

1. 緒言

液晶製品の製造過程において液晶欠陥と呼ばれる液晶分子配向の乱れが生じ、製品の生産性や性能の低下に繋がっている。そのため、液晶欠陥の抑制や除去を目的とした研究が行われている。

液晶欠陥には配向状態によって様々な種類があり、その配向状態は欠陥強度によって表される。異符号の強度を持つ一対の液晶欠陥同士は互いに引き付け合い、最終的に消滅する性質を持つ。この液晶欠陥対消滅過程において液晶分子の配向状態の変化にともない、液晶分子が回転運動をするため流動が誘起されると推測される。

本研究では液晶欠陥対消滅過程における液晶分子の配向状態を土井理論による配向分布関数を用いて計算し、液晶欠陥対消滅が誘起する流動を明らかにする。

2. 基礎方程式

配向分布関数  $f^{(1)}$  の発展方程式、構成方程式、運動方程式、および連続の式は以下のように表される。

$$\frac{Df}{Dt} = \bar{D} \left( 1 - \frac{3}{2} \mathbf{S} : \mathbf{S} \right)^{-2} \nabla_{\mathbf{u}} \cdot \left( \nabla_{\mathbf{u}} f + \frac{f}{kT} \nabla_{\mathbf{u}} V \right) - \nabla_{\mathbf{u}} \cdot \left\{ f (\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{u} - \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{u}) \right\} \quad (1)$$

$$\boldsymbol{\tau} = 3ckT \left\{ \mathbf{S} + \frac{\delta}{3} - U \left\{ \mathbf{S} \cdot \mathbf{S} + \frac{\mathbf{S}}{3} - \mathbf{S} : \langle \mathbf{u}\mathbf{u}\mathbf{u} \rangle \right\} \right. \\ \left. - \frac{Ul_i^2}{24} \left[ \mathbf{S} \cdot \nabla^2 \mathbf{S} + \frac{1}{3} \nabla^2 \mathbf{S} - \langle \mathbf{u}\mathbf{u}\mathbf{u} \rangle : \nabla^2 \mathbf{S} \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{1}{4} \left\{ (\nabla \mathbf{S}) : (\nabla \mathbf{S})^T - \nabla \mathbf{S} : \mathbf{S} \right\} \right] \right\} \quad (2)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (3)$$

$$\rho \frac{D\mathbf{v}}{Dt} = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} \quad (4)$$

ここで、 $t$  は時間、 $\bar{D}$  は等方状態における回転拡散係数、 $\mathbf{S}$  は配向秩序パラメータテンソル、 $\nabla_{\mathbf{u}}$  は単位球面上の微分演算子、 $k$  はボルツマン定数、 $T$  は絶対温度、 $\boldsymbol{\kappa}$  は速度こう配テンソル、 $\mathbf{u}$  は着目した棒状の液晶分子に平行な単位ベクトル、 $\boldsymbol{\tau}$  は偏差応力テンソル、 $c$  は液晶分子の数密度、 $U$  はネマティックポテンシャル強度、 $l_i$  は棒状分子の相互作用代表長さ、 $\mathbf{v}$  は速度ベクトル、 $\rho$  は密度、 $p$  は圧力である。式(1)中の  $V$  は Marrucci-Greco ポテンシャルであり、

$$V = -\frac{3}{2} UKT \left( \mathbf{S} + \frac{1}{24} l_i^2 \nabla^2 \mathbf{S} \right) : \mathbf{u}\mathbf{u} \quad (5)$$

と表される。

3. 計算領域

本研究では図 1 に示すような一辺が長さ  $H$  である正方形領域を考え、領域内の  $P(0.25H, 0.5H)$  と  $Q(0.75H, 0.5H)$  に

異符号の強度を持つ一対の液晶欠陥を配置する

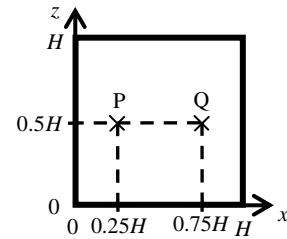


Fig.1 Computational domain

代表長さ  $H$ 、代表時間  $1/\bar{D}$  を用いて式(1)~(6)を無次元化し計算を行う。計算方法として、空間方向には中心差分を、時間方向には 4 次精度の Runge-Kutta 法を用いて離散化した。境界条件として周期境界条件を用いた。また、簡略化のために速度場が分子配向場へ与える影響は無視し、本計算を通して  $l_i^* (= l_i/H) = 0.2$  とした

4. 計算結果および考察

図 2(a), (b) と図 3(a), (b) に  $t^* (= t\bar{D}) = 0$  と 10 の時の分子配向場と配向秩序度の時間変化を示す。図 2 では配向方向が水平または垂直方向に向いている部分を黒く示している。図 3 では配向秩序度の低い部分を黒く示している。図より液晶欠陥同士は引き付け合い消滅していく様子が分かる。

図 4 に  $t^* = 10$  の時の速度場を示す。図より液晶欠陥対消滅過程で液晶流動が誘起され、欠陥の上下に渦状の流れが発生していることが分かる。渦状の流れには欠陥上下の対称性はあるが、左右の対称性は無いことが分かる。

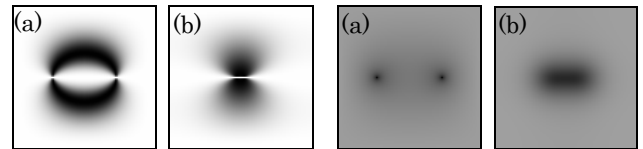


Fig.2 Molecular orientation

Fig.3 Orientational order

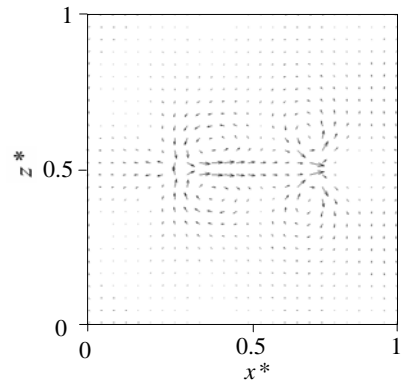


Fig.4 Velocity field ( $t^* = 10$ )

参考文献

(1) Doi, M., J. Poly, Sci, Phys. Ed., 19(1981), 229.