

小テーマ名：A-2-2 理論的アプローチによる液晶混合設計指針の検討

『分子間相互作用の理解に基づく混合手法の開発』から変更]

液晶の高速化を支配する要因に、弾性率、粘性係数、誘電率に代表される液晶の諸物性が挙げられる。これらの物性値を制御し、本研究の柱となっている OCB モードの高速応答のためのオーダーメイドの液晶を作るためには、分子設計法と液晶混合法の両面からのアプローチが必要となる。本研究は、液晶の分子論と計算機シミュレーションを基盤として、液晶の高速応答性を目指した分子設計法と混合法の新しい指針を示すため取組してきた。

フェーズ I :

混合手法の多くは、長年積み重ねてきた経験、データベース、および試行錯誤によって確立されているが、本小テーマでは、混合によって変化する液晶の物性、構造を分子論的に理解することで、混合による物性制御の機構を解明し、どのような分子を設計し、どのような割合で混ぜれば良いか、という混合手法の指針を示すことを目的に、混合のためのモデル分子系について、理論および計算機シミュレーションを用いて混合の効果を検討した。実際の分子は、炭素、水素、酸素、フッ素などの原子から成る微細構造をもつ。それらの組み合わせと結合様式がどのように物性に影響するかを理解するのが最終的な目標であるが、まずはそういった微細な構造は捨象し、どんな分子でも一般的に持っている性格に着目する。今年度までは、分子の核同士が反発し合う効果—排除体積効果—のみを考慮し、分子のモデリングを行った。このように排除体積効果のみを考慮した分子モデルを剛体分子モデルという。剛体分子モデルは、単純な分子間相互作用のみを考慮したものであるが、手法を試行するには適したモデルである。図 1 (a) の剛体冠球円柱は、直径 D_c 、長さ L の円柱の両端に半球を被せ

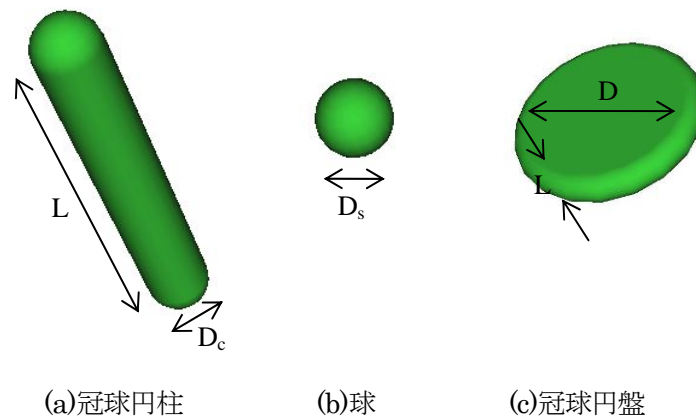


図 1 剛体分子モデル

たかたちのものであり、 L/D_c の値によって、液晶相としてはネマチック液晶とスメクチック液晶を示すことが知られている [1, 2]。本小テーマでは、液晶系に加える添加剤の効果を議論するために、図 1 (a) の剛体冠球円柱と図 1 (b) の剛体球の混合系を、理論とシミュレーションの両面から取り扱った。また、円盤状の液晶分子が形成する液晶相を取り扱うため、図 1 (c) に示す剛体冠球円盤モデルを検討した。冠球円盤は、直径 D の円盤上に中心をもつ直径 L の球の集合からなる円盤で、冠球円柱を円盤に拡張したモデルである。

フェーズ II :

可能な限り短い時間で、実際の液晶の物性値を予測するシミュレーションに関しては、8 個の分子から成る系について、5CB と 50CB で比較をしてみたところ、密度について実験値（正しいもの）を与えてやれば、配向のオーダーパラメーターについては、シミュレーションで実験値を再現できるという結果を得た。

液晶のフルアトムシミュレーションについては、特定の問題について、個別に行われているのが現状で、汎用的に液晶の分子設計をするための研究は、これから発展していく分野であり、本計画は、その出発点と考えられる。

今後の取組 :

シミュレーター自身の実用化には至らなかったが、そのための萌芽と考え、プロジェクト終了後も、得られた成果の継承と発展を続けたい。シミュレーションの再現確認と、他の系への適用可能性を検討する必要がある。粗視化分子モデルとフルアトムモデルの両面から検討し、発展的に他の競争的資金などへの応募課題へと展開したい。

小テーマ名：A-2-3 配向膜の構造とチルト角の相関説明

『配向膜構造と液晶分子配向の相関に関する検討』から変更

液晶の表示モードの一つである OCB モードの高速化のためには、液晶の物性値の改善と共に、液晶ディスプレイ基板と液晶の界面相互作用の制御が不可欠である。従って界面の調整法と液晶の応答速度との相関を評価することが重要である。さらに、液晶ディスプレイの大画面化に向けた ODF 工程においては界面と液晶流動との相関が求められており、界面特性に関する系統的な検討が必要であるため、液晶分子と直接接する配向膜の分子構造に着目し、応答特性、液晶流動に関する系統的な検討を行った。

フェーズ I :

様々な液晶モードが存在する中で、OCB (Optically Compensated Bend) モードは、視野角特性と応答特性に非常に優れた特徴を有している。本研究では TN モード、OCB モードの液晶セルを製作し、応答特性を中心にラビング強度との関係を調べた。ビング装置ならびに応答速度評価装置を作製し、ラビング強度の増加に伴い安定した応答速度を示し、ポリイミド配向膜の側鎖分率の増加に伴い、応答速度が増加することを明らかにした。図 1, 2 に液晶に 5CB を用いた場合のラビング強度と立ち上がり速度、立ち下り速度との関係を示す。t_{on} は印加電圧を上げると短くなっているが、t_{off} は印加電圧を上げると長くなっている。

図 3, 4 に OCB モード用に調整された液晶を用いたセルの応答がラビング強度によって変化する様子が示してある。図 3, 4 で特徴的なのは、応答速度に最小値を与えるラビング強度が存在するという点である。ラビングが不十分でも過剰でも応答速度が落ち、最適なラビング強度の存在を示唆する重要な結果である。

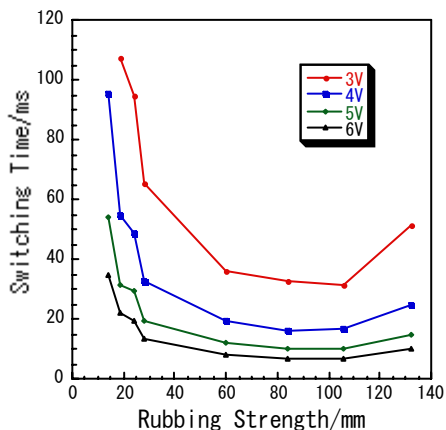


図 3 OCB 液晶セルのラビング強度に対する立ち上がり応答時間

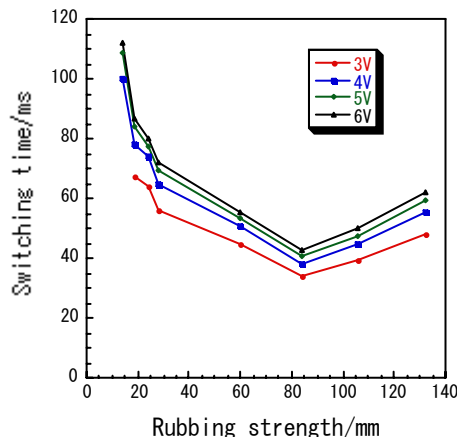


図 4 OCB 液晶セルのラビング強度に対する立ち下がり応答時間

フェーズ II :

フェーズ II では、分子構造（特に側鎖の分率）の異なるポリイミド配向膜を合成して、ガラス基板上に塗布したときの界面構造とプレチルト角、応答速度およびスプレイ・ベンド転移との間の相関を明らかにし、液晶の高速化に効果的な配向膜の分子構造に関する知見を得ることを目標に取組した。

その結果、側鎖に液晶基を導入した OCB モード用ポリイミド配向膜の分子構造と応答速度の関係を明らかにすることを目的として、側鎖を有するジアミンの仕込み比を変えて、側鎖の量を系統的に変化させたポリイミドの合成を行った。現在までに側鎖置換率 10, 30, 50% の 3 種のポリイミドを合成した。合成したポリイミドを用いてラビング強度の異なる液晶セルを作製し、プレチルト角と応答速度測定を行なった。スプレイ・ベンド転移に関しては、側鎖置換率およびラビング強度の異なる配向