

最先端・次世代研究開発支援プログラム
事後評価書

研究課題名	キラル液晶の動的交差相関：機構解明とエネルギー変換デバイスの作製
研究機関・部局・職名	早稲田大学・理工学術院・教授
氏名	多辺 由佳

【研究目的】

液晶は表示素子・光学位相素子・センサー等に広く用いられているが、これらはいずれも熱平衡状態にある液晶の静的構造を利用したものである。本研究では、異方性流体としての液晶の特長がより発揮される非平衡構造に注目し、その理解と応用を目的とするもので、以下の2点を具体的な研究目標としている。

(1) 鏡面对称性キラル液晶の動的交差相関のしくみを解明し、これを制御することによって、廃エネルギーである熱や物質の拡散流を液晶の回転運動に変換するキラル液晶デバイスを試作すること。

(2) (1)の研究目的達成のため、①キラル液晶の動的交差相関メカニズムの解明、②キラル液晶デバイスのプロトタイプを試作、③キラル液晶の一方向回転を熱・物質流に変換する逆過程の検証、の3つを研究の柱とする。鏡面对称性の破れた液晶に現れる特異な非平衡定常構造を理解・制御し、最終的にデバイス応用を目指す。

【総合評価】

<input type="checkbox"/>	特に優れた成果が得られている
<input type="checkbox"/>	優れた成果が得られている
<input type="radio"/>	一定の成果が得られている
<input type="checkbox"/>	十分な成果が得られていない

【所見】

① 総合所見

本研究は、キラル液晶分子の動的交差相関の仕組みを解明することにより、熱や物質の拡散による流れと液晶分子の回転運動を相互に変換をする液晶デバイスを試作することを目的としている。

熱流から液晶分子の回転運動への変換に関しては、理論的解析に基づく要因究明は進み熱流による液晶分子の高速回転を実現し、この分子回転から流動に至る機構を示唆する検証を得て、特許出願にまで至ったことは評価できる。しかし、自走するベシクルの作製にはイオン透過材料の見直しが必要であること、計画された分子運動の動的挙動を実証する計測技術については時分割偏光解消計測への高感度物質の

選択や合成、キラル液晶の瞬間凍結による電子顕微鏡観察などにハードルの高い課題があり、流動現象の確認と制御からこれを引き起こす分子運動の動的挙動の解明に至るには、高感度物質の選択や合成など、より一層の工夫と努力の集中が必要である。また、液晶分子の回転運動から熱や物質流への逆変換に関しては、その兆候を得てはいるものの、研究終了時までには残念ながら実現できていない。

一方、本研究課題は、(a)動的交差相間の原理と法則の解明、という理学的な側面と、(b)廃エネルギーを再利用するデバイス開発、という工学的な側面をもつ。成果として出ている内容は、(a)の理学的なものが主で、工学的な(b)、特にデバイスに結びつくものは少ないように見える。たとえば、企業との共同開発を進めている高効率熱駆動液晶フィルムについても回転エネルギーの取り出し方および利用方法について未定のままである。作製されたフィルムの使用用途がはっきりしないというのは、工学的な視点としては、重要な点が欠けていたように見える。

今後は工学的視点を持ち、デバイス開発としての進展を期待したい。

② 目的の達成状況

・所期の目的が

(全て達成された ・ 一部達成された ・ 達成されなかった)

本研究課題の目的は、温度や物質の空間的に緩やかな不均一性を、キラル液晶を用いて利用可能なエネルギーに変換するデバイスを開発することである。その目的は(1)キラル液晶の動的交差相間のしくみの解明、(2)拡散流を回転エネルギーに変換するキラル液晶デバイスの開発、の2つに大別できる。

目的(1)については、分子動力学を補助手段として1分子レベルで液晶の運動を観測し動的交差相間のしくみを解明することを目指している。時間分解偏光解消蛍光実験では、回転に起因する有意なデータを得ることに成功していないが、分子動力学計算では、気体分子の衝突によってキラル液晶分子がキラリティに応じたトルクを受けることを確認すると共に、実験的検証の困難さを予測している。

一方、目的(2)については、拡散流を回転エネルギーに変換するデバイスの開発に関しては、コレステリック液晶滴を分散したセルに温度勾配を印加により生じる熱流によりキラル液晶分子の回転させることに成功し、境界条件等の最適化により、 $100 \text{ rad/sec}/(\text{K/m})$ という変換効率を得ている。(2)の一部である拡散流の透過で回転するキラル液晶薄膜モーターに関する研究では、実験と理論両面からの検討で液晶分子の配向回転と渦という運動モードが、境界条件・液晶の粘弾性・気体透過流量という3つのパラメータで決定されることを明らかにしている。なお、液晶ドメインを埋め込んだ巨大ベンクルの作製や回転運動からポテンシャル勾配を生み出すエネルギー逆変換の検証は、試みているものの顕著な成果には至っていない。

<p>③ 研究の成果</p>
<p>・これまでの研究成果により判明した事実や開発した技術等に先進性・優位性が (<input checked="" type="checkbox"/>ある ・ <input type="checkbox"/>ない)</p>
<p>・ブレイクスルーと呼べるような特筆すべき研究成果が (<input type="checkbox"/>創出された ・ <input checked="" type="checkbox"/>創出されなかった)</p>
<p>・当初の目的の他に得られた成果が (<input checked="" type="checkbox"/>ある ・ <input type="checkbox"/>ない)</p>
<p>ナノ領域の動的挙動がマクロ現象に繋がる動的規序を解明する画期的な挑戦である。①キラル液晶の動的交差相間のメカニズムについて、流体力学的スケールにおける現象論で従来理論を修正するとともに、未解決な点を解明した。具体的には、交差相間により駆動される運動が、液晶の配向運動だけではなく重心運動も駆動すること、さらに、これらを選択的に駆動できることを示した。</p> <p>②動的交差相間の原因が、分子キラリティにあるか、マクロ螺旋にあるかという以前からの論争に対し、実験的にどちらもその原因になり得ることを示した。その結果に基づき、膜圧の変化で液晶の回転方向を制御する方法を提案している。</p> <p>③熱流下のコレステリック相—等方相二相共存状態中の等方相中のコレステリック液晶滴において、液滴が回転する運動と液滴内の配向の回転の2種類があることを発見した。この運動のタイプは液晶滴内の螺旋軸の向きで決定され、その制御方法も考案した。配向の回転では高い効率を得ることができた。</p> <p>このように、研究成果は挙げているが、残念ながらブレイクスルーとなるような成果には届いていないと考える。</p> <p>以上、本研究課題は、キラル液晶系の研究であり、液晶は使用できる材料のスペクトルが広く、構成成分の比率を変えることで多様な液晶が作成できる。多様な構造を相転移的に形成する多形をその構成成分と温度、圧力、イオンなどの因子から決定する理論は知られていない。その中で、この研究はキラル液晶が環境因子からどのような力を受けるかについて、有力な知見を与えており、これは、やや目的に合致はするものの、当初目的の他に得られた成果として特筆すべきと考えてよい。</p> <p>熱流下のコレステリック相—等方相二相共存状態中の等方相中のコレステリック液晶滴において、液晶滴には規則正しいマイクログローブが刻まれており、液晶滴が回転するとともにこのグローブも回転することを発見している。これは、今後色々な応用が期待できる発見である。</p>

<p>④ 研究成果の効果</p>
<p>・研究成果は、関連する研究分野への波及効果が (<input checked="" type="checkbox"/>見込まれる ・ <input type="checkbox"/>見込まれない)</p>
<p>・社会的・経済的な課題の解決への波及効果が (<input type="checkbox"/>見込まれる ・ <input checked="" type="checkbox"/>見込まれない)</p>
<p>本研究課題での成果は、先行研究のない独創的なものでありこの実証と機構解明の試みは、成功の是非に関わらずナノ領域の分子などの動的挙動から、マクロ領域の機能発現に至る、グリーン・バイオ・ものづくりなどあらゆる分野の知見の拡充に資することが期待される。</p>

特に、液晶の粘性・弾性・配向ピッチ・熱伝導率といったマクロ（流体力学的な）なパラメータやガスの透過量、試料の境界条件といったマクロな物理量とキラル液晶の運動の関係といった1分子レベルではない流体力学的なスケールでの現象論的なアプローチに基づく実験結果の解析は、非平衡熱力学の発展に寄与することが期待できる。

民間会社と共同で高効率熱駆動液晶フィルムの開発を進めていると報告されているが、回転エネルギーの取り出し方および利用方法についてもアイデアがない状態である。この取り出し方と利用方法が社会的・経済的課題解決には重要と考えられるものの、現状では、残念ながら、開発されたフィルムの応用は明確ではなく、それらに対する貢献は見込めない状況にある。

⑤ 研究実施マネジメントの状況

・適切なマネジメントが（行われた ・ 行われなかった）

東日本大震災関連のトラブルで、装置の購入・ポスドクの雇用等に遅れが生じ、その後も人員確保に苦心している様子が見え始める。人員確保については、多少見通しの甘さがあり、研究の進捗が遅れる主要因になっているとはいえ、問題が生じた後の対応はしっかりしており、マネジメント全体が不適切といえるほどの問題は出ていないと考える。

原著論文6報、会議発表42件、図書1件は、原著論文の公表が、やや少ないという印象をもつものの概ね適切と判断できる。一方、知的所有権の取得は、出願1件に留まり、この分野としては、より積極的な取り組みが望まれる。

国民との科学・技術対話については、これから国の将来を担う高校生との対話は大変重要であり、研究期間終了後も、機会を逃さずかつ工夫を凝らして継続的に高校生との対話を続け、多くの高校生に液晶科学のすばらしさと可能性を伝えてほしい。