

# 卒業論文要旨 等方-ネマチック液晶相界面挙動の数値シミュレーション

流体力学研究室

西木彰杜

## 1. 緒言

現在,工業製品を小型化するために液晶性材料を利用したアクチュエーターやマニピュレータなどが研究されている.液晶性材料は温度勾配を与えると液晶相と等方相を共存させることができ,相転移温度付近で相界面が発生する.相界面には界面力が存在し,界面力により等方相側に存在する微粒子を駆動できることが実験により確認されている.本解析では相界面の界面挙動を求め,微粒子を含まない単純な計算領域において数値シミュレーションを行い,等方-ネマチック液晶相界面の移動特性を求め.

## 2. 基礎式および解析方法

液晶性材料の状態は温度に依存するため液晶セルに温度勾配を与え,液晶性材料の状態を分子の配向度合いを表す秩序パラメータ  $S$  で求めた.  $S$  は等方相では分子配向の秩序がないため  $S=0$  に,液晶相ではある程度の分子配向の秩序があるので  $0 < S < 1$  となる.秩序パラメータの算出には式(1)のテンソル秩序パラメータの時間発展方程式を用いる.

$$\frac{\partial S_{ij}}{\partial t} = \frac{-6D_r}{\left(1 - \frac{3}{2}S_{ij} \cdot S_{ij}\right)^2} \times \quad (1)$$

$$\left\{ \left(1 - \frac{U}{3}\right) S_{ij} - U \left[ S_{ij} \cdot S_{ij} - \frac{1}{3} (S_{ij} : S_{ij}) \delta_{ij} \right] + U (S_{ij} : S_{ij}) S_{ij} \right\} + \frac{L_1}{\eta} \nabla^2 S_{ij} + \frac{L_2}{2\eta} \left\{ \nabla (\nabla \cdot S_{ij}) + [\nabla (\nabla \cdot S_{ij})]^T - \frac{2}{3} \text{tr}[\nabla (\nabla \cdot S_{ij})] \delta_{ij} \right\}$$

ここで,  $D_r$  は回転拡散係数,  $L_1, L_2$  は定数,  $\eta$  は粘度,  $U$  はネマチックポテンシャル強度と呼ばれ  $U=3T/T_c$  で  $T$  はセル内温度,  $T_c$  は相転移温度である.液晶セル内の温度変化には式(2)の

$$\frac{\partial T}{\partial t} = k \left( \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) \quad (2)$$

の熱拡散方程式を用いる.  $k$  は熱拡散係数である.

本解析では,式(1)より相界面の挙動を調べるため,図 1(a)に示す 2 枚のガラス平板に挟まれた液晶セルに温度勾配を与え,温度差が相界面挙動に与える影響と,図 1(b)のようにガラス側面にラビング処理で液晶分子配向を固定した場合のガラス側面の配向が相界面挙動に与える影響を数値シミュレーションで求める.液晶セル内の初期条件として,液晶セル内温度を  $35.5^\circ\text{C}$ ,左端を冷熱源とし  $20^\circ\text{C}$ ,ガラス平板側面の液晶分子の角度  $\theta$  を  $0^\circ$  する.温度差の影響は冷熱源を  $10^\circ\text{C}$  とした場合の界面の移動速度を求め,分子配向の影響は  $\theta$  を  $30, 60, 90^\circ$  とした場合の移動速度を求め比較し,考察を行う.

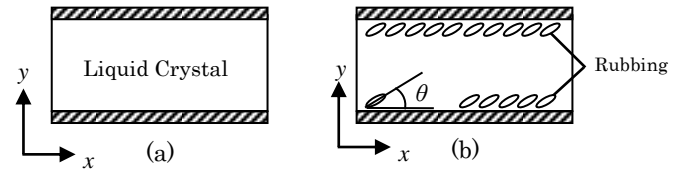


Fig.1 Liquid Crystal cell model

## 3. 解析結果

図 2 に冷熱源を変更した 10 秒間の速度と時間の関係を示す. 図 2 より温度差が大きいほど界面の移動速度が速くなることが確認できる.図 3 にガラス側面の配向を変更した,結果速度の差が大きかった 7 秒までの速度と時間の関係を示す.図 3 より液晶分子がガラス平板に対し,水平に近いほど界面の移動速度が速くなる傾向が見られた.

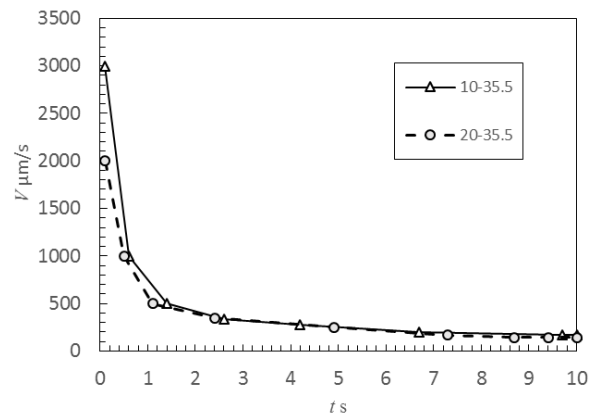


Fig.2 Velocity of the interface for temperature

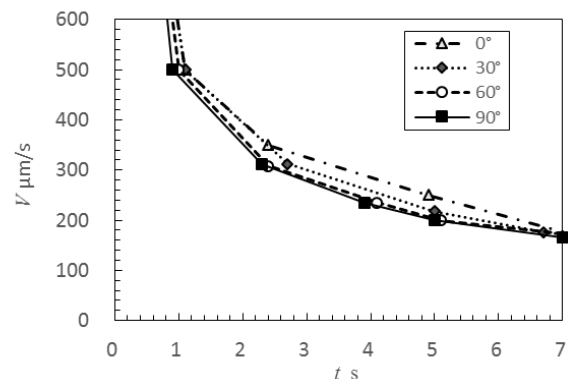


Fig.3 Velocity of the interface for molecular orientation

## 文献

- (1) 折原宏 (2004) 「液晶の物理」 内田老鶴圃, pp.1-35
- (2) 土井正夫 (2010) 「ソフトマターの物理」 岩波書店