

1. 緒言

液晶は今までに液晶ディスプレイを中心とした製品に利用されてきた。しかし、ディスプレイ関連においての研究は既に一区切りつき、現在は駆動装置などその他の分野の研究開発が進められている。

液晶はフレクソエレクトリック効果⁽¹⁾と呼ばれる一種の圧電効果を示すことが知られている。フレクソエレクトリック効果は液晶分子の配向状態に依存して発現することが分かっている。また、液晶は液体であるため、複雑な形状や大変形する圧電デバイスに応用することが出来る。

これまで、液晶圧電効果に関する研究は静的な状態に限定されてきた。一方、液晶分子の配向状態は流動の影響を強く受けることが知られており、この性質を利用すると分子の配向状態を媒介とし流動によってフレクソエレクトリック効果を誘起することが可能であると考えられる。

本研究では、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行い、流動によるフレクソエレクトリック効果について吟味する。また、シミュレーション条件(平板間分割数 m)が結果に与える影響についても言及する。

2. 基礎方程式

本研究で用いた支配方程式は以下の通りである。

連続の式

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

運動方程式

$$\rho \frac{D\mathbf{v}}{Dt} = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} \quad (2)$$

ここで、 \mathbf{v} は速度ベクトル、 ρ は流体密度、 D/Dt は実質微分、 p は圧力、 $\boldsymbol{\tau}$ は偏差応力テンソルである。液晶における $\boldsymbol{\tau}$ は Leslie-Ericksen 理論⁽²⁾より以下のように与えられる。

$$\boldsymbol{\tau} = \alpha_1 \mathbf{nnn} \cdot \mathbf{D} \cdot \mathbf{n} + \alpha_2 \mathbf{N} \mathbf{N} + \alpha_3 \mathbf{N} \mathbf{n} + \alpha_4 \mathbf{D} + \alpha_5 \mathbf{nn} \cdot \mathbf{D} + \alpha_6 \mathbf{D} \cdot \mathbf{nn} - \frac{\partial F}{\partial \nabla \mathbf{n}} \cdot (\nabla \mathbf{n})^T \quad (3)$$

この時、 \mathbf{n} は液晶の平均的な配向方向を表す単位ベクトルでディレクタと呼ばれる。また、 \mathbf{D} は変形速度テンソル、 \mathbf{N} は流体とディレクタの相対角速度ベクトル、 $\alpha_1 \sim \alpha_6$ は Leslie 粘性係数であり、 F は液晶分子の空間的歪みによる弾性エネルギーで以下のように表される。

$$2F = K_1 (\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + K_2 (\mathbf{n} \cdot \nabla \times \mathbf{n})^2 + K_3 |\mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n}|^2 + A \{1 - (\mathbf{n}_A \cdot \mathbf{n}_w)^2\} \quad (4)$$

上式の A はディレクタの束縛強度、 \mathbf{n}_A は配向処理によるディレクタ、 \mathbf{n}_w は実際のディレクタを表しており、 $K_1 \sim K_3$ は Frank の弾性定数である。 $A \{1 - (\mathbf{n}_A \cdot \mathbf{n}_w)^2\}$ は上部平板面におけるディレクタにのみ適応される。上述の連続の式と運動方程式で速度場は決定されるが Leslie-Ericksen 理論において \mathbf{n} を導入しているため、 \mathbf{n} を表す以下の方程式が必要となる。

$$\mathbf{n} \times \left\{ \frac{\partial F}{\partial \mathbf{n}} - \nabla \cdot \left(\frac{\partial F}{\partial \nabla \mathbf{n}} \right) + (\alpha_3 - \alpha_2) \mathbf{N} + (\alpha_6 - \alpha_5) \mathbf{D} \cdot \mathbf{n} \right\} = \mathbf{0} \quad (5)$$

液晶の配向場に歪みを与えることによって発生する分極値は次の式で与えられる。

$$\mathbf{P}_f = e_{11} \mathbf{n} (\nabla \cdot \mathbf{n}) + e_{33} (\nabla \times \mathbf{n}) \times \mathbf{n} \quad (6)$$

ここで e_{11} , e_{33} はフレクソエレクトリック係数⁽³⁾である。

3. 数値計算

上部平板の速度 U 、代表粘性係数 $\gamma_1 (= \alpha_3 - \alpha_2)$ 、代表弾性係数 $\bar{K} (= (K_1 + K_2 + K_3)/3)$ 、平板間隔 H を使って上述の基礎式の無次元化を行う。その結果、 Er (粘性力と弾性力の比)と Ae (壁面におけるディレクタの束縛力と弾性力の比)の 2 つの無次元数が現れる。 Er を変えることは上部平板面の移動速度、 Ae は壁面配向束縛力を変化させることにつながるが、本研究では Er , Ae 共に 100 として数値シミュレーションを行った。

図 1 は座標系および計算領域を表す。境界条件として上部平板においては弱固定配向、下部平板においては強固定配向とした。初期条件としてディレクタは計算領域全体にわたって $\mathbf{n} = (1, 0, 0)$ とした。そして、下部平板を固定して上部平板を速度 U で x 方向に移動させ、平行平板間に封入した液晶にせん断流れを与えた。

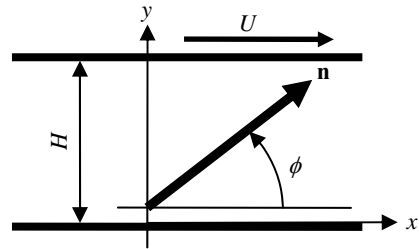


Fig.1 Flow geometry and coordinate systems

4. 計算結果及び考察

図 2 は y 方向分極値の平板間積分量 $\langle P_{fy}^* \rangle$ の無次元時間変化を平板間分割数ごとに示したものである。図 2 より、平行平板間せん断流れによって分極が発生することがわかる。また、平板間分割数が減少するにつれて分極値が最大となる時間に遅れが生じる。これにより、平板間分割数による計算誤差への影響が大きいことが考えられる。そのため、今後は計算誤差の少ない平板間分割数を求める必要がある。

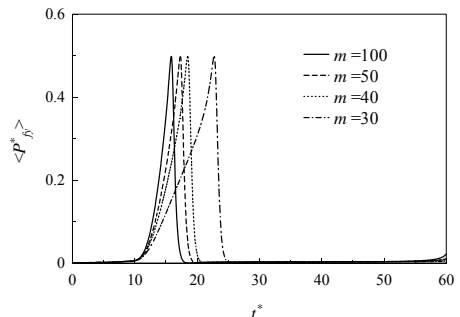


Fig.2 Behavior of flexoelectric polarization

文献

(1) 尾崎正則, 吉野勝美, フレクソエレクトリック効果, 液晶, 6, (2002), 22.
 (2) F.M. Leslie, Arch. Ration. Mech. Anal., 28(1968), 265.
 (3) T. Takahashi, et al. Jpn.J.Appl.Phys., 37(1998), 1865.