

研究成果（小テーマにつき2ページ以内でまとめてください）

<p>サブテーマ名：A-2 液晶応答速度の高速化 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]</p>
<p>サブテーマリーダー（所属、役職、氏名） 弘前大学 理工学部 教授 吉澤 篤 研究従事者（所属、役職、氏名） 山形大学 工学部 助教授 香田 智則</p>
<p>研究の概要、新規性及び目標</p> <p>①研究の概要 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、液晶の高速応答化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のものである。</p> <p>②研究の独自性・新規性 液晶の物性と分子構造や組成の相関についての理論は、分子間の引力を中心に考える引力モデルと斥力を中心にとらえる斥力モデルを軸に発展してきた。引力モデルは、サーモトロピックな液晶相転移を、また、斥力モデルはリオトロピックな液晶相転移を定性的に説明し、引力モデルと斥力モデルの混合モデルは、引力と斥力が相補的に液晶の物性に影響を与えることを明らかにしてきた。 このように、これまでの分子論は、主にネマチックと等方相間の相転移について定性的ではあるが有益な解釈を行ってきた。より高度な物性制御のためには、弾性率、粘性係数、誘電率に関する分子論的な指針が必要と思われるが、現状の分子論では、化学構造の詳細と物性値の相関を簡便に求められるには至っていない。ここでは、分子論的な手法と計算機的手法を基盤とし、分子の実際の化学構造、組成と諸物性の関わりを議論できる枠組みを作ることを試みる。計算機実験による試行と、分子論を組み合わせるところに、独自性と新規性がある。</p> <p>③研究の目標（各フェーズ毎に数値目標等をあげ、具体的に） フェーズⅠ 混合問題を扱うための手法を検討するために、簡単なモデルを対象とし、計算機的手法と分子論的手法の融合を試みる。 フェーズⅡ 実際の混合が、弾性率、粘性係数、誘電率に及ぼす効果を予測するための手法を構築する。他の小テーマの成果内容の分子論的な解釈による開発方針を提案する。また、基本的な液晶の応答挙動のシミュレーション用ソフトウェアを開発する。</p>
<p>研究の進め方及び進捗状況（目標と対比して） なるべく短い時間で、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ふ結果を得た。</p>

<p>主な成果 具体的な成果内容：得られた研究結果を研究テーマA-2-1へ移転した。</p> <p>特許件数：0件 論文数：6件 口頭発表件数：11件</p>																
<p>研究成果に関する評価</p> <p>1 国内外における水準との対比 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は、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。</p> <p>2 実用化に向けた波及効果 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。</p>																
<p>残された課題と対応方針について</p> <p>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。</p>																
	J S T負担分 (千円)							地域負担分 (千円)							合 計	
	H 13	H 14	H 15	H 16	H 17	H 18	小計	H 13	H 14	H 15	H 16	H 17	H 18	小計		
人件費	80	418	1,766	1,098	1,091	0	4,453	1,581	2,333	3,150	1,428	1,428	0	9,920	14,373	
設備費	0	328	419	0	0	0	747	50	0	0	0	0	0	50	797	
その他研究費 (消耗品費、 材料費等)	3,338	928	2,141	600	600	0	7,607	230	0	0	0	0	0	230	7,837	
旅費	38	164	539	289	347	0	1,377	0	0	0	0	0	0	0	1,377	
その他	9	5	93	74	55	0	236	0	0	0	0	0	0	0	236	
小 計	3,465	1,843	4,958	2,060	2,093	0	14,419	1,861	2,333	3,150	1,428	1,428	0	10,200	24,619	
<p>代表的な設備名と仕様 [既存 (事業開始前) の設備含む]</p> <p>J S T負担による設備： 地域負担による設備：パソコン</p>																

※複数の研究課題に共通した経費については按分する。