

# 実験と数値計算を併用した液晶弾性定数の評価

## Evaluation of liquid crystal elastic constants by combining the experimental and computational results

知能機械工学コース

流体工学研究室 1245007 大熊 風葵

### 1. 緒言

LCD は様々な研究が行われており、現在までに進化を遂げてきた。しかし、近年、有機 EL の登場やパネル製造技術の成熟化に伴い、液晶利用の多様化が求められる時代となり現在、液晶の力学的性質を利用した無定形マニピュレータやアクチュエータとしての研究がなされている。

液晶を駆動源として使用するに当たり、電場応答性や背流効果などが活用されているがその利用には液晶のパラメータを理解することは必要不可欠である。特に背流効果に関しては液晶の配向が大きく関わっており、それを決定する要素の一つとして液晶弾性定数がある。

液晶弾性定数計測法の一つとして透過光の波長を計測する手法などがあるが光の波長を計測する機械は非常に高価であり、導入にはハードルが高い。

今後、液晶研究が進む中で液晶弾性定数を安価かつ手軽に求める手法の確立は必須であり、精密な液晶制御のために重要な要素の一つであると言える。

本研究では数値シミュレーションによる透過光と実験による透過光を比較することで波長計などの機材を用いず安価に変数である弾性定数を明らかにすることを目的とする。

### 2. 計算条件

今回実験で用いる液晶セルは図 1 のような構成になっている。液晶層は厚さ 16 $\mu\text{m}$ 、幅 1300 $\mu\text{m}$ 、ベタ基盤厚さは 700 $\mu\text{m}$  となっている。また、下部から光を照射する際、実験装置の下部と上部に直行した偏光板を設けることで液晶層を透過した光の位相が影響を受け、液晶の配向によって異なる光のパターンを確認できるようにする。

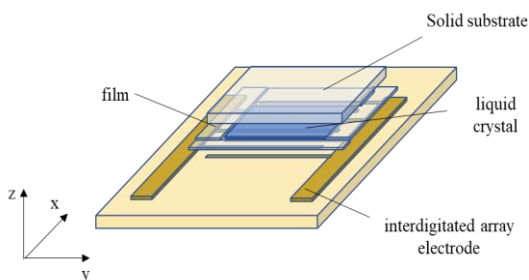


Figure1 interdigitated array electrode

ベタ基盤、櫛形電極表面は垂直に配向処理がなされており、それに伴い液晶層は垂直に配向している。

$$\begin{aligned} & \sin 2\theta \left\{ (E_x^2 + E_y^2) \Delta \varepsilon + (K_1 - K_3) \left( \left( \frac{\partial \theta}{\partial y} \right)^2 - \left( \frac{\partial \theta}{\partial x} \right)^2 + 2 \frac{\partial^2 \theta}{\partial x \partial y} \right) \right\} + \\ & \cos 2\theta \left\{ -2 E_x E_y \Delta \varepsilon - (K_1 - K_3) \left( \frac{\partial^2 \theta}{\partial y^2} - 2 \frac{\partial^2 \theta}{\partial x \partial y} - \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} \right) \right\} - \\ & (K_1 - K_3) \left( \frac{\partial^2 \theta}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} \right) = 0 \end{aligned} \quad (1)$$

式(1)は液晶弾性定数 $K_1, K_3$ の液晶が電場によってどれくらい傾くか計算する式である。

式(1)を用いて事前研究で櫛形電極に電圧を印加した際に生じる電場、及び液晶の配向はシミュレートされており、

図 2 に印加電圧 5V、液晶弾性定数  $K_1, K_2$  をそれぞれ  $6.37\text{e-}12, 8.6\text{e-}12$  としたときの計算結果を示す。

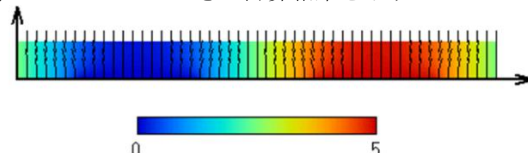


Figure2 Orientation field on interdigitated array electrode.5V

この結果を用いて液晶に光が入ったときの透過光強度を計算していくものとする。

光が液晶層を通過するときその透過光はネマチック液晶層を分割数回通過するとして扱う。その際の偏光はジョーンズ計算法を用いて計算する。

分割層ごとの偏光素子、ジョーンズベクトル  $\mathbf{W}$  は液晶の常光屈折率 $n_o$ 、プレチルト角が変化したときの異常光屈折率 $n_e(\theta)$ 、入射光の波長 $\lambda$ 、分割厚さ $\Delta d$ を用いて

$$\mathbf{W} = \begin{bmatrix} \exp\left(-\frac{i2\pi n_e(\theta)\Delta d}{\lambda}\right) & 0 \\ 0 & \exp\left(\frac{i2\pi n_o\Delta d}{\lambda}\right) \end{bmatrix} \quad (2)$$

と表される。また、 $n_e(\theta)$ は用いる液晶の常光屈折率 $n_o$ 、異常光屈折率 $n_e(\theta)$ 、入射光の角度 $\theta$ より

$$n_e(\theta) = \frac{n_e n_o}{\sqrt{n_e^2 \sin^2(\theta) + n_o^2 \cos^2(\theta)}} \quad (3)$$

となる。ジョーンズの計算法により偏光素子  $\mathbf{W}$  を透過した光波 $\begin{pmatrix} E'_x \\ E'_y \end{pmatrix}$ と入射光の光波 $\begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix}$ の関係は

$$\begin{pmatrix} E'_x \\ E'_y \end{pmatrix} = \mathbf{W} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix} \quad (4)$$

となる。これらの関係性を用いて実験装置下部から光を透過した際の透過光強度を計算する。

シミュレーションの結果と実験の結果を比較するために実験によって観測された光のパターンを使用する。

図 3 は印加電圧 6V で観測された光のパターンである。

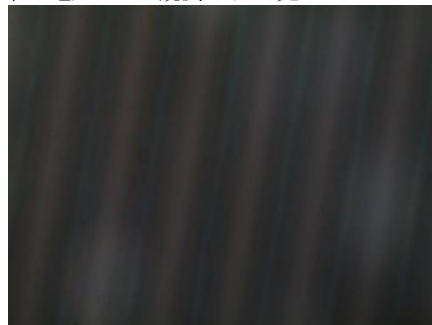


Figure3 The light pattern.6V.

本実験に用いたくし形電極セルは正極と負極が交互に並

んだ形状をしている。電極は幅  $50\mu\text{m}$ ，間隔  $50\mu\text{m}$ であることと，電極間が最も電場が強まり，透過光強度が増すことから画像の座標（ピクセル）と実際のサイズを対応させる。

実験環境が外光の入る状態であったため，入射光と出射光の強度を比較することが難しかったため，実験による透過光パターンとシミュレーションによる透過光パターンを形状に重点を置いて比較することとする。

比較は印加電圧ごとに実験結果とシミュレーション結果の平均値を一致させることで実験の透過光のパターンを透過光強度の値としておいた。

実験とシミュレーションの比較に当たり，フィッティングしたい対象モデルとデータの差を正負の扱いを無くすために二乗し，それらの合計であらわされ以下のようになる

$$\sum_{i=1}^n (y_i - f(x_i))^2 \quad (4)$$

この式を用いて実験とシミュレーション結果を比較，誤差を評価し，最も適切な弾性定数を求める。

弾性定数は  $K_1 = 4.37 \times 10^{-12}\text{N}$ ,  $K_3 = 6.6 \times 10^{-12}\text{N}$  から始め，それぞれ  $2.5 \times 10^{-13}$  刻みで増やしていき，

$K_1 = 8.37 \times 10^{-12}\text{N}$ ,  $K_3 = 10.6 \times 10^{-12}\text{N}$  になるまで調べる。

### 3. 計算結果

図 4 に印加電圧 6V で液晶弾性定数を変更しながらシミュレーションした結果と実験の値を比較したグラフを示す。

実験の結果とシミュレーションの結果のピーク位置はおよそ一致している。また，シミュレーション結果ではピーク減少時の傾きがなだらかになっている箇所があり，実験結果のグラフとの差異が確認できる。

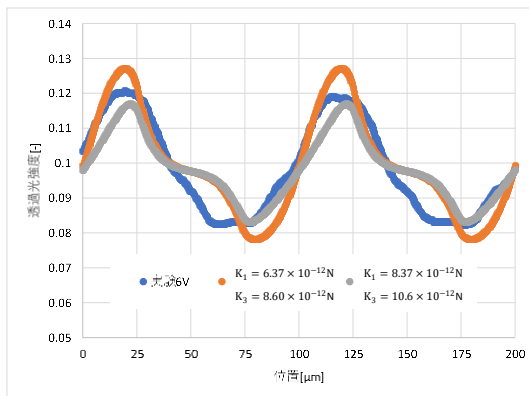


Figure4 Comparison between experiment and simulation

図 5 は液晶弾性定数ごとの残差平方和を示したグラフである。液晶弾性定数  $K_1 = 8.37 \times 10^{-12}\text{N}$ ,  $K_3 = 10.6 \times 10^{-12}\text{N}$  の時，残差平方和は最小値となっており，最も誤差が小さいことが分かる。今回用いた液晶では

液晶弾性定数  $K_1 = 6.37 \times 10^{-12}\text{N}$ ,  $K_3 = 8.6 \times 10^{-12}\text{N}$  が想定されている数値であり，この液晶弾性定数で最も誤差が少な

る結果が望ましい。しかし，液晶弾性定数が大きくなるほど誤差も小さくなるという結果になり，今回調べた範囲では実験に近いシミュレーションの結果を出すことができていない事がわかる

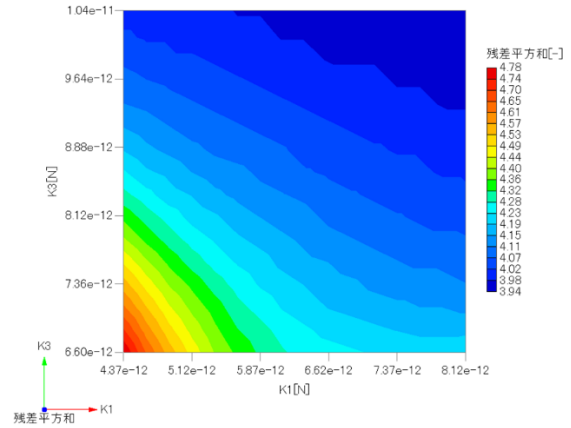


Figure 5 Liquid crystal elastic constants and residual sum of squares

### 4. 結言

今回調べた 6V の印加電圧においては液晶弾性定数の組み合わせは， $K_1 = 8.37 \times 10^{-12}\text{N}$   $K_3 = 10.6 \times 10^{-12}\text{N}$  の時に残差平方和 3.94 と最小になり，最も誤差なく実験に近い値をシミュレーションすることができるという結果になった。

今回求められた液晶弾性定数は透過光強度の計算と実験の数値の扱いが問題となり正確な結果になったとは言えない。実験の観測結果では入射光の大きさを定めることが難しかったため，観測される光のパターンに着目し，誤差の少ない液晶弾性定数を求めたが，実験によって観測できる透過光パターンとシミュレーションによって観測できる透過光パターンに大きな齟齬があったため，実験結果から透過光強度を評価する手法とシミュレーションを現実に取り得る結果に近づける正確な計算手法が必要になってくる。

本研究のシミュレーションで計算の関係上無視した要素の一つにべた基盤のような観測までに液晶層以外の透過光強度に影響を与える要素がある。これらについて細かく考慮することで正確な液晶弾性定数の決定に近づけることができるだろう。

今回は想定される液晶弾性定数が分かっていたためその液晶弾性定数の値周辺について調べることでより実験の透過光強度に近くなる液晶弾性定数を決定したが，液晶弾性定数が不明の場合，液晶弾性定数の調査範囲も拡大するためシミュレーションにかかる時間も増加していく。

### 文献

- (1) 文献液晶便覧編集委員会，”液晶便覧”，丸善株式会社，2000/10/30
- (2) 折原 宏，”材料学シリーズ液晶の物理”，株式会社内田老鶴園，2004/04/15
- (3) 株式会社イーエッチシー，“EHC セル クシ型電極セル”，HP
- (4) 金原 繁，梶谷 剛，濱島 高太郎，塚田 啓二，杉本 秀彦，“専門基礎ライブラリー電磁気学”，実教出版株式会社，2018/4/10
- (5) 山口 留美子，“液晶科学実験講座第 18 回 表計算ソフトを用いた液晶セルの光学シミュレーション(その 2)”，液晶：日本液晶学会誌 Ekisho 10(2)，2006/04/25
- (6) 山口 留美子，“液晶科学実験講座第 18 回 表計算ソフトを用いた液晶セルの光学シミュレーション(その 1)”，液晶：日本液晶学会誌 Ekisho 10(2)，2006/04/25