

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 5 年 6 月 12 日現在

機関番号：32607

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2019～2022

課題番号：19H02537

研究課題名(和文) 計算科学と実験科学の連携によるキラル液晶のナノ空間制御

研究課題名(英文) Theoretical and Experimental Studies on Nanostructures Based on Chiral Liquid Crystals

研究代表者

渡辺 豪 (Watanabe, Go)

北里大学・理学部・准教授

研究者番号：80547076

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 13,600,000円

研究成果の概要(和文)：ホストとなる液晶とゲストであるキラル分子の組み合わせによって多様な相を発現する多様なキラル液晶において、『キラル分子の微視的なねじれ構造』と『巨視的ならせん構造』の関係を理解することは重要である。本研究では、計算科学的手法と実験科学的手法を連携した新規なアプローチにより、キラル分子に剛直な骨格を持つ八面体型金属錯体を用いたキラル液晶で、錯体分子の液晶への相溶性がマイクロスケールな拡散挙動と相関があることを明らかにした。また、金属錯体分子のエナンチオ体が形成する新規キラルコラムナー液晶の構造とその発現メカニズムに関わる知見を得た。

研究成果の学術的意義や社会的意義

応用の可能性が多岐にわたるソフトマテリアルであるキラル液晶について、マイクロとマクロという異なる階層での物性の包括的理解という分子科学の観点から重要かつ本質的な未解決問題に、計算科学者と実験科学者が緊密に連携して取り組むという点で学術的意義は大きい。本研究で確立された基盤技術は、新規キラル触媒開発や共役分子の有機溶媒への溶解性予測などにも適用可能であり、合成化学から有機半導体までの基礎化学から応用化学までの幅広い分野に寄与できる。

研究成果の概要(英文)：In the chiral liquid crystals formed by doping the chiral molecules into the nematic liquid crystals, it is important to understand the relation between the microscopic structure of the chiral dopant molecules and the macroscopic helical structure. In this study, we revealed that the miscibility of the chiral dopant molecules with the liquid crystal solvent correlates with the diffusion coefficient of the liquid crystal molecules in chiral liquid crystals with octahedral metal complexes by a novel approach that combines computational and experimental methods. We also obtained new insights related to the structural details of the chiral columnar liquid crystals formed by the enantiopure octahedral complexes.

研究分野：計算化学

キーワード：分子動力学シミュレーション 液晶 キラルティール ソフトマテリアル

1. 研究開始当初の背景

我々の身の回りには、らせん構造を有する物質や材料が満ち溢れている。例えば、生体材料であれば、高強度・高靱性を有するロブスターなどの甲殻類の外骨格や蓮糸、二重らせん構造を有する DNA、そして植物に含まれるセルロースが挙げられる。これらの物質の多くは、化学結合でらせん構造を形成している高分子である。そのため、一元系のらせん構造制御は、精密な分子設計技術に頼らざるを得ない上、汎用性に欠ける。

一方、低分子のホストとゲストの二元系を用いることで、種々のらせん構造を形成するキラル液晶が開発されてきた。ディスプレイなどに用いられている一般的な液晶は、構成分子が自己組織化して平均的に一方向に並びながらも流動性を有しているが、そのようなホスト液晶中に光学活性(キラル)な分子をゲストとして少量添加することでらせん構造が発現する。キラル液晶は、ホスト液晶とゲストのキラル分子の組み合わせに応じて、異なるらせん構造を形成する。具体的には、一次元のらせん構造を有し、その周期が数百 nm オーダーのキラルネマチック液晶、周期が数 nm オーダーのツイストバンドネマチック液晶、そして三次元らせん構造を有するブルー相液晶が存在する。それぞれの液晶の構造や機能については、数多くの研究報告があり、反射型ディスプレイや光変調素子などの新規アプリケーションの提案もなされている。これらのキラル液晶は、ホストとなる液晶とゲストであるキラル分子の種類を変えることで発現するだけでなく、混合比や温度によって系統的に発現する。しかしながら、液晶とキラル分子の組み合わせと発現する液晶相の相関関係については有用な知見がほとんど得られていない。特に、キラル液晶のらせん構造が形成するナノ空間制御にはホスト-ゲスト間の相互作用の理解が不可欠であるが、これらの相互作用が弱い非共有結合であるために達成されていない。さらには、らせん構造はキラル分子特有の物性(らせん誘起力と液晶溶解性)に依存しているため、構造制御にはこれらの物性に関わる重要因子の解明も必須である。これまでには有機・無機問わずに数多くのキラル分子が提案されてきたが、本質的に重要な課題である『キラル分子の微視的なねじれ構造』と『巨視的ならせん構造』との関係は未解明なままである。そのため、所望の物性のキラル液晶をデザインする分子技術が確立されておらず、新規ソフトマテリアルへの展開が進んでいない。

このような未解決課題を追求する上で適切な系として、キラル分子に剛直骨格を持つ八面体型金属錯体を用いたキラル液晶が挙げられる。キラル金属錯体では、配位子の種類や数に応じてキラル液晶のらせん構造を系統的に変化させることができる。その上、ある温度に依存して複数のキラル液晶相を発現することも報告されている。このように、本来は混合することが困難な無機物(ハード)と有機物(ソフト)を、液晶という特異な場を利用して融合したキラル液晶は、キラル分子のナノねじれ構造と系全体に誘起される巨視的ならせん構造との相関関係解明の糸口として期待される。

2. 研究の目的

本研究においては、計算科学的手法と実験科学的手法を連携した新規なアプローチにより、キラル液晶におけるキラル金属錯体の分子構造ねじれと系全体に発現するらせん構造との相関関係の理解、さらにはらせん構造のナノ空間制御因子の提案を目指す。具体的には、計算科学を基軸とした手法により、キラル液晶の物性に関する重要因子の解明、その予測手法の確立、実験科学によってキラル液晶における特異的構造解析、新規キラル金属錯体分子合成・評価を行う。

3. 研究の方法

計算科学的アプローチではキラル液晶の物性に関する重要因子の解明、およびその物性を予測する手法の確立、そして実験科学的アプローチではキラル液晶の構造・物性評価と新規材料の探索が本研究の基盤となっている。

1) キラル液晶の物性を予測するシミュレーション

キラル金属錯体分子のホスト液晶に対するらせん誘起力や溶解性を予測する理論体系の基軸には、分子レベルのミクロな描像を可視化する上で有用な全原子分子動力学 (MD) シミュレーションという手法を用いる。

研究代表者が考案した MD シミュレーションと連続体理論 (Surface chirality モデル) を組み合わせる手法 (*J. Phys. Chem.* 2016) によって、代表的なキラル金属錯体についてはらせん誘起力

が算出可能であるが、更なる高精度化・適用範囲の拡大を目指す。MD シミュレーションではラセミ（キラル分子の光学異性体を同数ずつ液晶中に混合した系）な系を対象とする。

2) キラルドーパントの精密合成と物性測定

これまでにキラルネマチック液晶の物性を報告してきた Ru 錯体骨格を持つキラル分子を中心として、系統的に配位子を変えた錯体分子を合成し、物性評価（らせん誘起力や液晶への相溶性）を行う。また、中心金属を Ir に変えた錯体分子も設計・合成し、Ru 錯体分子との物性比較を行い、新規キラル液晶材料へ展開する上での知見を得る。

4. 研究成果

1) 金属錯体ドーパントの相溶性と液晶の拡散挙動の相関関係

Ru 錯体分子は配位子によって、ネマチック液晶へのらせん誘起力が系統的に異なるだけではなく、溶けやすさである相溶性が異なる。一般的に金属錯体は液晶に対する相溶性が低く、図 1 に示した Ru-Br0 や Ru-Br1 は一般的なネマチック液晶である MBBA への相溶性は 0.2 mol% 以下であるが、Ru-trop は 4.0 mol% まで溶ける。これらのドーパントを添加して得られたキラルネマチック液晶の粘性には明確な違いは見られないことから、Ru 錯体分子の液晶中でのミクロスコピックな挙動が相溶性に影響を与えていると考えて、全原子 MD シミュレーションによって原子・分子レベルでの描像の理解に取り組んだ。

構造と相溶性が異なる Ru 錯体分子、異なるエナンチオ体を同数ずつネマチック液晶中に添加した系 (MBBA のみの系を pure MBBA とし、Ru-Br0、Ru-Br1、Ru-trop を液晶 MBBA に添加した系をそれぞれ N-Ru-Br0、N-Ru-Br1、N-Ru-trop とする) を対象とした MD シミュレーションを実行し、ホスト液晶の拡散係数を解析した。その結果、相溶性の高い分子ほど、液晶分子の拡散係数は大きい値となり、逆に相溶性の低い分子ほど拡散係数の値は小さくなることがわかった (表 1)。

表 1. 各系における MBBA の拡散係数

	Pure MBBA	N-Ru-Br0	N-Ru-Br1	N-Ru-trop
D (m ² /s)	1.99 ± 0.01	1.87 ± 0.02	1.84 ± 0.02	2.00 ± 0.02

また、ネマチック液晶と Ru 錯体分子との相互作用エネルギーの解析から、各々の相溶性と Coulomb 相互作用には明確な相関はないと考えられる。また van der Waals 相互作用については、相溶性の高い Ru-trop のような分子が van der Waals 相互作用エネルギーが小さく、逆に相溶性の低い Ru-Br0 や Ru-Br1 のような分子が van der Waals 相互作用エネルギーの値が高いという結果が得られた。

さらに Ru 錯体分子の濃度を 2 倍にした系においても同様の MD シミュレーションを行ったが、相溶性が高い錯体分子が添加されている系ほどネマチック液晶の拡散係数は大きいと傾向は変わらなかった。

上記の MD シミュレーションでは、初期構造において添加した Ru 錯体分子の異なるエナンチオ体の 2 分子は十分離れていたが、それらの凝集性を確認するために、2 分子が隣接している系でシミュレーションを行ったところ、時間経過とともにホスト液晶中に分散していく様子を確認することができた。そして、液晶分子の拡散係数についても、錯体分子の初期配置に依存して値が大きく変わることはなかった。

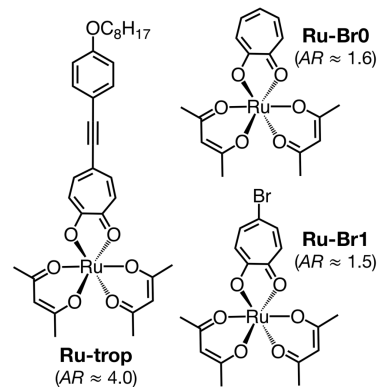


図 1. 計算対象とした Ru 錯体分子の分子構造と分子のアスペクト比

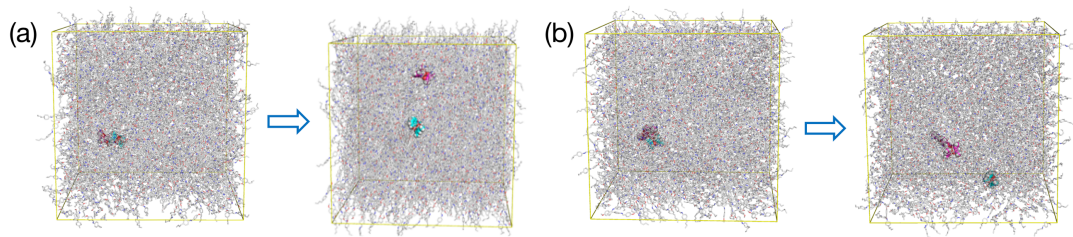


図 2. 初期構造で(a) Ru-Br0 と (b) Ru-trop の Δ 体、 Λ 体をそれぞれ隣接させて MBBA 液晶中に配置した系の MD シミュレーションスナップショット (矢印の左側は 0 ns、右側は 400 ns 後)

Ru 錯体分子とネマチック液晶との van der Waals 相互作用エネルギーが錯体分子の宿主液晶への相溶性と相関があることから、分子形状が相溶性に寄与しており、より異方性が大きい棒状の錯体分子であるほど相溶性が高い傾向にあると考えられる。実際に、Ru-Br0 や Ru-Br1、Ru-trop について、分子のアスペクト比はそれぞれ 1.6、1.5、4.0 となっているので、Ru-Br0 や Ru-Br1 と比較して相溶性が高い Ru-trop はより棒状であることが分かる。つまり、棒状分子が構成するネマチック液晶には細長いキラル錯体分子の方が相溶性は高く、液晶の拡散係数への影響も小さいことを示唆している。

2) 金属錯体分子が形成するキラルカラムナー液晶の構造と発現メカニズム

ネマチック液晶へのキラルドーパント分子として報告していた Ru 錯体分子の一つである Ru-C8 (図 3) がエナンチオ体において、ヘキサゴナルカラムナー液晶を発現することを偏光顕微鏡観察、示差走査熱量測定および微小角入射 X 線回折測定により明らかにした。また、カラム内には 5.2 nm の周期のらせん構造を有していることも実験結果から分かった。詳細な分子の配向構造を解明するために、全原子 MD シミュレーションを行った。X 線構造解析から得られている格子定数、らせんピッチ長の情報をもとにして、様々な条件検討を行った結果、図 4 に示すようならせん構造を有するヘキサゴナルカラムナー液晶を再現した。分子はらせん軸の周囲を階段状に積層しており、また分子の対称軸 (C_3 軸) はらせん軸からわずかに傾いていることが分かった。

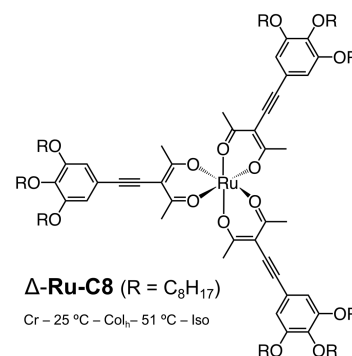


図 3. 計算対象とした Ru-C8 の分子構造

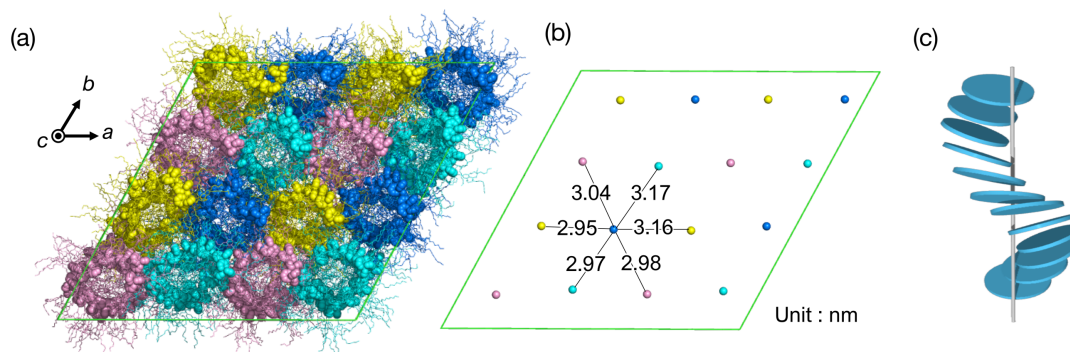


図 4. (a) Δ -Ru-C8 を対象とした MD シミュレーションスナップショット (200 ns 後)、(b) 各カラムの平均重心位置、(c) カラム内における分子の配向構造の模式図

Ru-C8 の各配位子の配置を調べてみると、一つの配位子は全てらせん構造の内側に位置しており、それ以外は外側に位置していた。内側の配位子は断続的 (数分子ごと) に π スタックしていたが、外側の配位子については π スタックがほとんど見られなかった。これは配位子の立体反発を避けるために、少しずつ傾きながら横にずれて分子が積層していると同時に π - π 相互作用によるスタッキングも維持しようとしているために生じていると考えられる。

また、らせん 1 周期は約 14 分子からなっており、各分子の双極子モーメントをプロットして、合計値についても調べた。その結果、らせん 1 周期において双極子モーメントはほぼ打ち消され

ていた。また実験において、Ir 骨格で同じ配位子が導入されていて双極子モーメントが極めて小さい錯体分子では液晶相が発現しないことが確かめられており、双極子相互作用がらせん構造の形成にも関わっているといえる。

Δ -Ru-C8、 Λ -Ru-C8 のどちらのエナンチオ体においてもヘリカルヘキサゴナルカラムナー液晶を発現し、カラム内のらせん構造の巻き方向は一意に決まることを MD シミュレーションで確かめた。

Ru-C8 のエナンチオ体が形成するヘキサゴナルカラムナー液晶は、分子間の π - π 相互作用、双極子相互作用、そして配位子の立体反発といった複数の因子の競合によって、未だ報告例がない新しいタイプのらせん構造を発現していることが明らかになった。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計15件（うち査読付論文 15件／うち国際共著 1件／うちオープンアクセス 7件）

1. 著者名 Shikita So, Watanabe Go, Kanouchi Dai, Saito Junya, Yasuda Takuma	4. 巻 2
2. 論文標題 Alternating Donor-Acceptor -Conjugated Macrocyclic Exhibiting Efficient Thermally Activated Delayed Fluorescence and Spontaneous Horizontal Molecular Orientation	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Advanced Photonics Research	6. 最初と最後の頁 2100021 ~ 2100021
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/adpr.202100021	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 Yu Craig P., Kojima Naoya, Kumagai Shohei, Kurosawa Tadanori, Ishii Hiroyuki, Watanabe Go, Takeya Jun, Okamoto Toshihiro	4. 巻 4
2. 論文標題 Approaching isotropic charge transport of n-type organic semiconductors with bulky substituents	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Communications Chemistry	6. 最初と最後の頁 155/1-155/10
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s42004-021-00583-2	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 渡辺 豪	4. 巻 66
2. 論文標題 分子動力学シミュレーションを用いたソフト界面の構造と物性の解明	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 トライボロジスト	6. 最初と最後の頁 267 ~ 274
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.18914/tribologist.66.04_267	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 Watanabe Go, Watanabe Hideyo, Suzuki Kota, Yuge Hidetaka, Yoshida Shintaro, Mandai Takuyoshi, Yoneda Shigetaka, Sato Hisako, Hara Mitsuo, Yoshida Jun	4. 巻 56
2. 論文標題 Visualizing the helical stacking of octahedral metallomesogens with a chiral core	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Chemical Communications	6. 最初と最後の頁 12134 ~ 12137
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D0CC05930G	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 Watanabe Go, Eimura Hiroki, Abbott Nicholas L., Kato Takashi	4. 巻 36
2. 論文標題 Biomolecular Binding at Aqueous Interfaces of Langmuir Monolayers of Bioconjugated Amphiphilic Mesogenic Molecules: A Molecular Dynamics Study	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Langmuir	6. 最初と最後の頁 12281 ~ 12287
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.langmuir.0c02191	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 Toshihiro Okamoto, Shohei Kumagai, Eiji Fukuzaki, Hiroyuki Ishii, Go Watanabe, Naoyuki Niitsu, Tatsuro Annaka, Masakazu Yamagishi, Yukio Tani, Hiroki Sugiura, Tetsuya Watanabe, Shun Watanabe, Jun Takeya	4. 巻 6
2. 論文標題 Robust, high-performance n-type organic semiconductors	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Science Advances	6. 最初と最後の頁 eaaz0632
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1126/sciadv.aaz0632	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 Zhang Wanying, Suzuki Satoshi, Cho SeongYong, Watanabe Go, Yoshida Hiroyuki, Sakurai Tsuneaki, Aotani Mika, Tsutsui Yusuke, Ozaki Masanori, Seki Shu	4. 巻 35
2. 論文標題 Highly Miscible Hybrid Liquid-Crystal Systems Containing Fluorescent Excited-State Intramolecular Proton Transfer Molecules	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Langmuir	6. 最初と最後の頁 14031 ~ 14041
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.langmuir.9b02272	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 Ishida Atsuya, Watanabe Go, Oshikawa Mio, Ajioka Itsuki, Muraoka Takahiro	4. 巻 25
2. 論文標題 Glycine Substitution Effects on the Supramolecular Morphology and Rigidity of Cell Adhesive Amphiphilic Peptides	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Chemistry - A European Journal	6. 最初と最後の頁 13523 ~ 13530
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/chem.201902083	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 Yoshida Jun, Tateyama Kazunori, Yuge Hidetaka	4. 巻 49
2. 論文標題 Tris(tropolonato) ruthenium as a hub for connecting π -conjugated systems	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Dalton Transactions	6. 最初と最後の頁 2102 ~ 2111
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C9DT04860J	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 Goto Yutaro, Watanabe Yutaka, Noboriguchi Aoki, Yoshida Jun, Mori Shigeki, Sato Hisako	4. 巻 48
2. 論文標題 Chiral tectonics toward square planar tetranuclear Pd(ii) complexes: propagation of axial chirality through a long molecular axis	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Dalton Transactions	6. 最初と最後の頁 10138 ~ 10144
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C9DT01913H	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 Yu Craig P., Kojima Naoya, Kumagai Shohei, Kurosawa Tadanori, Ishii Hiroyuki, Watanabe Go, Takeya Jun, Okamoto Toshihiro	4. 巻 4
2. 論文標題 Approaching isotropic charge transport of n-type organic semiconductors with bulky substituents	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Communications Chemistry	6. 最初と最後の頁 155
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s42004-021-00583-2	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 Nishikawa Hiroya, Sano Koki, Kurihara Saburo, Watanabe Go, Nihonyanagi Atsuko, Dhara Barun, Araoka Fumito	4. 巻 3
2. 論文標題 Nano-clustering mediates phase transitions in a diastereomerically-stabilized ferroelectric nematic system	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Communications Materials	6. 最初と最後の頁 89
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s43246-022-00312-9	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 Hiratsuka Keiko, Muramatsu Tatsuya, Seki Takuya, Weder Christoph, Watanabe Go, Sagara Yoshimitsu	4. 巻 11
2. 論文標題 Tuning the mechanoresponsive luminescence of rotaxane mechanophores by varying the stopper size	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of Materials Chemistry C	6. 最初と最後の頁 3949 ~ 3955
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D3TC00330B	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 該当する

1. 著者名 Kawashima Yusuke, Hamachi Tomoyuki, Yamauchi Akio, Nishimura Koki, Nakashima Yuma, Fujiwara Saiya, Kimizuka Nobuo, Ryu Tomohiro, Tamura Tetsu, Saigo Masaki, Onda Ken, Sato Shunsuke, Kobori Yasuhiro, Tateishi Kenichiro, Uesaka Tomohiro, Watanabe Go, Miyata Kiyoshi, Yanai Nobuhiro	4. 巻 14
2. 論文標題 Singlet fission as a polarized spin generator for dynamic nuclear polarization	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Nature Communications	6. 最初と最後の頁 1056
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41467-023-36698-4	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 Watanabe Go, Yamazaki Akane, Yoshida Jun	4. 巻 15
2. 論文標題 The Missing Relationship between the Miscibility of Chiral Dopants and the Microscopic Dynamics of Solvent Liquid Crystals: A Molecular Dynamics Study	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Symmetry	6. 最初と最後の頁 1092 ~ 1092
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/sym15051092	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21件 (うち招待講演 4件 / うち国際学会 7件)

1. 発表者名 吉田 純
2. 発表標題 粘土鉱物表面を舞台とするキラル錯体の2次元自己集合
3. 学会等名 日本セラミックス協会 第34回秋季シンポジウム (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Go Watanabe, Mitsuo Hara, and Jun Yoshida
2. 発表標題 A Molecular Dynamics Study of Helical Columnar Liquid Crystals Based on Propeller-Shaped Metallomesogens
3. 学会等名 Optics of Liquid Crystals 2021 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Go Watanabe, Mitsuo Hara, and Jun Yoshida
2. 発表標題 Visualizing helical stacking of propeller-shaped metallomesogen molecules: a molecular dynamics study
3. 学会等名 The 2020 International Chemical Congress of Pacific Basin Congress (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 渡辺 豪
2. 発表標題 分子シミュレーションによる液晶の微視的描像解明
3. 学会等名 物性研究所スパコン共同利用・CCMS合同研究会「計算物質科学の新展開2020」
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 藤島 瑛大、宮下 大勇、櫻井 庸明、渡辺 豪
2. 発表標題 分子動力学計算によるネマチック液晶中における蛍光分子の静的構造・動的挙動の解析
3. 学会等名 2020年日本液晶学会オンライン研究発表会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 萬代 拓由、吉田 晋太郎、吉田 純、原 光生、渡辺 豪
2. 発表標題 八面体型金属錯体分子が発現するカラムナー液晶の分子動力学シミュレーション
3. 学会等名 2020年日本液晶学会オンライン研究発表会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Go Watanabe, Takuyoshi Mandai, Mitsuo Hara, and Jun Yoshida
2. 発表標題 Elucidating Helical Structure of Columnar Liquid Crystals Formed by Chiral Octahedral Metallomesogens Using Molecular Dynamics Simulations
3. 学会等名 69th Symposium on Macromolecules
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 渡辺 豪
2. 発表標題 計算科学で解き明かすソフトマターのミクロな世界
3. 学会等名 電気学会四国支部講演会（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Go Watanabe, Mitsuo Hara, and Jun Yoshida
2. 発表標題 Molecular Dynamics Study of Chiral Columnar Liquid Crystals with Helical Structure
3. 学会等名 The 5th International Conference on Molecular Simulation (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 吉田 晋太郎, 萬代 拓由, 吉田 純, 原 光生, 渡辺 豪, 米田 茂隆
2. 発表標題 分子動力学シミュレーションによるキラルカラムナー液晶のらせん構造解明
3. 学会等名 第33回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 渡辺 豪
2. 発表標題 分子動力学シミュレーションで解き明かす液晶の分子描像
3. 学会等名 第68回高分子討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 吉田 純, 原 光生, 渡辺 豪
2. 発表標題 八面体型金属錯体をメソゲンとするキラルカラムナー液晶の開発と内部構造解析
3. 学会等名 錯体化学会 第69回討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 吉田 晋太郎, 萬代 拓由, 吉田 純, 原 光生, 渡辺 豪, 米田 茂隆
2. 発表標題 分子動力学シミュレーションによるキラルカラムナー液晶のらせん構造解明
3. 学会等名 2019年 日本液晶学会討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 萬代 拓由, 吉田 晋太郎, 吉田 純, 原 光生, 渡辺 豪, 米田 茂隆
2. 発表標題 八面体型金属錯体が形成するカラムナー液晶の微視的構造解析
3. 学会等名 2019年 日本液晶学会討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 吉田 純, 原 光生, 渡辺 豪
2. 発表標題 分子中心に位置するキラリティーがカラム状積層構造に及ぼす影響: エナンチオ体とラセミ体の比較
3. 学会等名 2019年 日本液晶学会討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 渡辺 豪
2. 発表標題 計算化学で視るソフトマターの分子描像
3. 学会等名 構造有機化学研究会 ミニシンポジウム (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 吉田 純, 原 光生, 渡辺 豪
2. 発表標題 八面体型金属錯体をメソゲンとするカラムナー液晶開発と積層構造の解析
3. 学会等名 第23回液晶化学研究会シンポジウム
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Go Watanabe and Jun Yoshida
2. 発表標題 A Theoretical Study for Design of Metal Complex Doped Chiral Nematic Materials
3. 学会等名 10th International Conference on Materials for Advanced Technologies (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Jun Yoshida, Mitsuo Hara, and Go Watanabe
2. 発表標題 Investigation of the Molecular Stacking Structures in Chiral Columnar Phases Formed by Chiral Octahedral Metallomesogen
3. 学会等名 10th International Conference on Materials for Advanced Technologies (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Go Watanabe, Mitsuo Hara, and Jun Yoshida
2. 発表標題 A Molecular Dynamics Study of Novel Columnar Metallomesogens Forming Helical Structure
3. 学会等名 28th International Liquid Crystals Conference (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Go Watanabe
2. 発表標題 A Molecular Dynamics Study for Self-Assembling Soft Materials
3. 学会等名 Optics of Liquid Crystals 2021 Satellite Work Shop 2022 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

研究者個人ページ https://www.go-watanabe.com/researchmap https://researchmap.jp/go_watanabe
--

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
研究分担者	吉田 純 (Yoshida Jun) (60585800)	日本大学・文理学部・准教授 (32665)	

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