

令和 3 年 6 月 17 日現在

機関番号：17104

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2018～2020

課題番号：18K03566

研究課題名(和文) 捩れと曲げ歪みをもつ液晶相の理論的研究

研究課題名(英文) Theoretical studies of twist-bend liquid crystalline phases

研究代表者

松山 明彦 (Matsuyama, Akihiko)

九州工業大学・大学院情報工学研究院・教授

研究者番号：60252342

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,400,000円

研究成果の概要(和文)：3年間の研究では、バナナ型分子が作る、ねじれと曲げ変形を持つ新規な液晶相であるツイストベンドネマチック(TBN)相についての理論を構築し、温度とバナナ型分子の曲げ角度に依存したさまざまな液晶相を理論的に予測した。ネマチックダイレクターと捩れることによる局所的な外場(電場)のカップリングによって、TBN相がネマチック相の低温側に現れることや、バナナ型分子の混合系では、濃度に依存してネマチック相からTBN相に相転移することなどを見つけた。本研究により、多くの実験で観測されている現象を定性的に説明できた。キラルカップリングパラメータを導入し、これまでの実験を説明できたことは大きな成果である。

研究成果の学術的意義や社会的意義

3年間の研究では、バナナ型分子が作る、ねじれと曲げ変形を持つ新規な液晶相であるツイストベンドネマチック(TBN)相についての理論を構築し、温度とバナナ型分子の曲げ角度に依存したさまざまな液晶相を理論的に予測した。ネマチックダイレクターと捩れることによる局所的な外場(電場)のカップリングによって、TBN相がネマチック相の低温側に現れることや、バナナ型分子の混合系では、濃度に依存してネマチック相からTBN相に相転移することなどを理論的に示すことができたことは、学術的意味は大きい。

研究成果の概要(英文)：In the three-year study, the theory of the twisted nematic (TBN) phase, which is a novel liquid crystal phase with a banana molecule, which has a torsional molecule, and the bending angle of the bannered molecule, was constructed. Various liquid crystal phases were theoretically predicted. The coupling of the local outer field (electric field) by twisting with the nematic directors (electric fields) appears on the low temperature side of the nematic phase, and in the mixed system of the banana molecule, the nematic dependence on the concentration The theoretical factors can be shown to the TBN phase, and the scientific meaning is large.

研究分野：ソフトマター物理

キーワード：液晶 ネマチック相 相転移 物性論

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

#### 1. 研究開始当初の背景

2013年、アメリカのケント大学液晶研究所のグループによって、バナナ型分子(棒状分子をV字型に曲げた分子)が積み重なることによって、捻れ変形と曲げ変形の両方の歪みを持つ液晶相が観測された。この液晶相をツイスト・ベンドネマチック(NTB)相とよぶ。しかしながら、NTB相の基礎物性の理解はまだ始まったばかりであった。

#### 2. 研究の目的

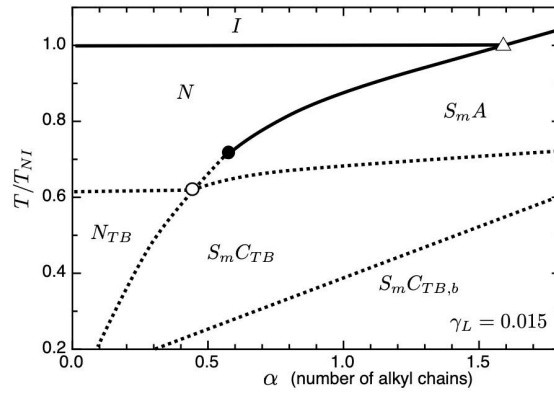
(1) 捻れと曲げ歪みを持つ安定なNTB相やSmC\*相を作るためのバナナ型分子の曲げ角度依存性(2) 捻れと曲げ歪みを持つ液晶相と他の液晶相への相転移、について解明することである。この問いに答えるために、本研究ではバナナ型分子の曲げ角度に依存した分子間相互作用を考慮に入れ、温度・濃度・外場(電場や磁場など)に依存した捻れと曲げの歪みを持つNTB相やSmC\*相の平均場理論を構築し、様々な新規な液晶相転移や相分離を探索する。このようなバナナ型分子の曲げ角度を取り入れた分子場理論は、新しい研究課題であり、光学分野や機能性材料分野へのイノベーションの基礎的知見を提供することができ、学術的創造性は極めて高い。

#### 3. 研究の方法

液晶の弾性理論では、ダイレクターの空間変化を考慮に入れることで、弾性エネルギーを最小にするように相構造の安定性を議論している。バナナ型分子の曲げ角度を考慮に入れ、温度や濃度に依存した相安定性や相転移を記述することは難しい。一方、分子論的観点からは、分子間相互作用を考慮に入れた統計力学的理論が相転移を議論するには必要である。ネマチック相やスメクチックA相の平均場理論としてマイヤー・ザウペ理論が有名であるが、捻れと曲げ歪みを持つNTB相やSmC\*相の分子場理論による研究は少なく、本研究の平均場理論による研究には独創性がある。さらに、このような平均場理論を構築することで今後様々な液晶複合系・混合系に応用が可能である。

#### 4. 研究成果

3年間の研究では、バナナ型分子が作るねじれと曲げ変形を持つ新規な液晶相であるツイストベンドネマチック(NTB)相についての理論を構築し、温度とバナナ型分子の曲げ角度に依存したさまざまな液晶相を理論的に予測した。ネマチックタダイレクターと捻れることによる局所的な外場(電場)のカップリングによって、NTB相がネマチック相の低温側に現れることや、バナナ型分子の混合系では、濃度に依存してネマチック相からNTB相に相転移することなどを見つけた。本研究により、多くの実験で観測されている現象を定性的に説明できた。また、ねじれが右巻きから左巻きに変化する螺旋反転についても理論を構築し、実験との比較も行なった。螺旋反転の重要なパラメータとして、キラルカップリングパラメータを導入し、これまでの実験を説明できたことは大きな成果である。



さらに、最終年度には、層状のスメクチック相がつくるツイストバンドネマチック相 (SmCTB)に理論を拡張し、様々な相転移を予測した。実験的に観測されている結果と一部は定性的に一致したが、今後更なる理論の改良は必要である。この結果は、緊急性のある研究結果であり、Phys. Rev. E (Rapid Communication) に掲載された。図は研究結果の一例である。横軸が液晶分子のサイズ( ), 縦軸が温度を示す。パラメータ  $\gamma_L$  が小さいところでは、温度の低下につれて、等方相からネマチック相(N)さらに NTB 相に相転移するが、 $\alpha=1$  あたりでは、N 相の低温側でスメクチック A 相(SmA)やツイストバンドスメクチック C 相(SmCTB)に相転移することを示している。定性的に実験を再現できているが、多くの改良点も今後必要である。

また、バナナ型分子の、温度と曲げ角に依存した、等方相、ネマチック相、2 軸ネマチック相についての理論を構築し相図を計算した。理論では新規な 3 つのネマチック相を提案したが、これについては今後の実験が待たれるところである。

3 年間の研究中には、液晶分子間の水素結合による会合現象によって NTB 相が発現する実験の報告もあった。今後、液晶の会合現象を考慮した理論的研究への展開を考えることも重要である。

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計12件（うち査読付論文 12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 Akihiko Matsuyama	4. 巻 46
2. 論文標題 Twist-bend nematic phases of banana-shaped molecules with an axial chirality	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Liquid Crystals	6. 最初と最後の頁 2301-2321
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/02678292.2019.1650967	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 -

1. 著者名 H.Kakiuchida, Akihiko Matsuyama, A. Ogiwara	4. 巻 11
2. 論文標題 Normal- and Reverse-Mode Thermoresponsive Controllability in Optical Attenuation of Polymer Network Liquid Crystals,	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 ACS Appl. Matter. Interfaces,	6. 最初と最後の頁 19404-19412
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsami.9b01280	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 -

1. 著者名 松山明彦	4. 巻 47
2. 論文標題 並進秩序と配向秩序の競合による相分離,	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 日本結晶成長学会誌	6. 最初と最後の頁 1-10
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	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 -

1. 著者名 松山明彦	4. 巻 24
2. 論文標題 液晶の統計物理学入門：第4回 外場下の液晶相の理論	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 液晶	6. 最初と最後の頁 246-253
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	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 -

1. 著者名 松山明彦	4. 巻 24
2. 論文標題 液晶の統計物理学入門：第3回 コレステリック相の平均場理論	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 液晶	6. 最初と最後の頁 189-199
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	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 -

1. 著者名 松山明彦	4. 巻 24
2. 論文標題 液晶の統計物理学入門：第2回 ネマチック相とスメクチックA相の平均場理論	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 液晶	6. 最初と最後の頁 121-131
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	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 -

1. 著者名 松山明彦	4. 巻 24
2. 論文標題 液晶の統計物理学入門：第1回 液晶相の秩序パラメータ	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 液晶	6. 最初と最後の頁 54- 62
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	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 -

1. 著者名 Akihiko Matsuyama, Saki Arikawa, Moto Wada, and Nanako Fukutomi,	4. 巻 46
2. 論文標題 Uniaxial and biaxial nematic phases of banana-shaped molecules and the effects of an external field	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Liquid Crystals	6. 最初と最後の頁 1672-1685
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/02678292.2019.1595756	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 -

1. 著者名 Akihiko Matsuyama	4. 巻 683
2. 論文標題 Cholesteric-isotropic phase transitions in banana-shaped liquid crystalline molecules	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Mol. Cryst. Liq. Cryst.	6. 最初と最後の頁 3-13
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/15421406.2019.1581700	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 -

1. 著者名 Akihiko Matsuyama and Kan Tatsuaki	4. 巻 46
2. 論文標題 Helical inversions and phase separations in binary mixtures of cholesteric liquid crystalline molecules	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Liquid Crystals	6. 最初と最後の頁 45-58
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/02678292.2018.1468041	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 -

1. 著者名 Akihiko Matsuyama	4. 巻 6
2. 論文標題 Volume Phase Transitions of Heliconical Cholesteric Gels under an External Field along the Helix Axis	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Gels	6. 最初と最後の頁 40
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/gels6040040	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 Akihiko Matsuyama	4. 巻 101
2. 論文標題 Phase transitions of heliconical smectic-C and heliconical nematic phases in banana-shaped molecules,	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review E	6. 最初と最後の頁 050701(R)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevE.101.050701	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8件（うち招待講演 1件 / うち国際学会 4件）

1. 発表者名 松山明彦
2. 発表標題 Twist-bend nematic phase of banana-shaped molecules with an axial chirality
3. 学会等名 International Soft Matter Conf.(ISMC) 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 松山明彦
2. 発表標題 バナナ型分子のツイストベンドネマチック相
3. 学会等名 液晶討論会2019
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Akihiko Matsuyama
2. 発表標題 Theory of Twist-bend nematic phases
3. 学会等名 International Liquid Crystal Conference 2018 (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Akihiko Matsuyama
2. 発表標題 Nematic phase of banana-shaped molecules
3. 学会等名 Japan-Italy Liquid Crystal Conference (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 松山明彦
2. 発表標題 バナナ型分子のネマチック相
3. 学会等名 日本液晶学会討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 松山明彦
2. 発表標題 キラル相互作用をもつ高分子・液晶系の理論
3. 学会等名 第8回ソフトマター研究会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Akihiko Matsuyama
2. 発表標題 Helical inversions of chiral liquid crystals
3. 学会等名 ソフトマター物理の国際ワークショップ(国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 松山明彦
2. 発表標題 バナナ型分子のネマチック相と外場効果
3. 学会等名 物理学会
4. 発表年 2018年



〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

松山研のホームページ  
<http://labo.bio.kyutech.ac.jp/~matuyama/index.html>  
松山研究室  
<http://labo.bio.kyutech.ac.jp/~matuyama/>

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
---------	---------