

1. 緒言

液晶は、物質の状態であり、固体と液体の中間の状態を指す。固体の持つ異方性から、位置的な秩序は失っているが、液体の持つ流動性から、分子の方向はある程度揃っている。また、液晶を加熱し、相転移温度に達した場合、液晶分子の配向は秩序を失い、液晶相から等方相へと相転移する。相転移時に、液晶相と等方相との間に相界面を発生させることができる。発生した相界面は表面張力である界面力を持ち、界面力によって微粒子を動かすことができる。本研究室では、液晶一等方相界面を利用したデバイスの開発が進められてきた。しかしながら、そのデバイスを最適駆動させるためのパラメータは、未知な部分が多く、本研究では、そのデバイスの最適駆動のため、温度勾配によって液晶 - 等方相界面がどのような挙動を示していくかを数値計算で検証した。

2. 基本式及び数値計算

基本式は、液晶の解析などでよく利用される Landau-deGennes の自由エネルギー式を利用する、自由エネルギー E は(1)式で与えられる。

$$E = E_0 + C_1 \text{tr}(\mathbf{S} \cdot \mathbf{S}) + C_2 \text{tr}(\mathbf{S} \cdot \mathbf{S} \cdot \mathbf{S}) + C_3 \text{tr}(\mathbf{S} \cdot \mathbf{S} \cdot \mathbf{S} \cdot \mathbf{S}) + \frac{L_1}{2ckT} (\nabla \mathbf{S}) : (\nabla \mathbf{S})^T + \frac{L_2}{2ckT} (\nabla \cdot \mathbf{S}) \cdot (\nabla \cdot \mathbf{S}) \quad \dots (1)$$

ここで、 L_1 , L_2 はランダウ係数、 c は液晶分子の数密度、 k はボルツマン定数、 T は温度、 \mathbf{S} は 2 階の秩序パラメータテンソルであり、(2)式で与えられる。

$$\mathbf{S} = S(\mathbf{nn} - \frac{\delta}{3}) \quad \dots (2)$$

と定義される。 \mathbf{n} は、棒状分子に平行な単位ベクトル、 δ は、単位テンソルである。式(1)のコヒーレンス長 C_1 , C_2 , C_3 は、Maier-Saupe 理論より、(3)で与えられる。

$$C_1 = 1 - \frac{U}{3}, C_2 = \frac{U}{3}, C_3 = \frac{U}{4} \quad (3)$$

U はネマティックポテンシャルエネルギー強度、従って、秩序テンソルパラメータ \mathbf{S} の時間発展方程式は、(4)で与えられる。

$$\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial t} = -\frac{6D}{(1-3\mathbf{S}:\mathbf{S}/2)} \{ (1-\frac{U}{3}) \mathbf{S} - U [\mathbf{S} \cdot \mathbf{S} - \frac{1}{3} (\mathbf{S}:\mathbf{S}) \mathbf{I}] + U (\mathbf{S}:\mathbf{S}) \mathbf{S} \} + \frac{L_1}{\eta} \nabla^2 \mathbf{S} + \{ \nabla(\nabla \cdot \mathbf{S}) + [\nabla(\nabla \cdot \mathbf{S})]^T - \frac{2}{3} \text{tr}[\nabla(\nabla \cdot \mathbf{S})] \mathbf{I} \} \quad \dots (4)$$

η は、粘性係数であり、ここからスカラーの秩序パラメータ S の発展方程式は、式(2)と式(4)より、テンソル秩序パラメータにおける発展方程式から導かれ、次のように表される。

$$\begin{aligned} \frac{\partial S}{\partial t} &= \frac{3}{2} \mathbf{n} \cdot \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial t} \mathbf{n} \\ &= -2D \text{tr} S (S - \frac{1}{4} + \frac{1}{4} \sqrt{9 - \frac{24}{U}}) (S - \frac{1}{4} + \frac{1}{4} \sqrt{9 - \frac{24}{U}}) \\ &\quad + (L_1 + \frac{7}{12} L_2 + \frac{1}{4} L_2 \cos 2\varphi - \frac{1}{2} L_2 \cos^2 \varphi \cos 2\theta) \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \\ &= f(S) + D \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \end{aligned} \quad (5)$$

D は、回転拡散係数である。さらに、平衡状態での秩序度を S_{eq} とし、境界条件 $S(-\infty, t) = 0$ および $S(+\infty, t) = S_{eq}$ が与えられた温度の下での界面の移動速度 V が以下のように求められる。

$$V = \sqrt{L_1 + \frac{7}{12} L_2 + \frac{1}{4} \cos 2\varphi^2 - \frac{1}{2} L_2 \cos^2 \varphi \cos 2\theta} \left(\frac{1}{4} - \frac{3}{4} \sqrt{9 - \frac{24}{U}} \right) \quad (6)$$

3. 結果および考察

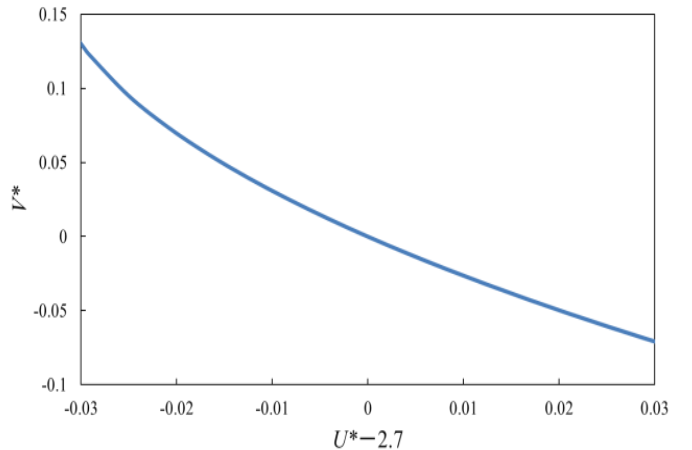


Fig.1 Theoretical result of interface velocity

左側を液晶一等方相転移温度以下に、右側を相転移温度以上に設定し、液晶セル内に液晶相領域と等方相領域を作り出す。図の縦軸は無次元の界面移動速度、横軸は相転移が起こるポテンシャル強度との差分である。相転移ポテンシャル強度から離れるほど界面の移動速度が増加することが分かる。

文献

P. G. de Gennes and J. Prost. The physics of liquid crystals. (1993)