

平成 1 3 年度

修士論文

スメクティック C 液晶の平行平板間流れの
数値シミュレーション

高知工科大学大学院工学研究科基盤工学専攻
知能機械コース博士課程前期

寺田 敦史

目次

スメクティック液晶の平行平板間流れの数値シミュレーション	1
第1章 緒言	2
1・1 本研究の目的	2
1・2 液晶	2
1・3 スメクティック液晶	3
1・4 研究の背景	4
1・5 液晶ディスプレイ	5
1・6 本論文の構成	8
第2章 座標系と支配方程式	9
2・1 局所座標系	9
2・2 基礎式	10
2・3 流れ領域	12
2・4 スメクティック層の配置	12
2・5 Planar 配置	14
2・6 Bookshelf 配置	15
2・7 無次元化と無次元数	16
第3章 数値計算	18
3・1 差分法	18
3・2 ルンゲ・クッタ法	19
3・3 物性値	19
第4章 計算結果及び考察 ~Planar 配置~	23
4・1 計算結果 1	23
4・2 計算結果 2	29

第5章 計算結果及び考察 ~ Bookshelf 配置 ~	36
5・1 アライニングとタンプリング	36
5・2 計算結果3	37
5・3 計算結果4	41
第6章 結言	46
ネマティック液晶の同心回転円板間流れの数値シミュレーション	47
A1 研究目的	48
A2 座標系及び支配方程式	50
A2・1 流れ領域及び座標系	50
A2・2 基礎式	50
A2・3 無次元化	51
A3 数値計算	53
A3・1 境界条件	53
A3・2 物性値	53
A4 結果と考察	55
A5 結言	59
参考文献	60
謝辞	61

スメクティック C 液晶の平行平板間流れの
数値シミュレーション

第1章 緒言

1・1 本研究の目的

近年，液晶ディスプレイ業界では従来型の液晶ディスプレイに替わって，強誘電性液晶ディスプレイが注目されている．強誘電性液晶ディスプレイは従来型より視野角が広く，応答速度が速く，消費電力が少ないといった利点を持つ．しかし強誘電性液晶ディスプレイは実用化に向けてまだ大きな問題を抱えている．その問題は強誘電性液晶ディスプレイに使われている液晶材料にある．

後ほど詳しく説明するが液晶は分子の配列上の違いからネマティック液晶，コレステリック液晶，スメクティック液晶の3種類に分けることができる．そのうち従来型の液晶ディスプレイに使われている液晶はネマティック液晶であり，強誘電性液晶ディスプレイに使われている液晶はスメクティック液晶である．

液晶ディスプレイ製造過程において最も時間を要するのがディスプレイセルへの液晶材料の注入である．ネマティック液晶の場合にはその流動を表す理論が確立されており，経験的にも理論的にも十分に研究が行われている^{(1),(2)}．スメクティック液晶はネマティック液晶に比べ粘度が高く，液晶ディスプレイセルへの注入に時間がかかる．そのため，液晶ディスプレイセルへのスメクティック液晶の注入条件の最適化は極めて重要な課題である．しかしスメクティック液晶の場合，流動を表す理論が提案されているが，理論式の複雑さのため，その有用性は確認されていないのが現状である．

本研究ではそのスメクティック液晶の流動を表す理論を，数値シミュレーションを解いて理論の有用性を確認する．スメクティック液晶の流動を表す理論が確立されれば，近い将来に達成されるであろう強誘電性液晶ディスプレイの実用化に大きく貢献するのは間違いなく，本研究は工学的に高い価値があるといえる．

1・2 液晶

液晶は結晶相から等方相へ相転移を起こす過程で現れる中間相であり，その構造によってネマティック液晶，コレステリック液晶，スメクティック液晶の3つに大別される．ネマティック液晶は最も単純な構造の液晶で，棒または円盤状の分子から構成されている．ネマティック液晶は分子の向きに関する秩序を有するが，その重心位置の空間的な配置は液体のように無秩序であるような，最も低秩序な液晶である．

コレステリック液晶はカイラルネマティック液晶とも呼ばれ、ネマティック液晶に光学活性物質を添加することでネマティック液晶の対称性が崩れ、分子が螺旋状に配向している液晶で、温度変化等によってらせんピッチが変化することを利用して温度センサ等に使用されている。

スメクティック液晶は分子が向きの秩序のみならず、重心位置の密度に周期性を有する。その結果、分子が層構造を形成している。すなわち、層平面方向では分子の重心位置は無秩序であり分子は自由に移動することができるが、層法線方向には分子はほとんど移動できない。スメクティック液晶には様々な種類が存在するがそれらの詳細な分類は以下で説明する。

1・3 スメクティック液晶⁽³⁾

前節に挙げた3種類の液晶のうちスメクティック液晶はさらに層内の分子の配置や層に対する分子の向きによって、細かく分類されている。それらは発見された順にA, B, C...と添字を付けられ、 S_A 相、 S_B 相、 S_C 相...と呼ばれている。

表1はスメクティック液晶の分子構造による分類を表している。この中で本研究の対象となる S_C 相は強誘電性液晶ディスプレイへの応用が考えられている。

S_B, S_I, S_F 相はボンド配向秩序を有するヘキサティック相を形成する。 $S_L, S_J, S_G, S_E, S_K, S_H$ 相は分子が層内に分子が六方晶の格子を形成し三次元結晶に分類され、流動性は持たない。 S_E, S_K, S_H 相はさらに矢筈模様の構造も形成する。

Table 1. Distinction of smectic liquid crystals on each molecular formation

Molecular formations	Molecular orientation respect to the layer normal	
	No tilt	Tilt
Liquid like	S_A	S_C
Hexatic phase	S_B	S_I, S_F
Hexagonal crystal	S_L	S_J, S_G
Hexagonal crystal and herringbone structure	S_E	S_K, S_H

S_B , S_L , S_E 相は分子の向きが層法線に対し傾いたものがそれぞれ二種類存在するが、これは図 1-1 に示す様に最近傍点と第二最近傍点のどちらの方向に傾いているかで区別される。

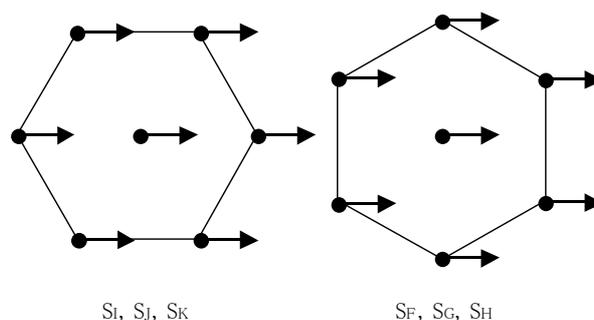


Fig 1-1. Tilt directions of tilt on S_F , S_G , S_H , S_I , S_J , S_K phases

表 1 には S_D 相が含まれていないが、 S_D 相はキュービック相とも言われ分子がいくつか集まったミセルが立法晶を形成しているため一見すると等方相のようにも見える、しかし X 線を使うことによって等方相ではないことが分かる。

1・4 研究の背景

液晶は 19 世紀の末にオーストリアの植物学者とドイツの物理学者により、有機化合物の融解過程での中間相として確認された。液晶は液体の流動性と結晶の光学異方性をもつ異方性流体で、気体、液体、固体に並ぶ物質の第 4 の状態である。発見からしばらくの間は液晶の応用用途が見出されず、液晶の研究は一部の研究者によってわずかに続けられていた程度であった。しかし 1960 年代に入り液晶ディスプレイへの応用が提案され、液晶の研究は一気に盛んになった。

現在までに材料の合成、光学特性、電気特性等、液晶に関する様々な研究が行われているが、それら中で実際の製造を考えたとき重要になるのが流動の研究である。液晶は流動性を持つために液晶製品を作る過程ではほとんどの場合で流動が関係し、この製品プロセス中の流動に製品の性能が大きく依存する。すなわち、高品質な製品を作るために液晶の最適な流動方法が求められている。しかし液晶は局所的な分子の配向によって流動特性が

変化する異方性流体であるので、液晶の流動は通常の水や空気など（異方性流体に対して等方性流体と呼ぶ）の流動と比べ複雑である。故に、液晶の流動を正確に記述するためには流動と分子配向の両方を同時に解かなければならない。

現在、液晶の流動を表す理論としては Leslie-Ericksen の連続体理論⁽¹⁾（以下 L-E 理論）、土井理論⁽⁴⁾、Tsuji-Rey 理論⁽⁵⁾等がある。これらの液晶の流動を記述する理論の存在が液晶の工学的応用の隆盛を陰から支えたといっても過言ではない。しかしこれらは全てネマティック液晶のための理論で、分子の配置が異なるスメクティック液晶には適用できない。スメクティック液晶は層構造を形成するため分子配向の変化に加えて層の変化を考える必要がある。

スメクティック液晶、その中でもスメクティック C 液晶の流動を表す理論として、現在は Leslie らによって提案された理論⁽⁶⁾ ⁽⁷⁾がある。この理論は L-E 理論をスメクティック C 液晶のために拡張した理論で、層の向きを表す単位ベクトルを導入し、速度、分子配向、層の変化の 3 つを連立させている。しかし、あまりの複雑さに、この理論を実用した例は皆無である。

1・5 液晶ディスプレイ

液晶ディスプレイはガラス板を張り合わせたセルに液晶を封入し、セルに電圧をかけることで、液晶分子の向きを変え光の透過量を調節する。液晶分子は電場や磁場の変化に敏感に反応するため液晶ディスプレイの駆動に必要な電圧はブラウン管内蔵のディスプレイに比べ低く抑えることができ、液晶ディスプレイは省電力ディスプレイとして普及した。さらに液晶ディスプレイはブラウン管内蔵のディスプレイに対して圧倒的に薄く、小さく作ることができるので、当初は携帯型製品や、製品の動作表示用のインジケータに使われた。現在では注入技術の発達により小型の製品だけでなくテレビやディスプレイなどの大型の製品にも液晶ディスプレイが使われるようになっている⁽⁸⁾。

液晶ディスプレイをテレビやディスプレイに使うためにはどうしても動画を表示する必要がある。1 秒間に 30 フレームの動画を 500 × 500 の 25 万画素のディスプレイで表示しようとするると 1 画素当たり約 60 μs で順次走査する必要がある。しかし現在のネマティック液晶の応答速度は約 1 ms 程度ではるかに遅い。現在は画素数を減らすなどして対処しているが、それは同時に映像の美しさをも犠牲にしているため、根本的な対策として応答速度の速い液晶が求められている。本節では液晶ディスプレイについてネマティック液

晶を使った従来型の液晶ディスプレイと、近年注目されているスメクティック液晶を使った強誘電性液晶ディスプレイの仕組み、長所、短所を比較して説明する。

図 1-2 に従来型のネマティック液晶を使った液晶ディスプレイの断面図を示す。図中の上下のガラス板には偏光フィルムが貼ってあり、2枚のフィルムの偏光方向は直交しているため、セル内が空の状態では光はセルを透過できない。セルに液晶を封入すると、ガラス内側のラビング処理により液晶分子は上下の板表面で 90° ねじれた状態で固定され、その間の分子はなだらかな螺旋状に配置する(左図)。この場合液晶分子の螺旋構造によって光の振動方向が曲げられるので、光はセルの中を透過でき明視野が得られる。ここでセルに電場をかけるとガラス板表面を除く液晶分子は電界方向を向いてしまい、光の振動方向を変えることができないため光は透過せず、暗視野となる(右図)。

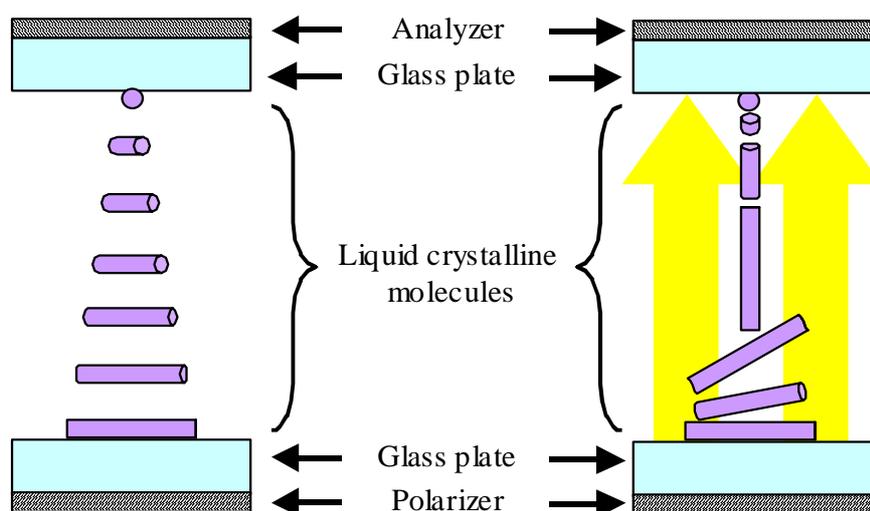


Fig 1-2. Liquid crystal display device

以上が TN(Twisted Nematic)型と呼ばれるネマティック液晶を使った液晶ディスプレイの基本的な構造で、他にも TN 型の上下板表面間での液晶分子のねじれを 180° 以上にした STN(Super Twisted Nematic)型がある。最近では薄膜トランジスタを搭載し分子の応答速度を向上させた TFT(Thin Film Transistor)型液晶ディスプレイが普及している。TFT 型液晶ディスプレイは各画素にトランジスタを取り付け分子の高速応答を実現した液晶ディスプレイで、膨大な数のトランジスタを必要とするためトランジスタが高価だった時代はコストがかかりそれほど普及はしなかった。しかし技術の進歩によりトランジスタを安価に

供給できるようになるとコストの問題が解決し TFT 型液晶ディスプレイは普及し始めた。TFT 型液晶ディスプレイが現在のネマティック液晶を使った液晶ディスプレイの中で最も優れている。

強誘電性液晶ディスプレイに使われている強誘電性液晶はスメクティック C 液晶の一種で、スメクティック C 液晶の中でも分子中の原子配置によって、電氣的に+と-が均一ではなく、分子が極性を有し分極が自発的に発生しているものを指す。分極が自発的に発生しているため強誘電性液晶は通常の液晶よりも電場・磁場の変化に敏感で、省消費電力化・高速応答に優れている。

図 1-3 は強誘電性液晶ディスプレイを正面から見た図を示している⁹⁾。図中の円柱は液晶分子を表しており、分子はガラス板に対して垂直に層を形成するように配置されている。強誘電性液晶分子には分極が存在し、液晶分子中の矢印記号はその方向を表す。分極の方向は電場方向に一致するので、電場を反転させることで、分極が反転し、液晶分子の向きも反転する。上下のガラス版には偏光方向が直行するように偏光フィルムが貼られており、右上の矢印の方向が偏光方向を表している。図中で電場が紙面手前向きで、液晶分子の長軸方向が偏光子の偏光方向（図中では P 方向）に一致するとき、入射光の振動方向は検光子の偏光方向（図中では A 方向）に直行するので、光は透過できず暗視野となる(a)。一方電場の向きが反転し、それに伴って液晶分子の向きが反転し、長軸方向が P 方向に一致しなくなれば、入射光は楕円偏光となり光が透過し明視野になる(b)。

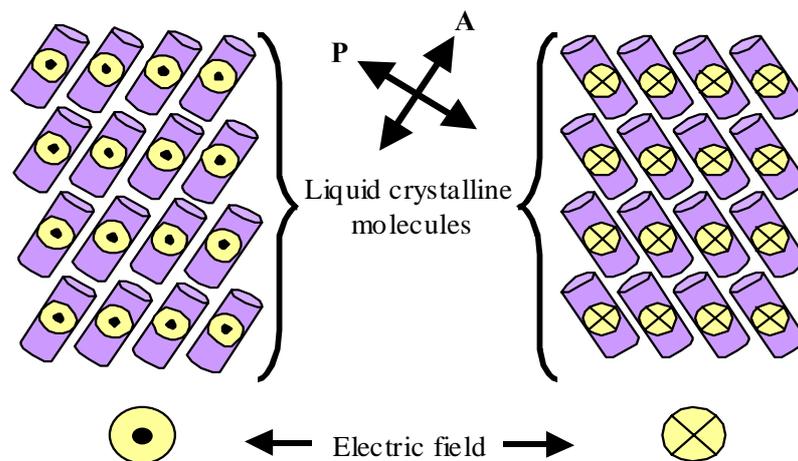


Fig 1-3. Ferroelectric liquid crystal display device

強誘電性液晶ディスプレイに類似して、他に反強誘電性液晶を使った反強誘電性液晶ディスプレイも考案されている。反強誘電性液晶ディスプレイは電場をかけていない場合の液晶分子の向きに変化があるだけで、原理的には強誘電性液晶ディスプレイと同じである。

最後に強誘電性液晶ディスプレイの長所と短所を挙げる、長所は先程述べたが高速応答、低消費電力、そして広視野角である。また、短所はディスプレイセルへ液晶を注入するのに時間がかかることである。強誘電性液晶ディスプレイは従来の液晶ディスプレイよりはるかに応答速度が速く次世代液晶ディスプレイとして今後の研究、開発が期待されている。

1・6 本論文の構成

本論文は全6章から構成されており、以降第2章ではまずスメクティックC液晶の局所座標系を説明し計算中で使用する物理量を紹介するとともに Leslie らの理論の基礎式を説明する。さらに本研究で用いた平行平板間流れの流れ構造と全体の座標系について説明する。第3章ではシミュレーションに用いた数値計算方法について説明する。また計算に用いた各パラメータについて説明する。第4章、第5章では第2章で説明した平板間における2種類の液晶の配置それぞれについて計算結果を示し、それらに対する考察を述べる。最後に第6章では結言である。

第2章 座標系と支配方程式

2・1 局所座標系

ネマティック液晶の連続体理論⁽¹⁾では局所の分子の平均配向方向を表すためにディレクタと呼ばれる単位ベクトル \mathbf{n} を導入している。スメクティック液晶の場合、分子が層を形成するので分子のディレクタ \mathbf{n} に加えて、層の向きを表す層法線単位ベクトル \mathbf{a} を導入する必要がある。これ以降これら2つのディレクタを区別するためにそれぞれ \mathbf{n} ディレクタ、 \mathbf{a} ディレクタと表記する。これら2本のディレクタを使うことで流動中における分子配向状態と、それに伴う層の向きを知ることが出来る。

図2-1では本研究で用いた局所座標系を示す。 \mathbf{a} と \mathbf{n} はそれぞれ層法線方向と局所での分子配向を表すディレクタである。図中で層法線は z 軸に一致しているため、層平面は x - y 平面に一致する。スメクティック C 液晶の場合、 \mathbf{n} は \mathbf{a} に対して角度 θ をとるため、 \mathbf{n} を層平面へ投影した単位ベクトル \mathbf{c} (\mathbf{c} ディレクタ) 定義すると便利である。 \mathbf{c} は層平面上のみを動き、 \mathbf{n} の方位を表す。この \mathbf{c} の x 軸からの平面角を ϕ とする。

Leslie らの理論⁽⁵⁾ではスメクティック C 液晶の分子配向と層の向きを表すために、 \mathbf{a} と \mathbf{n} のかわりに \mathbf{a} と \mathbf{c} を用いている。 \mathbf{a} と \mathbf{c} と \mathbf{n} の関係は以下の式で表される。

$$\mathbf{n} = \mathbf{a} \cos \theta + \mathbf{c} \sin \theta \quad (2-1)$$

また、 \mathbf{a} と \mathbf{c} の定義より以下の関係が成立する。

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{a} = \mathbf{c} \cdot \mathbf{c} = 1, \quad \mathbf{a} \cdot \mathbf{c} = 0 \quad (2-2)$$

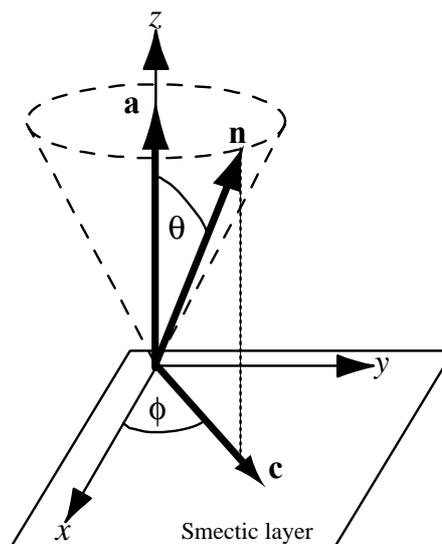


Fig 2-1 Local coordinate system for smectic C liquid crystal

Leslie は理論に簡略化のための 2 つの仮定を加えている . 一つは \mathbf{n} の傾き角 θ は一定であること . これによってディレクタは図 2-1 中の点線で描かれた円錐斜面のみを移動する . もう一つは , 層は膨張 , 圧縮しないとして , 層間隔は不変であるとしていることである . 2 つ目の仮定より以下の条件が導かれる .

$$\nabla \times \mathbf{a} = \mathbf{0} \quad (2-3)$$

2・2 基礎式

以下に本研究で用いた基礎式を示す .

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (2-4)$$

$$\rho \frac{D\mathbf{v}}{Dt} = \rho \mathbf{F} - \nabla(p+w) + \tilde{\mathbf{g}}^a \cdot \nabla \mathbf{a} + \tilde{\mathbf{g}}^c \cdot \nabla \mathbf{c} + \nabla \cdot \tilde{\mathbf{t}} \quad (2-5)$$

式(2-4) , (2-5)は連続の式と運動方程式である . ここで \mathbf{a} , \mathbf{c} は前節で定義した a ディレクタと c ディレクタ , \mathbf{v} は速度ベクトル , ρ は流体密度 , \mathbf{F} は外力 , D/Dt は実質微分 , p は圧力を , w は \mathbf{a} と \mathbf{c} の空間的ひずみによって発生する弾性エネルギー密度であり以下の式で表される .

$$\begin{aligned} w = & \frac{1}{2} K_1^a (\nabla \cdot \mathbf{a})^2 + \frac{1}{2} K_2^a \{ \mathbf{c} \cdot (\nabla \mathbf{a} \cdot \mathbf{c}) \}^2 + K_3^a \nabla \cdot \mathbf{a} \{ \mathbf{c} \cdot (\nabla \mathbf{a} \cdot \mathbf{c}) \} \\ & + \frac{1}{2} K_1^c (\nabla \cdot \mathbf{c})^2 + \frac{1}{2} K_2^c \nabla \mathbf{c} : \nabla \mathbf{c} + \frac{1}{2} K_3^c (\nabla \mathbf{c} \cdot \mathbf{c}) \cdot (\nabla \mathbf{c} \cdot \mathbf{c}) \\ & + K_4^c (\nabla \mathbf{c} \cdot \mathbf{c}) \cdot (\nabla \mathbf{c} \cdot \mathbf{a}) + K_1^{ac} \nabla \cdot \mathbf{c} \{ \mathbf{c} \cdot (\nabla \mathbf{a} \cdot \mathbf{c}) \} + K_2^{ac} \nabla \cdot \mathbf{c} \nabla \cdot \mathbf{a} \end{aligned} \quad (2-6)$$

式中の K_i^a ($i=1 \sim 3$) , K_j^c ($j=1 \sim 4$) , K_k^{ac} ($k=1, 2$) はスメクティック C 液晶の弾性定数を表す .

運動方程式(2-5)中の $\tilde{\mathbf{g}}^a$, $\tilde{\mathbf{g}}^c$ は以下の様に表される .

$$\tilde{\mathbf{g}}^a = -2(\lambda_1 \mathbf{D}^a + \lambda_3 \mathbf{c} \mathbf{c} \cdot \mathbf{D}^a + \lambda_4 \mathbf{A} + \lambda_6 \mathbf{c} \mathbf{c} \cdot \mathbf{A} + \tau_2 \mathbf{D}^c + \tau_3 \mathbf{c} \mathbf{a} \cdot \mathbf{D}^a + \tau_4 \mathbf{c} \mathbf{c} \cdot \mathbf{D}^c + \tau_5 \mathbf{C}) \quad (2-7)$$

$$\tilde{\mathbf{g}}^c = -2(\lambda_2 \mathbf{D}^c + \lambda_5 \mathbf{C} + \tau_1 \mathbf{D}^a + \tau_5 \mathbf{A}) \quad (2-8)$$

$$\mathbf{D}^a = \mathbf{D} \cdot \mathbf{a}, \quad \mathbf{D}^c = \mathbf{D} \cdot \mathbf{c} \quad (2-9a, b)$$

$$\mathbf{A} = \dot{\mathbf{a}} - \mathbf{W} \cdot \mathbf{a}, \quad \mathbf{C} = \dot{\mathbf{c}} - \mathbf{W} \cdot \mathbf{c} \quad (2-10a, b)$$

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2} \{ \nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T \} \quad (2-11)$$

$$\mathbf{W} = \frac{1}{2} \{ \nabla \mathbf{v} - (\nabla \mathbf{v})^T \} \quad (2-12)$$

\mathbf{A} , \mathbf{C} はそれぞれ \mathbf{a} , \mathbf{c} の相対角速度ベクトルを, \mathbf{D} , \mathbf{W} はそれぞれ変形速度テンソルと渦度テンソルである. また運動方程式中の $\tilde{\mathbf{t}}$ は応力テンソルを表し対称成分 $\tilde{\mathbf{t}}^s$ と反対称成分 $\tilde{\mathbf{t}}^a$ に分けられる.

$$\tilde{\mathbf{t}} = \tilde{\mathbf{t}}^s + \tilde{\mathbf{t}}^a \quad (2-13)$$

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{t}}^s = & \mu_0 \mathbf{D} + \mu_1 \mathbf{a} \cdot \mathbf{D}^a \mathbf{a} + \mu_2 \left\{ \mathbf{D}^a \mathbf{a} + (\mathbf{D}^a \mathbf{a})^T \right\} + \mu_3 \mathbf{c} \cdot \mathbf{D}^c \mathbf{c} \\ & + \mu_4 \left\{ \mathbf{D}^c \mathbf{c} + (\mathbf{D}^c \mathbf{c})^T \right\} + \mu_5 \mathbf{c} \cdot \mathbf{D}^a \left\{ \mathbf{a} \mathbf{c} + (\mathbf{a} \mathbf{c})^T \right\} \\ & + \lambda_1 \left\{ \mathbf{A} \mathbf{a} + (\mathbf{A} \mathbf{a})^T \right\} + \lambda_2 \left\{ \mathbf{C} \mathbf{c} + (\mathbf{C} \mathbf{c})^T \right\} + \lambda_3 \mathbf{c} \cdot \mathbf{A} \left\{ \mathbf{a} \mathbf{c} + (\mathbf{a} \mathbf{c})^T \right\} \\ & + \kappa_1 \left\{ \mathbf{D}^a \mathbf{c} + (\mathbf{D}^a \mathbf{c})^T + \mathbf{D}^c \mathbf{a} + (\mathbf{D}^c \mathbf{a})^T \right\} \\ & + \kappa_2 \left[\mathbf{a} \cdot \mathbf{D}^a \left\{ \mathbf{a} \mathbf{c} + (\mathbf{a} \mathbf{c})^T \right\} + 2 \mathbf{a} \cdot \mathbf{D}^c \mathbf{a} \mathbf{a} \right] \\ & + \kappa_3 \left[\mathbf{c} \cdot \mathbf{D}^c \left\{ \mathbf{a} \mathbf{c} + (\mathbf{a} \mathbf{c})^T \right\} + 2 \mathbf{a} \cdot \mathbf{D}^c \mathbf{c} \mathbf{c} \right] \\ & + \tau_1 \left\{ \mathbf{C} \mathbf{a} + (\mathbf{C} \mathbf{a})^T \right\} + \tau_2 \left\{ \mathbf{A} \mathbf{c} + (\mathbf{A} \mathbf{c})^T \right\} + 2 \tau_3 \mathbf{c} \cdot \mathbf{A} \mathbf{a} \mathbf{a} + 2 \tau_4 \mathbf{c} \cdot \mathbf{A} \mathbf{c} \mathbf{c} \end{aligned} \quad (2-14)$$

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{t}}^a = & \lambda_1 \left\{ (\mathbf{D}^a \mathbf{a})^T - \mathbf{D}^a \mathbf{a} \right\} + \lambda_2 \left\{ (\mathbf{D}^c \mathbf{c})^T - \mathbf{D}^c \mathbf{c} \right\} + \lambda_3 \mathbf{c} \cdot \mathbf{D}^a \left\{ \mathbf{a} \mathbf{c} - (\mathbf{a} \mathbf{c})^T \right\} \\ & + \lambda_4 \left\{ (\mathbf{A} \mathbf{a})^T - \mathbf{A} \mathbf{a} \right\} + \lambda_5 \left\{ (\mathbf{C} \mathbf{c})^T - \mathbf{C} \mathbf{c} \right\} + \lambda_6 \mathbf{c} \cdot \mathbf{A} \left\{ \mathbf{a} \mathbf{c} - (\mathbf{a} \mathbf{c})^T \right\} \\ & + \tau_1 \left\{ (\mathbf{D}^a \mathbf{c})^T - \mathbf{D}^a \mathbf{c} \right\} + \tau_2 \left\{ (\mathbf{D}^c \mathbf{a})^T - \mathbf{D}^c \mathbf{a} \right\} + \tau_3 \mathbf{a} \cdot \mathbf{D}^a \left\{ \mathbf{a} \mathbf{c} - (\mathbf{a} \mathbf{c})^T \right\} \\ & + \tau_4 \mathbf{c} \cdot \mathbf{D}^c \left\{ \mathbf{a} \mathbf{c} - (\mathbf{a} \mathbf{c})^T \right\} + \tau_5 \left\{ (\mathbf{A} \mathbf{c})^T - \mathbf{A} \mathbf{c} + (\mathbf{C} \mathbf{a})^T - \mathbf{C} \mathbf{a} \right\} \end{aligned} \quad (2-15)$$

式(2-7), (2-8), (2-14), (2-15)に含まれる $\lambda_i (i=1 \sim 6)$, $\mu_j (j=0 \sim 5)$, $\kappa_k (k=1 \sim 3)$, $\tau_l (l=1 \sim 5)$ はスメクティック C 液晶の粘性係数を表す.

液晶は分子の配向と流れが相互作用をもつ異方性流体であるため, 連続の式と運動方程式中の \mathbf{a} と \mathbf{c} は未知変数として取り扱う必要がある. そこで, \mathbf{a} と \mathbf{c} に関する角運動方程式が必要である.

$$\nabla \cdot \left(\frac{\partial w}{\partial \nabla \mathbf{a}} \right) - \frac{\partial w}{\partial \mathbf{a}} + \tilde{\mathbf{g}}^a + \gamma \mathbf{a} + \mu \mathbf{c} + \nabla \times \boldsymbol{\beta} = \mathbf{0} \quad (2-16)$$

$$\nabla \cdot \left(\frac{\partial w}{\partial \nabla \mathbf{c}} \right) - \frac{\partial w}{\partial \mathbf{c}} + \tilde{\mathbf{g}}^c + \mu \mathbf{a} + \tau \mathbf{c} = \mathbf{0} \quad (2-17)$$

ネマティック液晶の連続体理論では分子配向は \mathbf{n} のみで表すことができたので, 角運動方程式は1つであった. しかしスメクティック液晶では分子の向き (\mathbf{c} ディレクタ) のみならず層の方向 (\mathbf{a} ディレクタ) についても考えなければならず, それぞれについての角運動量保存則が必要となり角運動方程式は2つになる. 角運動方程式中の μ , τ , 及び $\boldsymbol{\beta}$ は式(2-2),

(2-3)を用いて決定されるラグランジュの未定乗数である。

2・3 流れ領域

本研究では平行平板間せん断流れを取り扱う。この流れは 2 枚の平板の間に流体をはさみ、平板に速度を与えることで流体に流動が生じる。平行平板間せん断流れは流体力学における基本的な流れの 1 つである。

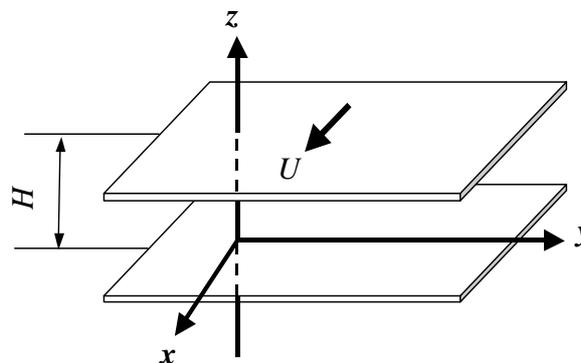


Fig 2-2. Flow geometry and coordinate system

図 2-2 に本研究で取り扱う平行平板間せん断流れの流れ領域及び座標系を示す。デカルト座標系中に x - y 平面に平行な板を間隔 H で配置する。すなわち下部平板は $z = 0$ 、上部平板は $z = H$ に位置し、その間は液晶で満たされているとする。上部平板 x 方向に速度 U を与えることによって液晶に流動を発生させた場合の速度分布、配向分布を調べる。無限に広い平板を考えた場合、速度、配向ともに x および y 方向に変化しないため、 z 方向のみの一次元数値シミュレーションを行った。

2・4 スメクティック層の配置

スメクティック C 液晶は層構造を有するため図 2-2 に示すような平行平板間に液晶を満たす場合、層法線の向きは図 2-3 に示す 3 つの基本配置が考えられる。Case1 では層は x - y 平面に平行、Case2 では z - x 平面に平行 Case3 では y - z 平面に平行となる。本研究では、スメクティック層を座標系の各座標軸方向に向け図 2-3 のケース 1 ~ 3 の 3 つの基本配置それぞれについて考える。ただしいずれの場合においても図 2-2 に示すように上板に与える速度の方

向は x 方向とする。

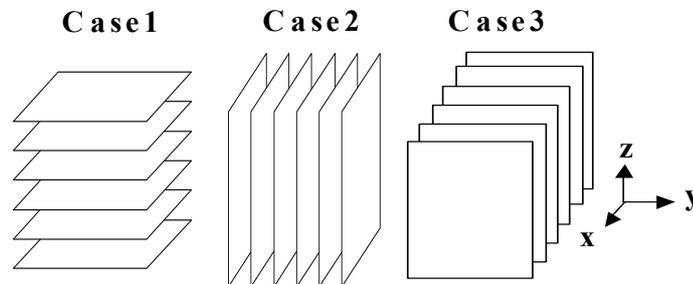


Fig 2-3. Three types of the layer formation between parallel plates

Leslie らによる方法⁽¹⁰⁾では層の間隔を変える変形は起こらないと仮定している。実際、層の圧縮弾性エネルギーは他の配向歪みエネルギーに比して極めて大きい。 x - z 平面においてせん断流を与えた場合、Case3 では層間隔の変化無しに流動が生じることが不可能であり、スメクティック液晶材料は固体的にふるまうことが予測される。Case1 および Case2 の場合、 x - z 平面のせん断に対して層法線の変化は生じない。

層法線を表すディレクタ \mathbf{a} を固定して、層平面を回転する \mathbf{c} の方向で \mathbf{n} の方向を決定しているので \mathbf{n} が作る軌跡は図 2-1 で示したような \mathbf{n} の始点を頂点とした円錐の斜面になる。Case1, Case2 では層間隔を変えることなく流動が発生することが出来る。しかし Case3 では層間隔を変えるような変形をしなければ流動が生じず Leslie らの仮定との矛盾が生じる。本研究では Case3 を除いた Case1 と Case2 についてシミュレーションを行った。

2・5 Planar 配置

図 2-4 の Case1 では図 2-5 のように層を z 方向に向けて平板内に配置する．この配置を Planar 配置と呼び，その局所座標系を図 2-6 に示す．

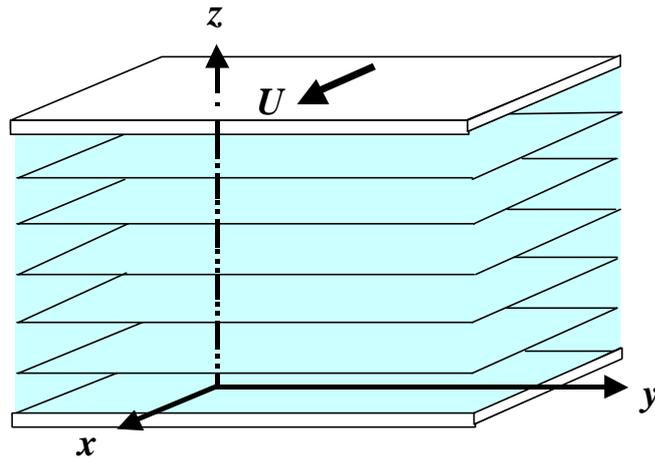


Fig 2-5. Planar arrangement

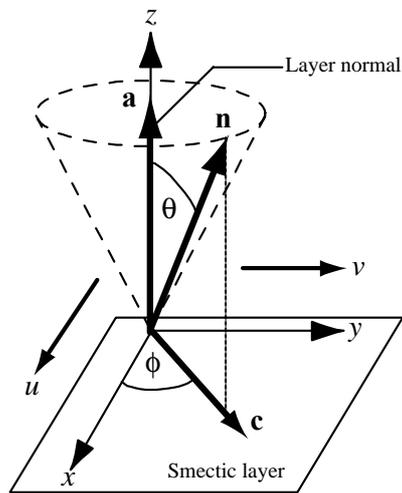


Fig 2-6. Local coordinate system for the Planar arrangement

Planar 配置での \mathbf{a} , \mathbf{c} , \mathbf{v} の各成分を以下に示す．

$$\mathbf{a} = [0, 0, 1], \quad \mathbf{c} = [\cos \phi(z), \sin \phi(z), 0], \quad \mathbf{v} = [u(z), v(z), 0] \quad (2-18a, b, c)$$

先に述べたように層は変形しないため a は z 方向に一定である。 ϕ は c と x 軸の間の回転角である。 u は x 方向速度, v は y 方向速度を表す。

式(2-5), (2-16), (2-17)の基礎式を用いて, ϕ, u, v についての数値シミュレーションを行う。Planar 配置の計算結果については4章で述べる。

2・6 Bookshelf 配置

図 2-4 の Case2 では図 2-7 のように層を y 方向に向けて平板間に配置する。この配置を Bookshelf 配置と呼び, この場合の局所座標系を図 2-8 に示す。

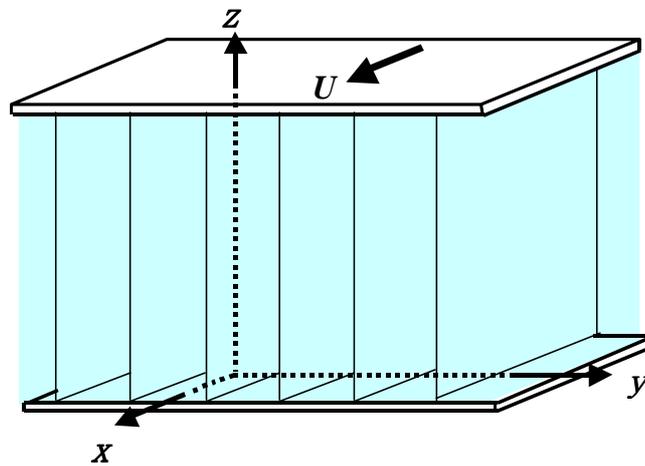


Fig 2-7. Bookshelf configuration

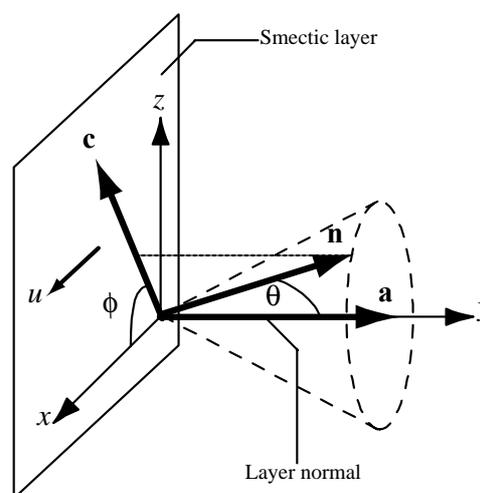


Fig 2-8. Local coordinate system for the Bookshelf arrangement

Bookshelf 配置での \mathbf{a} , \mathbf{c} , \mathbf{v} の各成分を以下に示す .

$$\mathbf{a} = [0, 1, 0], \quad \mathbf{c} = [\cos \phi(z), 0, \sin \phi(z)], \quad \mathbf{v} = [u(z), 0, 0] \quad (2-19a, b, c)$$

Planar 配置と同様に層は変化しないため \mathbf{a} は y 方向に一定であり, ϕ は Planar 配置と同様に \mathbf{c} と x 軸の間の回転角である . u は x 方向速度である . Planar 配置では v を y 方向速度としたが, Bookshelf 配置の場合層間隔不変の下では y 方向速度は発生しない .

式(2-5), (2-16), (2-17)の基礎式を用いて, ϕ, u, v についての数値シミュレーションを行う . Bookshelf 配置の計算結果については 5 章で述べる .

2・7 無次元化と無次元数

基礎式を ϕ, u, v について展開した後, 式中の物理量をそれぞれの代表物理量で無次元化する . 表 2 は無次元化に用いた各物理量を挙げる . 代表長さとして平板の間隔 H , 代表速度として上板に与える速度 U , 代表粘性係数として Planar 配置の場合は η_1 と η_5 から求められる η_0 を, Bookshelf の場合 η_5 を, 代表弾性定数として K_2^c をそれぞれ用いた .

Table 2. Reference physical constants for non-dimensionalize operation

	Planar	Bookshelf
Reference length	H	H
Reference velocity	U	U
Reference viscosity coefficient	η_0	$2\lambda_5$
Reference elastic constant	K_2^c	K_2^c

$$\eta_0 = \tau_5 - \tau_1$$

各代表物理量を用いて以下のように有次元量を無次元化する .

$$z^* = \frac{z}{H}, \quad u^* = \frac{u}{U}, \quad t^* = \frac{U}{H} t, \quad \mu^* = \frac{\mu}{\eta_0}, \quad K^* = \frac{K}{K_2^c} \quad (2-20a, b, c, d, e)$$

全ての物理量を無次元化した後, 式の中に 2 つの無次元量が現れる .

$$\text{Re} = \frac{\rho H U}{\eta_0} \quad (2-21)$$

$$\text{Er} = \frac{\eta_0 HU}{K_2^c} \quad (2-22)$$

無次元数 Re はレイノルズ数であり，慣性力と粘性力の比を表し，無次元数 Er はエリクセン数であり，粘性力と弾性力の比を表す．これらの無次元数を計算パラメータとし数値シミュレーションを行う．

第3章 数値計算

3・1 差分法

無次元化した基礎式を空間方向，時間方向に離散化し，空間方向には2次の中心差分，時間方向には4次のルンゲ・クッタ法を用いて計算を行った。

差分法とは連続した領域を差分格子に分割し，離散化し各格子点における各変数の微分を差分で近似する方法である．差分法についての説明を以下で行う．

空間に依存したある関数 $f(z)$ を考え，テーラー展開の2次の項までを考える．

$$f(z+\Delta z) = f(z) + \frac{df(z)}{dz} \Delta z + \frac{1}{2} \frac{d^2 f(z)}{dz^2} \Delta z^2 \quad (3-1)$$

$$f(z-\Delta z) = f(z) - \frac{df(z)}{dz} \Delta z + \frac{1}{2} \frac{d^2 f(z)}{dz^2} \Delta z^2 \quad (3-2)$$

式(3-1)，(3-2)より以下の2式が導き出される．

$$\frac{df(z)}{dz} = \frac{f(z+\Delta z) - f(z-\Delta z)}{2\Delta z} \quad (3-3)$$

$$\frac{d^2 f(z)}{dz^2} = \frac{f(z+\Delta z) + f(z-\Delta z) - 2f(z)}{\Delta z^2} \quad (3-4)$$

式(3-3)，(3-4)を用いることで，ある点での微分係数をその点自身と近傍の点の値から求めることができる．従って本研究で用いた2次の中心差分は以下の図のように刻み Δz で離散化された関数の i 番目の点の値を $i-1$ 番目， i 番目， $i+1$ 番目の3点の値で近似することである．そしてこの関数の刻み幅を細かくするほど計算の精度が上がる．

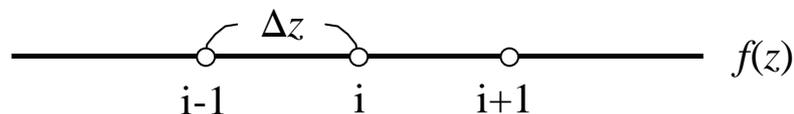


Fig 3-1. One-dimensional concept of finite difference method

3・2 ルンゲ・クッタ法

ルンゲ・クッタ法は微分方程式を数値的に解く方法の1つで、ある点において、既知量と傾きから次の値を計算する陽解法の1つである。ルンゲ・クッタ法の他にも陽解法にはオイラー法やホイン法がある。

4次のルンゲ・クッタ法は連続な関数を Δt の刻みで離散化し各点ごとに計算を進めていく方法であり、各点の計算は4段階のステップで行われる。

$$\frac{df(t, z)}{dt} = g(t, f(t, z)) \quad (3-5)$$

時間 t と関数 $f(t, z)$ を用いて、 $f(t, z)$ の t についての変化量が式(3-5)のように求められるとき、ある時刻 t_n での値 $f(t, z)_n$ を用いて Δt 時間が進んだ時刻 t_{n+1} での値 $f(t, z)_{n+1}$ は以下のように求めることができる。

$$g_1 = g(t_n, f(t, z)_n) \quad (3-6a)$$

$$g_2 = g\left(t_n + \frac{1}{2}\Delta t, f(t, z)_n + \frac{1}{2}g_1\Delta t\right) \quad (3-6b)$$

$$g_3 = g\left(t_n + \frac{1}{2}\Delta t, f(t, z)_n + \frac{1}{2}g_2\Delta t\right) \quad (3-6c)$$

$$g_4 = g(t_n + \Delta t, f(t, z)_n + g_3\Delta t) \quad (3-6d)$$

$$f(t, z)_{n+1} = f(t, z)_n + \frac{1}{6}g_1\Delta t + \frac{1}{3}g_2\Delta t + \frac{1}{3}g_3\Delta t + \frac{1}{6}g_4\Delta t \quad (3-6e)$$

本研究では時間刻みを Δt として4次のルンゲ・クッタ法を用いて時間積分を行った。

3・3 物性値

数値シミュレーションを行うに当たって、2章で示した運動方程式、角運動方程式中の各物性値に値を代入しなければならない。式に使用されている物性値には密度、粘性係数、弾性定数があり、実際、それらは温度の関数であるが、本研究では系の温度は一定にしているため、各物性値は一定である。

Leslieらの理論中では粘性係数が20個、弾性定数が9個使われている。これはネマティック液晶の連続体理論では粘性係数が6個、弾性定数が3個しか使われていないのに比べてはるかに多く、その測定は困難を極める。

基礎式中の各物性値の内、粘性係数についてはOsipovら⁽¹¹⁾が平均場に基づいて各粘性係

数について以下に示す理論式を提案した .

$$\mu_0 = \frac{1}{35} \rho \lambda \frac{p^2 - 1}{p^2 + 1} (7 - 5S - 2\langle P_4 \rangle) \quad (3-7a)$$

$$\mu_1 = \alpha_1 \frac{p^2 - 1}{p^2 + 1} \cos^3 \Theta \quad (3-7b)$$

$$\mu_2 = \alpha_0 \frac{p^2 - 1}{p^2 + 1} \cos^2 \Theta \quad (3-7c)$$

$$\mu_3 = \alpha_1 \frac{p^2 - 1}{p^2 + 1} \sin^4 \Theta \quad (3-7d)$$

$$\mu_4 = \alpha_0 \frac{p^2 - 1}{p^2 + 1} \sin^2 \Theta \quad (3-7e)$$

$$\mu_5 = \frac{1}{2} \alpha_1 \frac{p^2 - 1}{p^2 + 1} \sin^2 2\Theta \quad (3-7f)$$

$$\lambda_1 = \frac{1}{2} \gamma_0 \cos^2 \Theta \quad (3-7g)$$

$$\lambda_2 = \frac{1}{2} \gamma_0 \sin^2 \Theta \quad (3-7h)$$

$$\lambda_3 = 0 \quad (3-7i)$$

$$\lambda_4 = \lambda_0 \cos^2 \Theta \quad (3-7j)$$

$$\lambda_5 = \lambda_0 \sin^2 \Theta \quad (3-7k)$$

$$\lambda_6 = 0 \quad (3-7l)$$

$$\kappa_1 = \alpha_0 \frac{p^2 - 1}{p^2 + 1} \sin \Theta \cos \Theta \quad (3-7m)$$

$$\kappa_2 = \alpha_1 \frac{p^2 - 1}{p^2 + 1} \sin \Theta \cos^3 \Theta \quad (3-7n)$$

$$\kappa_3 = \alpha_1 \frac{p^2 - 1}{p^2 + 1} \sin^3 \Theta \cos \Theta \quad (3-7o)$$

$$\tau_1 = \frac{1}{4} \gamma_0 \sin 2\Theta \quad (3-7p)$$

$$\tau_2 = \frac{1}{4} \gamma_0 \sin 2\Theta \quad (3-7q)$$

$$\tau_3 = 0 \quad (3-7r)$$

$$\tau_4 = 0 \quad (3-7s)$$

$$\tau_5 = \frac{1}{2} \lambda_0 \sin 2\Theta \quad (3-7t)$$

幾つかの粘性係数の値がゼロになっているがこれは Osipov らが、液晶分子が 1 軸性であると仮定しているため、2 軸パラメータに比例している係数はゼロになるためである。また、式(3-7a~t)中の α_0 、 α_1 、 γ_0 、 λ_0 は以下に表される。

$$\alpha_0 = \frac{1}{14} \rho \lambda (3S + 4\langle P_4 \rangle) \quad (3-8a)$$

$$\alpha_1 = -\rho \lambda \langle P_4 \rangle \quad (3-8b)$$

$$\gamma_0 = -\rho \lambda S \quad (3-8c)$$

$$\lambda_0 = \frac{1}{70} \rho \lambda S^2 (7 + 5S - 12\langle P_4 \rangle) \frac{(4.451T_c/T)^2}{2 + 4.451T_c S/T} \quad (3-8d)$$

式(3-7a~t)、(3-8a~d)中で ρ は流体密度、 λ は物質に依存する定数、 S はオーダーパラメータ、 $\langle P_4 \rangle$ はルジャンドルの 4 次多項式の調和平均、 p は分子のアスペクト比、 Θ は層法線ベクトルからのディレクタの傾き角、 T は絶対温度、 T_c はネマティック相から等方相への相転移温度を表す。

本研究では T_c 、 T 、 Θ の値は (*N,N'*-terephthalylidene bis (4-butylaniline)) (以下 TBBA) の値を用いた。については水の密度を用いた。の値は不明であるが、式(2-20d)の無次元化の結果、基礎式中に陽には現れない。粘性係数を求めるために用いた各パラメータの値を表 3-1 に示す。

Table 3-1 Parameters for calculations of viscosity coefficients

ρ	p	S	$\langle P_4 \rangle$	T_c	T	Θ
10^3 kg/m^3	20	0.9	0.5	509K	423K	25°

Planar 配置の計算では、各粘性係数はこれらのパラメータを用いて式(3-7a~t) , (3-8a~d)から導かれる。また Bookshelf 配置の計算では、一部の粘性係数を表 3-2 に示す Leslie らによって提案されたもの⁽¹²⁾と置き換えて計算を行う。

Table 3-2 Viscosity coefficients for the Bookshelf arrangement

μ_0	μ_4	λ_2	λ_5
0.2Pa s	0.03Pa s	-0.12Pa s	0.1Pa s

弾性定数については粘性係数のような理論式は無く、Planar 配置では弾性定数は全て参考文献⁽¹³⁾よりネマティック液晶と同程度の 10^{-12} N を用いて計算を行った。Bookshelf 配置では Leslie らによって提案された表 3-3 に示す値を用いた。

Table 3-3 Elastic constants for the Bookshelf arrangement

K_1^c	K_2^c	K_3^c
10^{-11} N	10^{-11} N	10^{-11} N

第4章 計算結果及び考察 ~ Planar 配置 ~

4・1 計算結果1

流動が存在しない場合，液晶セル中のディレクタの配向分布はアンカリング角と呼ばれる壁面配向角によって決定される．壁面配向角はラビング処理と呼ばれる壁面処理法によってコントロールされる．すなわち，上下平板上のアンカリング角が同じであればセル内部のディレクタの配向角もアンカリング角と同じ値となる．また，上下平板上のアンカリング角が異なる場合，セル内部のディレクタの配向角は上下のアンカリング角を滑らかにつなぐ分布となる．

まず平板間全体で c ディレクタの回転角 ϕ を初期状態において $\phi = 90^\circ$ として計算した場合の ϕ, u, v の分布を示す．このとき上下の平板では各変数は固定とした．初期状態でのディレクタ \mathbf{n} の配置を図 4-1 に示す． \mathbf{n} の層法線からの傾き角 θ は一定であるため， \mathbf{n} の先端が移動する軌道は図中の円錐の点線で示された部分である．

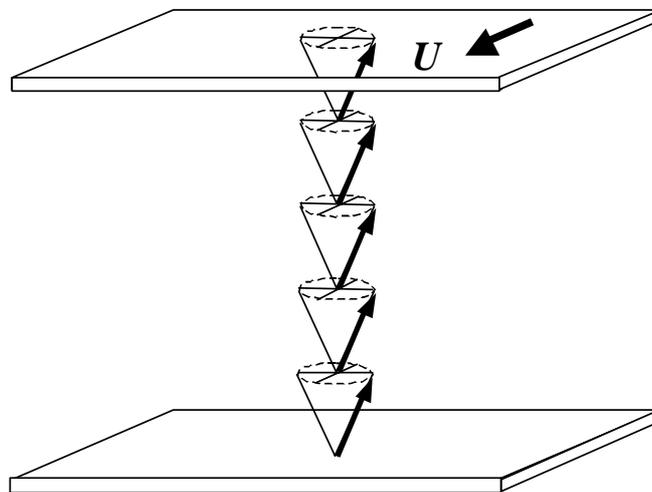


Fig 4-1. Initial director configuration for the Planar arrangement

図 4-2(a), (b), (c) は $Er = 100$ としたときのそれぞれ ϕ, u, v の分布である．横軸は平板間位置を表し， $z^* = 0$ で下部平板， $z^* = 1.0$ で上部平板である．時間の経過に伴い ϕ の分布では平板の影響を受けない平板間中央部でディレクタが流れ方向 ($\phi = 0^\circ$) に近づいてい

るのが分かる。 u はほとんど変化せず下部平板から上部平板まで直線的な分布となっている。 y 方向速度を表す v は ϕ の分布の空間変化が大きい位置で正または負の値を生じている。また ϕ の時間変化が大きいほど v は大きくなり、 $t^* = 0.7$ 付近で最大となっている。 $t^* = 6.0$ 以降では ϕ 、 u 、 v とともに定常値に至っている。

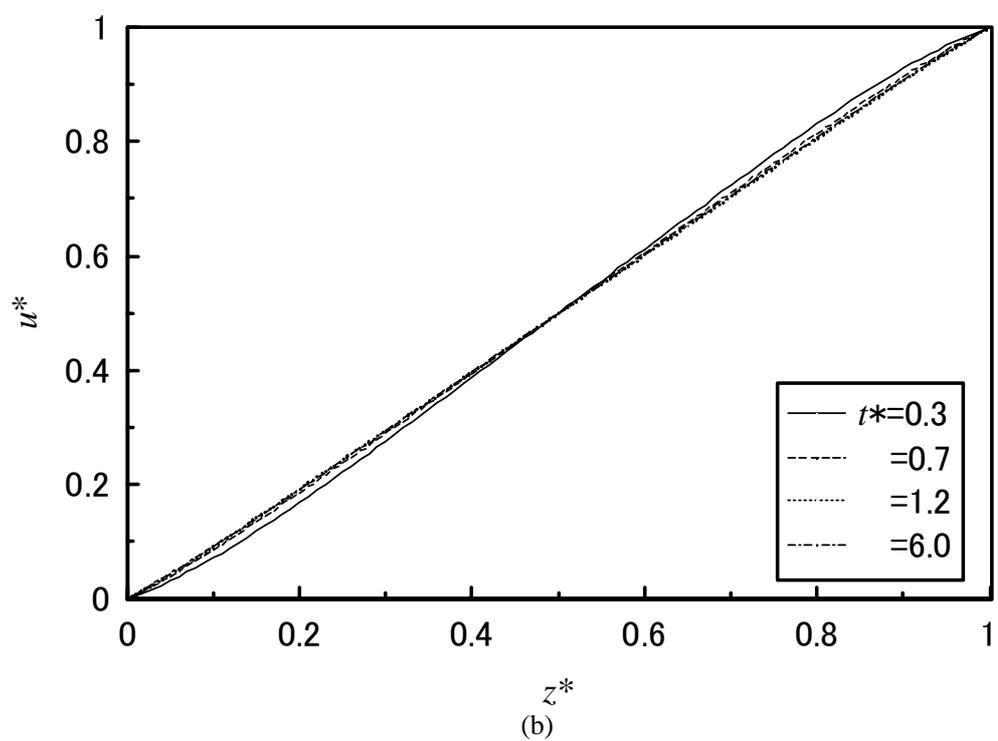
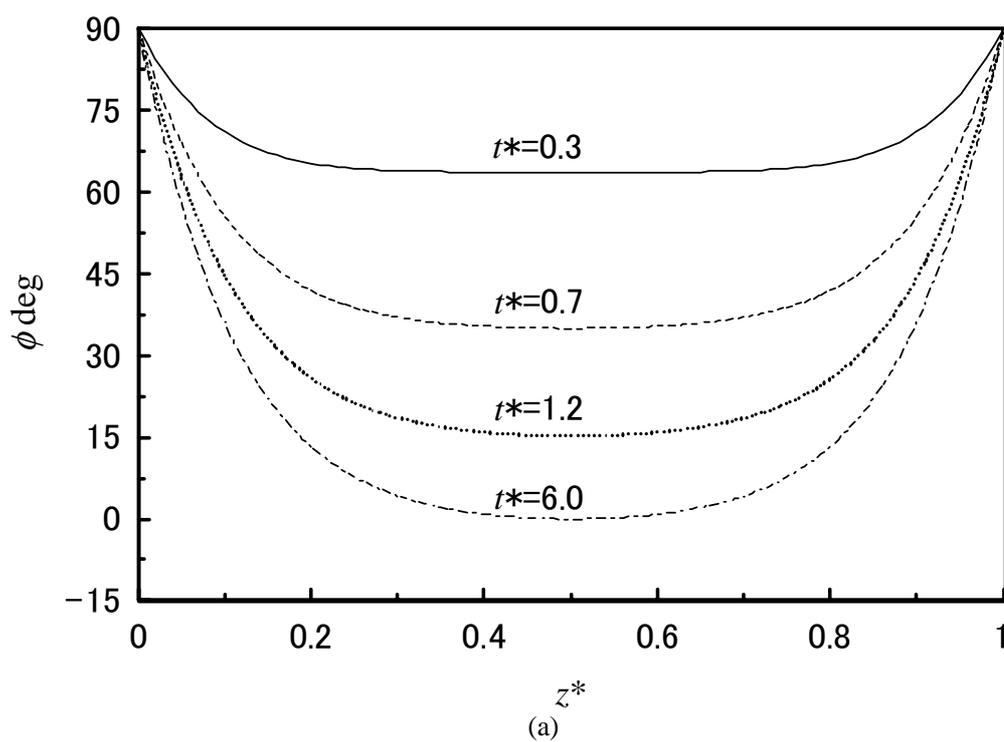
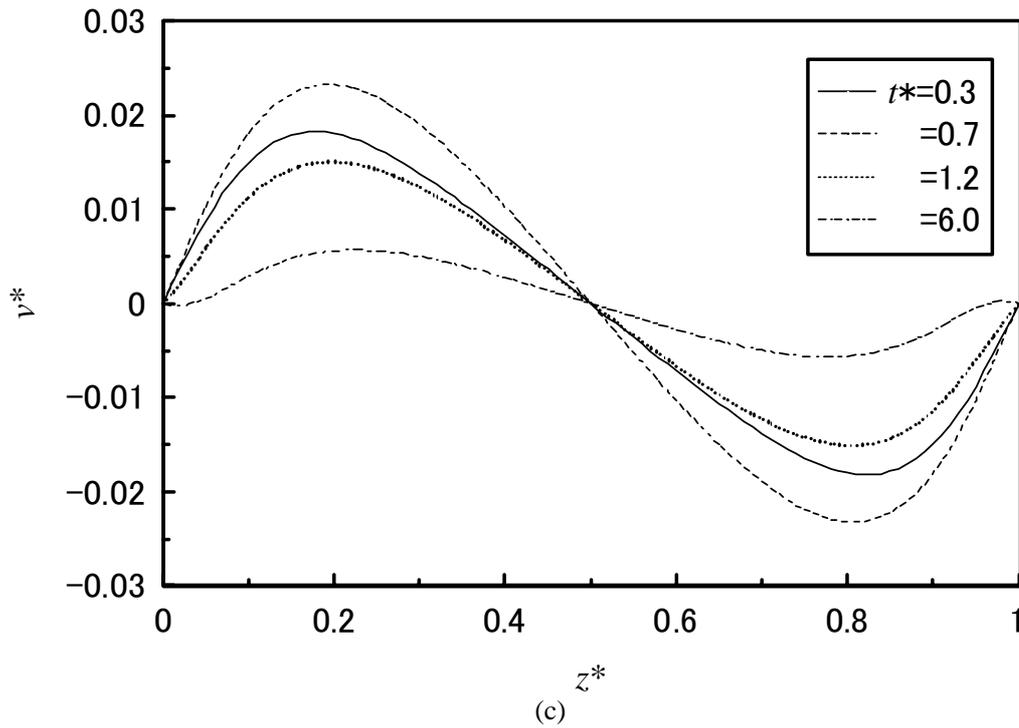


Fig 4-2(a),(b),(c). Director and velocity profiles at $Er=100$

図 4-2(c)は次項 .



次に $Er = 1000$ の場合の ϕ, u, v の結果を図 4-3(a), (b), (c) に示す。エリクセン数の定義より、 $Er = 1000$ は $Er = 100$ と比べて 10 倍の U を与えたと考えてよい。図 4-3(a) より、平板中心付近の ϕ の平坦部が、図 4-2(a) に比べ、明らかに広がっているのが分かる。これは Er の増加にともなって、ディレクタを流れ方向へ向けようとする粘性の効果が増したためであると考えられる。 u, v のグラフでは先程と比べ目立った違いは見られない。また、先程と同様に $t^* = 6.0$ 以降では u, v は変化していない。

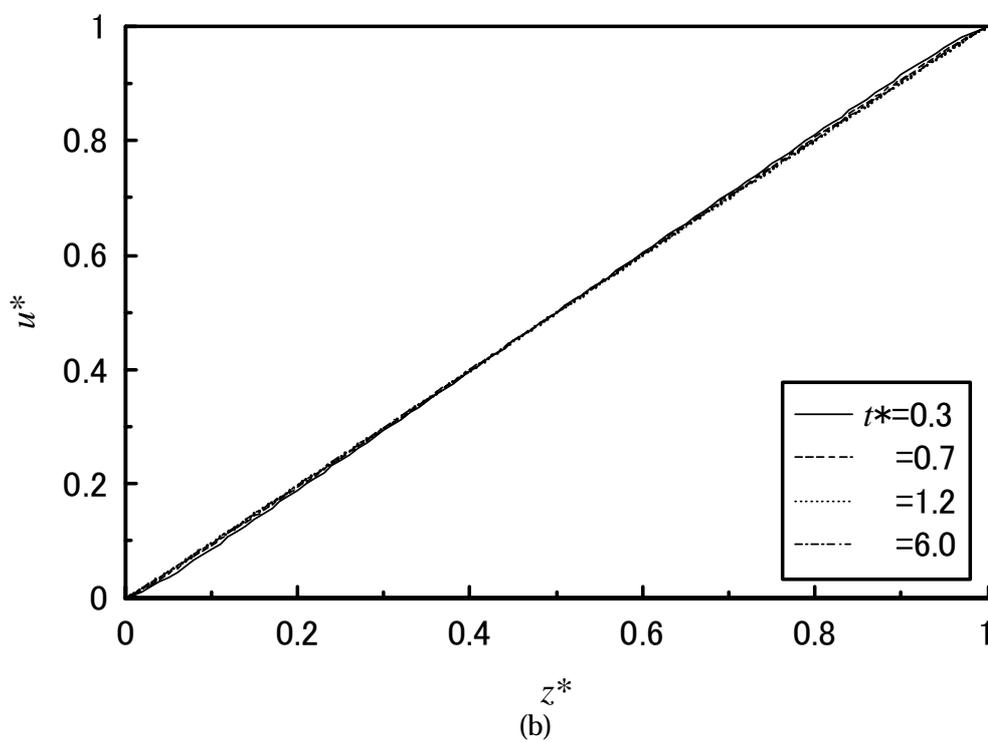
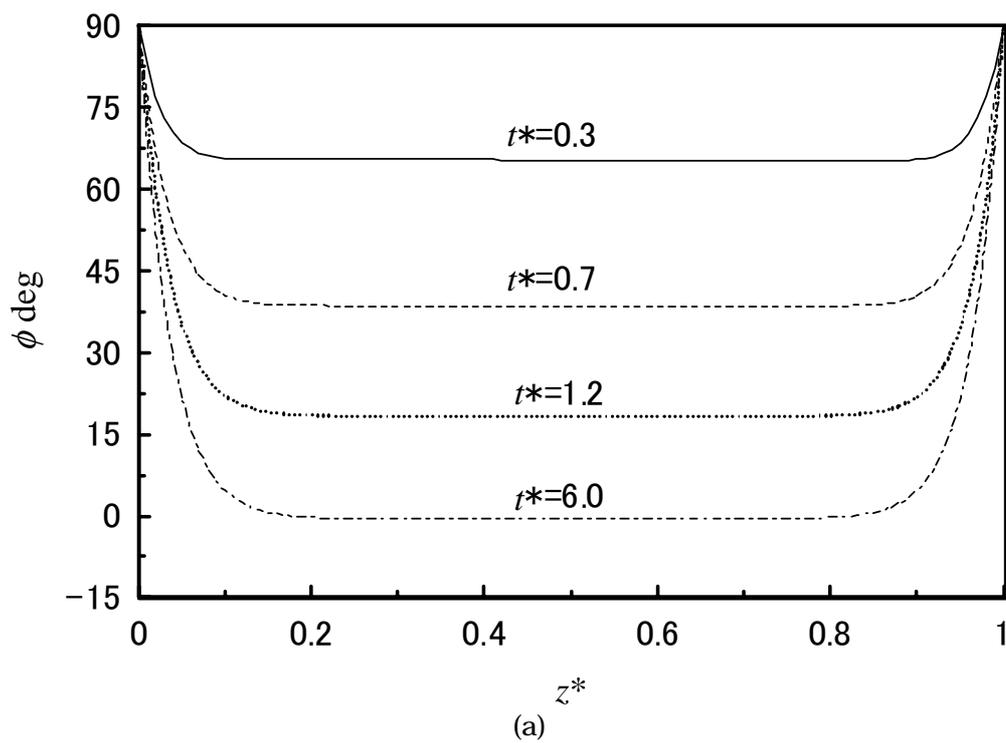


Fig 4-3(a), (b), (c). Director and velocity profiles $Er=1000$

図 4-3(c)は次項 .

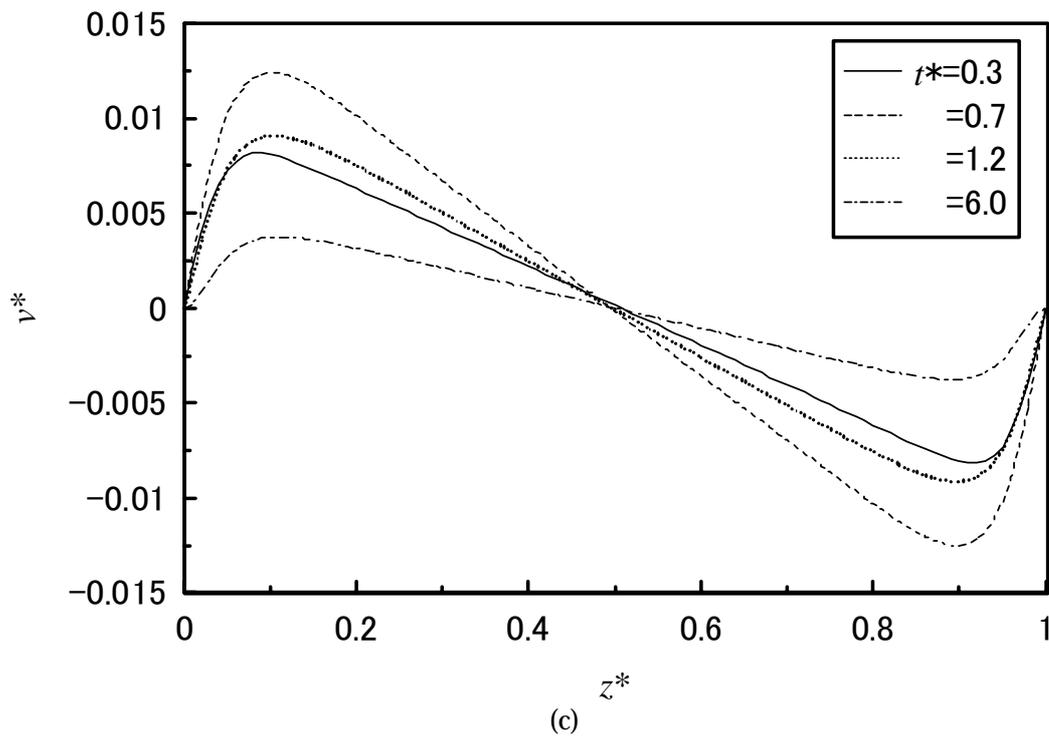


図 4-2(a) , 4-3(a)より壁面近傍を除いて ϕ が時間とともに $\phi = 0^\circ$ に近づいているのが分かる．即ち Planar 配置の場合 , 粘性による c の安定角は流れ方向に一致する (ここでは $\phi = 0^\circ$) と考えられる . また , エリクセン数の増加は弾性の効果の低下をもたらし , c の向きが 0° 付近に達する領域の拡張につながる .

図 4-2(b) , 4-3(b)は x 方向速度 u を表しているがどちらも下部平板から上部平板へ直線的に増加する .

4・2 計算結果2

前節で Planar 配置では c の角度 $\phi = 0^\circ$ のときディレクタが安定であることを明らかにした。従って、逆向きの $\phi = 180^\circ$ が 準安定角と考えられる。

そこでアンカリング角を $\phi = 180^\circ$ として計算を行い c ディレクタが安定角へと移行する過程を調べた。速度の境界値は前節と同様，下部平板で $u = 0, v = 0$ ，上部平板で $u = U, v = 0$ である。初期状態におけるディレクタ \mathbf{n} の配置の模式図を図 4-4 に示す。しかし，この場合にはセル中の c ディレクタ配向角の初期値はアンカリングより， $\phi = 180^\circ$ である。 ϕ は初期状態から変化しなかった。そこで， ϕ の初期値に微小摂動を与えた。

図 4-5(a), (b), (c) に $Er = 50$ としたときの ϕ, u, v の分布を示す。横軸は平板間位置であり， $z^* = 0$ で下部平板， $z^* = 1.0$ で上部平板に一致する。時間の経過と共に は平板間中央部が流れ方向 ($\phi = 360^\circ = 0^\circ$) に近づく。ここで が 0° と 360° のどちらの配向角に至るかは初期条件の微小摂動に依存する。図 4-5(b) に示す u の分布は直線分布から変化しない。図 4-5(c) に示す v の分布より y 方向速度は平板間で中心に関して反対称分布を示す。

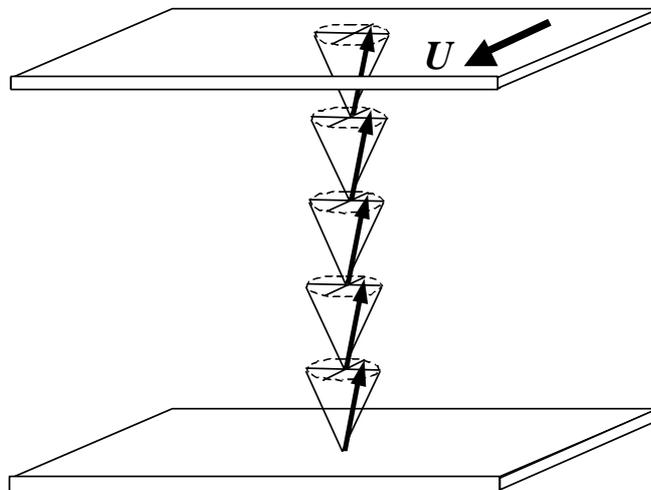


Fig 4-4. Initial director configuration for the Planar arrangement

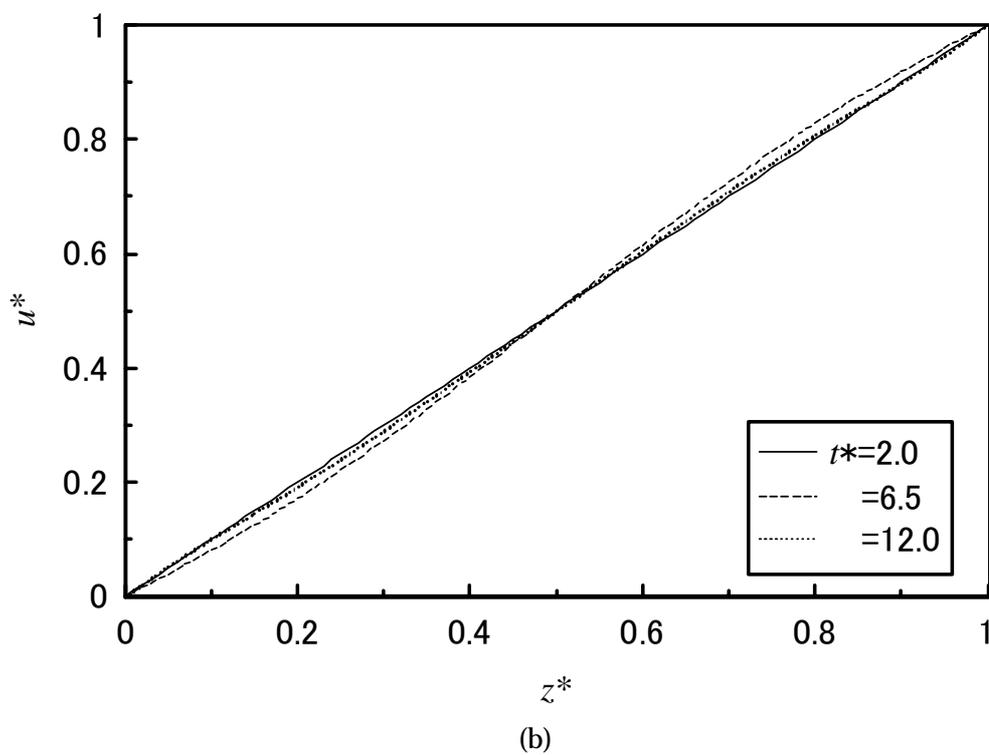
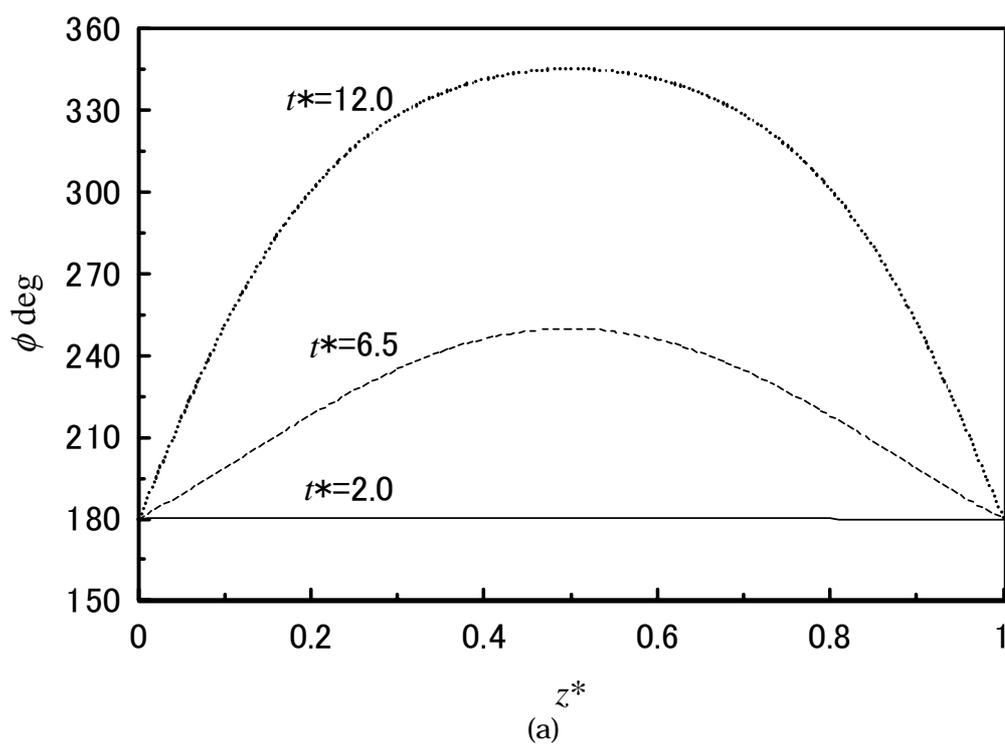
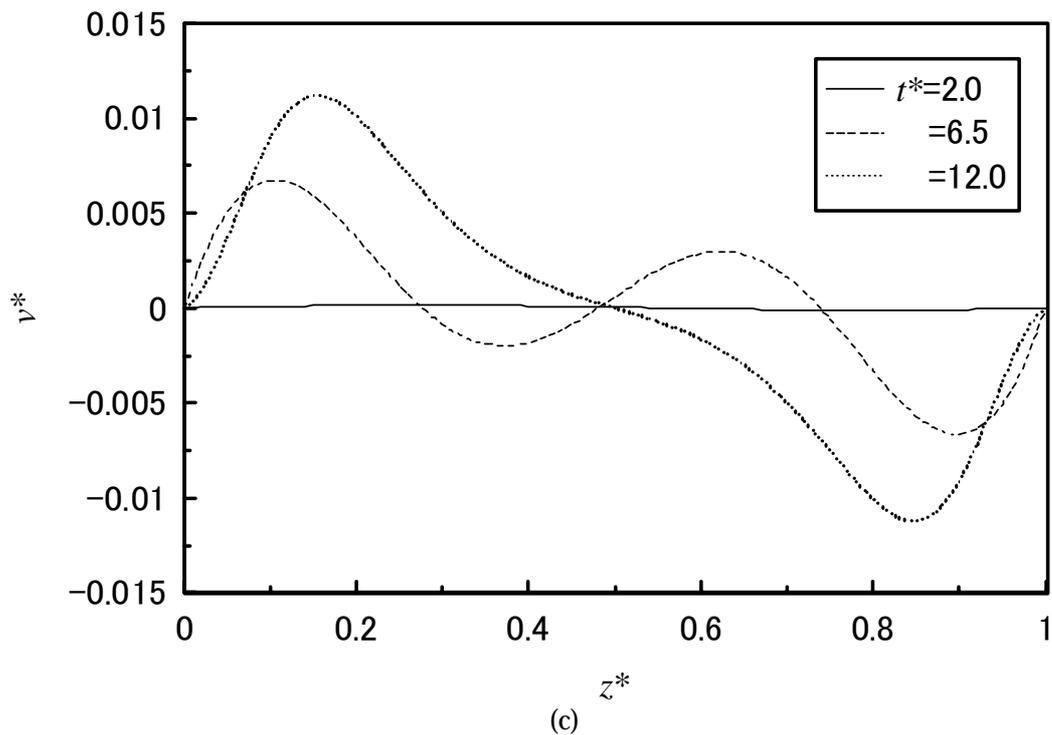


Fig 4-5(a),(b),(c). Director and velocity profiles at $Er=50$

図 4-5(c)は次項 .



次に $Er = 100$ の場合の平板間位置に対する ϕ, u, v の分布を図 4-6(a), (b), (c) にそれぞれ示す。図 4-6(a) より, $t^* = 5.0$ のとき平板間下半分の領域で ϕ の値が正, 上半分の領域で負の値をとる反対称分布を示す。その後, ϕ の正の領域が広がり, 最終的に平板間の全領域で ϕ は正の値をもつ対称分布へと移行する。このとき, 平板間中心近傍では ϕ が 0 となり c ディレクタは流れ方向と一致する。しかし, ϕ の分布が反対称から対称分布へと移行する過程である $t^* = 10.0$ のとき u の分布が一時的に直線分布からずれることが分かる。図 4-6(c) の図より, y 方向速度 v の値は c ディレクタの時間変化がはげしい平板間上部で大きな値をもつ。

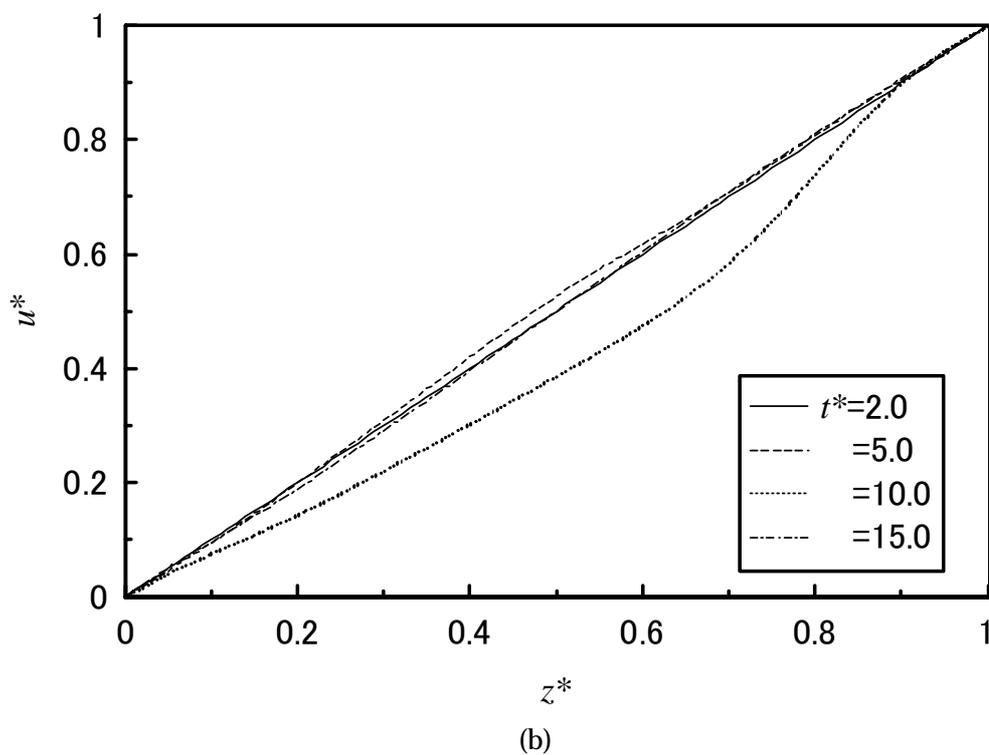
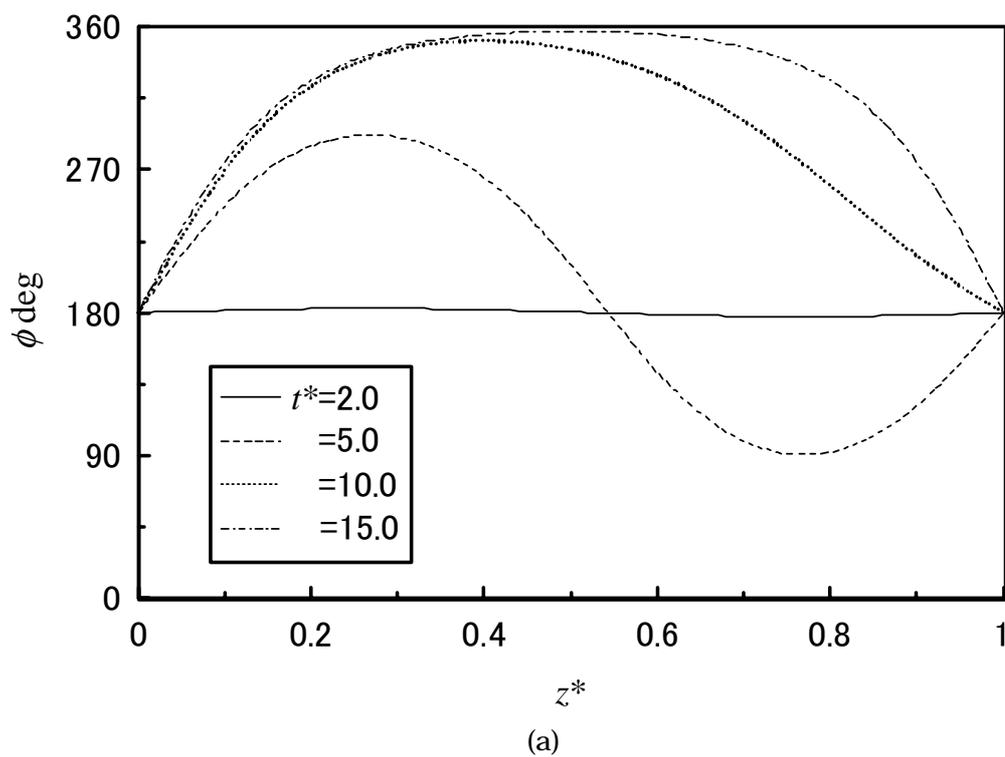


Fig 4-6(a),(b),(c). Director and velocity profiles at $Er=100$

図 4-6(c)は次項 .

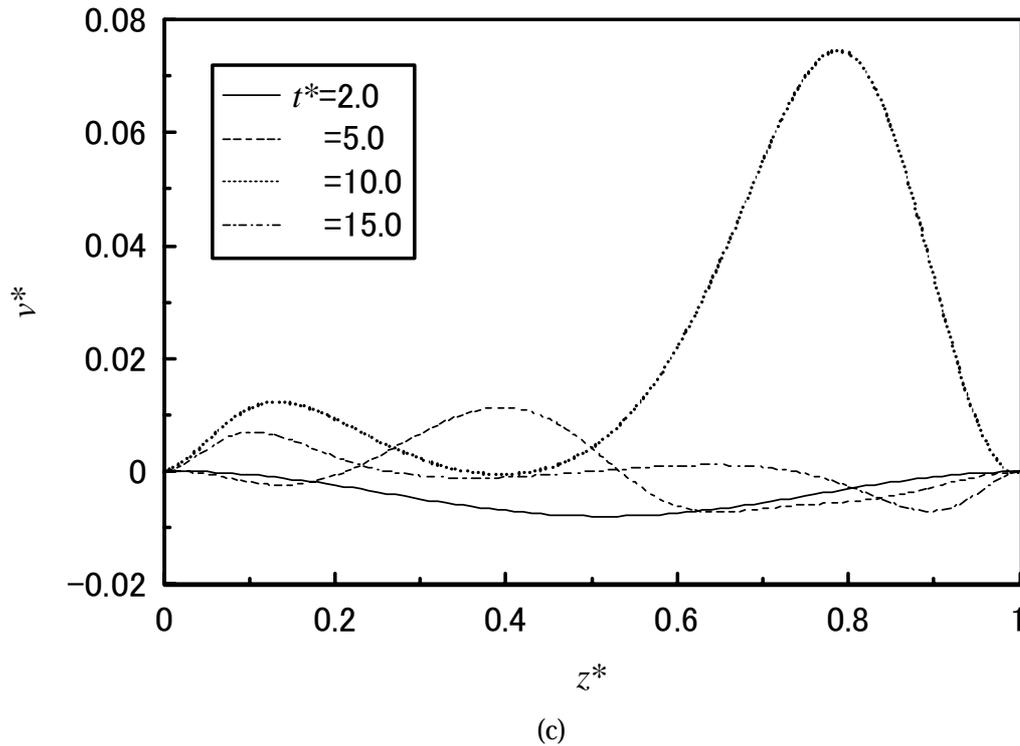


図 4-7(a), (b), (c)に $Er = 1000$ の場合の ϕ, u, v の z 方向分布を示す．図 4-6(a)より， ϕ は平板間下部領域で正，上部で負の対称分布を示す．しかし， $Er = 100$ の場合には反対称分布から対称分布へ移行したのに対し， $Er = 1000$ の場合には ϕ の対称分布への移行はみられず，反対称分布のまま定常状態へと至る．これは， Er の増加にともなって，粘性の影響が強くなったためであると考えられる．一方， x 方向および y 方向の速度分布については $Er = 100$ の場合と同様の傾向が見られる．

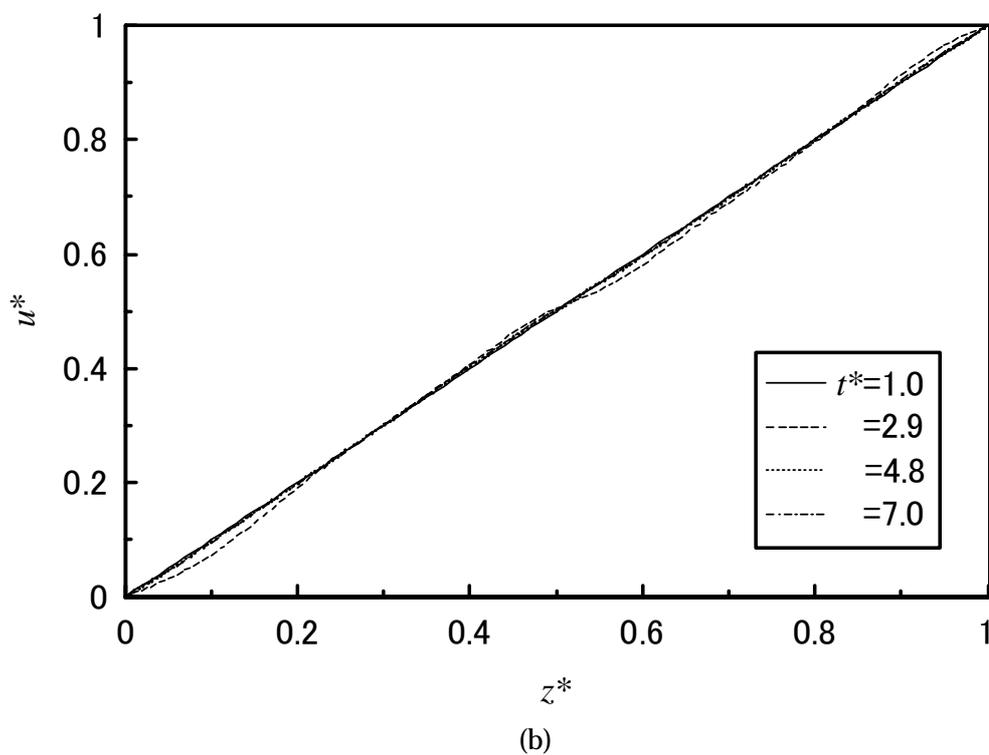
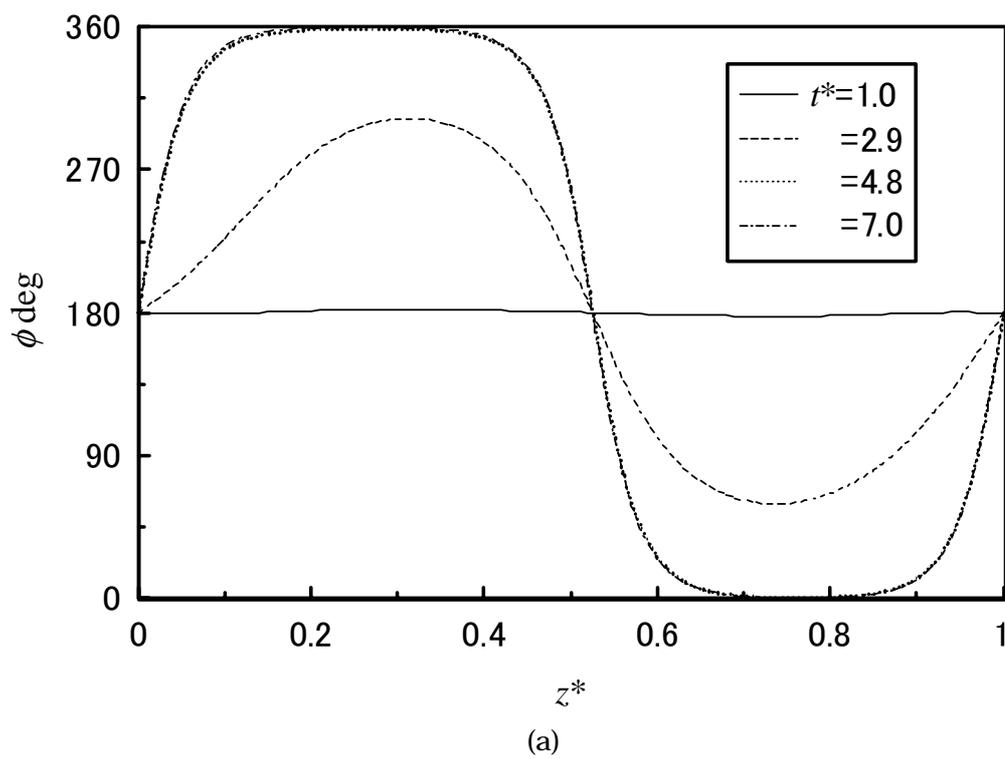
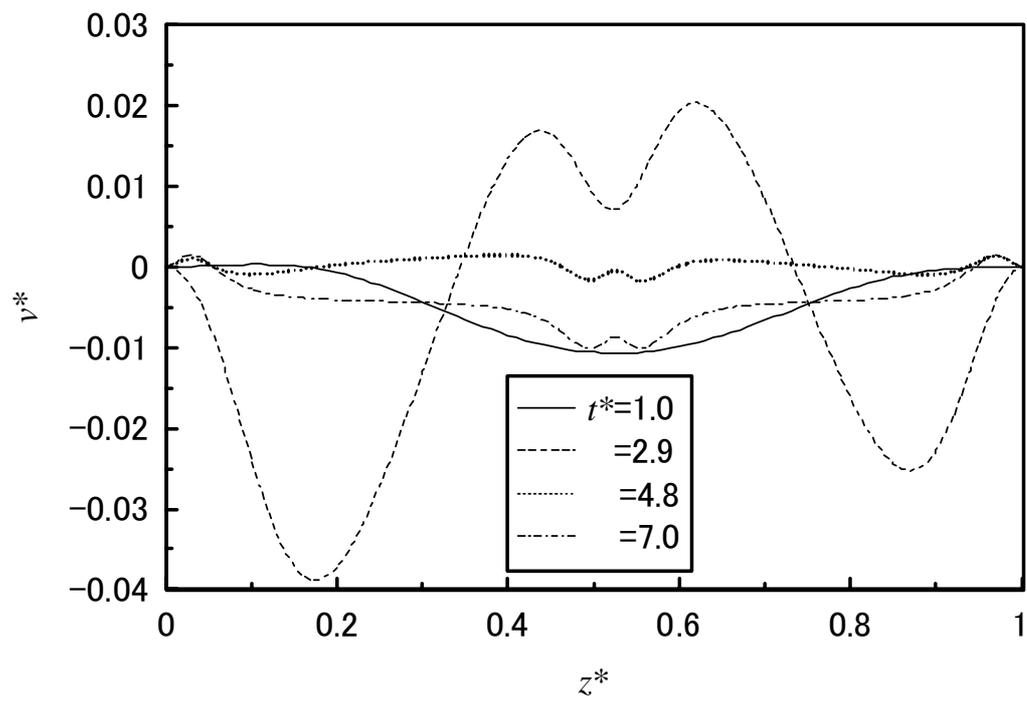


Fig 4-7(a),(b),(c). Director and velocity profiles at $Er=1000$

図 4-7(c)は次項 .



第5章 計算結果及び考察 ~ Bookshelf 配置 ~

5・1 アライニングとタンプリング

第5章では平板間で層が上下平板に対し垂直に配置された Bookshelf 配置で行った計算結果を示す。層が変化しない状態で、 \mathbf{a} は y 方向に固定されるため、Bookshelf 配置では x 方向のせん断に対して \mathbf{c} が存在する層平面 (z - x 平面) がせん断平面に一致する。 \mathbf{c} は定義より層平面上のみを回転するため、Bookshelf 配置において \mathbf{c} はせん断流れ中のネマティック液晶のディレクタ \mathbf{n} に近い存在である。ネマティック液晶のディレクタ \mathbf{n} はせん断流中でアライニングとタンプリングと呼ばれるの挙動をとることが知られている。

アライニングとはせん断平面内でネマティック液晶のディレクタ \mathbf{n} がせん断方向に対してある角度をなして静止する挙動で、そのときの角度は Leslie 角と呼ばれネマティック液晶の粘性係数から算出される。一方、タンプリングはせん断平面内でディレクタ \mathbf{n} が回転しつづける挙動である。これら2つ挙動のどちらが現れるかはネマティック液晶の粘性係数の値によって決定される。Bookshelf 配置のスメクティック C 液晶の \mathbf{c} においても粘性係数に依存してこれらの現象が発生すると考えられる。

\mathbf{c} についての角運動方程式、式(2-17)を単純せん断流に適用し、 ϕ の定常解 ϕ_A を求めると以下の関係が導かれる。

$$\phi_A = \frac{1}{2} \cos^{-1} \left(-\frac{\lambda_5}{\lambda_2} \right) \quad (5-1)$$

$|\lambda_2| > \lambda_5$ の場合、 \mathbf{c} は流れに対して ϕ_A の角度をなして静止する。しかし $|\lambda_2| < \lambda_5$ の場合には ϕ_A は値を持たず、 ϕ の定常解は存在しない。従って、 \mathbf{c} はせん断平面内を回転しつづける。 $|\lambda_2| > \lambda_5$ の場合にはアライニングが、 $|\lambda_2| < \lambda_5$ の場合にはタンプリングが発生すると考えられる。

本研究では $|\lambda_2| > \lambda_5$ の場合および $|\lambda_2| < \lambda_5$ の場合それぞれについて解析結果を示し、考察を述べる。上下平板のアンカリング角はどちらの場合も $\phi = 90^\circ$ 、初期状態として平板間全体で $\phi = 90^\circ$ の条件の下で、 \mathbf{c} の回転角 ϕ と x 方向速度 u を計算した。初期状態における \mathbf{n} の分布の模式図を図 5-1 に示す。

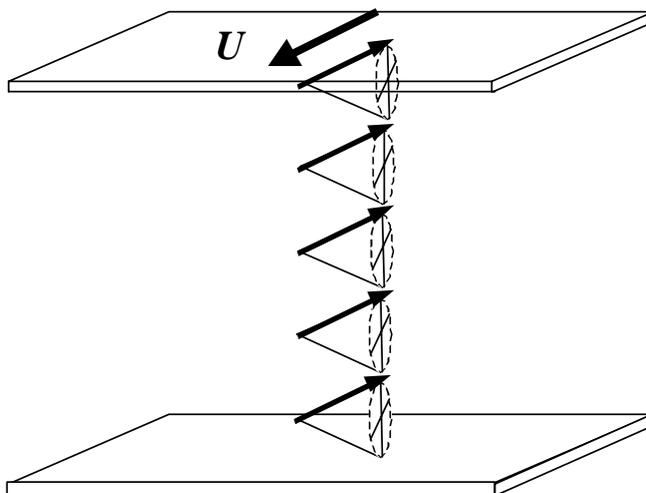


Fig 5-1. Initial director configuration for the Bookshelf arrangement

5・2 計算結果 3

図 5-2(a), (b)~図 5-4(a), (b)は表 3-2 に示す Leslie らによって提案された λ_2 と λ_5 の値を用いて計算を行った場合の c の回転角 ϕ と x 方向速度 u の分布を示す。エリクセン数は図 5-2(a), (b)では 100, 図 5-3(a), (b)では 500, そして図 5-4(a), (b)では 1000 である。

ϕ 値はいずれのエリクセン数においても上下平板上での壁面配向の影響が小さい平板間中央部付近で時間とともに減少し, $\phi = 15^\circ$ 付近で定常に達した。エリクセン数が高い場合, 平板間中心付近で一定の角度に達する領域が広がっている。これは図 4-1(a), 4-2(a)と同様にエリクセン数が高くなるに従い, 系の粘性の影響が増し弾性の影響が減っているためと考えられる。

本計算において $\lambda_2 = -0.12$, $\lambda_5 = 0.1$ であり, この値を式(5-1)に代入すると $\phi_A = 16.78^\circ$ が算出される。この ϕ_A の値は図 5-3(a), 5-4(a)の平板間中心における ϕ の値とほぼ一致する。図 5-2(a)では, 定常状態での中央の角度が理論値と約 6° のずれがあった。これはエリクセン数が低いため, 壁面配向角の影響が弾性によって平板間中心にまで及んだことによる。

x 方向速度 u の分布ではエリクセン数の変化による影響はほとんど見られない。しかし図 4-2(b), 4-3(b)のように平板間全体で直線的な分布となった Planar 配置の場合と対照的に, いずれの Er の場合も時間の変化にともない直線的な分布からずれが生じた。

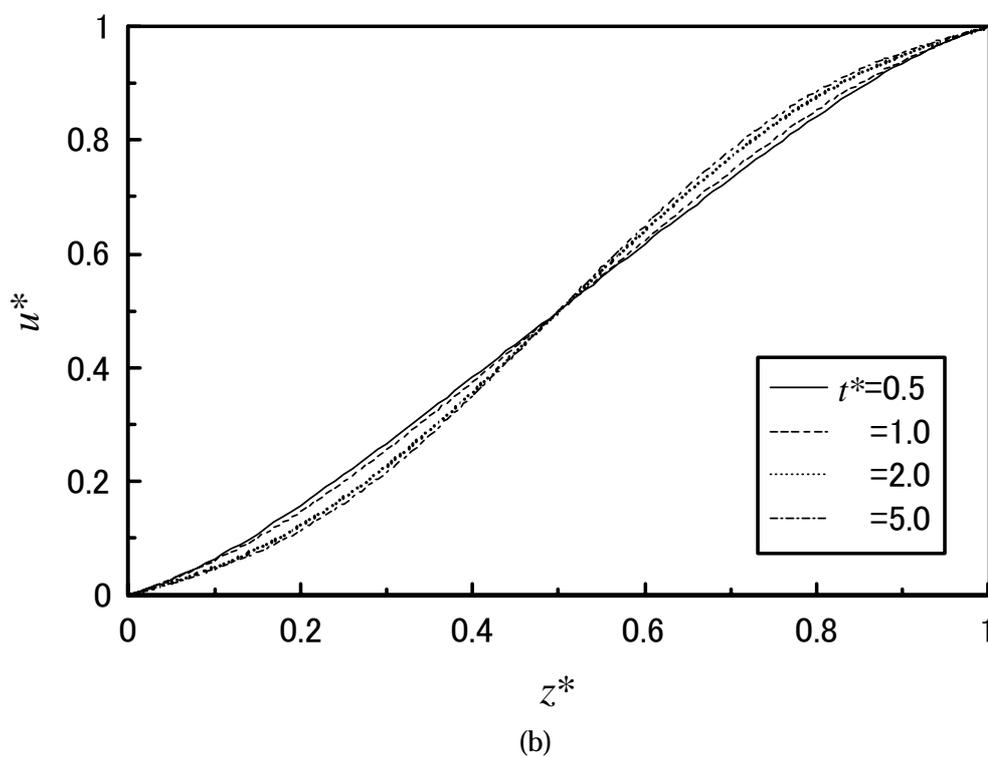
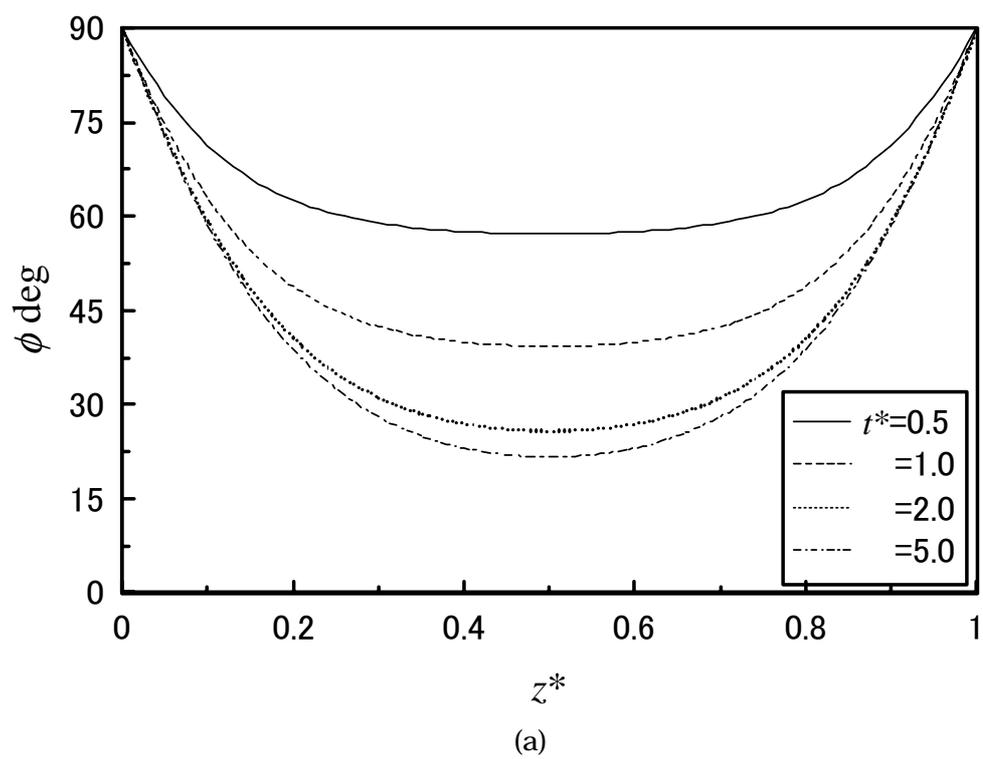


Fig 5-2(a),(b). Director and velocity profiles at $Er=100$

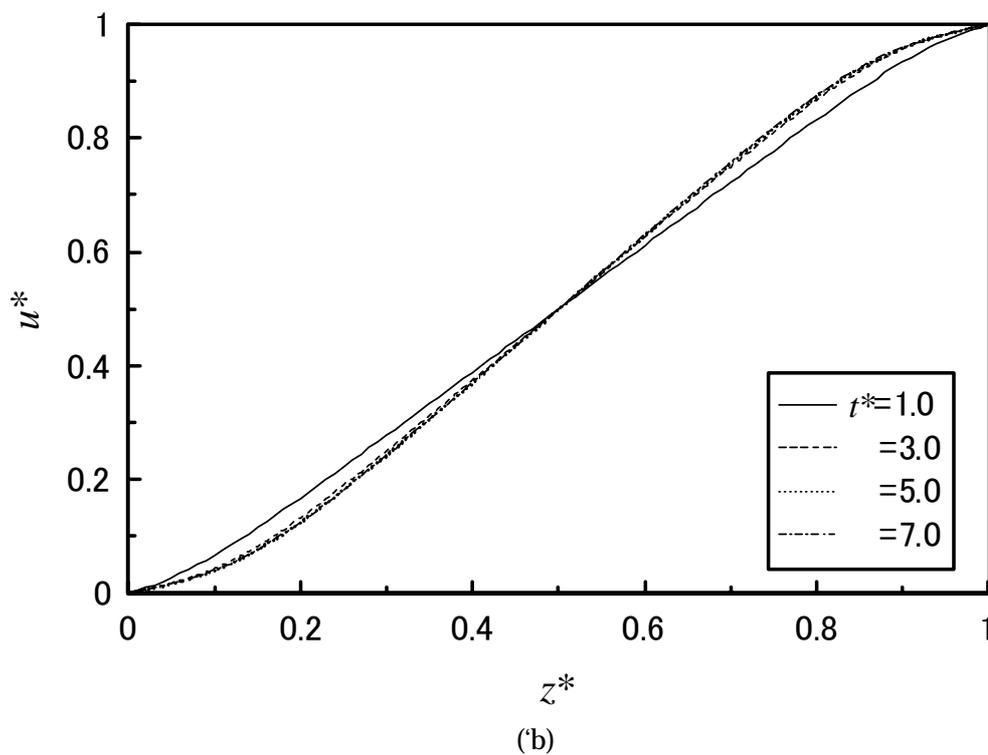
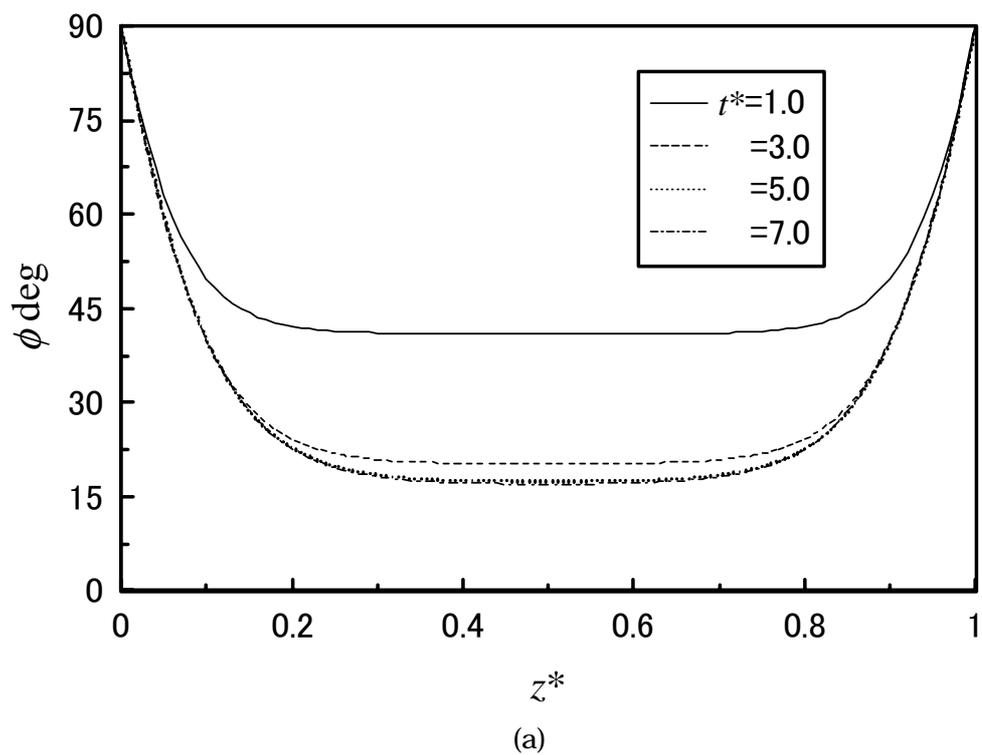


Fig 5-3(a),(b). Director and velocity profiles at $Er=500$

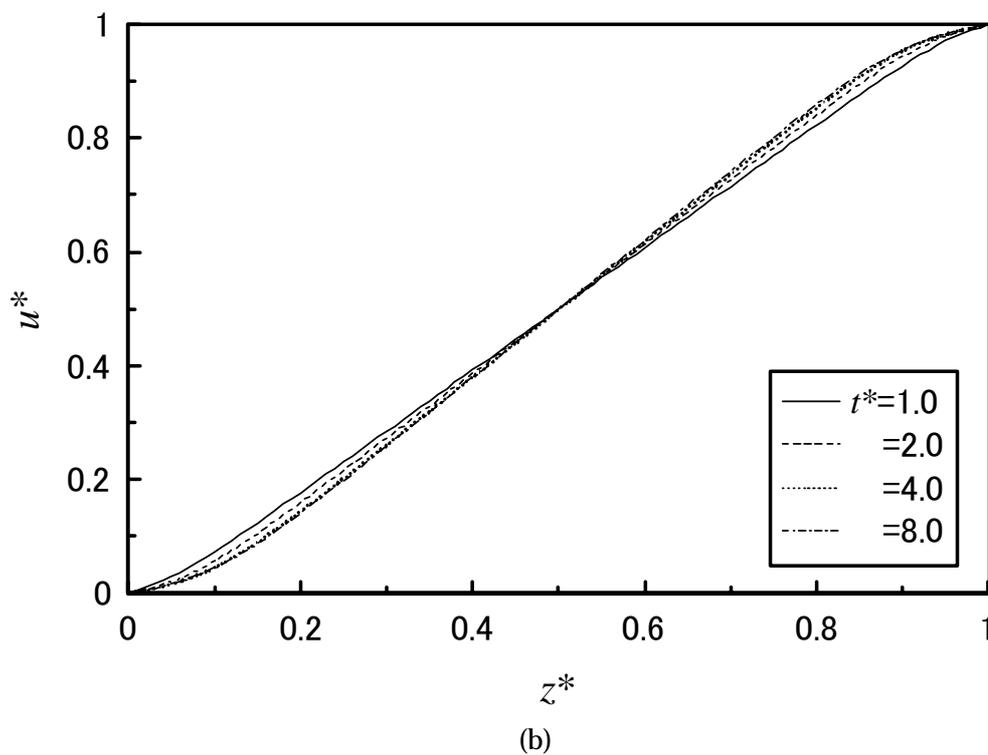
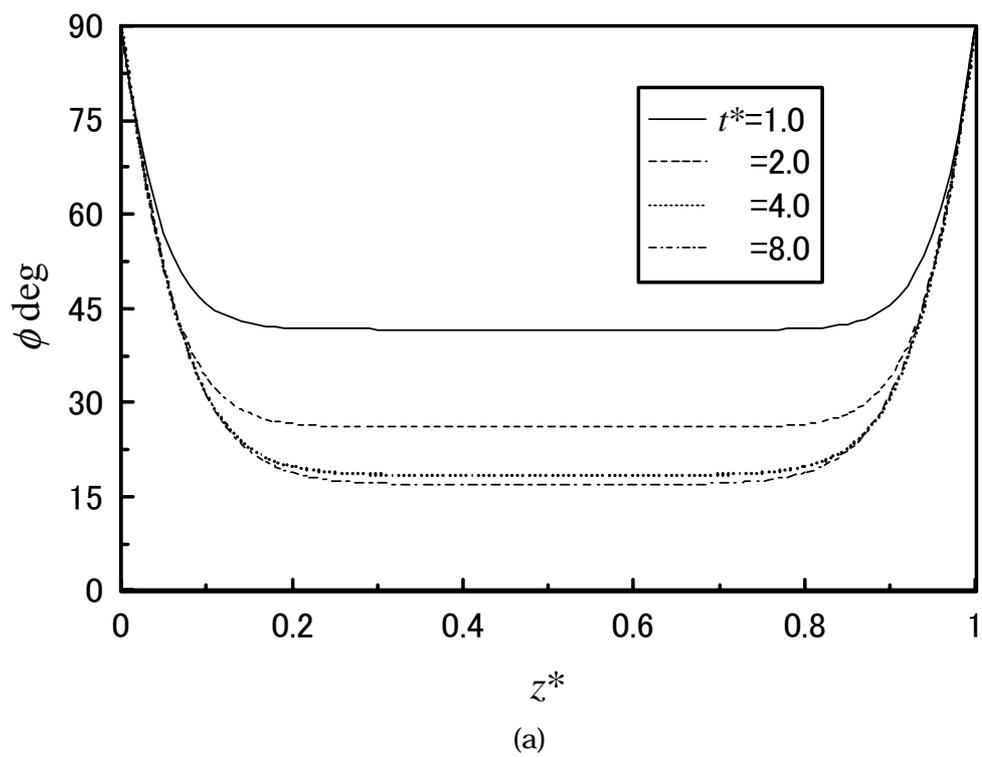


Fig 5-4(a),(b). Director and velocity profiles at $Er=1000$

5・3 計算結果4

本節では前節で計算に用いた λ_5 の値を2倍し、 $|\lambda_2| < \lambda_5$ とした場合の計算結果を示す。式(5-1)より $|\lambda_2| < \lambda_5$ では ϕ の定常解 ϕ_A は存在せずタンプリング挙動が生じる。

図5-5(a), (b)はそれぞれエリクセン数Erを1000の場合の ϕ の z 方向の分布と、平板間中心部での ϕ の時間変化を示す。図5-5(a)の横軸は平板間位置、縦軸は c の配向角 ϕ である。前節で示した結果と同様に、時間とともに平板間中央部付近での ϕ の値が初期状態($\phi = 90^\circ$)から減少する。しかし前節の場合と異なり ϕ の値は減少し続け、最終的に $\phi = -1260^\circ$ にまで達する。すなわち、 c は定常に至るまでに3.5回転しており、 c ではタンプリングが発生している。もし配向の空間的な変化(即ち、分子場の弾性)を考慮しなければ c は永久に回転しているが、計算では z 方向の変化は考慮しているため最終的には c は静止状態へと至る。

図5-5(b)は壁面のアンカリング角の影響が最も少ないと考えられる平板間中央における ϕ の値の時間変化を示している。横軸は時間、縦軸は平板間中央における ϕ の値を表す。図中より ϕ は緩やかに時間変化している部分と急激に時間変化している部分を繰り返している。この急激な時間変化をしている部分で c はタンプリングしている。 c の向きが流れ方向に一致している時、すなわち、 $\phi = 0^\circ - 180^\circ \times i$ ($i = 0, 1, 2, \dots$)の時、 c の回転速度は低下し、 ϕ の値は緩やかに変化する。 c の回転速度は c が流れ方向と直行する状態で最大となる。これを繰り返して、図のような階段状の分布を形成する。最終的には $\phi = -1260^\circ$ で定常に達するが、 $\phi = -1260^\circ$ では c の向きが流れ方向と一致し、粘性による c の回転トルクが低い状態である。

図5-5(c)は x 方向速度 u の分布を示している。下部平板から上部平板にかけて波うつような分布を形成している。これは、 c の z 方向分布と密接に関係しており、 c が流れと平行な位置で速度が大きく、逆に c が流れと直行する位置では速度は小さい。このことはネマティック液晶のミエソビッツの粘性係数から考えても明らかである。

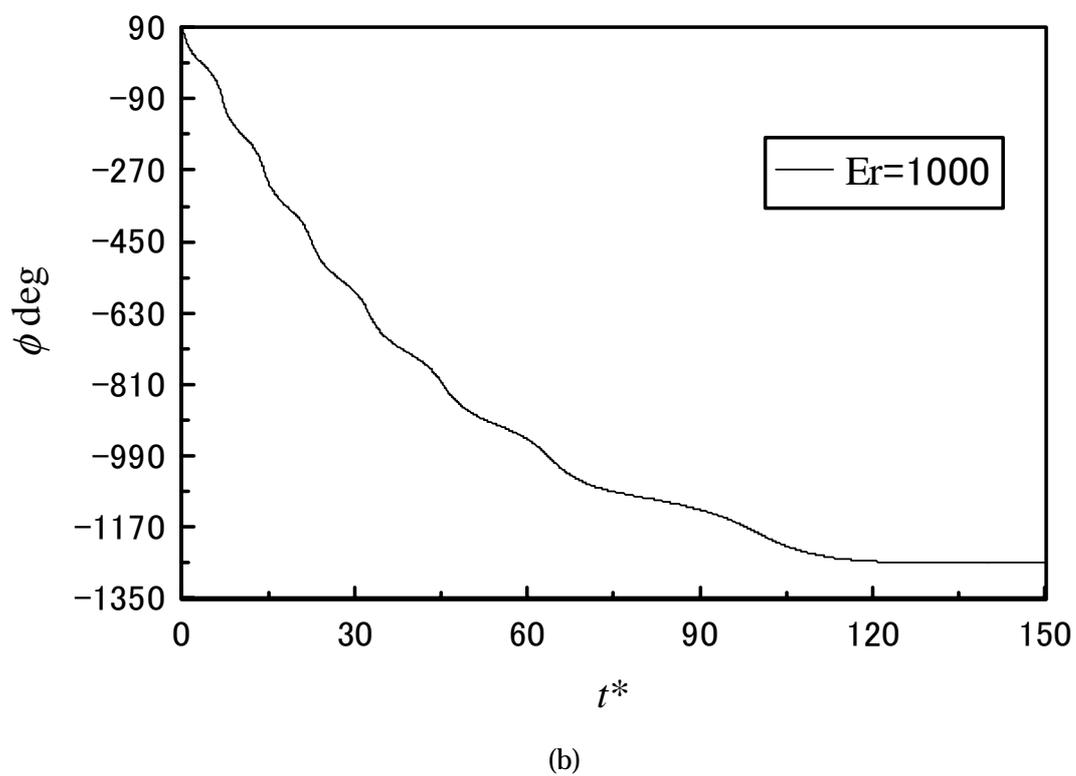
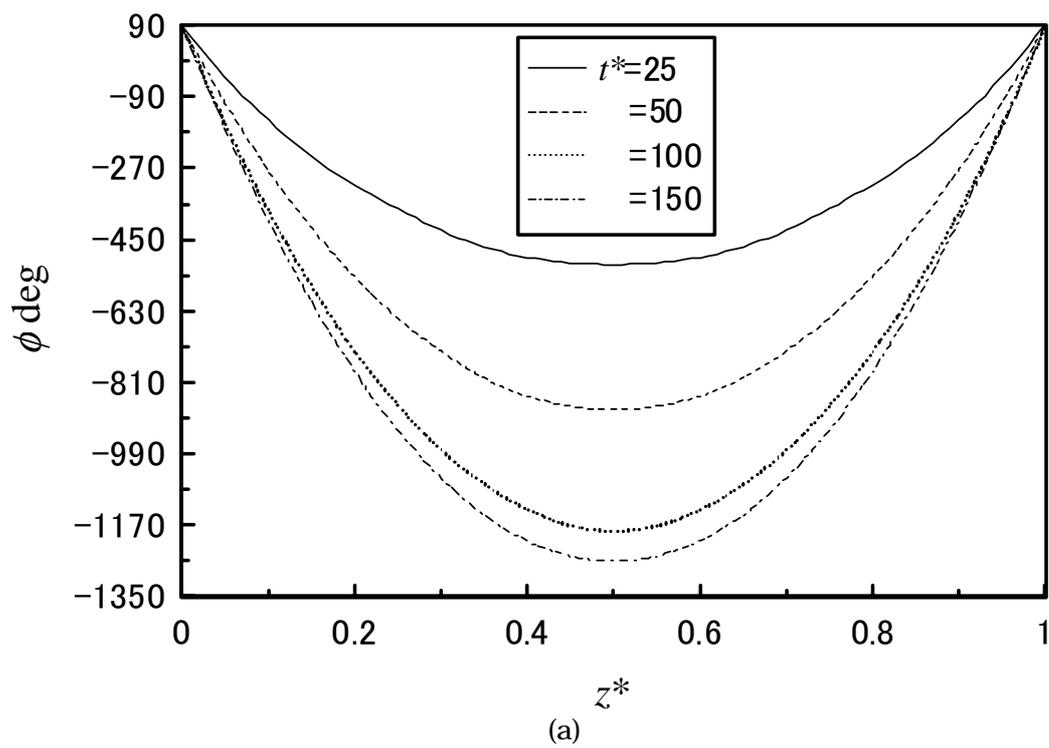


Fig 5-5(a), (b), (c). Director and velocity profiles at $Er=1000$

図 5-5(c)は次項 .

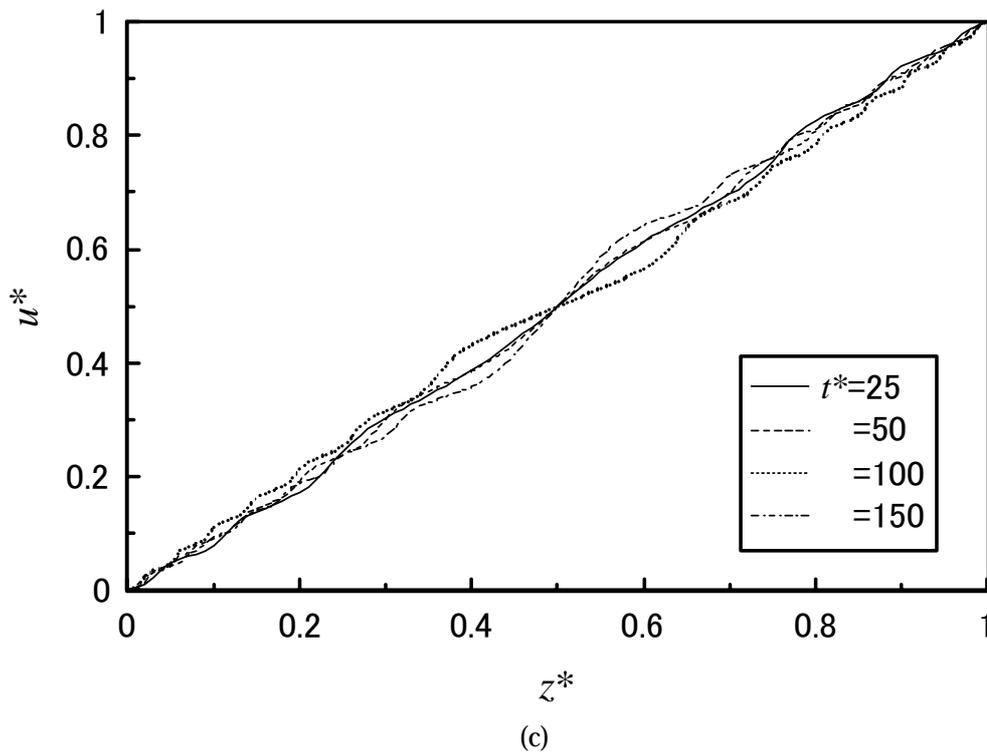


図 5-6(a) , (b) , (c)は $Er = 100$ として計算した場合の ϕ と u の z 方向の分布 , そして ϕ の時間変化を表す . 図 5-6(a)に示す ϕ のグラフでは平板間中央部で ϕ が時間とともに減少し ϕ は約 22° で定常に達した . 図 5-5(a)の場合と比べて ϕ は殆ど回転していない .

図 5-6(b)に平板間中央部での ϕ の値の時間変化を示す . 図 5-5(b)の場合と比較すると , c がタンブリングした時に生じる ϕ の急激な変化が見られない . $Er = 100$ の場合 , $Er = 1000$ のときに比べ弾性の影響が強いためタンブリングが発生しなかったと考えられる .

図 5-6(c)は平板間での x 方向速度 u の分布である . c のタンブリングが起こっていないため u の分布に関しても図 5-5(c)に見られるような波状の速度分布は発生していない .

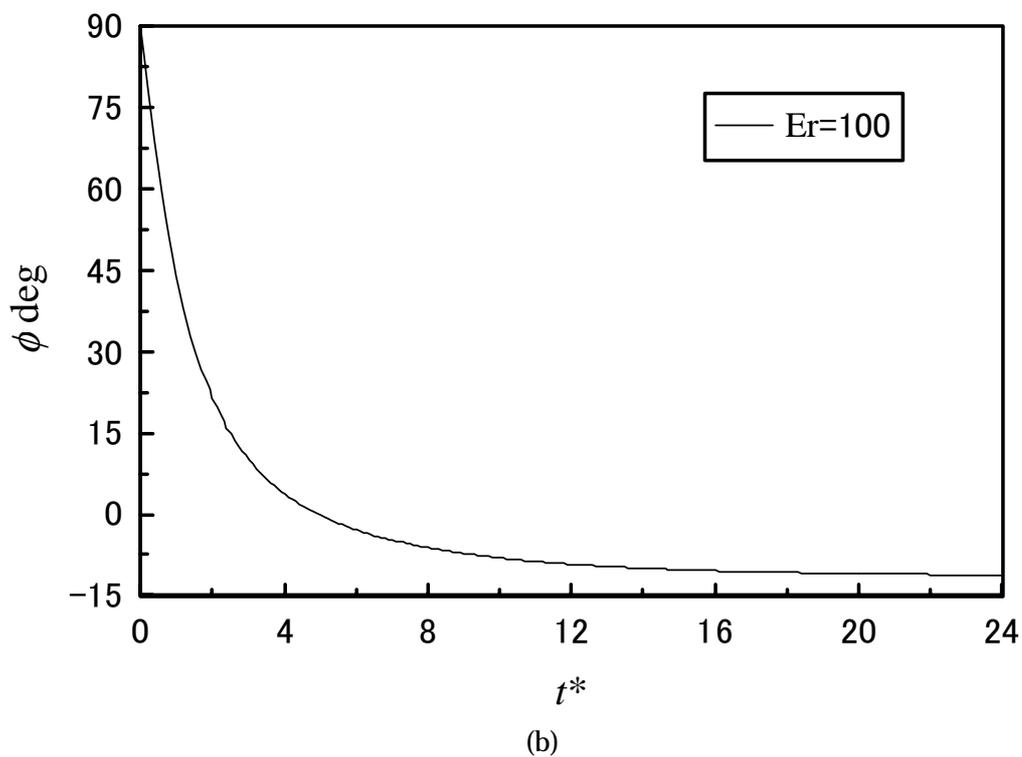
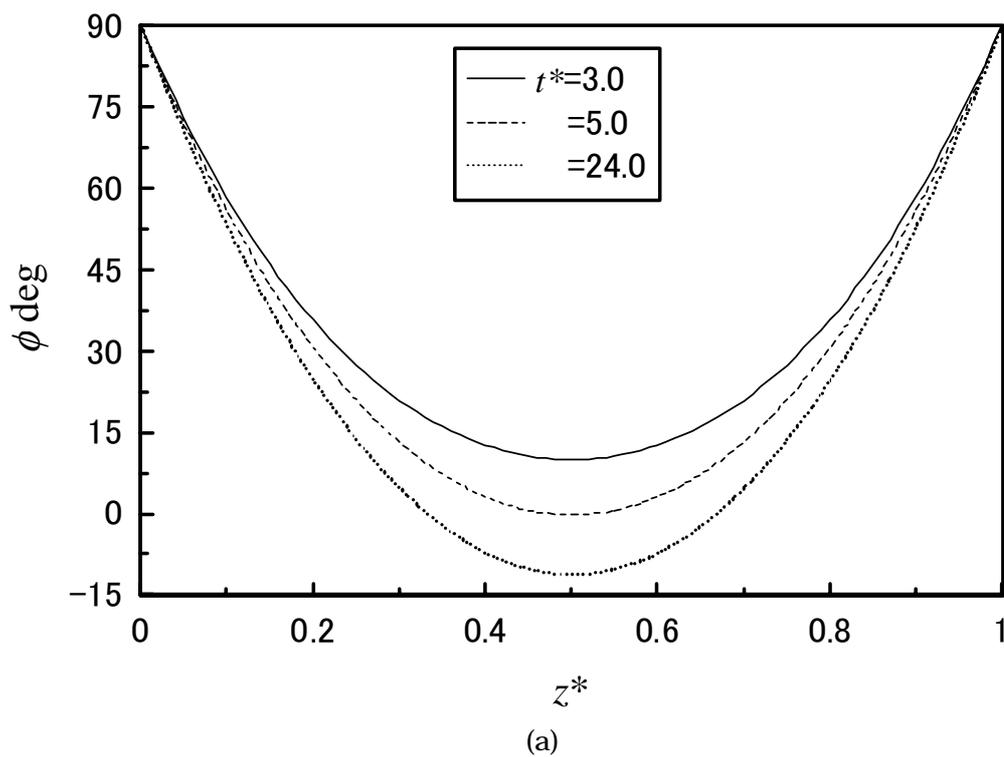
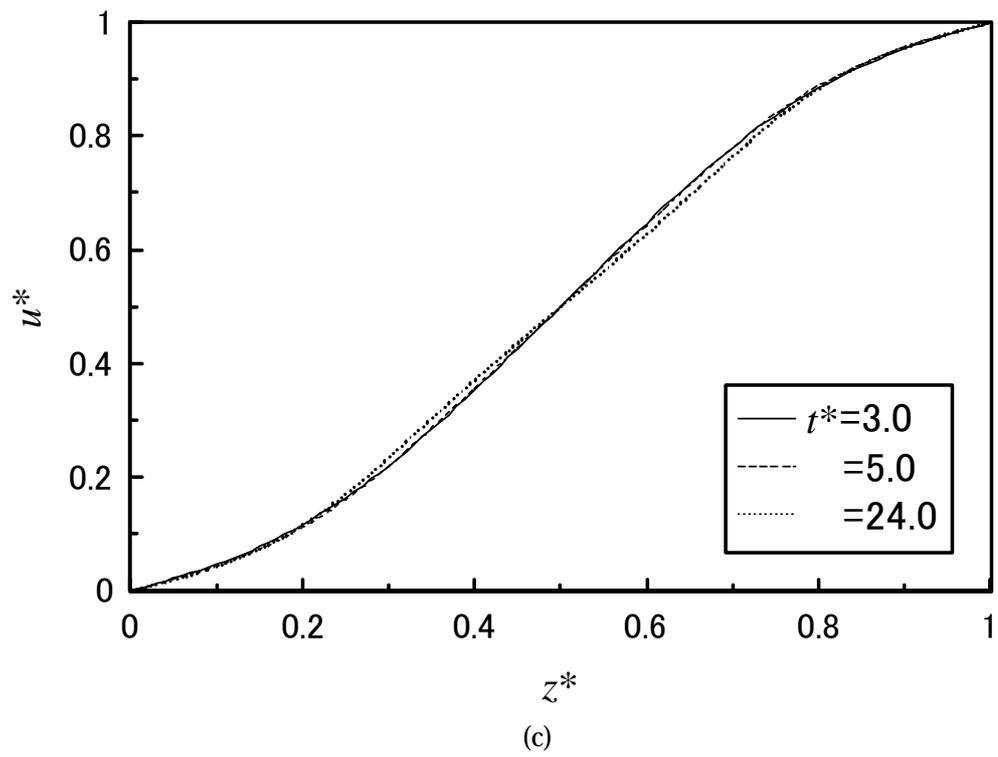


Fig 5-6(a), (b), (c). Director and velocity profiles at $Er=100$

図 5-6(c)は次項 .



第6章 結言

本研究ではスメクティック C 液晶の平行平板間せん断流れの数値シミュレーションを、Leslie らによって提案されたスメクティック C 液晶の連続体理論を用いて行った。平板間に層を配置する際に考えられる 3 つの基本的な配置について一次元の数値シミュレーションを行い以下に示す結論を得た。

- Leslie らの理論では層間隔は不変と仮定されているため、本研究で提案した基本配置の内の 1 つでは、層間隔不変の条件と流動の間に矛盾が生じる。
- 層平面を平板に対して平行に配置した場合 (Planar 配置), 分子の配向を表すディレクタ \mathbf{n} の方位を表す c ディレクタの向きは流れ方向に一致する。
- 平板間に層を垂直に配置した場合 (Bookshelf 配置), ネマティック液晶で発生するアライニング及びタンブリング現象がスメクティック C 液晶の c ディレクタにおいても確認された。
- アライニング及びタンブリング挙動の発生条件は粘性係数の λ_2 と λ_5 によって決定され、アライニングの場合、定常状態での流れ方向からの角度がその 2 つの粘性係数から導かれる。

スメクティック液晶はネマティック液晶がもつ分子配向の秩序に加え一次元の重心位置の秩序を有するために層構造を形成する。本研究で用いた Leslie らによる理論を含む従来のスメクティック液晶の理論研究では層間隔は不変とするのが一般的であった。しかし実際にはスメクティック液晶の層間隔は不変ではなく、最近では層圧縮弾性係数に関する研究⁽¹⁴⁾も行われている。このことより Leslie らによって提案されたスメクティック C 液晶の連続体理論も層間隔の変化を考慮したものへ拡張される必要がある。

ネマティック液晶の同心回転円板間流れの
数値シミュレーション

A 1 研究目的

ネマティック液晶はせん断流れ中で分子の局所的な配向を表すディレクタ \mathbf{n} がせん断方向に対し一定の角度を保ち静止する現象（アライニング）, 又はせん断面内を回転しつづける現象（タンプリング）を示すことが知られている．これら 2 つの現象のうちどちらが発生するかは物性値の粘性係数によって決定され, アライニングを発生させるものをアライニングネマティック, タンプリングを発生させるものをタンプリングネマティックと呼ぶ．

Carlsson らはガラス製の 2 枚の同心回転円板間にタンプリングネマティックを封入し, 円板を回転させて液晶に流動を発生させ, 下から光を入射し, 上から透過光を観察することで図 A1-1 に示す結果を得た．図 A1-1 は円板外周から発生した黒いリングが内側へ移動し, 外側からは新たなリングが発生している写真である．この黒いリングの部分ではディレクタがタンプリングしており, 配向に乱れが生じ光の透過量が変化している部分である．

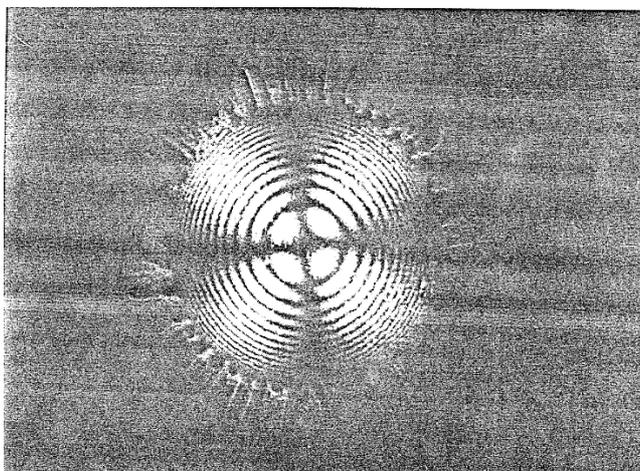


Fig A1-1. Concentric circular pattern observed by Carlsson et al⁽¹⁵⁾

Carlsson ら⁽¹⁶⁾はネマティック液晶の同心回転円板間流れを解析するにあたって, 図 A1-2 に示すように円板の半径方向 (r 方向) にせん断流れの結果をせん断速度を増加させて並べたモデルを用いた．図中では円筒座標系 (r, θ, z) における任意の θ の位置での r - z 平面を表している．三角形のブロッカー一つは z 方向のみの変化を考慮したせん断流れの結果を表しており, 半径方向 (r 方向) にせん断速度を増加させて並べている．すなわち, 物理量の r

方向の勾配を無視した z 方向の一次元解析を行っている。

本研究の目的は円板間厚さ方向及び半径方向の配向分布の変化を考慮した二次元数値シミュレーションを行い, Carlsson らのモデルより, より実験に近い状態の下でネマティック液晶の同心回転円板間流れの解析を行い, Carlsson らの実験結果と比較を行うことである。

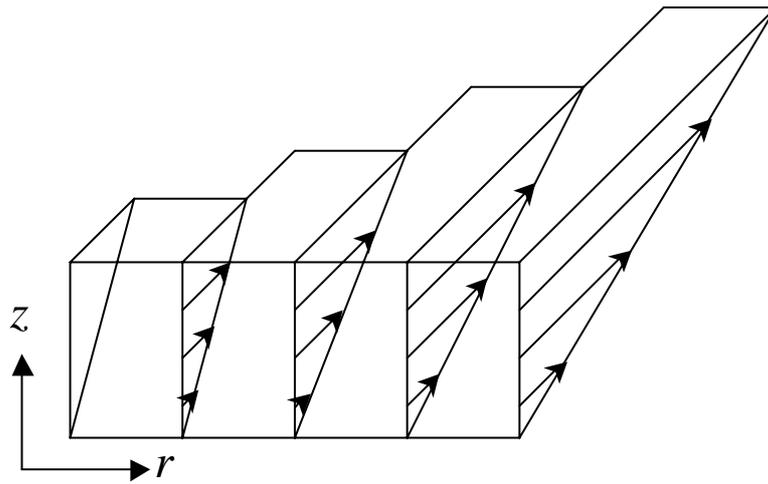


Fig A1-2. Flow model suggested by Carlsson for torsional shear flow

A 2 座標系と支配方程式

A 2・1 流れ領域及び座標系

図 A2-1 に本研究で扱う同心回転円板間流れの流れ領域と座標系を示す．中心に z 軸が来るように 2 枚の円板を，間隔 H をおいて下部円板が $z=0$ ，上部円板が $z=H$ となるように円筒座標系 (r, θ, z) 中に配置する．円板間は液晶で満たされ，上部円板を一定の角速度 ω で回転することによって液晶に流動が発生する．

本研究では θ 方向速度分布は円板間方向 (z 方向)，及び半径方向 (r 方向) に直線分布であると仮定した．すなわち， $\mathbf{v} = (0, r\omega z, 0)$ である．以上の条件の下で，円板間でのディレクタ \mathbf{n} の分布を非定常数値シミュレーションで計算した．円周方向 (θ 方向) には速度と \mathbf{n} の分布は一様であるとして，任意の θ の位置での r - z 平面についての二次元数値シミュレーションを行う．ディレクタは常にせん断面 (ここでは θ - z 面) 内に存在し， r 方向の成分はもたない．以上の条件から \mathbf{n} の成分は以下のように表される．

$$\mathbf{n} = (0, n_\theta(r, z), n_z(r, z)) \quad (\text{A2-1})$$

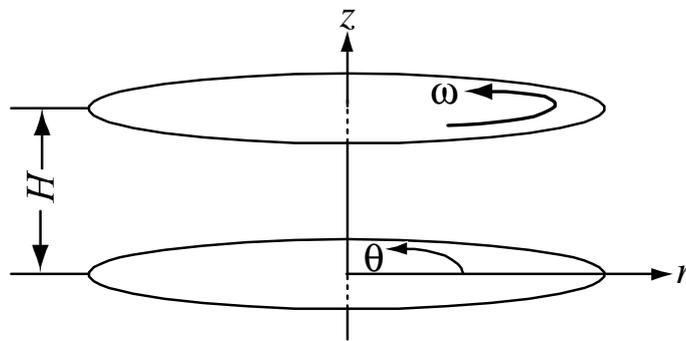


Fig A2-1. Flow area and coordinate system

A 2・2 基礎式

本研究ではネマティック液晶の同心回転円板間流れを解析する．ネマティック液晶は流れが分子の配向を変化させ，配向の変化が流れに影響を与えるため流れを表す速度と分子配向を表すディレクタ \mathbf{n} を同時に取り扱うことのできる Leslie-Ericksen の連続体理論⁽¹⁾(以下 L-E 理論)を用いた．本研究で用いた基礎式を以下に示す．

$$\mathbf{n} \times \left[\frac{\partial F}{\partial \mathbf{n}} - \nabla \cdot \frac{\partial F}{\partial \nabla \mathbf{n}} + (\alpha_2 - \alpha_3) \mathbf{N} + (\alpha_5 - \alpha_6) \mathbf{A} \cdot \mathbf{n} \right] = \mathbf{0} \quad (\text{A2-2})$$

L-E 理論では速度と配向を取り扱っているため、運動方程式と角運動方程式から構成されている。しかし本研究では速度分布は r 方向に直線分布であると仮定しているため改めて解析は行わず、 \mathbf{n} の分布を角運動方程式を用いて明らかにする。式(A2-2)は \mathbf{n} の配向を表す角運動方程式で、式中で \mathbf{N} は流体と \mathbf{n} との相対角速度ベクトルで、以下のように表される。

$$\mathbf{N} = \dot{\mathbf{n}} - \mathbf{W} \cdot \mathbf{n} \quad (\text{A2-3})$$

式中の \mathbf{A} は変形速度テンソル、 \mathbf{W} は渦度テンソルで以下のように表される。

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2} \{ \nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T \}, \quad \mathbf{W} = \frac{1}{2} \{ \nabla \mathbf{v} - (\nabla \mathbf{v})^T \} \quad (\text{A2-4a, b})$$

式中の α_i ($i = 2, 3, 5, 6$) はネマティック液晶の Leslie 粘性係数を表す。 F は \mathbf{n} の空間的ひずみから生じる Frank の自由エネルギー密度で、以下のように表される。

$$2F = K_1 (\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + K_2 (\mathbf{n} \cdot \nabla \times \mathbf{n})^2 + K_3 |\mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n}|^2 \quad (\text{A2-5})$$

式中の K_i ($i = 1 \sim 3$) はネマティック液晶の Frank 弾性定数を表し、 K_1 、 K_2 、 K_3 はそれぞれ広がり、捩り、曲がりの各変形の弾性定数を表す。

A2・3 無次元化

次に基礎式を式(A2-1)に示す \mathbf{n} の成分で展開する。展開された式の有次元の各物理量を表 A2 で示す各代表物理量で無次元化する。無次元化後、基礎式中には以下に示すような粘性力と弾性力の比を表す無次元数であるエリクセン数 Er が表れる。

$$Er = \frac{\mu H^2 \omega}{K} \quad (\text{A2-6})$$

本研究ではこのエリクセン数をパラメータとして変化させ計算を行う。代表長さ H は平板間隔をしているため、平板間隔が不変であればエリクセン数は系に与える角速度 ω にのみ比例する。従って、エリクセン数を変化させることは上部円板に与える角速度 ω を変えることと同等である。

**Table A2. Reference physical constants
for non-dimensionalize operation**

Reference length	H
Reference viscosity coefficient	$\mu = \alpha_2 - \alpha_3$
Reference elastic constant	$K = \frac{1}{3}(K_1 + K_2 + K_3)$

A 3 数値計算

A 3・1 計算条件

次に計算に用いた境界条件について説明する。本研究では r, θ, z の円筒座標系中において任意の θ での $r-z$ 平面について計算を行った。展開，無次元化した基礎式を離散化し，空間方向には 2 次の中心差分法，時間方向には 2 次のルンゲクッタ法を用いて計算を行った。回転円板中心部及び上下の円板面ではディレクタ \mathbf{n} は z 方向を向け固定した。円板間の外周では， r 方向についてはノイマン型境界条件を用いて r 方向について直線近似を行った。

A 3・2 物性値

角運動方程式中の粘性係数と弾性定数には本研究ではタンブリングネマティックとして，4'-n-Octyl-4-cyanobiphenyl (8CB)，比較のためにアライニングネマティックである 4'-n-Pentyl-4-cyanobiphenyl (5CB) の物性値を用いた。8CB と 5CB の各物性値を表 A3 に示す。

表中で $\alpha_i (i=1 \dots 6)$ はネマティック液晶の Leslie 粘性係数を表し， $K_i (i=1 \dots 3)$ はネマティック液晶の Frank 弾性定数を表す。この中でネマティック液晶においてタンブリングとアライニングの発生を決定するパラメータは粘性係数の α_2 と α_3 である。

式(A2-2)の角運動方程式を空間方向の変化を考慮せずに単純せん断を与えた場合，定常状態でディレクタ \mathbf{n} がせん断方向に対してなす角度を ϕ_A とすると以下の関係が導かれる。

$$\phi_A = \tan^{-1} \sqrt{\frac{\alpha_3}{\alpha_2}} \quad (\text{A3-1})$$

ここで α_2 と α_3 は Leslie 粘性係数である。 α_2 と α_3 が同符号であれば \mathbf{n} はせん断方向に対し ϕ_A の角度をなして静止する。すなわち，アライニングが発生する。このときの ϕ_A は特に Leslie 角と呼ばれている。

α_2 と α_3 が異符号であれば ϕ_A は値を持たず， ϕ には定常解が存在しない。すなわち， \mathbf{n} はせん断平面内を回転しつづける。すなわち，タンブリングが発生する。⁽¹⁷⁾

Table A3. Material parameters of 5CB and 8CB

	5 CB	8 CB
Viscosity coefficients	Pa · s	
α_1	0.0	13.4×10^{-2}
α_2	-8.6×10^{-2}	-7.0×10^{-2}
α_3	-0.4×10^{-2}	1.4×10^{-2}
α_4	8.9×10^{-2}	5.6×10^{-2}
α_5	5.9×10^{-2}	5.3×10^{-2}
α_6	-3.1×10^{-2}	-2.9×10^{-2}
Elastic constants	N	
K_1	1.1×10^{-11}	1.4×10^{-11}
K_2	0.6×10^{-11}	0.7×10^{-11}
K_3	1.5×10^{-11}	2.1×10^{-11}

A 4 結果と考察

図 A4-1 にアライニングネマティックである 5 CB を円板間に満たし, エリクセン数を 100 とした場合の計算結果を示す. 本研究では長さを円板間隔 H で無次元化しているため, 横軸は円板間隔に対する円板の半径方向の比を表し, 縦軸は円板間中央での \mathbf{n} のせん断方向 (θ 方向) からの角度 ϕ の値である. 初期状態 ($t^* = 0$) では \mathbf{n} は円板間全体で $\phi = 90^\circ$ として z 方向を向いているとした. 配向が固定されている円板中心 ($r^* = 0$) 以外では時間の経過に伴い ϕ の値は減少し, 同じ時刻ではせん断速度が速い円板外側の方でより小さくなっている. 最終的には, 配向が固定された円板中心部付近を除いてアライニングが発生し, 粘性トルクがゼロとなる Leslie 角に達する. 式(A3-1)に表 A3 中の 5 CB の α_2 と α_3 の値を代入すると Leslie 角は $\phi_A = 12.17^\circ$ となり計算結果に一致する.

図 A4-2 に円板間にタンプリングネマティックの 8 CB を満たしエリクセン数を 100 として計算を行った場合の結果を示す. 初期状態では図 A4-1 で示した 5 CB の場合と同様に円板間全体で $\phi = 90^\circ$ とした. また, 横軸は先程と同様に円板間隔に対する円板半径方向の長さの比, 縦軸は円板間中央部での \mathbf{n} のせん断方向からの角度 ϕ である. 時間の経過とともに円板中心部付近を除く部分で ϕ の値は減少する. 5 CB の場合と異なり 8 CB の場合では, ϕ は一定の値に達することなく減少を続ける. 同じ時刻では, 円板中心から離れるに従い, ϕ の値は緩やかな変化と急激な変化を繰り返し減少する. ϕ が急激に減少している部分では \mathbf{n} はせん断面 (z - θ 面) 内を回転しており, タンプリングが発生している. タンプリングはせん断速度が高い円板外周から発生し時間の経過と共に円板中心に近いせん断速度の遅い領域でも発生し, その時, 外周では次のタンプリングが発生する.

図 A4-3 に図 A4-2 と同じく 8 CB の場合の結果を示す. ここではエリクセン数は 10 として上部円板に与える角速度は図 A4-2 の場合の 10 分の 1 とした. 図 A4-1, 図 A4-2 と同様に横軸は円板間隔に対する円板半径方向の長さの比, 縦軸は円板間中央 \mathbf{n} のせん断方向からの角度 ϕ である. 図 4-3 では図 4-2 とは異なり ϕ の値の急激な変化, すなわちタンプリングは発生しなかった. エリクセン数が 10 の場合はせん断速度が遅いためタンプリングが発生しなかったと考えられる.

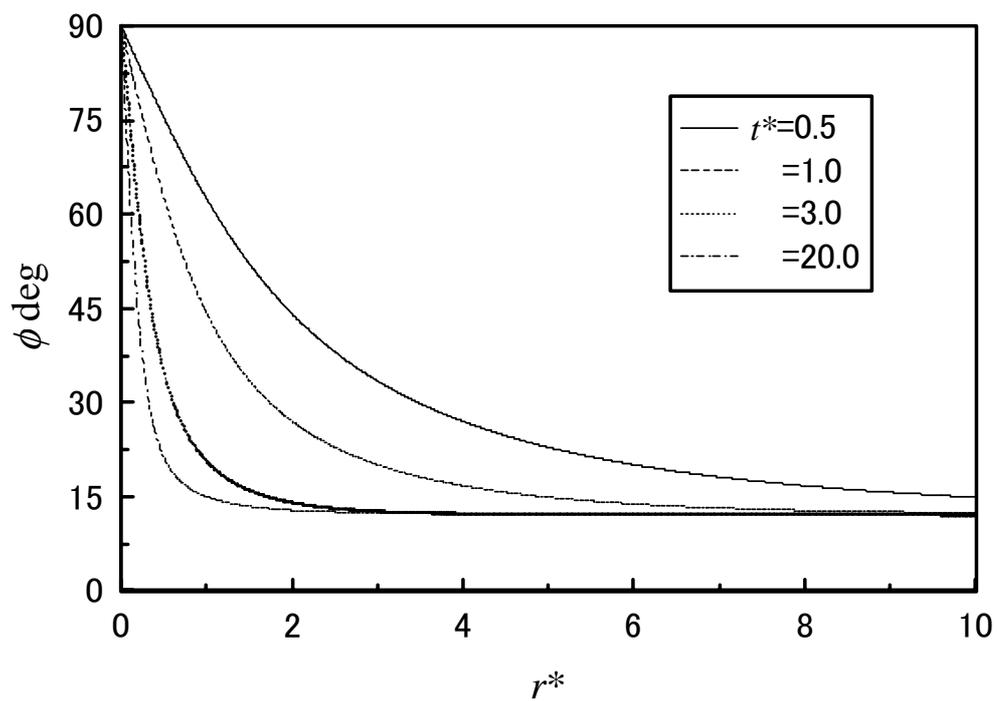


Fig A4-1. Director angle profiles of 5CB at Er=100

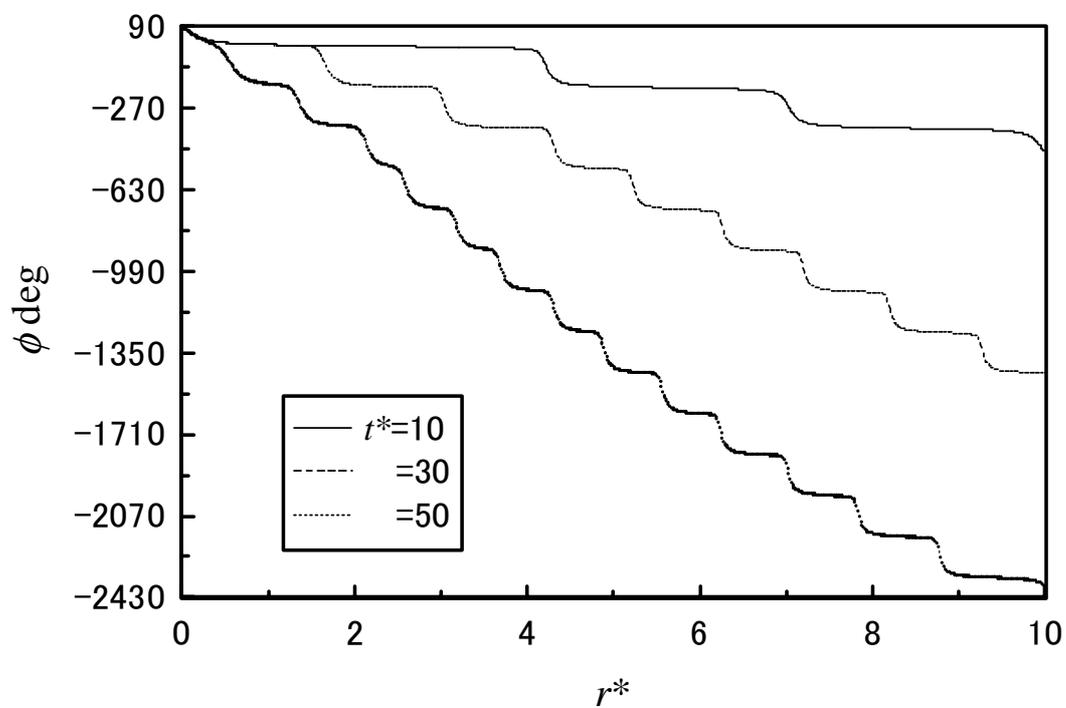


Fig A4-2 Director angle profiles of 8CB at Er=100

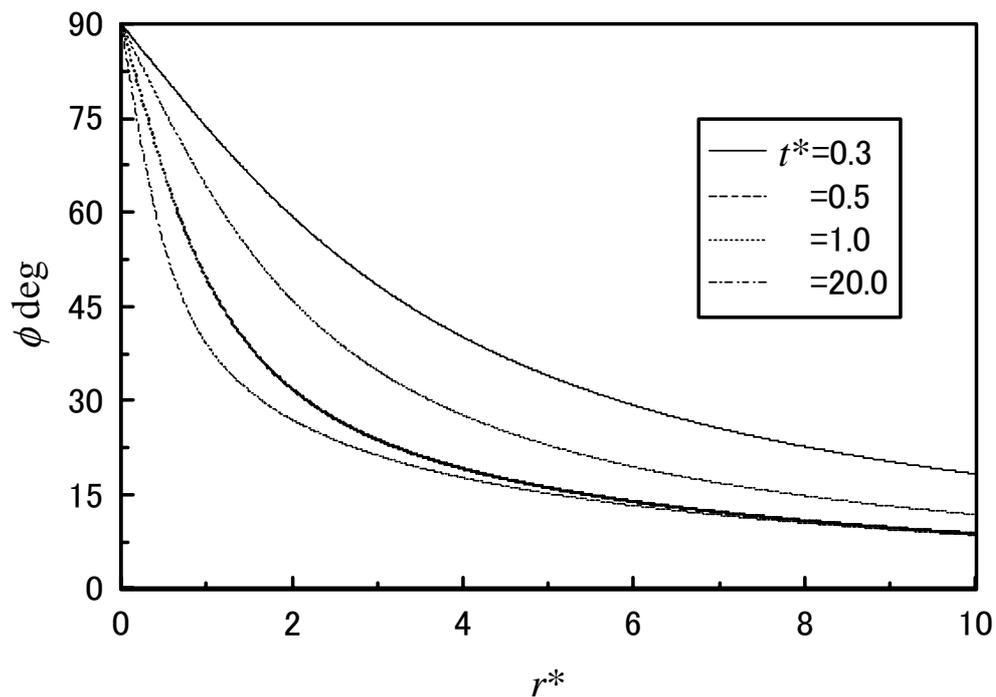


Fig A4-3. Director angle profiles of 8CB at Er=10

図 A4-4 に計算から得られたデータをもとに円板の光の透過量を計算し Carlsson らの同心回転円板の実験を模した図を示す。用いた液晶は 8CB，エリクセン数は 100 であり，タンプリングの発生が確認された図 A4-2 に示した計算と同じ条件である。時間の経過と共に同心円が発生し円板の中心方向に移動し，外側から次の同心円が発生している。

また，図 A4-4 の $t^* = 10, 30, 50$ の図での同心円の数および半径方向の位置は図 A4-2 の対応する時刻の分布でのタンプリングの発生している回数および発生箇所一致する。

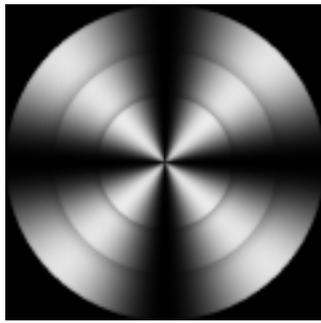
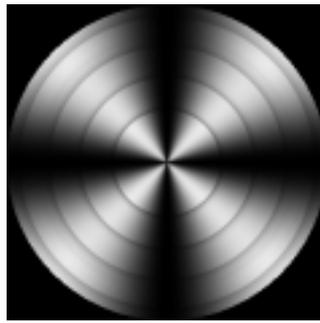
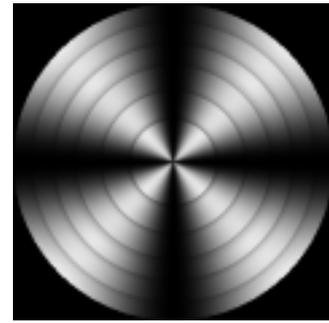
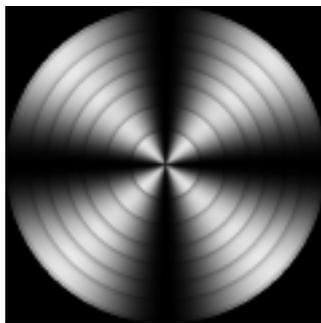
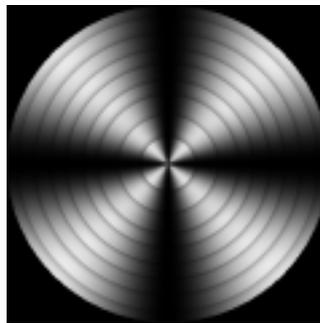
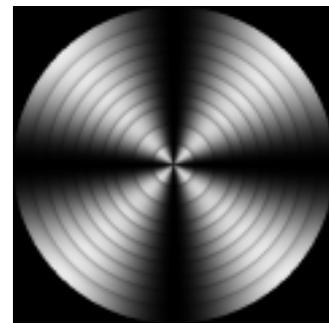
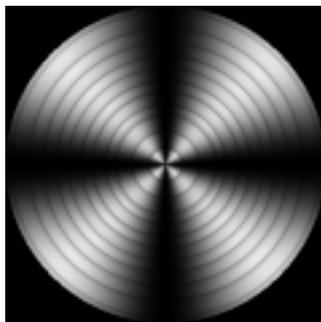
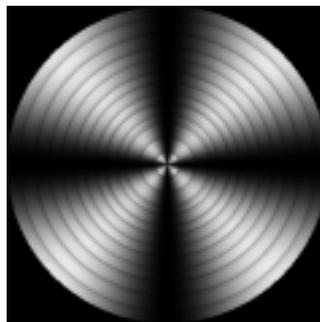
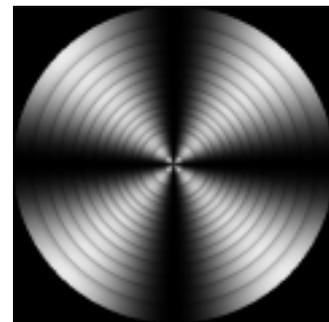
 $t^* = 10$  $t^* = 15$  $t^* = 20$  $t^* = 25$  $t^* = 30$  $t^* = 35$  $t^* = 40$  $t^* = 45$  $t^* = 50$

Fig A4-4. Figures of concentric circular pattern made from simulation results

A5 結言

本研究ではネマティック液晶の同心回転円板間流れの数値シミュレーションを、ネマティック液晶の連続体理論を用いて行った。半径方向には速度は直線分布、ディレクタはせん断断面内にのみ存在すると仮定し、基礎式を円筒座標系にて展開し円周方向を一様として2次元数値シミュレーションを行った。

円板間にはアライニングネマティックとタンプリングネマティックの2種類の液晶を用いてそれぞれについてシミュレーションを行った。特にタンプリングネマティックを用いたシミュレーションでは、Carlsson らの実験の結果に相当する結果を数値シミュレーションから得ることができた。

参考文献

- (1) F. M. Leslie., Arch. Ration. Mech. Anal., **28**, (1968), 265.
- (2) 蝶野成臣, 辻知宏, 日本液晶学会, **3**, 2, (1999), 107
- (3) 福田敦夫, 竹添秀男, 強誘電性液晶の構造と物性, (1990), 22, コロナ社.
- (4) M. Doi., J. Polym. Sci. Polym. Phys. Ed, **19**, (1981) 229.
- (5) T. Tsuji., A. D. Rey., J. Non-Newt. Fluid Mech., **73**, (1997), 127.
- (6) F. M. Leslie., I. W. Stewart, M. Nakagawa., Mol. Cryst. Liq. Cryst., **198**, (1991), 443.
- (7) F. M. Leslie., Liq. Crystals, **14**, (1993), 121.
- (8) (3)の文献の p1.
- (9) 竹添秀男, 固体物理, **35**, 9, (2000), 137
- (10) S. P. A. Gill, F. M. Leslie., Liq. Crystals, **14**, (1993), 1905.
- (11) M. A. Osipov, T. J. Sluckin, E. M. Terentjev., Liq. Crystals, **19**, (1995), 197.
- (12) T. Carlsson, F. M. Leslie, N. A. Clark., Physical Review E, **51**, (1995), 4509.
- (13) 液晶便覧編集委員会, 液晶便覧, (2000), 60, 丸善株式会社.
- (14) 芝原靖司, 竹添秀男, 固体物理, **36**, 8, (2001), 497.
- (15) T. Carlsson, K. Skarp, Liq. Crystals. **1**, 5, (1986), 455.
- (16) T. Carlsson., Mol. Cryst. Liq. Cryst. **104**, (1984), 307.
- (17) G. Marrucci., F. Greco., Advances in Chemical Physics, **86**, (1993), 336 John Wiley & Sons.

謝辞

研究を遂行し、本論文を執筆するに際し、終始、多大かつ明瞭なるご指導を賜りました高知工科大学工学部知能機械システム工学科蝶野成臣教授、辻知宏助手に対し深く感謝を申し上げます。

また、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の皆様には日々ご援助、ご協力を賜りましたことを深く感謝いたします。

2002年2月