

第5章 欠陥構造

5.1 欠陥

液体や気体には科学的な意味での欠陥構造は存在しない。もちろん、液体や気体には成分や密度の揺らぎがあり、それらは平均的な値からは異なる状態ではあるのだけれど、それらは欠陥とは定義できない存在なのである。密度の揺らぎが欠陥とは呼びがたいのは、それはある時間後には消失してしまうものであるのが一つの理由ではあるが、液体が構造をそのままに固化したガラスを考えても、密度や成分の揺らぎは欠陥とは呼びがたい物であることがわかる。

ガラスの中で、特に均一性が要求されるものに光学ガラスがある。光学ガラスはレンズやプリズムの原料となるガラスで、密度や成分の揺らぎがあると屈折率に変化が生じるために光学系の性能が低下してしまう。光学ガラス製造時に攪拌が悪かったりすると、内部に不均一が生じる。このような状態が内包されたガラスを平面に研磨し透過像を観察すると、画像が歪むことから、内部に不均一があることがわかる。このような状態は、脈理と呼ばれ、工学的な意味で欠陥である。工学的な意味でと記したのは、どの程度の屈折率の揺らぎまで許容できるかは光学硝子の用途により異なるもので、脈理というのは決して一意的に定義出来る物ではないからである。光学硝子の欠陥には脈理の他に気泡の混入がある。この場合も、気泡の許容サイズと密度は工学的に定まるものであり、定義には恣意性がある。

一方、結晶において、本来原子があるべきところの原子が欠如しているようなものは、一意的に欠陥として定義できる。何故なら、結晶の並進対称性より、格子点のところに原子は存在すべきであり、それが欠如しているのは、結晶の並進対称性の明白な乱れであるからである。気泡のサイズや、脈理の程度が連続的に変化するのに対して、格子点の欠如は不連続な変化であり、その有無の判断に恣意性はない。

欠陥とは制限された対称性の乱れとして発現するものであり、任意の回転・並進対称性を持っている系では、この意味における欠陥は存在しないのである。

5.1.1 点欠陥・線欠陥・面欠陥

格子点における原子の欠如は、その格子点に局在したものであり、点欠陥と呼ばれる欠陥の一種である。欠陥には、この他、線欠陥や面欠陥がある。

液晶の中で、N層やSmA,Cなど液体的な秩序を有する相には点欠陥は存在しない。確かにSmAには1次元的な秩序構造は存在するのだけれど、2次元的には液体である層の内部から分子を1ヶ引き抜いたとしても、それは液体状態の乱れであって、点欠陥とはなりえない。一方、柔軟性結晶的なSm相では点欠陥は原理的には存在しうる。ただし、これまでのところ、これらのSm相における点欠陥を扱った論文にお目にかかったことはない。ボンダーオーダー相における点欠陥については、項を改めて議論する。

面欠陥は端的に言えば、結晶軸の異なる結晶の界面である。これらの界面をはさんで結晶軸の方位に整合性がないために、格子の乱れた状態が出現する。界面での格子の状態を子細に検討すれば、面としての乱れがあるというより、後述する線欠陥の集合体として記述する方が正しいのかもしれないが、伝統的に結晶界面は面欠陥として扱われている。

界面の両側で分子の配向方向が異なっても面欠陥になるはずではあるけれども、ネマチック液晶には面欠陥は存在しない（と思う）。これは、配向ベクトルが異なる2つのドメインの合体時に界面で配向ベクトルは連続的に変化して不連続な状態を緩和させてしまうからである。一方、Sm液晶においてはSmAやSmCなどの液体に近い相でも、1次元結晶としての性質故にドメイン（結晶）界面が出現する。

線欠陥には転位・転傾・ディスピレーションの3種類がある。転位は並進対称性、転傾は回転対称性、ディスピレーションは螺旋対称性の乱れである。以下、これら3種の欠陥についての説明を行う。

5.1.2 転位 (Dislocation)

エネルギーについてはあと

5.1.3 転傾 (Disclination)

エネルギーについてはあと

※平面を曲げることもここに入れる。不定形炭素はここで扱って良いだろう。

5.1.4 ディスピレーション (Dispiration)

5.1.5 転位及び転傾のエネルギー

転位や転傾はそれらの欠陥の周囲に配向の乱れを引き起こす。配向が乱れている部分では配向に乱れない状態に比べて弾性エネルギー分だけエネルギー的に高い状態となる。転位や転傾による過剰エネルギーは欠陥よりある程度以上遠方の領域においては弾性理論に基づいて評価できる。欠陥よりある程度以上遠方と記したのは弾性理論はとなりあう粒子間の変位や配向方向変化が小さくて連続体として物質を扱えることを前提とした議論であり、欠陥核周辺で隣り合う分子間の変位や配向方向変化が大きい状態では前提が満たされていないからである。別の言い方をすれば、核付近の大変形領域では歪みと応力に関して非線型項の寄与が無視できなくなっており、線形の復元力近似が成立していないのである。

このため、欠陥による過剰エネルギーを算出する時には、欠陥からある程度以上離れた連続体近似が成立する領域の変形エネルギーを通常の手法により評価し、連続体近似が成立しない欠陥核近傍のエネルギーを別途、核エネルギーとして加えている。ただし、欠陥核近傍の過剰エネルギーの正確な評価手法は確立していない（と思う）。

転位のエネルギー

転位に伴う過剰エネルギーを考えるために、楔型転位とらせん転位について転位に伴う歪みを考えよう。

※ 3次元結晶における転位のエネルギー

らせん

$$E_s = \frac{Gb^2}{4\pi} \ln \frac{R}{r_0}$$

刃状

$$E_e = \frac{Gb^2}{4\pi(1-\nu)} \ln \frac{R}{r_0}$$

※ 層状構造（1次元結晶、あるいはS m相）における転位のエネルギー

層状構造刃状

$$E = \frac{k_{11}b^2}{2\lambda r_c} + E_c = \frac{k_{11}^{1/2}B^{1/2}b^2}{2r_c} + E_c$$

$$\lambda = (k_{11}/B)^{1/2}$$

らせん

$$u = \frac{b}{2\pi} \tan^{-1} \left(\frac{y}{x} \right)$$

$$E = 0 + E_c$$

刃状転位間の引力と、それによるクラスター集合（ドメイン境界化）

転傾のエネルギー

転傾

$$E = \pi s^2 \ln(R/r_c) + E_c$$

※フォーカルコニックのエネルギー

$$E \cong \pi k_{11}(1 - e^2)p \ln(a/r_c)$$

e : 離心率 p : 周長 a : 長軸の長さ

e は円で 0。それ故円と直線はエネルギー的に不利

両放物線の場合は

$$E \cong \frac{\pi k_{11}}{8} f \left(\frac{R}{f}\right)^4 \ln\left(\frac{R^2}{4fr_c}\right)$$

f : 放物面の焦点距離 R : 試料半径

$$R < 3f$$

で価は少し小さい

5.1.6 ネマチック液晶における欠陥

1 軸性ネマチック液晶における欠陥

各種の線欠陥としての転傾の断面の分子配向の図示 $S = 1$ のみは点に対する分子の方向で状況がことなること。また、その形状は弾性定数で定まること
楔型とねじれ型の図示をなんとかしたい。

偏光顕微鏡下における欠陥の様相

欠陥強度の見分け方プラスとマイナスの区別

線欠陥から点欠陥へのシュリンク

3 次元構造への逃げ

$$E = 3\pi kS = 1$$

$$E = \pi kS = -1$$

2 軸性ネマチック液晶における点欠陥の非存在

5.1.7 Sm 相における欠陥

転位の転傾対への緩和

フォーカルコニック

シェブロン境界

Cダイレクターのシュリーレン

cダイレクターの対称性と許される転傾強度

ボンドオーダー相における欠陥

転傾対、あるいは空格子と過剰格子のペア

5.1.8 液晶における Dispiration

ディスプレイションを発生しうる対称性

第6章 液晶表示装置小史

6.1 RCA研究所における液晶表示の発見

・RCAの状況・本来の目的と発見されたGH効果・DSタイプ・当時の液晶研究と室温液晶への道・何故RCAは液晶を商業化しなかったか

6.2 日本での液晶表示の商業化

・導入した会社 シャープ・日立…・DSからTNへ・TNとCMOSの相性の良さ・日立的立場（あるいは、他の家電が何故、液晶をやらなかったか）・TNのマトリックス化の限界（そのための液晶材料など）

6.3 アクティブマトリックスの勝利への道

・TNの限界を破る手法-・STN・TNの限界を破る手法-アクティブマトリックス・TNの限界を破る手法-強誘電・反強誘電

6.4 アクティブマトリックスの勝利と新規参入

・何故、アクティブマトリックスが物になったのか・誰が、どうして読み違えたのか・新規参入の出現

6.5 経営戦略

・半導体とTFTの進化の同じ部分と違う部分・何故、日本は遅れをとったのか・これからの方向

6.6 競合技術との優劣

・液晶の耐久性の原因・現在のセルにしめるコスト・液晶以外の平面ディスプレイとの比較