

論文内容要旨 (和文)

平成 14 年度入学 大学院博士後期課程 物質生産工学専攻 材料物理工学講座
学生番号 02522207
氏 名 松田 浩充



(英文の場合は、その和訳を () を付して併記すること。)

論文題目 液晶混合系の相挙動に関する分子論

液晶とは液体が持つ流動性と結晶が持つ配向の秩序性を兼ね備えた状態である。その電気光学的応答は携帯電話、カーナビ、テレビ等のディスプレイに幅広く使用されている。単体の液晶分子では液晶相を形成する温度範囲は狭く、要求される物性を得るためには新たな分子設計を行うか既存の分子を混合することで相転移温度等の諸物性を調整する必要がある。混合は一つの有力な方法であるが、その指針は実験結果に基づいた経験によって与えられる場合が多く、その機構は理論的にはよく知られていないのが実情である。このような背景のもとで混合が液晶の相形成に及ぼす影響について理論的に研究することは、新規の液晶を設計する上で重要な意味を持つ。本論文では、混合の効果が液晶の相挙動に与える影響について検討した。

本論文の独創的な点は分子論的な立場から混合が液晶の相形成に与える影響を記述することで次世代液晶の開発を目指すということである。また、対称破りポテンシャルの方法を用いたことが本論文の特徴である。これは液晶の配向に関する秩序を解析するために、秩序度に共役な「対称破りポテンシャル」を仮想的に系に加えて自由エネルギーを算出する方法である。この方法を用いることによってこれまでの研究と違い、バルクの系についてより簡便に同分子間相互作用や異分子間相互作用を取り入れることが可能となった。これら混合系の相挙動を、分子間相互作用としては剛体斥力相互作用のみを考慮して、平均場近似の範囲で分子論的に解析した。

本論文は、全五章から構成されている。主な内容と明らかになった点を以下に示す。

第一章「序論」では、研究の対象となる液晶相の状態、これまでの理論的研究について述べ、本研究に至った背景、動機、目的を述べた。

第二章「棒状分子-円板状分子混合系液晶の分子論」では形状が極端に異なる棒状分子と円板状分子の混合系が液晶状態においてどのような相挙動を示すかについて述べた。この混合系において、いかなる場合においてもそれぞれの分子の配向方向が異なる二軸性ネマチック相は出現しないことが見いだされた。この混合系では、光学的に正である棒状分子が形成するネマチック相と、負である円板状分子が形成するネマチック相の二つの一軸性ネマチック相が安定状態であることを見いだした。これら二つの

一軸性ネマチック相は二相共存領域を経て一次相転移をするという結論を得た。

第三章「外場印加時における混合液晶の相挙動」では棒状分子-棒状分子混合系に電場等の外場を印加することで系の相挙動がどのように変化していくかを述べた。この研究により極端に長い棒状分子と極端に短い棒状分子の混合系について圧力一定のもとで外場対組成比の相図を作成した場合、(I)外場誘起の臨界点が現れる圧力領域、(II)等方相+ネマチック相共存領域からネマチック相+ネマチック相共存領域へと連続的に変化する圧力領域、(III)外場に起因した等方相+ネマチック相+ネマチック相の三重点が現れる圧力領域の三つのタイプが存在することを見出した。本研究において液晶の混合の仕方と外場の与え方によって臨界現象を制御できることが示唆できた。

第四章「コレステリック相を形成するキラル分子 R 体-S 体液晶混合系の分子論」ではコレステリック相を形成する液晶分子について、化学的な組成は同じでも幾何学的な掌性(キラリティー)の異なる分子、すなわち光学異性体を混合させたときに分子のキラリティーが相挙動に与える影響について述べた。この研究から分子のキラリティーが強い場合、高圧状態において右巻き螺旋のコレステリック相と左巻き螺旋のコレステリック相の二相共存領域が出現することを見出した。本研究において剛体斥力相互作用のみを想定した場合においてもキラリティー由来の相分離が生じることを見出した。

第五章「総括」では二章、三章、四章を総合的にとらえ、混合が液晶の相挙動に与える影響について述べ、本論文がこれからの液晶の発展にどのように寄与するかを述べた。

本論文にて次世代液晶の分子設計への指針を与えるために混合が液晶の相挙動に与える影響についての分子レベルからの理論的なアプローチを行ってきた。本論文の研究結果から混合の相挙動に剛体斥力相互作用が与える影響は実に多彩で複雑なものであることがわかる。しかしながら、本論文から見いだされた新たな知見は液晶物性の向上のための新規の液晶開発へ大きく貢献するものといえる。

実際の液晶混合系の相挙動は、液晶分子の炭化水素鎖のフレキシビリティの役割や異分子間相互作用、分子の大きさ、形状の異方性等が複雑に依存して現れるものである。本論文にて用いた対称破りポテンシャルの方法、及び、モデルを発展させることがこうした複雑な相関するものを簡便な記述につながることを示すことができた。

論文内容要旨 (英文)

平成 14 年度入学 大学院博士後期課程 物質生産工学専攻 材料物理工学講座
学生番号 02522207
氏名 松田 浩充



論文題目 **Molecular Theory on Phase Behavior for Liquid Crystalline Mixtures**

Liquid crystal has orientational order of crystal and mobility of isotropic liquid. Liquid crystalline mixtures have been actively used for applications, such as display devices. However, phase behavior in liquid crystalline mixtures is not well understood theoretically.

In this thesis, behavior of liquid crystalline mixtures is studied using molecular theory with only hard-core molecular interaction. Originality of this thesis is to use the symmetry breaking potential method with the mean field theory for mixtures of liquid crystals.

This thesis consists of 5 chapters, and the main contents in the chapters and new major findings are briefly written as follows.

Chapter 1 was devoted to summarize liquid crystals and previous theoretical studies. Background, motivations and purposes of this thesis were described.

Chapter 2 described isotropic(Iso)-nematic(N) phase transitions in hard rod-disc mixtures. Results indicated that biaxial nematic phase is always less stable than two types of uniaxial nematic phases: rod-like optically positive one and disc-like negative one. Biaxial nematic phase never appears in the rod-disc mixtures without attractive intermolecular forces.

Chapter 3 expounded phase behaviors in mixtures of hard rods in an external field. Three types appear for phase diagrams in the external field-composition plane depending on pressure. One type shows critical point, another shows that Iso+N co-existence region continuously change to N+N co-existence region, and the other shows Iso+N+N triple point by an external field. Our present results suggest controls of critical field and triple point by mixing liquid crystals.

Chapter 4 dealt with phase behavior given by molecular chirality in mixture system. In the high pressure region, phase separation between right handed helix and left handed helix cholesteric phases occurs if molecular chirality is strong. We find that phase separation which originates from molecular chirality appears for hard-core potential model.

Chapter 5 described new findings given by this thesis and how they contribute to future development of liquid crystals.

In this thesis, phase behavior of liquid crystalline mixtures was investigated using molecular theory with symmetry breaking potential method for future development of liquid crystals. Though liquid crystalline mixtures are complex systems depending on the molecular shape and interactions between molecules, this thesis provides useful tools to understand behaviors of liquid crystalline mixtures .

学位論文の審査及び最終試験の結果の要旨

平成17年 2月10日

理工学研究科長 殿

課程博士論文審査委員会

主査 池田 進

副査 森田 博昭

副査 米竹 孝一郎

副査 香田 智則



学位論文の審査及び最終試験の結果を下記のとおり報告します。

記

1. 論文申請者

専攻名 物質生産工学 専攻
氏名 松田 浩充

2. 論文題目 (外国語の場合は, その和訳を併記すること。)

..... 液晶混合系の相挙動に関する分子論

3. 学位論文公聴会

開催日 平成 17年 1月 28日
場 所 山形大学工学部6号館T教室

4. 審査年月日

論文審査 平成 17年 1月 26日 ~ 平成 17年 1月 28日
最終試験 平成 17年 1月 31日 ~ 平成 17年 2月 10日

5. 学位論文の審査及び最終試験の結果 (「合格」・「不合格」で記入すること。)

(1) 学位論文審査 合格

(2) 最終試験 合格

6. 学位論文の審査結果の要旨 (1,200字程度)

別紙のとおり

7. 最終試験の結果の要旨

別紙のとおり

別紙

専攻名	物質生産工学	氏名	松田 浩充
学位論文の審査結果の要旨			
<p>液晶材料は、テレビ、携帯電話やカーナビゲーションシステムの表示、コンピューターのディスプレイなど、我々の身近にある様々な場面で表示装置に使用されている。液晶の実用に際しては、冬の氷点下から真夏の炎天下までの幅広い温度範囲で、安定した液晶として存在できることが要求される。液晶相を示す分子は数多く報告されているが、この条件を満たすものは、単体の液晶分子としては存在しない。混合物にして初めて、実用に見合う温度範囲に対応できるものが可能となる。このように、液晶材料にとって混合とは、基本的で、実用のために必須となる技術である。にもかかわらず、液晶の材料設計のための混合手法は、経験によって築き上げられたものが中心で、混合が液晶材料に与える効果の詳細は、明らかになっていない部分も多い。</p> <p>本論文は、このような背景の下で行った、液晶の混合の理論的な研究に関するものである。簡単なモデル分子を用いて、理論的に液晶が混合によって受ける影響を明らかにすることが、液晶の材料設計の発展につながるという立場のもとで書かれた論文である。全体で5章の構成になっており、第1章は序論として、本論文の背景を述べている。第2章から第4章では、それぞれ異なる液晶混合系の振る舞いを議論するためにモデル分子系を設定し、対称破りポテンシャルという統計力学的な手法による相挙動の解析を展開している。</p> <p>第2章「棒状分子・円盤状分子液晶混合系の分子論」では、円盤状分子と棒状分子の混合の問題を取り扱っている。円盤状分子も棒状分子もそれ自身は一軸性のものを取り扱っている。お互いが一軸性の分子の混合系で、2軸性の秩序が出現するかどうか、一つの焦点となる。この論文では、そうした2軸性の秩序は準安定としてしか存在しないと結論している。</p> <p>第3章「外場印加時における混合液晶の相挙動」では、2種類の棒状液晶分子の混合系に電場や磁場などの外場を加えた場合の挙動について議論している。この系について、圧力、外場、組成比をパラメータとした相図を作成した結果、外場誘起の臨界点、外場に起因した三重点が存在することを予想している。また、外場誘起の相分離を利用した、新しいタイプのディスプレイの提案も行っている。</p> <p>第4章「コレステリック相を形成するキラル分子R体-S体液晶混合系の分子論」では、化学的な組成は同じだが、掌性の異なる液晶分子の混合系の問題を取り扱っている。この研究では、圧力と組成比をパラメータとした相図を理論的に作成することで、高圧領域に、右巻き螺旋のコレステリック相と左巻き螺旋のコレステリック相の二相共存領域が出現することを見出している。また、各々の掌性の分子を分離する場合には、圧力が重要な因子になることを結論付けている。</p> <p>第5章は、全体を総括している。なお、本論文は、液晶という現代の表示を支える基幹となる材料について、基礎学問としての理解、および、新たな展開への提案を示していると判断できる。また、本論文に関する投稿論文数、国内学会・国際学会における発表回数も規定を満たしており、論文公聴会の内容も十分であったことから、本論文を学位論文として合格と判定した。</p>			
最終試験の結果の要旨			
<p>申請者の論文に関する議論、および、本論文に記された内容以外に、申請者が修学期間中に行った研究に関する議論を通じて、申請者の学識、研究能力、研究計画能力、および、研究指導能力に関する試験を行った。その結果、本申請者の能力は、博士（工学）の称号を得るのに十分であると判断し、よって、学位授与に関する最終試験に合格と判定した。</p>			