



## ディスプレイ用 光学透明フィルムの開発

研究・開発機関 : 住友ベークライト(株)  
 利用施設 : (公財) 計算科学振興財団 FOCUSスパコン  
 計算規模 : 計算速度0.11 TFlops (1ノード)  
 利用ソフトウェア : 逆モンテカルロ法 RMC++

### Before

●粒子の三次元配置を求める手法である逆モンテカルロ法では、ナノスケールサイズの粒子の配列を求めることが可能ですが、粒子数の多い系では計算が完了するまでに12時間以上と長い時間がかかるという問題がありました。

### After

○スーパーコンピュータを利用した高並列計算によって粒子の三次元配置推定を従来の6分の1程度の速度で求めることができるようになりました。数万個レベルの粒子の大規模シミュレーションでも2時間程度で行なうことができるようになりました。  
 ○これにより、粒子配置とそれが引き起こす複雑な光学特性の関係を解明することができるようになるものと期待できます。

### ■背景と目的

近年、バイオミメティクスと呼ばれる自然界の動植物の微細構造パターンを模倣することによる機能性材料の開発が注目されています[1]。この一例として、モルフォチョウやタマムシに見られる「構造色」が挙げられます。これらはその体表やリンブンに数百ナノメートルの規則パターンを持っており、光が入射すると、光の強めあい、弱めあいが起こり、特徴的な色を示すようになります。このような微細なスケールの規則構造がもたらす発色現象＝構造色は、色素を利用しないために材料劣化による色の変化に強く、また非金属材料でも金属調の光沢を持たせられるといったことから、塗料、繊維、化粧品、光学デバイスなど幅広い分野への応用が期待されています。

構造色を発現させる手段の一つとして数百ナノメートルの大きさの球状粒子を規則配列させる方法があります。私たちはポリマーネットワーク中にシリカコロイド粒子を分散させることで構造発色を示す透明フィルムを開発し、ディスプレイ用光学透明フィルムとしての利用を検討し

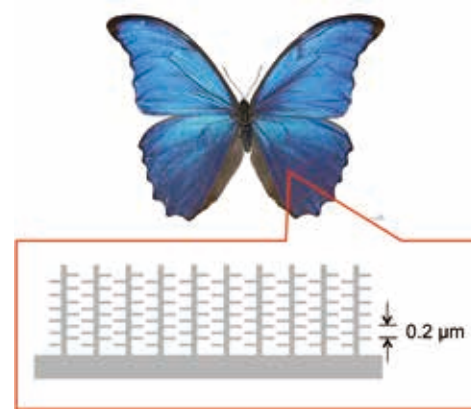


図1. モルフォ蝶の構造発色とそのリンブンの周期構

ています[3-5]。フィルムの透明性や発色性といった光学特性は、粒子がフィルム中にどのように配置しているかに大きく左右されることから、様々な光学特性を制御するためには粒子配置の分析および制御が重要となります。そこで、本研究では粒子配置と光学特性の間の関係を解明することを目的に、粒子配置推定のためのシミュレーションを行いました。

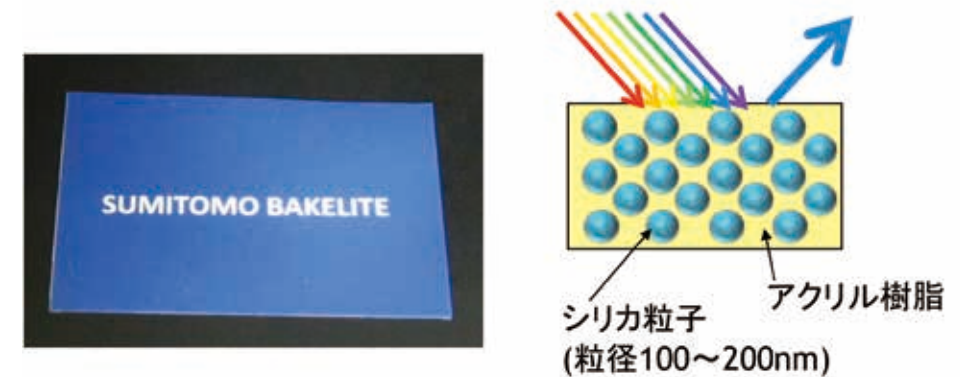


図2. アクリル樹脂へのシリカコロイド粒子の分散による構造発色フィルム

### ■利用成果

本研究では、逆モンテカルロ法を用いたシリカ粒子の三次元配置の推定を行いました。本手法ではSPrng-8の高輝度放射光による測定データを元にして粒子配置に関する情報を引き出し、この粒子配置の情報を再現する構造を探索します。粒子が高密度に含まれる系においては系の収束までに要する計算時間が12時間以上を要するため、妥当な三次元構造の探索に非常に時間がかかりましたが、スーパーコンピュータを利用した高並列計算によって粒子の三次元配置を従来の6分の1ほどの時間で求めることができるようになり、数万個レベルの粒子の大規模シミュレーションも2時間程度で行なうことも可能になりました。

今後は、得られた三次元配置をもとに、更に光学特性のシミュレーションを行なうことによって構造発色の詳細なメカニズムが解明できるものと期待されます。これによって、粒子の特性や分散状態を最適化し、新たな機能性を有する光学材料を開発することが可能になります。

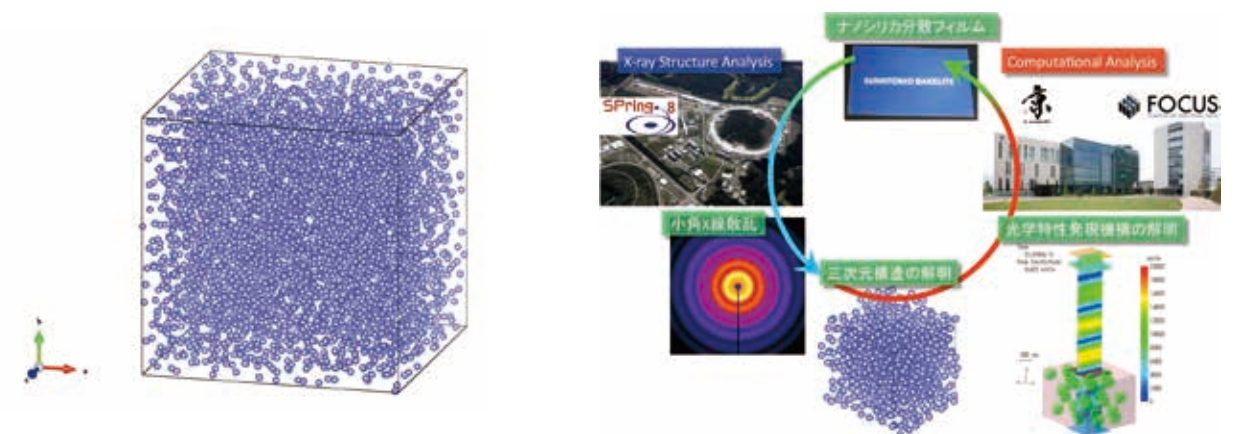


図3. 逆モンテカルロシミュレーションによって求められた粒子の三次元配置

図4. SPrng-8とスーパーコンピュータの光学材料開発への活用

#### ■参考文献

- [1] “昆虫に学ぶ新世代ナノマテリアル”, NTS (2008)
- [2] <http://ja.wikipedia.org/wiki/モルフォチョウ属>
- [3] “ナノ粒子の高充填手法の解説”, 情報機構, pp.5 (2012).
- [4] ネットワークポリマー, vol. 31, No.1, 19 (2010).
- [5] SPrng-8 Research Frontiers 2010, pp.136-137.