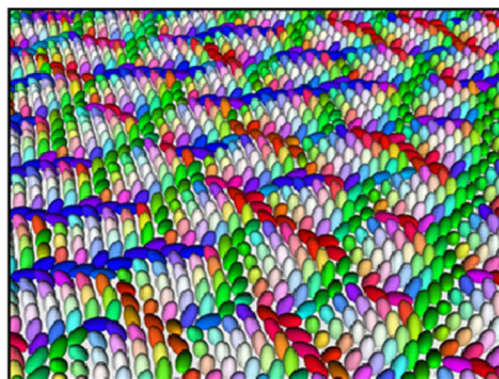
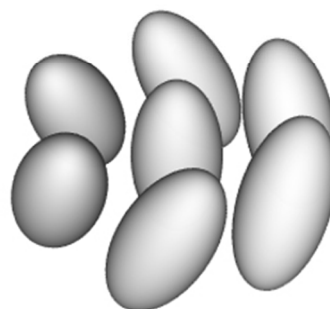
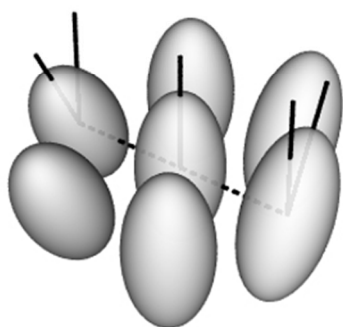


らせん



ハーフスキルミオン



トポロジカル材料を力で操る
 ～分子の形とねじれを制御する、独自の分子モデルで解明～

1. 発表者：

高江 恭平（東京大学 生産技術研究所 特任講師）

川崎 猛史（名古屋大学 大学院理学研究科 講師）

2. 発表のポイント：

- ◆らせん状や渦巻き状など鏡像と重ならない複数の構造を示す「トポロジカル材料」の相転移を制御するモデルを新たに提案した。
- ◆トポロジカル材料の相転移で力を生み出せること、力で相転移を制御できることを明らかにした。
- ◆電気・磁気のみならず、力学的にも機能を発揮するトポロジカル材料を設計する基礎的な物理原理を提供した。アクチュエータや圧電素子などへの応用が期待される。

3. 発表概要：

磁性体や液晶などの物質は、内部の分子がらせん状の構造やスキルミオン（注1）と呼ばれる渦巻き状の構造を形成する場合があります。これらの構造は、その鏡像と重ね合わせることができない「キラリティ」という性質をもちます。これらキラリティを示す複数の構造を総称してトポロジカル相と呼び、トポロジカル相を電場や磁場で制御することにより、磁気メモリなどへ応用することが注目されています。一方、これらのトポロジカル相をもつ物質の多くは、結晶であるため弾性を持ち、トポロジカル相を力学的に制御する可能性も注目されていま

す。しかし、これまでの研究では、トポロジカル相への相転移における、物体の弾性場（注2）の役割は明らかにされてきませんでした。

東京大学 生産技術研究所の高江 恭平 特任講師、名古屋大学 大学院理学研究科の川崎 猛史 講師の研究グループは、トポロジカル相を分子形状およびキラリティに由来する分子間のねじれにより制御可能な分子モデルを提案し、コンピュータシミュレーションにより、相転移における弾性場の発現、および応答の物理的な解明を目指しました。隣り合った分子間に働くねじれの強さを制御することで、ねじれが弱い時は分子の向きが揃った均一相、ねじれを強くすると分子の向きがねじれたらせん相、さらにねじれを強くすると分子が渦状に並んだハーフスキルミオン（注3）相へと、トポロジカル相転移を制御することに成功しました。この相転移は、分子配向の変化を伴うものであるため、相転移により物体が変形し、弾性場、すなわち力が発生すること、またその結果として、外から力を与えることで、これらの相を制御できることを明らかにしました。この結果は、電気・磁気のみならず、力学的にも高機能なトポロジカル材料を設計するための基礎的な物理原理を提供するものであり、アクチュエータや圧電素子への応用など実用上のインパクトも大きいと期待されます。

本成果は2022年3月28日に *Proceedings of the National Academy of Science of the United States of America* 誌（PNAS、米国科学アカデミー紀要）で公開されました。

4. 発表内容：

ある物体がその鏡像と重ね合わせることができないという性質を表す「キラリティ」は、物理学・化学・生物学・薬学など、さまざまな分野において重要な役割を担っています。例えば、糖、アミノ酸、タンパク質など、生体を構成している物質の多くは「キラルな物質」です。キラルな物質には、光学異性体と呼ばれる、鏡合わせの関係にある物質が存在します。生体内では、キラル物質のうち、一方の立体構造をもつものが選択的に用いられていることが知られています。このため、創薬の際、化合物のキラリティは極めて重要な役割を担います。実際、キラル物質を用いた医薬品は、一方の立体構造をもつ物質のみが薬として機能し、またもう一方は毒になることが知られています。そのため、キラル物質において、一方の立体構造のみを選択的に合成する不斉合成と呼ばれる技術は大変重要であり、この技術を開発した野依良治博士は2001年にノーベル化学賞を受賞されています。キラリティは材料科学においても、現在、盛んに研究されています。特に、磁性体や液晶などの物質においては、スピン（注4）や分子が、らせん状の構造や、スキルミオンと呼ばれる渦巻き状の構造など、キラリティを示す構造を形成する場合があります。このような構造を示す物質をトポロジカル物質と呼び、2016年にはノーベル物理学賞の対象にもなりました。近年、電場・磁場などの外場を与えることで、このようなトポロジカル相を制御する研究が進展しており、磁気メモリへの応用など、省エネルギーの観点からも注目されています。これらのトポロジカル物質の多くは結晶であるため、弾性を持ちます。そのため、トポロジカル相の力学的な制御も、電場や磁場と同様に注目されています。ところが、これまでの研究では、トポロジカル相の発現における弾性場の役割は明らかにされてきませんでした。

東京大学 生産技術研究所の高江 恭平 特任講師、名古屋大学 大学院理学研究科の川崎 猛史 講師の研究グループは、トポロジカル相を分子形状および分子間のねじれにより制御可能な分

子モデルを提案し、コンピュータシミュレーションにより、相転移における弾性場の発現、および応答の物理的な解明を目指しました。本研究で扱う分子は、分子自体がもつキラリティに由来して、隣り合った分子同士は、ねじれた配置をとるとき、安定になります。そこで、分子の形状を変化させ、隣り合った楕円体分子間に働くねじれの強さを制御したところ、多様なトポジカル相転移を制御することに成功しました（図1）。具体的には、ねじれが弱い時は、分子の向きが揃った均一相、ねじれを強くしていくと分子の向きがねじれたらせん相、そしてさらにねじれを強くすると分子が渦状に配向したハーフスキルミオン相への相転移が起こることを明らかにしました。さらに、ハーフスキルミオン相内部においても、ハーフスキルミオンの配列が、液体相、ヘキサチック相（注5）、結晶相と相転移していく現象が観測されました。

本研究で観測されたさまざまなトポジカル相転移は、分子配向の変化を伴います。そのため、楕円体分子の向きが変わると、そちら方向に物体が伸びるという性質をもち、変形を伴います。このことから、相転移により弾性場が発生すること、そして、その結果として、外から力を与えることで、これらの相を制御できることを明らかにしました。この結果は、アクチュエータや圧電素子などの工学的応用につながるものと期待されます。本シミュレーション研究で対象としたような、形状に異方性のある分子は、液晶分子やセルロース、コロイド粒子などを用いて実験的に作製可能であることから、本研究の結果は、分子結晶やコロイド結晶を用いて、電気・磁気のみならず、力学的にも高機能なトポジカル材料を設計するための基礎的な物理原理を提供するものであり、実用上のインパクトも大きいものと期待されます。

本研究は、日本学術振興会 新学術領域研究ソフトクリスタル（JP17H06375）、特別推進研究（JP20H05619）、新学術領域研究量子液晶の物性科学（JP20H05157）、基盤研究（JP20H00128, JP19K03767, JP18H01188）の支援を受けて実施しました。

5. 発表雑誌：

雑誌名 : 「*Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America* (PNAS, 米国科学アカデミー紀要)」 (3月28日)
論文タイトル : Emergent elastic fields induced by topological phase transitions: Impact of molecular chirality and steric anisotropy
著者 : Kyohei Takae and Takeshi Kawasaki
DOI 番号 : 10.1073/pnas.2118492119
URL : <https://www.pnas.org/doi/full/10.1073/pnas.2118492119>

6. 用語解説：

(注1) スキルミオン

分子の回転角が渦状に変化している構造の一種。スキルミオンの中心に位置する分子と外周に位置する分子は180度向きを変えているが、本研究では分子の頭尾を区別しないため、両者は同一である。その間の分子は少しずつ角度を変えて配列している。スカーミオンともいう。

(注2) 弾性場

ある物体に対して、外部から、あるいは自然に力がかかっているとき、均一ではなく、空間的に不均一に分布している力および変形のこと。

(注3) ハーフスキルミオン

分子の回転角が渦状に変化している構造の一種。スキルミオンとは異なり、渦の外周に位置する分子が中心の分子と垂直になっており、分子の回転角がスキルミオンの半分であるためこのように呼ばれる。メロンともいう。

(注4) スピン

磁石は分割しても磁石であるが、どんどん分割していき、原子の大きさまで達しても、やはり磁石のままである。このときの、おのおのの原子がもつ磁石のことをスピンという。

(注5) ヘキサチック相

スキルミオンのように2次元的な構造を持つ系において現れる、液体と固体の中間相のこと。

7. 添付資料：

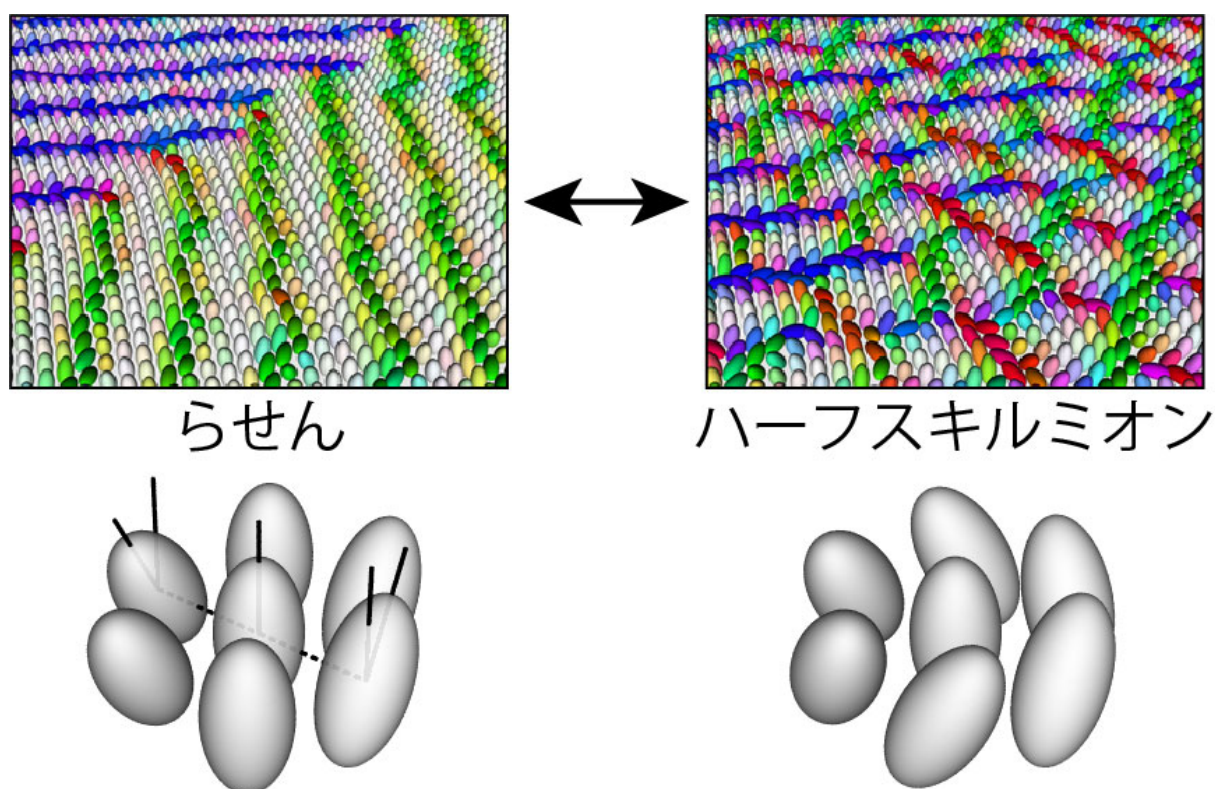


図1 新たに提案した分子モデルによるトポロジカル相の制御

分子のもつキラリティに由来して、隣り合った分子同士にはねじれが働き、分子の向きが変化する。そのような分子を用いて単分子層の結晶をシミュレーションにより作製すると、分子の向きが一方向にねじれているらせん相（左図）と、分子の向きが渦状にねじれるハーフスキルミオン相（右図）との相転移を制御できる。色は各分子の向きを反映している。