研究成果報告書 科学研究費助成事業

今和 6 年 5 月 3 1 日現在

機関番号: 12102

研究種目: 基盤研究(B)(一般)

研究期間: 2021~2023

課題番号: 21H01046

研究課題名(和文)低分子液晶におけるジャイロイド構造形成の分子論の確立

研究課題名(英文)Molecular Mechanism of Gyroid Formation by Small Mesogenic Molecules

研究代表者

齋藤 一弥 (Kazuya, SAITO)

筑波大学・数理物質系・教授

研究者番号:30195979

交付決定額(研究期間全体):(直接経費) 13,500,000円

研究成果の概要(和文): 長年の未解決課題であった,棒状液晶分子が示すキラルキュービック相の構造解析が達成でき,隣接するジャイロイド相と類似の分子の捩れ配列と複数のドメインが存在しない事が明らかになった.これに基づき,ジャイロイド等の構造形成メカニズムとして,捩れ配列を骨格とする空間充填が同定され

層状液晶相の分子凝集構造の詳細と物性が密接な関係を持つこと定量的に示された. ジャイロイド相の分子配列に基づいて策定された捩れ配列を好む無頭古典スピンモデルが,フラストレーショ 、を伴わない基底状態の巨視的縮重,二次元での相転移,4次元での3段階秩序化など,興味深い挙動をすること が見出された.

研究成果の学術的意義や社会的意義 本研究の結果は、液晶分子を棒と考えずに主要な内部構造を考慮することにより、凝集構造や物性の理解が飛躍することを示している、また、平衡状態における複雑な超構造(メゾスコピックな構造)の生成機構としては、これまでもっぱら相分離が考えられてきたが、今回の研究により相分離を伴わない機構が見出された、超構造形成や自己組織化の研究に、新しい視点をもたらした、また、派生的に得られたスピンモデルの統計的挙動は、長距離秩序を伴わない相転移が可能であることを示すことが興味深いだけで無く、有限系の「相転移」様挙動の可能性を示しており、工学的な応用の可能性も考え得る

研究成果の概要(英文):Structure analyses of the chiral cubic phase, neighboring to the gyoid phase on the phase diagram against the alkyl-chain length of rodlike mesogens, were achieved utilizing a new crystallographic algorithm. The result suggested the importance of smooth variations of molecular orientations, which is identified as a new mechanism for the structure formation of

complicated superstructures consisting of rodlike molecules. In layered liquid crystals, the details of the layer structure, such as sharpness, dominate the physical properties. For example, the details successfully explain the thermodynamic order of the phase transition between the two liquid crystalline phases, smectic A and nematic.

A headless classical Heisenberg model preferring twist, inspired by the twist in the gyroid phase, exhibits intriguing properties, such as the macroscopic degeneracy without frustration, a phase transition without long-range order in dimension two, and three-step ordering in dimension four.

研究分野: 物性科学

キーワード: ジャイロイド 液晶 エントロピー 凝集構造 スピンモデル

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等に ついては、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

1.研究開始当初の背景

巨視的な系における構成粒子(本研究が対象とする系では分子)の凝集構造の役割は,あらゆる物性の舞台を提供するという意味で決定的であり,それをよりよく理解しようとする研究には,言うまでも無く長い蓄積がある.現実には,分子間相互作用の直接的到達範囲を遙かに超えた長い周期性が生じることもある.このような場合に,周期的構造がなぜ形成されるかが,本研究の背後にある根源的な問いである.

高分子・液晶などがしばしば示す高次構造であるジャイロイド構造は自然が作る美しい造形である.低分子液晶においては,ジャイロイド相の単位格子の大きさは分子の直径に比べると2桁ほど大きく,単位格子に 10³ 個程度の分子を含む[1].つまり,分子間相互作用の直接的到達範囲を遙かに超えた長い特定の周期性を発現している.しかし,構成単位はあくまでも分子であり,その分子が構造内に密に充填され,安定な構造としてジャイロイド構造を選択しているのかについては未解明である.この意味で,低分子液晶が形成するジャイロイド構造の発現機構を解明することは,周期性の物理的起源の解明にとって重要な貢献になる.

2.研究の目的

本研究では,低分子液晶が構築するジャイロイド構造形成機構の分子論的理解を確立することを主たる目的とする.

3. 研究の方法

液晶のような複雑な分子集合体の研究において,システマティクス(系統論)は,「変数」を適切に選べば,極めて豊富な情報を与える.そこで,本研究では,ジャイロイド相や関連した液晶相における分子凝集構造を,とくに分子コアとアルキル鎖を区別して,できるだけ詳細かつ系統的に解析した.一方で,系統論に到達するだけのデータを集められない場合に,それだけで精緻な解析と議論に絶える実験データを得ることに努めた.独自の実験装置を用いた熱力学的測定は後者に属する.

一方で,具体的な物質の挙動を.より広い文脈で位置づけることにも留意し,ジャイロイド相での分子凝集構造の特徴に基づいて抽象化して策定された,スピンモデル等の統計的性質についても計算機実験を実施した.

4. 研究成果

主要な成果として3項目について述べる.他については,発表論文を参照されたい.

4.1 ジャイロイド相に隣接するキラルキュービック相の構造解析

棒状分子の温度変化型液晶において,ジャイロイド相に加えて別の立法対称相が隣接したアルキル鎖長の物質において現れることは,代表的なキュービック液晶物質である ANBC(n)とBABH(n)について古くから知られていた[1].研究代表者らのものを含め,いくつかの構造モデルが提案されていたが,2014 年にこの相がキラリティーを持つことが報告された[2]. それまでのモデルが正しくないことが明らかになるとともに,構造解析は暗礁に乗り上げた.実験で得られる回折データが位相情報を持たないため,アキラルな場合には構造復元に必要な位相を有限の離散的組み合わせから選び出すにとどまるのに対し,キラルな場合にはそれぞれの回折線について連続の位相を適切に割り振る必要があるためである.その後も,アキラルという仮定で得られた電子密度マップを起点にしたいくつかのモデルが提案されたが,「手作りのモデル」の域を出なかった.

2022年になって,静岡大学の岡が,ソフトマターの双連結構造に共通する構造的特徴を積極的に利用するとともに,一方で空間群などの情報を必要としない,電子密度復元アルゴリズムを提案した[3,4].このアルゴリズムは,必ず正解に収束することが保証されているものではないが,正解のわかっている多くの実データとモデルデータについて正解を与えることが確認された[4].そこで,共同研究として,このアルゴリズムを粉末パターンに適用できるよう改良して適用することにより,キラルキュービック相の構造を解析した[5].

回折強度のみのデータから電子密度を復元し、空間群を $P2_13$ と決定した.相互貫入した 2 個の noh ネットに分子コアが凝集しており、2 個の noh ネットは並進操作で関係づけられていた.キラリティーを反映して、ネット自体も整合的に歪んでいた.ジャイロイド相では srs ネット上で分子配向が連続的に変化していたが、キラルキュービック相の noh ネットの歪みは、ジャイロイド相における捩れ配列と整合的であった.

連続的な捩れ配列の 2 個のネットが同じキラリティーを持つというキラルキュービック相の構造に対し,ミクロ相分離とそれに伴うドメイン境界の極小化を要請することはできない.したがって,連続的な捩れ配列に起源を求める方が自然である.このため,srs や noh のネット構造(幾何学)そのものに特別な意味があると考えられた.そこで,ネット構造についてのデータベース[6]に収載されたネットについて構造の解析を行った[7].二重化したsrsと noh は,交点の構造の理想性と空間配列の一様さにおいて,明らかに優れていることが確認できた.

連続的捩れ配列の重要さは、研究対象としたジャイロイド相とキラルキュービック相の凝集構造が、(拡散)運動のために最適化された結果と見なすことができることを示している。この意味で、これらの構造の形成機構についての基本的な理解に到達したと言えよう。今後は、取り扱いの容易な、具体的なモデルの構築が望まれる。

4.2 層状液晶相の凝集構造と物性

我々は既に,直交系層状液晶相の層間隔のアルキル鎖長依存性から基本的な分子充填様式を明らかにしてきたが [8-10],より直接的な構造解析は行ってこなかった.本研究期間に,先に報告していた電子密度の解析法[11]が,過去の精緻な構造研究で得られていた同レベルの定量的な情報を与え,むしろ,より広い適用範囲を持つことを確認した.

アルキル鎖長依存性から異なる凝集構造を持つことを指摘していた SmA 相を示す化合物において ,SmA 相から N 相への相転移の熱力学次数が 2 次と 1 次に分けられること , および , この , 相転移次数の変化が , 過去に報告されていた理論的研究を補強するものとなったことを指摘した[12] , X 線で得られた凝集構造情報が熱力学的に決定されたエントロピーと整合することを明らかにした , 出版準備中 ,

4.3 ねじれを好む古典スピンモデルの性質

隣接分子がねじれを好むとき、一般的にどのようなことが起き得るかを明らかにするために、配向に依存した相互作用が

$$V(\theta) = V_0 \left[(1 - r) P_2(\cos \theta_{ij}) - r \frac{7}{3} P_4(\cos \theta_{ij}) \right]$$
 (1)

で表される無頭古典スピンの統計集団の性質をモンテカルロシミュレーションにより調べた.単純立方格子での結果[13]は既に報告していたので,式(1)の相互作用の著しい性質である,3 スピンがフラストレーション無しに最低エネルギー状態を取り得ることに注目し,トリパータイトな場合を調べた.バイパータイトな単純立方格子では最低エネルギー状態は連続的に縮重しているが,トリパータイトな場合にはこの縮重は離散的で,巨視的に有限のエントロピー(1 スピンあたり $(k_{\rm B}/3) \ln 2$ 以上)を持つ.

4.3.12次元三角格子(シュレーフリ記号{3,6})

二次元系では,ここで対象とするような連続スピンの系は配向秩序を持たないことがよく知られており(マーミン・ワグナーの定理),実際,一軸配向秩序は相転移としては実現せず,配向秩序は定理の予想する通り短距離秩序にとどまった.しかし,緩和時間の顕著な増大とシステムサイズ依存性を伴う別の相転移が確認された.格子点を3色(たとえばR,G,B)で塗り分け,中心スピンから同じ距離にある格子点上での配向の相関を反映する秩序変数を定義すると,相転移温度を境に0と有限値が得られ,三角格子の持つ6回対称性が短距離秩序によって破れることが確認できた[14].

マーミン・ワグナーの定理との関連で、配向秩序そのものが相転移を引き起こしていないことを確認するために、外場を印加したシミュレーションも実施した[15].配向を反映するネマチック秩序変数は外場に強く依存するが、無外場で見出された相転移はほとんど影響を受けないことを確認した。

4.3.2 4 次元正 24 胞体ハニカム

三角格子での挙動を理解するために平均場的な振る舞いを確認するために,高次元でのシミュレーションを計画した.対称性の高いトリパータイトな(おそらく)唯一の格子として4次元正多胞体{3,4,3}による空間充填(ハニカム,{3,4,3,3})を同定した[16].

配向無秩序相,一軸配向相(ネマチック相,副格子の配向が同じ配向を向いている),離散的に縮重したエネルギー最低状態に繋がる相,に加え,三つの副格子の配向が別かつ物理的に同等な相が見出された.隣接する2スピン間の配向に依存した相互作用が,4種の相を与えるという興味深い例となっている.

4.3.3 トリパータイトなクラスター

三角格子の結果は,長距離秩序を持たなくても格子の持つ対称性の低下が相転移となることを示した.このため,有限のクラスターも構造次第で同様の挙動を示す可能性が考えられた.そこで,トリパータイトな「正多面体」である正八面体(3次元){3,4}と正24胞体(4次元){3,4,3}の頂点にスピンを配置したクラスターの性質を調べた[17].いずれの場合も,高温では距離に応じて配向相関が弱くなるフェロ的挙動を示すものの,低温では副格子の影響が顕著になるアンチフェロ的な挙動へと,相転移に類似した挙動を示した.

引用文献

- [1] S. Kutsumizu, *Isr. J. Chem.*, **52**, 844 (2012).
- [2] C. Dressel, F. Liu, M. Prehm, X. Zeng, G. Ungar & C. Tschierske, *Angew. Chem.*, *Int. Ed.*, **53**, 13115 (2014).
- [3] T. Oka, Acta Cryst. A, 78, 430 (2022).

- [4] T. Oka, Acta Cryst. A, 79, 51 (2023).
- [5] T. Oka, Y. Yamamura, S. Kutsumizu & K. Saito, Soft Matter, 19, 1194 (2023).
- [6] Reticular Chemistry Structure Resource, https://rcsr.anu.edu.au
- [7] K. Saito & Y. Yamamura, Bull. Chem. Soc. Jpn., 96, 607 (2023).
- [8] Y. Yamamura, R. Tsuchiya, S. Fujimura, M. Hishida & K. Saito, J. Phys. Chem. B, 121, 1438 (2017).
- [9] Y. Yamamura, T. Murakoshi, S. Iwagaki, N. Osiecka, H. Saitoh, M. Hishida, Z. Galewski, M. Massalska-Arodz & K. Saito, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **19**, 19434 (2017).
- [10] Y. Yamamura, T. Murakoshi, M. Hishida & K. Saito, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **19**, 25518 (2017).
- [11] K. Saito, T. Miyazawa, A. Fujiwara, M. Hishida, H. Saitoh, M. Massalska-Arodz & Y. Yamamura, J. Chem. Phys., 139, 114902 (2013).
- [12] Y. Yamamura, M. Ito, K. Sugai, H. Noda, Z. Galewski & K. Saito, Soft Matter, 19, 7245 (2023).
- [13] K. Saito, M. Hishida & Y. Yamamura, J. Phys. Soc. Jpn., 86, 084602 (2017).
- [14] K. Saito, M. Hishida & Y. Yamamura, J. Phys. Soc. Jpn., 90, 124003 (2021).
- [15] K. Saito & Y. Yamamura, J. Phys. Soc. Jpn., 91, 074007 (2022).
- [16] K. Saito & Y. Yamamura, J. Phys. Soc. Jpn., 92, 054003 (2023).
- [17] K. Saito & Y. Yamamura, J. Phys. Soc. Jpn., 91, 104603 (2022).

5 . 主な発表論文等

「雑誌論文 〕 計13件(うち査詩付論文 12件/うち国際共著 2件/うちオープンアクセス 2件)

〔雑誌論文〕 計13件(うち査読付論文 12件/うち国際共著 2件/うちオープンアクセス 2件)	
1.著者名 Oka Toshihiko, Yamamura Yasuhisa, Kutsumizu Shoichi, Saito Kazuya	4.巻 19
2.論文標題 Aggregation structure of chiral cubic liquid crystals revealed by X-ray diffraction utilizing a new algorithm	5 . 発行年 2023年
3.雑誌名 Soft Matter	6.最初と最後の頁 1194~1201
 掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d2sm01687g	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 Saito Kazuya, Yamamura Yasuhisa	4 .巻 96
2.論文標題 Reticular-Chemical Approach to Soft-Matter Self-Assembly: Why Are srs and noh Nets Realized in Thermotropics?	5 . 発行年 2023年
3.雑誌名 Bulletin of the Chemical Society of Japan	6.最初と最後の頁 607~613
掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1246/bcsj.20230075	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	4.巻 25
Kawase Yuki, Kutsumzu Shoichi, Udagawa Taro, Miwa Yohei, Yamamura Yasuhisa, Saito Kazuya	
2.論文標題 Room-temperature la3d phase obtained for the binary mixture containing different sizes of siloxanyl terminals	5 . 発行年 2023年
3.雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6.最初と最後の頁 19891~19898
掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d3cp02200e	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 Aoki Keiko M., Yamamura Yasuhisa, Kutsumizu Shoichi, Saito Kazuya	4 .巻 50
2.論文標題 Spontaneous formation of cubic phases: a molecular dynamics study for soft repulsive spherocylinders	5 . 発行年 2023年
3.雑誌名 Liquid Crystals	6.最初と最後の頁 1383~1391
掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/02678292.2022.2157502	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	. 211
	4 . 巻
Yamamura Yasuhisa, Ito Mizuki, Sugai Kazutaka, Noda Hiroshi, Galewski Zbigniew, Saito Kazuya	19
고 소수·振旺	r 284=/r
2.論文標題	5 . 発行年
Molecular aggregation in liquid-crystalline layers crucially affects their physics: smectic A	2023年
(SmA) - nematic (N) phase transition	
3.雑誌名	6.最初と最後の頁
Soft Matter	7245 ~ 7254
引載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)	査読の有無
10.1039/d3sm00958k	有
↑-プンアクセス	国際共著
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	該当する
13 JODA CIONSON XION JODA JODA CINIO EL XI	W1/0
. 著者名	4 . 巻
Saito Kazuya, Yamamura Yasuhisa	92
outto Nazuya, Talilaliluta Tabulitba	
	5.発行年
Three-Step Ordering of Classical Headless Spins Preferring Twists on Icositetrachoric	2023年
Honeycomb, a Four-Dimensional Analog of the Triangular Lattice	2020 1
RichleyCollib, a Pour-Dimensional Analog of the Triangular Lattice 3.雑誌名	6.最初と最後の頁
Journal of the Physical Society of Japan	0.取例C取及UD戶 -
Journal of the rhysical Society of Japan	
弱載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)	査読の有無
10.7566/JPSJ.92.054003	有
ナープンアクセス	国際共著
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	-
1 . 著者名	4 . 巻
齋藤一弥	17
· . 論文標題	5 . 発行年
分子科学としての物性研究の一断面 分子の運動と変形	2023年
	1
3.雑誌名	6.最初と最後の頁
B.雑誌名 Molecular Science	6.最初と最後の頁 A0128
Molecular Science	A0128
Molecular Science B載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)	A0128 査読の有無
Molecular Science	A0128
Molecular Science 引載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.3175/molsci.17.A0128	A0128 査読の有無 有
Molecular Science 引載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.3175/molsci.17.A0128	A0128 査読の有無
Molecular Science 引載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.3175/molsci.17.A0128	A0128 査読の有無 有
Molecular Science 副載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.3175/molsci.17.A0128 コープンアクセス オープンアクセスとしている(また、その予定である)	A0128 査読の有無 有 国際共著
Molecular Science 掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.3175/molsci.17.A0128 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)	A0128 査読の有無 有 国際共著 -
Molecular Science 引載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.3175/molsci.17.A0128 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)	A0128 査読の有無 有 国際共著
Molecular Science 引載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.3175/molsci.17.A0128 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) 1.著者名 齋藤一弥	A0128 査読の有無 有 国際共著 - 4 . 巻 48
Molecular Science 掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.3175/molsci.17.A0128 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) 1.著者名 齋藤一弥 2.論文標題	A0128
Molecular Science 掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.3175/molsci.17.A0128 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) 1.著者名 齋藤一弥	A0128 査読の有無 有 国際共著 - 4 . 巻 48
Molecular Science 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3175/molsci.17.A0128 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) 1.著者名 齋藤一弥 2.論文標題 棒状低分子のつくる立方対称超構造の形成機構	A0128 査読の有無 有 国際共著 - 4 . 巻 48 5 . 発行年 2023年
Molecular Science 掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.3175/molsci.17.A0128 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) 1.著者名 齋藤一弥 2.論文標題 棒状低分子のつくる立方対称超構造の形成機構 3.雑誌名	A0128 査読の有無 有 国際共著 - 4 . 巻 48 5 . 発行年 2023年 6 . 最初と最後の頁
Molecular Science 掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.3175/molsci.17.A0128 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) . 著者名 齋藤一弥 2. 論文標題 棒状低分子のつくる立方対称超構造の形成機構	A0128 査読の有無 有 国際共著 - 4 . 巻 48 5 . 発行年 2023年
Molecular Science 掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.3175/molsci.17.A0128 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) 1.著者名 齋藤一弥 2.論文標題 棒状低分子のつくる立方対称超構造の形成機構 3.雑誌名	A0128 査読の有無 有 国際共著 - 4 . 巻 48 5 . 発行年 2023年 6 . 最初と最後の頁
引載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3175/molsci.17.A0128 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) 1.著者名 齋藤一弥 2.論文標題 棒状低分子のつくる立方対称超構造の形成機構 3.雑誌名 C&I Communications	A0128
Molecular Science の の の の の の の の の の の の の	A0128
Molecular Science 掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.3175/molsci.17.A0128 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) 1.著者名 齋藤一弥 2.論文標題 棒状低分子のつくる立方対称超構造の形成機構 3.雑誌名	A0128
Molecular Science	A0128

1.著者名	4 . 巻
I · 自自口 Saito Kazuya, Yamamura Yasuhisa	4 · 공 91
out to hazaya, Tamamata Taoantoa	
2 . 論文標題	5.発行年
Headless Heisenberg Spin Models Preferring Twist on Triangular Lattice: Phase Transition under	2022年
External Field	
3.雑誌名	6.最初と最後の頁
Journal of the Physical Society of Japan	-
掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)	査読の有無
10.7566/JPSJ.91.074007	有
オープンアクセス	国際共著
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	-
1.著者名	4 . 巻
Saito Kazuya, Yamamura Yasuhisa	91
2.論文標題	5 . 発行年
Small Spin Clusters Mimicking a Temperature-Induced Phase Transition: Spins on Vertices of	2022年
Regular Octahedron and Icositetrachoron	
3.雑誌名	6.最初と最後の頁
Journal of the Physical Society of Japan	-
掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)	査読の有無
10.7566/JPSJ.91.104603	有
オープンアクセス	国際共著
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	-
1 . 著者名	4 . 巻
Kutsumizu Shoichi, Kawafuchi Akane, Yamamura Yasuhisa, Udagawa Taro, Otaki Takashi, Masuda	27
Masaki, Miwa Yohei, Saito Kazuya	= 7V./= h=
2. 論文標題	5 . 発行年
Stabilization of Bicontinuous Cubic Phase and Its Two Sided Nature Produced by Use of Siloxane	2021年
Tails and Introduction of Molecular Nonsymmetry	c = = = = = = = = = = = = = = = = = = =
3.雑誌名	6.最初と最後の頁
Chemistry - A European Journal	10293 ~ 10302
掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)	 査読の有無
10.1002/chem.202101233	有
オープンアクセス	国際共著
	四
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	-
1 英字夕	4 *
1. 著者名	4.巻 90
Saito Kazuya、Hishida Mafumi、Yamamura Yasuhisa	90
2 . 論文標題	
Two-Dimensional Spin Model Possibly Undergoing a Phase Transition: Heisenberg Model of Headless Spins Preferring Twist on Triangular Lattice	2021年
3 . 雑誌名	6.最初と最後の頁
Journal of the Physical Society of Japan	0.取別に取扱の具
Journal of the Physical Society of Japan	-
掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)	査読の有無
TO TOWN TO THE TOTAL TO THE TOTAL TO THE TOTAL T	
10.7566/JPS L 90.124003	
10.7566/JPSJ.90.124003	有
	有
オープンアクセス	
	有

1. 著者名	4 . 巻
Rozwadowski Tomasz、Yamamura Yasuhisa、Saito Kazuya	21
2.論文標題	5 . 発行年
Interplay between Melt and Cold Crystallization in a Smectic Liquid Crystal, 4-Pentylphenyl 4-	2021年
(trans-4-Pentylcyclohexyl)benzoate	
3.雑誌名	6.最初と最後の頁
Crystal Growth & Design	2777 ~ 2785
掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)	査読の有無
10.1021/acs.cgd.0c01682	有
オープンアクセス	国際共著
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	該当する

〔学会発表〕 計29件(うち招待講演 5件/うち国際学会 8件)

1 . 発表者名

Kazuya Saito, Yasuhisa Yamamura

2 . 発表標題

Reticular-Chemical Approach to Soft-Matter Self-Assembly: Why Do srs and noh Nets Realize in Thermotropics?

3 . 学会等名

Topological Soft Matter (国際学会)

4 . 発表年

2023年

1.発表者名

Kazuya SAITO

2 . 発表標題

Alkyl Chains in Liquid Crystals

3 . 学会等名

Polish Liquid Crystal Conference (招待講演) (国際学会)

4.発表年

2023年

1.発表者名

Izumi Akihiro, Yasuhisa Yamamura, Kazuya Saito

2 . 発表標題

Schiff base liquid crystal compounds exhibiting HexB phase, 2MBAC and 4MBAC

3 . 学会等名

YOUNG MULTIS 2023 (国際学会)

4.発表年

2023年

1 . 発表者名 Toshihiko Oka, Yasuhisa Yamamura, Shoichi Kutsumizu, Kazuya Saito
2 . 発表標題 Aggregation Structure of Chiral Cubic Liquid Crystals Revealed by X-ray Diffraction Utilizing a New Algorithm
3 . 学会等名 7th International Soft Matter Conference(国際学会)
4 . 発表年 2023年
1 . 発表者名 Yasuhisa Yamamura
2 . 発表標題 Phase Transitions and Molecular Packing Modes in Smectic Liquid Crystal Phases
3 . 学会等名 26th IUPAC International Conference on Chemical Thermodynamics (ICCT2023)(招待講演)(国際学会)
4 . 発表年 2023年
1.発表者名 Kazuya SAITO
2 . 発表標題 Small Spin Clusters Mimicking a Temperature-Induced Phase Transition
3 . 学会等名 Multiscale Phenomena in Condensed Matter (MULTIS2022)(招待講演)(国際学会)
4 . 発表年 2022年
1.発表者名 齋藤一弥
2. 発表標題 正多面体型スピンクラスターの示す温度誘起相転移様挙動
3.学会等名 日本応用数理学会2022年度年会(招待講演)
4 . 発表年 2022年

1.発表者名
Kazuya SAITO
2 . 発表標題
Phase Transition in Finite System?
3.学会等名
Virtual International Assembly on Calorimetry and Thermal Analysis (VIACTA 2022)(招待講演)(国際学会)
(34.54.5.4.5.4.5.4.5.4.5.4.5.4.5.4.5.4.5.
2022年
│ 1 . 発表者名

K.M. Aoki, Y, Yamamura, S. Kutsumizu, K. Saito

2 . 発表標題

Spontaneous Formation of Cubic Phases

3 . 学会等名

28th International Liquid Crystal Conference (ILCC2022)(国際学会)

4.発表年

2022年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

•

6.研究組織

	・ WI プレドロド4以		
	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
	山村 泰久	筑波大学・数理物質系・准教授	
研究分担者	(YAMAMURA Yasuhisa)		
	(80303337)	(12102)	

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			
ポーランド	プロツワフ大学	核物理学研究所	ジェシュフ工科大学	