

令和 5 年 5 月 17 日現在

機関番号：15501

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2018～2022

課題番号：18K03416

研究課題名(和文)力学系的手法によるキラル液晶の構造の研究

研究課題名(英文)Research on structure of chiral liquid crystals by dynamical system method

研究代表者

西山 高弘(Nishiyama, Takahiro)

山口大学・大学院創成科学研究科・教授

研究者番号：60333241

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 900,000円

研究成果の概要(和文)：力学系の積分曲線すべての集合が、与えられた空間群の対称性をもつようにパラメータを決める際、磁気群を利用する方法が便利であることを示した。そして、その方法をキラルな六角晶の対称性のもとで適用し、数値的に得られた不変トーラスの配置が、キラルスメクチック液晶のブルー相におけるダブルツイストシリンダの配置として過去に提案されたものと類似していることを指摘した。また、立方晶の対称性のもと、不変トーラスが円柱充填6種(そのうち2種はコレステリック液晶のブルー相におけるダブルツイストシリンダの配置に相当)のそれぞれに似た配置をとるためには、どのような磁気群を力学系に適用したら良いかについて明らかにした。

研究成果の学術的意義や社会的意義

結晶学的対称性をもつ力学系の研究は過去にも存在したが、欲しい結晶学対称性や欲しい不変トーラスの配置を実現させるため、磁気群を力学系に適用する方法は、従来には無かった新しいものである。そのアプローチで力学系の積分曲線を用いてキラル液晶中の分子配向をモデル化することについては課題も残ったが、電磁場中の電気力線や磁力線について本研究の手法が適用可能とみられ、今後も研究の価値があると思われる。

研究成果の概要(英文)：Magnetic groups were shown to be useful for determining the parameters in the dynamical system whose set of all integral curves was required to have the symmetry of a space group specified. This was demonstrated in the case of chiral hexagonal symmetry. Then the arrangement of invariant tori numerically obtained were shown to be similar to the arrangement that had been previously proposed for double twist cylinders in a blue phase of a chiral smectic liquid crystals. Moreover, which cubic magnetic group should be applied to a dynamical system was made clear when the set of invariant tori was required to have a similar arrangement to each of the six cubic rod packings (two of which are the same as the arrangements of double twist cylinders in blue phases of cholesteric liquid crystals).

研究分野：応用数学

キーワード：力学系 キラル液晶 ブルー相 ベルトラミ流 不変トーラス 磁気群

## 1. 研究開始当初の背景

液晶とは、異方性をもつ分子が固体結晶中のように向きに規則性をもつ一方、液体中のように流動する物質の一状態のことである。液晶分子の向きの分布は、ダイレクタと呼ばれる、単位ベクトル関数  $\mathbf{n}$  を  $-\mathbf{n}$  と同一視したもので表され、ダイレクタに 3 次元周期的な周期性がある場合、その対称性は空間群で記述される。

キラルな(鏡像体をもつ)液晶の一つであるコレステリック液晶は、その名の由来でもあるコレステリック相から、温度上昇に伴い、青色光を反射するブルー相に転移する。このブルー相には、BP I, BP II, BP III なる 3 つの状態があり、BP I と BP II のダイレクタ  $\mathbf{n}$  は 3 次元周期的で、それぞれ空間群  $I4_132$ ,  $P4_332$  で表される立方晶の対称性をもつことが 1980 年代に実験で確かめられている。更に、これら BP I, BP II において、 $\mathbf{n}$  がどのように配向しているかも 1980 年代に理論的にエネルギーの極小化によって調べられた。その結果、ダブルツイストシリンダと呼ばれる柱状曲面に  $\mathbf{n}$  が螺旋状に巻きついて接し、そのシリンダが丸太小屋の丸太のように積み重なっていると結論付けられた(図 1)。

同じ 1980 年代に流体力学分野において、BP I の  $\mathbf{n}$  と同じ対称性の積分曲線をもつ力学系が詳しく調べられた。それは、非粘性非圧縮性流体の定常流の一つ、Arnold-Beltrami-Childress の流れ(ABC 流)における流線方程式であり、含まれる 3 個のパラメータが等しいとき、その積分曲線すべての集合の空間群は  $I4_132$  である。その積分曲線のうち、6 本を  $x, y, z$  各方向に  $\text{mod } 2\pi$  でプロットしたのが図 2 であり、各曲線は不変トーラスと呼ばれるチューブ状の曲面に螺旋状に巻きついている。図 1 と見比べれば、不変トーラスが(その湾曲を別にならば) BP I のダブルツイストシリンダと同様に並んでいることがわかる。

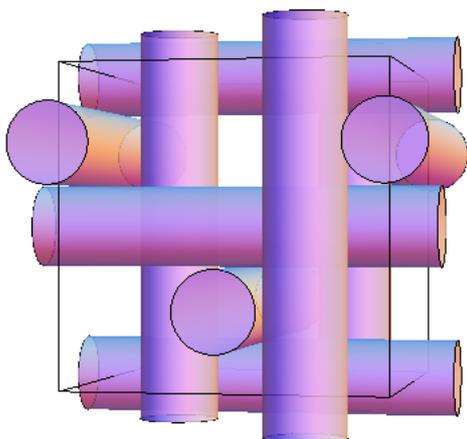


図 1: BP I のダブルツイストシリンダ

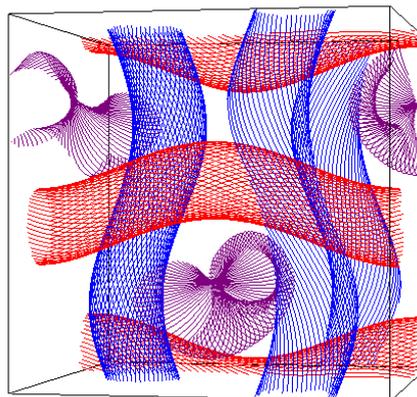


図 2: ABC 流の不変トーラス

## 2. 研究の目的

図 1 と図 2 の類似性について、過去に詳しく調べた文献は無いようである。その類似性はどこから来るのか、あるいは ABC 流の流線方程式のような自励系の力学系の不変トーラスを用い、キラルな液晶のシリンダ構造をモデリングできないか、調べるのが本研究の当初の目的であった。そして実際に、力学系が立方晶の対称性をもつ場合を調べた。その後、図 1 のシリンダ配置は、結晶学や化学合成の分野で知られている円柱充填のうち、立方晶の対称性をもつもの 6 種(キラルな場合の鏡像一対を 2 種と数えれば 9 種)の一つ、 $\Pi$  型( $-\Pi$  型)充填であることを知った。そこで、不変トーラスが円柱充填それぞれの配置をとるのはどのような場合か、立方晶の対称性をもつ力学系について考察することを新たな目的として追加した。

## 3. 研究の方法

成分が三角関数で表され、 $x, y, z$  方向に周期的なソレノイダル(div-free)なベクトル場  $V(x,y,z)$  を考える。キラルな不変トーラスの配置を考えるときは、 $V(x,y,z)$  としてベルトラミ流(ABC 流を一例とする  $V$  と  $\text{rot } V$  が平行である流れ)を用いる。また、キラルでない(アキラルな)不変トーラスの配置を考えるときは、ベルトラミ流とその鏡像の和で表されるソレノイダルなベクトル

場を用いる。研究の手順としては、まず自励系の力学系  $(dx/dt, dy/dt, dz/dt)=V(x,y,z)$  に対する積分曲線  $(x(t), y(t), z(t))$  の集合が、与えられた空間群(Gとする)の対称性をもつよう、 $V(x,y,z)$ の各成分に含まれる三角関数の係数を定める。次に、様々な初期値  $(x(0), y(0), z(0))$  に対し、積分曲線を数値的に求めて単位胞を法にして描き、不変トーラスに巻き付くものを探す。そして、そのときの初期値  $(x(0), y(0), z(0))$  と G-等価な点を新たな初期値として(G-等価な)不変トーラスを描く。

#### 4. 研究成果

力学系  $(dx/dt, dy/dt, dz/dt)=V(x,y,z)$  の積分曲線すべての集合が、与えられた空間群の対称性をもつように  $V(x,y,z)$ の中の定数を決める際、力学系自体の空間群を考えるよりも、 $V(x,y,z)$ の磁気群(空間群の各要素に対称性・反対称性を付加したもの)を考えると容易であることに気付いた。そして、実際にその考え方をキラルな六方晶系空間群の対称性の場合に適用し、様々な不変トーラスを得た[1]。図3はそのうちの一部であり、その配置は、過去の文献にてキラルスメクチック液晶のブルー相におけるダブルツイストシリンダの配置として提案されていたものと似ている。

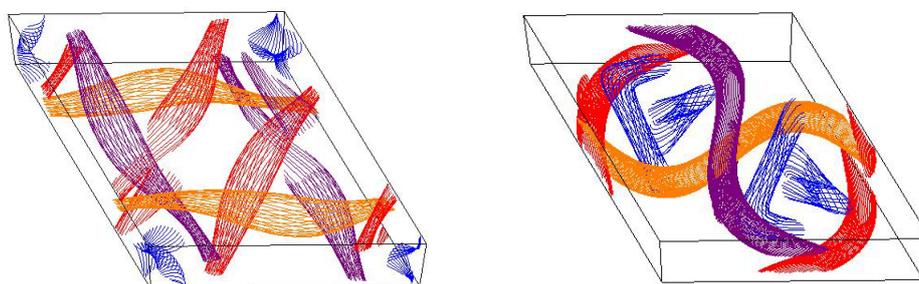


図3: キラルな六方晶の対称性をもつ力学系の不変トーラスの例

次に、力学系  $(dx/dt, dy/dt, dz/dt)=V(x,y,z)$  の不変トーラスが立方晶系の円柱充填6種、すなわち  $\Pi$ 型,  $\Pi^*$ 型,  $\Gamma$ 型,  $\Sigma$ 型,  $\Sigma^*$ 型,  $\Omega$ 型(あるいはキラルな  $\Pi$ 型,  $\Sigma$ 型,  $\Omega$ 型を鏡像の対  $+\Pi$ ,  $-\Pi$ ,  $+\Sigma$ ,  $-\Sigma$ ,  $+\Omega$ ,  $-\Omega$  とした計9種)の配置それぞれをとるためには、 $V(x,y,z)$ にどのような対称性・反対称性が必要かを、不変トーラスの中心軸が直線であるという仮定のもと、磁気群を用いて明らかにした。そして、その結果を用い、実際に円柱充填の配置をした不変トーラスをもつ  $V(x,y,z)$ の具体例を見出し(図4)、論文[2]にて発表した。

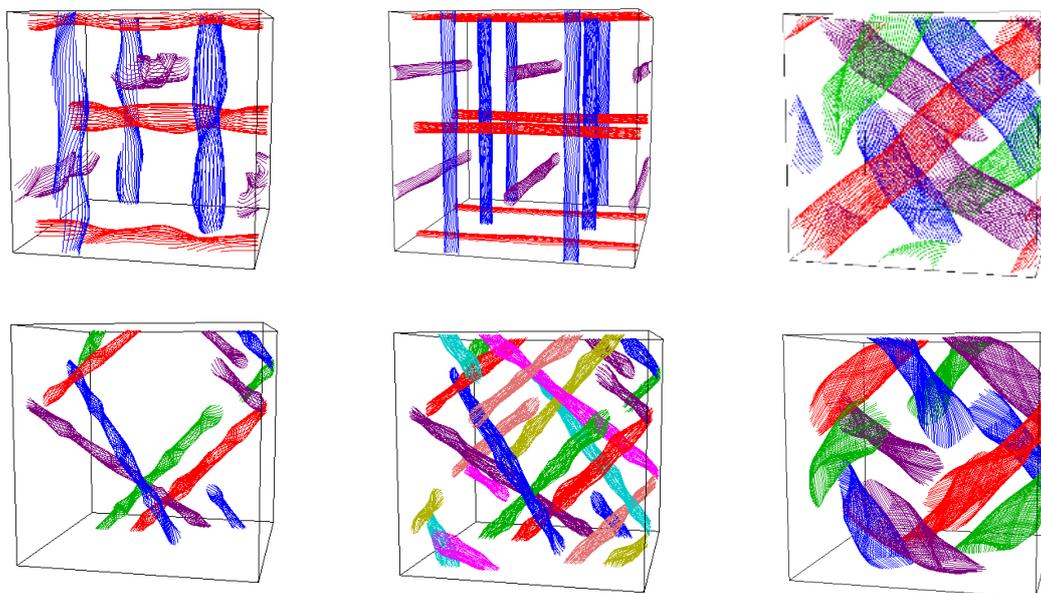


図4: 円柱充填に似た配置をとる不変トーラス。上段: 左から順に  $+\Pi$ ,  $\Pi^*$ ,  $\Gamma$ 型。下段: 左から順に  $+\Sigma$ ,  $\Sigma^*$ ,  $+\Omega$ 型。

また、研究の副産物として、積分曲線群の空間群が  $I4_132$  である力学系において、複数のループ状の不変トーラスが互いに絡み合っ形成する鎖状構造を見出した(図 5).

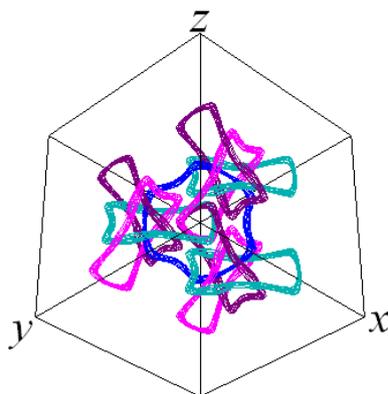


図 5 : ループ状の不変トーラスが形成する鎖状構造

【結論】 本研究課題の主な成果は、

- 力学系の積分曲線すべての集合が、与えられた空間群の対称性をもつように、力学系に含まれるパラメータを定める際、磁気群を用いる方法を提案したこと。
- その磁気群を用いる方法を六方晶の対称性のもと実演し、キラルスメクチック液晶のブルー相におけるダブルツイストシリンダの配置として過去に提案されたものと似た配置をとる不変トーラスを数値的に得たこと。
- 不変トーラスが円柱充填に似た配置をとるためには、どのような磁気群を力学系に適用したら良いか、不変トーラスの中心軸が直線であるという仮定のもと、立方晶の場合に明らかにしたこと。
- 鎖状構造をなすループ状の不変トーラスを見出したこと。

と言える。図 1(BPI のダブルツイストシリンダ)と図 2(ABC 流の不変トーラス)の類似性は、両者の空間群が  $I4_132$  であることと上記の成果を合わせて考えると、ごく自然なものとして理解できる。ただ、ダブルツイストシリンダの外側におけるダイレクタ場には、半整数の回転数をもつ線欠陥が存在し、その分布を力学系の積分曲線で記述するのは容易でない。その難しさを克服するためには工夫が必要と考えられる。

【参考文献】

[1] T. Nishiyama, Crystallography of three-dimensional fluid flows with chirality in hexagonal cases, Acta Crystallogr., Vol. A75, (2019) pp. 798-813.

[2] T. Nishiyama, Rod-packing arrangements of invariant tori in solenoidal vector fields with cubic symmetries, J. Math. Chem., Vol. 60, (2022) pp. 1163-1199.

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計2件（うち査読付論文 2件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 Takahiro Nishiyama	4. 巻 60
2. 論文標題 Rod-packing arrangements of invariant tori in solenoidal vector fields with cubic symmetries	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Mathematical Chemistry	6. 最初と最後の頁 1163-1199
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1007/s10910-022-01349-4	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

1. 著者名 Takahiro Nishiyama	4. 巻 75
2. 論文標題 Crystallography of three-dimensional fluid flows with chirality in hexagonal cases	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Acta Crystallographica Section A	6. 最初と最後の頁 798-813
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1107/S205327331901146X	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計4件（うち招待講演 0件/うち国際学会 0件）

1. 発表者名 西山高弘
2. 発表標題 立方晶の対称性をもつベクトル場におけるダブルツイスト構造・rod packing の観点から
3. 学会等名 日本液晶学会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 西山高弘
2. 発表標題 3次元周期的な流れの結晶学
3. 学会等名 第65回理論応用力学講演会・第22回土木学会応用力学シンポジウム
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 西山高弘
2. 発表標題 キラル液晶のシリンダ構造に関する常微分方程式を用いた考察-その3-六方晶の場合
3. 学会等名 日本液晶学会 討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 西山高弘
2. 発表標題 キラル液晶のシリンダ構造に関する常微分方程式を用いた考察 - その2 - 磁気群の応用
3. 学会等名 日本液晶学会
4. 発表年 2018年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関