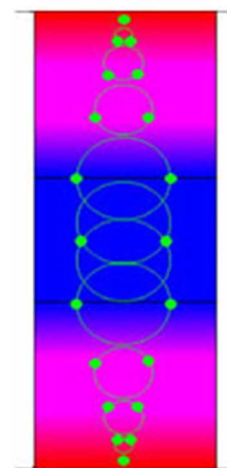


図2

成果展開可能なシーズ、用途等

欠陥の無い強誘電性液晶デバイスが構成できる。強誘電性液晶の優れた特性である高速応答が可能な、液晶ディスプレイをはじめとする液晶光学素子への応用が期待される。ここで開発した複合化構造は液液界面のようなソフトな界面で挟まれた液晶の振る舞い、外場等による界面形状変化に伴う液晶分子配向変化の探究、構造化液晶の構築など、基礎・応用両面からその興味は尽きない。

また、高分子ネットワークは重合時の配向構造を記憶し、テンプレートとしての働きを有するわけである。このテンプレートを利用した一様分子配向の実現や、ある液晶に新たな相を誘起させたり、ある相の温度範囲を拡大するなど、様々な利用が期待できる。また、光パターニングを用いれば2次元・3次元に構造化された液晶媒質を構築することも可能であろう。

特許出願

- 1) 古江広和、西山伊佐、山本潤、横山浩：強誘電性液晶表示装置及びその製造方法、特願 2001-286349（出願日 2001/9/20）特許 3594917（2004/9/10）PCT 出願
- 2) 古江広和、横山浩：スメクティック液晶素子、特願 2003-276462（2003/7/18）特許 3594955（2004/9/10）PCT 出願

報告書他

- 1) Furue H., Nishiyama I., Yamamoto J. and Yokoyama H. : Fabrication of Defect-Free Surface-Stabilized Ferroelectric Liquid Crystals Using an Intervening Interfacial Layer with a Graded SmA-SmC* Transition Temperature, Jpn. J. Appl. Phys., 40, ppL820-L823 (2001).
- 2) Furue H., Yokoyama H. and Kobayashi S. : Newly Developed Polymer-Stabilized Ferroelectric Liquid Crystals: Microsized Bistable Domains and Monostable V-shaped Switching, Jpn. J. Appl. Phys., 40, pp5790-5794 (2001).
- 3) Furue H., Takahashi T., Kobayashi S. and Yokoyama H. : Models of Molecular Alignment Structure in Polymer-Stabilized Ferroelectric Liquid Crystals, Jpn. J. Appl. Phys., 41, pp7230-7233 (2002).
- 4) Furue, H. and Yokoyama, H. : Polymer-Stabilized Antiferroelectric Liquid Crystals, Jpn. J. Appl. Phys., 42, pp.6180-6182 (2003).

1-4 無しきい値液晶デバイス

研究成果の概略

液晶物質に、相溶性が良くない、高分子等の適当な物質を選んで混合し、完全ぬれ状態の水平配向液体（液晶）－液晶界面が、広い温度範囲で実現される混合系を作成する技術を開発しました。また、液体（液晶）－液晶界面を特異的に活性化する分子を用いて界面活性を行うことにより、混合物質の選択の幅を広げ、より広い温度範囲で、液体（液晶）－液晶界面を安定化させる技術を開発しました。上記、水平配向の完全ぬれ状態の界面を液晶表示素子に応用することで、外場（電場・磁場）により水平面内に 360 度配向回転可能で、メモリー性を持ちながらスイッチングしきい値のない、新しいタイプの液晶光スイッチングデバイスとする基本原理を発明しました。

成果展開可能なシーズ、用途等

完全ぬれ状態の液体（液晶）と液晶界面を用いて、液晶の配向状態を制御する液晶デバイスが開発可能です。電界・磁界などの外場に対して無しきい値特性とメモリー性を併せ持つ光スイッチングデバイスが構成できる。液晶－液体の界面現象の基礎的知見は、分子の自己集合を利用した材料設計に、多くのブレイクスルーをもたらすものと確信できる。

特許出願

- 1) 山本潤、横山浩、渡邊順次：ゼロ面アンカリング液晶配向法およびその液晶デバイス、特願 2004-266837（出願日 2004/9/14）東工大と共同出願

報告書他

- 1) 山本潤、横山浩、富川直樹、渡邊順次：完全ぬれ状態の液晶－液体界面－ジブロック高分子・液晶混合系の界面活性、2004 年日本液晶学会討論会 予稿集 1C08、名古屋大学、2004.09-26-68

1-5 液晶コロイド超構造の光マニピュレーション

研究成果の概略

液晶を分散媒とする微粒子や液滴などの微小構造体のコロイド分散系は液晶コロイドと呼ばれます。液晶という異方性媒体の配向状態や物性が微小構造体の凝集・分散挙動に対して大きな影響を与えることから、コロイド科学のみならず液晶科学においても非常に興味深い研究対象です。そして、微小構造体が液晶に安定に分散し、様々なスケールで高次構造を形成すれば液晶物性の外場刺激に対する鋭敏な応答を利用することにより構造や物性を自在に制御できる液晶デバイスへの展開も期待できます。液晶コロイドの構造や物性を制御する外場刺激として光に着目し、微小構造体表面の物性をアゾベンゼン誘導体の光異性化反応を用いて変調することにより、液晶コロイド超構造の光マニピュレーションを検討しました。

低分子ネマティック液晶にグリセロールドロップレットが分散した液晶エマルション（図1）において、アゾベンゼン誘導体のドロップレットへの吸着に基づく界面物性の変化を利用してドロップレットの凝集・分散挙動の光制御に成功しました。さらに、任意のパターンを有するコロイド超構造の光描画を達成しました。

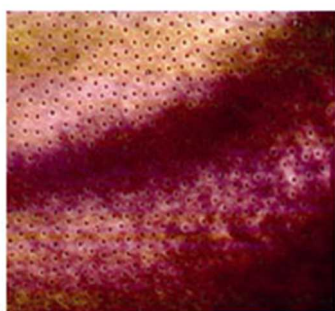


図1

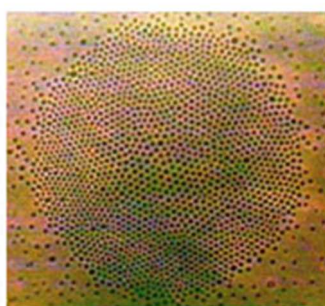


図2：紫外光に集まる液晶コロイド



図3：パターン化された光によるマニピュレーション

成果展開可能なシーズ、用途等

液晶に微粒子を分散した複合系（液晶コロイド）では、液晶の分子配向を介して粒子間に強い力が働き、特定の手順を経ることで、微粒子が規則的に配列したコロイド結晶が自己組織化されることを見出した。さらに、光応答性色素を加えることで、コロイド結晶の凝集状態を光照射で大幅に制御することにも成功した。微小構造体表面における液晶アンカリングを光で制御することができれば、配向欠陥の制御が可能となり、最終的にはコロイド高次構造や鎖状構造の方位を光で制御することができる。

電場・磁場に応答する液晶の特性に加えて光応答性のある規則的配列構造は、フォトニック結晶の機能を拡大し、例えばチューナブル特性を付与した、新しい光波制御素子への展開が期待できる。

特許出願

なし

報告書他

- 1) Nazarenko V.G., Nych A.B. and Lev B.I. : Crystal structure in nematic emulsion, Phys. Rev. Lett., 87(7), pp075504 (2001).
- 2) Lev B.I., Nazarenko V.G., Nych A.B., Schur D., Tomchuk P.M., Yamamoto J. and Yokoyama H. : Deformation of liquid crystal droplets under the action of an external ac electric field, Phys. Rev. E, 64, pp021706 (2001).
- 3) Yamamoto, T. Yamamoto, J. Lev B.I. and Yokoyama H. : Light-Induced Assembly of Tailored Droplet Arrays in Nematic Emulsions Appl.Phys.Lett., 81, pp2187-2189 (2002).

1-6 液晶と粒子から成る規則欠陥配列

研究成果の概略

一様な液晶配向場の中に粒子を導入すると、何が起こるでしょうか？我々はこの命題について、(1).粒子導入による液晶場の配向欠陥発現、及び(2).液晶場を媒介とする異方的な粒子間相互作用、の2点に着目して研究を行いました。(1) 水粒子／コレステリック液晶系では、試料に強い剪断を印加すると、剪断停止後に四角形規則欠陥配列(図1)が自発形成することを発見しました。また適当な定常剪断速度下では六角形欠陥配列へと変化することが判明しました。蛍光レーザー共焦点顕微鏡により欠陥配列中の水粒子を追跡した結果、剪断停止後の水粒子の運動が欠陥配列形成を誘起することが確認できた。(2) ポリスチレン粒子／ネマティック液晶系の研究では、レーザートラップ法により、トポロジカルな配向欠陥を持つ2粒子間に働く力の2次元マッピング(図2)を行い、液晶配向場による粒子間力の異方性が初めて実験的に検証しました。さらに、検出された2粒子の安定配置を利用して、複数粒子の規則安定配列構造の構築に成功しました。

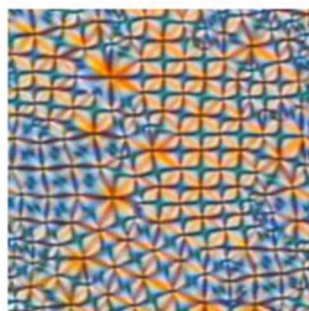


図 1

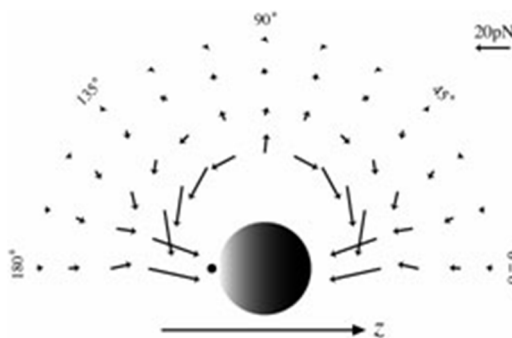


図 2

成果展開可能なシーズ、用途等

コレステリック液晶／逆ミセルの系において規則格子を形成することを見出した。格子間隔は逆ミセルの密度と、せん断速度によって大幅に制御可能である。微粒子のマニピュレーションと粒子間力の直接測定に成功し、従来知られていない粒子の安定配位を見出した。この結果は解析理論の予測と定量的に一致する(項目2. 1参照)。今後は、液晶配向の規則欠陥配列を自己組織化させたり、多ビームレーザートラップ法で多数微粒子の規則安定配列構造を構築し、液晶ならではの新しいコロイド構造を創製し、そのデバイスすなわちフォトニック結晶に類似したデバイスへの応用へ展開できる。SORST「液晶ナノシステム」では引き続いて、液晶コロイドの科学の研究：理論・創製・実験を進める予定である。

特許出願

なし

報告書他

- 1) Yada, M., J. Yamamoto and Yokoyama H. : Spontaneous Formation of Regular Defect Array in Water-in-Cholesteric Liquid Crystal Emulsion *Langmuir*, 18, pp7436-7440 (2002).
- 2) Yada, M., J. Yamamoto and Yokoyama H. : Generation Mechanism of Shear Yield Stress for Regular Defect Array in Water-in-Cholesteric Liquid Crystal Emulsions *Langmuir*, 19, pp3650-3655 (2003).
- 3) Yada, M., Fukuda, J., Yamamoto, J. and Yokoyama H. : Hexagonal Defect Array Formed under Steady Shear Flow in Water-in-Cholesteric Liquid Crystal Emulsions *Rheologica Acta*, 42, pp578-584 (2003).
- 4) Yada, M., Yamamoto, J. and Yokoyama, H. : Contribution of Water Droplets to Defect Array Formation in Water-in-Cholesteric Liquid Crystal Emulsions *Langmuir*, 19, pp9613-9618 (2003).
- 5) Yada, M., Yamamoto, J. and Yokoyama, H. : Direct observation of anisotropic inter-particle forces in nematic colloids with optical tweezers *Phys. Rev. Lett.*, 92, 185501 (2004)

2. 理論・シミュレーション

2-1 微粒子分散系の数値計算

研究成果の概略

微粒子分散液晶系においては、分散粒子の大きさ($\sim \mu\text{m}$)および液晶の相関長($\sim 10\text{nm}$)という2つの大きく異なる特徴的長さの共存という困難があります。本研究では、液晶の配向秩序の空間変化が激しい部分のみに細かい格子を動的に割り当てるアダプティブメッシュの手法を用いて、この数値的困難の克服に成功しました。

実験的には、ヘッジホッグあるいはサターン・リングと呼ばれる平衡構造が粒子のまわりのネマティック液晶で観察されており、これらの構造が数値的に再現できることを示しました。さらに、外場によって引き起こされる、ヘッジホッグからサターン・リングへの構造転移の数値的再現にも初めて成功しました(図1)。

また、2つの粒子を含む液晶系に関する数値計算も行ない、液晶の弾性変形を媒介とする粒子間相互作用の解析を行なった。その結果、ヘッジホッグを伴う粒子間には、双極子型の長距離引力と、欠陥の存在による短距離斥力が働くことを定量的に見い出し(図2)、またネマティック等方相転移点近傍の液晶では、粒子表面が誘起するネマティック相領域によって、強い引力相互作用が働くことを示しました(図3)。



図1

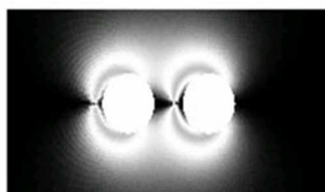


図2



図3

成果展開可能なシーズ、用途等

点欠陥と粒子のサイズに3桁以上の開きがあるために、これらが共存する状況では、数値解析も、計算量の観点で大きな困難が伴う。これを解決するために、点欠陥を自動的に検出して局所的に密なグリッドを生成して、計算量の爆発を防ぐアダプティブメッシュの計算手法を開発した。この手法により、液晶中の1-2個の粒子間に働く力を明らかにした。今後はより多くの粒子系での解析を展開する。

液晶コロイド系のように、様々な空間、時間スケールの現象が協同する系においては、連続体理論による液晶の取り扱い、特に液晶コロイドのマクロ、メソスケールの性質の探求の重要な手法であり、液晶コロイド系の性質のより深い理解の一翼を担うことが期待される。

特許出願

なし

報告書他

- 1) Fukuda J. and Yokoyama H. : Director configuration and dynamics of a nematic liquid crystal around a two-dimensional spherical particle: Numerical analysis using adaptive grids, Eur. Phys. J. E, 4, pp389-396 (2001).
- 2) Fukuda J. and Yokoyama H. : Calculation of the free energy of polymeric systems in terms of compositional and orientational order parameters, J. Chem. Phys., 115(10), pp4930-4937 (2001).
- 3) Fukuda, J., Lev B.I., and Yokoyama H. : Interaction of foreign macroparticles in a cholesteric liquid crystal, Phys. Rev. E, 65, 031710 (2002)
- 4) Fukuda, J., Yoneya M., and Yokoyama H. : Defect structure of a nematic liquid crystal around a spherical particle: Adaptive mesh refinement approach, Phys. Rev. E, 65, 041709 (2002)
- 5) Fukuda, J. and Yokoyama H. : Stability of a hyperbolic disclination ring in a nematic liquid crystal, Phys. Rev. E, 66, 012703 (2002).
- 6) Fukuda, J., Lev, B.I., Aoki, K.M., Yokoyama, H. : Interaction of particles in a deformed nematic liquid crystal, Phys. Rev. E, 66, 051711 (2002).
- 7) Fukuda, J., Yoneya, M. and Yokoyama H.: Nematic Liquid Crystal around a Spherical Particle: Investigation of the Defect Structure and Its Stability Using Adaptive Mesh Refinement, Eur. Phys. J. E, 13, pp. 87-98 (2004).
- 8) Fukuda, J., Stark, H. and Yokoyama H.: Wetting of a spherical particle by a nematic liquid crystal, Phys. Rev. E, 69, 021714 (2004).
- 9) Fukuda, J., Stark, H., Yoneya, M. and Yokoyama, H. : Interaction between two spherical particles in a nematic liquid crystal, Phys. Rev. E, 69, 041706 (2004).
- 10) Stark, H., Fukuda, J. and Yokoyama, H. : Capillary condensation in Liquid crystal colloids, Phys. Rev. Lett., 92, 205502 (2004).

2-2 液晶のシミュレーション：実験との定量的比較をめざして

研究成果の概略

シミュレーションセルの動力学に異方性因子を導入することにより、静水圧あるいは界面張力一定の条件が自然に満たされる新しい分子動力学法を開発しました。

分子形状から端を発しマクロな物性にまで現れる異方性は液晶状態の定義そのものであり、本質をつかむ上で正しく捕らえられなければなりません。圧力一定の下で行われる現実の実験との定量的比較をめざすには、バルク状態のシミュレーションでは外部圧力に応じて静水圧が実現されなければならないし、界面張力一定の下で界面のシミュレーションを行うためには垂直圧力も一定に保たれる必要があります。我々は、シミュレーションセルの動力学に異方性因子を導入することにより、そうした分子動力学法の開発に成功しました。

これらの方法を用いて2種類の長さが混じった系のミクロな動的性質とそれらがもたらすマクロな物性を調べました。静水圧を実現する圧力一定の方法で混合状態を調べるとともに（図1）、界面張力が掛かった状態で生ずる界面を調べました（図2）。

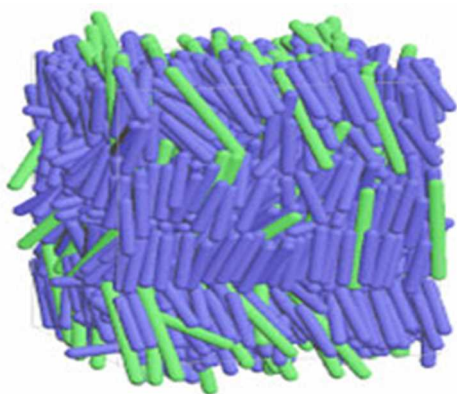


図1

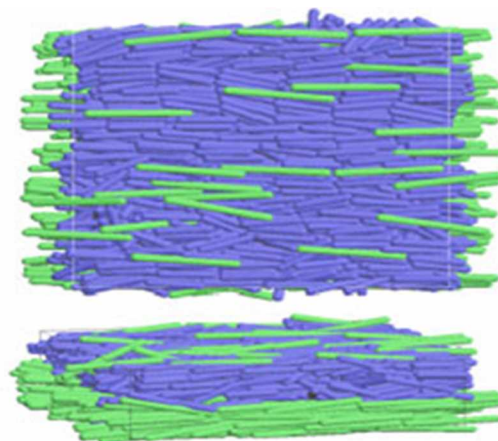


図2

成果展開可能なシーズ、用途等

異方性をもつ物質を圧力一定のもとで分子動力学シミュレーションを行うには、従来の方法では様々な問題を生ずる。それを克服するのに異方性液体でも系にストレスを生じず、静水圧となるような分子動力学法を開発した。また、様々な界面張力の下でもシミュレーションができるよう、界面張力一定の方法を開発した。これらにより液晶相および液体間の界面の安定したシミュレーションが自動的なアルゴリズムで計算可能となった。

今後、液晶だけではなく、生体膜など、異方性をもつ物質の理論的シミュレーションを検討する際には大変有益な方法であり、広い展開が期待される。

特許出願

- 1) 青木圭子、米谷慎、横山浩：シミュレーション方法及びその装置、プログラム、特願 2002-358605（出願日 2002/12/10）

報告書他

- 1) Aoki K. M., Yoneya M. and Yokoyama H. : Extended methods of molecular dynamic simulations under hydrostatic pressure and/or isostress, J. Chem. Phys., 118, pp.9926-9936 (2003).
- 2) Aoki K. M., Yoneya M. and Yokoyama H. : Molecular dynamic simulation methods for anisotropic liquids, J. Chem. Phys., 120, pp.5576-5584 (2004).
- 3) 青木圭子：分子形状と出現する液晶相 日本液晶学会誌、Vol. 5 pp. 143-148 (2001)

2-3 液晶単分子膜における光誘起進行波の理論

研究成果の概略

液晶単分子膜の非平衡ダイナミクスを記述する連続体モデルを提案しました。光によって誘起された分子配向に関する進行波の生成メカニズムを理論的に解明しました。

光異性化反応により2つの状態をとり得る液晶分子により構成されたラングミュア膜に直線偏光した光を照射すると、液晶分子の配向に関する進行波（配向波）が形成される。我々はこの現象に対し、液晶配向場の自発的な歪みの効果と光異性化反応の異方性を考慮した連続体モデルを提案した。このモデルに基づいた理論解析および数値シミュレーションの結果、モデルに取り入れたこれら2つの効果によって配向波が生成されることがわかりました（図1）。

また、提案したモデルは実験的に観察されている現象を定性的に良く説明し、特に、照射光の偏光方向を90度回転させると配向波の進行方向が反転する現象も再現します（図2）。

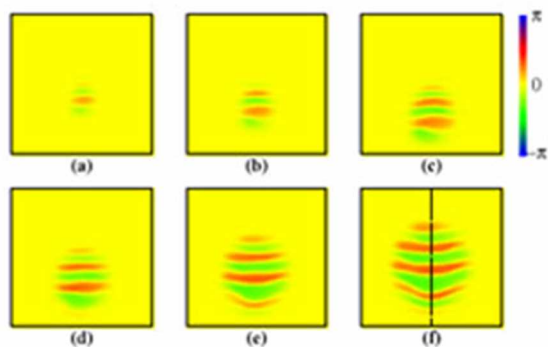


図1

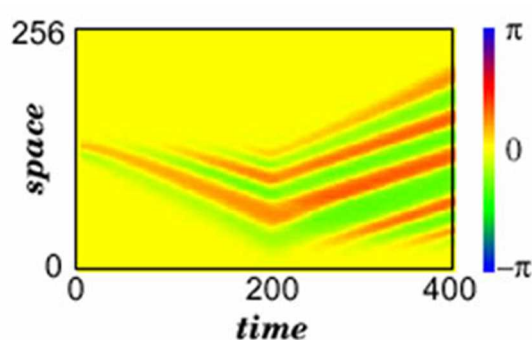


図2

成果展開可能なシーズ、用途等

これまでの実験結果を説明するモデルが得られたことで、実験に先行して各種パラメータ依存性の理論的予測が期待される。また、水の蒸発・凝縮に伴う液晶分子の集団的回転運動（液晶分子モーター：3. 1 参照）について、レーマン効果の2次元アナロジーにより連続体モデルを構築し、数値シミュレーションによって、系に現れる非平衡パターンに関する議論を行うことができる。今後、この現象の理論的解明への展開が期待される。

特許出願 なし

報告書他

- 1) Okuzono, T., Tabe, Y. and Yokoyama, H. : Generation, propagation and switching of orientational waves in photo-excited liquid-crystalline monolayers, Phys. Rev. E, 69, 050701(R) (2004).

2-4 キュービック液晶相の分子シミュレーション

研究成果の概略

ミクロ相分離により誘起されたナノスケールの三次元高次構造を有するキュービック液晶相の分子レベル構造に、分子シミュレーションにより初めてアプローチしました。

メソゲンコア部位が水素結合能を有する液晶分子 BABH8 系において、その Ia3d(ジャイロイド)対称性に対応したキュービック相の分子レベルの構造モデル(図1)を提案し、熱力学的安定性を分子シミュレーションにより調べた。その結果、光学等方性や Ia3d に特徴的な反射ピーク等が維持され、提案したモデルが有望な候補であることが示されました。

また、メソゲン部と非相溶性の高いパーフルオロアルキル鎖を有する PFMI6 液晶分子においては、三次元格子状にメソゲンコアが局在したラビリンス(図2)の自発的形成がシミュレーションにより得られました。得られた構造は、光学等方で、さらに提案したモデル(図1)と同様の、ローカルには配向したバンドルが、グローバルには光学等方となる、構造の階層性を有しています。

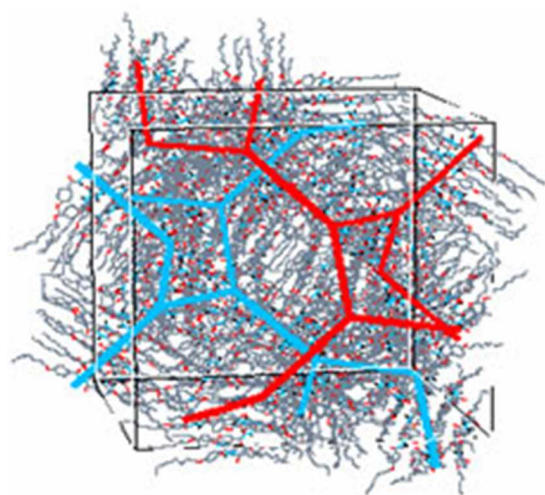


図1

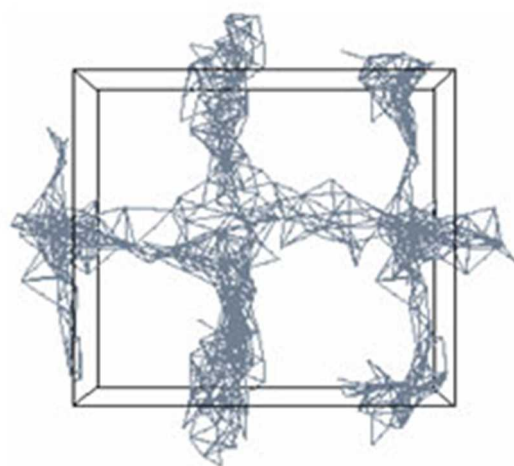


図2

成果展開可能なシーズ、用途等

キュービック相の分子レベルの構造モデルを構築・提案し、有望な候補であることが示された。得られた3次元構造は光学等方で、ローカルには配向したバンドルがグローバルには光学等方となる構造階層性を有していた。この結果より、各原子が寄与する液晶材料の特性への影響が理論シミュレーションで予測されるので、既存液晶材料の特性改良や新しいキュービック液晶材料の開発が加速されると期待される。

また、パソコンをクラスターとした手に届く範囲の環境でも、計算機の中で自発的な構造形成が分子レベルでかなり追いかけられる様になってきている。特にボトムアップによるナノテクノロジー研究において、分子シミュレーションがナノ構造を探る有効な道具として生かせる局面がますます増えると考えられる。

特許出願

なし

報告書他

- 1) Yoneya M. and Yokoyama H.: Chirality induction from chiral molecules to adsorbed monolayers, J. Chem. Phys., 114(21), pp9532-9538 (2001).
- 2) Yoneya M., Nishikawa E. and Yokoyama H.: Hydrogen bond-induced nano-segregation in the thermotropic cubic phase forming molecule, BABH8, J. Chem. Phys., 116(13), pp5753-5758 (2002).
- 3) Yoneya, M., Nishikawa, E. and Yokoyama H.: Searching for nano-structures of the cubic mesophase of liquid crystal molecules, BABH8, J. Chem. Phys., 120, pp. 3699 (2004).
- 4) Yoneya, M., Araya, K., Nishikawa, E. and Yokoyama H.: Calamitic liquid crystals as nano-scale analogues of a block copolymer, J. Phys. Chem. B, 108(24), 8099-8101 (2004).
- 5) Yoneya, M., Nishikawa, E. and Yokoyama H.: Spontaneous three-dimensional nanostructure formation of perfluoroalkyl terminated liquid crystal: A molecular dynamics simulation study J. Chem. Phys., 121(15), 752016 (2004)
- 6) 米谷慎：分子シミュレーションでナノ構造液晶相を探る, 日本液晶学会誌 Vol. 7, 238-245, (2003)

3. 液晶ダイナミクスと物性測定

3-1 二次元液晶単分子膜の非平衡ダイナミクス

研究成果の概略

二次元の液晶は、バルクにない現象を見せることがあります。中でも我々は水面上単分子膜の液晶を対象に、適切な外場を摂動として与えた時の非平衡ダイナミクス（散逸構造）を観測してきました。その特徴は、二次元特有の大きな揺らぎを伴う分子運動が、微弱な光やわずかな化学ポテンシャル勾配と結合し、それが液晶の協調作用によって広い時空間スケールにわたって変換・増幅され、最終的に大規模なダイナミクスに発展することです。ここでは、我々が見つけた2つの非平衡ダイナミクスについて紹介します。

(1) 光異性化分子として知られるアゾベンゼンでできた単分子膜液晶が、微弱な直線偏光照射下で見せる配向の波です(図1)。

(2) キラル液晶分子で構成された単分子膜液晶が、水の移動で駆動されて集団回転するという現象(図2)。

いずれも分子間の強い相互作用が本質的な役割を果たし、実験室系では稀有な凝縮系の散逸構造の例を与えています。

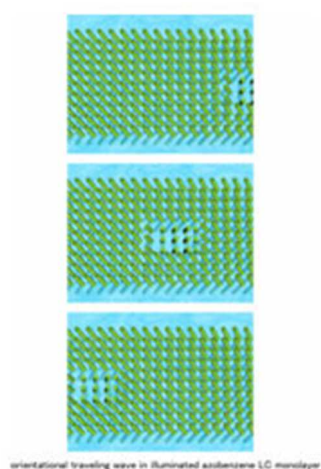


図1

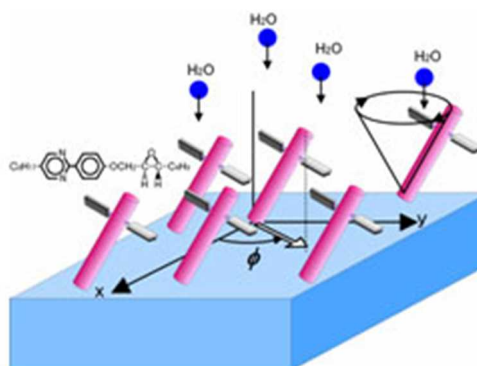


図2

成果展開可能なシーズ、用途等

液晶単分子膜の機能は、生体内の細部膜の機能と類似しており、ドラッグデリバリシステムへの応用が期待される。また、世界で初めて見出した液晶分子モーターはこれまでの分子モーターにはない、歪みエネルギーの蓄積・放出という機能もあり、バイオニクス分野への展開が期待される。これらの課題は SORST「液晶ナノシステム」において研究を継続する。

特許出願

なし

報告書他

- 1) Tabe, Y., Yamamoto, T., Nishiyama, I., Aoki, K.M., Yoneya, M. and Yokoyama, H.: Can hydrophobic oils spread on water as condensed Langmuir monolayers? J. Phys. Chem. B, 106(47), pp12089-12092 (2002).
- 2) Tabe, Y., Yamamoto, T., Nishiyama, I., Yoneya, M. and Yokoyama, H. : Ferroelectric Nematic Monolayer Jpn. J. Appl. Phys., 42, ppL406-L409 (2003).
- 3) Tabe, Y., Yamamoto, T., and Yokoyama, H. : Photo-induced traveling waves in condensed Langmuir monolayers, New J. Phys., 5, 65 (2003).
- 4) Tabe Y. and Yokoyama H.: Coherent collective precession of molecular rotors with chiral propellers, Nature Materials, 2, pp. 806-809 (2003).
- 5) 多辺由佳：二次元強誘電ネマティック液晶, 日本液晶学会誌 Vol. 7, 314-322, (2003)

3-2 液晶配向表面の構造と液晶性高分子のカイラル信号の検出

研究成果の概略

表面選択的な非線型光学的手法で液晶配向を実現する表面の構造を種々研究してきました。ここでは、ホメオトロピック配向ポリイミドの表面のイミド環 C=O、側鎖のエステル C=O、側鎖アルキルの表面における配向を明らかにしました。ホモジニアス配向ポリイミドに比べ、イミド環面が表面法線方向に配列し、あたかも側鎖の表面密度を大きくしているように配列していることを見出した。また、従来のアルキルリッチな全くの疎水的な表面とは異なり、ポリイミド表面の液晶単分子層ではシアノ基を表面に向けて配向していることも明らかにしました(図1)。

液晶のナノ構造形成にも重要な因子のひとつであるカイラリティについて、液晶性カイラル高分子薄膜をサンプルとして、Sum-Frequency Vibrational Spectroscopy を用いた高分子膜のカイラル信号の検出に初めて成功しました。側鎖のカイラル中心が主鎖のヘリカル構造を誘起する液晶性ポリマーを用いました。主鎖の π 電子共役系による電子遷移共鳴と分子振動がカップルし、二重共鳴がカイラル信号検出に有効であることを示しました(図2)。

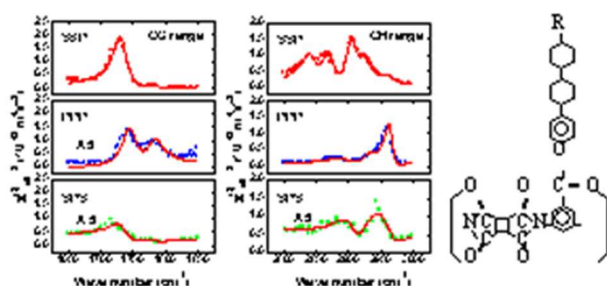


図1

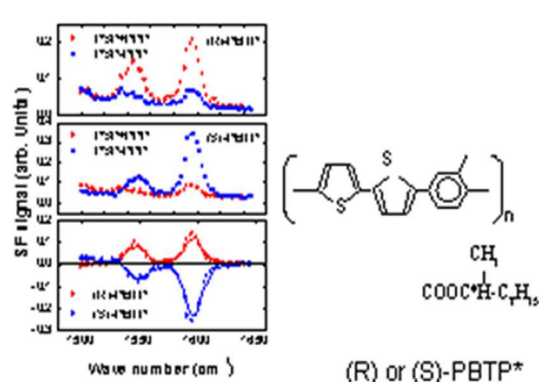


図2

成果展開可能なシーズ、用途等

高度な非線型分光測定法である、Sum-Frequency Vibrational Spectroscopy(SFVS)を確立し、多くの課題で成果を上げた。SFVS は真空系を必要とせず、大気中で表面の構造にアクセスする強力な手法であり、これを用いて関連する表面・界面の分子の並びを表面選択的に研究することができる。今後は、共焦点顕微鏡や近接場顕微鏡との組合せ、または、粒子系への適用として光散乱の利用など、その技術を改善し適用分野の拡大が期待される。

特許出願

なし

報告書他

- 1) Oh-e, M., Asahi, T., Masuhara H. : Ultrafast Charge Separation and Recombination Dynamics in a Nanometer Thin Film of Polyimide Observed by Femtosecond Transient Absorption Spectroscopy, J. Phys. Chem. B, 106, pp5840-5844 (2002).
- 2) Oh-e, M., Tabe, Y., Yokoyama, H. : Anisotropy of alkyl chains of azobenzene molecules at the air/water interface observed by sum-frequency vibrational spectroscopy, Phys. Rev. E, 68, 061602 (2003).
- 3) Oh-e, M., Kim, D., Yokoyama, H. : Mapping molecular orientation and conformation of polyimide surfaces for homeotropic liquid crystal alignment by nonlinear optical Spectroscopy, Phys. Rev. E, 69, 051705 (2004).
- 4) Oh-e, M., Yokoyama, H. and Baldelli, S. : Structure of the glycerol liquid/vapor interface studied by sum-frequency vibrational spectroscopy, Appl. Phys. Lett., (to be published).
- 5) Sung, J., Kim, D., Whang, C. N., Oh-e, M. and Yokoyama, H. : Sum-frequency vibrational spectroscopic study of polyimide surfaces made by spin-coating and ionized cluster beam deposition, J. Phys. Chem. B 2004, 108, 10991-10996
- 6) Oh-e, M., Yokoyama, H., Yorozya, S., Akagi, K., Belkin, M. A. , Shen, Y. R.: Sum-frequency vibrational spectroscopy of helically structured conjugated polymers, Phys. Rev. Lett., 93, 767402(2004)
- 7) 大江昌人：和周波発生振動分光法（Sum-Frequency Vibrational Spectroscopy）－液晶配向に関わるポリマー表面構造の解析への応用, J. Vac. Soc. Jpn, (真空)、Vol. 47, 522-528(2004)

3-3 液晶アンカリング強度の新しい測定法

研究成果の概略

超電導マグネットなどで可能となる強磁場を用いて、液晶の磁界誘起トルクを測定すると、磁界の逆数と誘起トルクとの間には直線関係が成り立つ。この関係を用いて、液晶デバイス設計の基本となるアンカリング強度を、精度良く測定する原理と測定システムを発明した。この方法は、これまでの強電場法に比較して、強磁場を用いることにより、原理が透明（バルクと界面の応答を分離可能）で普遍的な測定が可能、かつバイアス補正処理（光学測定では必須）が不要であり、任意形状の液晶を対象とすることができる。液晶アンカリング強度を短時間で高精度に測定する測定方法及びそのシステムが得られた。

成果展開可能なシーズ、用途等

この成果は、液晶産業における液晶材料の改良、液晶デバイスの機能改良などの研究開発、生産工程などで利用可能である。液晶ディスプレイ、光メモリ、光通信分野などでの液晶デバイス設計開発に広く適用が可能である。また、測定装置の商用化も期待できる。

特許出願

- 1) 横山浩：液晶アンカリング強度測定法及びその測定システム、特願 2001-82770 （出願日 2001/3/22） 特許 3420217（2003/4/18）

報告書他

- 1) 横山浩、鄭都漢、木村雅之、多辺由佳、磁場誘起トルク測定に於けるアンカリング強度の普遍測定、2000 年日本液晶学会討論会 1B01 松江
- 2) 鄭都漢、黒田隆志、木村雅之、多辺由佳、横山浩、磁場誘起トルク測定に於けるアンカリング強度の普遍測定 II、2001 年日本液晶学会討論会 1PA11 大宮
- 3) 横山浩アンカリング強度測定の原理と実際 日本液晶学会誌 Vol.4, pp.63-72(2000)

3-4 液晶リターダーの駆動方法とその応用

研究成果の概略

市販されている液晶リターダーは、シンプルな比例電圧制御ができないため、精度も悪く使用勝手も悪い。そこでリターデーション（R：位相量）と比例関係が得られる駆動電子回路の印可電圧の逆数が正確に得られる回路を発明した。これを用いることで、精度良く任意のリターデーションが設定できる。

成果展開可能なシーズ、用途等

電圧制御で任意の位相量を容易に設定できる液晶リターダを作成できる。これを応用すれば、万能リターダーの製作および計測応用素子、計測装置への展開が可能である。とくに、これまでの装置に比較して簡便な全自動測定可能なエリプソメータの製作が可能となる。

特許出願

- 1) 横山浩、多辺由佳：液晶リターダ駆動法、特願 2000-116037（出願日 2000/4/18） 特許 3529699（2004/3/5）
- 2) 横山浩、多辺由佳：電圧制御液晶リターダで構成されたエリプソメータ、特願 2000-116038（出願日 2000/4/18） 特許 3537732（2004/3/26）
- 3) 横山浩、多辺由佳：電圧制御リターダの組み合わせによる万能リターダー、特願 2000-116039（出願日 2000/4/18） 特許 3529700（2004/3/5）

報告書他

なし

4. ボトムアップアプローチ

4-1 フォトニック液晶

研究成果の概略

サーモトロピック液晶の起源には、常にミクロな分子の運動が重要な役割を持っている。そこで我々は、2つの液晶分子を化学的につないだツイン分子を添加し、分子のミクロな運動を局所的に凍結させることを考案した。ある種のカイラル液晶分子のモノマーとツインの混合系が、極めて多彩な相図(図1)を示すことを見出した。特に、等方相との相転移点近傍では、可視光波長で特定の色を示す SmBPIso 相を初めて発見しました(図2)。

SmBPIso 相の X 線測定から、ミクロなスケールで層状構造が存在することが確認されるにも関わらず、巨視的な光学特性は、完全に等方性を示す点が極めて特徴的です。巨視的粘弾性測定からは、ソフトなゲル弾性と、対称組成濃度付近での、層状構造の強い不安定化を発見しました。凍結断面法による TEM 観察により、空間的にランダムな、らせん構造の存在が確認されました。可視光波長スケールの 3 次元フォトニック構造を、層状構造と、カイラリティ由来のらせん構造との競合によって、自発的に形成させることに成功しました。

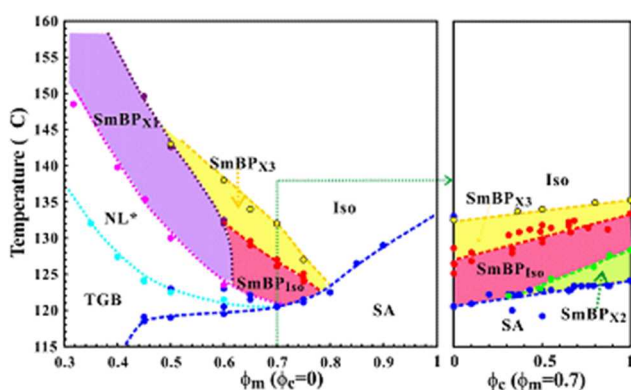


図 1

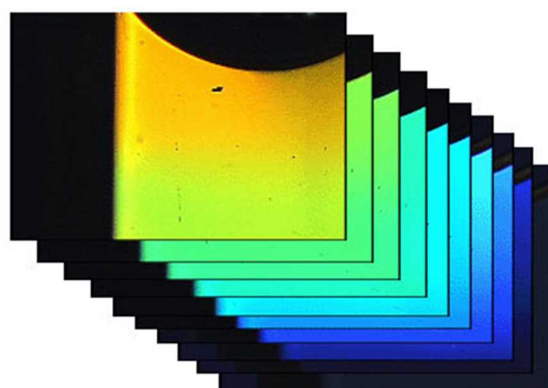


図 2

成果展開可能なシーズ、用途等

フォトニック液晶は最近話題のフォトニック結晶の特性をもっている。しかも液体であるので、任意の形状で作成・使用できるほか、半導体材料によるフォトニック結晶の製作過程に比較して、フォトニック液晶の製作にはほとんどエネルギーを消費しない特長がある。液晶分子の強い相互作用により自己組織的に形成されるからである。温度・圧力・電場・磁場などによる外場変調でその特性を容易に変化させることができるので、今後は、広い分野での光波制御素子への展開が有望である。

特許出願

なし

報告書他

- 1) Yamamoto, J., Nishiyama, I., Saiga, C., Mitsuhashi, Y., Yoneya, M., Yokoyama, H.: Novel Transparent Iridescent Smectic Blue Phase in Chiral Twin/Monomer Commensurate Mixture, 19th Int. Liq. Cryst. Conf. P492, Edinburgh, UK, 2002.6.30-7.5
- 2) 山本潤、西山伊佐、横山浩：カイラルツイン・モノマー混合系における擬等方性呈色欠陥(TGB) 格子相、2002 年日本液晶学会討論会 3B04 奈良 2002.10.09-11
- 3) 山本潤、西山伊佐、新居輝樹、横山浩 ミクロな非整合性とナノ構造液晶, オレオサイエンス 3, 599-607 (2003)

4-2 カイラリティに由来するスメクティック超構造液晶

研究成果の概略

分子の両末端にカイラル部分を導入する事で強いカイラリティを発現させ、また、コアを形成するフェニル環の数を系統的に変える事でスメクティック層構造の強さを調節するという分子設計を採用した(図1)。その結果、螺旋構造をつくろうとする力と層構造を作る力のバランスによって生じる多彩な液晶超構造を得る事に成功しました。

カイラリティの導入により液晶分子の秩序に螺旋構造が形成され、そこには螺旋のピッチに相当する周期秩序を有する超構造がつくり出された。ねじれ力が強く、欠陥の形成が容易な場合には、単純な螺旋構造だけでなく、ねじれに由来した3次元構造も作り出される(図2)。

十分に強い層構造をつくる分子では、スメクティック層構造を保持したまま分子レベルでの螺旋状態を構築するフェリ誘電性液晶相が見られた。層構造を弱くするよう設計した分子では、スメクティック層構造がブロックを形成しながらねじれる事によって生じる Twist Grain Boundary (TGB) 相や、スメクティックブルー相が得られ、さらに層構造を弱めるとスメクティックQ相やスポンジ相等の3次元超構造が発現した。

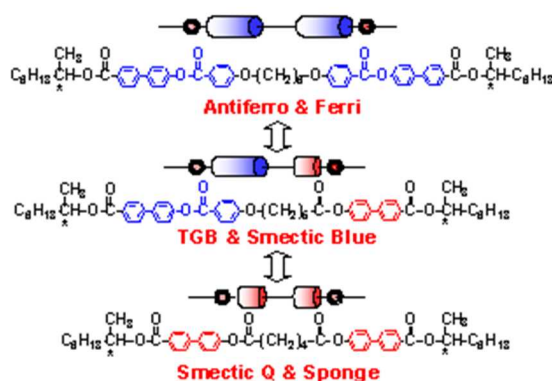


図1

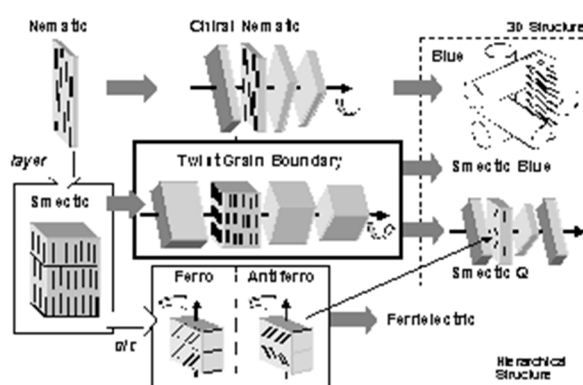


図2

成果展開可能なシーズ、用途等

ナノ構造液晶の分子設計と化学合成において、カイラリティ (Chirality) とクリニシティ (Clinicity 傾斜) の導入が非常に有益なことが分かった。現在まで知られていなかった液晶相を初めとして、数々の新しい液晶状態を示す材料を得ることに成功し、新たな特性機能も明らかになった。3次元構造を作るフォトニック液晶の化学合成にも成果を上げた。今後は、"Chirality"と"Clinicity"に加えてそれ以外のナノ構造を創り出す要素技術の探索が重要である。

特許出願

なし

報告書他

- 1) Nishiyama I., Yamamoto J., Goodby, J.W. and Yokoyama H. : A symmetric chiral liquid-crystalline twin exhibiting stable ferrielectric and antiferroelectric phases and a chirality-induced isotropic-isotropic liquid transition, J. Mat. Chem., 11, pp2690-2693 (2001).
- 2) Nishiyama I., Yamamoto J., Goodby, J.W. and Yokoyama H. : Novel non-symmetric chiral twin liquid crystals possessing two identical chiral moieties at both peripheral ends: highly chirality-sensitive phases appeared between smectic and isotropic liquid phases, J. Mat. Chem., 12, pp1709-1716 (2002).
- 3) Nishiyama I., Yamamoto J., Goodby, J.W. and Yokoyama H. : Ferrielectric and antiferroelectric chiral twin liquid crystals showing a stable chiral nematic phase, Liq. Cryst., 11, pp1409-1423 (2002).
- 4) Nishiyama, I., Yamamoto J., Goodby, J.W. and Yokoyama, H. : Liquid Crystal Trimers Showing Stable Anticlinic Structures in Smectic C and I Phases, J. Mater. Chem., 13, pp.2429-2435 (2003).
- 5) Nishiyama, I., Yamamoto, T., Yamamoto, J., Goodby, J.W. and Yokoyama, H.: Achiral Non-branched Rod-shaped Liquid Crystals Showing Anticlinic Smectic Phase, J. Mater. Chem., 13, pp.1868-1876 (2003).
- 6) Nishiyama I., Yamamoto J., Goodby, J.W. and Yokoyama H. : Effect of Introducing Thioether Linkages on the Molecular Organization of Chiral Twin Liquid Crystals, Liquid Crystals, 31(11), 1495-1502(2004)
- 7) Nishiyama I., Yamamoto J., Goodby, J.W. and Yokoyama H. : Novel Chiral Effects on the Molecular Organization in the Liquid-crystalline Phases, Chemistry of Materials, 16, 3213-3214(2004)
- 8) 西山伊佐 スメクティック相の分子集合状態の多様性, 日本液晶学会誌 Vol. 7, 40-50, (2003)

4-3 紫外光域で有用な液晶材料

研究成果の概略

紫外光吸収の少ない液晶材料は、これまであまり開発されておらず、また使用温度範囲が狭く実用的でなかった。これまでの紫外光領域で使用可能な液晶材料は、複屈折性が小さいほか、誘電異方性が負であり、応用面で課題があった。

上記課題を解決するため、ネマティック相のみが出現する新しい液晶材料の合成に取り組み、成功した。この液晶は、回転粘性が低い、複屈折が小さい、紫外光照射に安定、誘電異方性が正である、などの特徴を有しています。新しく合成した液晶材料はネマティック相の出現温度領域が広い、複屈折性が実用化に適した範囲内で優れている、紫外光に対する安定性が高い、誘電異方性が正であるなどの長所を持っています。材料合成方法も低価格原料を出発とする合成方法であり、かつ合成プロセスも簡便であるので、実用的観点からも新しい液晶材料として優れている。

成果展開可能なシーズ、用途等

反射型液晶表示装置（AM-TFT-LCD）や新しく応用が検討されている蛍光型液晶表示装置（PL-LCD）に適した、紫外光領域で光吸収の少ない液晶材料を提供する。発展著しい光ディスクではその高密度化のため、光源波長を赤外・赤・青と短波長化してきた。将来は紫外光領域の利用が検討されているが、光学素子の位相制御などに液晶デバイスがより多く使用されると想定され、その素材を提供することになる。この液晶材料は、単独または既存液晶材料との混合により所用の機能を発現する。

特許出願

- 1) Neil Campbell、山本潤、横山浩：液晶材料、液晶材料の製造方法および液晶デバイス，
特願 2004-218656（出願日 2004/7/27）

報告書他

なし

4-4 分子の立体構造とバナナ液晶

研究成果の概略

バナナ型液晶化合物が基本的に有する折れ曲がり構造とその分子パッキングの相乗効果により様々な液晶構造や物性を液晶場に反映させることができる。特に、光学活性基を持たない分子構成にも関わらず、反強誘電特性やらせん構造に代表されるカイラル特性が発現してくる現象は新規な機能であり、且つカイラリティの起源についても、純粋な物理現象として興味深い。

バナナ型化合物では上述のバナナ相に加えて棒状化合物で見られる典型的な液晶相も形成される。この2種類の液晶相間で、類似点、相違点を明らかにすることにより、バナナ液晶相の起源を理解できるはずである。

ここでは、分子構造の異なるバナナ液晶分子を系統的に合成し、その物性を調べることでバナナ液晶相の知見を収集しました。また、特に、「折れ曲がり分子自体がねじれることで誘起されるカイラリティ」に特に着目して研究をおこなった。(図1) B1相の偏光顕微鏡写真、(図2) B2相の偏光顕微鏡写真。

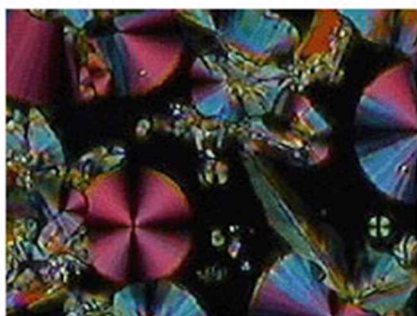


図1

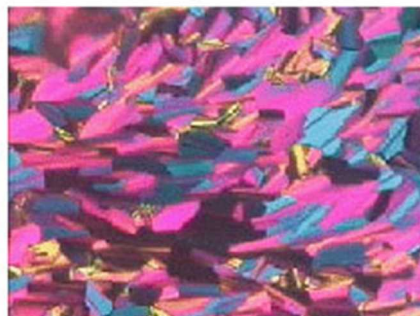


図2

成果展開可能なシーズ、用途等

非対称型バナナ分子では、相転移温度の低下とネマティック相との共存化に成功したことで、ディスプレイへの応用も視野に入れることができるようになった。分子修飾方法によるバナナ相の発現傾向にある程度の規則性を見い出せたこと、また分子のねじれに着目したカイラリティ強化、などは機能性付加を目的とした分子設計や今後の研究発展の上で重要な指標となる。

特許出願

なし

報告書他

- 1) Niori, T., Yamamoto, J. and Yokoyama, H.: New mesogenic compounds exhibiting a thermotropic optically isotropic phase, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* , 364, pp843-850 (2001).
- 2) Niori, T., Yamamoto, J. and Yokoyama, H.: Dynamics of the nematic phase formed by an achiral banana-shaped materials *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, 409,475-482 (2004)
- 3) Niori, T., Yamamoto, J. and Yokoyama, H.: Search for the B phase in an achiral non-symmetric banana-shaped materials *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*,413, 283-291 (2004)
- 4) 新居輝樹 バナナ型液晶化合物－アキラルが生み出すマジック, *日本液晶学会誌*, Vol.6, pp.278-288 (2002)

4-5 全フッ素置換鎖を持つ液晶性ポリカテナー化合物

研究成果の概略

ポリカテナー化合物は棒状分子と板状分子を組み合わせた分子構造に基づき、様々な液晶相を形成する。そのような分子骨格に全フッ素置換鎖を組み込んだ分子を設計合成した。全フッ素鎖は炭化水素部位との相溶性が低くマイクロ分離構造を誘起するが、特徴的な分子形状との相乗効果によりナノ構造液晶相形成が期待されます。

図1に示す nPCF 化合物はペリ位のアルキル鎖長 n に依存して様々な液晶相を示すことが分かった。12PCF と 14PCF はスメクティック A 相と 2 種のカラム相を、16PCF は 3 種のカラム相を形成した。また、14PCF と比較し、全フッ素鎖を有しない化合物 1 1 1 1 は液晶相を形成せず、全フッ素部位の構造が異なる 2 2 2 2 はカラム相とキュービック相を形成し、全フッ素鎖とコア部を結ぶアルキルスパーサー長が異なる 3 3 3 3 はカラム-スメクティック A-カラムという特徴ある液晶相系列を示す。このように、これらの化合物群はその分子構造の特徴に基づき多彩な液晶相を示すことが明らかになった。

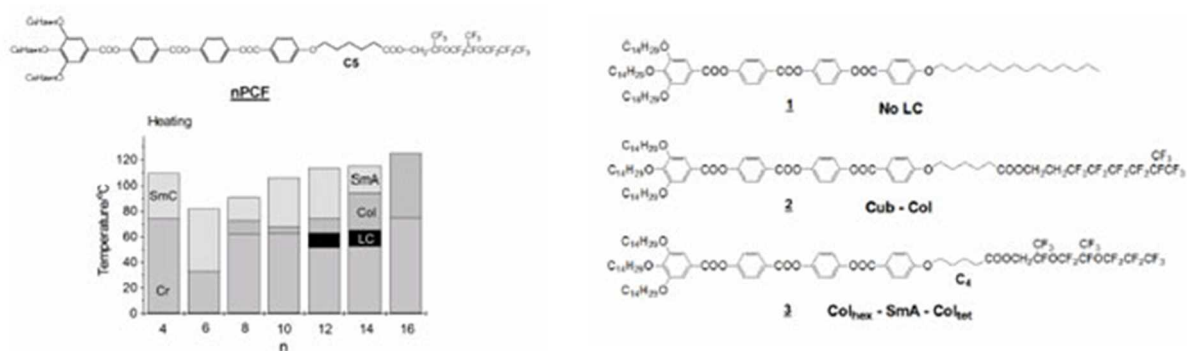


図 1

成果展開可能なシーズ、用途等

全フッ素鎖と炭化水素部位との非相溶性に基づくマイクロ分離能を第一の構造形成要因とし、1) 水素結合性相互作用、2) 分子形状異方性、3) ポリマー効果、などの第二の要素と組み合わせることで、様々なマイクロ分離構造の液晶相を形成する化合物を手に入れられることを示した。とくにキュービック相を示す液晶分子は新しいものであり、実現温度範囲の拡大などの、今後の展開が期待される。

特許出願

なし

報告書他

- 1) Nishikawa E., Yamamoto J. and Yokoyama H.: Synthesis and properties of perfluoroalkylalkoxy substituted benzoic acid derivatives, Chem. Lett., (2) pp94-95 (2001).
- 2) Nishikawa E., Yamamoto J. and Yokoyama H.: Synthesis and properties of perfluoroalkylalkoxy substituted benzoic acid derivatives II - Forming liquid crystalline cubic phases -, Chem. Lett., (5), pp454-455 (2001).
- 3) Nishikawa E., Yamamoto J. and Yokoyama H.: A polycatenar mesogen with a perfluorinate moiety showing continuous phase transformation between a smectic A phase and a structured, fluid, optically isotropic phase, Chem. Comm., 3, pp420-421 (2003).
- 4) Nishikawa E., Yamamoto J. and Yokoyama H.: Nano-segregation structures of hydrogen-bonded mesogens with perfluorinated moieties: cubic phase formation and first order smectic A to smectic C phase transition, Liq. Cryst., 30, pp.785-798 (2003).
- 5) Nishikawa, E., Yamamoto, J. and Yokoyama, H.: Polycatenar mesogens with a perfluorinated moiety showing, liquid crystalline polymorphism and, microscopically, continuous smectic A to structured, fluid, optically isotropic liquid phase, J. Mater. Chem., 13, pp.1887-1893 (2003).
- 6) Etsushi Nishikawa , Jun Yamamoto , Hiroshi Yokoyama: Polycatenar mesogens with a perfluorinated moiety showing a variety of liquid crystalline polymorphism, Liquid Crystals, 32, pp. 585-598, May 2005