



一般社団法人

日本液晶学会

The Japanese Liquid Crystal Society

本論文は日本液晶学会の学会誌「液晶」に掲載された日本液晶学会賞 論文賞B部門受賞記事です。

液晶学会にご入会いただけましたら、この他にも最新技術の紹介、講座記事など
研究に役立つ論文などがオンラインでいつでもご覧いただけます。

液晶学会への入会のお手続きは <http://jlcs.jp/access/enrollment> からお申込みください。

日本液晶学会設立20周年記念出版のお知らせ

液晶科学実験講座 -基礎と計測-

「液晶科学実験講座 -基礎と計測-」(日本液晶学会編:国際文献社)は日本液晶学会設立20周年を記念して2017年9月に発行予定です。学会誌「液晶」の講座記事、解説記事から選りすぐった記事を掲載し、A4版206頁の書籍の中には、液晶研究を行う上で基礎となる知識、具体的な方法はもちろん、機能性材料の評価方法が、きっちりとコンパクトにまとめられており、これから液晶研究を始める方にはもちろん、液晶の研究を続けている方にも、既刊の「液晶科学実験入門」と同様に有益な内容になっています。

また、購入者特典として、学会誌未収録の特別章5編についてWeb上で閲覧可能となっています。

[リーフレット\(PDF\)](#)



液晶の広範な未来を拓く

日本液晶学会

The Japanese Liquid Crystal Society (JLCS)

会員募集

主要活動

- 会誌「液晶」の発行(季刊)
- 年会「日本液晶学会討論会」の開催
- 研究フォーラムによるテーマ講演会の開催
 - 液晶物理・物性研究フォーラム
 - 液晶化学・材料研究フォーラム
 - 液晶ディスプレイ研究フォーラム
 - 液晶フォトンクス・光デバイス研究フォーラム
 - ソフトマター研究フォーラム
 - 分子配向エレクトロニクス研究フォーラム
- 特別講演会/講習会等の開催
- 国際液晶コミュニティとの交流
- インターネットによる情報提供

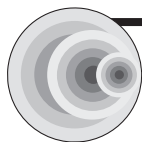
入会方法

- 電子メールによるお申し込み
jlcs-post@bunken.co.jp
- 学会ホームページからのお申し込み
<http://jlcs.jp/>
- 会費(年)

正会員	9,000円
学生会員	3,000円
賛助会員	80,000円/口

問い合わせ先

一般社団法人 日本液晶学会 事務局
〒162-0801 東京都新宿区山吹町358-5
アカデミーセンター



本論文は日本液晶学会の学会誌「液晶」に掲載された論文賞受賞記事です。液晶学会にご入会いただけましたら、この他にも最新技術の紹介、講座記事など研究に役立つ論文などがオンラインでいつでもご覧いただけます。会員登録は <http://jlcs.jp/access/enrollment> から。

液晶の計算科学・理論

米谷 慎*

本稿では、この20年の私の研究開発活動を通じて、液晶の計算科学・理論の一断面を振り返る。

キーワード：シミュレーション、モデル、自己組織化

1. はじめに

20年前の1997年、私は今は撤退した某液晶パネルメーカーの技術者であった。前年1996年には、インプレーススイッチング (IPS) 方式として知られる新規な表示原理に基づく液晶モニターが製品化されており、その開発グループに属していた私は、職場のある茨城県・日立市と、工場のある千葉県・茂原市を頻繁に行き来する日々を過ごしていた。1997年には、その後の液晶モニター、テレビにおいてIPS方式のライバルとなるマルチドメインバーチャルアライメント (MVA) 方式が別のパネルメーカーから製品化されており、1997年はまさに液晶広視野角表示モードの元年とも言う年であった。

あれから20年、液晶をとりまく環境は様々な意味で大きく変わり、私自身も上記液晶パネルメーカーから現職に転身したが、その間ずっと液晶に係り続けてこられたのは大変に幸運と思っている。

本稿では、この20年の私の研究開発活動を通じて、液晶の計算科学・理論の一断面を振り返ってみたい。なお、本稿で言う「計算科学・理論」とは、それぞれ、計算機、紙と鉛筆を使った仕事という即物的な意味であることをご容赦いただきたい。

2. 液晶製品開発における計算科学・理論

液晶の計算科学・理論と一口に言っても、分子軌道 (MO) 計算に代表される主に孤立分子を対象とした電子状態計算から、分子動力学 (MD) 計算などによる分子集合体の凝集状態の計算、さらに液晶の連続体モデルによるマクロな液晶配向場の計算、また応用上重要な光学特性などの計算、さらに液晶パネルの駆動特性の回路シミュレーションなど多岐にわたる。この中で、連続体モデルシミュレーション

は、マクロなスケールの液晶デバイスにおける液晶挙動をシミュレートするほぼ唯一の手法・道具でもある。

この液晶研究・開発の道具としての液晶の連続体モデルシミュレーションに大きな転機が訪れたのは、IPS方式の開発・製品化によると考えられる¹⁾。IPS方式は、その名の通り、基板面内に配置された櫛歯電極で面内横電界を発生させ、液晶層を面内方向にスイッチングする表示方式である²⁾。上記の構造上、本質的に二次元以上のモデルが必要となり、例えばさまざまな櫛歯電極の配置に対し、上記の横電界と液晶配向の二次元分布を得るには、現実的にシミュレーションを用いる以外に選択肢はなく、その意味でシミュレーションの位置付けは、それ以前の、いわゆるツイステッド・ネマチック (TN) に代表される表示モードの場合とは全く違うものとなった³⁾。

緒言で触れた様に、1996年のIPS方式液晶ディスプレイ (LCD) の製品化の後、翌年の1997年には、IPS-LCDの量産も本格化し、当初の13.3インチに加え、14.1インチ、15.1インチと品種も増えてきた頃である。この頃、私が取り組んでいたのは、その表示むら不良についてであった。

2.1 IPS-TFT-LCDの表示むらの理論検討

当時のIPS-LCDは金属櫛歯電極を用いており、マスク露光に始まるプロセス要因で、その電極幅は、パネル面内で設計値からの変動があり、それによる中間調での表示むらがIPS方式特有の問題となっていた。この表示むらの程度は、上記品種によっても異なり、また特定品種ではゲートDCによるスタティック点灯より、薄膜トランジスタ (TFT) によるダイナミック駆動表示で低減される場合もあり、その要因解析と低減設計が求められていた。

これに対し私が試みたのは、櫛歯電極幅のパラメータとTFTを含む画素等価回路についてモデルを作成し、櫛歯電極仕上がり幅変動によるTFT駆動時の透過率変動を理論的に調べることであった。ポイントとなるのは、Fig. 1にあるように、金属櫛歯電極とTFTのソース、ドレイン電極や蓄積容量 (C_{st}) が、同じマスク (図中SD層) で形成されていることから、櫛歯電極間間隔 (図中 l) とTFTソー

* Makoto YONEYA

国立研究開発法人産業技術総合研究所
茨城県つくば市東1-1-1つくば中央第5 (〒305-8565)
E-mail: makoto-yoneya@aist.go.jp
受理: 2017.4.16

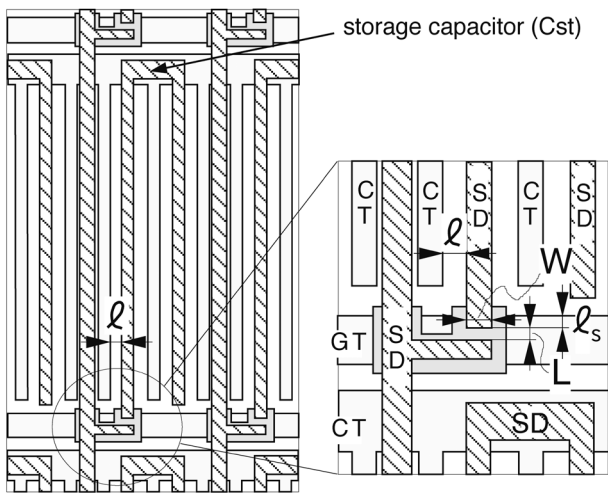


Fig. 1 Pixel plan view of an IPS TFT-LCD

ス・ドレイン電極寸法などのプロセス変動が、同一マスクプロセスでカップルしていることで、それによりTFT駆動時にこれらの寸法変動の影響が一部相殺されるケースがある点である。

詳細は、論文⁴⁾に譲るが、上記変動相殺が駆動方式により大きく異なること（最初の13.3インチ品種が最も相殺効果が低かった）や、その対策となる駆動方法の改良方法などがこのモデルによる理論解析で明らかにできた。個人的には、紙と鉛筆だけでも、実際のLCD開発・量産に貢献できることが実感できた仕事であった。

その後、IPS方式は、現在の透明電極を用いた物へと発展したが、その契機となったのは、1998年のフリンジフィールド・スイッチング（FFS）方式の発表である⁵⁾。

2.2 Finger on Plate電極構成のシミュレーション

FFS方式は、そのオリジナルな構成では、櫛歯電極を透明ITO（Indium Thin Oxide）電極とし、その電極間間隔を極端に詰めて負の誘電異方性の液晶材料を組み合わせたもので、IPS方式に比べ透過率が大きく改善可能であった⁶⁾。上記の構成は、オリジナルなIPS方式が金属櫛歯電極と正の誘電異方性の液晶材料の組み合わせであるのと大きく異なる。当時私の周囲では、IPS方式で単に電極を透明化しただけでは透過率向上効果が僅かであることは確認済みであったこともあり、FFS方式に疑問を持つ人が少なくなかった。

ある日（1999年4月24日）、茂原の小野記久雄氏より、上記オリジナルのFFS方式とは異なる、透明面電極の上に片側一方のみの櫛歯電極が絶縁層を隔てて重畳された、いわゆるFinger on Plate（FOP）電極構成とするアイデアの連絡があり、連続体モデルシミュレーションでのこのアイデアの検証を依頼された⁷⁾。シミュレーションの結果は、駆動電圧が上昇するものの、透過率向上に関してはオリジナルなFFS方式と同等の大きな効果があるとの結果が得られ、

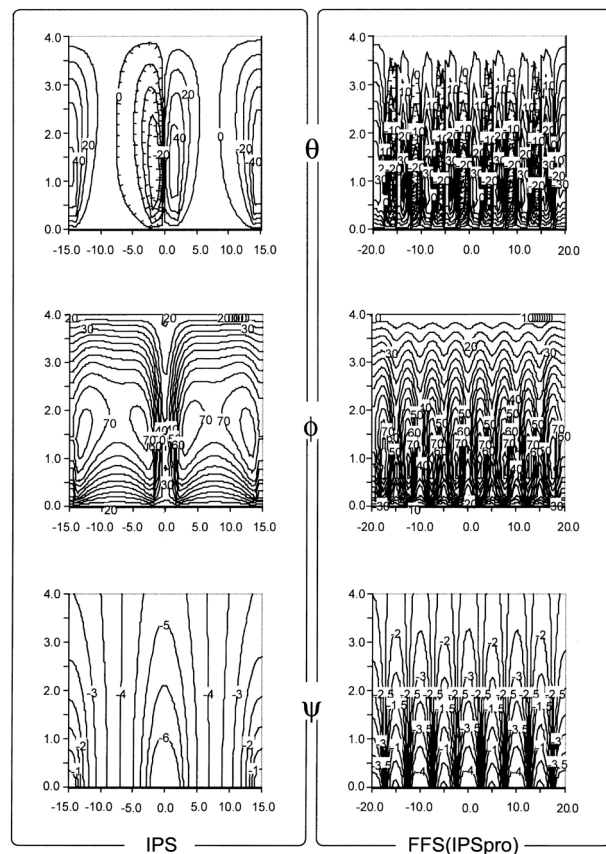


Fig. 2 Comparison of simulation results between IPS-mode and FFS(IPSpro)-mode LCDs. Top: LC tilt-up from the substrate, middle: LC twist and bottom: electric potential.

すぐにセル試作が行われ、シミュレーションで予想した通りの大きな透過率向上効果が確認された。一方で、予想された駆動電圧上昇は見られず、逆に低減されていた（良い方向に計算結果が外れていたため、この件ではお叱りを受けることはなかった）。FOP電極構成では、電極エッジ部に電界が集中し（Fig. 2）、計算に使用するメッシュ間隔をこの部分で細かくする必要があったが、それが不十分であったために駆動電圧の予想がずれたのが原因であった。

時を同じくして、ディスプレイ関連の最大の国際会議であるSociety of Information Displayにおいて、オリジナルのFFS方式開発グループからもFOP電極構成が発表⁸⁾（1999年5月20日）されたことが参加していた同僚から連絡があり、世界は狭いと実感した。

今日主流となっているFOP電極構成は、上記の様に独立に見いだされたが、その後、FOP電極構成LCDの開発は、IPS方式特有の残像現象であるAC残像の問題で長らく中断していた⁷⁾。AC残像は、FOP電極構成による透過率向上効果の顕著な誘電異方性が負の液晶が特に悪く、一方で、誘電異方性が正の液晶は、透過率向上効果は小さかったがAC残像も弱かった⁷⁾。多くの困難を乗り越え、FOP電極構成と、オリジナルのIPS方式と同じ誘電異方性が正の液晶を組み合わせたIPSpro方式を液晶テレビとして2004年に製品化することができた。

液晶テレビでは画質の点でコントラスト向上が求められることとなり、ライバルであったVA方式に比べIPS方式の正面コントラストは数値の上では苦戦していたこともあり、黒表示での光漏れ（黒輝度）低減がコントラスト向上に必須の課題となった。

2.3 液晶光散乱によるコントラスト低下要因の理論検討

当時、IPS方式は水平ホモジニアス配向で黒表示をしていることから、VA方式にはない液晶配向軸（ラビング方向）と偏光板偏光軸との合わせのファクターがあることから、正面コントラストを上げにくいとの認識はあった。一方で、黒表示状態を顕微鏡で注意深く見ると、動的光散乱起因と思われる明減が見え、これと光漏れの関連を示唆する話もあった。

そこで、水平配向セルと垂直配向セルの動的光散乱による明減光強度を比較する簡単な実験をやってみた結果、液晶の教科書⁹⁾にも載っているこの現象が、光散乱による偏向解消を通してLCDの黒輝度に寄与しているとの確証を深めた。LCDの光源は放射分布をもったバックライトからの散乱光であり、Fig. 3のようにパネルに斜め入射した光の一部は、散乱角 θ で散乱し、正面に散乱光として出射することから、パネル正面光はこのような散乱光を含んでいる。

カラーフィルターによる光散乱でコントラスト低下が生じることはよく知られ、材料の改良が進められていたが、液晶による動的光散乱はそれまで検討されたことはなかった。しかし、液晶相での光散乱と黒輝度の関連は、室温で等方相となる液晶を代わりに封入した実パネルの黒輝度が大きく低減されるなどの傍証もあり、より詳細な確認と対策提案が必要であった。

配向揺らぎ起因の光散乱強度の理論式は、de Gennesらにより定式化され¹⁰⁾、その結果のみ示すと、光散乱強度 $\langle I \rangle$ は液晶材料の弾性定数 K_a と誘電異方性 $\Delta\epsilon$ 、散乱波数ベクトル q のダイレクタ n (z 方向にとる)に平行および直交する成分の絶対値 q_{\parallel}, q_{\perp} などを用いて次式で表される。

$$\langle I \rangle = \frac{E_0^2}{2} \left(\frac{2\pi}{\lambda_0} \right)^4 \left(\frac{\Delta\epsilon}{4\pi R} \right)^2 \frac{V k_B T}{K_3} \sum_{\alpha=1,2} \frac{(i_{\alpha} f_z + i_z f_{\alpha})^2}{q_{\parallel}^2 + (K_{\alpha}/K_3) q_{\perp}^2}$$

ここで、 i_{α}, f_{α} は、入射および散乱光の偏光方向ベクトル i, f 、 x, y 平面内に $e_{\perp} \perp q$ となるように定義した互いに直交するベクトル e_1, e_2 を用いて $i_{\alpha} = e_{\alpha} \cdot i$ および $f_{\alpha} = e_{\alpha} \cdot f$ で表され、 E_0, λ_0 はそれぞれ入射光の電界振幅と波長で、 V, R, T は、散乱体積、測定点までの距離および絶対温度である。上式で、最後の和の項が、液晶の水平 (IPS)・垂直配向 (VA) などの散乱ジオメトリに依存する項であり、この項の違いに基づく液晶光散乱強度のIPS・VAの相対的な違いを検

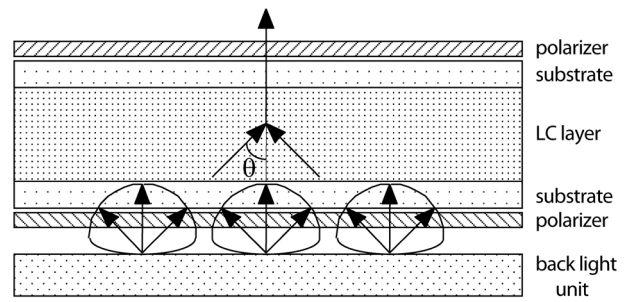


Fig. 3 Cross-sectional view of a transparent LCD

討してみた所、前者において液晶散乱による相対的に大きな光漏れが生じることが判った¹¹⁾。この光漏れの低減策提案としては、内海夕香氏により¹²⁾、上式に光学領域での誘電率 ϵ と屈折率 n の関係式 $\epsilon = n^2$ と、体積とセルギャップとの関係式 $V = dS$ 、一弾性定数 ($K_{\alpha} = K$) 近似を適用して得られる強度指数、

$$S = \frac{\{\Delta n(n_{\parallel} + n_{\perp})\}^2 d}{K}$$

が提案され、実際のIPS-LCDパネルの液晶材料選定の指標となっているとのことである⁷⁾。

個人的には、液晶動的光散乱という液晶の教科書に載っている現象と、それに関する純粋に科学的な知見が製品開発の現場で役に立ったという点で、液晶科学の奥深さを実感した仕事であった。IPS (IPSPRO) 方式は、その後2010年に、スマートフォンやタブレット端末の高精細液晶パネルとして採用され¹³⁾、今日では高精細中小型モバイル機器に全世界で広く使われている。

3. 液晶科学における理論・シミュレーション

1999年10月より科学技術振興機構（当時は事業団）ERATO横山液晶微界面プロジェクトが発足し、会社から出向（最初の2年、その後は週半分の部分出向）して参加するチャンスを得た。そこでの私のテーマの一つが、ナノ構造液晶相としてのキュービック相¹⁴⁾であった。分子シミュレーションでキュービック相の複雑な三次元構造を調べる傍ら、単純なモデルでキュービック液晶材料の分子設計ができないかと考えるようになった。

3.1 相分離モデルによるキュービック液晶材料設計

キュービック相を発現する両親媒性分子、液晶分子、ジブロックコポリマーの間には相分離という共通点があることがすでに指摘されていた。そこで、ジブロックコポリマーの相分離モデル¹⁵⁾を、原子団寄与法に基づく溶解度パラメータと分子容計算を仲介にして、強引に液晶分子をコポリマーに見立てて当てはめてみた所、Fig. 4, 5に示す様に、多くのキュービック相を発現する液晶分子が、このコポリマー相分離モデルにあてはまること判った^{16,17)}。

Fig. 5で、縦軸は、液晶分子をコア部と末端鎖からなる

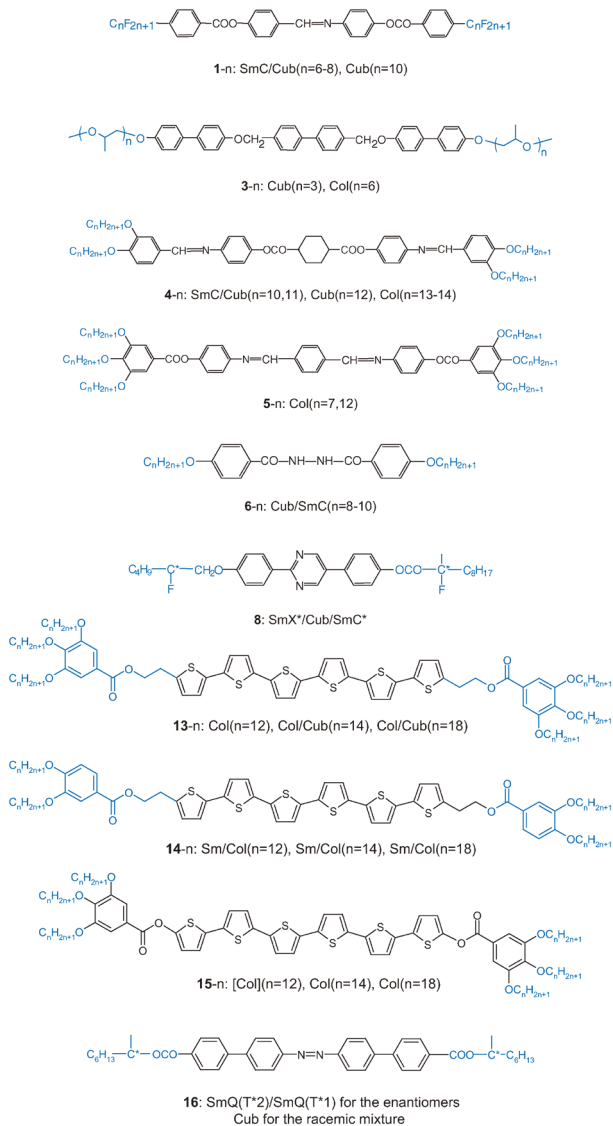


Fig. 4 Various LC compounds that we have evaluated $\chi_{core-chain}$ and f_{core} in^{16, 17}. In each molecules, the blue colored parts were assigned as the chain parts.

コポリマーと見なした場合の χ パラメータ,

$$\chi_{core-chain} = V_R(\delta_{core} - \delta_{chain})^2 / RT$$

で, δ , V_R , T は, それぞれ, 溶解度パラメータ, 全分子容 $V_{core} + V_{chain}$ および融点である. また, **Fig. 5**横軸は体積分率 $f_{core} = V_{core} / V_R$ である. 溶解度パラメータ δ は, 凝集エネルギー ΔE と分子容 V を用いて,

$$\delta = (\Delta E / V)^{1/2}, \quad (1)$$

と表され, これらは, Fedorsによる原子団寄与法¹⁸)を用いると, 個々の原子団 i の寄与の積算式,

$$\Delta E = \sum \Delta e_i, V = \sum v_i \quad (2)$$

で算出できる.

その後, この相分離モデルではカラムナー相となるはずの領域でもキュービック相が発現するなどの, 液晶系の特

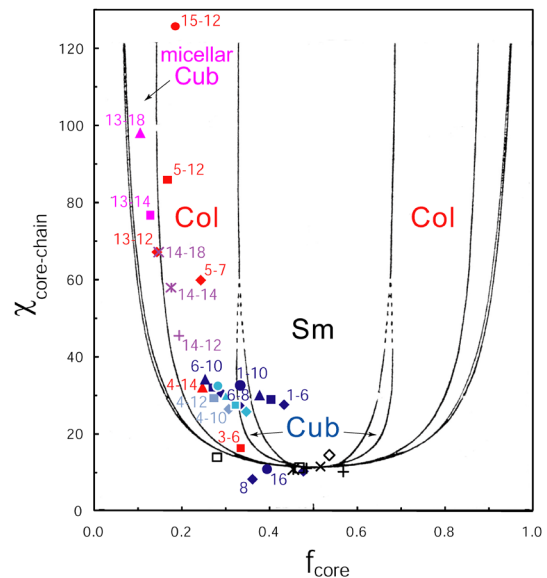


Fig. 5 f_{core} versus $\chi_{core-chain}$ plot for block LCs. Colors are used for the identification of the phase type (blue for cubic, red for columnar and magenta for micellar cubic). Theoretical phase boundaries for the diblock copolymer¹⁵) are traced in the background.

殊性とも思える例も見いだされている¹⁷⁾が, 分子構造を考えたとき, キュービック相が発現するか否かの第0近似の分子設計指針としては使えると思っている. 残念ながら, これを指針として新規キュービック液晶材料が創成できたという話は未だないようである.

3.2 ディスコチック半導体液晶の分子シミュレーション

ディスコチック液晶は, 複数の末端アルキル鎖を有し, 一般的に分子サイズが棒状液晶に比べて大きなことから, 従来は計算負荷の観点から避けてきた. しかし, グラフィクスプロセッサユニット (GPU) による高速並列計算と, それをサポートしたシミュレーションソフトウェアの発展により, 実用的に計算可能な分子のサイズは大きく広がり, 以下に紹介する液晶性フタロシアニンの分子シミュレーションも, 今日では日常的に行える計算となっている.

この液晶性フタロシアニン材料は, **Fig. 6**に示すように, 8本の末端アルキル鎖が一般的なペリフェラル位ではなく, ノンペリフェラル位で置換されていることが特徴で, time of flight (TOF) 法測定により, カラムナー相で $10^{-1} \text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$ オーダーのディスコチック液晶性半導体としては高い移動度を示すことが知られている^{19,20)}.

一方で, その高移動度の起源については, カラムナー相でのX線回折パターンが, キャリアパスであるはずの π スタッキングの秩序高さに対応する広角側 ($2\theta \sim 26^\circ$) の顕著なピークを示さず謎であった.

分子シミュレーションを用い, 計算機の中でこの (**Fig. 6**で $n=6$ の) 分子系を単結晶X線構造解析 (XRD) により既知の結晶相構造からカラムナー液晶相まで昇温す

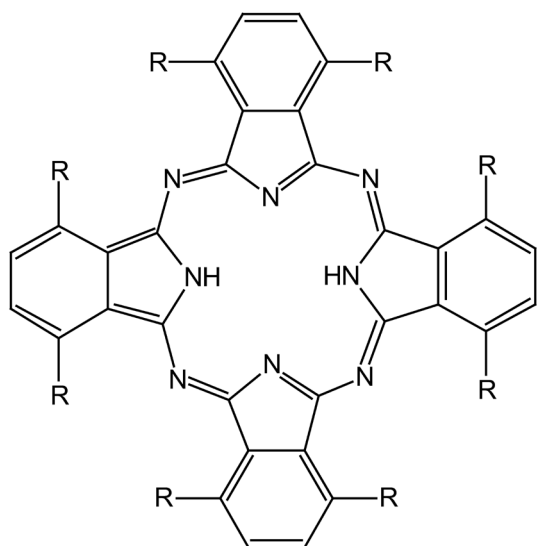


Fig. 6 Non-peripheral ($R=C_nH_{2n+1}$) octa-alkyl substituted phthalocyanine.

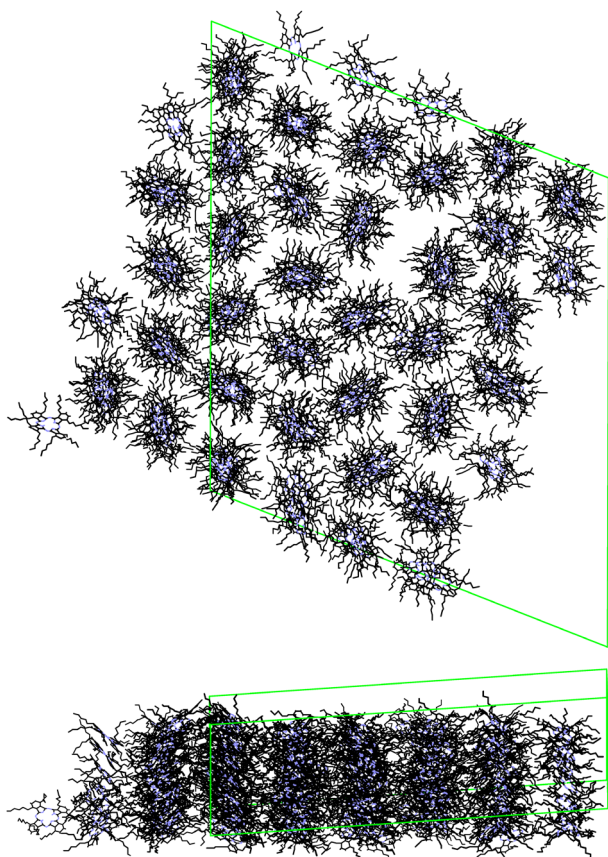


Fig. 7 Snapshot after a 30 ns MD run at LC temperature (438 K). Upper: view along the crystal a-axis. Lower: view perpendicular to the crystal a-axis.

ると、Fig. 7に示すカラムナー液晶相への自発的な相転移が見られた²¹⁾。

シミュレーションで得られたカラムナー液晶相は、その構造関数がXRDで得られたものと同じヘキサゴナルカラムナー相であったが、XRDと同じく π スタッキングに対応する広角側のピークが見られなかった。MD計算で得られ

たカラムナー構造を詳しく見ると、通常のヘキサゴナルカラムナー相では、カラム軸とコア円盤法線が平均的に一致（カラム軸とコア円盤が直交）しているのに対し、両者が45度を超える角度をなし、カラム軸とコア円盤が傾いた、レクタングュラーカラムナー相と同様なカラム構造をしているために広角側の π スタッキングピークが現れにくくなっていることがわかった²¹⁾。個々のカラムがレクタングュラーカラムナー相と同様に傾いているにも拘らず、カラムの配列がヘキサゴナルカラムナーに対応した構造関数（XRDパターン）を示す理由は、カラム毎のコア円盤傾き方向が乱雑化しているためであることもわかった。

一方で、フタロシアニンコア自身は0.35nm前後の面間隔でスタックしていることから、上記ピークが見られなくても高移動度と矛盾しないと考えられる。ホッピング伝導によるキャリア移動度は、カラムナー液晶ではカラム軸に沿った隣接分子間のホッピングレート（MO計算による分子自身の再配列エネルギーと、隣接分子間のトランスファー積分などから計算される）から、カイネティックモンテカルロ（KMC）計算により算出することができる。実際にこの分子系で、MDシミュレーションで得られたカラム構造からKMC計算で算出したホール移動度は、上述のTOF法測定によるものと同オーダーの移動度が得られた²²⁾。高移動度の要因は、ノンペリフェラル位置で置換されたアルキル鎖が、カラム中隣接分子間に相互貫入する（XRD単結晶構造では確認されており、MD計算ではカラムナー液晶相でも貫入が見られる）ことにより、隣接分子間の π 共役面の面内重なり相対関係が、貫入のない場合（たとえば無置換フタロシアニン結晶）に比べてより移動度の高い相対配置に変化しているためと考えられる²²⁾。

本例のような、MD計算、MO計算、KMC計算を組み合わせた液晶相でのキャリア移動度の計算は、それをサポートするソフトウェア²³⁾が整備されてきていることから、今後より身近になっていくと考えられる。

3.3 溶液プロセスの分子シミュレーション

有機半導体材料を、真空蒸着ではなく、溶液プロセスにより薄膜トランジスタ（TFT）化できれば、フレキシブルなプラスチック基板上に印刷プロセスでTFTが形成でき、新たな応用が期待され、脱真空による製造プロセスの省エネルギー化も可能となる。このような印刷エレクトロニクスを目指して、新規な可溶性有機半導体材料とその印刷技術の開発が盛んに進められている。

この中でも特に、有機半導体インク（有機半導体の溶媒溶液）と貧溶媒インクの二種類のインクを用いた、ダブルショットインクジェット印刷（DS-IJP）が、大面積単結晶薄膜形成が可能なることから注目されている²⁴⁾。DS-IJPでは、親撥処理によるパターンの上に、まず貧溶媒層がインクジェット印刷により形成され、その上に有機半導体溶液

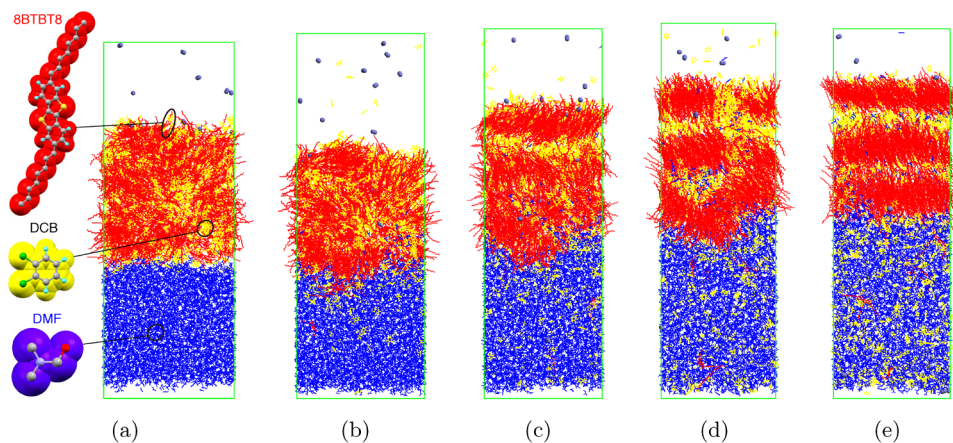


Fig. 8 Results of MD run with 8BTBT8 as the OSC material. a) Initial structure and snapshots after b) 1 ns, c) 4 ns, d) 10 ns and e) 50 ns of the MD runs of the 8BTBT8 (red) and DCB (yellow) OSC solutions on the DMF (blue) subphase. The green box corresponds to the simulation box with 2-D periodic boundary conditions.

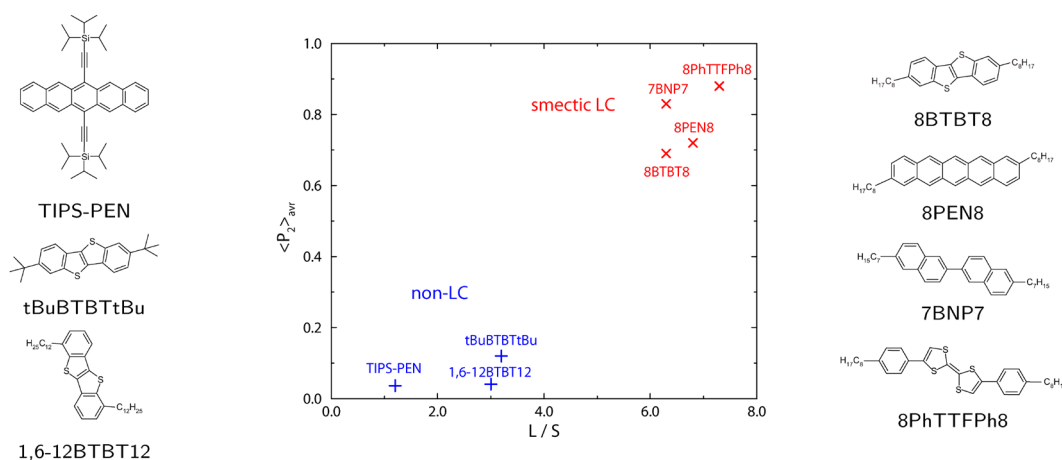


Fig. 9 Correlations between molecular long- and short-axis ratio L/S and simulated orientational order parameter $\langle P_2 \rangle_{avr}$.

が重畳印刷されて溶液薄膜を形成し、その気—液界面が単結晶薄膜形成に重要な役割を果たしていると考えられている。しかしながら、このDS-IJPによる単結晶薄膜形成に、どのような有機半導体材料が向いているのかなどの知見は明らかになっていない。たとえば、スメクチック液晶材料としても知られる有機半導体分子8BTBT8では単結晶薄膜が得られているが、可溶性有機半導体として広く用いられているTIPS-ペンタセンでは単結晶薄膜は得られず、多結晶薄膜となることが報告されている²⁴⁾。このような材料依存性の原因を明らかとし、DS-IJPによる単結晶薄膜形成が可能な新材料を開発するには、分子レベルでのDS-IJPによる薄膜形成プロセスの理解が必要と考えられる。

Fig. 8に、DS-IJPの素過程モデルのシミュレーション結果を示す²⁵⁾。この図のように、有機半導体材料として8BTBT8を用いた場合、ランダム溶液状態から、分子配向と、気—液界面に平行な層構造が、自発的に形成される過程がシミュレーションで得られた。一方で、8BTBT8をTIPS-ペンタセンに代えるとこのような気—液界面に平行な層構造形成は見られなかった。

同様のシミュレーションを種々の可溶性有機半導体材料

について行い、その長短軸比を横軸に、**Fig. 8**右端のMD計算50 ns後の分子長軸配向オーダーパラメータを縦軸にしてまとめたものを**Fig. 9**に示す。この図の様に、配向層の自発形成は、有機半導体分子の長短軸比と高い相関があり、(スメクチック)液晶性を有する有機半導体分子が、8BTBT8と同様に、DS-IJPプロセスによる単結晶薄膜形成を可能とする材料として有望であることを示唆している。半那²⁶⁾らにより、スピコート法により平滑で高品質な多結晶薄膜を得るためには、液晶性有機半導体を、その液晶相温度でスピコートすることが重要であることが指摘されているが、上記の結果は、室温DS-IJPプロセスによる単結晶薄膜形成にも、有機半導体溶液のリオトロピック液晶的な性質が重要であることを示唆しているものと考えられる。

上記の結論は、液晶関係者にとっては、有機半導体溶液がリオトロピック液晶的な性質を(過渡的に)示す場合には、その気—液界面全面が垂直配向場として働くことにより、有機半導体分子の垂直配向と、界面に平行な層構造が自発形成されると考えれば理解可能と思われる。一方、有機半導体関係者にとっては必ずしもそうではないようで、

両者の異分野交流により今後新しい展開の可能性が有るよ
うに思われる。

4. おわりに

本稿では、液晶の計算科学・理論について、個人的な係
りを中心にこの20年を振り返った。

1997年が、IPSおよびMVA方式という日本発の新表
示方式による、液晶モニタ、テレビへの流れの元年であ
り、20年後の現在、両方式は液晶テレビ、携帯電話など
になくはならない表示方式として、世界中で日々の生活
で利用されている。一方で、上記新表示方式を開発したパ
ネルメーカー二社は当該分野から撤退して久しく、最大手
メーカーも外資傘下となった。

このように、液晶を取り巻く環境が大きく変化した20
年では有ったが、個人的には液晶科学そのものの魅力は決
して失われておらず、これからも未知の新たな側面で私た
ちを惹きつけていくものと信じて疑いない。

液晶科学の新天地を求め、私自身も探検を続ける所存で
ある。

参 考 文 献

- 1) M. Ohta, M. Oh-e and K. Kondo, in Proc. 15th. Int. Display Res. Conf., Hamamatsu, 1995, p. 707.
- 2) 大江昌人, 近藤克己, ネマチック液晶のインプレーンスイッ
チング電気光学効果, 液晶, **2**, 303 (1998).
- 3) 米谷慎, 「液晶のシミュレーション」(小出直之編), p. 419
(2013), エース出版.
- 4) M. Yoneya, M. Ohta and K. Kondo, J. Appl. Phys., **98**, 013102
(2005).
- 5) S. H. Lee, S. L. Lee and H. Y. Kim, Proc. Asia Display, 1998, p.
371.
- 6) S. H. Lee, 液晶, **13**, 49 (2009).
- 7) 小野記久雄, ディスプレー革命, 広視野角IPS液晶の進化は
止まらない 大型液晶テレビへの挑戦, 光配向やネガ型液晶
で進化続く, 2015, [http://techon.nikkeibp.co.jp/article/COLUMN/
20150521/419545/](http://techon.nikkeibp.co.jp/article/COLUMN/20150521/419545/), (参照2017年6月).
- 8) S. H. Lee, S. L. Lee, H. Y. Kim and T. Y. Eom, SID99 Digest, San-
Jose, 1999, p. 202.
- 9) 福田敦夫, 竹添秀男, 「液晶・基礎編」(岡野光治, 小林駿介
編), 第5章, (1985), 培風館, 東京.
- 10) P. G. de Gennes and J. Prost, *The Physics of Liquid Crystals*,
(Clarendon Press, Oxford, 1993) second 2nd ed., chapter 3.
- 11) M. Yoneya, Y. Utsumi and Y. Umeda, J. Appl. Phys., **98**, 016106
(2005).
- 12) 内海夕香, 液晶, **13**, 119 (2009).
- 13) 小野記久雄, ディスプレー革命, 広視野角IPS液晶の進化は
止まらない 大型液晶テレビへの挑戦, 高精細スマホで飛
躍, そして進化の行く先, 2015, [http://techon.nikkeibp.co.jp/
article/COLUMN/20150715/428001/](http://techon.nikkeibp.co.jp/article/COLUMN/20150715/428001/), (参照2017年6月).
- 14) 斉藤一弥, 徂徠道夫, 液晶, **5**, 20 (2001).
- 15) M. W. Matsen and F. S. Bates, *Macromolecules*, **29**, 7641 (1996).
- 16) M. Yoneya, K. Araya, E. Nishikawa and H. Yokoyama, J. Phys.
Chem. B, **108**, 8099 (2004).
- 17) M. Yoneya, *Chem. Rec.*, **11**, 66 (2011).
- 18) R. F. Fedors, *Polym. Eng. Sci.*, **14**, 147 (1974).
- 19) 尾崎雅則, 藤井彰彦, 液晶, **17**, 47 (2013).
- 20) 清水洋, 液晶, **17**, 26 (2013).
- 21) M. Yoneya, T. Makabe, A. Miyamoto, Y. Shimizu, Y. Miyake, H.
Yoshida, A. Fujii and M. Ozaki, *Phys. Rev. E Stat. Nonlin. Soft
Matter Phys.*, **89**, 062505 (2014).
- 22) M. Yoneya, A. Miyamoto, Y. Shimizu, A. Fujii and M. Ozaki, J.
Phys. Chem. C, **119**, 23852 (2015).
- 23) V. Rühle, A. Lukyanov, F. May, M. Schrader, T. Vehoff, J. Kirkpat-
rick, B. Baumeier and D. Andrienko, *J. Chem. Theory Comput.*, **7**,
3335 (2011).
- 24) H. Minemawari, T. Yamada, H. Matsui, J. Tsutsumi, S. Haas, R.
Chiba, R. Kumai and T. Hasegawa, *Nature*, **475**, 364 (2011).
- 25) M. Yoneya, H. Minemawari, T. Yamada and T. Hasegawa, *J. Phys.
Chem. C*, **121**, 8796 (2017).
- 26) 半那純一, 液晶, **17**, 7 (2013).