

## 2020年度共同利用研究報告書

2022年04月05日

所属・職名 九州大学・マス・フォア・インダストリ研究所・教授

鍛冶 静雄

		整理番号	20200007
1.研究計画題目	機能性液晶の探索に向けたトポロジー手法		
2.新規・継続	新規		
3.種別	プロジェクト研究		
4.種目	短期共同研究		
5.研究代表者	氏名	鍛冶 静雄	
	所属 部局名	九州大学・マス・フォア・インダストリ研究所	職名 教授
6.研究実施期間	2021年02月04日(木曜日)～2021年02月04日(木曜日)		
	2022年03月28日(月曜日)～2022年03月30日(水曜日)		
7.キーワード	液晶、分子間相互作用、相転移、ホモトピー、擬ベクトル場、最適輸送、トポロジカル欠陥、ディスクリネーション、双安定性		
8.参加者人数	28人		

### 9.本研究で得られた成果の概要

化学、物理、数学よりなる参加者の間で、3年前より定期的に勉強会を開き、問題をお互いの言葉に翻訳してきた(JSTさきがけの補助を受けている)。また、内田・中野・鍛冶は液晶一分子の情報から、集団の性質である相転移温度を予測する手法を機械学習を用いて開発し、最近の研究に良くみられる予測にとどまらず、ランダウ理論により仮定される秩序変数が上下温度のどちらの相に属するかという物理的な仮説の検証を行なっている。吉田・横山・鍛冶は基板や電場により配向の境界条件を制御する技術を用いて、トポロジカルな制約を作り出すことで複雑な欠陥を実現する研究を行なっている(科研費基盤Bの補助を受けている)。1年前より太田が加わり、最適輸送の観点から配向場の時間発展を捉える方法を模索している。今回の短期共同研究を受けて上記の議論を発展させた内容について、学会発表2件(物理的仮説のデータドリブンな検証・トポロジカルな欠陥の強制)を行い、それぞれ論文執筆準備中である。

2020 年度九州大学 IMI 共同利用・短期共同研究

## 機能性液晶の探索に向けたトポロジー手法

Topological methods for liquid crystal  
報告書

2022 年 3 月 30 日

九州大学マス・フォア・インダストリ研究所  
鍛冶 静雄 (Shizuo KAJI)

### *Abstract*

Most nematic liquid crystals are uniaxial and can be modelled by line fields. Defects are then modelled by the singularity of the field. Recent development in experimental chemistry has enabled to impose various boundary conditions on the orientation field of liquid crystal. Controlling and designing the orientation fields with desired defects has practical applications in addition to theoretical interests. However, topological and geometrical study of the alignment of liquid crystal is yet to be developed. The aim of this research project is to investigate problems such as existence and distribution of defects, and transition of them by use of homotopy theory and optimal transport. Their solution would provide machinery to control orientation field and lead to discovery of a novel functional liquid crystal.

Keywords: Liquid crystal, Intermolecular interactions, phase transition, homotopy, pseudo vector field, optimal transport, disclination, bistability, Machine learning, Chemoinformatics

キーワード：液晶、分子間相互作用、相転移、ホモトピー、擬ベクトル場、最適輸送、トポロジカル欠陥、ディスクリネーション、双安定性、機械学習、ケモインフォマティクス

## 1. はじめに

液晶は固体と液体の間にある物質の状態、秩序と無秩序の双方の性質を備える。その特性は液晶ディスプレイなどに応用されている。液晶を構成する分子は対称性を持ち、例えばネマティック相では棒状の分子が規則を持った配向を取る。実験技術の進歩により、コロイドを導入したり、境界条件を基板に印刷することで、配向を操作したり、配向状態を観察することが可能となっている。ネマティック相の配向は、空間の各点に方向が指定された場 (line field) として定式化される。これは局所的にはベクトル場から向きを忘れたものである。配向のトポロジカル欠陥は

この場の特異点として記述される。トポロジカル欠陥は、ドーパント分子の局所的な濃度増大を促すことや自己組織化を促進することなどが見いだされ、近年、局所的な機能創成の方法として注目を集めはじめている。欠陥の存在や分布は位相的な制約を受ける。例えば、Poincare-Hopfの定理の line field への拡張がその解析に適用できることが知られているが、この拡張は近年ようやく得られた。このように、配向を記述するための数学はまだ整備途上にある。本研究では、液晶に適用可能なトポロジーと幾何、特にホモトピー論・最適輸送の理論を開発することを目指す。液晶の配向が受けるトポロジー制約を解明し、制御することで、新しい現象や機能を持った液晶の発見につながることを期待される。

## 2. 背景

化学、物理、数学よりなる参加者の間で、JST さきがけの補助を受けて、3年前より定期的に勉強会を開き、問題をお互いの言葉に翻訳してきた。また、内田・中野・鍛冶は液晶一分子の情報から、集団の性質である相転移温度を予測する手法を機械学習を用いて開発し、最近の研究に良くみられる予測にとどまらず、ランダウ理論により仮定される秩序変数が上下温度のどちらの相に属するかという物理的な仮説の検証を行なっている。吉田・横山・鍛冶は基板や電場により配向の境界条件を制御する技術を用いて、トポロジカルな制約を作り出すことで複雑な欠陥を実現する研究を行なっている(科研費基盤 B の補助を受けている)。さらに太田の専門である最適輸送の観点から、配向場の時間発展を捉える方法を模索してきた。

## 3. 実施状況

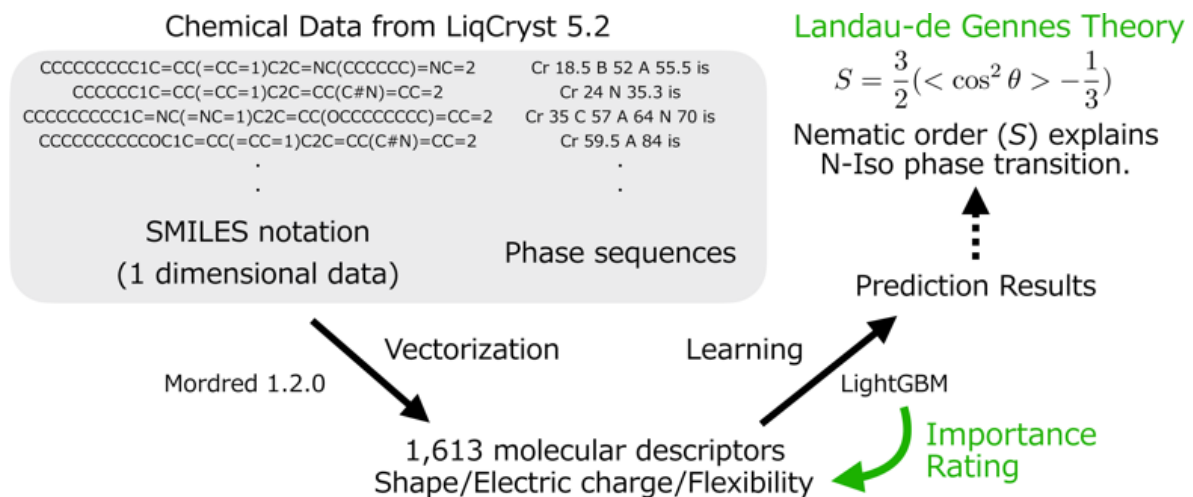
2021年2月4日(木)に公開プログラムとして、物理・化学・数学からさまざまな視点により液晶研究についての4つの講演を得た。(詳細な内容については、本報告書最後に添付するアブストラクトを参照のこと)新型コロナウイルスの感染拡大状況を踏まえて、Zoomによるオンライン開催となった。液晶の化学的・物理学的な基礎、ベクトル場を用いた配向の数学的な定式化、ホモトピー論による欠陥の記述、最適輸送を用いた物理現象の勾配流によるモデル化などを概説する講演を設けることで、化学・物理・数学の分野を繋ぎ、問題の共有を図った。28名の参加者は、さまざまなバックグラウンドを持つ研究者・学生であったが、専門外の分野の知識を概観し、液晶研究における多様なアイデアを共有して活発な議論が行われた。

非公開プログラムについては、対面での議論を基本とするため、感染状況を睨みながら開催時期を模索し2021年度に延長した。当初の延期後開催予定としていた夏はちょうど感染拡大時期と重なって再延期となり、結局2022年3月28日(月) -- 2022年3月30日(水)にオンラインにて開催することとなった。期間中はZoomにより組織委員参加者の間で、配向場のトポロジー解析、時間発展の最適輸送による記述、それらの実験実装のための具体化が議論された。

## 4. 研究成果

参加者による共同研究により、以下の二つの具体的な成果を得た。

液晶の相転移挙動は、物理学者によって現象論的な理論で秩序変数を使って説明されてきた。この秩序変数は、一般に単一分子の性質を粗視化した平均場理論によって説明されるが、どのような構造に着目し、どう粗視化を行うかは物理学者の直観に委ねられる。一方、近年の機械学習の発展により、物理的な仮定から独立してデータから転移挙動を高精度で予測することが可能となっている。後者の手法を、前者の理論構築に活かすことはできないであろうか。本共同研究の一つの成果として、液晶の大規模データベースを用いて、液晶理論の仮定を検証するスキームを考察した(参考の 1, 2)。その応用として、現象論的ランダウ理論の仮定(転移点下の相の性質に着目して秩序変数を設計する)と、液晶の平均場理論を構築するために一般的に行われている分子形状や分子間静電相互作用に加えて、分子の柔軟性を仮定する必要性が示唆された。このような洞察は、マテリアルインフォマティクスの新しい側面であると同時に、新材料特性を持つ化合物を創製するための、定量的なメソスケール理論につながる可能性がある。



データによる仮説検証のフレームワーク

液晶の配向場の特異点は欠陥と呼ばれ、これをコントロールすることは理論上も応用上も非常に重要である。参加者の吉田は、基板上にプリントを施すことで、境界条件を設定できることを用いて、基板に挟まれた薄いネマティック液晶の層にさまざまな欠陥を生成してきた。一方、数学的には、特異点の数や種類はトポロジーの制約を受ける。今回は、ウォールというそれ自身は欠陥では無いが、平面に射影すると線状の特異性をもつ構造について、パリティの異なる二つのウォールが衝突する時に特異点が生成されることを証明した(参考の 3)。これは、配向場を変換することでカピラリーの標準的な特異点に帰着するというそれ自体面白いテクニックによる。さらにウォールの交差やアレイといった複雑な状態に考察を広げている。

## 参考

- 1) Yoshiaki Uchida, Shizuo Kaji, Naoto Nakano, **Chemical-Data-Driven Validation of Physical Theories of Liquid Crystals**, in preparation
- 2) 内田幸明, 鍛冶静雄, 中野直人「化学的データを用いた液晶の物性理論の検証」, 日本化学会 第102春季年会, 2022
- 3) 中山雄介, 吉田浩之, 鍛冶静雄, 横山知郎, 尾崎雅則「ネマティック液晶のツイストウォールを利用した点欠陥の生成」, 日本物理学会 2021年秋季大会, オンライン, 2021

## 機能性液晶の探索に向けたトポロジー手法

Topological methods for liquid crystal

日時： 2021年2月4日（木） 13：00 ～ 16：30

場所： オンライン（Zoomミーティング）

### 2月4日（木）

13：00-13：10 開会のあいさつ

13：10-13：40

講演者： 内田 幸明（大阪大学大学院基礎工学研究科・准教授）

講演タイトル： 液晶の分子設計のための分子論

Speaker: Yoshiaki Uchida

Title: Molecular Theory for Molecular Design of Liquid Crystals

液晶の機能を設計するとき、機能の発現に必要な配向場を設計する前段階として、ターゲットとなる機能の発現に必要な部位を含む分子に、ターゲットとなる液晶相を発現させる必要がある。この分子設計の段階で頼りにすべき液晶の分子論では、分子の微細構造が捨象されているため、大まかな指針のみが得られるのが現状である。本講演では、分子の微細構造の設計に利用可能な分子論を構築するための最近の取り組みについて紹介する。

14：00-14：40

講演者： 太田 慎一（大阪大学大学院理学研究科・教授）

講演タイトル： 最適輸送理論と発展方程式

Speaker: Shin-ichi Ohta

Title: Optimal transport theory and evolution equations

話題提供として、確率測度間の最小輸送コストを扱う最適輸送理論、その輸送コストを確率測度間の距離と見なす Wasserstein 距離について概説した後、熱方程式などの発展方程式の解が、対応するエントロピーの Wasserstein 距離で測った勾配曲線（エントロピーが最も効率良く減少する曲線）と解釈できることを紹介する。

14：50-15：30

講演者 : 横山 知郎 (京都教育大学・准教授)

講演タイトル: 構造の分類と表現する手法 - Poincare-Bendixson 定理と接触構造

Speaker: Tomoo Yokoyama

Title: Methods for classifications and representations of flow structures:  
Poincare-Bendixson theorem and contact structures

本講演では、液晶の解析に利用できる道具を探索するため、いくつかの力学系と幾何学の概念や定理を紹介する。実際、2次元空間上の流れを極限集合の分類 (Poincare-Bendixson 定理) とある種の有限的な特異点の分類について紹介する。さらに、有限的な曲面流の空間分解について紹介する。他方、液晶の幾何構造のモデルとして用いられている、3次元空間上の接触構造を紹介する。

15:40-16:20

講演者 : 吉田 浩之 (大阪大学大学院工学研究科・講師)

講演タイトル: 界面配向制御を通じた液晶の欠陥生成

Speaker: Hiroyuki Yoshida

Title: Generation and control of defects through surface anchoring control in liquid crystals

ネマティック液晶の配向場は頭尾の区別の無い、ダイレクタベクトルによって記述される。液晶配向場には点、線や環状の欠陥が存在し、制御および観察が比較的容易であることから、他の物質系では見られない複雑な欠陥の生成や、それらを利用した機能創製を目指した研究が行われている。本講演では、液晶を保持するガラス基板の界面配向を通して欠陥を制御する発表者らの取り組みについて紹介する。

16:20-16:30 閉会