

平成 12 年度

卒業論文

ネマティック液晶における  
磁場による流動の誘起

高知工科大学工学部

知能機械システム工学科

知能流体力学研究室

小笠原 光一

## 目次

### 第1章 緒 言

1.1 はじめに	1
1.2 液晶	1
1.2.1 ネマティック液晶	1
1.2.2 フレデリクス転移	2
1.2.3 ティルト角	2
1.2.4 表面処理	2
1.2.5 物性値	3
1.3 研究目的	4

### 第2章 理論

2.1 基礎式と構成方程式	5
---------------	---

### 第3章 計算方法

3.1 計算領域	7
3.2 数値計算	8

### 第4章 計算結果

4.1 配向場	9
4.2 速度場	16
4.3 平板中心でのティルト角 の時間変化の比較	23

### 第5章 結 言

5.1 まとめ	24
---------	----

### 参考文献

25

### 謝辞

26

## 第1章 緒 言

### 1.1 はじめに<sup>(1)</sup>

液晶は、液体と結晶の間に存在しており、液体と結晶の中間的な性質を持つ。その性質は、液体の流動性と結晶の異方性を持つことであり、特徴は流動的なので大変形を可逆的に起こすことができ、異方的なので外場に対する応答が多彩なことである。また液晶は構成分子の種類や形状、あるいは液晶の生成方法などで分類される。例えば構成分子が低分子か高分子であるか、生成方法が温度に依存する(サーモトロピック)のか物質の濃度に依存する(ライオトロピック)のかなどがある。

液晶状態は自然界ではイカの墨、石鹼水、蚕の紡糸などで見られる。またパソコン、テレビなどに使われているディスプレイ、防弾チョッキなどに使われている高強度繊維(ケブラーなど)、その他微細コネクターや回路成形品などの精密電子機器部品などは液晶を工業製品に利用した例である。ディスプレイには流動性や外部刺激に対する高い応答性を持つ低分子液晶が、防弾チョッキや精密電子機器部品などには高分子液晶が用いられる。しかしこれらの工業製品の製造過程における液晶の流動状態を把握することは液晶の流れ挙動と液晶分子の挙動を同時に考えなければならず非常に困難である。ゆえにこれらの製造は経験と勘に頼っていることが多い。またディスプレイにおいては製品動作中の液晶の挙動が品質に大きく作用する。

これらの液晶製品の製造過程中あるいは製品稼動中における液晶の挙動の解明が品質の向上に役立つと思われる。

### 1.2 液晶<sup>(2)</sup>

#### 1.2.1 ネマティック液晶

液晶は、配向構造の空間的な規則性によりネマティック液晶、コレステリック液晶、スマートティック液晶に分類することができる。

このうちネマティック液晶は、細長い棒、あるいは平たい円板のような異方性を有する有機分子からなる凝縮系で、分子の重心位置は通常の流体と同様に無秩序で巨視的な流動性を持つ。しかし、通常の液体と違って分子の長軸の方向が自発的にある方向にそろっており巨視的に異方性を示す液晶である。

### 1.2.2 フレデリクス転移

磁化率の異方性が正のネマティック液晶に磁場を印加すると液晶分子は磁場方向に配向しようとする。例えば液晶分子の配向方向を一定に束縛するような表面処理を行った2枚の平行なガラス基板の間に液晶を封入し、基板の配向束縛力によって液晶分子を一定の方向に配向させたサンドイッチセルを作り、液晶分子対し垂直な磁場を印加する場合、磁場強度  $H$  がある値  $H_c$  を越すまでは有限の磁場が存在するにもかかわらず配向はまったく変化せず、液晶分子は  $H$  が  $H_c$  を超えてはじめて磁場の方向に配向する。このような現象をフレデリクス転移と言う。また  $H_c$  をしきい値という。

### 1.2.3 ティルト角

図1.1のように壁面表面上で液晶分子が壁面に対し持っている有限の角度のことをいう。

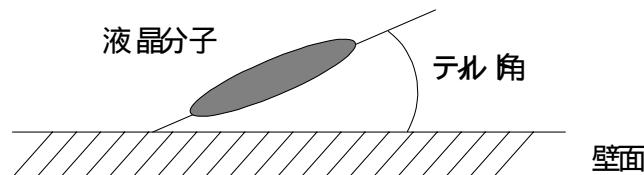


図1.1 ティルト角の定義

### 1.2.4 表面処理

表面処理の方法には(1)ラビング法(2)SiO 蒸着法 (3) 化学処理(4)LB 膜の液晶配向膜としての利用などがある。

ティルト角は斜方蒸着法で蒸着角度を変化させることにより発生させることができる。またラビング法で高分子を塗布し、かつラビングの強さを適当に選ぶことにより実現できる。

このとき基板表面上で外場の影響を無視できるものを強いアンカリング(強い束縛)といい、無視できないものを弱いアンカリング(弱い束縛)と言う。またネマティック液晶では強いアンカリングが実現されやすい。したがって本研究では、壁面上で強いアンカリング状態であると仮定し壁面配向角は変化しないとする。

### 1.2.5 物性値

本研究では、ネマティック液晶に 117 から 136 で液晶状態を示すサーモトロピック液晶の PAA(*p*-azoxy-anisole)<sup>(3)</sup>を用いる。PAA の物性値を表 1 に、化学構造<sup>(4)</sup>を図 1.2 に示す。

表 1 物性値

Leslie viscosities	Elastic constants	Susceptibility
$\alpha_1$ Pa · s $4.3 \times 10^{-3}$	$K_1$ $0.49 \times 10^{-11}$ N	$\chi_{\parallel}$ $-4.4 \times 10^{-13}$ Hm <sup>-1</sup>
$\alpha_2$ $-6.9 \times 10^{-3}$	$K_2$ $0.245 \times 10^{-11}$	
$\alpha_3$ $-0.2 \times 10^{-3}$	$K_3$ $1.05 \times 10^{-11}$	
$\alpha_4$ $6.8 \times 10^{-3}$		
$\alpha_5$ $4.7 \times 10^{-3}$		
$\alpha_6$ $-2.3 \times 10^{-3}$		

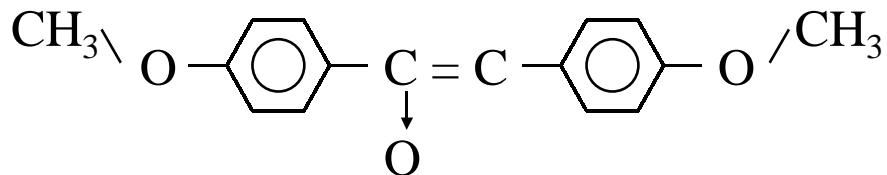


図 1.2 PAA の化学構造

### 1.3 研究目的

液晶ディスプレイはフレデリクス転移を利用することによって画素のスイッチングを行っている。この場合、液晶分子の配向の変化に伴って流動が生じる（背流効果）ことが知られる<sup>(5)</sup>。例えば液晶ディスプレイ中の1画素に磁場を印加した場合、この背流が周りの画素の配向に影響を与え、画像を乱す可能性がある。

ネマティック液晶の背流効果についてこれまでに研究報告がなされて来た。Clark と Leslie<sup>(6)</sup>は平行平板中で平行方向に配向した液晶分子に壁面に垂直方向にかけられた磁場をはずした後の、平板間の背流効果について調べた。しかし、実際の液晶ディスプレイは平板間でツイスト構造を有しており、Clark らによる解析結果を直接利用することはできない。また液晶ディスプレイでは、配向欠陥の発生を防ぎ、また液晶分子の応答時間を短縮するために、壁面上の液晶分子はティルト角を有している。しかし、ティルト角の影響を考慮した背流効果の研究はなされていない。

本研究では、Leslie-Ericksen (L-E) 理論<sup>(7)</sup>を用いてツイスト構造を有する平行平板間のネマティック液晶に磁場を印加した場合の配向構造の変化および背流の発生を調べる。またティルト角が配向構造の変化および背流に及ぼす影響を調べる。

## 第2章 理 論

### 2.1 基礎式および構成方程式

外場のある非圧縮性流体の流れ場を決定する方程式は、

連続の式

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (1)$$

運動方程式

$$\rho \left\{ \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \right\} = \mathbf{F} + \nabla \cdot (-p \mathbf{I} + \hat{\mathbf{o}}) \quad (2)$$

である。 $\mathbf{v}$  は速度ベクトル、 $\rho$  は流体密度、 $p$  は圧力、 $\mathbf{I}$  は単位テンソルである。 $\hat{\mathbf{o}}$  は偏差応力テンソル、 $\mathbf{F}$  は外力であり、Leslie-Ericksen 理論より、

$$\hat{\mathbf{o}} = \alpha_1 \mathbf{n} \mathbf{n} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{n} + \alpha_2 \mathbf{n} \mathbf{N} + \alpha_3 \mathbf{N} \mathbf{n} + \alpha_4 \mathbf{A} + \alpha_5 \mathbf{n} \mathbf{n} \cdot \mathbf{A} + \alpha_6 \mathbf{A} \cdot \mathbf{n} \mathbf{n} - \frac{\partial F}{\partial \nabla \mathbf{n}} \cdot (\nabla \mathbf{n})^T \quad (3)$$

$$\mathbf{F} = [(\chi_{\perp} \mathbf{H} + \chi_a (\mathbf{n} \cdot \mathbf{H}) \mathbf{n}) \cdot \nabla] \mathbf{H} \quad (4)$$

と与えられる。ここで、 $\mathbf{n}$  は微小体積中の液晶分子の平均配向方向を表す単位ベクトルで、ディレクタと呼ばれる。 $\alpha_i$  ( $i = 1, \dots, 6$ ) はレズリーの粘性係数、 $\mathbf{A}$  は変形速度テンソルである。 $\mathbf{N}$  はディレクタと流体との相対角速度ベクトルで、

$$\mathbf{N} = \frac{D\mathbf{n}}{Dt} - \dot{\mathbf{U}} \cdot \mathbf{n} \quad (5)$$

となる。 $\dot{\mathbf{U}}$  は渦度テンソルである。式(3)の  $F$  はディレクタの空間ひずみから生じる自由エネルギー密度で、

$$2F = K_1 (\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + K_2 (\mathbf{n} \cdot \nabla \times \mathbf{n})^2 + K_3 |\mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n}|^2 \quad (6)$$

と与えられる。 $K_1$ 、 $K_2$ 、 $K_3$  は、それぞれディレクタの空間的広がり、ねじれおよび曲がりに関するフランクの弾性定数である。式(4)の  $\mathbf{H}$  は磁場強度、 $\chi_a$  は磁化率の異方性であり、

$$\chi_a = \chi_{\parallel} - \chi_{\perp} \quad (7)$$

となる。ここで、 $\chi_{\parallel}$  と  $\chi_{\perp}$  はそれぞれディレクタに対して平行および垂直方向の磁化率である。

等方性流体の流れ場を決定するには式(1)、(2)に速度ベクトル  $\mathbf{v}$  と圧力  $p$  を与えることで決定できる。しかしネマティック液晶の流れ場を決定するためにはディレクタ  $\mathbf{n}$  を規定しなければならない。その方程式は、

### 角運動方程式

$$\mathbf{n} \times \left\{ \mathbf{G} + \frac{\partial F}{\partial \mathbf{n}} - \nabla \cdot \left( \frac{\partial F}{\partial \nabla \mathbf{n}} \right) + \lambda_1 \mathbf{N} + \lambda_2 \mathbf{A} \cdot \mathbf{n} \right\} = \mathbf{0} \quad (8)$$

である。 $\mathbf{G}$  はディレクタに働く磁場強度  $\mathbf{H}$  による体積力であり、

$$\mathbf{G} = \{ \chi_a (\mathbf{n} \cdot \mathbf{H}) \} \mathbf{H} \quad (9)$$

で与えられる。また  $\lambda_1$ ,  $\lambda_2$  はそれぞれ流体の回転と変形がディレクタの配向に影響を及ぼす場合の粘性係数であり、レズリーの粘性係数と、

$$\lambda_1 = \alpha_3 - \alpha_2 \quad (10)$$

$$\lambda_2 = \alpha_3 + \alpha_2 \quad (11)$$

の関係にある。

### 第3章 計算領域

#### 3.1 計算領域

本研究では図3.1に示す計算領域を用いる。ここに速度ベクトル  $\mathbf{v}$ 、磁場強度  $\mathbf{H}$ 、 $\mathbf{H}$  がディレクタに働く体積力  $\mathbf{G}$  を適用すると、

$$\mathbf{v} = (u, 0, w) \quad (12)$$

$$\mathbf{H} = (0, H, 0) \quad (13)$$

$$\mathbf{G} = (0, \chi_a H^2 \sin \phi, 0) \quad (14)$$

となる。またディレクタ  $\mathbf{n}$  はねじれ角 およびティルト角 を用いて

$$\mathbf{n} = (\cos \phi \sin \theta, \sin \phi, \cos \phi \cos \theta) \quad (15)$$

と表される。また Zöcher 数<sup>(8)</sup>と呼ばれる磁力と弾性力の比を表す無次元パラメータを導入する。この Zöcher 数は、平板距離  $L$ 、磁場強度  $H$ 、磁化率の異方性  $\chi_a$ 、代表弾性定数  $K_{11}$  を用いて、

$$Z = LH \sqrt{\chi_a / K_{11}} \quad (16)$$

と定義される。

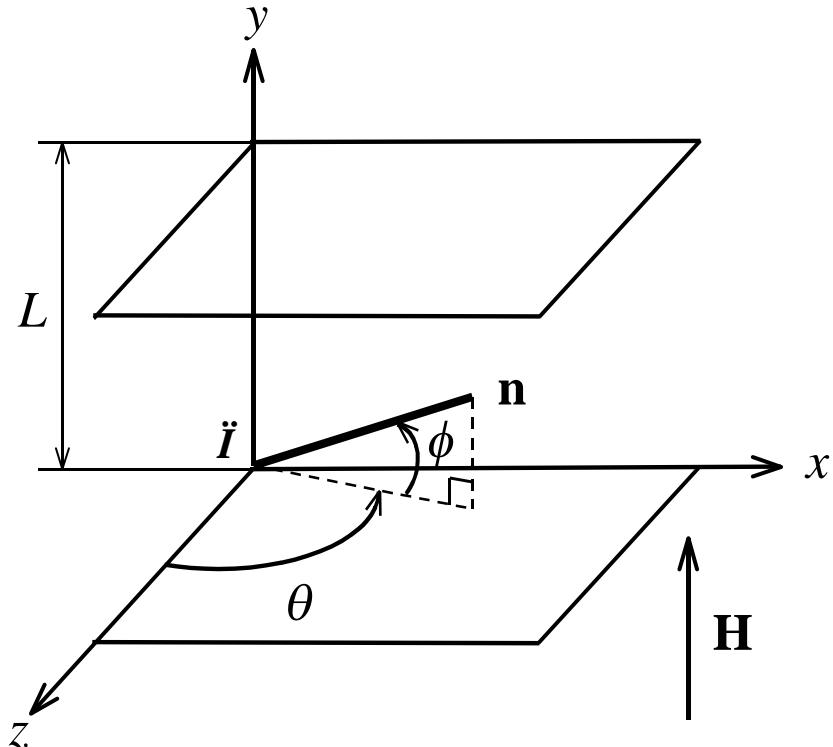


図3.1 計算領域および座標系

### 3.2 数値計算

本研究では、平板間距離  $L = 1\text{mm}$  のネマティックセルを用いる。壁面上の配向は、第1章で記述した配向手法を用いることにより決定することができる。ゆえにディレクタ  $n$  の壁面配向角は下部平板( $y=0\text{mm}$ )で  $\omega=0^\circ$ 、上部平板( $y=1\text{mm}$ )で  $\omega=-90^\circ$  とし、 $\omega$  は  $\omega=0^\circ$  から  $50^\circ$  までを  $10^\circ$  刻みで変化させる。またネマティック液晶の場合、壁面上は第1章で記述したように強いアンカリングを示すので、壁面配向角は変化しないとする。

上記の配向状態にある平板に  $t=0\text{s}$  で平板に対して垂直な磁場を印加する。磁場はツイスト構造( $\omega=0^\circ$ )の時にフレデリクス転移を起こすものを用いる。このとき  $Z^2 = 2040$  である。また比較のために他の配向場にも同様の磁場を印加する。物性値には第1章で示したPAAを用いる。また、流体密度  $\rho$  は  $1000\text{kg/m}^3$ とした。

本研究では差分法を用いて計算を行った。空間方向に2次精度の中心差分法を行い、時間積分に2次精度のRunge-Kutta法を用いた。計算には  $y$  方向を 100 分割( $y=0.01\text{mm}$ )した格子を用いる。また時間ステップは  $t=10^{-7}\text{s}$ とした。

## 第4章 計算結果

### 4.1 配向場

$t=0\text{s}$  で磁場を印加した場合の、壁面配向角  $\omega=0^\circ$  から  $50^\circ$  の  $10^\circ$  刻みの配向場の時間変化をそれぞれ図 4.1(a) ~ (e) に示す。図 4.1(a) ~ (e) においてグラフの縦軸は  $y$  方向、横軸は時間の変化を表す。このとき時間変化の刻みは  $0.5\text{s}$  とする。また図中の円筒はディレクタを表す。最上部のディレクタと最下部のディレクタはそれぞれ上部平板および下部平板の壁面配向角を示す。

いずれの図においても初期の配向状態は  $\omega$  を有するツイスト構造であることがわかる。ここに磁場を印加すると壁面近傍を除いて磁場の方向へ配向する。壁面近傍では第 1 章で仮定したアンカリングの影響によりディレクタの配向は壁面配向から急激に磁場方向に変化する。

初期配向状態から磁場方向への転移に要する時間は、図 4.1 (a) では  $5.5\text{s}$ 、図 4.1 (b) では  $3.5\text{s}$ 、図 4.1 (c) では  $3\text{s}$ 、図 4.1 (d) では  $2.5\text{s}$ 、図 4.1 (e) では  $2.3\text{s}$ 、図 4.1 (f) では  $2\text{s}$  である。これより壁面配向角  $\omega$  が増加するに従い配向場が定常に至る時間は短くなることがわかる。この時間は、ディレクタが磁場強度から受ける体積力の大きさと平板間の初期配向状態によって決定されると考えられる。

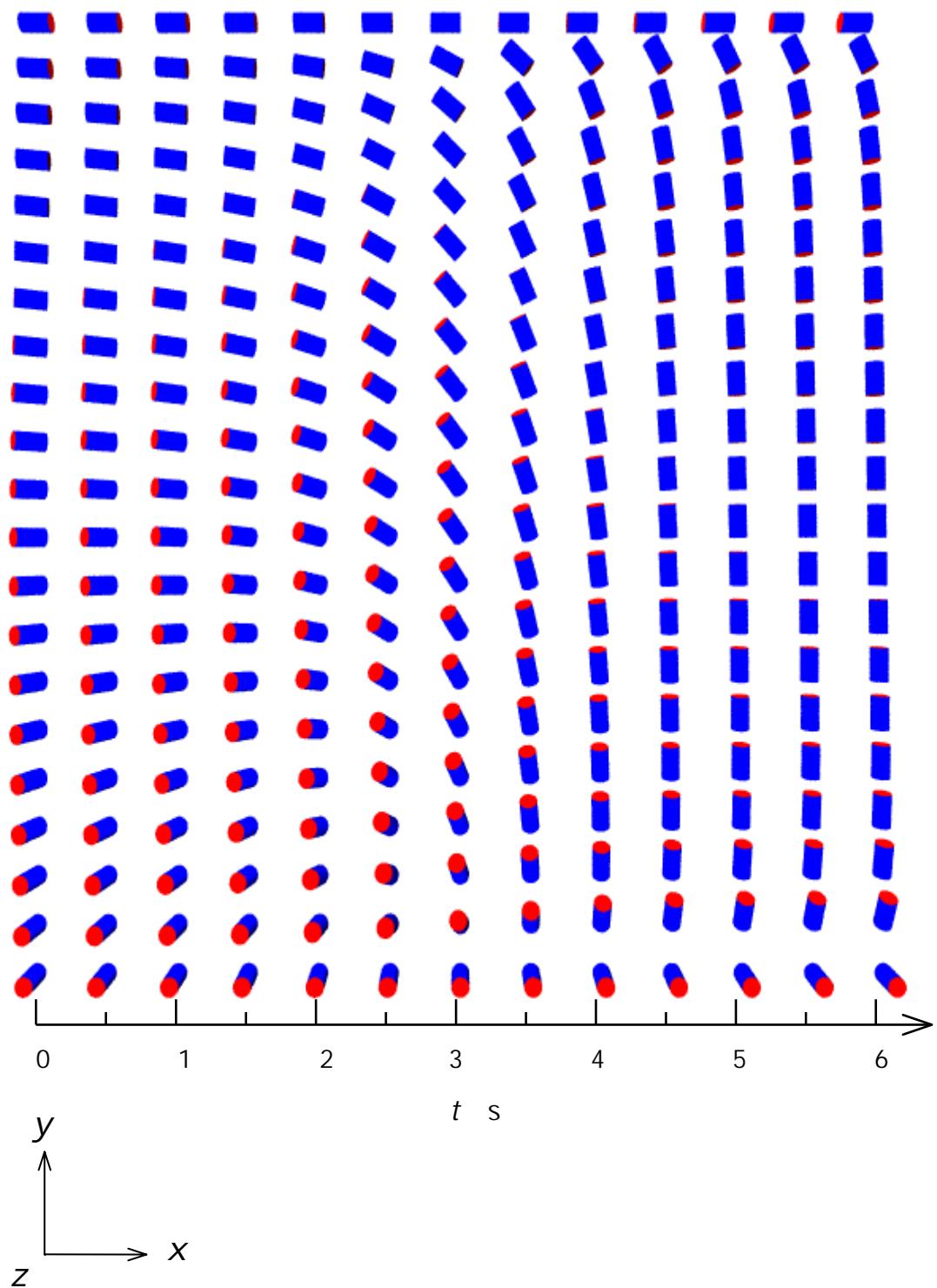


図 4.1(a) 配向場の時間変化( $\omega_w = 0^\circ$ )

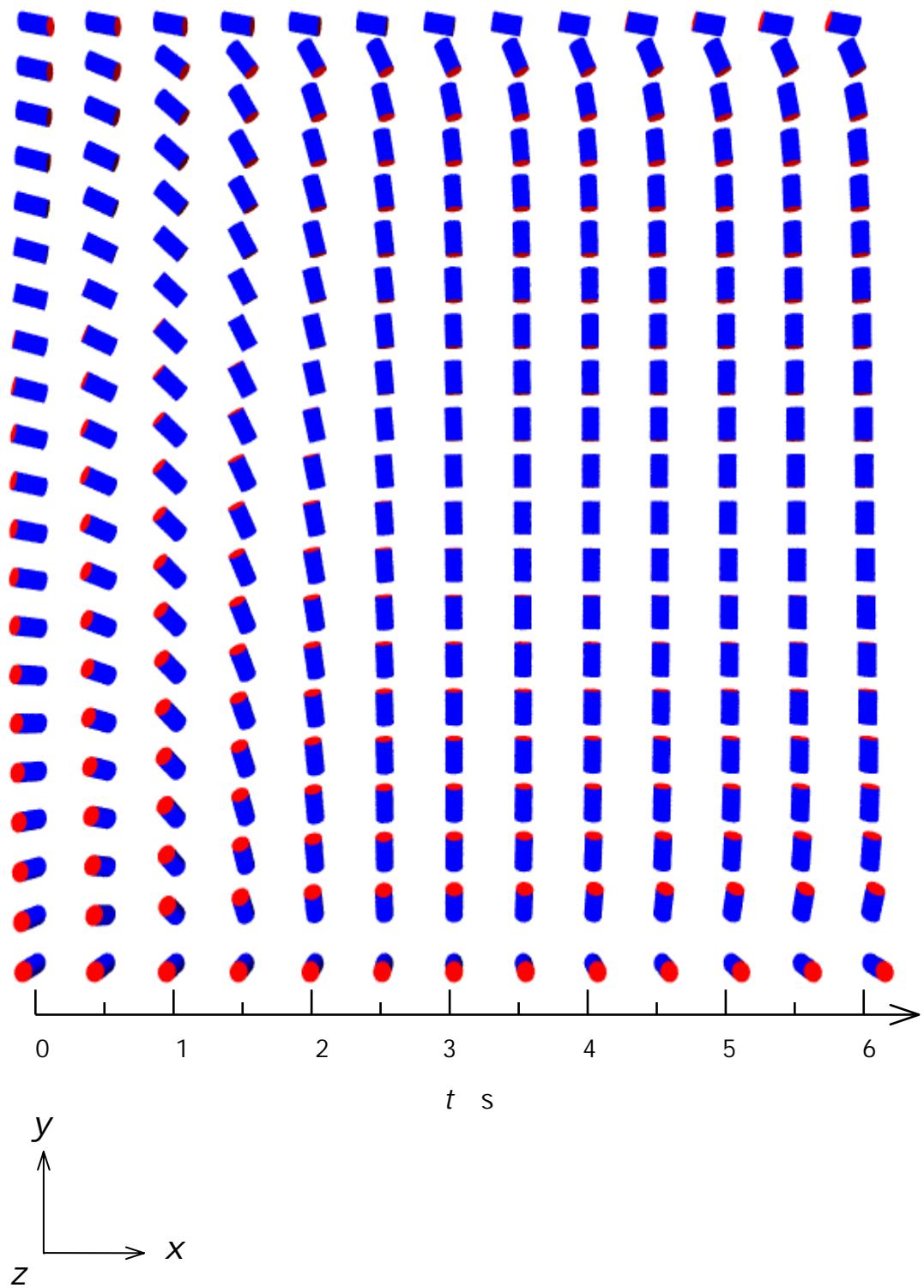


図 4.1(b) 配向場の時間変化( $\omega_w = 10^\circ$ )

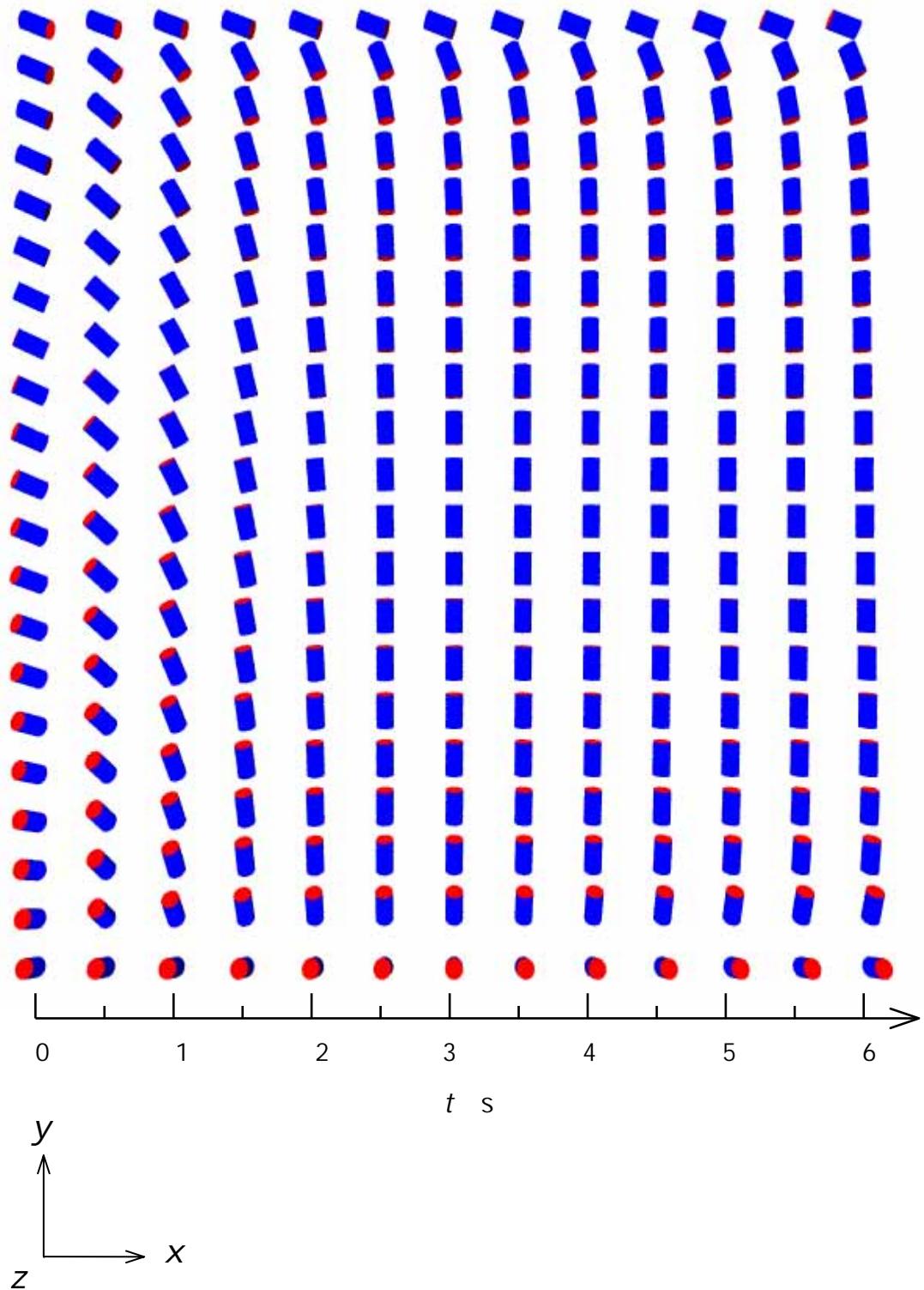


図 4.1(c) 配向場の時間変化( $w = 20^\circ$ )

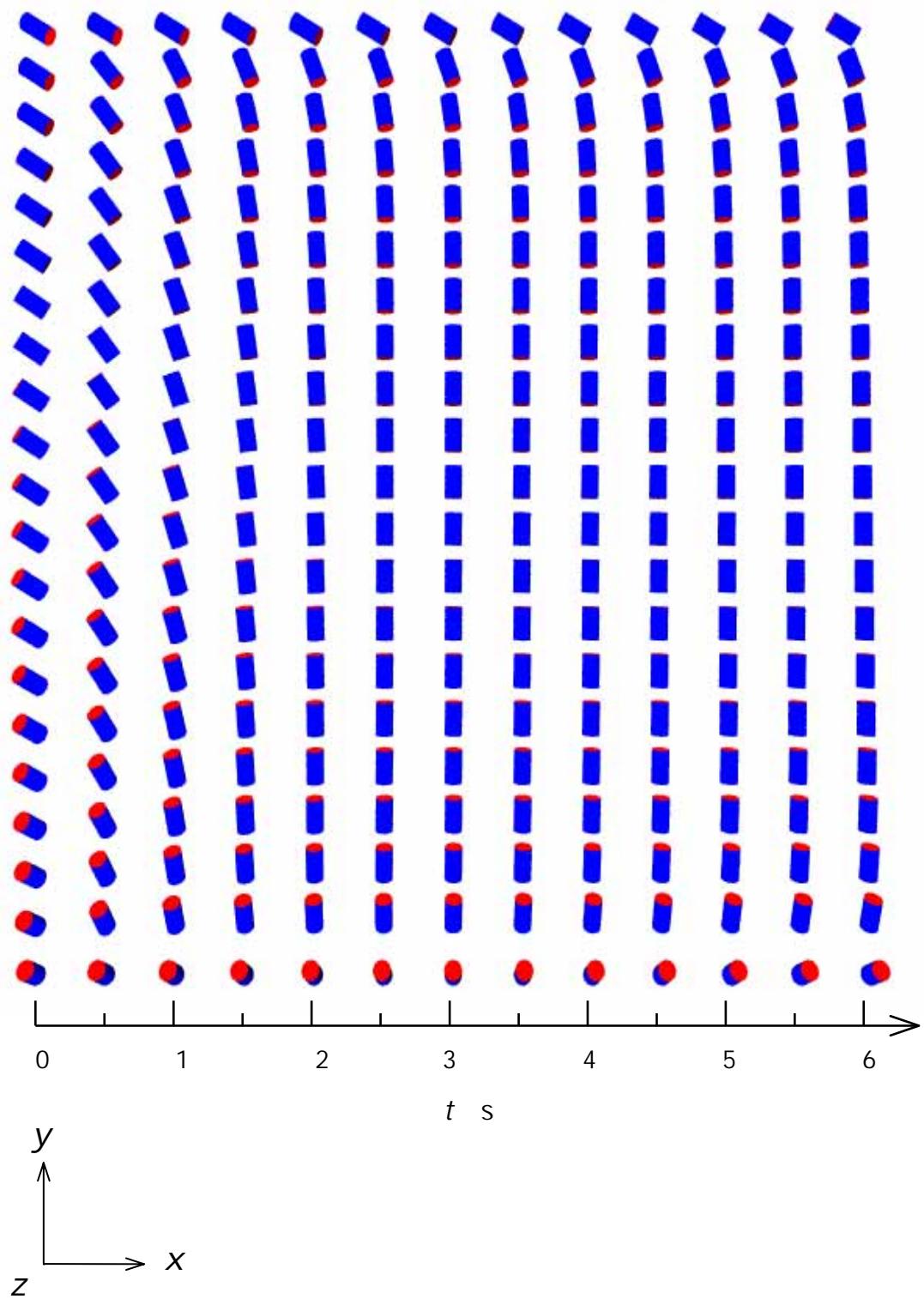


図 4.1(d) 配向場の時間変化(  $w = 30^\circ$  )

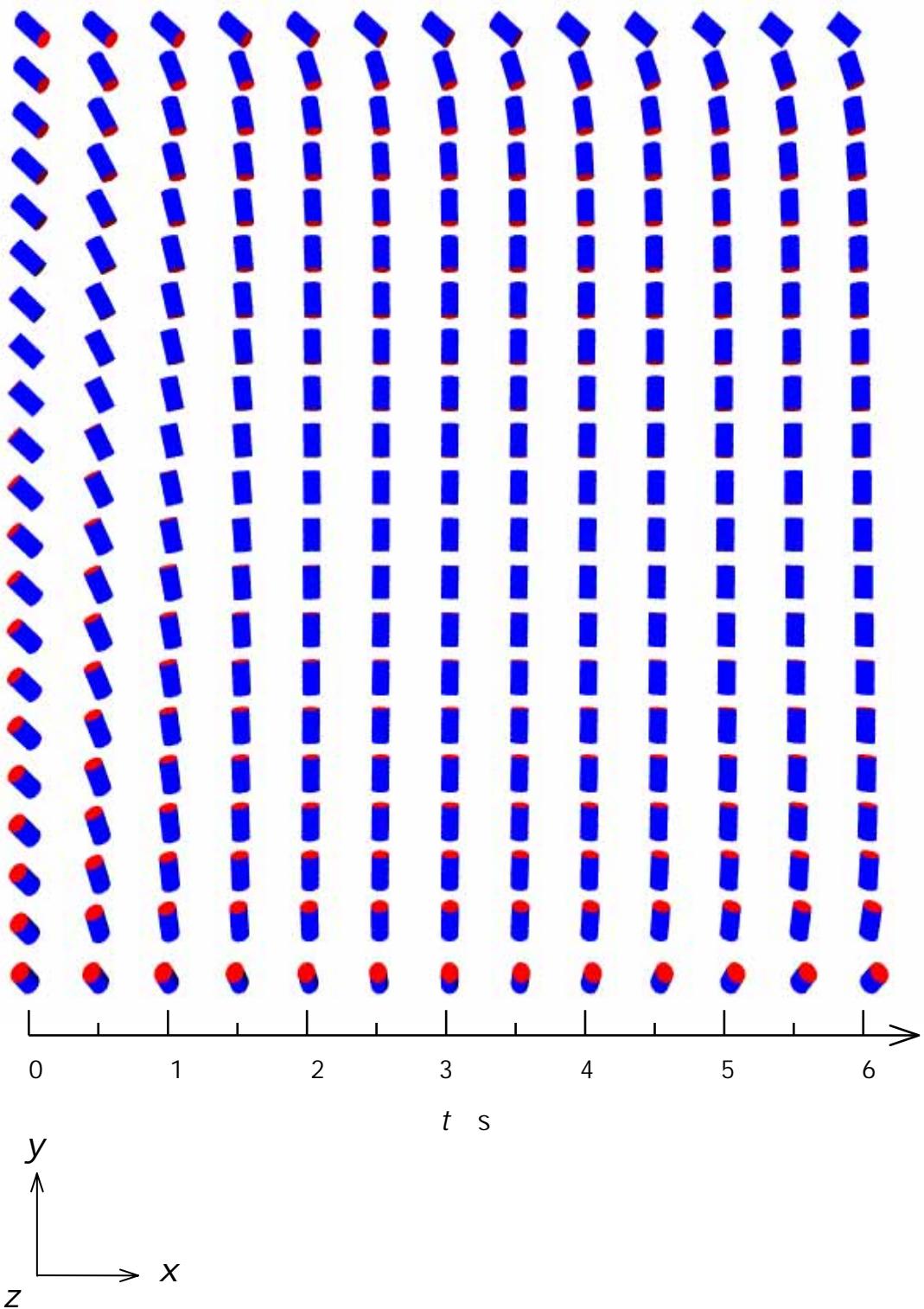


図 4.1(e) 配向場の時間変化(  $w = 40^\circ$  )

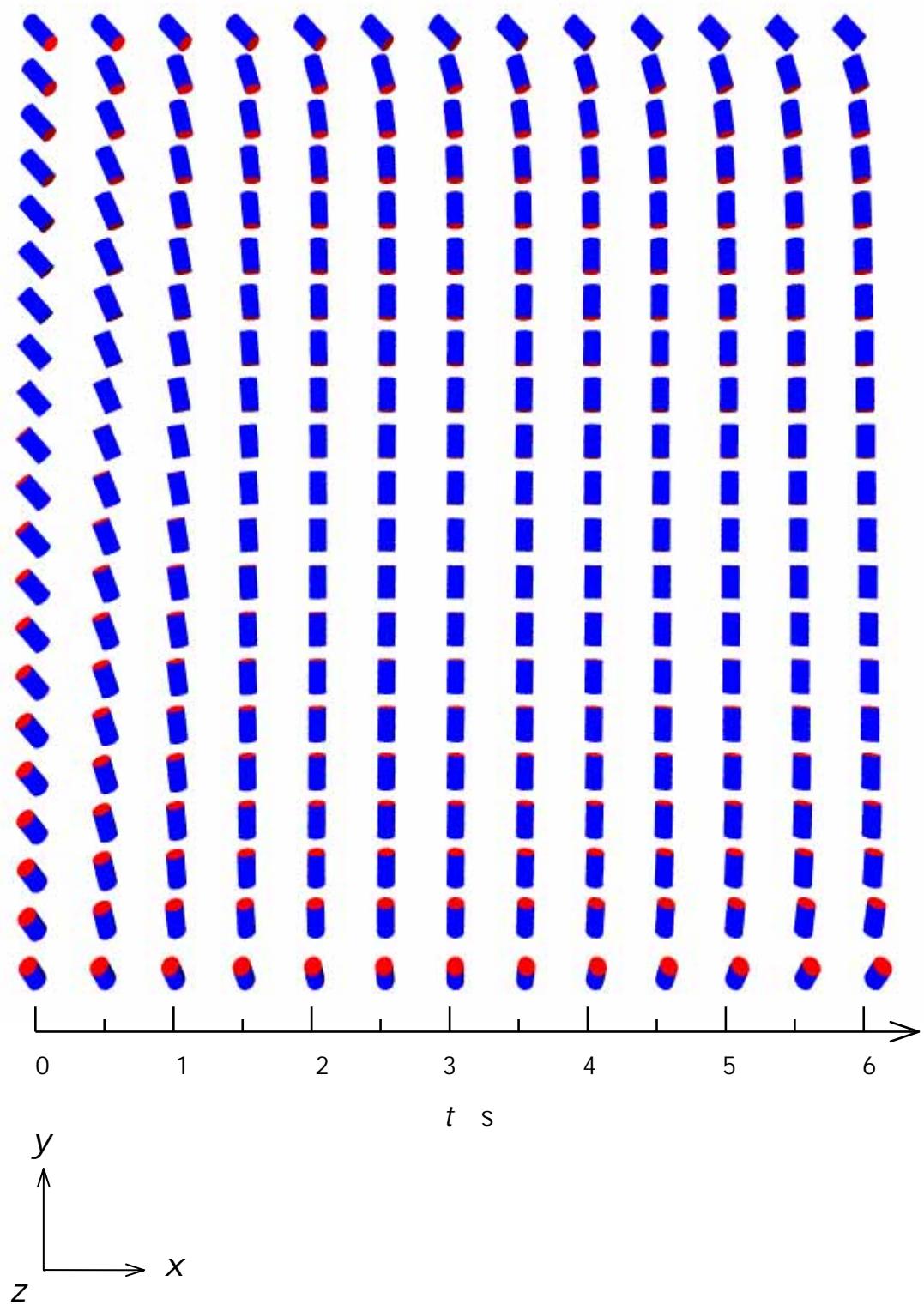


図 4.1(f) 配向場の時間変化( $\omega_w = 50^\circ$ )

## 4.2 速度場

図 4.2(a) ~ (f) に図 4.1(a) ~ (f) の配向場の変化に伴い誘起される背流の時間変化を表す。すべての図において上の図は  $x$  方向速度  $u$  での、下の図は  $z$  方向速度  $w$  での  $y$  方向分布を示している。図 4.2(a) に  $w = 0^\circ$  の場合に背流が誘起する様子を示す。背流は、 $x$  方向速度  $u$  では  $y$  方向の上部に発展していき、 $z$  方向速度  $w$  では  $y$  方向の下部に向かって発展していく。このとき  $u$  と  $w$  の大きさは平板中心 ( $y = 0.5\text{mm}$ ) を軸に対称であることがわかる。これらはディレクタがツイスト構造を有しているためにこのように背流が発展するものと考えられる。また  $u$  方向では上部平板近傍、 $w$  方向では下部平板近傍において速度が負になっている。このとき背流が最大流速をとるまでに要する時間は約 6s である。

図 4.2(b) ~ (f) はそれぞれ  $w = 10^\circ, 20^\circ, 30^\circ, 40^\circ, 50^\circ$  の場合の背流の時間変化を示している。これらの図において  $u$  と  $w$  は、図 4.2(a) の場合と同様に  $y$  方向の上部および下部で発展していき、その大きさは平板中心を軸とした軸対称になっている。このとき  $u$  と  $w$  が最大流速をとるまでに要する時間は図 4.2(a) で約 6s であるのに対し図 4.2(b) で約 4s、図 4.2(c) で約 3s、図 4.2(d) で約 3s、図 4.2(e) で約 3s、図 4.2(f) で約 2s となり、 $w$  の増加に伴い短くなっているが、 $w$  の値がある一定の大きさを超えると変化は少なくなる。また図 4.2(a) で上部平板近傍、下部平板近傍において速度が負になっている所は、図 4.2(b) ~ (d) にも存在している。しかし、その大きさは徐々に減少していき、図 4.2(e), (f) では存在しない。これは、 $w$  が増加するに従い平板近傍で初期配向状態から磁場印加後の定常な配向状態まで変化するディレクタの変化量が減少するためだと思われる。

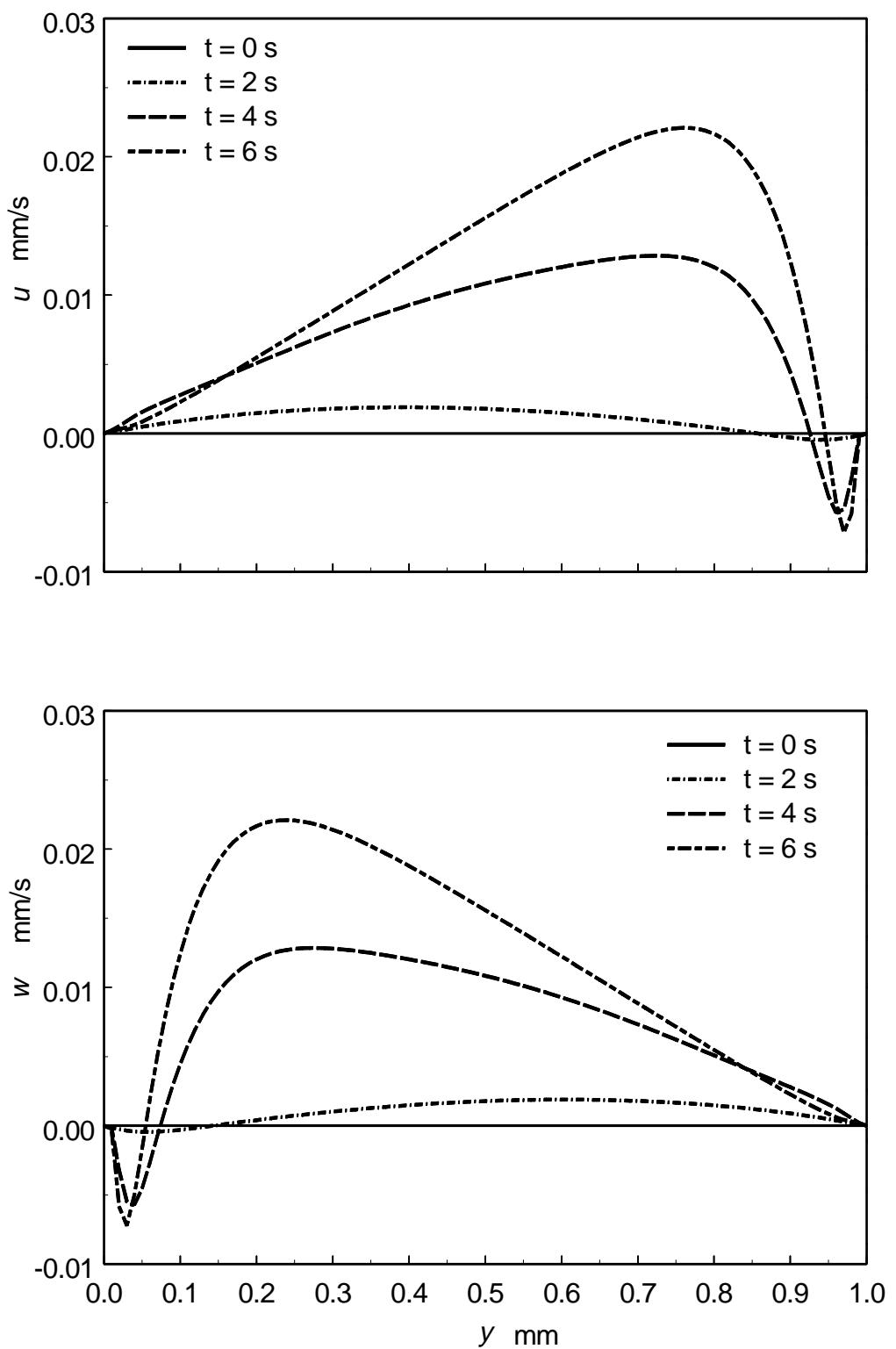


図 4.2(a) 速度分布の時間変化(  $w=0^\circ$  )

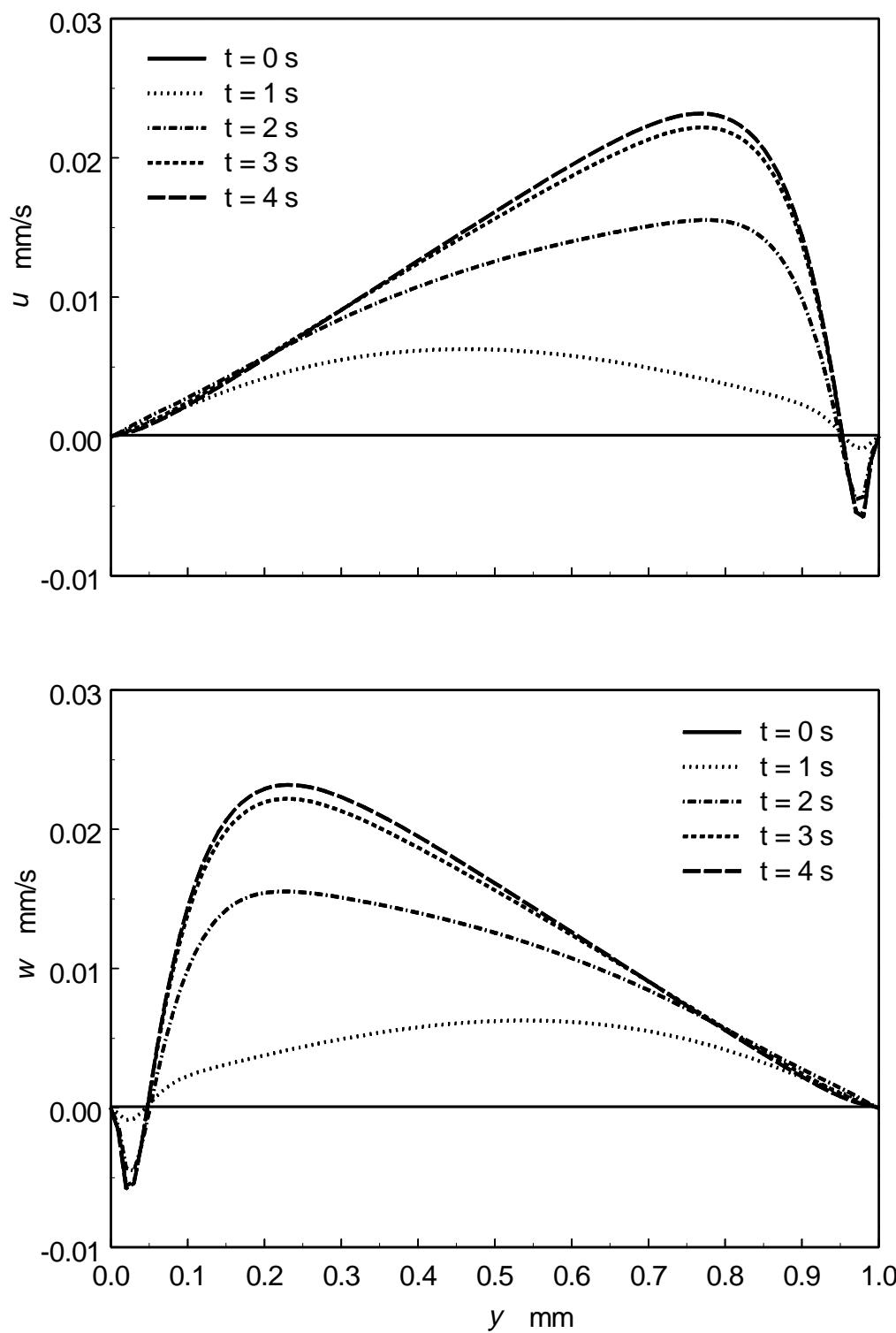


図 4.2(b) 速度分布の時間変化(  $\omega = 10^\circ$  )

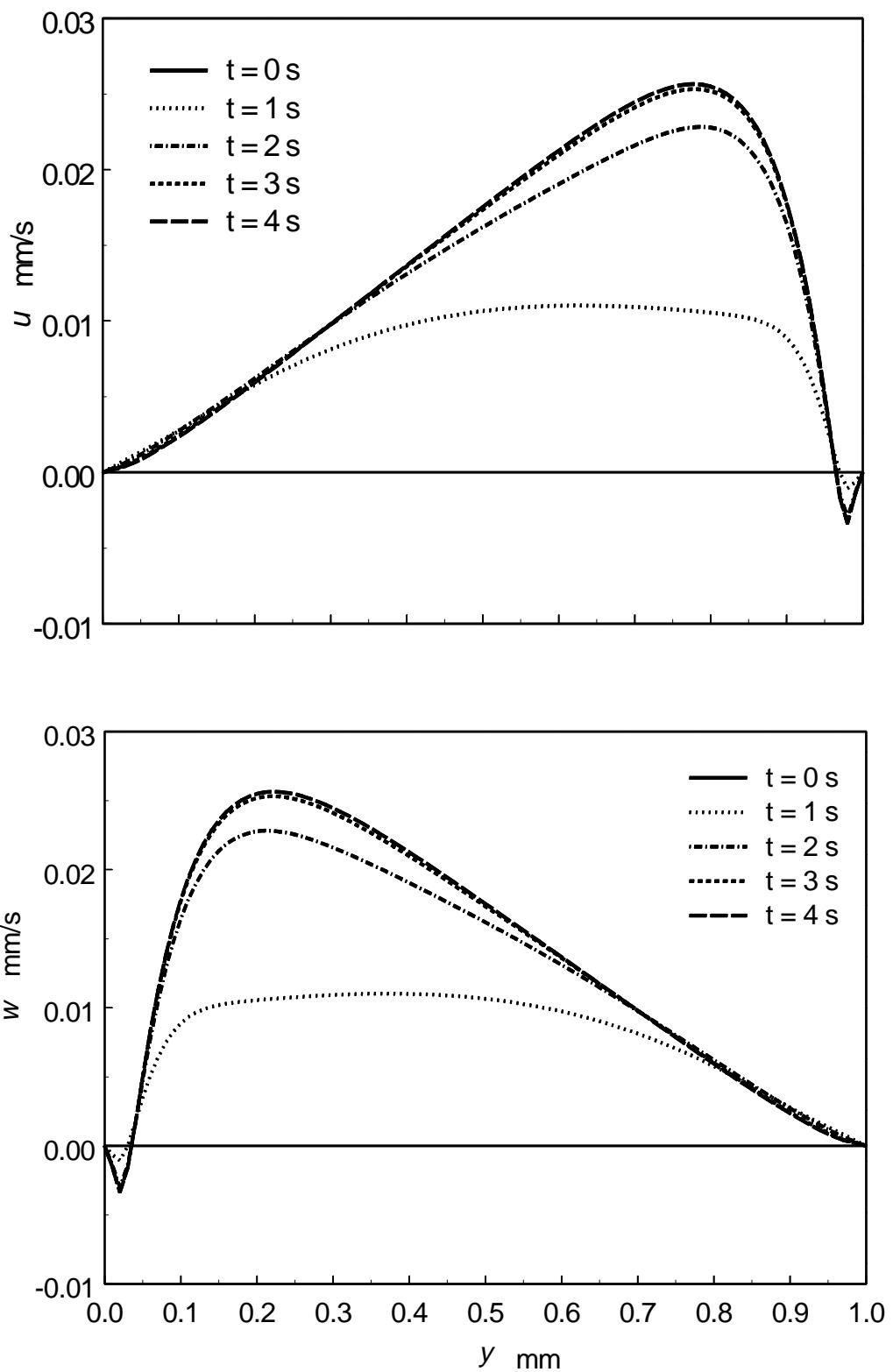


図 4.2(c) 速度分布の時間変化(  $\omega_w = 20^\circ$  )

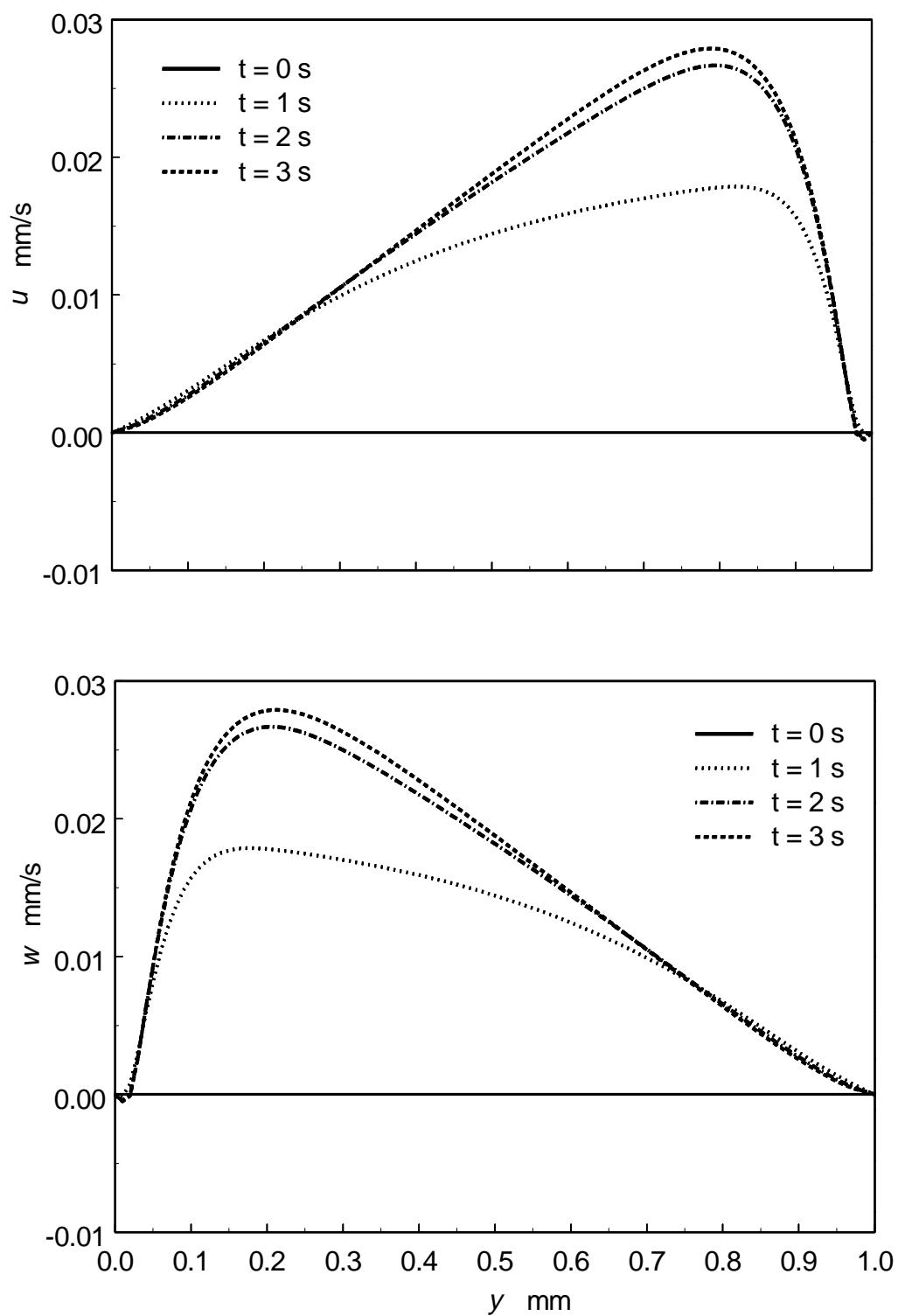


図 4.2(d) 速度分布の時間変化(  $\omega_w = 30^\circ$  )

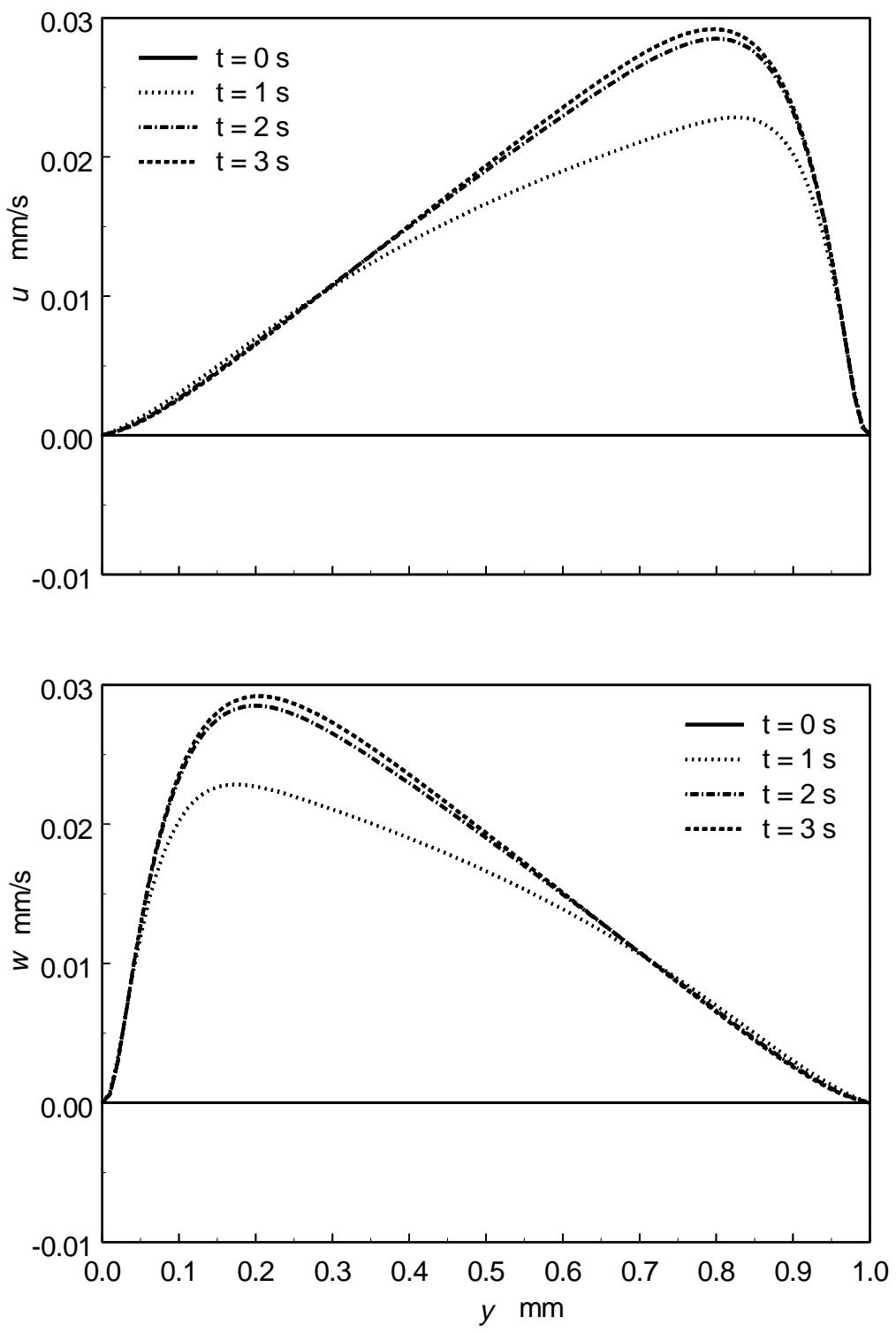


図 4.2(e) 速度分布の時間変化(  $\omega_w = 40^\circ$  )

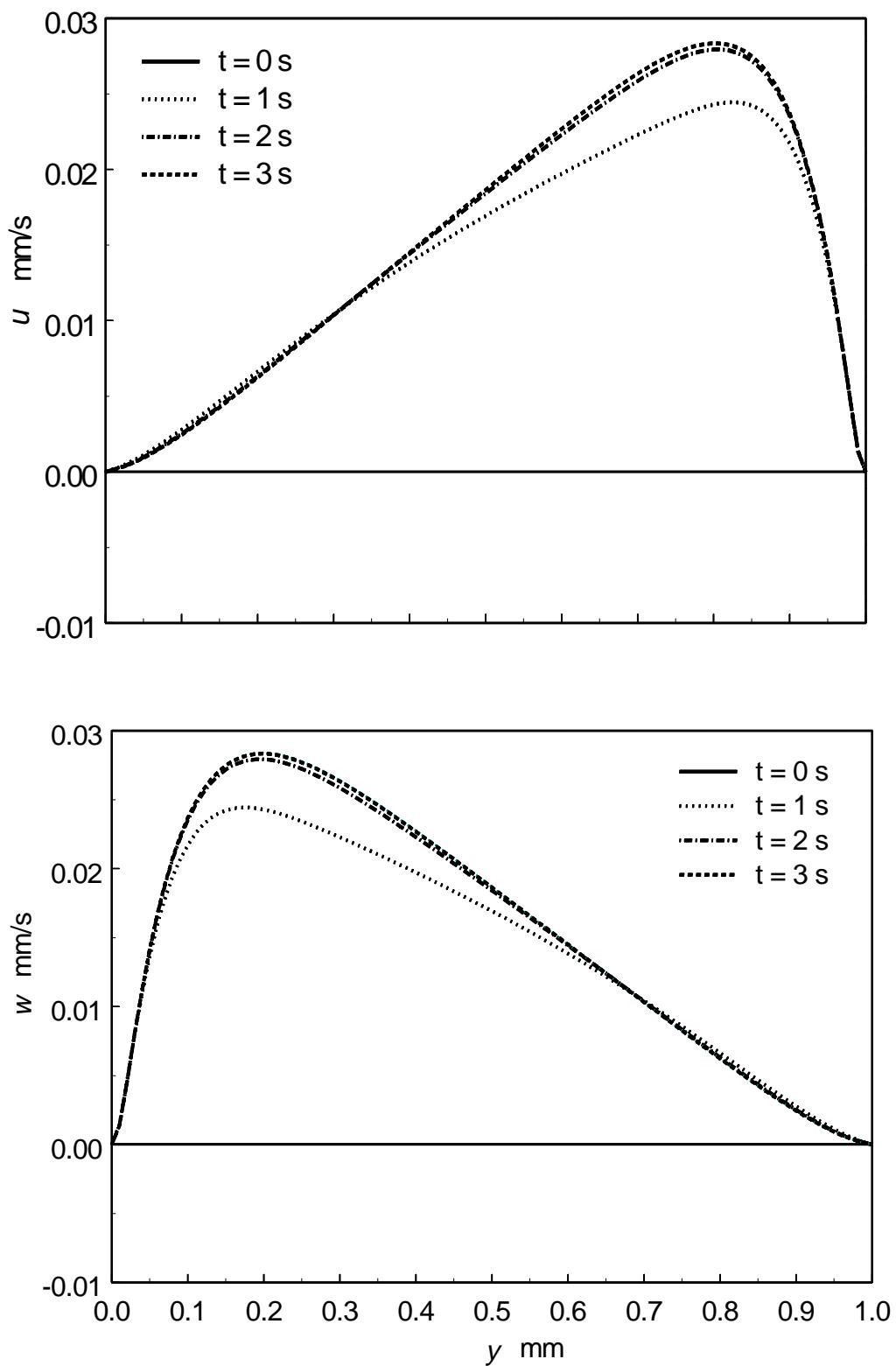


図 4.2(f) 速度分布の時間変化(  $w = 50^\circ$  )

#### 4.3 平板中心におけるティルト角 の時間変化

図 4.3 に平板中心( $y = 0.5\text{mm}$ )のディレクタがとるティルト角 の時間変化を壁面のティルト角  $w$  ごとに示した。図より  $w = 0^\circ$  の時にディレクタが磁場方向に配向するのに要する時間は 5.5s 程度必要である。しかし、 $w$  の増加に伴い配向場が定常に至るまでの時間は短くなるのがわかる。

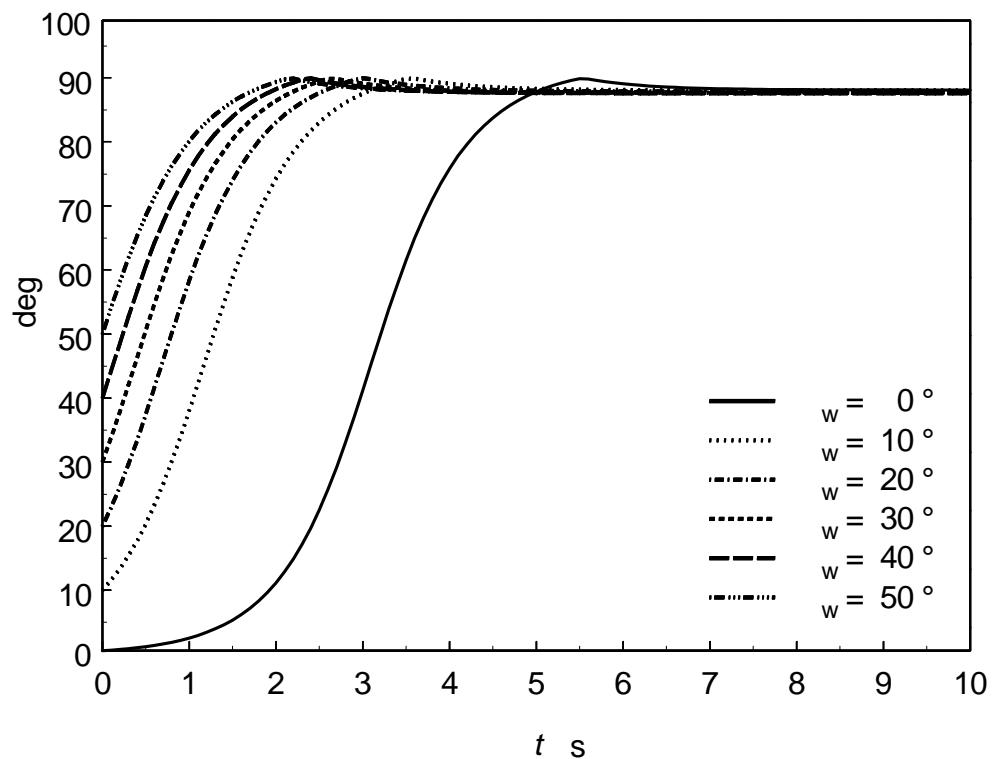


図 4.3 ティルト角 の時間変化

## 第5章 結 言

### 5.1 まとめ

Leslie-Ericksen 理論を用いてツイスト構造を有する平行平板間内のネマティック液晶に磁場を印加した場合の計算を行い次の結果を得た .

- (1) 磁場による配向場の変化に伴って ,  $x$  方向および  $z$  方向に背流が誘起される .
- (2) 磁場を印加後の配向構造の時間的な変化の様子がわかった .
- (3) 誘起される背流の定量的な大きさがわかった .
- (4)  $w$  が増加するに伴い , 配向場および速度場の応答時間が短くなる .

## 参考文献

- (1) 福田敦夫 , 竹添秀夫 , 強誘電性液晶の構造と物性 ,( 1990 ), コロナ社 .
- (2) 例えば , 岡野ら , 液晶辞典 ,( 1989 ), 培風館 .
- (3) Tseng , H.C. , ほか 2 名 , Phys.Fluids , 15(1972) , 1213.
- (4) 例えば , 加藤ら , 液晶便覧 ,( 2000 ), 丸善株式会社 .
- (5) Chandrasekher , S. , 液晶の物理学 ,( 1995 ), 吉岡書店 .
- (6) Clark , M.G. , and Leslie , F.M. , Proc.Roy.Soc. , A361(1978) , 463.
- (7) Leslie , F.M. , Arch.Ration.Mech.Anal. , 28(1968) , 255.
- (8) 久保篤氏 磁場かにおけるネマティック液晶の二次元流れの数値計算(卒業論文)  
(1996)

## 謝 辞

本研究を行うにあたり，終始懇切丁寧な御指導を賜りまして蝶野成臣教授ならびに辻知宏助手に対し，深く感謝いたします．また高知工科大学知能流体力学研究室の皆さんからは多大なるご援助を頂き，あわせて感謝します．