

1. 緒言

これまでに液晶のフレクソエレクトリック効果を利用した液晶圧電デバイスの実現の可能性を模索するため、平行平板間せん断流れにおける液晶分子のタンブリング挙動が数値計算により確認されている<sup>(1)</sup>。しかし、これまでの研究は液晶分子の初期配向状態が平行配向に限定されている。そこで平行配向以外の初期配向状態が液晶分子の挙動にどのような影響を及ぼすかについて調べる。

本研究では初期配向状態に着目し、ねじれ配向が液晶分子の挙動にどのような影響を及ぼすか Leslie-Ericksen 理論<sup>(2)</sup>を用いた数値計算によって明らかにする。

2. 基礎方程式

本研究で用いた支配方程式を以下に示す。

・連続の式

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \tag{1}$$

・運動方程式

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

・偏差応力テンソル

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

・Frankの自由エネルギー

$$2F = \{K_1(\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + K_2(\mathbf{n} \cdot \nabla \times \mathbf{n})^2 + K_3|\mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n}|^2\} \tag{4}$$

ここで、 $\mathbf{v}$ は速度ベクトル、 $\rho$ 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、Leslie-Ericksen 理論によって表される。 $\mathbf{n}$ は液晶分子の平均的な配向方向を表すディレクタと呼ばれる単位ベクトル、 $\alpha_i (i=1\sim6)$ はLeslie粘性係数、 $\mathbf{D}$ は変形速度テンソル、 $\mathbf{N}$ はディレクタと流体の相対角速度ベクトル、 $F$ は液晶分子の空間的歪みによる液晶分子場の弾性エネルギーである。 $K_1$ はディレクタの空間広がり、 $K_2$ はねじれ、 $K_3$ は曲がりに関する弾性定数である。また、Leslie-Ericksen 理論では液晶の分子配向を表す単位ベクトル $\mathbf{n}$ 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。

・角運動方程式

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

3. 数値計算

図1(a)に本研究で用いた流れ領域および座標系(x,y,z)を、図1(b)にねじれ配向を示す。平行平板間に液晶を充填し、上部平

板を移動させることで液晶分子配向場にせん断流れを与える。この場合、速度ベクトルは、 $\mathbf{v}=(v_x,0,0)$ である。境界条件として上部平板に $\mathbf{v}=(V,0,0)$ 、下部平板には $\mathbf{v}=(0,0,0)$ の速度ベクトルを与える。 $H$ は平板間隔で、無次元数 $H=1$ で固定する。上部平板面のディレクタは $\mathbf{n}=(n_x, n_y, n_z)$ を、下部平板面のディレクタは $\mathbf{n}=(1,0,0)$ を与える。数値計算として、空間方向の離散化には2次精度の中心差分法を、時間方向には2次精度のルンゲ・クッタ法を用い、時間ステップは $\Delta t=1.0 \times 10^{-8}$ とした

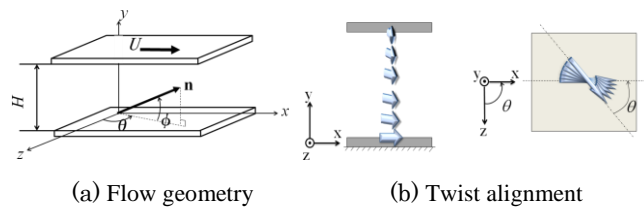
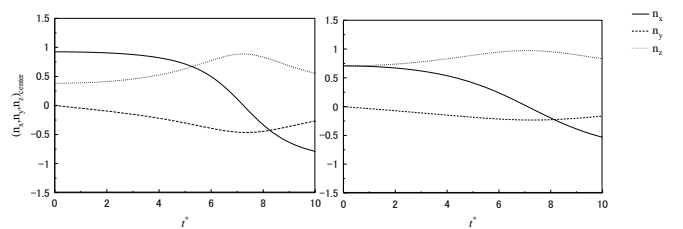


Fig.1. Coordinate systems

4. 計算結果および考察

図2にEr=1000 および上部平板面のディレクタ配向角(a) 45° (b) 90°に関する平板間中心部におけるディレクタの各成分(x,y,z)の時間変化を示す。横軸は無次元時間  $t^*$ 、縦軸はディレクタの各成分(x,y,z)である。図2(a)のx成分に着目すると、 $t^*=0\sim5$ にかけて緩やかに減少しているが、 $t^*=5\sim9$ にかけて急激に減少し、その後は定常に至る傾向がある。それに対し図2(b)のx成分は $t^*=0\sim10$ にかけて急激な減少はなく、緩やかに減少している。二つの結果は初期配向状態のみが異なることから、ねじれ配向がディレクタ挙動に大きく影響を及ぼしたことが分かる。



(a) Director orientation angle 45° at upper plate plane (b) Director orientation angle 90° at upper plate plane

Fig.2. Evolution of director components at  $H/2$  for  $Er=1000$

文献

- (1) 例えば、前田昭廣、液晶の圧電効果を利用したデバイスに関する基礎研究、高知工科大学、学士論文、(2004)
- (2) Chandrasekhar, S., 液晶の物理学, (1995), pp96-131, 吉岡書店