

化学的データを用いた液晶の物性理論の検証

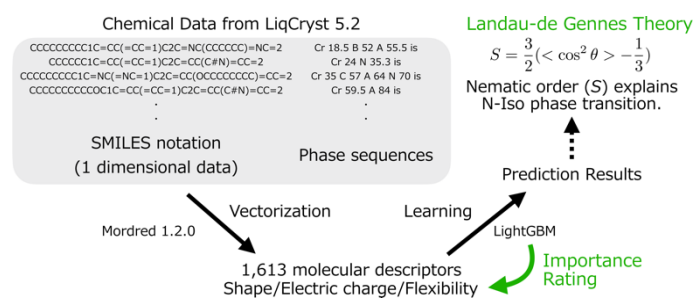
(阪大院基礎工¹・九大IMI²・京大国際高等教育院³) ○内田 幸明¹・鍛冶 静雄²・中野 直人³

Chemical-Data-Driven Validation of Physical Theories of Liquid Crystals (¹*Graduate School of Engineering Science, Osaka University*, ²*Institute of Mathematics for Industry, Kyushu University*, ³*Institute for Liberal Arts and Sciences, Kyoto University*) ○Yoshiaki Uchida,¹ Shizuo Kaji,² Naoto Nakano³

Liquid crystalline phases are states that molecules with anisotropic shapes exhibit, but physicists explain their properties not based on molecular fine structures but based on intuitive assumptions. The phase transition behaviors have been explained with order parameters in phenomenological theories. Order parameters are generally accounted for by single molecular properties in microscopic mean-field theories. In contrast, we will introduce a chemical data-driven method to test and develop physical theories which are useful for the materials chemistry. As examples, we tested the assumptions of the phenomenological Landau theory of liquid crystals, and confirmed the importance of molecular flexibility in addition to the molecular shape and intermolecular electrostatic interactions commonly accounted for in mean-field theories of liquid crystals.

Keywords: *Liquid Crystals; Machine Learning; Phenomenological Theory; Mean Field Theory*

液晶相は異方的な形状を持つ分子が示す状態であるが、物理学者は分子構造ではなく、物理的直感に基づいてその特性を説明する。例えば、相転移挙動は、現象論的な理論で秩序変数を使って説明されてきた¹⁾。また、この秩序変数は、一般に単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²⁾。本講演では、化学データを用いて、物理的な仮定から独立して物理理論を検証し、これを材料化学に適用できる形に発展させる手法を紹介する。この手法により液晶の現象論的ランダウ理論の仮定を検証できたほか、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、全く新しい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。



1) P. G. de Gennes, J. Prost, *The Physics of Liquid Crystals* (Oxford University Press, New York, 1993).

2) M. Osipov, Molecular Theories of Liquid Crystals. *Handbook of Liquid Crystals*, 1–54 (John Wiley & Sons, 2nd Edition, Vol. 1, Chap. 5, 2014).