

PAb13

MDシミュレーションによる反強誘電性液晶の駆動電圧の予測

(株式会社デンソー) ○瀧川 賢司、林 仁志、宮崎 利邦
(三重大学 工学部) 山下 護

Estimation of Switching Voltage of Antiferroelectric Liquid Crystals
by Molecular Dynamics Simulation

Kenji TAKIGAWA, Hitoshi HAYASHI and Toshikuni MIYAZAKI (DENSO CORPORATION, 500-1 Minamiyama, Komenoki-cho, Nisshin, 470-0111)
Mamoru YAMASHITA (Department of Physics Engineering, Faculty of Engineering, Mie University, Kamihama-cho, Thu, 514-8507)

To develop a low switching voltage desirable for liquid crystal displays, the switching voltage is measured for several materials, together with constant temperature-pressure molecular dynamics simulation (MD simulation) to study the layer structure and the stability. By comparing these results such tendency comes out that as the switching voltage is higher, the difference of the internal energy at the ferroelectric state to that at the anti-ferroelectric one is larger.

1. はじめに

反強誘電性液晶の発見以来、高速応答性を生かした高精細な液晶表示素子の開発が盛んに行われてきた¹⁾。しかし、これまでに合成された反強誘電性液晶の総数はネマチック液晶のそれに比べて数は少ない。今回我々は新たな反強誘電性液晶を分子設計する一環として、MDシミュレーションソフト「MASPHYC」²⁾を用いて、液晶の駆動電圧を予測する手法について検討したので報告する。

2. 実験とシミュレーション

反強誘電性液晶を反強誘電相から強誘電相へ相転移するために必要な電界(駆動電界)は、液晶の反強誘電相と強誘電相の内部エネルギーの差と相関があると考え、十種類の「反強誘電性液晶の内部エネルギーの差」をシミュレーションにて計算し、実測した駆動電圧と比較した。

(1) 駆動電圧の測定

十種類の反強誘電性液晶をギャップが 1.6 μm のセルを用いて駆動電圧を測定した。セルはポリイミドを配向膜としてアンチパラレルにラビングし、球状のスペーサを介して作製した。各液晶化合物には SCA*相の上限温度から20°C低温において三角波($\pm 40\text{V}$, 1Hz)を印加し、飽和輝度の90%となる電圧を駆動電圧とした。

(2) MDシミュレーション

MD計算は、温度:100K, 300K、圧力:0.0001 GPa(一定)の条件にてシミュレーションを実行し、初期状態で規則的に配列させた分子を5万ステップ(100Kの場合)、10万ステップ(300Kの場合)運動させた後の配列を調べた。MDのタイムステップは 1 fsである。分子内原子間の結合力は、隣り合った2~4個の原子が伸び・曲げ・捻じれ・面外振動などのバネで繋がれているモデルに基づく「DREIDEING」ポテンシャルによって決めた。また、電荷を持った原子間のクーロン相互作用は、各原子の電荷量は「MOPAC」を用いたMO計算で求め、「Ewaldの方法」を使って計算した。一方、異なる分子に含まれる原子間力は「Lennard-Jones」ポテンシャルによって決めた。

3. 結果と考察

今回のシミュレーションでは、初期状態における液晶分子の配列について、分子構造の対象性から4種類を設定した。図1に一例として代表的な反強誘電性液晶について、初期状態（反強誘電相と強誘電相）とMDシミュレーションを5万ステップ実施した後の液晶分子の配列を示した。

図2では100Kにおいて、各反強誘電性液晶の初期状態を反強誘電相と強誘電相に設定したときのシミュレーション後の内部エネルギー差と駆動電圧の実測値の関係を示した。この内部エネルギーは、各々の相にて5万ステップ後の状態における分子の配列が均一でかつ内部エネルギー値の最小値をとる状態の差で定義した。これを見ると、内部エネルギー差と駆動電圧には相関が見られ、内部エネルギー差が小さい液晶化合物は駆動電圧が小さくなるという結果を得た。これにより、今回のシミュレーションを用いることで、定性的であるが分子設計した反強誘電性液晶の駆動電圧を比較できると考えられる。その他、詳細は当日発表する。

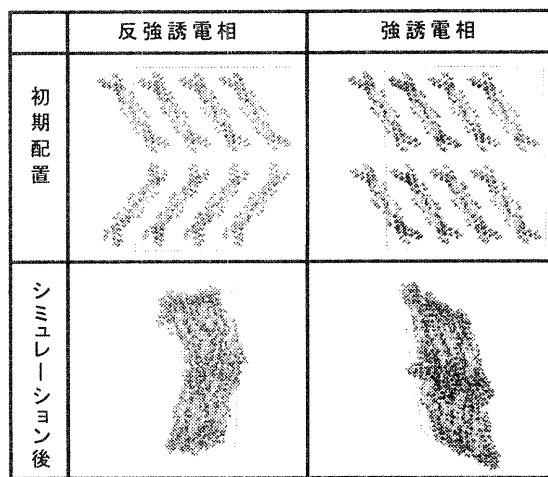


図 1

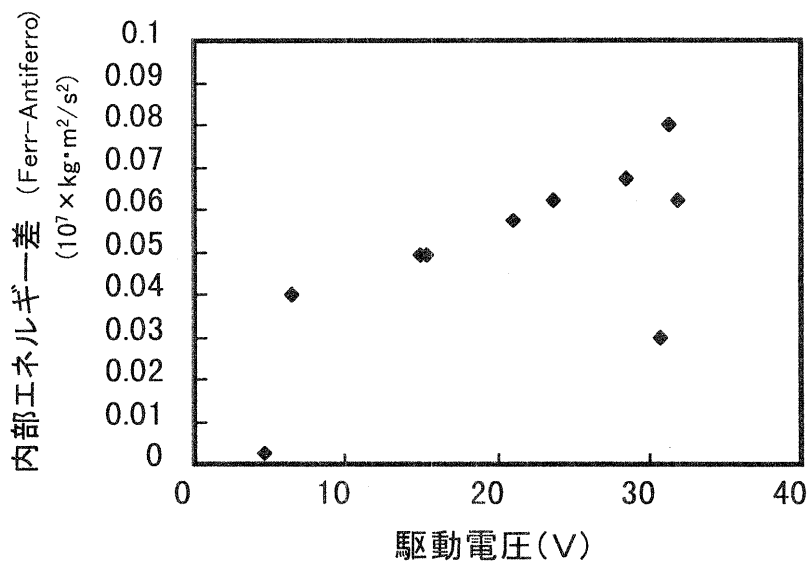


図 2

参考文献

- 1) Y.Yamada et al., Jpn. J. Appl. Phys. **29**(1990)
- 2) 竹内、紙谷、吉田、鳥海：1998年日本液晶学会討論会予稿集, 2A04 (1998)