

1. 緒言

液晶は高強度、優れた寸法安定性を持ち、その特性を利用して飛行機の複合材料、自動車部品などに使用されている。これら液晶成形品の材料強度は製造過程の液晶分子の配向状態に大きく依存する。そのため、液晶分子の配向状態を知る事が重要である。

本研究では配向分布関数を用いて単純せん断流中における液晶分子の配向挙動の数値計算を行う。ただし、計算量を低減するために配向分布関数を球面調和関数の級数で近似する。計算精度は展開項数に依存するため、精度を上げると展開項数も増え計算時間も増加する。そこで、計算時間短縮と近似に必要な展開項数を検討する。

2. 土井理論

土井理論の配向分布関数 f の時間発展方程式は次のように表される⁽¹⁾。

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

ここで、 t は時間、 D は等方状態における回転拡散係数、 ∇_u は単位球面上での微分演算子、 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} は着目した一本の棒状の液晶分子に平行な単位ベクトルである。 \mathbf{S} は配向秩序パラメータテンソル、 V は平均場ポテンシャルで以下のように表される。

$$\mathbf{S} = \int_{|\mathbf{u}|=1} \left(\mathbf{u} \mathbf{u} - \frac{\boldsymbol{\delta}}{3} \right) f d\Omega = \left\langle \mathbf{u} \mathbf{u} - \frac{\boldsymbol{\delta}}{3} \right\rangle \quad (2)$$

$$V = -\frac{3}{2} U \mathbf{K} \mathbf{T} \mathbf{S} : \mathbf{u} \mathbf{u} \quad (3)$$

$\boldsymbol{\delta}$ は単位テンソル、 U は無次元のネマティックポテンシャル強度であり、式(2)中の

$$\int_{|\mathbf{u}|=1} (\dots) d\Omega$$

は単位球面上での面積分である。

3. 数値計算

本研究では液晶に単純せん断流を与えたときの数値計算を行う。また、配向分布関数 $f(\mathbf{u}; t)$ を球面調和関数 $Y_{lm}(\mathbf{u})$ の級数を用いて次式のように近似する。

$$f(\mathbf{u}; t) = \sum_{l=0}^{l_{\max}} \sum_{m=-l}^l C_{lm}(t) Y_{lm}(\mathbf{u}) \quad (4)$$

C_{lm} は係数、 l_{\max} は方位量子数の最大値で級数解の項数を決定するパラメータである。式(4)を式(1)に代入し、球面調和関数の正規直交性

$$\int Y_{lm}^* Y_{l'm'} = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (5)$$

を用いると、 C_{lm} の時間発展方程式を得る。 Y_{lm}^* は Y_{lm} の共役複素数である。

計算方法として積分には4次精度のRunge-Kutta法を用いた。時間刻み幅は $dt^* = 1/(1000\dot{\gamma}^*)$ とし、 $t^* = 80$ まで計算を行った。ただし、 $t^* (= tD)$ は無次元時間、 $\dot{\gamma}^* (= \dot{\gamma}/D)$ は無次元せん断速度である。

4. 結果と考察

単純せん断流中における液晶分子の平均的配向方向の挙動を計算し、定性的または定量的な近似精度として必要な l_{\max} の値と計算パラメータの関係を図1, 2に示す。各図の縦軸はネマティックポテンシャル強度 U 、横軸はせん断速度 $\dot{\gamma}^*$ である。図から、 U または $\dot{\gamma}^*$ の値が増加すると l_{\max} の値も増加することがわかる。これは U または $\dot{\gamma}^*$ が増加すると配向分布関数が急峻になるためである。そのため、 l_{\max} の値を増加して計算する必要があると考えられる。また、計算時間短縮を優先して計算をするならば図1を、近似精度を優先して計算をするならば図2を参考にすればよい。

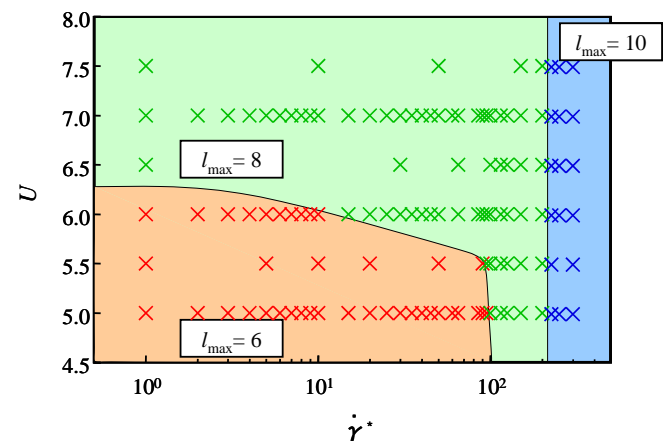


Fig.1 Values of l_{\max} for qualitative accuracy

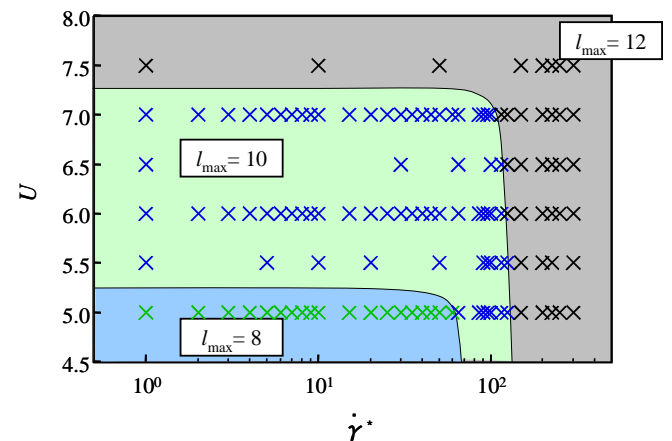


Fig.2 Values of l_{\max} for qualitative accuracy

参考文献

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