

2023 年度年次報告書

未踏探索空間における革新的物質の開発

2023 年度採択研究代表者

荒岡 史人

理化学研究所 創発物性科学研究センター
チームリーダー

強誘電性ネマチックの学理深化と機能開拓

主たる共同研究者:

佐野 航季 (信州大学 学術研究院 助教)

渡辺 豪 (北里大学 未来工学部 教授)

研究成果の概要

本研究は、類い希なる流動する強誘電体である「強誘電性ネマチック」について、その学理進化和新奇応用物性への展開を目的としている。近年注目を集める本系は、偶然に発見されたという背景もあり、これを呈する分子もいまだ決して多くはない。そこで、スタートアップである本年度は、課題1においてまず、強誘電性ネマチックに特化したハイスループット合成法の確立と分子種の拡充を起点とし、それによる分子ライブラリ構築を第一目標として研究を行った。ここでは、近年注目を集めている、機械的な震盪による刺激で化学反応を進行させるボールミル装置を用いたメカノ合成法を採用している。この手法はドライな条件下で行うことを基本とするが、微量の溶媒を加えることによる粘稠性、ヒートガンによる温度制御など、緻密な条件探索を行うことで、さらに高効率な液晶合成法として確立させることに成功した。特筆すべきは、従来の溶液反応で数時間以上かかっていた各反応プロセスが数分で完了することである。このことは、多くの液晶のような、分子の構成部位がブロック化され、これを繋げてゆく分子合成において、特に高い効率化効果が得られる。こうして達成した高効率合成法により、当初より目的としている新規な強誘電性ネマチック分子を複数発見することにも成功した。

課題1では、計算化学による構造の理解も試みている。全原子を考慮した分子動力学計算により、一部の新規分子については極性局所構造の再現に成功している。またハイスループット合成により拡充された分子ライブラリを活用した機械学習についても進めている。機械学習については、既報の分子に上記の新規分子を加えたライブラリにより、いくつかの異なる記述子の比較と予測モデルの組み合わせを検討し、強誘電性に寄与する分子部位や、分子内の分極分布にあたりをつけることができている。このほか理論面では、平均場理論を拡張したモデルにより自由エネルギーを考察し、強誘電性ネマチックにおける電場摂動の効果を提示した。連続体として液晶を考えた場合の強誘電性ネマチックの理論は、物質そのものと同様、まだ多くはない。このため、こうした理論研究は他に先駆けるものであり、今後の理論的な理解に先鞭をつけるものであるといえる。

【代表的な原著論文情報】

- 1) Hiroya Nishikawa, Dennins Kwaria, Motonobu Kuwayama, Atsuko Nihonyanagi, Fumito Araoka, Mechano-chemical synthesis of liquid crystal materials: an easy method towards fast, simple and almost solvent-free molecular screening, *Liquid Crystals*, 51, (2024)
- 2) A. V. Emelyanenko, V. Yu. Rudyak, S. A. Shvetsov, F. Araoka, H. Nishikawa, K. Ishikawa, Transformation of polar nematic phases in the presence of an electric field, *Physical Review E*, 109, 014701, (2024)