スメクティック液晶のせん断流れの2次元分子動力学シミュレーション

1. 緒言

現在、ディスプレイに使われている液晶はネマティック液 晶である.一方,液晶の他の種類として、スメクティック液 晶がある.図1にネマティック液晶とスメクティック液晶に おける分子配向状態を示す.図中の楕円は液晶を構成する棒 状分子を表す.ネマティック液晶とスメクティック液晶のど ちらも分子の向きは揃っているが、スメクティック液晶はさ らに層構造をもつ.⁽¹⁾

スメクティック液晶の分子配向特性および層構造を利用 することで、新たなデバイスの開発につながると期待できる.

本研究では、スメクティック液晶にせん断流れを印加した 場合の分子動力学シミュレーションを行い、せん断流れが スメクティック液晶特有の分子配向場の層構造に及ぼす影 響を調べる.





(b) Smectic liquid crystal

Fig1. Schematics of molecular configurations in nematic liquid crystal and smectic liquid crystal

2. 基礎式および計算条件⁽²⁾

ここで,

本研究では、運動方程式および角運動方程式を用いて棒 状の液晶分子の並進挙動および回転挙動を解析する.

$$m_I \frac{\mathrm{d}v_I}{\mathrm{d}t} = -\sum_J \frac{\partial U_{\mathrm{GB}}}{\partial r_I} \tag{1}$$

$$I\frac{d\omega_I}{dt} = -\sum_I \hat{u}_I \times \frac{\partial U_{\rm GB}}{\partial \hat{u}_I}$$
(2)

Gay-Berne ポテンシャル UGBは次式で与えられる.

$$U_{\rm GB}(\hat{\boldsymbol{u}}_{l}, \hat{\boldsymbol{u}}_{J}, \hat{\boldsymbol{r}}_{lJ}) = 4\varepsilon(\hat{\boldsymbol{u}}_{l}, \hat{\boldsymbol{u}}_{J}, \hat{\boldsymbol{r}}_{lJ}) \left\{ \left(\frac{\sigma_{0}}{R}\right)^{1/2} - \left(\frac{\sigma_{0}}{R}\right)^{6} \right\}$$
(3)

$$\varepsilon(\hat{\boldsymbol{u}}_{I}, \hat{\boldsymbol{u}}_{J}, \hat{\boldsymbol{r}}_{IJ}) = \varepsilon_0 \varepsilon_1^{\gamma} (\hat{\boldsymbol{u}}_{I}, \hat{\boldsymbol{u}}_{J}) \varepsilon_2^{\mu} (\hat{\boldsymbol{u}}_{I}, \hat{\boldsymbol{u}}_{J}, \hat{\boldsymbol{r}}_{IJ})$$
(4)

$$\varepsilon_1(\hat{\boldsymbol{u}}_I, \hat{\boldsymbol{u}}_J) = \left[1 - \chi^2 \left(\hat{\boldsymbol{u}}_I, \hat{\boldsymbol{u}}_J\right)^2\right]^{-\frac{1}{2}}$$
(5)

$$\varepsilon_{2} = 1 - \frac{\chi}{2} \left\{ \frac{(\hat{\boldsymbol{r}}_{IJ} \cdot \hat{\boldsymbol{u}}_{I} + \hat{\boldsymbol{r}}_{IJ} \cdot \hat{\boldsymbol{u}}_{J})^{2}}{1 + \chi(\hat{\boldsymbol{u}}_{I} \cdot \hat{\boldsymbol{u}}_{J})} + \frac{(\hat{\boldsymbol{r}}_{IJ} \cdot \hat{\boldsymbol{u}}_{I} - \hat{\boldsymbol{r}}_{IJ} \cdot \hat{\boldsymbol{u}}_{J})^{2}}{1 - \chi(\hat{\boldsymbol{u}}_{I} \cdot \hat{\boldsymbol{u}}_{J})} \right\}$$
(6)

$$\sigma(\hat{\boldsymbol{u}}_{I}, \hat{\boldsymbol{u}}_{J}, \hat{\boldsymbol{r}}_{LJ}) = \sigma_0 \left[1 - \frac{\chi}{2} \left\{ \frac{(\hat{\boldsymbol{r}}_{LJ} \cdot \hat{\boldsymbol{u}}_{I} + \hat{\boldsymbol{r}}_{LJ} \cdot \hat{\boldsymbol{u}}_{J})^2}{1 + \chi \, \hat{\boldsymbol{u}}_{I} \cdot \hat{\boldsymbol{u}}_{J}} \right. \right.$$

システム工学群航空宇宙工学専攻

流体工学研究室 1200022 石本 真輝

 $+\frac{(\hat{\boldsymbol{r}}_{IJ}\cdot\hat{\boldsymbol{u}}_{I}-\hat{\boldsymbol{r}}_{IJ}\cdot\hat{\boldsymbol{u}}_{J})^{2}}{1-\chi\,\hat{\boldsymbol{u}}_{I}\cdot\hat{\boldsymbol{u}}_{J}}\bigg]^{\frac{1}{2}}$ (7)

$$\chi = \frac{(1/d)^{-1}}{(1/d)^{2} + 1}$$
(8)

$$\chi = \frac{1 - (\varepsilon_{\rm E}/\varepsilon_{\rm S})^{\mu}}{1 + (\varepsilon_{\rm E}/\varepsilon_{\rm S})^{\frac{1}{\mu}}} \tag{9}$$

ただし、 \hat{u}_{l} は棒状分子の主軸方向の単位ベクトル、 \hat{r}_{IJ} は I 番目と J 番目の分子の重心を結ぶ単位ベクトル、 σ_{0} は分子の短軸直径、 $\varepsilon_{E}/\varepsilon_{S}$ はポテンシャル強度、l/dは棒状分子のアスペクト比、 μ 、 ν は分子の形状に関するパラメータを表す.

シミュレーションを行うにあたり、位置r,時間tおよび温度 Tの無次元化を次のように行った.

$$r = \sigma_0 r^*, t = \sqrt{\frac{m\sigma_0^2}{\varepsilon_0}} t^*, T = \frac{\varepsilon_0}{k_B} T^*$$
(11)

ここで, k_Bはボルツマン定数である.

数値積分には Leap-frog 法を, せん断流れの印加には Lees-Edwards 境界条件および SLLOD 法用いた. また,速度スケー リング法を用いて、温度補正を行う.

図 2 は棒状分子をランダムに配置した初期値から計算を 開始し,定常に至った後 ($t^*=1000$)の分子配向状態を表す. 計算条件は,棒状分子の数 144 個,セルの長さ $L^*=20$,温度 $T^*=1.0$,アスペクト比3である.図2より,スメクティック 液晶特有の層構造が再現できている.以降の計算では,図2 の状態を分子の初期配置として,せん断速度印加後の分子挙 動を調べる.



Fig.2 Equilibrium molecular configuration for $T^*=1.0$

3. 計算結果

図 3 の(a)~(h)は、せん断速度ÿ=0.5 および 5.0 を印加した ときの, t*=500 毎の分子の配向状態を表している. (a)~(d)に示すせん断速度ý=0.5 の場合,流れ方向に平行な分 子配向状態を維持したまま,層構造がせん断流によって時計 回りの回転挙動を示す. (e)~(h)のせん断速度 γ=5.0 の場合, 分子配向方向が流れ方向に対して大きな角度を持つととも に、分子配向場に大きな乱れが生じている.また、時間の経 過とともに層の向きが流れ方向と平行になるように変化し ていることが分かる.

図 4 はせん断速度ý=0.5 および 5.0 の場合の配向秩序度 S の時間変化である. $\dot{\gamma}$ =5.0の場合には, $\dot{\gamma}$ =0.5の場合と比べて, 時間に対する S の変動が大きく現れている. このことより, せん断流れが液晶分子配向状態を乱し,秩序度を低下させる 効果を持つことが分かる.一方, せん断速度ý=0.5 の場合, せ ん断速度印加直後にSは初期値(すなわち,平衡状態におけ る値)から増加し、ほぼ一定の値を保ち続ける.このことか



 $\overrightarrow{a} t^* = 500, \dot{\gamma} = 0.5$



(b) $t^* = 1000, \dot{\gamma} = 0.5$







Fig3. Molecular configurations under shear flows

ら低せん断速度領域では、 せん断流れは秩序度を上昇させる 効果を持つことが分かる. すなわち, せん断速度に依存して, せん断流れは秩序度の上昇と低下を引き起こす.

図 5 はせん断速度ý=0.5 および 5.0 の場合の, 平均分子配 向方向がx軸(流れ方向)となす角度 θ の時間変化である. 図より、 $\dot{\gamma}$ =0.5 の場合には θ の変化はほとんど見られない. 一方, せん断速度 γ=5.0 の場合には, 200≤t*≤400 において θ の急激な増加を示した後、一定値に至る.図3に示したよう に、せん断速度ý=5.0の場合には層の方向が流れ方向に沿う 傾向がみられる.スメクティック液晶において、分子の配向 方向と層の方向は直交関係にあり, せん断速度の印加によっ て層の向きが変化したことが, 平均配向角 θ の増加につなが ったと考えられる.



Fig4. Molecular orientation order parameters as a function of time



Fig5. Averaged molecular orientation angles as a function of time

4. 結言

本研究では、スメクティック液晶にせん断流れを印加し、 せん断流れがスメクティック液晶特有の分子配向場の層構 造に及ぼす影響を調べた.

 ・高せん断速度下において、スメクティック液晶の層の向き は流れ方向に沿う傾向がある.

 ・低せん断速度領域では、分子の配向秩序度は平衡状態の値 よりも高くなる一方,高せん断速度領域では配向秩序度は平 衡値よりも低下する.

 ・高せん断流れは、分子の平均配向角を増加させる作用を持 つ.

文献

- 折原 宏, "材料学シリーズ 液晶の物理" P15~P20 (1)
- 森 教安, 森本 淳, 中村 喜代次, "液晶性分子の定 (2)常せん断流れに対する分子動力学シミュレーション", 日本機械学会論文集 B 編, Vol. 62, No. 596 (1996), pp. 1288-1293.