

平成 17 年 3 月 修了  
博士 (工学) 学位論文

スメクティック C 液晶の流動の数値シミュレーション

Numerical Simulation of Smectic C Liquid Crystalline Flow

平成 16 年 12 月 17 日  
高知工科大学大学院 工学研究科 基盤工学専攻

学籍番号 1066016

寺田 敦史

Atsushi Terada



## 目次

|                    |    |
|--------------------|----|
| 目次                 | 3  |
| 要旨                 | 7  |
| 第1章 序論             | 16 |
| 1・1 研究の背景          | 16 |
| 1・2 液晶の分類          | 17 |
| 1・2・1 ネマティック液晶     | 17 |
| 1・2・2 コレスティック液晶    | 18 |
| 1・2・3 スメクティック液晶    | 19 |
| 1・3 スメクティック液晶の応用   | 20 |
| 1・3・1 強誘電性液晶       | 21 |
| 1・3・2 液晶ディスプレイ     | 21 |
| 1・4 研究の目的          | 24 |
| 1・5 本論文の構成         | 24 |
| 参考文献               | 25 |
| 第2章 層を固定した場合の計算    | 26 |
| 2・1 平行平板間せん断流れ     | 26 |
| 1 緒言               | 26 |
| 2 基礎式及び座標系         | 27 |
| 2・1 層とディレクタ        | 27 |
| 2・2 基礎式            | 28 |
| 2・3 座標系            | 29 |
| 2・4 層配置            | 30 |
| 2・4・1 Planar 配置    | 31 |
| 2・4・2 Bookshelf 配置 | 31 |
| 3 数値計算             | 32 |
| 3・1 数値計算           | 32 |
| 3・2 物性値            | 32 |

|         |                                    |    |
|---------|------------------------------------|----|
| 4       | 計算結果及び考察                           | 33 |
| 4・1     | Planar 配置                          | 33 |
| 4・2     | Bookshelf 配置                       | 35 |
| 4・2・1   | 単純せん断流中の定常解                        | 35 |
| 4・2・2   | $ \lambda_2  \geq  \lambda_5 $ の場合 | 36 |
| 4・2・3   | $ \lambda_2  <  \lambda_5 $ の場合    | 38 |
| 5       | 結 言                                | 40 |
|         | 付 録                                | 41 |
| 2・2     | 平行平板間入り口流れ                         | 41 |
| 2・2・1   | 座標系                                | 42 |
| 2・2・2   | 数値計算                               | 43 |
| 2・2・3   | 計算結果および考察                          | 43 |
| 2・2・3・1 | $ \lambda_2  \geq  \lambda_5 $ の場合 | 44 |
| 2・2・3・2 | $ \lambda_2  <  \lambda_5 $ の場合    | 50 |
| 2・2・4   | 結 言                                | 54 |
|         | 参考文献                               | 55 |
| 第3章     | 層の変形を考慮した計算                        | 57 |
| 1       | 緒 言                                | 57 |
| 2       | 基礎式及び局所座標系                         | 59 |
| 2・1     | 局所座標系                              | 59 |
| 2・2     | 基礎式                                | 60 |
| 3       | 全体座標系および数値計算                       | 60 |
| 3・1     | 座標系                                | 60 |
| 3・2     | 数値計算                               | 61 |
| 3・3     | 物性値                                | 62 |
| 4       | 計算結果および考察                          | 63 |
| 4・1     | in-plane 成分のみの場合                   | 63 |
| 4・2     | out-of-plane 成分を含む場合               | 65 |
| 5       | 結 言                                | 70 |

|                               |    |
|-------------------------------|----|
| 参考文献                          | 71 |
| 付 録                           | 71 |
| 第4章 総 括                       | 73 |
| 付録A ネマティック液晶の円板間流れの数値シミュレーション | 76 |
| 1 緒 言                         | 76 |
| 2 基礎式及び数値計算                   | 77 |
| 2・1 基礎式                       | 77 |
| 2・2 座標系                       | 78 |
| 2・3 数値計算                      | 79 |
| 3 計算結果及び考察                    | 81 |
| 3・1 タンプリング挙動                  | 81 |
| 3・2 直線速度分布の検討                 | 81 |
| 3・3 Carlsson-Skarp モデル        | 83 |
| 3・4 二次元計算                     | 86 |
| 3・4・1 $\phi_m$ の分布            | 86 |
| 3・4・2 $\phi$ の等値線図            | 88 |
| 3・4・3 透過光強度                   | 88 |
| 4 結 言                         | 91 |
| 参考文献                          | 91 |
| 付録B 展開式                       | 93 |
| 謝 辞                           | 95 |



## 学位論文要旨

液晶は 1880 年代に初めてその存在が確認されたが、発見当初は液晶の研究は一部の研究者が科学的好奇心のために行なっていたに過ぎなかった。1960 年代に液晶の表示装置への応用が発見されると、液晶の研究は（基礎，応用共に）急激に盛んになり、今日に至る。

液晶ディスプレイ（以下 LCD）はブラウン管型ディスプレイ比べ省電力、省スペースといった長所を活かし普及した、当初はディスプレイセルへの液晶材料の注入が困難であったため、LCD は小型の製品が中心であった。その後、液晶流動に関する研究が進展し注入技術が発達すると、より大型の製品も生産されるようになった。大型の製品が開発されるに従い、表示内容が静止画中心から動画中心へと変化した。この変化は LCD 中の液晶分子の応答速度という新たな課題をもたらした。この課題に対しては様々な解決策が提案されており、その中の一つに次世代 LCD として注目されている強誘電性 LCD（以下 FELCD）がある。

FELCD の応答速度は従来の LCD に比べ 3 桁程速いと言われる。しかし、FELCD に使われる液晶材料は従来の LCD に使われていたネマティック液晶ではなく、スメクティック C 液晶であり、駆動方法やセル内の分子配列が従来の LCD とは全く異なるため、普及されるまでにはまだ多くの課題をクリアしなければならない。その課題の一つに液晶材料のディスプレイセルへの注入がある。スメクティック C 液晶はネマティック液晶より結晶に近い状態で、粘度もネマティック液晶に比べて高く、ディスプレイセルへの液晶材料の注入はより困難である。LCD の製造においてセルへの液晶材料の注入工程は製品の品質や生産量を決定する重要な工程で、流動中の分子配向やスメクティック液晶特有の層の状態を制御しながら短時間で注入する方法の提案が求められている。液晶分子の配向は流動や外部からの影響を受け容易に変化するため実験的検証が難しい、特に局所的な液晶分子の配向を知るためには液晶流動のコンピュータシミュレーションを行う必要がある。

コンピュータシミュレーションを行う場合、対象の流動を表す理論が必要となる。ネマティック液晶では Leslie-Ericksen 理論<sup>(1),(2)</sup>等が提案されており、これまで多くのシミュレーションに用いられている。一方、スメクティック C 液晶に関してはネマティック液晶と同様に Leslie らによって連続体理論<sup>(3)</sup>が提案されているが、層の変化、分子配向、流動を同時に扱う彼らの理論は非常に複雑で、まだ研究例が少ない。本研究では Leslie らの理論を用いてスメクティック C 液晶の流動のシミュレーションを行う。

本論文は全 4 章と付録から構成される．各章の要旨を以下に記す．

## 第 1 章 緒 言

本章では本研究の背景及び研究対象であるスメクティック C 液晶とその工学的応用について解説を行った後，研究目的について述べる．

図 1 にスメクティック C 液晶の局所座標系を示す．図中で  $\mathbf{n}$  はディレクタと呼ばれる分子の局所平均配向方向を表す単位ベクトルである．スメクティック C 液晶は層構造を形成し，分子の配向方向は層法線方向に対し一定の角度  $\theta$  で傾いているため， $\mathbf{n}$  の他に層法線を表す単位ベクトル  $\mathbf{a}$  を用いる必要がある．Leslie らは  $\mathbf{n}$  を層平面に投影し，層内を移動して  $\mathbf{n}$  の方向を表す単位ベクトル  $\mathbf{c}$  を導入し， $\mathbf{a}$  と  $\mathbf{n}$  を  $\mathbf{a}$  と  $\mathbf{c}$  で表している．

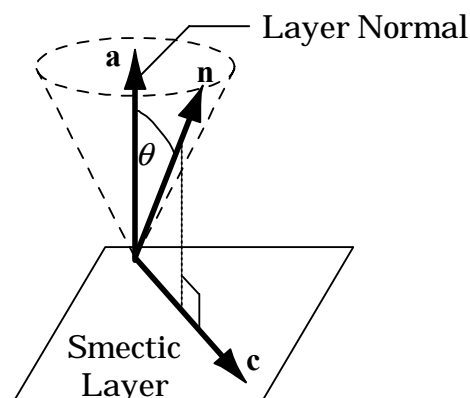


Fig. 1 A layer and the director in smectic C liquid crystals.

## 第 2 章 層を固定した場合の計算結果

Leslie らのスメクティック C 液晶の連続体理論は非常に複雑で，完全な形で取り扱うのは容易ではない本章では理論の簡単化のために層を固定し層固定状態でのシミュレーションを行う．すなわち図 1 における層法線を表す  $\mathbf{a}$  ベクトルを定ベクトルとし，分子配向を表す  $\mathbf{c}$  ベクトルの変化のみに注目する．また，計算結果に先立ち理論中に用いられている物性値の決定方法について説明する．

Leslie らの理論中にはスメクティック C 液晶の物性値として密度，粘性係数，弾性定数が含まれる．これらの物性値を個別に測定することは困難を極め，個々の係数を測定した例は皆無である．本研究では密度  $\rho$  には水の密度を用い，弾性定数に関しては Carlsson ら<sup>(4)</sup>によって提案された値を用いた．また粘性係数に関しては Osipov ら<sup>(5)</sup>によって提案されている各粘性係数の理論式に，*N, N'*-terephthalylidene bis(4-butylaniline) (以下 TBBA) の物性値を代入し算出を試みた．しかし彼らの理論式中には不明なパラメータとして，分子数密度と微小抵抗係数が含まれているため単体での利用は難しい．しかしこれらの不明



なパラメータは全ての式に堰の形で含まれるため、各係数の比は正確である。そこで本研究では Carlsson ら<sup>(3)</sup>が提案している値を参考にこの不明なパラメータを算出し、全ての粘性係数の値を算出した。

本研究では最初に一次元の平行平板間せん断流れの計算を行う。用いた流れ領域と全体座標系を図2に示す。無限の広がりを持つ2枚の平板が、 $z=0$ と $z=H$ の位置に、 $x-y$ 平面と平行な状態で配置されている。下部平板を固定し、上部平板を $x$ 方向に一定速度 $U$ で移動させることで、平板間の液晶にせん断流れを与える。このような流れ領域では、速度場、配向場は $x, y$ には依存せず $z$ のみの関数となる。

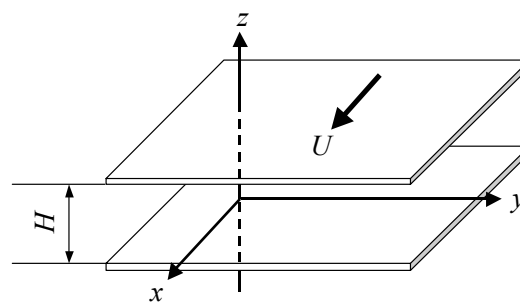


Fig. 2 Flow and global coordinate systems

せん断流れの計算では平行平板間の層配置として、図3に示すような3種の基本パターンを考える。図中の座標軸は図2の全体座標系の座標軸に一致する。3種のうち配置(c)では、上部平板が $x$ 方向に移動すると、液晶に流動が発生するためには層が変形する必要があり、層固定の仮定と矛盾が生じる。そのため本研究では、配置(a)と配置(b)を計算対象とした。Leslieら<sup>(6)</sup>に倣い、以下では、配置(a)をplanar配置、配置(b)をbookshelf配置と呼ぶ。

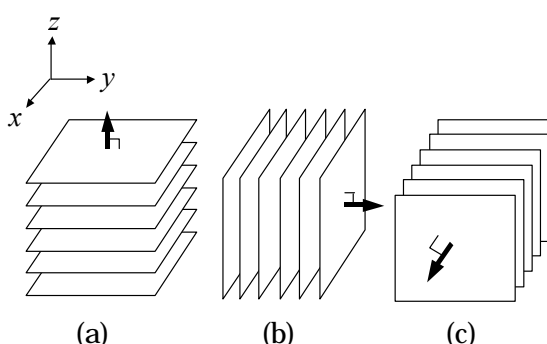


Fig. 3 Three typical layer arrangements

planar 配置の計算では上部平板の移動速度の増加に伴い、 $c$ が流動方向に配向し、このとき $c$ が流れから受けるトルクが最小になっていることが分かる。

bookshelf 配置では層平面がせん断面に一致しているため、単純せん断流中で $c$ の定常解の存在条件を考慮し、定常解を持つ場合と、定常解を持たない場合についてそれぞれ計算を行なった。 $c$ の定常解の有無は理論中のある粘性係数の値に依存する。図4に各場合の計算結果を示す。横軸は液晶固有の無次元数で弾性力に対する粘性力の比を表すエリクセン数  $Er$  を示している。本研究では物性値と平板間隔が固定されているためエリクセン数は上部平板の移動速度に比例する。縦軸は上下の壁面での固定配向の影響が最も小さい平板間中央での $c$ の配向角  $\phi_m$  を示す。(a)図は単純せん断流中で $c$ が定常解を持つ粘性係数の組み

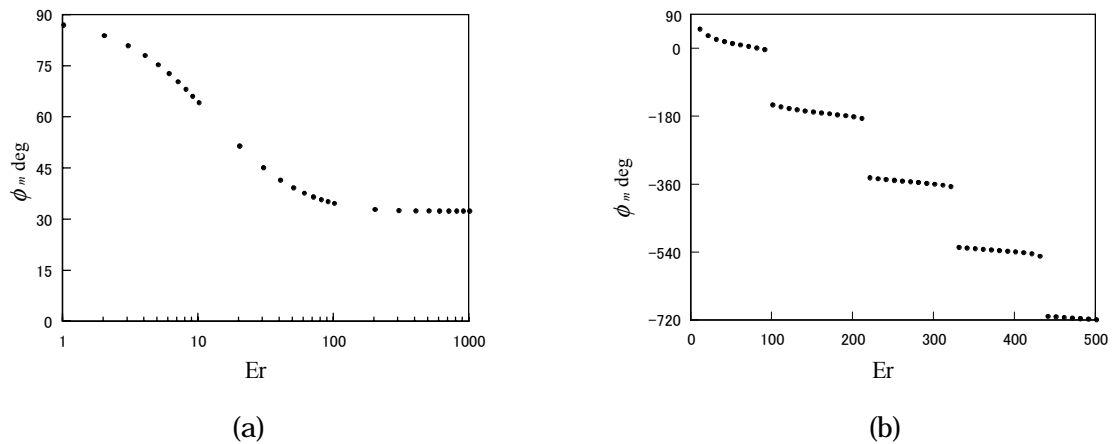


Fig. 4 Orientation angle of c-director at the middle of the plates to Ericksen number for bookshelf layer arrangement (a) aligning smectic, (b) tumbling smectic.

合わせの結果を示しており， $Er$  の増加に伴い  $\phi_m$  は連続的に減少するが，最終的には  $c$  は流れ方向から一定の角度をなして静止する．一方，(b)図は  $c$  が定常解を持たない粘性係数の組み合わせの結果で，(a)図とは対照的に  $Er$  の増加に伴い  $\phi_m$  は不連続な分布を形成し(a)図に比べ大幅に減少している．次に平板間隔方向だけでなく流動方向の空間変化を考慮し，層を固定した状態での二次元流動の数値計算を行う．流れ場には図 5 に示す平行平板間入り口流れを用いた．流路の長さは流路間隔の 10 倍とした．

一次元せん断流れの場合と同様に平板間での層の配置と流動方向を考慮すると層法線を紙面手前  $z$  方向に固定し層平面が  $x-y$  平面に一致した層配置が考えられる．この配置は前章における bookshelf 型層配置に酷似しており，平行平板間せん断流れの場合と同様に 2 通りの粘性係数の組み合わせについて計算を行い，平板間隔方向の変化のみならず流動方向の変化を明らかにした．

流路入口における流入速度  $U$  が小さい場合，粘性係数の値に依存せず同じような結果を示したが，流入速度が大きくなると粘性係数の依存して  $c$  はせん断流れの場合と同様の挙動を示す．一方，速度分布に関しては粘性係数の値による変化はほとんど見られない．また，流路間隔方向の速度分布に関しては流路中央よりやや離れた部分で速度が最大になった．

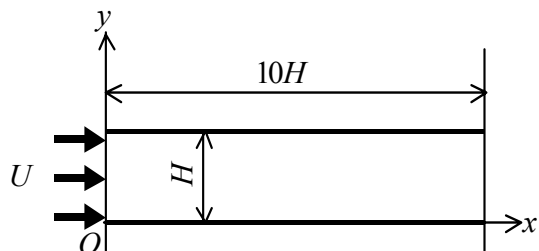


Fig. 5 Flow and coordinate systems of inlet

### 第3章 層の変化を考慮した流動計算

本章では層固定の条件を外し，分子配向と層配向を同時に解析した．流れ場には単純せん断流を用い，分子場弾性の無い状態で分子配向及び層配向の動的シミュレーションを行った．

初期状態で分子配向及び層配向がせん断面内に常に存在する in-plane の場合と面外成分 (= out-of-plane 成分) を有する場合について分子配向ディレクタ (図 1 中の  $\mathbf{n}$ ) の層平面への投影を表すディレクタ (図 1 中の  $\mathbf{c}$ ) と層配向ベクトル (図 1 中の  $\mathbf{a}$ ) の変化を明らかにした．

初期条件に依存して  $\mathbf{a}$  と  $\mathbf{c}$  は全く異なる振る舞いを示す．特に out-of-plane 成分を含む場合， $\mathbf{a}$  と  $\mathbf{c}$  は一定の配向を示さず，図 6 に示すように分子配向ディレクタ (図 1 中の  $\mathbf{n}$ ) ののまわりを回転し続ける． $\mathbf{n}$  の  $z$  成分はほぼ 0 であり， $\mathbf{n}$  は in-plane の場合と同様の結果を示した．すなわち， $\mathbf{a}$  と  $\mathbf{c}$  の軌跡を比較した場合，両者は初期条件に依存して全く異なる振る舞いを示すが，実際に分子配向を示すディレクタ (図 1 中の  $\mathbf{n}$ ) の軌跡を比較した場合には初期条件に依存せず，一定の振る舞いを示すことを明らかにした．

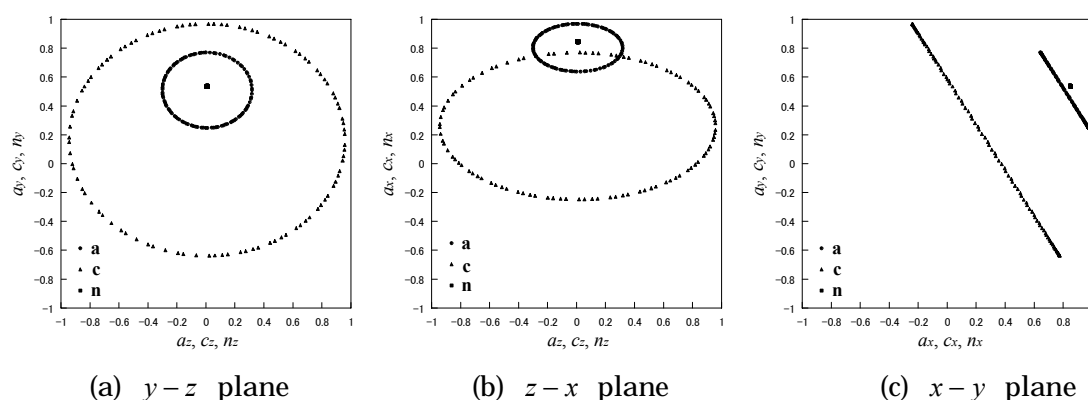


Fig. 6 Loci of directors with out-of-plane orientation.

### 第4章 総括

本章では本研究の総括を行う．

#### 付録 A ネマティック液晶の同心円板回転流れの数値シミュレーション<sup>(7)</sup>

付録 A では筆者が本研究に先んじて行ったネマティック液晶の同心円板回転流れの計算

結果を示す．通常の等方性流体の流動では変数として速度と圧力が含まれる，ネマティック液晶の流動ではそれらに加え分子配向が含まれ，スメクティック C 液晶の流動ではさらに層の変形が加わる．

筆者はスメクティック C 液晶の研究を行う前に液晶流動を理解する目的でネマティック液晶の流動の数値計算を行い，結果を日本機械学会論文集に投稿した．本研究ではネマティック液晶の同心円板間流れにおいて Carlsson と Skarp ら<sup>(8)</sup>が提案していた流動モデルでは実験で確認されている現象を表せないことを明らかにし，実験結果を表すことの出来る流動モデルの提案を行った．

## 参考文献

- (1) Leslie, F. M., *Arch. Ration. Mech. Anal.*, **28** (1968), 265.
- (2) Ericksen, J. L., *Arch. Ration. Mech. Anal.*, **4** (1960), 231.
- (3) Leslie, F. M., Stewart, I. W. and Nakagawa, M., *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, **198** (1991), 443.
- (4) Carlsson, T., Leslie, F. M. and Clark, N. A., *Physical Review E*, **51** (1995), 4509.
- (5) Osipov, M. A., Sluckin, T. J. and Terentjev, E. M., *Liq. Crystals*, **19** (1995), 197.
- (6) Gill, S. P. A. and Leslie, F. M., *Liq. Crystals*, **14** (1993), 1905.
- (7) 寺田敦史・辻知宏・蝶野成臣，*機論*，**69** - 681，B (2003), 1035.
- (8) Carlsson, T. and Skarp, K., *Liq. Cryst.*, **1** (1986), 455.

## 研究業績

### 論文

- (1) 寺田敦史，辻知宏，蝶野成臣，  
「ネマティック液晶の同心回転円板間流れの数値シミュレーション」，  
日本機械学会論文集 B 編 **69**, 681, (2003), 1035
- (2) 寺田敦史，辻知宏，蝶野成臣，  
「スメクティック C 液晶の平行平板間流れの数値シミュレーション」，  
日本機械学会論文集，掲載決定

- (3) 寺田敦史, 辻知宏, 蝶野成臣,  
「単純せん断流中のスメクティック C 液晶の層方向と分子配向」,  
日本機械学会論文集, 投稿準備中

## 学会発表

## 海外

- (1) A. Terada, T. Tsuji, S. Chono,  
Numerical Simulation of Smectic C Liquid Crystalline Flow  
between Parallel Plates,  
International Liquid Crystal Conference 2002, Edinburgh, U.K., July 2002.
- (2) A. Terada, T. Tsuji, S. Chono,  
Numerical Simulation of Nematic Liquid Crystalline Flows  
between Parallel Plates under Magnetic Fields,  
ASME Fluids Engineering Division Summer Meeting,  
Honolulu, U.S.A., July 2003.

## 国内

- (1) 寺田敦史, 辻知宏, 蝶野成臣,  
「ネマティック液晶の同心円板間流れの数値シミュレーション」,  
日本レオロジー学会討論会, 高知市, 2000 年 9 月
- (2) 寺田敦史, 辻知宏, 蝶野成臣,  
「スメクティック C 液晶の平行平板間流れの数値シミュレーション」,  
日本液晶学会討論会, さいたま市, 2001 年 9 月
- (3) 寺田敦史, 辻知宏, 蝶野成臣,  
「スメクティック C 液晶の平行平板間流れの数値シミュレーション  
(ブックシェルフ配置の場合)」,  
日本機械学会中国四国支部講演会, 東広島市, 2002 年 3 月

- (4) 寺田敦史, 辻知宏, 蝶野成臣,  
「ネマティック液晶の同心円板間流れの数値シミュレーション  
(タンプリング領域の移動について)」,  
日本機械学会年次大会, 東京都, 2002 年 8 月
- (5) 寺田敦史, 辻知宏, 蝶野成臣,  
「磁場下におけるネマティック液晶 2 次元流動の数値シミュレーション」,  
日本機械学会中国四国支部講演会, 鳥取市, 2003 年 3 月
- (6) 寺田敦史, 辻知宏, 蝶野成臣,  
「磁場下における平行平板間ネマティック液晶流の数値シミュレーション」,  
電磁力関連のダイナミックスシンポジウム, 金沢市, 2003 年 5 月
- (7) 寺田敦史, 辻知宏, 蝶野成臣,  
「せん断流中のネマティック液晶の  
フレクソエレクトリック効果についての基礎研究」,  
日本機械学会年次大会, 徳島市, 2003 年 8 月
- (8) 寺田敦史, 辻知宏, 蝶野成臣,  
「磁場下における液晶の二次元流れの数値計算」,  
日本レオロジー学会討論会, 奈良市, 2003 年 9 月
- (9) 寺田敦史, 辻知宏, 蝶野成臣,  
「スメクティック C 液晶の粘度測定」,  
日本機械学会中国四国支部講演会, 広島市, 2004 年 3 月
- (10) 寺田敦史, 辻知宏, 蝶野成臣,  
「せん断流中のスメクティック C 液晶の層方向と分子配向」,  
日本機械学会中国四国支部講演会, 松山市, 2005 年 3 月, 発表予定

## スメクティック C 液晶の流動の数値シミュレーション

## 第1章 序論

### 1・1 研究の背景

液晶は19世紀の末にオーストリアの植物学者 Reinitzer とドイツの物理学者 Lehman により、有機化合物の融解過程で確認された<sup>(1)</sup>。液晶は液体の流動性と結晶の光学異方性を併せ持ち、気体、液体、固体と同様に物質の状態の一つである。発見からしばらくの間、液晶の応用用途が見出されず、液晶に関する研究は一部の研究者によって科学的好奇心のみを原動力として続けられていた。しかし1960年代に入り、液晶のディスプレイデバイスへの応用が提案されて以来、液晶の研究は急激な盛り上がりを見せた。現在ではディスプレイ以外にも1980年代に発見された高分子系の液晶を用いて、高強度繊維や高強度プラスチックが製造されている。

液晶製品の製造過程には液晶材料を流動させる工程が含まれる。例えば、液晶ディスプレイの製造におけるディスプレイセルへの液晶材料の注入工程や、プラスチック成型における液晶材料の金型への充填工程である。これらの工程中の液晶流動状態が製品の性能や生産性に強く影響を及ぼす<sup>(2)</sup>ことが知られている。これは流動中の液晶分子の配向が最終的な製品において保持されることに起因する。例えば、液晶ディスプレイ製造において流動中の分子配向欠陥構造の発生を抑えることが製品の不良画素の発生を抑えることに繋がる。また、液晶から作られる繊維やプラスチックでは分子の配向方向を揃えることにより特定の方向の引張り強度が強い製品を作ることが可能である。また、全ての液晶製品に共通することであるが、液晶材料の注入時間の短縮は生産量の増加に繋がる。すなわち、液晶材料の注入工程では製品の目的に応じて分子配向を制御しながら短時間で流動させることが求められる。ただし、液晶分子の配向は温度変化や異物の混入などに敏感に反応するため実験的手法を用いた解析は容易ではない。さらに流動中の液晶分子の局所配向状態を知る為にはコンピュータシミュレーションが最も有効な手段である。

液晶流動の数値シミュレーションを行なうためには液晶流動を表す理論式が必要である。液晶は局所的な分子の配向方向に流動特性が依存する異方性流体に分類され、その流動は通常の水や空気など（異方性流体に対して等方性流体）の流動と比べ非常に複雑である。現在、液晶の流動を表す理論としては Leslie-Ericksen 連続体理論（以下 L-E 理論）<sup>(3)-(5)</sup>、土井理論<sup>(6)</sup>、Tsuji-Ray 理論<sup>(7)</sup>等がある。これらの理論を用いて液晶流動の数値シミュレーションが数多くなされてきた。



現在，ディスプレイや高強度プラスチックといった液晶製品には後述するネマティック液晶が用いられている．また，先に例示した液晶流動を表す理論は全てネマティック液晶の為の理論である．1980年代には同じく後述するスメクティック液晶に属する強誘電性液晶が発見され<sup>(8)</sup>，後にディスプレイデバイスへの応用も提案され，1990年代にはスメクティック液晶の流動を表す理論<sup>(9)(10)</sup>も提案されている．

## 1・2 液晶の分類

液晶(相)は結晶相から等方相へ相転移を起こす過程で現れる中間相であり，等方相(液体)の流動性と結晶相の光学異方性を併せ持つ．結晶状態では分子の位置は熱運動によってゆらいでいるが，重心位置の平均は3次元の規則性を有し，分子は空間格子を形成している．温度が上昇し，ゆらぎが大きくなると格子は崩れ，重心位置の規則性は失われる．この状態が液体である．球のような対称性の強い形状の分子から構成される物質はこのように液晶状態を経ることなく結晶から液体へ相転移する．一方，棒状や円盤状の様な異方性の強い形状の分子から構成される物質の場合，相転移の過程で分子が配向の規則性は保ったまま重心位置の規則性を失った状態が考えられる．この状態が液晶である．(ちなみに液晶とは逆に配向の秩序のみを失った場合は柔軟性結晶と呼ばれる．)

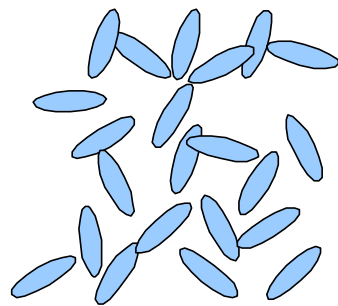
液晶は分子構造によってネマティック液晶，コレステリック液晶，スメクティック液晶の3つに大別される．図1-1に本節で説明する3種の液晶と液体の模式図を示す．図中の楕円体は分子を示し，(a)図が液体，(b)図がネマティック液晶，(c)図がコレステリック液晶，(d)図がスメクティック液晶を表す．以下では各液晶の特徴を述べる．

### 1・2・1 ネマティック液晶

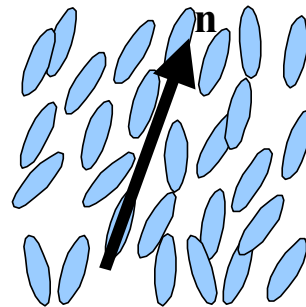
ネマティック液晶は分子が位置の秩序を持たず配向の秩序のみを有する最も単純な構造の液晶である．ネマティックの語源は糸を意味するギリシャ語であり，ネマティック液晶は薄膜の状態で糸状組織を形成することから命名された．

ネマティック液晶はこれまで多くの研究に用いられており，流動はもとより光学，電気物性，材料合成等様々な研究がなされている．

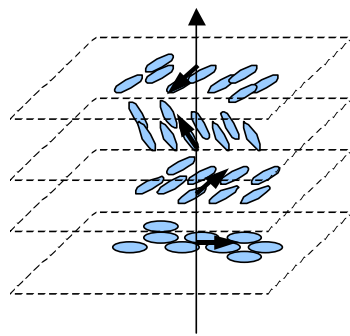
図1-1(a)に示す液体では分子の向きがランダムなのに対し，(b)のネマティック液晶では個々の分子の向きは完全には一致しないが，それらの平均配向を $\mathbf{n}$ で表すと，外部からの影響がない場合 $\mathbf{n}$ は一定の方向を指す． $\mathbf{n}$ は配向ベクトルあるいはディレクタと呼ばれ，ネマ



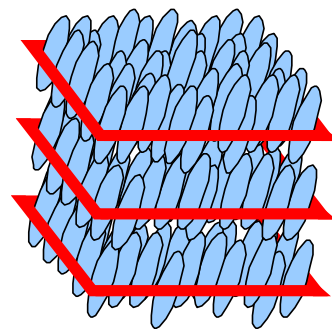
(a) isotropic liquid



(b) nematic liquid crystal



(c) cholesteric liquid crystal



(d) smectic liquid crystal

Fig. 1-1 isotropic liquid and liquid crystals

ティック液晶のみならず，液晶流動の研究において分子の局所平均配向を表す物理量としてしばしば用いられる．

### 1・2・2 コレステリック液晶<sup>(11)</sup>

コレステリック液晶はカイラルネマティック液晶とも呼ばれ，19世紀末に液晶が最初に確認された際の液晶である．コレステリック液晶はネマティック液晶を示す分子が光学活性を含む場合，あるいはネマティック液晶に光学活性物質を添加することで，ネマティック液晶の対称性が崩れ，分子が図 1-1(c)のように配向し螺旋状構造を形成する．このとき，螺旋軸は各配向方向に垂直である．

コレステリック液晶の応用例としてはディスプレイデバイスの他，螺旋のピッチが可視光の波長程度であり，温度変化によって螺旋ピッチが変化しすることを利用し，温度計等に利用されている．

### 1・2・3 スメクティック液晶<sup>(12)</sup>

スメクティック液晶は 3 種類の中で最も結晶に近い液晶で，分子は配向の秩序に加え低次元の位置の秩序を有する．その結果，図 1-1(d)に示すように分子の位置に疎密が発生し，分子は層構造を形成する．図 1-1(c)のコレステリック液晶の螺旋構造も一見すると層構造に見えるがコレステリック液晶の分子は位置の秩序を持たないためスメクティック液晶の層構造とは異なる．

スメクティック液晶のスメクティック液晶は層内の分子配置によってさらに分類可能で，それらは発見された順に A, B, C・・・と添字を付けられ，スメクティック A 相，スメクティック B 相，スメクティック C 相・・・と呼ばれている．本節では以下スメクティック A，スメクティック B，スメクティック C を  $S_A$ ,  $S_B$ ,  $S_C$  と略する．

表 1 はスメクティック液晶の分類を示している．左の列は層内の分子構造を示している．下に行くに従い，分子の対称性が低くなり，結晶に近い状態になる．層内の分子配列によって 4 種類に分けられた後，さらに分子の配向方向と層の法線方向が一致しているか，傾いているかによって分類される．

$S_A$ ,  $S_C$  相はスメクティック液晶の中で最も対称性が高く，分子は層内方向には位置の秩序を持たず液体的である． $S_B$ ,  $S_I$ ,  $S_F$  相では層内で分子がボンド配向秩序を有するヘキサ

Table 1. Distinction of smectic liquid crystals on each molecular formation in layer

| Molecular formations                        | Molecular orientation respect to the layer normal |            |
|---|---|------------|
|   | No tilt   | Tilt       |
| Liquid like                                 | $S_A$   | $S_C$      |
| Hexatic phase                               | $S_B$   | $S_I, S_F$ |
| Hexagonal crystal                           | $S_L$   | $S_J, S_G$ |
| Hexagonal crystal and herringbone structure | $S_E$   | $S_K, S_H$ |

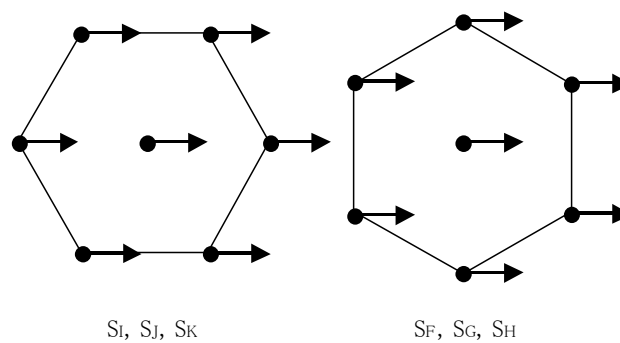


Fig 1-2. Tilt directions of tilt on  $S_F$ ,  $S_G$ ,  $S_H$ ,  $S_I$ ,  $S_J$ ,  $S_K$  phases

ティック相を形成する。 $S_L$ ,  $S_J$ ,  $S_G$  相では分子が層内方向にも位置の秩序を有し、六方晶の格子を形成する。 $S_L$ ,  $S_J$ ,  $S_G$  相は二次元結晶に分類され流動性はない。 $S_E$ ,  $S_K$ ,  $S_H$  相では分子は  $S_L$ ,  $S_J$ ,  $S_G$  相の六方晶の格子に加え矢筈模様の構造も形成する。 $S_E$ ,  $S_K$ ,  $S_H$  相も  $S_L$ ,  $S_J$ ,  $S_G$  相と同様に流動性はない。

$S_B$ ,  $S_L$ ,  $S_E$  相は分子の向きが層法線方向に対し傾いたものがそれぞれ二種類存在するが、これは図 1-2 に示す様に最近傍点と第二最近傍点のどちらの方向に傾いているかで区別される。

表 1 には  $S_D$  相が含まれていないが、 $S_D$  相は光学的には等方性でキュービック相とも呼ばれる特殊な相である。 $S_D$  相は分子がミセルを形成し、ミセルが立方晶に配列していると考えられている。

本節では液晶を分子の配列によって分類し、紹介してきた。しかし、青色コレステリック相やキュービック相のようなこれまでの規準では分類不可能な液晶相も発見されている<sup>(13)</sup>。

また、液晶は分子の配列以外にも液晶相の発現条件（温度相転移型（=サーモトロピック）、濃度相転移型（=ライオトロピック）、分子の形状（棒状（=カラミティック）、円盤状（=ディスコティック））、分子量（低分子、高分子）によって分類することが出来る<sup>(14)</sup>。本研究では棒状分子から構成される低分子サーモトロピックスメクティック C 液晶を対象として議論を進める。

### 1・3 スメクティック液晶の応用

現在、ほとんどの液晶製品はネマティック液晶がコレステリック液晶から製造されてお

り、スメクティック液晶を用いた製品は皆無である。スメクティック液晶の用途としては強誘電性液晶として次世代液晶ディスプレイへの液晶材料が挙げられる。本節ではスメクティック液晶の一種である強誘電性液晶について説明した後、従来のネマティック液晶を用いた液晶ディスプレイと強誘電性液晶ディスプレイについて説明する。

### 1・3・1 強誘電性液晶

コレステリック液晶はカイラルネマティック液晶とも呼ばれ、光学活性を含む分子から構成される物質がネマティック液晶を示す場合に現れることは既に述べた。同様に光学活性を含む分子がスメクティック C 液晶を示す場合、カイラルスメクティック C 液晶を表すことが知られている。Mayer らは、分子が長軸に垂直方向に分極をもつ場合、カイラルスメクティック C 液晶は強誘電性を示すことを予測し<sup>(8)</sup>、これに基づいて 2-methylbutyl p-[p-(decyloxybenzylidene) -amino] -cinnamate ( DOBAMBC ) を合成し、強誘電性液晶の存在を証明した<sup>(15)</sup>。

強誘電性とは自発的にマクロな分極を示すことを意味する。通常の液晶では分子が分極を有する場合でも分子配向の対称性によって分極は打ち消され、マクロな分極は示さず、流動等によって分子配向の対称性が崩れた場合にのみ、フレクソエレクトリック効果<sup>(16)</sup>としてマクロな分極を示すことが知られている。

### 1・3・2 液晶ディスプレイ<sup>(17)-(19)</sup>

ここで、液晶ディスプレイの仕組みについて説明する。図 1-3 にネマティック液晶を使った現在の液晶ディスプレイの断面図を示す。図中の上下のガラス板には互いの偏光方向が直交するように偏光フィルムが貼ってあり、セル内が空の状態では光はセルを透過できない。セルに液晶を封入すると、ガラス内側の表面にはラビング処理された配向膜が存在し、上下の板表面の液晶分子は偏光方向に一致した状態で固定され、その間の分子は配向方向の差を埋めるようになだらかな螺旋状に配置する(図 1-3 左)。この場合、液晶分子が作る螺旋構造によって光の振動方向が変化し、光はセルを透過し明視野が得られる。ここでセルに電場を印加するとガラス板表面を除く液晶分子は電界方向を向いてしまい、光の振動方向を変えることが出来ないため光は透過せず、暗視野となる(図 1-3 右)。

以上が TN(Twisted Nematic)型と呼ばれるネマティック液晶を使った液晶ディスプレイの原理である。TN 型の派生としての上下のガラス板間での液晶分子のねじれを 180° 以上

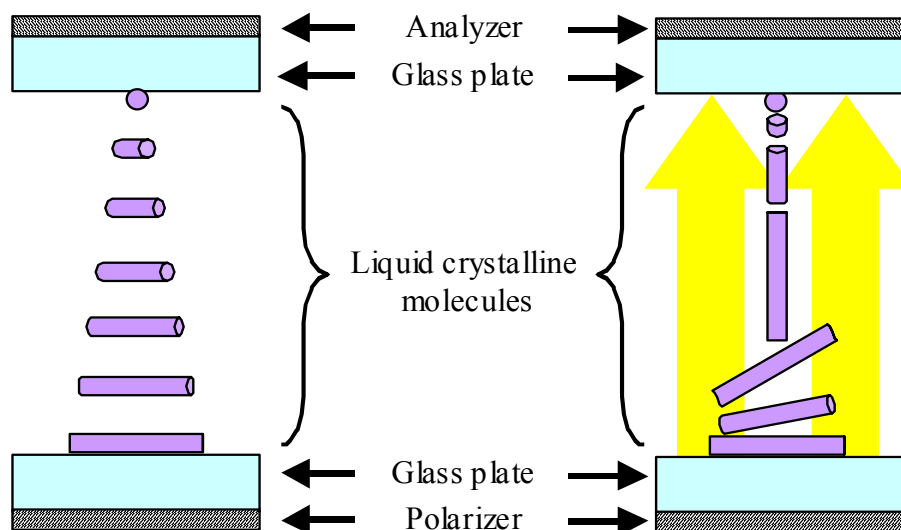


Fig 1-3. Liquid crystal display device

にしてコントラストを向上させた STN(Super Twisted Nematic)型 ,各画素にトランジスタを配置し , アクティブマトリクス方式によって高速応答を実現した . TFT(Thin Film Transistor)型液晶ディスプレイがある .

液晶分子は電場の変化に敏感に反応するため液晶ディスプレイの駆動電圧はブラウン管型のディスプレイに比べ低く抑えることが可能である . また , 液晶セルの間隔は数  $\mu\text{m}$  であり , 液晶ディスプレイはブラウン管型のディスプレイに対して圧倒的に薄く製造することができる . これらの利点を活かして液晶ディスプレイは当初 , 携帯型製品や , 製品の動作表示用のインジケータ等 , 小型の製品を中心に普及した . その後セルへの注入技術が発達し , 現在では小型の製品だけでなくテレビや大型ディスプレイ等の大型の製品も作られている .

大型の製品が作られるに伴い , 表示する内容が静止画中心から動画中心へと変化し , 液晶分子の応答速度が問題として浮上した . 動画を表示する場合 , 一秒間に何回も画面を書き換えながら順次静止画を表示しており , 実際のテレビ放送ではこの画面の書き換え ( = 走査 ) 速度は 16 ミリ秒に決められている . 従って , 液晶ディスプレイをテレビとして利用する場合は分子の応答速度が 16 ミリ秒以下であれば良いことになる . 当初は液晶分子の応答速度が 50 ミリ秒程度で , 画素数やフレーム数を減らし画質を犠牲にすることで対処してきた . この問題に関してはいくつかの解決策が提案され , その一つに強誘電性液晶ディス

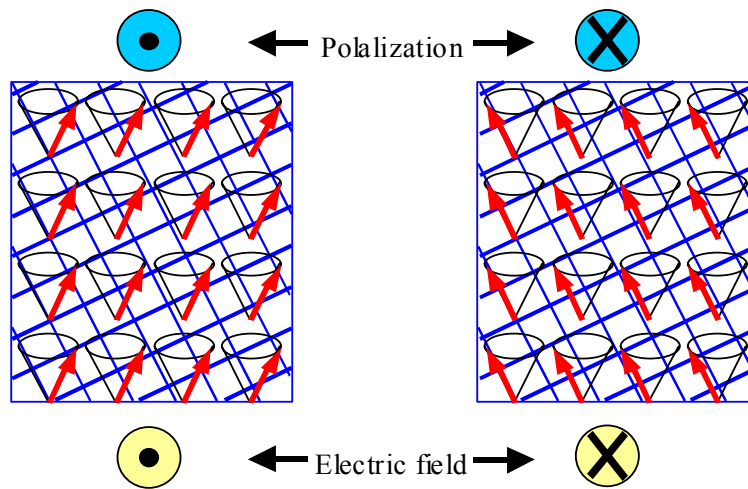


Fig 1-4. Ferroelectric liquid crystal display device

プレイが含まれる。

図 1-4 は強誘電性液晶ディスプレイを正面から見た図を示している<sup>(9)</sup>。図中の赤い矢印は液晶分子を表しており、分子は層がガラス板に対し垂直になるように配置されている。セル内の液晶分子の軌跡は図中の円錐斜面を形成する。左の図では紙面手前向きに電場が印加され、右の図では紙面奥向きに電場が印加されている。強誘電性液晶では分子の長軸方向に自発分極が発生し、分極方向は印加された電場の向きに一致する。電場を反転させることで、分極が反転し、液晶分子の向きも反転する。上下のガラス版には偏光方向が直行するように偏光フィルムが貼られており、図中の青で示した網目が上下のガラス板の偏光方向を表している。電場が紙面手前向きで、分子の配向方向が偏光方向に一致しない場合、入射光は楕円偏光となり光が透過し明視野になる（図 1-4 左）一方、電場の向きが反転し、分子の配向方向が一方の偏光方向に一致する場合、他方の偏光方向には直行するため、光はセルを透過できず暗視野となる。（図 1-4 右）

以上の強誘電性液晶ディスプレイの駆動原理は Clark と Lagerwall によって提案された強誘電性液晶の双安定状態間のスイッチング<sup>(20)</sup>が基になっている。双安定であるため強誘電性液晶ディスプレイの場合、電場をオフにした場合も液晶分子の配向が保持されるため、パルス駆動が可能となり、単安定型で電場をオフにした場合、液晶分子の配列は保持されない従来の液晶ディスプレイに比べさらに消費電力を小さくすることが可能である。

#### 1・4 研究の目的

前節では次世代液晶ディスプレイとして期待されている強誘電製液晶ディスプレイについて従来のネマティック液晶を用いた液晶ディスプレイとの比較を交えて説明した。現時点では強誘電性液晶ディスプレイは実用化されていない。その理由として液晶材料のディスプレイセルへの注入が非常に困難であることが挙げられる。強誘電性液晶はスメクティック C 液晶の亜種であり、従来の液晶ディスプレイの液晶材料であるネマティック液晶より分子の配列が結晶に近く、粘度も高い。また、強誘電性液晶ディスプレイのセルの間隔も従来の液晶ディスプレイに比べさらに小さく液晶材料の注入をより困難にしている。

前に述べたように液晶ディスプレイの生産量は液晶材料をガラスセルに注入する工程から強く影響を受けるため、材料を効率良く注入する必要があるが、液晶分子の配向は温度変化や異物の混入などに敏感に反応するため実験的手法を用いた解析は容易ではない。さらにスメクティック液晶特有の層構造は外部からの影響によって破壊され易く、これまで以上に実験的解析が困難で、スメクティック C 液晶の流動に関する数値解析手法の確立が望まれる。

現在、Leslie らによってスメクティック C 液晶の連続体理論<sup>(9)(10)</sup>が提案されている。しかし、速度、分子配向、層変形を同時に扱う彼らの理論は非常に複雑で、研究例が少なく、完全な形で解かれた例は無い。本研究では彼らの理論を様々な流れ場で数値シミュレーションを行い、理論の有用性を確認すると共に、スメクティック C 液晶流動の数値シミュレーション手法の確立への貢献を目的とする。

#### 1・5 本論文の構成

本論文は本章を含む全 4 章から構成され、第 1 章では序論として研究の目的および背景を述べた。第 2 章では Leslie らによって提案されたスメクティック C 液晶の連続体理論の基礎式、理論中に使われている物性値の決定方法を説明した後、層を固定した場合を仮定し、2 種類の流れ場での計算結果を示す。流れ場には平行平板間せん断流れと平行平板間入口流れを用いた。第 3 章では第 2 章で用いた層を固定する仮定を排し、分子配向を表すディレクタと層の法線方向を表すディレクタが流動中において示す振る舞いを明らかにする。最後に第 4 章で本研究の総括を行う。

また、付録として、以前に筆者が行ったネマティック液晶の同心回転円板間流れの計算結果<sup>(21)</sup>を紹介する。



## 参考文献

- (1) 例えば , Larson, R. G., *The structure and rheology of complex fluids*, (1999), 443, Oxford university press.
- (2) 例えば , 飯村一賀・浅田忠裕・安部明広 , *液晶高分子 - その基礎と応用 -* , (1988), 155, シグマ出版.
- (3) Ericksen, J. L., *Arch. Ration. Mech. Anal.*, **4** (1960), 231.
- (4) Ericksen, J. L., *Trans. Soc. Rheol.*, **5** (1961), 23.
- (5) Leslie, F. M., *Arch. Ration. Mech. Anal.*, **28** (1968), 265.
- (6) Doi, M., *J. Poly. Sci., Poly. Phys. Ed.*, **19** (1981), 229.
- (7) Tsuji, T. and Rey, A. D., *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **73** (1997), 229.
- (8) Meyer, R. B. *et al.*, *J. Phys. France*, **36** (1991), L 69.
- (9) Leslie, F. M., Stewart, I. W. and Nakagawa, M., *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, **198** (1991), 443.
- (10) Leslie, F. M., *Liq. Crystals*, **14** (1993), 121.
- (11) 液晶便覧編集委員会, *液晶便覧*, (2000), 12, 丸善.
- (12) 福田敦夫・竹添秀男 , *強誘電性液晶の構造と物性*, (1990), 22, コロナ社..
- (13) 文献(11)の 17 ページ.
- (14) 例えば, 松本正一・角田市良, *液晶の基礎と応用*, (1991), 3, 工業調査会.
- (15) Mayer, R. B., *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, **40** (1991), 33.
- (16) Meyer, R. B., *Phys.Rev.*, **22** (1969) ,918.
- (17) 鈴木八十二, *液晶ディスプレイ工学入門*, (1998), 5, 日本工業新聞社.
- (18) 文献(12)の 15 ページ.
- (19) 内田龍男 , *次世代液晶ディスプレイ技術*, (1994),153, 工業調査会.
- (20) Clark, N. A. and Lagerwall, S. T., *Appl. Phys. Lett.*, **36** (1980), 899.
- (21) 寺田敦史・辻知宏・蝶野成臣 , *機論* , 69 - 681 , B (2003), 1035.

## 第2章 層を固定した場合の計算

本章では理論の簡単化として層が固定された状態を考え、流動と分子配向の変化のみを計算する。スメクティック液晶の層構造は分子の重心位置の密度が周期性を持つことに起因しており、層を固定することは分子配向を部分的に固定することに等しい。液晶分子の配向制御には様々な方法が考案され、例を挙げるとガラス板上でたんぱく質や高分子の膜を用いて分子配向を固定する方法や、液晶全体に電磁場を印加して液晶分子を固定する方法がある。このように層を固定することは可能であり、層を固定する仮定はスメクティック液晶の流動の理論研究においてしばしば用いられている。

2・1節では平行平板間せん断流れ、2・2節では平行平板間入り口流れについて説明する。

### 2・1 平行平板間せん断流れ

#### 1. 緒言

液晶の主な用途として液晶ディスプレイ（以下LCD）が挙げられる。ブラウン管ディスプレイと比較して、LCDは省電力、省スペースといった利点を有する一方、応答速度が遅いといった欠点が指摘されている<sup>(1)</sup>。この欠点を解消するため様々な技術が提案されてきた<sup>(2)</sup>。例えばLCD基板の改良や、新規な液晶材料の合成等である。これらのLCD新技術の中で次世代LCDとして注目されているのが、応答速度が桁違いに速い強誘電性LCDである<sup>(3)</sup>。

液晶は構成分子の配位状態により、ネマティック、コレステリック、スメクティック液晶に分類される<sup>(4)</sup>。現在のLCD製品に利用されている液晶はネマティック液晶であり、棒状分子が結晶状態で有している位置の秩序と配向の秩序のうち、位置の秩序を失い配向の秩序のみを有する。一方、強誘電性LCDに用いられる液晶は主としてスメクティックC液晶に属しており<sup>(5)</sup>、ネマティック液晶の持つ配向秩序に加え、一次元の位置の秩序を有し、分子がある方向には規則的に並ぶ。スメクティックC液晶の模式図を図1に示す。図中の楕円体は個々の分子、または分子の平均的配向方向であるディレクタを表す。図のようにある方向に配向した分子が、位置の秩序によって層構造を形成していることがわかる。ただし層内においては位置の秩序は存在しない。ディレクタを単位ベクトル $\mathbf{n}$ 、層の法線方向を単位ベクトル $\mathbf{a}$ で表す。一般に $\mathbf{n}$ と $\mathbf{a}$ は一致せず、ディレクタは層法線に対して傾斜して

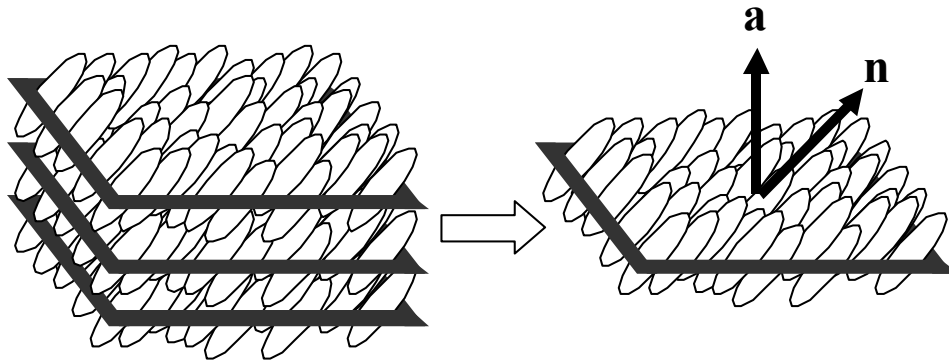


Fig. 1 Molecular configuration of smectic C liquid crystals

いる。

スメクティック C 液晶はネマティック液晶に比べて固体に近い状態であるので、その粘度はネマティック液晶よりも高い。従ってディスプレイセルへの注入は、ネマティック液晶の場合よりも困難であることは容易に予想される。液晶を注入する工程は LCD の生産性に大きく影響を及ぼすので<sup>(6)(7)</sup>、強誘電性 LCD の実用化にはスメクティック C 液晶の流動に関する知見が重要である。

スメクティック C 液晶の流動を表す理論としては、現在のところ Leslie らによって提案された連続体理論<sup>(8)(9)</sup>のみである。この理論は、ネマティック液晶の理論として広範に用いられている Leslie-Ericksen 理論に、層変形概念が加えられたものであり、極めて複雑である。そのため計算例はほとんど無く、スメクティック C 液晶の流動は明らかにされていない。本研究では、Leslie らの理論を平行平板間せん断流れに適用することで、スメクティック C 液晶の流動に関する基礎的知見を得ることを目的とする。

## 2. 基礎式および座標系

2・1 層とディレクタ 図2は層法線ベクトル  $\mathbf{a}$  とディレクタ  $\mathbf{n}$  の関係を描いたものである。  $\mathbf{a}$  に対する  $\mathbf{n}$  の傾き角  $\theta$  は、一般に、液晶の種類と温度に依存する。従って等温状態では、  $\mathbf{n}$  は点線で描かれた円錐の側面を動くことになる。そこで  $\mathbf{n}$  を層平面へ投影することで、  $\mathbf{n}$  の方位を層平面上の単位ベクトル  $\mathbf{c}$  で表現する。  $\mathbf{n}$  の代わりに、  $\mathbf{a}$  に垂直な  $\mathbf{c}$  を用いることで支配方程式が簡素になる。  $\mathbf{a}$  と  $\mathbf{c}$  の定義から以下の関係が成り立つ。

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{a} = 1 \quad (1a)$$

$$\mathbf{c} \cdot \mathbf{c} = 1 \quad (1b)$$

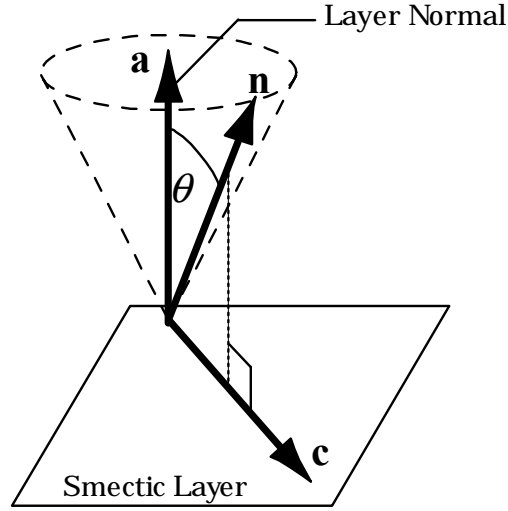


Fig. 2 A layer and the director in smectic C liquid crystals.

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{c} = 0 \quad (1c)$$

Leslie らは、層間隔を変化させるには多大なエネルギーを要するので層間隔を一定と仮定している。その結果、欠陥構造<sup>(10)</sup>を包含しない場合には

$$\nabla \times \mathbf{a} = \mathbf{0} \quad (1d)$$

が成り立つ。

**2・2 基礎式** 本研究で用いた基礎式を以下に示す<sup>(8)(9)</sup>。

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (2)$$

$$\rho \frac{D\mathbf{v}}{Dt} = \rho \mathbf{F} - \nabla(p+w) + \mathbf{g}^a \cdot \nabla \mathbf{a} + \mathbf{g}^c \cdot \nabla \mathbf{c} + \nabla \cdot \mathbf{t} \quad (3)$$

$\mathbf{v}$  は速度ベクトル、 $\rho$  は流体密度、 $D/Dt$  は実質微分、 $\mathbf{F}$  は単位質量当りの外力、 $p$  は圧力、 $w$  は  $\mathbf{a}$ 、 $\mathbf{c}$  の空間ひずみから発生する自由エネルギー密度で、

$$\begin{aligned} w = & \frac{1}{2} K_1^a (\nabla \cdot \mathbf{a})^2 + \frac{1}{2} K_2^a \{ \mathbf{c} \cdot (\nabla \mathbf{a} \cdot \mathbf{c}) \}^2 + K_3^a \nabla \cdot \mathbf{a} \{ \mathbf{c} \cdot (\nabla \mathbf{a} \cdot \mathbf{c}) \} \\ & + \frac{1}{2} K_1^c (\nabla \cdot \mathbf{c})^2 + \frac{1}{2} K_2^c \nabla \mathbf{c} : \nabla \mathbf{c} + \frac{1}{2} K_3^c (\nabla \mathbf{c} \cdot \mathbf{c}) \cdot (\nabla \mathbf{c} \cdot \mathbf{c}) + K_4^c (\nabla \mathbf{c} \cdot \mathbf{c}) \cdot (\nabla \mathbf{c} \cdot \mathbf{a}) \\ & + K_1^{ac} \nabla \cdot \mathbf{c} \{ \mathbf{c} \cdot (\nabla \mathbf{a} \cdot \mathbf{c}) \} + K_2^{ac} \nabla \cdot \mathbf{c} \nabla \cdot \mathbf{a} \end{aligned} \quad (4)$$

と表される。 $K_i^a$  ( $i=1 \sim 3$ )、 $K_i^c$  ( $i=1 \sim 4$ )、 $K_i^{ac}$  ( $i=1, 2$ ) は弾性定数である。 $\mathbf{t}$  は応力テンソルであり

$$\begin{aligned}
\mathbf{t} = & \mu_0 \mathbf{D} + \mu_1 \mathbf{a} \cdot \mathbf{D} \cdot \mathbf{a} + \mu_2 [(\mathbf{D} \cdot \mathbf{a})\mathbf{a} + \{(\mathbf{D} \cdot \mathbf{a})\mathbf{a}\}^T] \\
& + \mu_3 \mathbf{c} \cdot \mathbf{D} \cdot \mathbf{c} + \mu_4 [(\mathbf{D} \cdot \mathbf{c})\mathbf{c} + \{(\mathbf{D} \cdot \mathbf{c})\mathbf{c}\}^T] + \mu_5 \mathbf{c} \cdot \mathbf{D} \cdot \mathbf{a} \{\mathbf{ac} + (\mathbf{ac})^T\} \\
& + \lambda_1 [\mathbf{Aa} + (\mathbf{Aa})^T + \{(\mathbf{D} \cdot \mathbf{a})\mathbf{a}\}^T - (\mathbf{D} \cdot \mathbf{a})\mathbf{a}] + \lambda_2 [\mathbf{Cc} + (\mathbf{Cc})^T + \{(\mathbf{D} \cdot \mathbf{c})\mathbf{c}\}^T - (\mathbf{D} \cdot \mathbf{c})\mathbf{c}] \\
& + \lambda_3 [\mathbf{c} \cdot \mathbf{A} \{\mathbf{ac} + (\mathbf{ac})^T\} + \mathbf{c} \cdot \mathbf{D} \cdot \mathbf{a} \{\mathbf{ac} - (\mathbf{ac})^T\}] \\
& + \lambda_4 \{(\mathbf{Aa})^T - \mathbf{Aa}\} + \lambda_5 \{(\mathbf{Cc})^T - \mathbf{Cc}\} + \lambda_6 \mathbf{c} \cdot \mathbf{A} \{\mathbf{ac} - (\mathbf{ac})^T\} \\
& + \kappa_1 [(\mathbf{D} \cdot \mathbf{a})\mathbf{c} + \{(\mathbf{D} \cdot \mathbf{a})\mathbf{c}\}^T + (\mathbf{D} \cdot \mathbf{c})\mathbf{a} + \{(\mathbf{D} \cdot \mathbf{c})\mathbf{a}\}^T] \\
& + \kappa_2 [\mathbf{a} \cdot \mathbf{D} \cdot \mathbf{a} \{\mathbf{ac} + (\mathbf{ac})^T\} + 2\mathbf{a} \cdot \mathbf{D} \cdot \mathbf{ca}] \\
& + \kappa_3 [\mathbf{c} \cdot \mathbf{D} \cdot \mathbf{c} \{\mathbf{ac} + (\mathbf{ac})^T\} + 2\mathbf{a} \cdot \mathbf{D} \cdot \mathbf{ccc}] \\
& + \tau_1 [\mathbf{Ca} + (\mathbf{Ca})^T + \{(\mathbf{D} \cdot \mathbf{a})\mathbf{c}\}^T - (\mathbf{D} \cdot \mathbf{a})\mathbf{c}] + \tau_2 [\mathbf{Ac} + (\mathbf{Ac})^T + \{(\mathbf{D} \cdot \mathbf{c})\mathbf{a}\}^T - (\mathbf{D} \cdot \mathbf{c})\mathbf{a}] \\
& + \tau_3 [2(\mathbf{c} \cdot \mathbf{Aaa}) + \mathbf{a} \cdot \mathbf{D} \cdot \mathbf{a} \{\mathbf{ac} - (\mathbf{ac})^T\}] + \tau_4 [2(\mathbf{c} \cdot \mathbf{Acc}) + \mathbf{c} \cdot \mathbf{D} \cdot \mathbf{c} \{\mathbf{ac} - (\mathbf{ac})^T\}] \\
& + \tau_5 \{(\mathbf{Ac})^T - \mathbf{Ac} + (\mathbf{Ca})^T - \mathbf{Ca}\}
\end{aligned} \tag{5}$$

となる． $\mu_i$  ( $i=0 \sim 5$ ),  $\lambda_i$  ( $i=1 \sim 6$ ),  $\kappa_i$  ( $i=1 \sim 3$ ),  $\tau_i$  ( $i=1 \sim 5$ ) は粘性係数,  $\mathbf{D}$  は変形速度テンソル

$$2\mathbf{D} = (\nabla \mathbf{v})^T + (\nabla \mathbf{v}) \tag{6}$$

である． $\mathbf{A}$ ,  $\mathbf{C}$  は, それぞれ  $\mathbf{a}$ ,  $\mathbf{c}$  の流れに対する相対角速度ベクトルで,

$$\mathbf{A} = D\mathbf{a}/Dt - \boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{a} \tag{7a}$$

$$\mathbf{C} = D\mathbf{c}/Dt - \boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{c} \tag{7b}$$

となる．ここで  $\boldsymbol{\Omega}$  は渦度テンソル

$$2\boldsymbol{\Omega} = (\nabla \mathbf{v})^T - (\nabla \mathbf{v}) \tag{8}$$

である．式(3)の  $\mathbf{g}^a$ ,  $\mathbf{g}^c$  は以下のように表される．

$$\mathbf{g}^a = -2(\lambda_1 \mathbf{D} \cdot \mathbf{a} + \lambda_3 \mathbf{cc} \cdot \mathbf{D} \cdot \mathbf{a} + \lambda_4 \mathbf{A} + \lambda_6 \mathbf{cc} \cdot \mathbf{A} + \tau_2 \mathbf{D}^c + \tau_3 \mathbf{ca} \cdot \mathbf{D} \cdot \mathbf{a} + \tau_4 \mathbf{cc} \cdot \mathbf{D} \cdot \mathbf{c} + \tau_5 \mathbf{C}) \tag{9}$$

$$\mathbf{g}^c = -2(\lambda_2 \mathbf{D} \cdot \mathbf{c} + \lambda_5 \mathbf{C} + \tau_1 \mathbf{D} \cdot \mathbf{a} + \tau_5 \mathbf{A}) \tag{10}$$

一方  $\mathbf{a}$ ,  $\mathbf{c}$  ベクトルは, 次式の角運動方程式で規定される．

$$\mathbf{0} = \nabla \cdot \left( \frac{\partial w}{\partial \nabla \mathbf{a}} \right) - \frac{\partial w}{\partial \mathbf{a}} + \boldsymbol{\gamma} \mathbf{a} + \boldsymbol{\mu} \mathbf{c} + \nabla \times \boldsymbol{\beta} \tag{11}$$

$$\mathbf{0} = \nabla \cdot \left( \frac{\partial w}{\partial \nabla \mathbf{c}} \right) - \frac{\partial w}{\partial \mathbf{c}} + \boldsymbol{\mu} \mathbf{a} + \boldsymbol{\tau} \mathbf{c} \tag{12}$$

式(11), (12)中の  $\boldsymbol{\gamma}$ ,  $\boldsymbol{\tau}$ ,  $\boldsymbol{\mu}$ ,  $\boldsymbol{\beta}$  は, 式(1)に示した  $\mathbf{a}$ ,  $\mathbf{c}$  の束縛条件より発生する未定乗数である．

**2・3 座標系** 本研究で用いた流れ領域と全体座標系を図3に示す．無限の広がりを持つ2枚の平板が,  $z=0$  と  $z=H$  の位置に,  $x-y$  平面と平行な状態で配置されている．

下部平板を固定し, 上部平板を  $x$  方向に一定速度  $U$  で運動させることで, 平板間の液晶

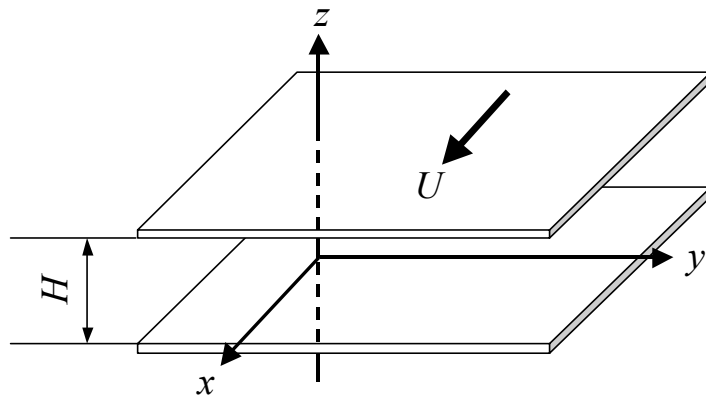


Fig. 3 Flow and global coordinate system

せん断流を与える．このような流れ領域では，速度場，配向場は  $x$  ,  $y$  には依存せず  $z$  のみの関数となる．

前節で示したようにスメクティック液晶の基礎式はかなり複雑で，そのままでは数値解を得難い．そこで本研究では，スメクティック液晶流動に関する研究の第一段階として，層を固定することで簡略化を図る．すなわち，図2における層法線ベクトル  $\mathbf{a}$  を定ベクトルとし，分子配向を表す  $\mathbf{c}$  ディレクタの変化のみに注目する．層固定による本結果は，今後展開されるべき層変化を許した研究に資する基礎データであると考えている．ある．そこで本研究では，層を固定することで簡略化を図る．すなわち図2における層法線ベクトル  $\mathbf{a}$  を定ベクトルとし，分子配向を表す  $\mathbf{c}$  ディレクタの変化のみに注目する．

2・4 層配置 本研究では，平行平板間における層配置として，図4に示すような3種の基本パターンを考える．層法線は，配置(a)では  $z$  軸に，配置(b)では  $y$  軸に，配置(c)では  $x$

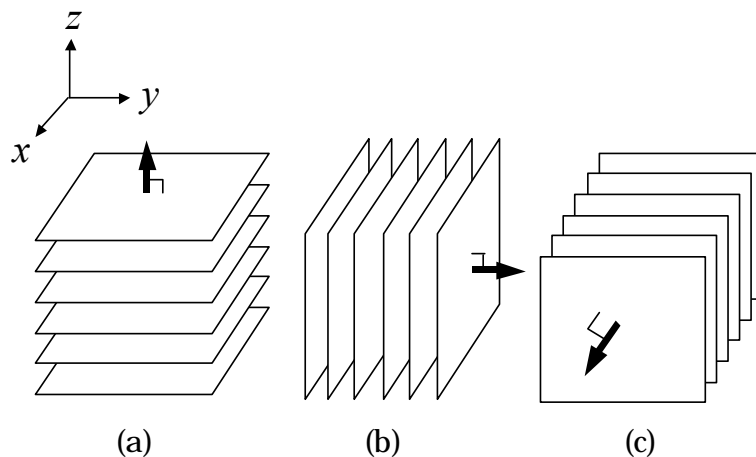


Fig. 4 Three typical layer arrangements

軸に平行である。しかし配置(c)では、上部平板が  $x$  方向に移動すると液晶に流動が発生するためには層が変形する必要があり、層固定の仮定と矛盾が生じる。そのため本研究では、配置(a)と配置(b)を計算対象とした。Leslieらに倣い以下では、配置(a)をplanar配置、配置(b)をbookshelf配置と呼ぶ<sup>(11)</sup>。

**2・4・1 planar配置** 図5(a)に局所座標系を示す。planar配置の場合、基礎式中の  $\mathbf{v}$ 、 $\mathbf{a}$ 、 $\mathbf{c}$  の各成分は以下ようになる。

$$\mathbf{v} = (u, v, 0)^T \quad (13a)$$

$$\mathbf{a} = (0, 0, 1)^T \quad (13b)$$

$$\mathbf{c} = (\cos \phi, \sin \phi, 0)^T \quad (13c)$$

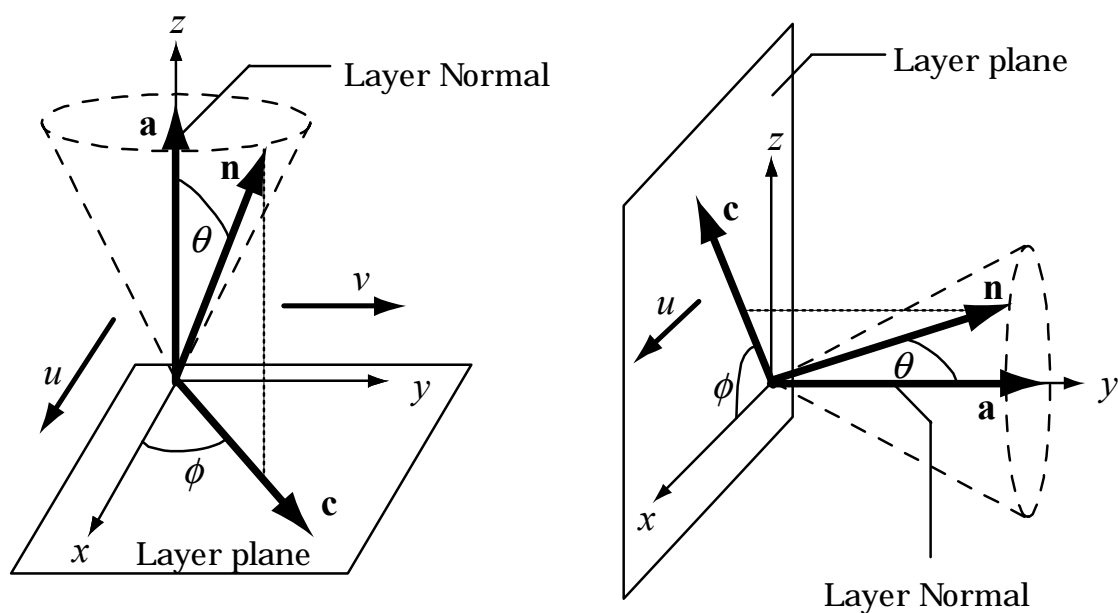
ここで  $u$  はせん断方向の速度、 $v$  はディレクタの変化によって発生する二次流れの  $y$  方向成分、 $\phi$  は  $\mathbf{c}$  ディレクタの  $x$  軸からの回転角である。

**2・4・2 bookshelf配置** 図5(b)に局所座標系を示す。bookshelf配置の  $\mathbf{v}$ 、 $\mathbf{a}$ 、 $\mathbf{c}$  の各成分は次式のようになる。

$$\mathbf{v} = (u, 0, 0)^T \quad (14a)$$

$$\mathbf{a} = (0, 1, 0)^T \quad (14b)$$

$$\mathbf{c} = (\cos \phi, 0, \sin \phi)^T \quad (14c)$$



(a) Planar layer arrangement

(b) Bookshelf layer arrangement

Fig. 5 Local coordinate systems

planar配置と同様,  $u$  はせん断方向速度成分,  $\phi$  はcディレクタの  $x$  軸からの回転角である. bookshelf配置では  $y$  方向が層法線方向であり, 層を固定した仮定と矛盾が生じるため, 二次速度  $v$  は発生しないものとした.

### 3. 数値計算

**3・1 数値計算** 基礎式を図3の座標系で展開後, 代表長さとして平板間隔  $H$ , 代表速度として上部平板速度  $U$ , 代表粘性係数として粘性係数  $\mu_0$ , 代表弾性定数として  $\bar{K}$  (展開後の式には, planar配置の場合は  $K_2^c$  のみが, bookshelf配置の場合は  $K_1^c, K_2^c, K_3^c$  が存在する. そこでplanar配置の場合は  $\bar{K} = K_2^c$ , bookshelf配置の場合は  $\bar{K} = (K_1^c + K_2^c + K_3^c)/3$ ) を用いて無次元化する (特に断らない限り, 以後の物理量は無次元である). 無次元化された式には, レイノルズ数  $Re$  とエリクセン数  $Er$  (粘性力と弾性力の比を表す液晶特有の無次元数)

$$Re = \rho HU / \mu_0 \quad (15)$$

$$Er = \mu_0 HU / \bar{K} \quad (16)$$

が現れる (上式右辺の物理量は有次元).

無次元化された基礎式を二次精度の中心差分で離散化し, 非定常項を残して時間進行法で計算した. 速度場および配向場の時間方向相対残差の全格子点平均値が  $1 \times 10^{-5}$  未満になったとき定常状態に達したと判断し計算を打ち切った.

速度場の境界条件として, 固体表面ではすべり無しとした. 一方配向場の境界条件であるが, 固体表面では表面処理により液晶分子の配向を自由に制御できる. 本研究では, 上下の平板面では固定配向を選択した. 具体的な値については結果のところの説明する.

**3・2 物性値** 基礎式には多数の粘性係数と弾性定数が含まれている. これらの物性値を直接測定することは不可能に近く, 実際, 過去の測定例は皆無である. 本研究では, 基礎式を図3の座標系で展開し, さらに層法線ベクトル  $\mathbf{a}$  を定ベクトルとした簡略化を導入した後, 式に残っている弾性定数3個と粘性係数13個の値を以下の方法で決定した.

弾性定数について, Carlsson らは式(4)とは異なる形の自由エネルギーの式<sup>(12)</sup>, および, 式に含まれる弾性定数の一部の値を提案している<sup>(13)</sup>. また, 式(4)の弾性定数と Carlsson らが新たに提案している式の弾性定数の関係も明らかにされており<sup>(14)</sup>, 本研究の展開後の式に表れる弾性定数はそれぞれ  $K_1^c = 0$ ,  $K_2^c = \theta^2 \times 10^{-11} \text{ N}$ ,  $K_3^c = 0$  となる. 式中の  $\theta$  は  $\mathbf{a}$  ベクトルに対する  $\mathbf{n}$  ディレクタの傾き角で (図2参照), 液晶の種類と温度に依存する. 本研究では代表的なスメクテ



ティック液晶である terephthal-bis-4-n-butylaniline (以下 TBBA) を選択した。TBBA は 144 ~ 172 でスメクティック C 相を発現するので<sup>(15)</sup>, 160 での傾き角,  $\theta = 18^\circ$  を用いる<sup>(16)</sup>。

粘性係数に関しては, Osipov ら<sup>(17)</sup>によって提案された粘性係数の理論式を用いた(付録参照)。式中の  $S$  はネマティック秩序パラメータで  $S = 0.85$ ,  $\beta$  は形状係数で  $\beta = 0.99$ ,  $Q$  は配向分布関数の 4 次モーメントで, Maier - Saupe ポテンシャル<sup>(18)</sup>の仮定と  $S = 0.85$  より  $Q = 0.59$  とした<sup>(19)</sup>。  $T$  は温度で  $T = 160$ ,  $T_{NI}$  はネマティック - 等方相転移温度で, TBBA の場合  $T_{NI} = 234$  である。  $c$  は分子の数密度,  $\lambda$  は分子の摩擦係数で, この両者については信頼できる参考データが見当たらない。しかし両者の積  $c\lambda$  はすべての粘性係数に含まれているので, 13 個の粘性係数の中で 1 個でも既知であれば  $c\lambda$  を逆算でき, その結果すべての粘性係数を見積もることができる。 Carlsson らは<sup>(13)</sup>, 実験に基づいて  $\lambda_5 = 0.1\theta^2 \text{ Pa}\cdot\text{s}$  を提案しており, 従って  $c\lambda = 5.68 \times 10^{-1} \text{ Pa}\cdot\text{s}$  を得た。表 1 に 13 個の粘性係数を示す。

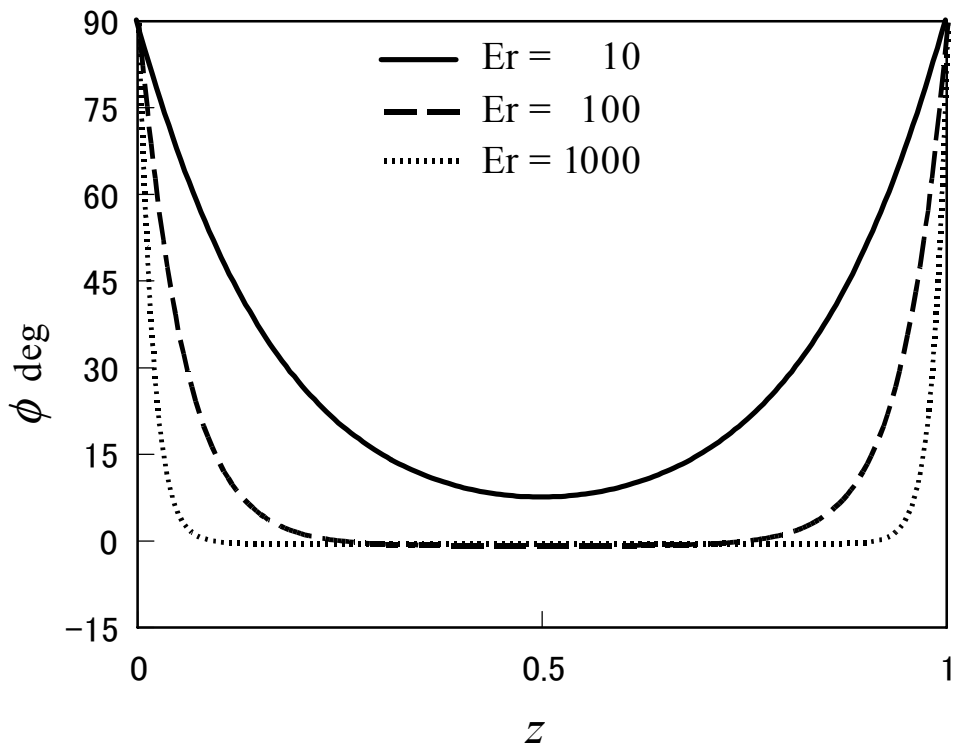
なお, 密度  $\rho = 1000 \text{ kg/m}^3$  とした。物性値を固定すればエリクセン数とレイノルズ数は互いに独立でない。以後の結果では, エリクセン数をパラメータとして選択する。この場合  $Re$  は planar 配置の場合  $Re = 1.55 \times 10^{-6} Er$ , bookshelf 配置の場合  $Re = 5.18 \times 10^{-7} Er$  となる。

Table 1 Viscosity coefficients of TBBA at 160 °C (unit : Pa·s)

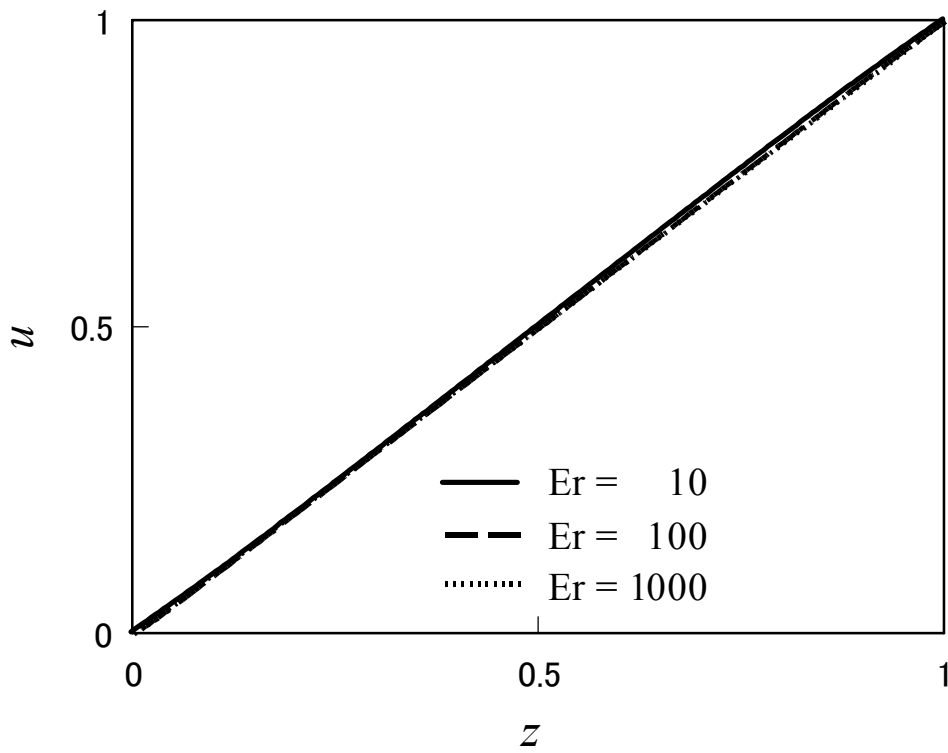
|             |                        |             |                        |
|-------------|------------------------|-------------|------------------------|
| $\mu_0$     | $2.52 \times 10^{-2}$  | $\mu_2$     | $1.79 \times 10^{-1}$  |
| $\mu_3$     | $-3.03 \times 10^{-3}$ | $\mu_4$     | $1.88 \times 10^{-2}$  |
| $\mu_5$     | $-5.74 \times 10^{-2}$ |             |                        |
| $\lambda_1$ | $-2.19 \times 10^{-1}$ | $\lambda_2$ | $-2.31 \times 10^{-2}$ |
| $\lambda_3$ | 0                      | $\lambda_4$ | $9.35 \times 10^{-2}$  |
| $\lambda_5$ | $9.87 \times 10^{-3}$  | $\lambda_6$ | 0                      |
| $\tau_1$    | $-7.10 \times 10^{-2}$ | $\tau_5$    | $3.04 \times 10^{-2}$  |

#### 4 . 計算結果および考察

**4・1 planar 配置** 図 6(a) ~ (c) に planar 配置の計算結果を示す。図(a), (b)は, 平板間位置  $z$  に対する c ディレクタの回転角  $\phi$  および  $x$  方向速度成分  $u$  を, 図(c)はエリクセン数

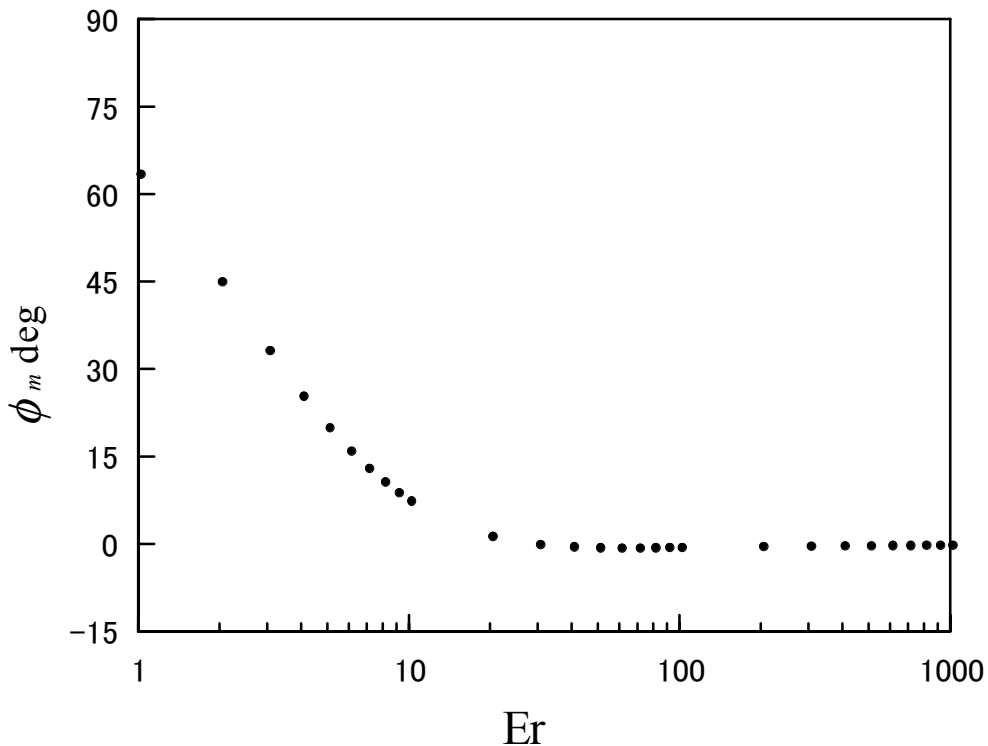


(a) Orientation angles



(b) Velocity profiles

(c) 図は次項 .



(c) Orientation angles at the middle plane

Fig. 6 Results for planar layer arrangement

Er に対する平板間中央位置 ( $z=0.5$ ) での  $\phi$  の値  $\phi_m$  をプロットしたものである。上下壁面での配向境界条件として  $\phi=90^\circ$  を選択した。なお二次速度  $v$  は配向場の変化によって過渡的に発生するので、定常状態では 0 となる。

流動によってディレクタは流れ方向に配向するので、図 6(a) に示すように、 $\phi$  は上下の平板 ( $z=0, 1$ ) での固定値  $90^\circ$  から平板間中央に向かって減少し、中央部で最小値をとる。Er が粘性力 (流動の影響) と弾性力 (壁面配向角の影響) の比を表すことから、上記の傾向は Er が大きいほど顕著である。すなわち Er=100 では  $\phi$  の最小値は  $0^\circ$  に達し、Er=1000 では  $0^\circ$  の領域が広範囲にわたっており、壁面近傍には配向境界層が形成されている。一方図 6(b) では、 $u$  は Er の値にかかわらずほぼ直線分布を示している。図 6(c) より、Er の増加に伴い  $\phi_m$  は減少するが、Er が 1~10 の範囲で減少の割合は著しく、Er が 100 付近から  $\phi_m$  は一定値  $0^\circ$  を示している。このとき平板間中央の c ディレクタは流れ方向に配向し、流れから受けるトルクが最小になり、流れに対して c ディレクタが最も安定した状態である。

#### 4・2 bookshelf 配置

4・2・1 単純せん断流中の定常解 bookshelf 配置では層平面がせん断平面に一致す

るため、層平面内を回転するcディレクタは in-plane 配向状態にあるネマティック液晶のディレクタに似た挙動を示すと考えられる。単純せん断流中のネマティック液晶のディレクタは、6種類ある粘性係数 ( $\alpha_1 \sim \alpha_6$ ) の中で  $\alpha_3$  の符号に依存してアライニングまたはタンブリングというまったく異なった挙動を示すことが知られている<sup>(20)~(23)</sup>。アライニングの場合ディレクタは  $\alpha_2$  と  $\alpha_3$  の比によって決定される角度で静止するのに対し、タンブリングの場合、ディレクタはせん断平面内で回転し続ける。

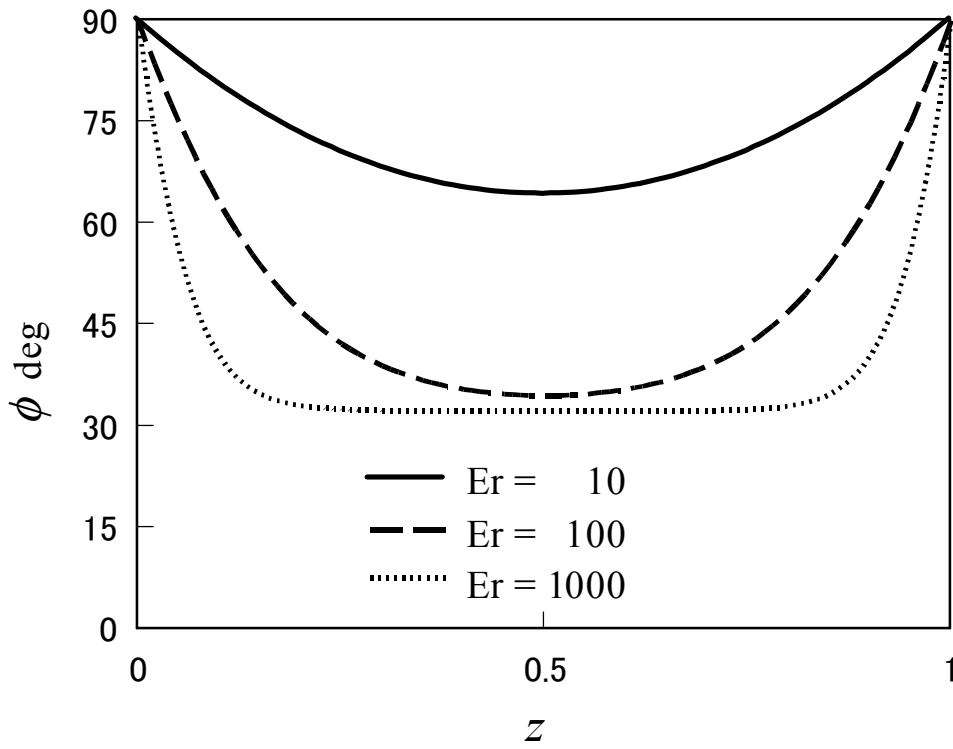
ここで、スメクティック C 液晶の bookshelf 配置における単純せん断流中での  $\phi$  の定常解  $\phi_s$  について検討する。式(12)より  $\phi_s$  は次式で表される。

$$\phi_s = \frac{1}{2} \cos^{-1} \left( -\frac{\lambda_5}{\lambda_2} \right) \quad (17)$$

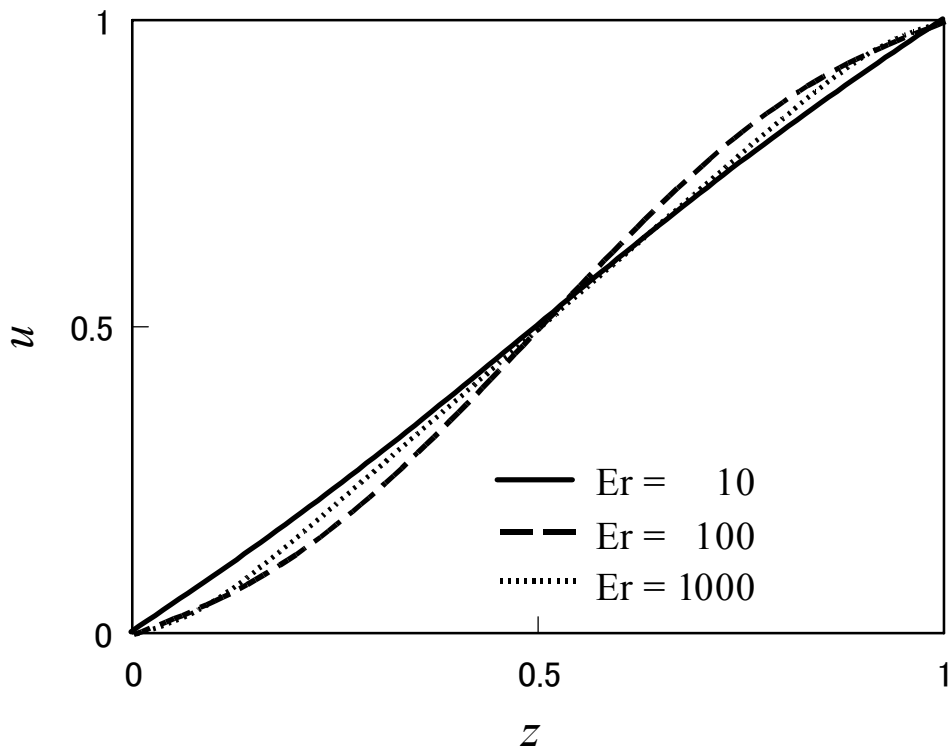
従って  $\phi_s$  が定常解を有する条件は  $|\lambda_2| \geq |\lambda_5|$  であり、このときアライニング挙動を示す。これに対して  $|\lambda_2| < |\lambda_5|$  の場合  $\phi_s$  は定常解を持たない。つまりcディレクタに働くトルクが0になる配向角は存在せず、結局cディレクタは回転し続けるタンブリング挙動となる。表1に示したように、本計算に用いた 160 の TBBA の  $\lambda_2$  と  $\lambda_5$  は  $|\lambda_2| \geq |\lambda_5|$  の関係を満たす。しかし粘性係数は温度のわずかな違いによって変化することから、 $|\lambda_2| < |\lambda_5|$  の場合を想定した計算も有用であると考えられる。以下では、表1の値をそのまま用いた場合と、 $\lambda_5$  を3倍することで  $|\lambda_2| < |\lambda_5|$  の場合の計算結果を示すことにする。なお配向境界条件として、いずれの場合も上下の平板面で  $\phi = 90^\circ$  を選択した。

**4・2・2  $|\lambda_2| \geq |\lambda_5|$  の場合** 図7(a)~(c)に、それぞれ  $\phi$ 、 $u$  の分布、および  $E_r$  に対する平板間中央位置での  $\phi$  の値  $\phi_m$  を示す。図7(a)、(c)より、図6(a)、(c)の planar 配置の場合と同様の結果が得られていることがわかる。ただし、 $E_r$  の増加に対して  $\phi_m$  は減少するが、その最小値は図6のように  $0^\circ$  には至らず、 $E_r$  が数100以上で約  $30^\circ$  余の値になっている。 $E_r$  の増加は弾性力または壁面配向角の影響の低下を意味することから、高  $E_r$  領域の流れ状態は近似的に単純せん断流と見なせる。実際、式(17)に表1の値を代入すると  $\phi_s = 32.3^\circ$  となり本計算結果と一致しており、アライニング挙動を示していることが確認できる。

図7(b)の  $u$  の分布では、図6(b)と比較して線形分布からのずれが増加しており、さらに  $E_r$  による違いも見られる。これは、bookshelf 配置ではcディレクタはせん断平面内で変化するので、cディレクタの姿勢が  $u$  の分布に、より顕著に現れたためと考えられる。

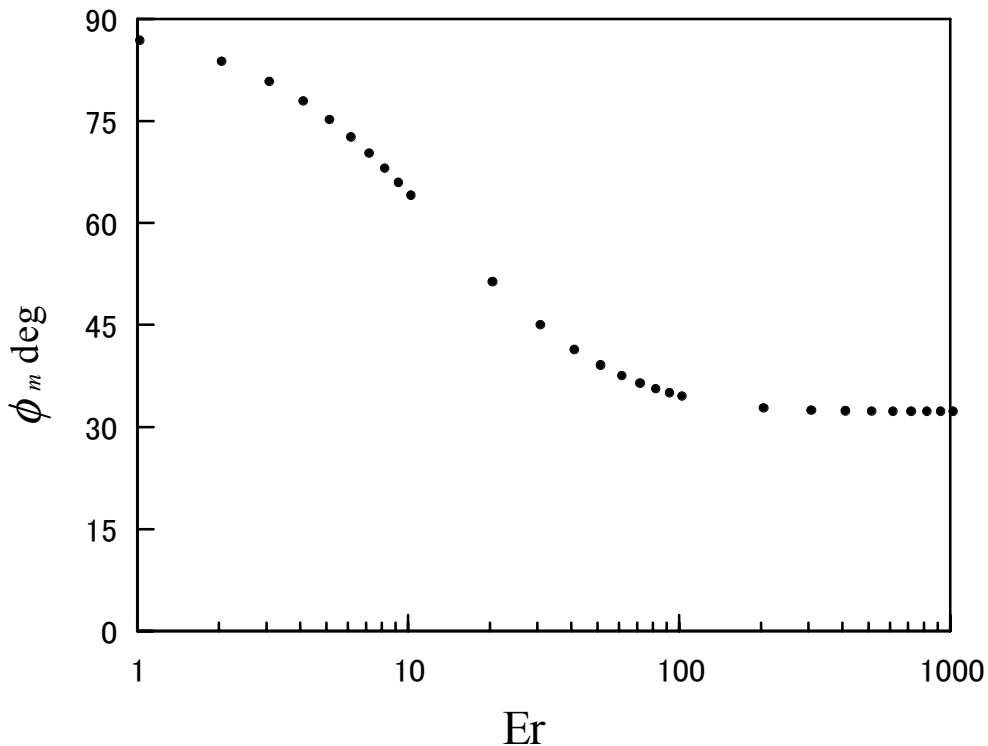


(a) Orientation angles



(b) Velocity profiles

(c) 図は次項 .

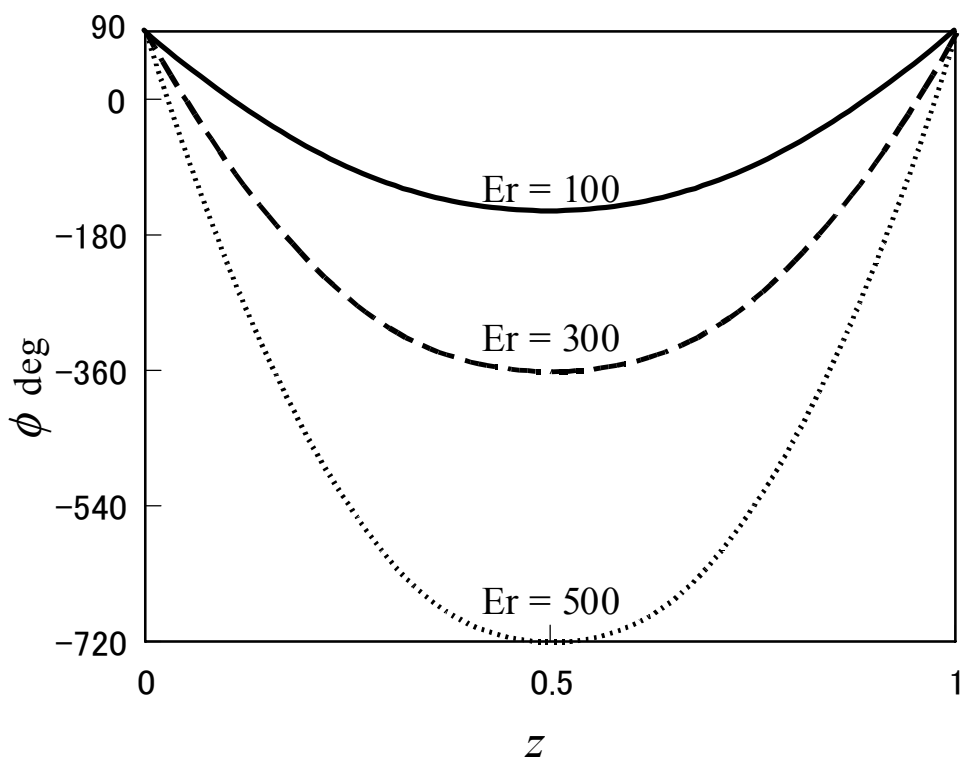


(c) Orientation angles at the middle plane

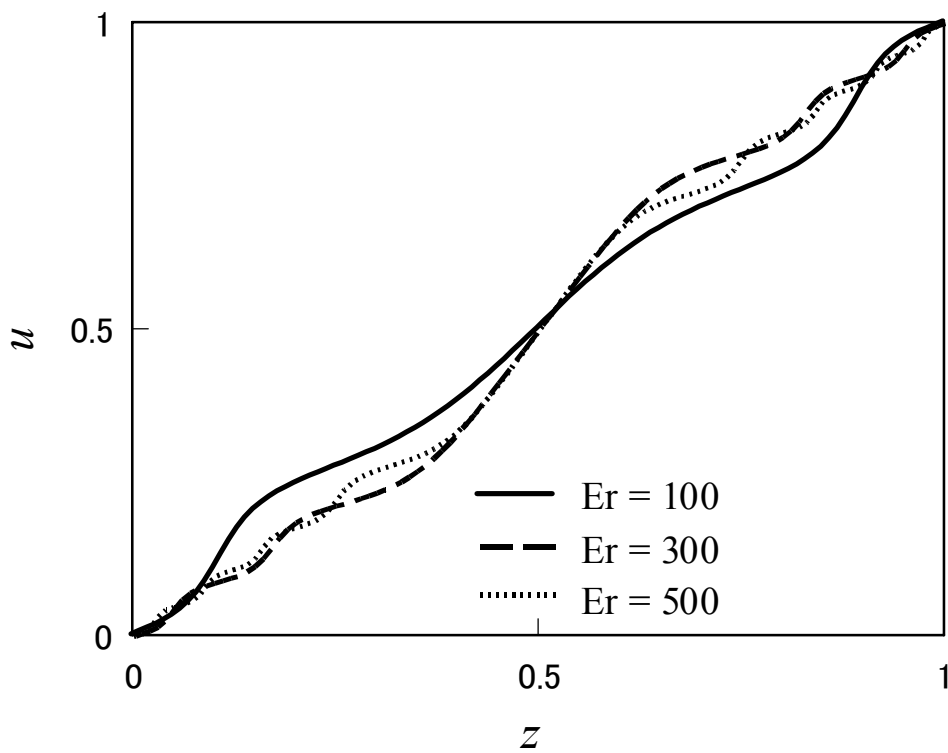
Fig. 7 Results for bookshelf layer arrangement with  $|\lambda_2| \geq |\lambda_5|$

**4・2・3  $|\lambda_2| < |\lambda_5|$  の場合** 図 8(a) ~ (c) に結果を示す．図より  $Er$  とともに  $\phi$  は大きく減少しており， $c$  ディレクタは平板間で数回転している．すなわち明らかにタンブリング挙動を示していることが理解できる．単純せん断流中では流動の効果のみが存在するのでディレクタは回転し続けるが，本計算のように壁面配向角の影響が併存する場合，ディレクタに働くトルクが 0 となる角度が必ず存在する．この角度は，図 8(c) から明らかなように， $Er$  の連続関数とはならず，タンブリング挙動特有の不連続分布となる．すなわち  $\phi_m$  が値を有する角度は， $\phi_m = -180^\circ \times m$  ( $m=1, 2, 3, \dots$ ) 付近のみである．このような角度では  $c$  ディレクタは流れ方向に配向し，流れから受けるトルクが小さい．一方， $c$  ディレクタが流れに対し直交するような角度では，流れから受けるトルクが大きく， $c$  ディレクタは回転する．そのため図のような不連続分布になる．

図 8(b) に示す  $u$  の分布は，図 7(b) に示したアライニングの場合に比べより複雑である．アライニング挙動では  $c$  ディレクタは  $30^\circ \sim 90^\circ$  の範囲で分布するのに対し，タンブリング挙動では数  $100^\circ$ ，または数回転の変化が生じ，これが速度分布に反映された結果である．ネマティック液晶の平行回転円板間の流れ<sup>(23)</sup> においても同様の複雑な速度場が確認されて

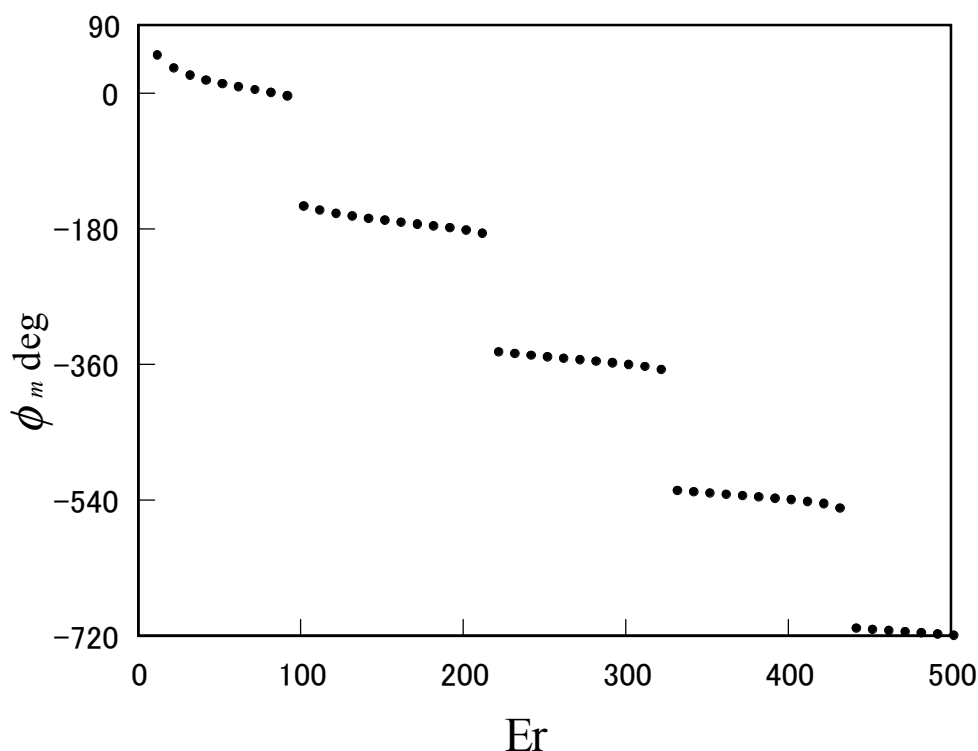


(a) Orientation angles



(b) Velocity profiles

(c) 図は次項 .



(c) Orientation angles at the middle plane

Fig. 8 Results for bookshelf layer arrangement with  $|\lambda_2| < |\lambda_5|$

おり，ネマティック液晶，スメクティック液晶にかかわらず，タンプリング挙動特有の現象である。

## 5. 結 言

本研究では Leslie らによって提案されたスメクティック C 液晶の連続体理論を用いて，平行平板間せん断流れの数値シミュレーションを行った．式中に多数含まれる粘性係数と弾性定数については，Osipov らと Carlsson らが提案した理論式とスメクティック液晶である TBBA のディレクタの傾き角から見積もった．計算を簡略化するため，スメクティック液晶特有の層が，平板に平行 (planar 配置) および垂直 (bookshelf 配置) である典型的な 2 種類のみを取り上げ，且つ，層が空間的に変化しないと仮定した．得られた結果をまとめて以下に示す．

(1) planar 配置の場合，c ディレクタは流動方向に配向する．この傾向はエリクセン数  $Er$  が大きいほど顕著であり，高  $Er$  の場合，壁面近傍には配向境界層が形成される．平板間速度分布は  $Er$  に依存せずほぼ直線である．



(2) bookshelf 配置の場合，c デイレクタは粘性係数  $\lambda_2$  と  $\lambda_5$  の大小関係に依存して，ネマティック液晶と類似であるアライニング挙動 ( $|\lambda_2| \geq |\lambda_5|$ ) およびタンブリング挙動 ( $|\lambda_2| < |\lambda_5|$ ) を示す．タンブリング挙動の場合，平板間速度分布は極めて複雑である．また平板間中央位置での c デイレクタの配向角は  $E_r$  に対して階段状の不連続分布となる．このような傾向は，ネマティック液晶，スメクティック液晶にかかわらずタンブリング挙動特有の現象である．

## 付 録

Osipov らによって提案された粘性係数の理論式を以下に示す．式中の文字については本文を参照のこと．

$$\mu_0 = c\lambda\beta(7 - 5S - 2Q)/35$$

$$\mu_2 = c\lambda\beta(3S + 4Q)\cos^2\theta/14$$

$$\mu_3 = -c\lambda\beta Q \sin^4\theta$$

$$\mu_4 = c\lambda\beta(3S + 4Q)\sin^2\theta/14$$

$$\mu_5 = -c\lambda\beta Q \sin^2 2\theta/2$$

$$\lambda_1 = -c\lambda S \cos^2\theta/2$$

$$\lambda_2 = -c\lambda S \sin^2\theta/2$$

$$\lambda_3 = 0$$

$$\lambda_4 = \frac{c\lambda S^2(7 + 5S - 12Q)(4.451T_{NI}/T)^2}{70(2 + 4.451ST_{NI}/T)} \cos^2\theta$$

$$\lambda_5 = \frac{c\lambda S^2(7 + 5S - 12Q)(4.451T_{NI}/T)^2}{70(2 + 4.451ST_{NI}/T)} \sin^2\theta$$

$$\lambda_6 = 0$$

$$\tau_1 = -c\lambda S \sin 2\theta/4$$

$$\tau_5 = \frac{c\lambda S^2(7 + 5S - 12Q)(4.451T_{NI}/T)^2}{140(2 + 4.451ST_{NI}/T)} \sin 2\theta$$

## 2・2 平行平板間入り口流れ

前節では流れ場に代表的な一次元流れである平行平板間せん断流れを用いて計算を行なった．本節では流れ場により高度な平行平板間入り口流れを用いて計算を行なう．入り口

流れでは流体は流路入り口で一様な速度分布を持ち，流路に進入した後は壁面の影響を受け，速度分布が徐々に発達する．また，液晶製品の多くは製造プロセスの中に液晶材料を型やセルに注入する工程を持つことは既に述べたが，型やセルの入り口付近の流れはこの入り口流れであり，前節のせん断流れの場合より工学的価値が高いことは言うまでも無い．

以下では本研究の座標系，数値計算方法について説明した後，計算結果を紹介するが，基礎式に関しては前節と同じであり，あらためて紹介しない．

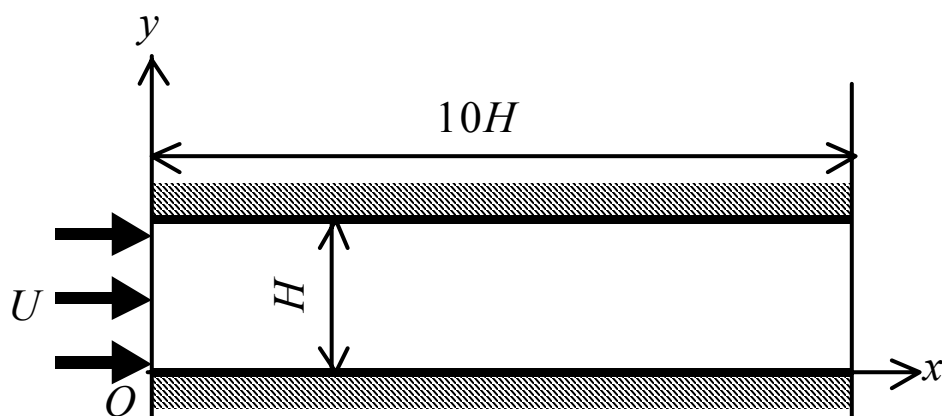


Fig. 2-1 Flow and coordinate systems of inlet flow.

### 2・2・1 座標系

図 2-1 に本研究で用いた座標系と流れ領域を示す． $x-y-z$  直交座標系中に 2 枚の平板が図の様に  $y=0$  と  $y=H$  の位置に， $z-x$  平面と平行な状態で配置されている．流路の長さは流路間隔の 10 倍をとする．流体は入り口で一様な速度  $U$  で流入し，流路出口では自由流 outgoing する．

ここで，平板間での層配置について考える．前節では平板間での層配置として，3 つの典型的な層配置を考えた．しかし，せん断方向と層法線方向が一致する場合，流動が発生するためには層が変形しなければならず，層を固定した仮定と矛盾が生じるため残った 2 通りについて計算を行なった．本研究でも同様に流動方向 ( $x$  方向) と層法線方向が一致した場合，流動が生じるためには層変形を必要とするため，仮定との矛盾を生じる．本研究では層法線方向が図 2-1 の  $z$  方向に一致した場合を考える．この場合，層平面は  $x-y$  平面に一致し，層法線方向である  $z$  方向の速度は発生しない．基礎式中の  $v$ ， $a$ ， $c$  の各成分は以下ようになる．

$$\mathbf{v} = (u, v, 0)^T \quad (2-1a)$$

$$\mathbf{a} = (0, 0, 1)^T \quad (2-1b)$$

$$\mathbf{c} = (\cos \phi, \sin \phi, 0)^T \quad (2-1c)$$

ここで  $\phi$  は  $x$  方向からの  $\mathbf{c}$  の配向角を表す。

## 2・2・2 数値計算

平板間の層配置から  $z$  方向の速度は発生しないため、二次元流れとなり、流れ関数  $\psi$  を導入することが出来る。流れ関数  $\psi$  を導入後、式(2-1a)中の  $u$ 、 $v$  は以下の様になる。

$$u = \frac{\partial \psi}{\partial y} \quad (2-2a)$$

$$v = -\frac{\partial \psi}{\partial x} \quad (2-2b)$$

基礎式中の  $\mathbf{v}$ 、 $\mathbf{a}$ 、 $\mathbf{c}$  に式(2-1)、(2-2)を代入し展開する。展開後、代表長さとして流路間隔  $H$ 、代表速度として入り口流速  $U$ 、代表粘性係数として粘性係数  $\mu_0$ 、代表弾性定数として  $\bar{K} = (K_1^c + K_2^c + K_3^c)/3$  (展開後の式には、 $K_1^c$ 、 $K_2^c$ 、 $K_3^c$  が存在する。)を用いて無次元化を行なう。無次元化後、式中には前節と同様にレイノルズ数  $Re$  とエリクセン数  $Er$  が現れる。無次元化後、基礎式を二次精度の中心差分で離散化し、緩和法を用いて計算を行なった。速度場および配向場の時間方向相対残差の全格子点平均値が  $1 \times 10^{-5}$  未満になったとき定常状態に達したと判断し計算を打ち切った。

速度場の境界条件として上下の平板面ではすべりなし条件を適用し、流路入り口では速度は一定、速度分布は一様とした。流路出口では自由流出を仮定し、ノイマン型境界条件  $\partial^2 \psi / \partial x^2 = 0$  を適用した。配向場の境界条件は上下の平板面では固定配向条件(固定する方向については後で説明する)、入り口では一様配向、出口では速度場と同様にノイマン型境界条件  $\partial^2 \phi / \partial x^2 = 0$  を用いた。初期条件としては速度場、配向場共に一様状態から計算を開始した。

基礎式に含まれる物性値の決定方法とその値は前節と全く同じである。物性値および流路間隔は一定であり、 $Re$ 、 $Er$  は共に入り口流速  $U$  のみの関数となる。 $Re$  と  $Er$  は互いに独立ではなく前節と同様に  $Re$  を従属変数として  $Er$  を計算パラメータとする。 $Re$  と  $Er$  の関係は  $Re = 5.18 \times 10^{-7} Er$  である。

### 2・2・3 計算結果および考察

本研究で用いた平行平板間入り口流れと前節の平行平板間せん断流れの bookshelf 配置を比較した場合、両者の流れ構造と層の配置の関係が酷似していることが分かる。前節の bookshelf 配置の場合、c ディレクタは in-plane を仮定されたネマティック液晶のディレクタに似た挙動を示すと考えられ、単純せん断流中で c ディレクタが定常解を持つ場合、持たない場合に分けて計算を行い、それぞれネマティック液晶のディレクタで確認されているアライニング、タンブリング挙動をスメクティック C 液晶の c において確認した。このとき、定常解の有無を決定するのは粘性係数の  $\lambda_2$  と  $\lambda_5$  で、 $|\lambda_2| \geq |\lambda_5|$  の場合 c ディレクタは定常解を持ち、 $|\lambda_2| < |\lambda_5|$  の場合定常解を持たない。前節で決定した粘性係数の値は  $|\lambda_2| \geq |\lambda_5|$  で c ディレクタは定常解を持つため、定常解を持たない場合は粘性係数  $\lambda_5$  の値を 3 倍して仮想的に  $|\lambda_2| < |\lambda_5|$  の場合を作り出した。

本研究でも前節と同様に  $|\lambda_2| \geq |\lambda_5|$  の場合、 $|\lambda_2| < |\lambda_5|$  の場合に分けて計算を行なう。上下の平板面では c ディレクタを平板に平行方向に固定した。以下にそれぞれの結果を示す。

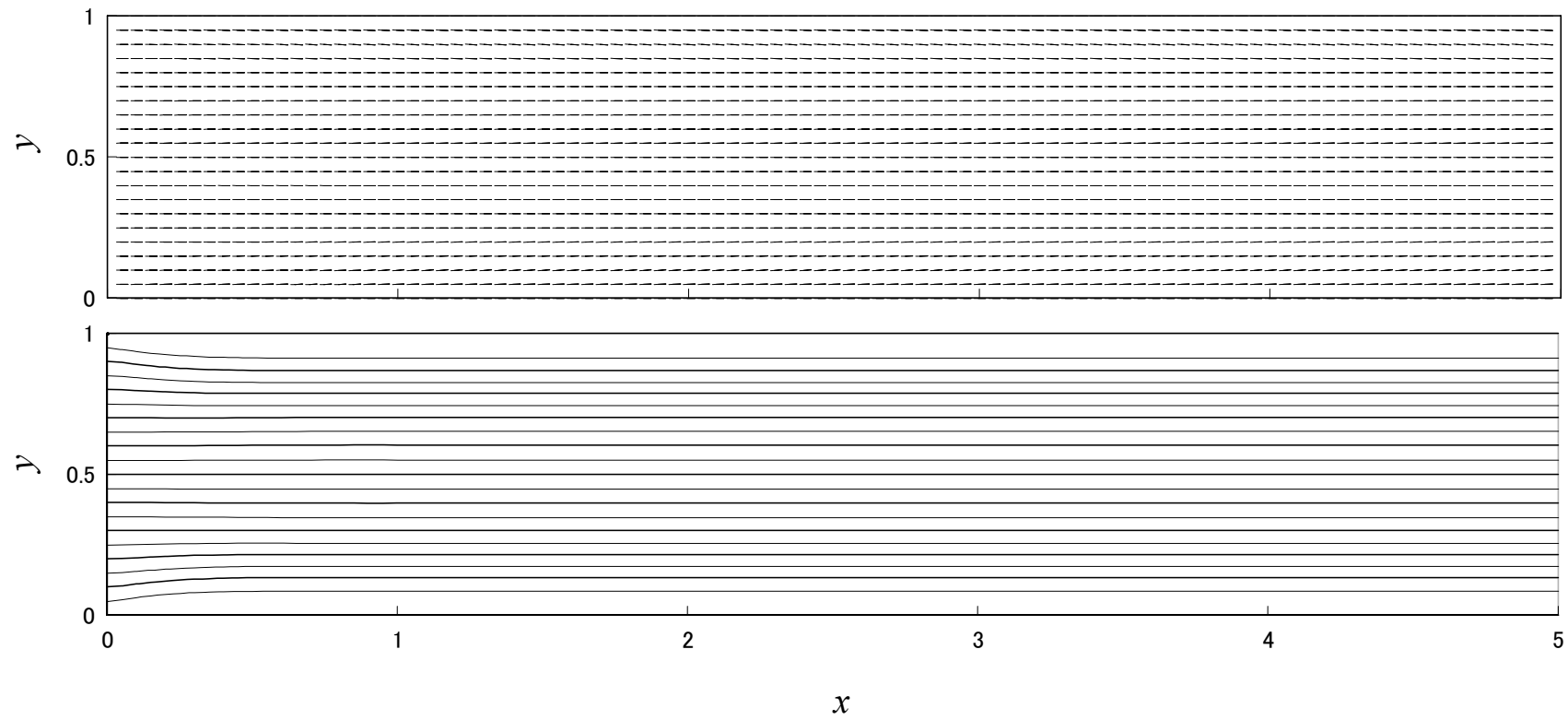
#### 2・2・3・1 $|\lambda_2| \geq |\lambda_5|$ の場合

図 2-2 に  $|\lambda_2| \geq |\lambda_5|$  の場合の計算結果を示す。各図ともに横軸、縦軸は共に平板間の位置を無次元で示している。上の図は c ディレクタの配向分布で、図中の短い線は c ディレクタを示す。下の図は流線を示し、流れ関数  $\psi$  を 0.05 毎に表示している。図 2-1 で示したように流路の長さは流路間隔の 10 倍としたが、下流では流れ方向 ( $x$  方向) については一定となるため、流れ方向の変化が著しい上流部分 ( $0 \leq x \leq 5$ ) の結果のみを示す。

(a) 図に  $Er = 10$  の場合の結果を示す。c ディレクタの分布では、上下の壁面近傍のディレクタが平行配向からわずかに傾いた。流れ場は  $y = 0.5$  を軸として上下対称であるため、傾く方向は流路の上半分と下半分で異なる。しかし、流路中央のディレクタはほぼ壁面に平行に配向したが、これも流れ場が上下対称であるため、流路中央 ( $y = 0.5$ ) のディレクタは上下対称を満たすように配向する必要があるためと考えられる。流線は流路入り口では一様流であるため間隔は均等だが、入口直後から壁面の影響を受けるため、流線の間隔が変化する。配向分布、流線ともに  $x \geq 1$  では  $x$  方向の変化は見られない。 $x \geq 1$  の範囲では  $y = 0.25$  と  $y = 0.75$  付近で流線の間隔が最も密であり、 $x$  方向の速度が最も大きいと考えられる。

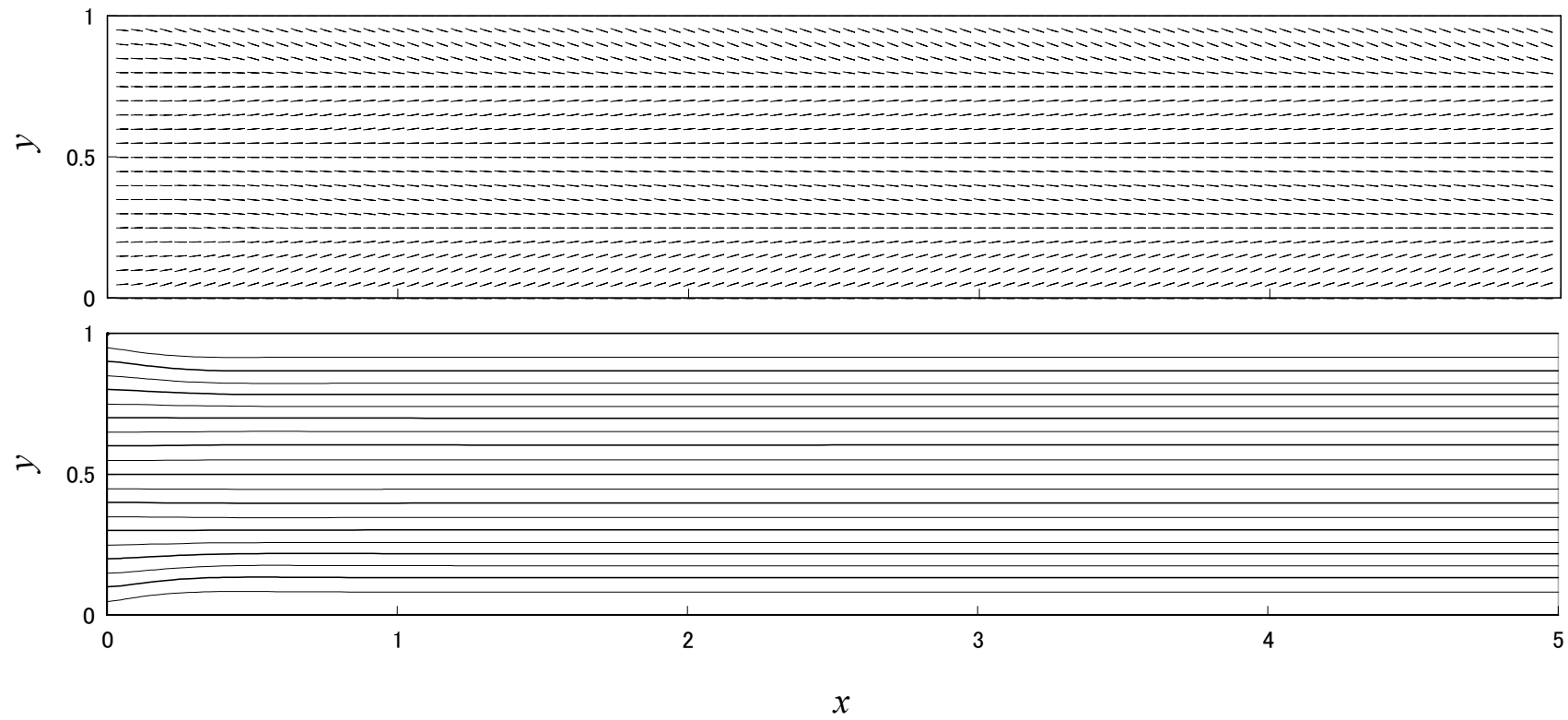
(b) 図  $Er = 100$  の場合の結果を示す。前にも述べたが本研究では、流路間隔および物性値は

固定しており， $Er$  の増加は入り口速度の増加に対応する．配向分布では流路中央  $y = 0.5$  では  $Er = 10$  の場合と同様に上下の対称性によって壁面と同じ方向に配向しているが， $Er = 10$  の場合と大きく異なり，流路の上部と下部でディレクタの傾く方向が一樣ではなく， $y = 0.25$  と  $y = 0.75$  付近でディレクタの傾く方向が変化している．ディレクタの傾く方向は  $y = 0.25, 0.5, 0.75$  付近で変化しており，これらの個所では速度勾配の方向が反転したと考



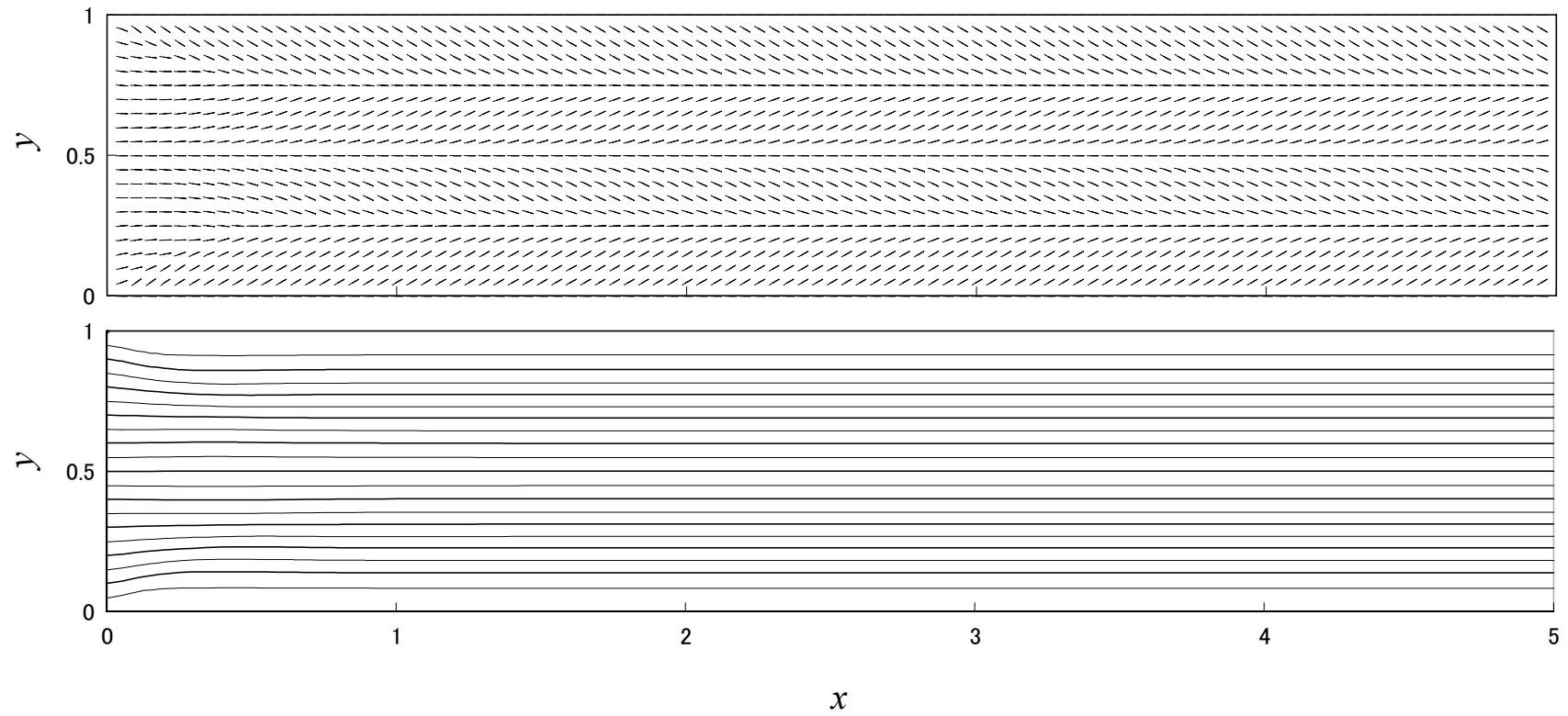
(a)  $Er = 10$

(b) , (c)図は次項 .



(b)  $Er = 100$

(c)図は次項 .



(c)  $Er = 700$

Fig. 2-2 Director profiles and streamlines of inlet flow of smectic C liquid crystals with  $|\lambda_2| \geq |\lambda_5|$ .



えられる。流線に関しては  $Er=10$  の場合と同様の結果を示し、 $y=0.25$  と  $y=0.75$  付近は流線の間隔が最も密な部分であり、従って  $x$  方向速度が最大となる。

(c) 図に  $Er=700$  の場合の結果を示す。配向分布、流線ともに (b) 図と同様の傾向を示しているが、配向分布においてディレクタの傾きは  $Er=100$  の場合に比べ大きくなっている。

図 2-3 に配向分布、流線ともに  $x$  方向について一様になった  $x=1$  での  $c$  ディレクタの配向角の  $y$  方向分布をエリクセン数ごとに示す。横軸は  $y$  方向の位置を無次元で示し、縦軸は  $c$  ディレクタの  $x$  方向からの配向角  $\phi$  を示す。

流路上下の対称性によって配向角の分布は  $y=0.5$  を中心として正負が逆転した分布を示す。点対称の分布を示している。  $Er$  の増加にともない流れ方向からの  $c$  ディレクタの傾きを表す  $\phi$  のゼロからの変化量が増加する。  $Er=500$  では  $\phi$  の最大（最小）値は約  $\pm 30^\circ$  であったが  $Er=700$  の場合でもそれらの値はほとんど変化せず、その値に達する範囲が増加した。前節の平行平板間せん断流れの場合においても同様の結果が確認され、単純せん断流の定常解に粘性係数を代入した場合の値と比較して、 $c$  ディレクタがアライニング現象を示していることを示した。同様の結果が二次元入口流れにおいても確認された。また、壁面近傍。

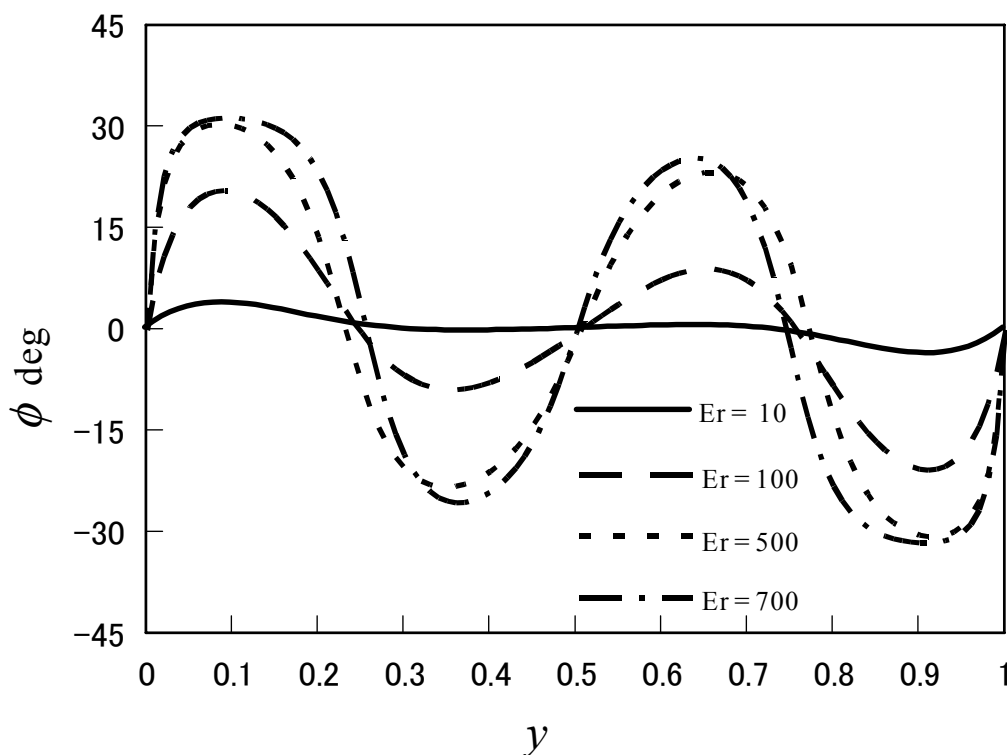


Fig. 2-3 Orientation angle profiles of  $c$ -director between parallel plates at  $x=1$ .

と流路中央付近の  $\phi$  のゼロからの変化量を比較すると壁面近傍の方が大きく、流路中央付近より壁面近傍の方が速度は大きいと考えられる

### 2・2・3・2 $|\lambda_2| < |\lambda_5|$ の場合

図 2-4 に  $|\lambda_2| < |\lambda_5|$  の場合の計算結果を示す。 $|\lambda_2| \geq |\lambda_5|$  の場合と同様に、c ディレクタの配向分布と流線を示す。横軸、縦軸は共に平板間の位置を無次元で示す。図 2-2 と同様に流路の上流部分 ( $0 \leq x \leq 5$ ) のみ結果を示す。

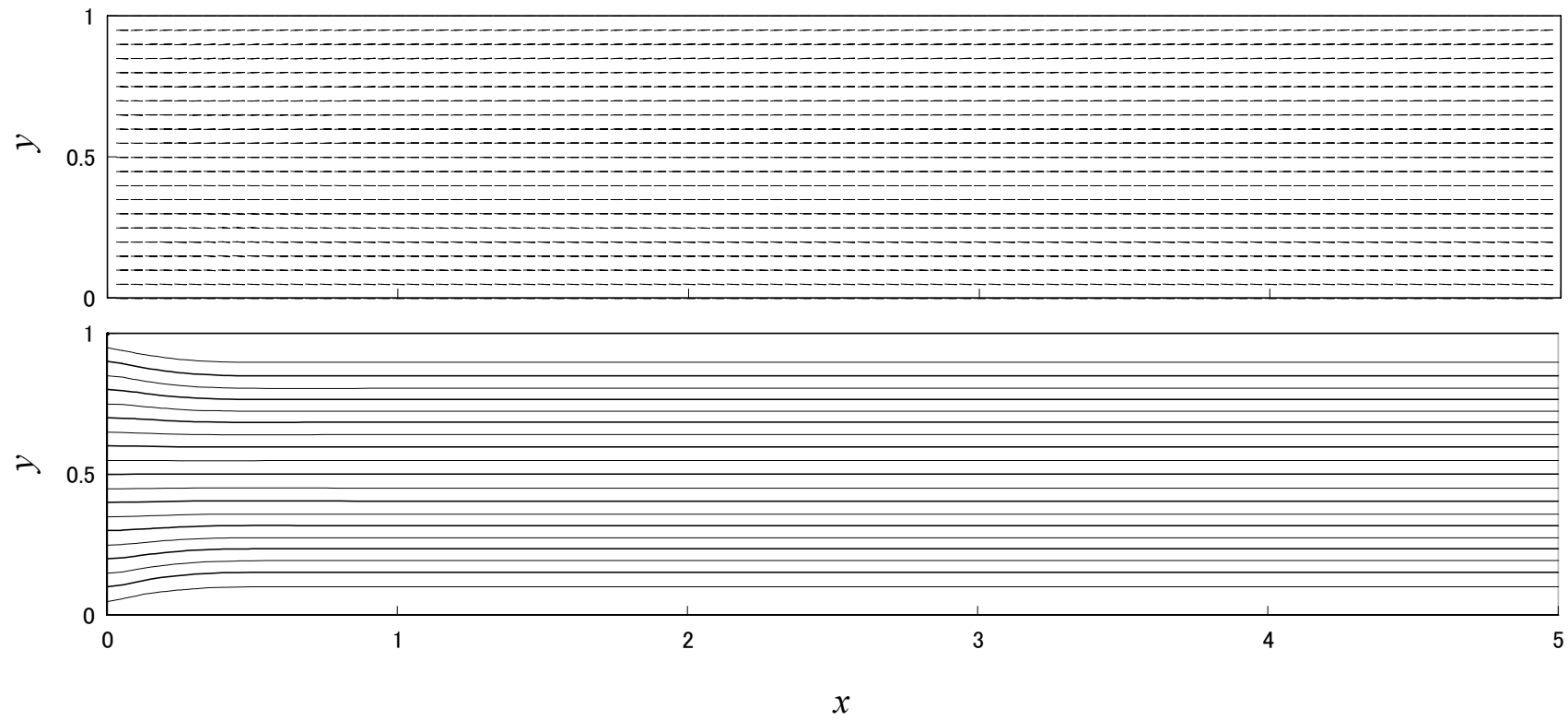
(a) 図に  $Er = 10$  の場合の結果を示す。 $Er = 10$  の場合、 $|\lambda_2| \geq |\lambda_5|$  の場合と同様に c ディレクタの分布では、上下の壁面近傍のディレクタが平行配向からわずかに傾いた。流れ場は  $y = 0.5$  を軸として上下対称であるため、傾く方向は流路の上半分と下半分で異なる。しかし、流路中央のディレクタはほぼ壁面に平行に配向した。同様に流線も流路入り口では一様流であるため間隔は均等だが、入口直後から壁面の影響を受けるため、流線の間隔が変化する。配向分布、流線ともに  $x \geq 1$  では  $x$  方向の変化は見られない。 $x \geq 1$  の範囲では  $y = 0.25$  と  $y = 0.75$  付近で流線の間隔が最も密であり、 $x$  方向の速度が最も大きいと考えられる。

(b) 図に  $Er = 100$  の場合の結果を示す。 $Er = 10$  の場合に比べ壁面近傍のディレクタの傾きが明らかに大きい。流路中央のディレクタは  $|\lambda_2| \geq |\lambda_5|$  の場合と同様に壁面と同じ方向に配向し続けるが、中央付近のディレクタは下流に行くにともない回転していく。壁面近傍のディレクタの回転は下流ほど大きくなる。それにともない配向場の歪みを小さくするため、より流路中央に近いディレクタも回転を開始すると考えられる。流線の図には  $Er = 10$  の場合と大きな違いはない。

(c) 図に  $Er = 300$  の場合の結果を示す。 $Er = 300$  では壁面近傍のディレクタは流路入口付近で一回転しており、タンブリング挙動を示している。また、 $x$  方向についてほぼ一定の  $x \geq 4$  の範囲では  $Er = 100$  の場合に比べ流路中央付近のディレクタの傾きが小さくなっている。これはディレクタには頭と尾の区別が無いいため、壁面近傍のディレクタがタンブリングをすることによって  $y$  方向に関する空間歪みが小さくなったためと考えられる。

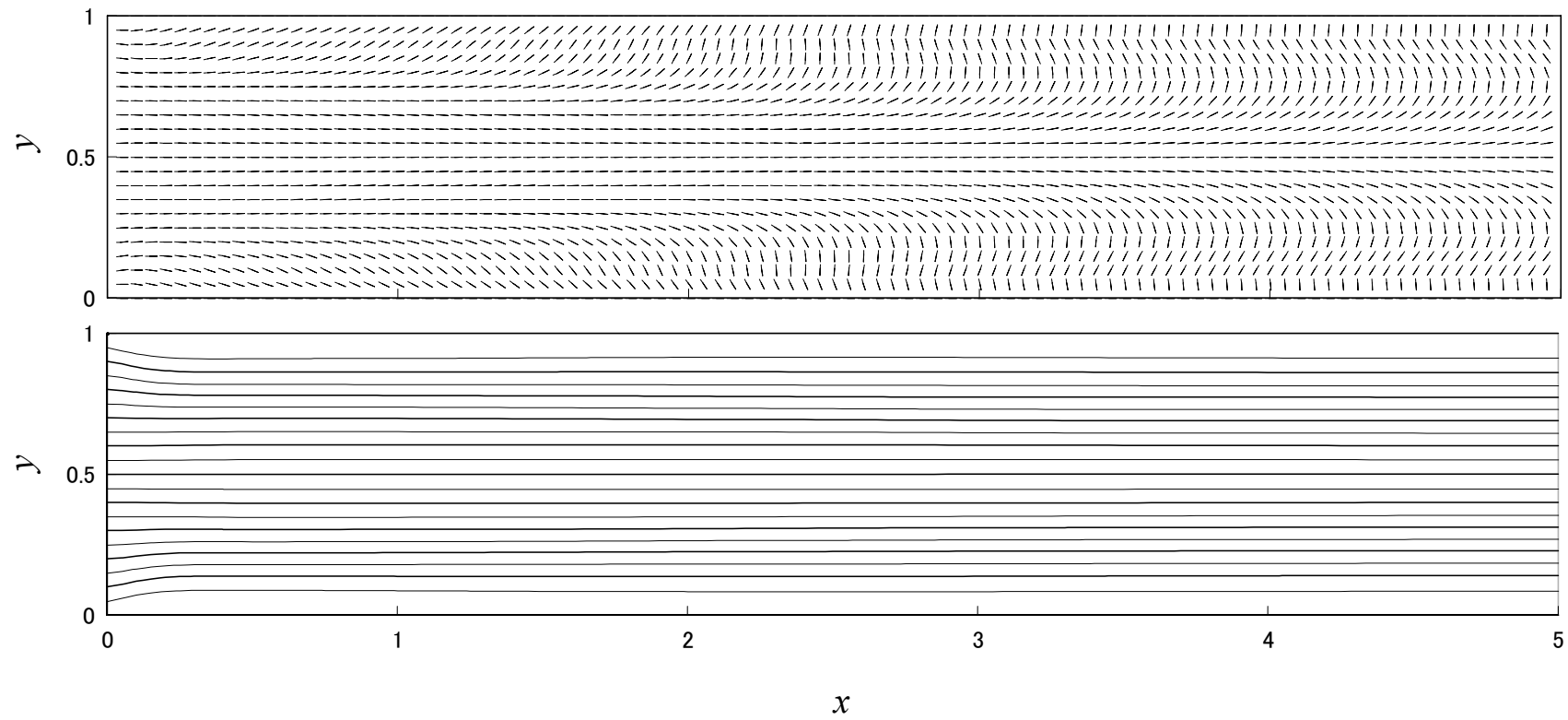
図 2-5 に  $Er = 10, 100, 300$  のすべての場合で配向分布、流線とも  $x$  方向についてほぼ一様である  $x = 5$  での c ディレクタの配向角の  $y$  方向分布をエリクセン数ごとに示す。横軸は  $y$  方向の位置を無次元で示し、縦軸は c ディレクタの  $x$  方向からの配向角  $\phi$  を示す。

$|\lambda_2| \geq |\lambda_5|$  の場合、 $\phi$  の値の正負が  $y = 0.25$  と  $y = 0.75$  付近で反転したが、 $|\lambda_2| < |\lambda_5|$  の場合は流路上部では正、流路下部では負のみの値を示した。また、平行平板間せん断流れでは



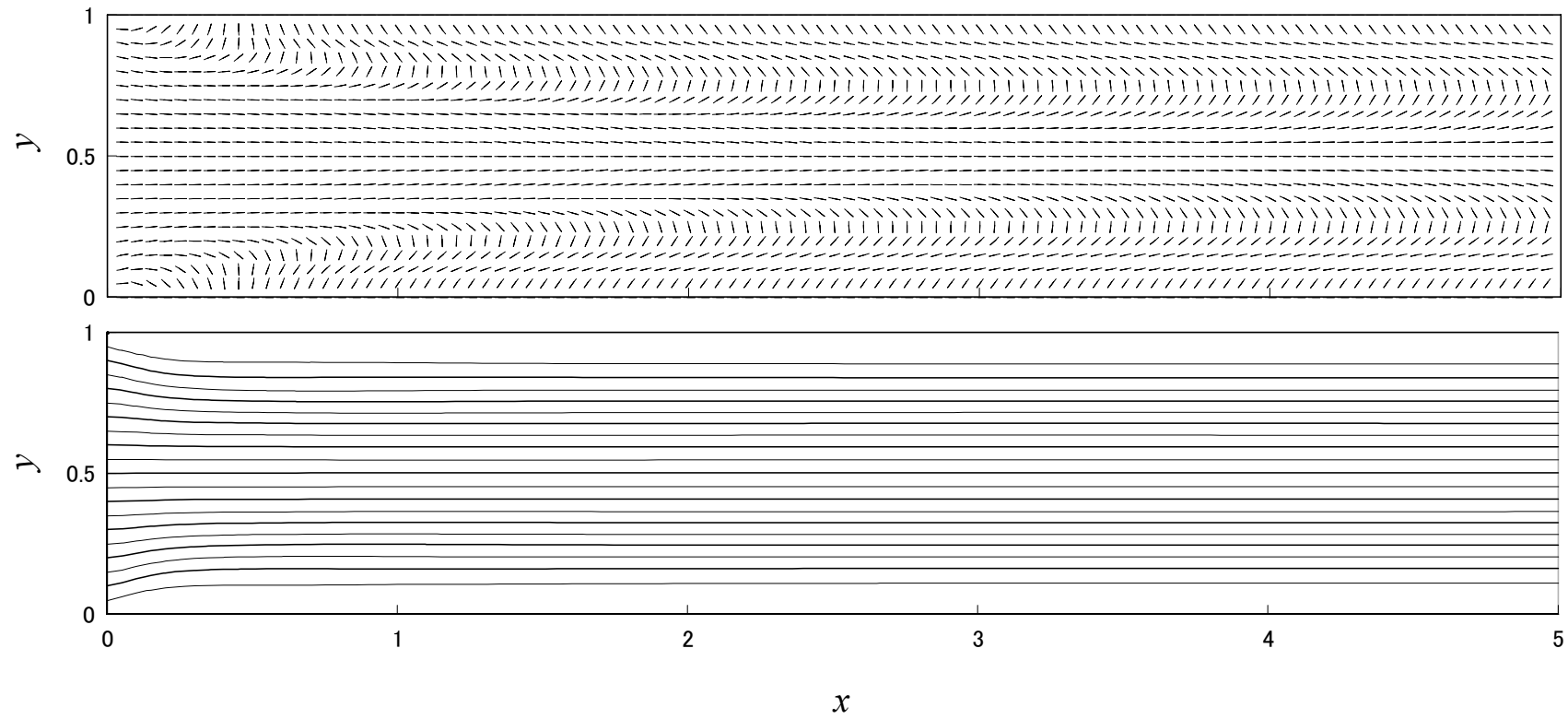
(a)  $Er = 10$

(b) , (c)図は次項 .



(b)  $Er = 100$

(c)図は次項 .



(c)  $Er = 300$

Fig. 2-4 Director profiles and streamlines of inlet flow of smectic C liquid crystals with  $|\lambda_2| < |\lambda_5|$ .

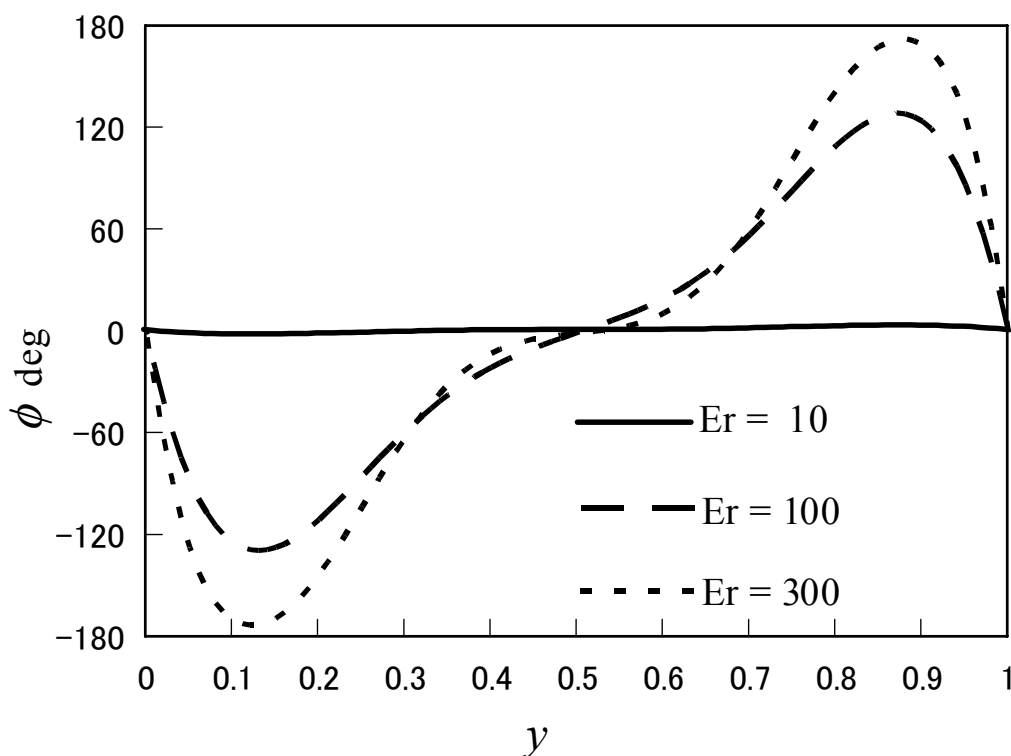


Fig. 2-5 Orientation angle profiles of c-director between parallel plates at  $x=5$ .

$Er=300$ の場合最も壁面配向の影響が小さい平板間中央部ではcディレクタは2回のタンブリングを確認したが、二次元入口流れの場合、 $Er=300$ ではタンブリングは一回しか確認されなかった。

#### 2・2・4 結 言

本研究ではスメクティック C 液晶の二次元入口流れの数値シミュレーションを行った。層法線が渦度方向に一致するように層を固定し、二次元流中のcディレクタ挙動を明らかにした。先に行なったスメクティック C 液晶の平行平板間流れの数値シミュレーションで確認されたアライニング、タンブリング挙動を示す粘性係数の組み合わせをそれぞれ用いて、二次元流中においてこれらの挙動が発生するメカニズムを明らかにした。以下に結果を示す。

(1).  $|\lambda_2| \geq |\lambda_5|$  の場合、cディレクタは  $y=0.25$  と  $y=0.75$  付近で壁面配向と同方向に配向した。この近傍ではcディレクタの配向角の回転方向が変化しており、配向角の変化量はエリクセン数に応じて増加する。エリクセン数を増加させていくと  $y \leq 0.25$  ,  $y \geq 0.75$  の壁

面近傍において平行平板間せん断流れにおいて確認されたcディレクタのアライニング挙動が確認された。Er = 700の場合、壁面近傍ではアライニング挙動が確認されたのに対し、 $0.25 \leq y \leq 0.75$ の流路中央部ではアライニングの際に達する角度に満たなかった。従って、壁面近傍と流路中央部の速度を比較した場合壁面近傍の方が速度は大きいと考えられる。流線の間隔を比較した場合、壁面近傍の方が密であり、このことから同様のことが言える。

(2).  $|\lambda_2| < |\lambda_5|$ の場合、エリクセン数の増加に伴い、cディレクタはタンプリング挙動を示した。平行平板間一次元流れの場合タンプリングは平板間隔方向のみに発生したが、二次元入口流れの場合では流れ方向にも発生していく様子が確認できた。 $|\lambda_2| \geq |\lambda_5|$ の場合と異なり流路中央以外でcディレクタが壁面配向と方向に一致する部分は無く、流路間隔方向のcディレクタの配向角の分布はネマティック液晶の二次元入口流れ<sup>(22)</sup>において確認された結果と同様の結果を示した。しかし、流線の間隔を比較した場合、壁面近傍の方が密であり、速度分布に関しては $|\lambda_2| \geq |\lambda_5|$ の場合と同様に流路中央部より壁面近傍の方が速度が大きい。

本研究ではネマティック液晶の2次元入口流れ<sup>(22)</sup>と比較するためにcディレクタの壁面配向に平板配向を選択した。 $|\lambda_2| \geq |\lambda_5|$ の場合、cディレクタのy方向分布は明らかにsplay(広がり)歪みを含んでいる。このような結果を示した理由としては、前節で決定した弾性定数の影響が大きいと考えられる。

本研究では弾性定数はCarlssonらの提案している値<sup>(11)</sup>を採用した。前節の式(4)よりcディレクタのsplay歪みに対する弾性定数は $K_1^c$ だが本研究では $K_1^c = 0$ であり、splay歪みを含む結果を示したと考えられる。同じ係数を使った一次元の平行平板間せん断流れの場合ではネマティック液晶の場合<sup>(20)</sup>と同様の結果を示し、 $K_1^c$ の影響は少なかったと考えられる。すなわち、本研究で用いた弾性定数は一次元流れの場合には適当であるが、二次元流れの場合には不適切であると考えられる。

## 参考文献

- (1) 例えば、伊吹順章、ディスプレイデバイス、(1989)、127、産業図書。
- (2) 内田龍男・他13名、次世代液晶ディスプレイ技術、(1994)、11、工業調査会。
- (3) 例えば、文献(2)の153ページ。

- (4) 例えば, 松本正一・角田市良, 液晶の基礎と応用, (1991), 3, 工業調査会.
- (5) 福田敦夫・竹添秀男, 強誘電性液晶の構造と物性, (1990), 2, コロナ社.
- (6) 飯村一賀・浅田忠裕・安部明広, 液晶高分子 - その基礎と応用 -, (1988), 155, シグマ出版.
- (7) 液晶若手研究会, (1996), 44, シグマ出版.
- (8) Leslie, F. M., Stewart, I. W. and Nakagawa, M., *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, **198** (1991), 443.
- (9) Leslie, F. M., *Liq. Crystals*, **14** (1993), 121.
- (10) S. Chandrasekhar 著, 木村初男・山下護訳, 液晶の物理学, (1995), 414, 吉岡書店.
- (11) Gill, S. P. A. and Leslie, F. M., *Liq. Crystals*, **14** (1993), 1905.
- (12) Carlsson, T., Stewart, I. W. and Leslie, F. M., *Liq. Crystals*, **9** (1991), 661.
- (13) Carlsson, T., Leslie, F. M. and Clark, N. A., *Physical Review E*, **51** (1995), 4509.
- (14) Stewart, I. W., The Static and Dynamic Continuum Theory of Liquid Crystals, (2004), 252.
- (15) 液晶便覧編集委員会, 液晶便覧, (2000), 44, 丸善.
- (16) 岩柳茂夫, 液晶, (1984), 106, 共立出版.
- (17) Osipov, M. A., Sluckin, T. J. and Terentjev, E. M., *Liq. Crystals*, **19** (1995), 197.
- (18) 例えば, 日本学術振興会情報科学用有機材料第 142 委員会液晶部会編, 液晶辞典, (1989), 212, 培風館.
- (19) 蝶野成臣・辻知宏・谷口聡, 機論, **62** - 594, B (1996), 600.
- (20) Pieranski, P. and Guyon, E., *Phys. Rev. Lett.*, **32** (1974), 924.
- (21) Cladis, P. E. and Torza, S., *Phys. Rev. Lett.*, **35** (1975), 1283.
- (22) 辻知宏・蝶野成臣, 機論, **61** - 587, B (1995), 2456.
- (23) 寺田敦史・辻知宏・蝶野成臣, 機論, **69** - 681, B (2003), 1035.



### 第3章 層変形を考慮した計算

本章ではこれまで Leslie らの理論を用いた研究において単純化として使われてきた層を固定する仮定を排し，層変形を考慮した場合の計算を行なう．言うまでも無くスメクティック液晶の特徴は層構造の形成であり，今後スメクティック液晶流動に関する研究が進展するには層変形の考慮が必要不可欠である．しかし層変形を考慮した場合の計算を行なうには以下の問題を解決する必要がある．

- 1．弾性定数の特定．
- 2．各ディレクタの拘束条件より発生する未定定数の解決．

前章の中で示したように 1 の弾性定数についてはこれまで理論式等は提案されておらず，Carlsson らによって値が提案されているのは 9 つの内の 3 つである．残りの 6 つの中には層の変形に関するものと層と分子配向の相互作用に関するものがあり個々の値の測定は容易ではない．

2 の未定定数についても層を固定した場合には前章のように層に関するディレクタの角運動方程式は必要なく，未定定数の大半は表れなかった．しかし，層変形を固定した場合，角運動方程式は 2 本とも必要で，全ての未定定数の解決が必要である．

本研究では単純せん断流中で 2 つの層と分子配向の方向を表すディレクタが示す挙動を明らかにする．単純せん断流では弾性がないため上に示した 1 の物性値の特定と 2 の未定定数の解決の内，層の間隔を一定に保つ条件から表れるものも必要ない．本章では層変形を考慮した場合におけるスメクティック C 液晶の単純せん断流れ中の層変形と配向挙動を紹介する．

#### 1. 緒言

現在，液晶は様々な製品に応用されている．これまでに液晶材料として用いられてきたのは主にネマティック液晶であり，スメクティック液晶の応用例はほとんど無い．しかし，次世代液晶ディスプレイ<sup>(1)</sup>を筆頭に様々な製品への応用が期待されている強誘電性液晶は主にスメクティック (C) 液晶に分類され，今後はスメクティック液晶を用いた液晶製品も増えることが考えられる．

ネマティック液晶とスメクティック液晶の違い<sup>(2)</sup>は，ネマティック液晶の分子が向きの秩

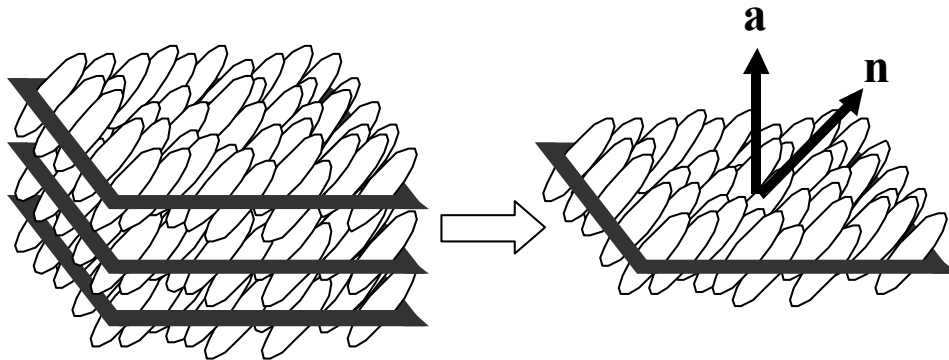


Fig. 1 Molecular configuration of smectic C liquid crystals

序しか持たないのに対し，スメクティック液晶の分子は向きの秩序に加え，低次元の位置の秩序を有し，層構造を形成することである．スメクティック液晶は層内の分子配置によって細かく分類され<sup>(3)</sup>，その一つがスメクティック C 液晶である．

図 1 にスメクティック C 液晶の模式図を示す．図中の楕円体は個々の分子，または分子の平均配向方向を示す単位ベクトルを表す．図のようにある方向に配向した分子が，一次元の重心位置の秩序から層構造を形成している．ただし層内方向に関しては位置の秩序は無く，分子は液体的に振舞う．分子配向の方向を  $\mathbf{n}$ ，層の法線方向を  $\mathbf{a}$  で表す．スメクティック C 液晶の場合，一般に  $\mathbf{n}$  と  $\mathbf{a}$  は一致せず，分子配向方向は層法線方向に対して傾斜している．

スメクティック C 液晶はネマティック液晶に比べ粘度が高く，液晶製品の製造工程を考えた場合，液晶材料の注入はより困難になることが予想される．液晶製品の品質や生産量が液晶材料を流動させる工程から多大な影響を受けることは周知の事実であり<sup>4)(5)</sup>，強誘電性液晶製品の実用化に向けてスメクティック C 液晶の流動に関する基礎研究が必要とされる．

スメクティック C 液晶に限らず，液晶は温度や外部の変化に敏感に反応し，実験的検証が難しい．特に液晶流動と密接に関わる液晶分子の配向挙動を知るためには数値シミュレーションが最も有効な手段である．ネマティック液晶の場合，流動を記述する理論として Leslie らによって Leslie-Ericksen 理論<sup>(6)-(8)</sup>が提案され，多くの研究に用いられている．スメクティック C 液晶に関しても Leslie らによって連続体理論<sup>(9)(10)</sup>が提案されているものの，流動，分子配向，および層変形を同時に扱う彼らの理論は非常に複雑で，まだ研究例がほとんど無いのが現状である．特に彼らの理論を用いたこれまでの研究<sup>(11)(12)</sup>では，層が固定

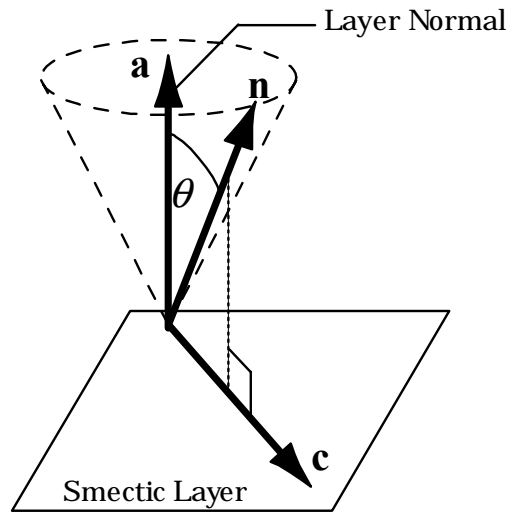


Fig. 2 A layer and the director in smectic C liquid crystals.

された状態が仮定され、流動中のスメクティック C 液晶の分子配向と層変形を同時に解析した研究は皆無である。そのため、スメクティック C 液晶の基本的な流動配向挙動すら明らかにされていない。そこで本研究では、弾性を考慮しない単純せん断流中のスメクティック C 液晶の層法線と分子配向を表す 2 つの単位ベクトルの振る舞いを明らかにする。

## 2. 基礎式および局所座標系

2・1 局所座標系 図 2 にスメクティック C 液晶の局所座標系を示す。スメクティックは層構造を形成するため、分子の平均配向を表す単位ベクトル  $\mathbf{n}$  (以下  $\mathbf{n}$  ディレクタ) の他に、層法線を表す単位ベクトル  $\mathbf{a}$  (以下  $\mathbf{a}$  ディレクタ) を用いる必要がある。また、スメクティック C 液晶では  $\mathbf{n}$  は層法線に対し一定の角度  $\theta$  で傾いている。 $\theta$  の角度を変える変形は多大なエネルギーを必要とするため、Leslie らの理論中で  $\theta$  は一定とされ、 $\mathbf{n}$  の軌跡は図中に破線で描かれた円錐斜面を描く。

理論中で Leslie らは  $\mathbf{n}$  を層平面へ投影し、層平面内に存在し  $\mathbf{n}$  の方位を表す単位ベクトル  $\mathbf{c}$  (以下  $\mathbf{c}$  ディレクタ) を新たに導入する。その結果、 $\mathbf{a}$  と  $\mathbf{n}$  は  $\mathbf{a}$  と  $\mathbf{c}$  によって簡便化される。 $\mathbf{a}$  と  $\mathbf{c}$  の条件を以下に示す。

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{a} = 1 \quad (1a)$$

$$\mathbf{c} \cdot \mathbf{c} = 1 \quad (1b)$$

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{c} = 0 \quad (1c)$$

**2・2 基礎式** Leslie らの理論は運動方程式と  $\mathbf{a}$  と  $\mathbf{c}$  の 2 つのディレクタについての角運動方程式から成るが、単純せん断流中の  $\mathbf{a}$  ,  $\mathbf{c}$  の挙動は以下の 2 つの角運動方程式を解くことにより求まる .

$$\nabla \cdot \left( \frac{\partial w}{\partial \nabla \mathbf{a}} \right) - \frac{\partial w}{\partial \mathbf{a}} + \tilde{\mathbf{g}}^a + \gamma \mathbf{a} + \mu \mathbf{c} + \nabla \times \boldsymbol{\beta} = \mathbf{0} \quad (2)$$

$$\nabla \cdot \left( \frac{\partial w}{\partial \nabla \mathbf{c}} \right) - \frac{\partial w}{\partial \mathbf{c}} + \tilde{\mathbf{g}}^c + \mu \mathbf{a} + \tau \mathbf{c} = \mathbf{0} \quad (3)$$

ここで、 $w$  は  $\mathbf{a}$  と  $\mathbf{c}$  の空間勾配より発生する自由エネルギー密度を表す . 本研究では  $\mathbf{a}$  と  $\mathbf{c}$  は空間的に一様であるため  $w=0$  である . 式中の  $\gamma$  ,  $\tau$  ,  $\mu$  は式(1)で示した  $\mathbf{a}$  と  $\mathbf{c}$  の条件から発生する未定乗数である . また、 $\boldsymbol{\beta}$  は Leslie らの理論中で用いられている層間隔が一定に保たれる条件から発生する未定乗数である .  $\tilde{\mathbf{g}}^a$  ,  $\tilde{\mathbf{g}}^c$  は以下のように表される .

$$\tilde{\mathbf{g}}^a = -2(\lambda_1 \mathbf{D} \cdot \mathbf{a} + \lambda_3 \mathbf{c} \mathbf{c} \mathbf{a} : \mathbf{D} + \lambda_4 \mathbf{A} + \lambda_6 \mathbf{c} \mathbf{c} \cdot \mathbf{A} + \tau_2 \mathbf{D} \cdot \mathbf{c} + \tau_3 \mathbf{c} \mathbf{a} \mathbf{a} : \mathbf{D} + \tau_4 \mathbf{c} \mathbf{c} \mathbf{c} : \mathbf{D} + \tau_5 \mathbf{C}) \quad (4)$$

$$\tilde{\mathbf{g}}^c = -2(\lambda_2 \mathbf{D} \cdot \mathbf{c} + \lambda_5 \mathbf{C} + \tau_1 \mathbf{D} \cdot \mathbf{a} + \tau_5 \mathbf{A}) \quad (5)$$

$\lambda_i (i=1 \sim 6)$  ,  $\tau_i (i=1 \sim 5)$  は粘性係数、 $\mathbf{D}$  は変形速度テンソル

$$2\mathbf{D} = (\nabla \mathbf{v})^T + (\nabla \mathbf{v}) \quad (6)$$

である .  $\mathbf{A}$  ,  $\mathbf{C}$  は、それぞれ  $\mathbf{a}$  ,  $\mathbf{c}$  の流れに対する相対角速度ベクトルで、

$$\mathbf{A} = D\mathbf{a}/Dt - \boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{a} \quad (7a)$$

$$\mathbf{C} = D\mathbf{c}/Dt - \boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{c} \quad (7b)$$

となる .  $D/Dt$  は実質微分、 $\boldsymbol{\Omega}$  は渦度テンソル

$$2\boldsymbol{\Omega} = (\nabla \mathbf{v})^T - (\nabla \mathbf{v}) \quad (8)$$

である .

### 3 . 全体座標系及び数値計算

**3・1 座標系** 図 3 に本研究で用いた全体座標系を示す .  $x-y-z$  直交座標系中に  $\mathbf{a}$  と  $\mathbf{c}$  の 2 本のディレクタを配置する .  $x-y$  平面内に速度勾配  $\dot{\gamma}$  を与え、 $\mathbf{a}$  と  $\mathbf{c}$  及び  $\mathbf{n}$  の変化を調べる .  $\mathbf{n}$  は基礎式中には直接は表れないが、 $\mathbf{a}$  と  $\mathbf{c}$  から以下の式を用いて算出することが出来る .

$$\mathbf{n} = \mathbf{a} \cos \theta + \mathbf{c} \sin \theta \quad (9)$$

ここで、 $\theta$  は図 2 で示した  $\mathbf{a}$  と  $\mathbf{n}$  の間の角度である . 基礎式中の  $\mathbf{a}$  ,  $\mathbf{c}$  ,  $\mathbf{D}$  ,  $\boldsymbol{\Omega}$  の各成分を以下に示す .

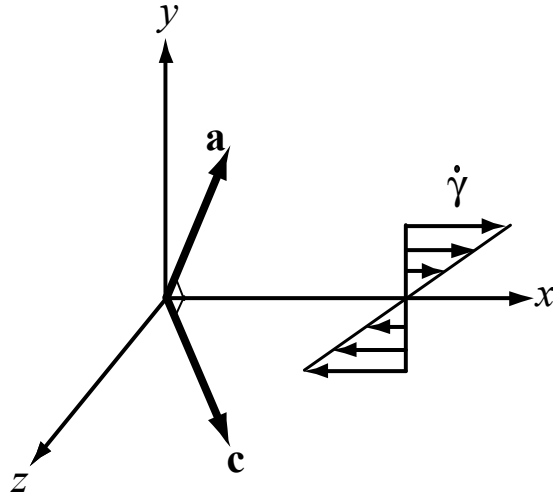


Fig. 3 Flow and coordinate systems

$$\mathbf{a} = (a_x(t), a_y(t), a_z(t))^T \quad (10a)$$

$$\mathbf{c} = (c_x(t), c_y(t), c_z(t))^T \quad (10b)$$

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} 0 & \dot{\gamma}/2 & 0 \\ \dot{\gamma}/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (10c)$$

$$\mathbf{\Omega} = \begin{pmatrix} 0 & -\dot{\gamma}/2 & 0 \\ \dot{\gamma}/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (10d)$$

**3・2 数値計算** 本研究では非定常項を残し式(10)の  $\mathbf{a}$  ,  $\mathbf{c}$  ,  $\mathbf{D}$  ,  $\mathbf{\Omega}$  の各成分を用いて基礎式を展開した．展開後の式は時間  $t$  の一階常微分方程式となる．現在，常微分方程式には多くの数値計算法が提案されているが，本研究では式(1)に示した  $\mathbf{a}$  と  $\mathbf{c}$  の条件を満たすため一次のオイラー法を基にして時間方向の計算を行なった．以下に手順を示す．

( 1 ) 式(2)および(3)より，未定乗数項を消去した後，

$$d\mathbf{a}/dt = \mathbf{f} \quad (11a)$$

$$d\mathbf{c}/dt = \mathbf{g} \quad (11b)$$

の形に変形する ( $\mathbf{f}$  および  $\mathbf{g}$  についての詳細は付録を参照)．

( 2 ) 上記の時間発展方程式(11a)および(11b)より， $t+\Delta t$  時刻における仮の  $\mathbf{a}$  および  $\mathbf{c}$  を以下の様に求める．

$$\tilde{\mathbf{a}}_{t+\Delta t} = \mathbf{a}_t + \mathbf{f}\Delta t \quad (12a)$$

$$\tilde{\mathbf{c}}_{t+\Delta t} = \mathbf{c}_t + \mathbf{g}\Delta t \quad (12b)$$

(3) 次に,

$$\hat{\mathbf{a}}_{t+\Delta t} = \tilde{\mathbf{a}}_{t+\Delta t} + \frac{\Delta t}{2\lambda_4} \mu \mathbf{c}_t \quad (13a)$$

$$\hat{\mathbf{c}}_{t+\Delta t} = \tilde{\mathbf{c}}_{t+\Delta t} + \frac{\Delta t}{2\lambda_5} \mu \mathbf{a}_t \quad (13b)$$

より, 直交条件を満たした  $\mathbf{a}$  および  $\mathbf{c}$  を求める. ここで,  $\hat{\mathbf{a}}_{t+\Delta t} \cdot \hat{\mathbf{c}}_{t+\Delta t} = 0$  より,

$$\mu = \frac{-2\lambda_4\lambda_5}{\Delta t} \frac{\tilde{\mathbf{a}}_{t+\Delta t} \cdot \tilde{\mathbf{c}}_{t+\Delta t}}{\lambda_4 \tilde{\mathbf{a}}_{t+\Delta t} \cdot \mathbf{a}_t + \lambda_5 \tilde{\mathbf{c}}_{t+\Delta t} \cdot \mathbf{c}_t} \quad (14)$$

である.

(4) 最後に, 条件式(1b)および(1c)を以下の式を用いて満足させる.

$$\mathbf{a}_{t+\Delta t} = \tilde{\mathbf{a}}_{t+\Delta t} / |\tilde{\mathbf{a}}_{t+\Delta t}| \quad (15a)$$

$$\mathbf{c}_{t+\Delta t} = \tilde{\mathbf{c}}_{t+\Delta t} / |\tilde{\mathbf{c}}_{t+\Delta t}| \quad (15b)$$

計算条件として  $\mathbf{a}$  と  $\mathbf{c}$  の初期配向を考え, 初期状態で  $\mathbf{a}$  と  $\mathbf{c}$  が共にせん断面内に含まれる (in-plane 成分のみの) 場合, せん断面外成分 (out-of-plane 成分) を含む場合に分けて計算を行なう.

時間刻み  $\Delta t$  は  $1 \times 10^{-4}$  秒として, ステップ毎に  $\mathbf{a}$  と  $\mathbf{c}$  の各成分の値の前ステップとの相対残差を算出し, 全ての成分前の時刻との差が  $1 \times 10^{-4}$  を切った場合に収束したと判断し, 計算を打ち切った. 尚, 収束判定を正確に行なうために, 絶対値が  $1 \times 10^{-4}$  以下の場合には収束判定から除外した.

**3・3 物性値** Leslie らの理論中には多くの物性値が含まれており, 各係数を個々に測定することは極めて困難で, 測定例も皆無である. 本研究中で用いた基礎式には物性値として 10 種類の粘性係数 ( $\lambda_i (i=1 \sim 6)$ ,  $\tau_i (i=1 \sim 5)$ ) が含まれている. これらの係数に関しては, Osipov らによって提案された粘性係数の理論式<sup>(13)</sup>を用いた. 各係数の理論式は付録に掲載する.

式中の  $\theta$  は  $\mathbf{a}$  に対する  $\mathbf{n}$  の傾き角で (図 2 参照), 液晶の種類と温度に依存する. 本研究では代表的なスメクティック液晶である terephthal-bis-4-n-butylaniline (以下 TBBA) を選択した. TBBA は 144 ~ 172 でスメクティック C 相を発現するので<sup>(14)</sup>, 160 での傾き角,  $\theta = 18^\circ$  を用いる<sup>(15)</sup>.  $S$  はネマティック秩序パラメータで  $S = 0.85$ ,  $\beta$  は形状係数で  $\beta = 0.99$ ,  $Q$  は配向分布関数の 4 次モーメントで, Maier - Saupe ポテンシャル<sup>(16)</sup>の仮

定と  $S=0.85$  より  $Q=0.59$  とした<sup>(17)</sup> .  $T$  は温度で  $T=160$  ,  $T_{NI}$  はネマティック - 等方相転移温度で, TBBA の場合  $T_{NI}=234$  である .  $c$  は分子の数密度,  $\lambda$  は分子の摩擦係数で, この両者については信頼できる参考データが見当たらない . しかし両者の積  $c\lambda$  はすべての粘性係数に含まれているので, 13 個の粘性係数の中で 1 個でも既知であれば  $c\lambda$  を逆算でき, その結果すべての粘性係数を見積もることができる . Carlsson らは<sup>(18)</sup> 実験に基づき  $\lambda_5 = 0.1\theta^2 \text{ Pa}\cdot\text{s}$  を提案しており, 従って  $c\lambda = 5.68 \times 10^{-1} \text{ Pa}\cdot\text{s}$  を得た . 表 1 に各粘性係数の値を示す .

Table 1. Viscosity coefficients of TBBA at 160 (unit : Pa·s)

|             |         |             |         |             |   |
|-------------|---------|-------------|---------|-------------|---|
| $\lambda_1$ | -0.219  | $\lambda_2$ | -0.0231 | $\lambda_3$ | 0 |
| $\lambda_4$ | 0.0935  | $\lambda_5$ | 0.00987 | $\lambda_6$ | 0 |
| $\tau_1$    | -0.0710 | $\tau_2$    | -0.0710 | $\tau_3$    | 0 |
| $\tau_4$    | 0       | $\tau_5$    | 0.0304  |             |   |

#### 4 . 計算結果および考察

**4・1 in-plane 成分のみの場合** 図 4 に初期状態で  $\mathbf{a}$  ,  $\mathbf{c}$  が in-plane 成分のみの場合の結果を示す . この場合,  $\mathbf{a}$  ,  $\mathbf{c}$  共に終始せん断面外の成分 ( $z$  成分) の値はゼロのまま  $\mathbf{a}$  ,  $\mathbf{c}$  はせん断平面内に留まったため,  $\mathbf{a}$  ,  $\mathbf{c}$  そして  $\theta=18^\circ$  として式(9) から算出した  $\mathbf{n}$  の配向状態をそれぞれ流れ方向 ( $x$  方向) からの角度 (それぞれ  $\theta_a$  ,  $\theta_c$  ,  $\theta_n$ ) を用いて示す . (a) 図は初期値が  $\mathbf{a}=(1,0,0)$  ,  $\mathbf{c}=(0,1,0)$  の場合, (b) 図は  $\mathbf{a}=(0,1,0)$  ,  $\mathbf{c}=(1,0,0)$  の場合の結果を示す . 共に横軸は時間, 縦軸は各配向角を示す . せん断速度は共に  $\dot{\gamma}=1 \text{ 1/s}$  である .

どちらの場合も  $\theta_a$  ,  $\theta_c$  ,  $\theta_n$  は初期値から一定量だけ増加 (あるいは減少) し一定値に達している . 一定値に達した後は  $\theta_a$  ,  $\theta_c$  を比較した場合, 各場合で異なる値に達しているが,  $\theta_n$  を比較するとどちらの場合も約  $30^\circ$  (厳密には一致しない) に達している .

図 5 に in-plane の場合における  $\mathbf{n}$  の流れ方向に対する角度  $\theta_n$  と  $\mathbf{n}$  に働くトルク  $\dot{\theta}_n$  の関係を示す . トルク  $\dot{\theta}_n$  を示す . ディレクタに頭と尾の区別は無いため  $\theta_n$  の範囲は  $0^\circ \leq \theta_n \leq 180^\circ$  である .  $\dot{\theta}_n$  の分布は  $\mathbf{a}$  ,  $\mathbf{c}$  の初期値に関わらずほぼ同一で,  $30^\circ$  と  $150^\circ$  付近でゼロとなっている . すなわち, これらの角度が流れ中で  $\theta_n$  がとり得る解である .  $\dot{\theta}_n$  の増減を考慮すると  $150^\circ$  付近の解は不安定解になることが分かる .

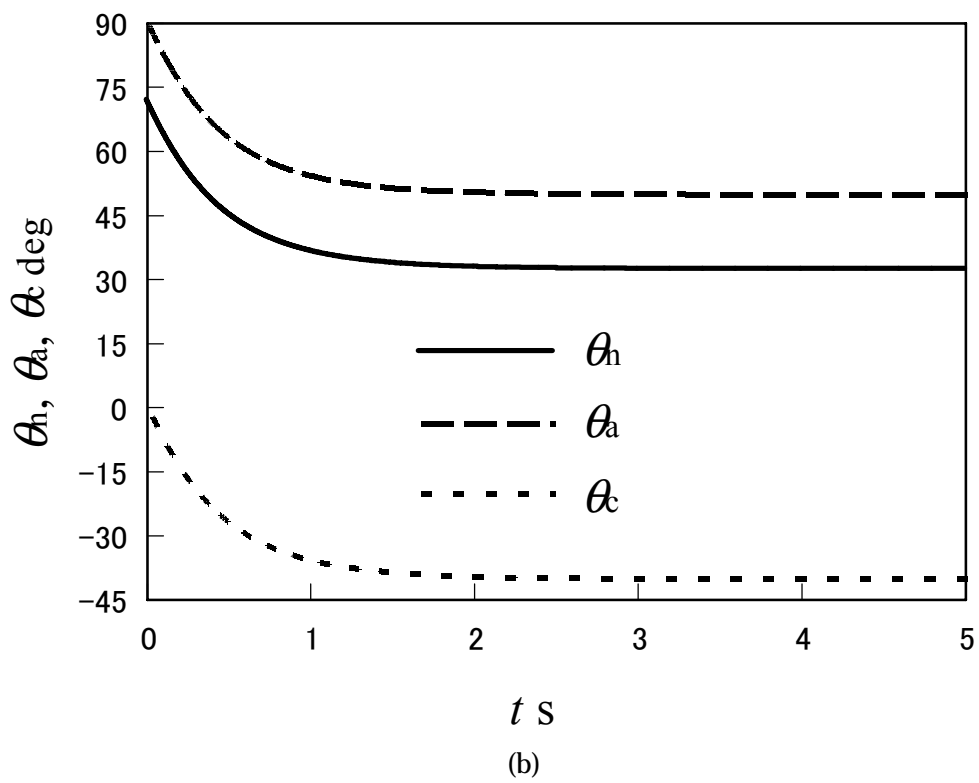
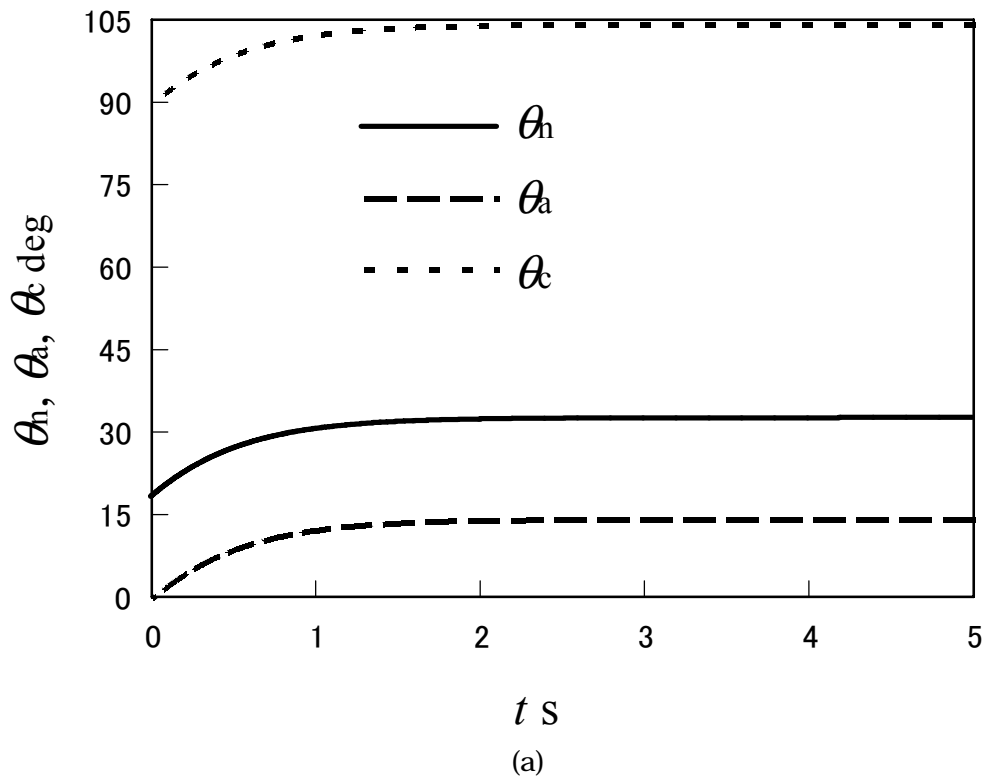


Fig. 4 Results of orientation angle profiles with the in-plane conditions



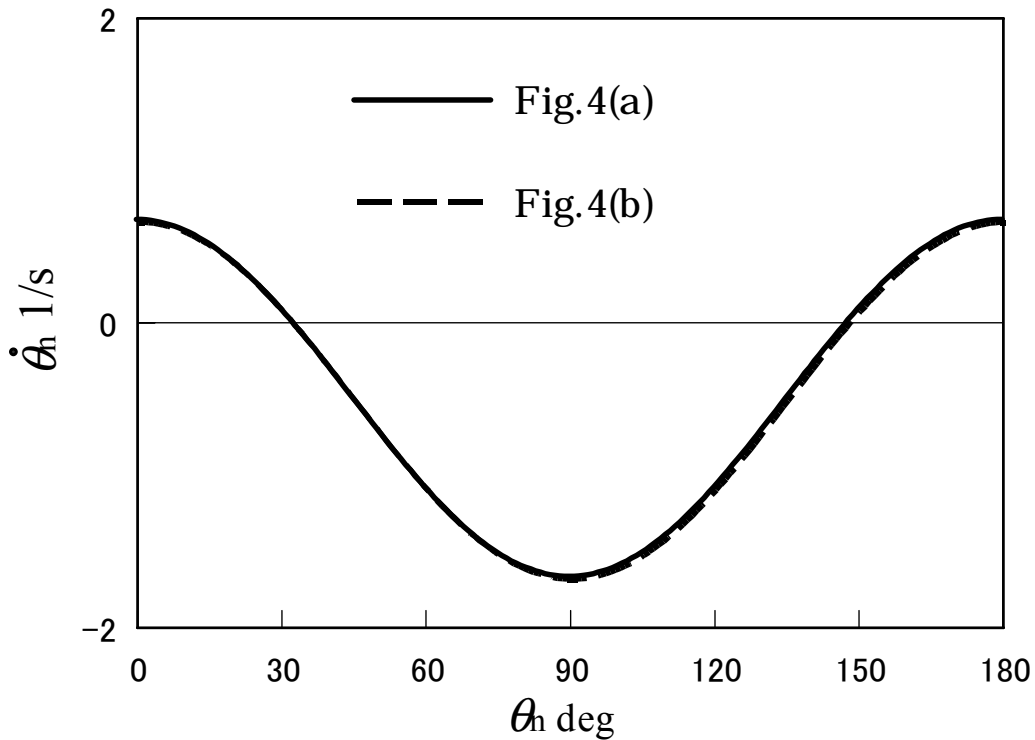
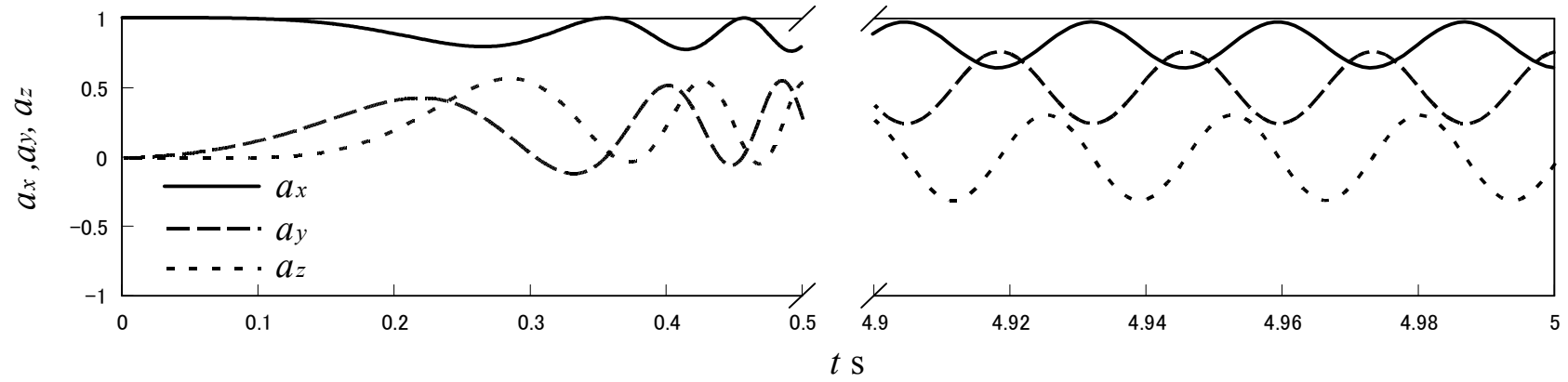


Fig. 5 Viscous torques of  $n$

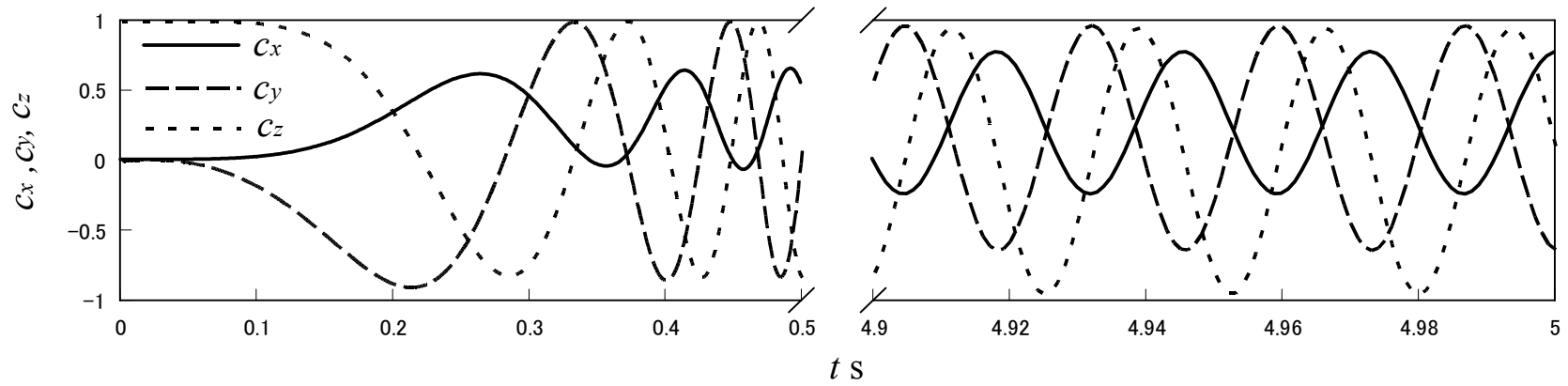
**4・2 out-of-plane 成分を含む場合** 図 6 に初期状態で  $a$  と  $c$  が out-of-plane 成分を含む場合の計算結果を示す． $a$  と  $c$  の初期値は  $a = (1, 0, 0)$  ,  $c = (0, 0, 1)$  , せん断速度は  $\dot{\gamma} = 1 \text{ 1/s}$  として計算を行なった．横軸は時間を示し, 縦軸は(a)図では  $a$  の成分, (b)図では  $c$  の成分, (c)図では  $a$  ,  $c$  から  $n$  の成分を示す．in-plane のみの場合と異なり, 結果は時間の経過に従い大きく振る舞い変えるため,  $0 \sim 0.5$  秒までと  $4.9 \sim 5.0$  秒までの 2 つの範囲に分けて表示する．

$a$  ,  $c$  ,  $n$  の各成分とも計算開始直後は一定の方向に増加あるいは現象している．しかし,  $0.2 \sim 0.3$  秒を境に各成分とも振動を開始し, その後一定値に達することなく振動し続ける．そのため out-of-plane 成分を含む場合の計算結果は 3・2 節で説明した収束判定の条件は満たしていない．

明らかに図 6(c)右側に示す  $4.9 \sim 5.0$  秒での  $n$  の各成分は同時刻の  $a$  ,  $c$  の成分に比べ振幅が小さく, ほぼ一定値であると考えられる．さらに  $n$  の  $z$  成分  $n_z$  はほぼゼロであり,  $n$  は, ほぼ  $x-y$  平面内すなわち, せん断平面内に存在していることが分かる． $n_z = 0$  と仮定して  $n_x$  ,  $n_y$  から  $n$  の配向角  $\theta'_n$  を導出すると  $\theta'_n \approx 32^\circ$  を示し, 図 4 で示した in-plane 成分のみの場合の  $n$  の配向角  $\theta_n$  にほぼ一致する．

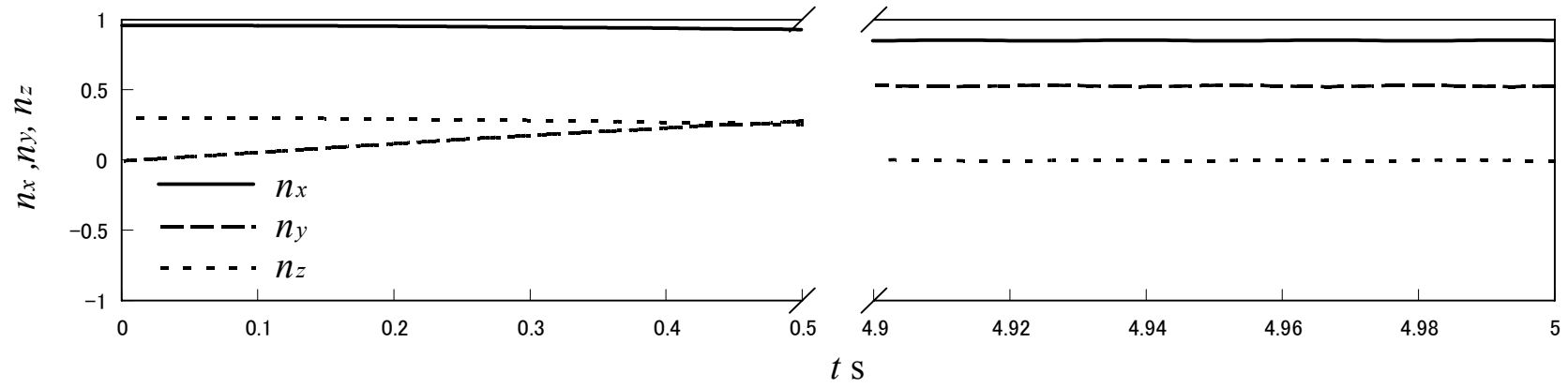


(a) a-director



(b) c-director

(c)図は次項 .



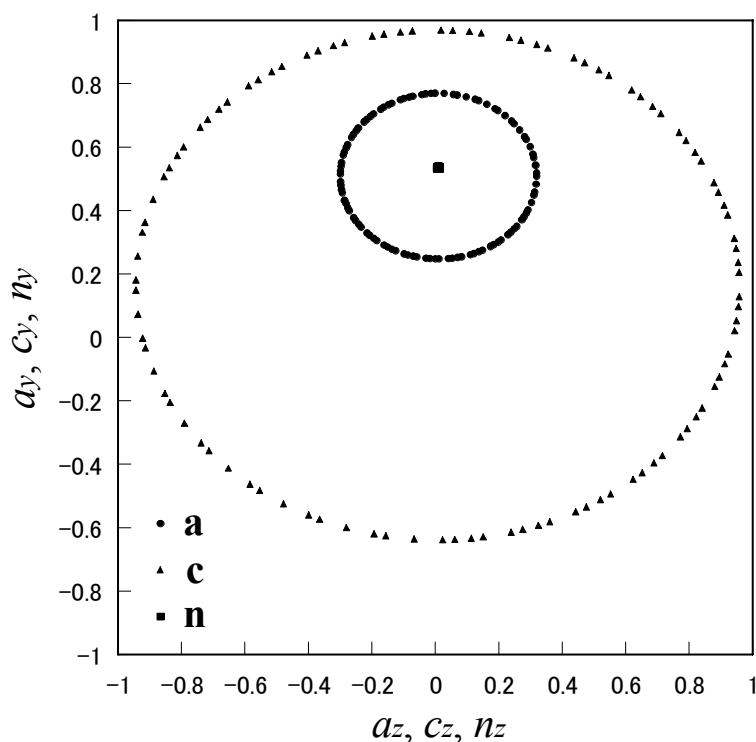
(c) n-director

Fig. 6 Transient of components of a, c, n-directors with the out-of-plane conditions

図6で示した各ディレクタの時間変化では、各成分が振動しており、挙動が掴みづらい。そこで、各ディレクタの挙動を明らかにするために、図7に4.9~5.0秒における各ディレクタの挙動を $x$ 方向から見た場合( $y-z$ 面)、 $y$ 方向から見た場合( $z-x$ 面)、 $z$ 方向から見た場合( $x-y$ 面)の軌跡を示す。横軸、縦軸共に各ディレクタの成分を示す。

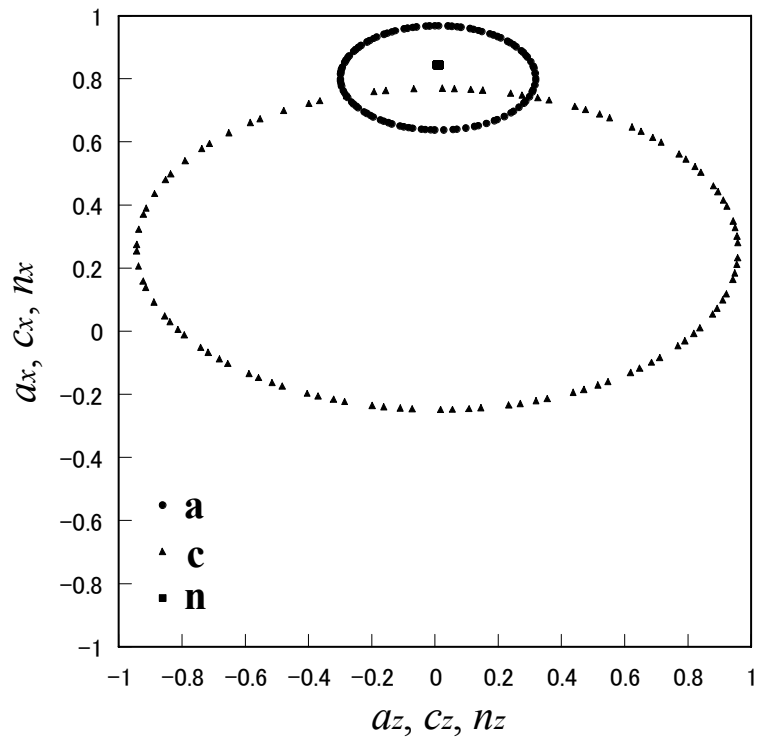
(a)図、(b)図から、 $n$ の軌跡がほぼ一点に留まっているのに対し、 $a$ と $c$ の軌跡は $n$ の軌跡の周りを回転していることが分かる。(c)図に示す $x-y$ 面内の軌跡では $n$ の軌跡は他と同様にほぼ一点に留まっているのに対し、 $a$ と $c$ の軌跡は $n$ を中心として直線的に往復しており、 $n$ を軸とした軸対称であることが分かる。 $n$ と $a$ の間の角度は一定であるため、 $n$ を定ベクトルと仮定すると $a$ の軌跡は $n$ の周りに図2で $n$ が作る軌跡として示したような円錐斜面を形成する。また、図6の $c$ の各成分の振幅は $a$ と $n$ に比較して大きかったが、図7の各ディレクタの軌跡を比較することでその理由は明白である。

このように in-plane 成分のみの場合と out-of-plane 成分を含む場合で初期配向条件を変えることで $a$ 、 $c$ については全く異なる振る舞いを示したが、 $n$ についてはどちらの場合もせん断面内で流れ方向から一定の角度で静止する挙動を示した。out-of-plane 成分を含む場

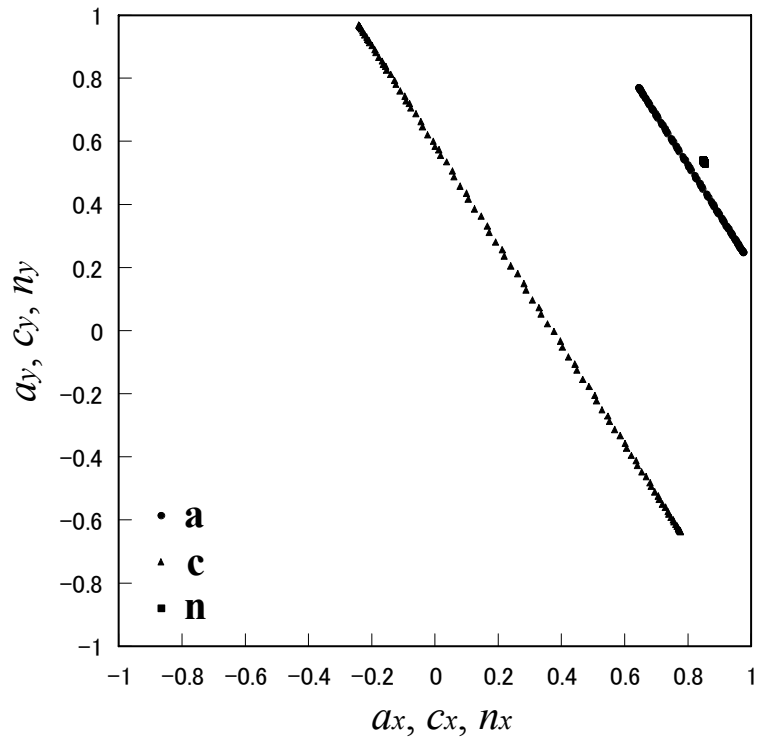


(a)  $y-z$  plane

(b), (c)図は次項。



(b)  $z-x$  plane



(c)  $x-y$  plane

Fig. 7 Loci of directors from 4.9 to 5.0 second.

合，本論文には  $\mathbf{a}=(1,0,0)$ ， $\mathbf{c}=(0,0,1)$  を初期配向にした場合のみを掲載したが他の初期配向の場合では，計算開始直後の振る舞いは異なるものの，十分に時間が経過した後の振る舞いは本論文の図 6 の 4.9 ~ 5.0 秒の範囲で示したものと定量的に一致した．

ネマティック液晶の場合，単純せん断流中の定常解の有無でディレクタはアライニング（静止）とタンブリング（回転）の 2 種類の挙動を示し，これらの挙動は粘性係数の値によって決定されることが知られている<sup>(19)(20)</sup>．本研究で得られた結果では in-plane 成分のみの場合には  $\mathbf{a}$ ， $\mathbf{c}$ ， $\mathbf{n}$  とともに “静止” 挙動を示し，out-of-plane 成分を含む場合には  $\mathbf{a}$  と  $\mathbf{c}$  は “回転” 挙動を示したが， $\mathbf{n}$  は “静止” 挙動を示した．スメクティック C 液晶の場合ネマティック液晶の様に 2 通りに分類可能であるか，どの粘性係数がそれらの挙動の引き金になるかは不明であるが，本研究で用いた粘性係数はアライニングを示す組み合わせだと考えられる．

## 5. 結 言

本研究では Leslie らによって提案されたスメクティック C 液晶の連続体理論を用いて，単純せん断流中での分子配向と層法線を表すディレクタの挙動を明らかにした．これまで彼らの理論を用いた研究において定ベクトルとして扱われてきた層法線方向を表すディレクタの変化を考慮し，流れの中での 2 つのディレクタの振る舞いを明らかにした．得られた結果を以下に示す．

(1) in-plane 成分のみの場合， $\mathbf{a}$ ， $\mathbf{c}$ ， $\mathbf{n}$  の各ディレクタは一定方向に増加あるいは減少し，一定値に達する．初期配向が in-plane 成分のみの場合，各ディレクタはせん断面外の成分を持つことはなく，せん断面内に留まる．in-plane 成分のみの場合，2 通りの配向状態が考えられるが  $\mathbf{a}$  と  $\mathbf{c}$  はそれぞれ異なる方向に配向したが， $\mathbf{n}$  はほぼ同一方向に配向した．

(2) out-of-plane 成分を含む場合，各ディレクタは計算開始直後には初期配向に依存した振る舞いを示すが，十分に時間が経過した後は  $\mathbf{a}$ ， $\mathbf{c}$ ， $\mathbf{n}$  の各成分は共に一定の値に達することなく振動し続ける． $\mathbf{a}$ ， $\mathbf{c}$  に比べ  $\mathbf{n}$  の成分の振幅は小さく，ほぼ一定値に達していると考えられ，このときの  $\mathbf{n}$  の配向方向は in-plane 成分のみの場合に確認されたものにほぼ一致した．また， $\mathbf{a}$  と  $\mathbf{c}$  は  $\mathbf{n}$  の周りを回転し続ける．

(3) 初期状態に依存して  $\mathbf{a}$ ， $\mathbf{c}$  に関しては全く異なる振る舞いを示したが， $\mathbf{n}$  に関してはせん断面内において流れ方向から一定の角度で静止するアライニング挙動を示した．

## 参考文献

- (1) 例えば, 内田龍男・他 13 名, 次世代液晶ディスプレイ技術, (1994), 153, 工業調査会.
- (2) 例えば, 松本正一・角田市良, 液晶の基礎と応用, (1991), 3, 工業調査会.
- (3) 福田敦夫・竹添秀男, 強誘電性液晶の構造と物性, (1990), 22, コロナ社.
- (4) 飯村一賀・浅田忠裕・安部明広, 液晶高分子 - その基礎と応用 -, (1988), 155, シグマ出版.
- (5) 液晶若手研究会, (1996), 44, シグマ出版.
- (6) Ericksen, J. L., *Arch. Ration. Mech. Anal.*, **4** (1960), 231.
- (7) Ericksen, J. L., *Trans. Soc. Rheol.*, **5** (1961), 23.
- (8) Leslie, F. M., *Arch. Ration. Mech. Anal.*, **28** (1968), 265.
- (9) Leslie, F. M., Stewart, I. W. and Nakagawa, M., *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, **198** (1991), 443.
- (10) Leslie, F. M., *Liq. Crystals*, **14** (1993), 121.
- (11) Gill, S. P. A. and Leslie, F. M., *Liq. Crystals*, **14** (1993), 1905.
- (12) 寺田敦史・辻知宏・蝶野成臣, 機論, 投稿中.
- (13) Osipov, M. A., Sluckin, T. J. and Terentjev, E. M., *Liq. Crystals*, **19** (1995), 197.
- (14) 液晶便覧編集委員会, 液晶便覧, (2000), 44, 丸善.
- (15) 岩柳茂夫, 液晶, (1984), 106, 共立出版.
- (16) 例えば, 日本学術振興会情報科学用有機材料第 142 委員会液晶部会編, 液晶辞典, (1989), 212, 培風館.
- (17) 蝶野成臣・辻知宏・谷口聡, 機論, **62** - 594, B (1996), 600.
- (18) Calsson, T., Leslie, F. M. and Clark, N. A., *Physical Review E*, **51** (1995), 4509.
- (19) Pieranski, P. and Guyon, E., *Phys. Rev. Lett.*, **32** (1974), 924.
- (20) Cladis, P. E. and Torza, S., *Phys. Rev. Lett.*, **35** (1975), 1283.

## 付 録

Osipov らによって提案された粘性係数の理論式を以下に示す．式中の文字については本文を参照のこと．

$$\lambda_1 = -c\lambda S \cos^2 \theta / 2$$

$$\lambda_2 = -c\lambda S \sin^2 \theta / 2$$

$$\lambda_3 = 0$$

$$\lambda_4 = \frac{c\lambda S^2(7 + 5S - 12Q)(4.451T_{NI}/T)^2}{70(2 + 4.451ST_{NI}/T)} \cos^2 \theta$$

$$\lambda_5 = \frac{c\lambda S^2(7 + 5S - 12Q)(4.451T_{NI}/T)^2}{70(2 + 4.451ST_{NI}/T)} \sin^2 \theta$$

$$\lambda_6 = 0$$

$$\tau_1 = -c\lambda S \sin 2\theta / 4$$

$$\tau_2 = -c\lambda S \sin 2\theta / 4$$

$$\tau_3 = 0$$

$$\tau_4 = 0$$

$$\tau_5 = \frac{c\lambda S^2(7 + 5S - 12Q)(4.451T_{NI}/T)^2}{140(2 + 4.451ST_{NI}/T)} \sin 2\theta$$



## 第4章 総括

以下に研究の本研究の総括を行なう。

### 1. 層を固定した場合の平行平板間せん断流れの数値シミュレーション

本研究では Leslie らによって提案されたスメクティック C 液晶の連続体理論を用いて、平行平板間せん断流れの数値シミュレーションを行った。式中に多数含まれる粘性係数と弾性定数については Osipov らと Carlsson らが提案した理論式とスメクティック液晶である TBBA のディレクタの傾き角から見積もった。計算を簡略化するため、スメクティック液晶特有の層が、平板に平行 (planar 配置) および垂直 (bookshelf 配置) である典型的な 2 種類のみを取り上げ、且つ、層が空間的に変化しないと仮定した。得られた結果をまとめて以下に示す。

- planar 配置の場合、c ディレクタは流動方向に配向する。この傾向はエリクセン数  $E_r$  が大きいほど顕著であり、高  $E_r$  の場合、壁面近傍には配向境界層が形成される。平板間速度分布は  $E_r$  に依存せずほぼ直線である。
- bookshelf 配置の場合、c ディレクタは粘性係数  $\lambda_2$  と  $\lambda_5$  の大小関係に依存して、ネマティック液晶と類似であるアライニング挙動 ( $|\lambda_2| \geq |\lambda_5|$ ) およびタンブリング挙動 ( $|\lambda_2| < |\lambda_5|$ ) を示す。タンブリング挙動の場合、平板間速度分布は極めて複雑である。また平板間中央位置での c ディレクタの配向角は  $E_r$  に対して階段状の不連続分布となる。このような傾向は、ネマティック液晶、スメクティック液晶にかかわらずタンブリング挙動特有の現象である。

### 2. 層を固定した場合の平行平板間二次元入口流れの数値シミュレーション

本研究ではスメクティック C 液晶の二次元入口流れの数値シミュレーションを行った。層法線が渦度方向に一致するように層を固定し、二次元流中の c ディレクタ挙動を明らかにした。先に行なったスメクティック C 液晶の平行平板間流れの数値シミュレーションで確認されたアライニング、タンブリング挙動を示す粘性係数の組み合わせをそれぞれ用いて、二次元流中においてこれらの挙動が発生するメカニズムを明らかにした。以下に結果を示す。

- $|\lambda_2| \geq |\lambda_5|$  の場合、c ディレクタは  $y=0.25$  と  $y=0.75$  付近で壁面配向と同方向に配向した。この近傍では c ディレクタの配向角の回転方向が変化しており、配向角の変化量はエリクセン数に応じて増加する。エリクセン数を増加させていくと  $y \leq 0.25$  ,  $y \geq 0.75$

の壁面近傍において平行平板間せん断流れにおいて確認されたcディレクタのアライニング挙動が確認された。Er = 700の場合、壁面近傍ではアライニング挙動が確認されたのに対し、 $0.25 \leq y \leq 0.75$ の流路中央部ではアライニングの際に達する角度に満たなかった。従って、壁面近傍と流路中央部の速度を比較した場合壁面近傍の方が速度は大きいと考えられる。流線の間隔を比較した場合、壁面近傍の方が密であり、このことから同様のことが言える。

- $|\lambda_2| < |\lambda_5|$ の場合、エリクセン数の増加に伴い、cディレクタはタンプリング挙動を示した。平行平板間一次元流れの場合タンプリングは平板間隔方向のみに発生したが、二次元入口流れの場合では流れ方向にも発生していく様子が確認できた。 $|\lambda_2| \geq |\lambda_5|$ の場合と異なり流路中央以外でcディレクタが壁面配向と方向に一致する部分は無く、流路間隔方向のcディレクタの配向角の分布はネマティック液晶の二次元入口流れ<sup>(19)</sup>において確認された結果と同様の結果を示した。しかし、流線の間隔を比較した場合、壁面近傍の方が密であり、速度分布に関しては $|\lambda_2| \geq |\lambda_5|$ の場合と同様に流路中央部より壁面近傍の方が速度が大きい。

### 3. せん断流中におけるスメクティックC液晶の分子配向と層挙動

本研究ではLeslieらによって提案されたスメクティックC液晶の連続体理論を用いて、単純せん断流中での分子配向と層法線を表すディレクタの挙動を明らかにした。これまで彼らの理論を用いた研究において定ベクトルとして扱われてきた層法線方向を表すディレクタの変化を考慮し、流れの中での2つのディレクタの振る舞いを明らかにした。得られた結果を以下に示す。

- in-plane成分のみの場合、a, c, nの各ディレクタは一定方向に増加あるいは減少し、一定値に達する。初期配向がin-plane成分のみの場合、各ディレクタはせん断面外の成分を持つことはなく、せん断面内に留まる。in-plane成分のみの場合、2通りの配向状態が考えられるがaとcはそれぞれ異なる方向に配向したが、nはほぼ同一方向に配向した。
- out-of-plane成分を含む場合、各ディレクタは計算開始直後には初期配向に依存した振る舞いを示すが、十分に時間が経過した後はa, c, nの各成分は共に一定の値に達することなく振動し続ける。a, cに比べnの成分の振幅は小さく、ほぼ一定値に達していると考えられ、このときのnの配向方向はin-plane成分のみの場合に確認されたものにほぼ一致した。また、aとcはnの周りを回転し続ける。

- 初期状態に依存して  $a$  ,  $c$  に関しては全く異なる振る舞いを示したが,  $n$  に関してはせん断面内において流れ方向から一定の角度で静止するアライニング挙動を示した.

## 付録 A ネマティック液晶の円板間流れの数値シミュレーション

付録 A では筆者が行ったネマティック液晶の同心円板間流れの数値シミュレーションについて述べる。スメクティック C 液晶の流動を表す理論として Leslie らが提案している連続体理論は、Leslie-Ericksen 連続体理論（以下 L-E 理論）をスメクティック C 液晶に適用させる為に拡張した理論であることは既に述べた。本論文では数値シミュレーションに L-E 理論を用いており、本編で紹介しているスメクティック C 液晶の連続体理論を理解する助けとなると判断し、掲載した。

### 1. 緒言

近年、液晶は液晶ディスプレイをはじめとして様々な工業製品に応用されている。液晶製品の製造工程には、多くの場合、液晶の流動に関するプロセスが含まれており、そこでの流れ挙動が生産性や最終製品の品質に影響を与えることは周知の事実である<sup>(1)(2)</sup>。

液晶は様々な視点から分類可能である<sup>(3)</sup>。結晶学的には、構成する分子の空間的配置によって、ネマティック液晶、コレステリック液晶、スメクティック液晶に、熱力学的には、液晶相の発現条件によって、サーモトロピック液晶、ライオトロピック液晶に、そして分子量的には高分子液晶、低分子液晶に分類される。一方流体力学的には、流れ中での液晶分子の挙動によって、アライニング（aligning）液晶とタンブリング（tumbling）液晶に分類される<sup>(4)(5)</sup>。すなわち、液晶分子の局所的な平均配向を表す単位ベクトルであるディレクタ（director）が、単純せん断流中で流れ方向に対してある角度で静止する挙動をアライニング、ディレクタがせん断平面内で回転しつづける挙動をタンブリングと定義される。これらの現象は物質固有のものであり、どちらの状態を取るかは液晶の物性値に依存する。

本研究で扱う同心回転円板間流れは、従来から流体の粘度測定に用いられている基本流れの一つであり、円板端部や高速回転時の遠心力が測定データに及ぼす影響などについても詳細な研究がなされている<sup>(6)</sup>。しかし液晶を対象とした研究は極めて少なく、この分野のデータ蓄積が望まれている。Carlsson ら<sup>(7)</sup>は、ネマティック系のタンブリング液晶を用いて円板下方から投光した透過光を円板上部で観察し、円板外周位置で発生した黒い同心円が時間とともに円板の中心部分に移動する特異現象を報告している。Carlsson らはさらに、この特異現象を数値的に解明することも試みている。すなわち、図 1 に示すように、一次元の平行平板間クエット流れ<sup>(8)</sup>を、せん断速度を順次増加させながら半径方向に単純に並べ

たモデルを提案している．しかしこのモデルでは，個々のクエット流れ間の不連続性が原因で半径方向の弾性力（後述する Frank 弾性）が欠落しており，実験結果を説明するには至っていない．

本研究では，半径方向の連続性も考慮した二次元計算を行うことにより，液晶，特にタングリング液晶の回転粘度測定に関する知見を提供するとともに，上記の特異現象の解明を図ることを目的とする．ただし，厳密には速度場と配向場を連立させて解く必要があるが，本論文では第一近似として円板間の速度分布は直線であると仮定し，分子配向のみの非定常計算を行う．

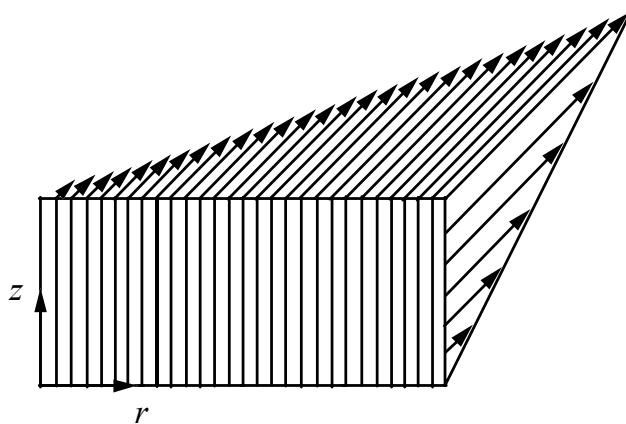


Fig. 1 A pseudo two-dimensional model proposed by Carlsson and Skarp<sup>(7)</sup>

## 2．基礎式および数値計算

**2・1 基礎式** ネマティック液晶の構成方程式として，Leslie-Ericksen 連続体理論<sup>(9)</sup>~<sup>(11)</sup>（以下 L-E 理論）を用いる．緒言で述べたように，本研究では速度場の計算は行わないので，基礎式はディレクタ  $\mathbf{n}$  に関する角運動方程式のみである．

$$\mathbf{0} = \mathbf{n} \times \left\{ \frac{\partial F}{\partial \mathbf{n}} - \nabla \cdot \left( \frac{\partial F}{\partial \nabla \mathbf{n}} \right) + \gamma_1 \mathbf{N} + \gamma_2 \mathbf{A} \cdot \mathbf{n} \right\} \quad (1)$$

ここで  $\gamma_1$  ,  $\gamma_2$  は以下のように表される．

$$\gamma_1 = \alpha_3 - \alpha_2 \quad (2)$$

$$\gamma_2 = \alpha_6 - \alpha_5 \quad (3)$$

$\alpha_i$  ( $i = 2, 3, 5, 6$ ) は Leslie 粘性係数である．式(1)の  $\mathbf{A}$  は変形速度テンソル， $\mathbf{N}$  は流体

とディレクタとの相対角速度ベクトルで、それぞれ以下のように表される．

$$2\mathbf{A} = (\nabla\mathbf{v})^T + (\nabla\mathbf{v}) \quad (4)$$

$$\mathbf{N} = \frac{D\mathbf{n}}{Dt} - \boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{n} \quad (5)$$

$\mathbf{v}$  は速度ベクトル， $D/Dt$  は実質微分， $\boldsymbol{\Omega}$  は渦度テンソルで

$$2\boldsymbol{\Omega} = (\nabla\mathbf{v})^T - (\nabla\mathbf{v}) \quad (6)$$

である．式(1)の  $F$  はディレクタ場の空間変化より生じる歪みに伴う Frank の自由エネルギー密度を表し、次式で表される．

$$2F = K_1(\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + K_2(\mathbf{n} \cdot \nabla \times \mathbf{n})^2 + K_3|\mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n}|^2 \quad (7)$$

$K_i$  ( $i = 1 \sim 3$ ) は Frank 弾性定数で、それぞれディレクタの空間的広がり、ねじれ、曲げに関する弾性定数である．

**2・2 座標系** 半径  $R$  の 2 枚の円板が間隔  $H$  で平行に置かれており、図 2 のように下部円板の中心に座標原点を有する円筒座標系  $(r, \theta, z)$  を設ける．円板間に満たされている液晶には、角速度  $\omega$  で回転する上部円板によってせん断が与えられる．

図 3 は任意の  $r$  位置での、せん断面  $\theta - z$  面におけるディレクタ  $\mathbf{n}$  の局所座標系を示している．本研究では、 $\mathbf{n}$  がせん断面内に存在し  $r$  成分をもたない In-plane 仮定を用いる．従って  $\mathbf{n}$  は、 $\theta$  軸となす角度（配向角） $\phi$  のみによって

$$\mathbf{n} = (0, \cos \phi, \sin \phi)^T \quad (8)$$

のように表される．一方速度ベクトル  $\mathbf{v}$  は

$$\mathbf{v} = (0, z\dot{\gamma}, 0)^T \quad (9)$$

となる． $\dot{\gamma}(=r\omega/H)$  は速度こう配で、円板間の速度分布を直線と仮定したことから  $z$  方向に

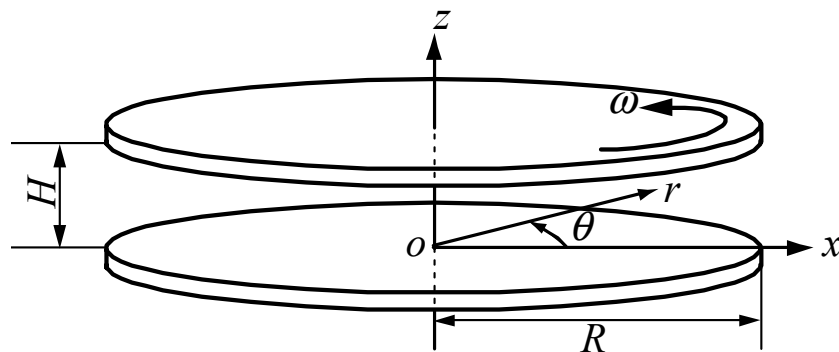


Fig. 2 Flow geometry and coordinate system

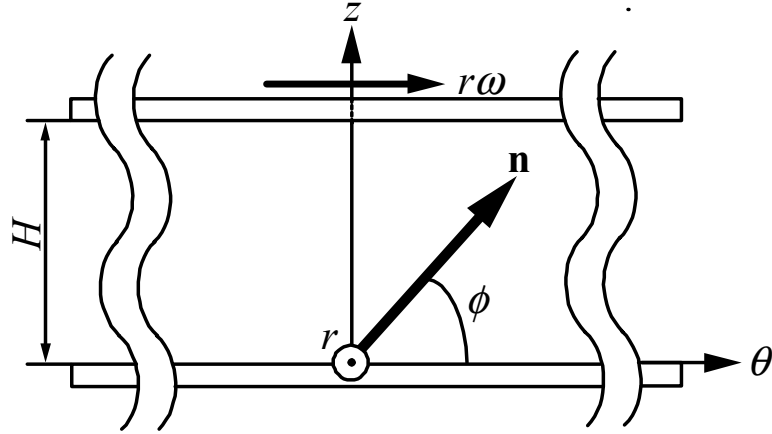


Fig. 3 Local coordinate system for the director

は一定である．なお，直線近似の妥当性については 3・2 節で検討する．

**2・3 数値計算** 式(8)，(9)を式(1)に代入した後，長さに関しては円板間隔  $H$ ，時間に関しては上部円板の回転角速度の逆数  $1/\omega$ ，粘性係数に関しては式(2)の  $\gamma_1$ ，弾性定数に関しては 3 個の平均値

$$K = \frac{K_1 + K_2 + K_3}{3} \quad (10)$$

を用いて無次元化すると（特に断らない限り，これ以後の物理量は無次元である），

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi}{\partial t} = & \frac{1}{2\gamma_1} \left[ -r\dot{\gamma}(1 + \gamma_2 \cos 2\phi) \right. \\ & + \frac{1}{Er} \left\{ \frac{K_2}{r^2} \sin 2\phi - (K_1 - K_2) \sin 2\phi \left( \frac{\partial \phi}{\partial z} \right)^2 + (K_1 + K_1 \cos 2\phi + K_2 - K_2 \cos 2\phi) \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} \right. \\ & \left. \left. + \frac{2K_2}{r} \left( \frac{\partial \phi}{\partial r} + r \frac{\partial^2 \phi}{\partial r^2} \right) \right\} \right] \end{aligned} \quad (11)$$

を得る．式中の  $Er$  はエリクセン数と呼ばれる粘性力と弾性力の比を表す液晶固有の無次元数であり，次式（右辺の物理量は有次元である）で定義される．

$$Er = \frac{\gamma_1 H^2 \omega}{K} \quad (12)$$

液晶の物性値と円板間隔を固定すれば，エリクセン数の変化は上部円板の回転角速度の変化に対応する．

境界条件は，円板中心部（ $r=0$ ）では軸対称性と矛盾しないよう配向角  $\phi = 90^\circ$ ，円板外周端（ $r=R$ ）ではノイマン型境界条件

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial r^2} = 0$$

を用いた。固体壁面では人為的に配向角を制御できる。Carlsson らの実験<sup>(7)</sup>では垂直配向が選択されているので、本研究でも円板表面 ( $z=0, 1$ ) で  $\phi=90^\circ$  とした。初期値については平衡状態での配向分布、すなわち全計算領域で  $\phi=90^\circ$  とした。

式(11)を空間に関して二次精度の中心差分、時間に関して二次精度のルンゲ・クッタ法を用いて非定常計算を行った。差分格子として円板間隔を 100 等分したサイズの正方格子を使用し、時間間隔はエリクセン数に依存して  $\Delta t=10^{-4}$  または  $10^{-3}$  とした。配向角の相対変化の格子点平均値が  $10^{-6}$  以下になった時点で定常状態に達したと判断し、計算を打ち切った。

本研究では、タンプリング液晶として 8CB (4-n-Octyl-4'-cyano biphenyl) を、アラニン液晶として 5CB (4-n-Pentyl-4'-cyano biphenyl) を選択した。両者の Leslie 粘性係数と Frank 弾性定数<sup>(12)~(14)</sup>を表 1 (有次元) に示す。

数値計算を行うに当たり、エリクセン数と円板半径比 (円板半径 / 円板間隔) を決定する必要がある。Carlsson らの実験では<sup>(7)</sup>、間隔 650  $\mu\text{m}$ 、半径 25 mm の平行二円板が用いられており、最大角速度は  $2 \times 10^{-2} \text{ s}^{-1}$  である。この場合  $Er$  の最大値はおよそ 70 となるの

Table 1 Material constants

|                             | 8CB(35°C)              | 5CB(29°C)              |
|-----------------------------|------------------------|------------------------|
| Viscosity coefficients Pa·s |                        |                        |
| $\alpha_2$                  | $-6.97 \times 10^{-2}$ | $-6.45 \times 10^{-2}$ |
| $\alpha_3$                  | $1.40 \times 10^{-2}$  | $-0.38 \times 10^{-2}$ |
| $\alpha_5$                  | $5.28 \times 10^{-2}$  | $5.19 \times 10^{-2}$  |
| $\alpha_6$                  | $-0.30 \times 10^{-2}$ | $-1.65 \times 10^{-2}$ |
| Elastic constants N         |                        |                        |
| $K_1$                       | $1.28 \times 10^{-11}$ | $0.95 \times 10^{-11}$ |
| $K_2$                       | $0.58 \times 10^{-11}$ | $0.51 \times 10^{-11}$ |
| $K_3$                       | $1.37 \times 10^{-11}$ | $1.22 \times 10^{-11}$ |

で、以下の計算では  $Er=50$  とその 1/10 の 5 を選択した。一方実験の半径比は 38 である。半径比の増加は円板外周部の実質エリクセン数を増加させるのみで、それ以外の影響は有



しない．そこで計算時間の短縮を考慮し，本研究では 10 に設定した．

### 3．計算結果および考察

**3・1 タンプリング挙動** 大きさ  $\dot{\gamma}$  の単純せん断流中で，ディレクタが流れから受ける粘性トルク  $\Gamma$  は

$$\Gamma = \dot{\gamma}(\alpha_3 \cos^2 \phi - \alpha_2 \sin^2 \phi) \quad (13)$$

と表される（式(13)は有次元である）．粘性トルクがゼロとなり，ディレクタが静止する角度  $\phi_L$  は，式(13)で  $\Gamma = 0$  とすれば

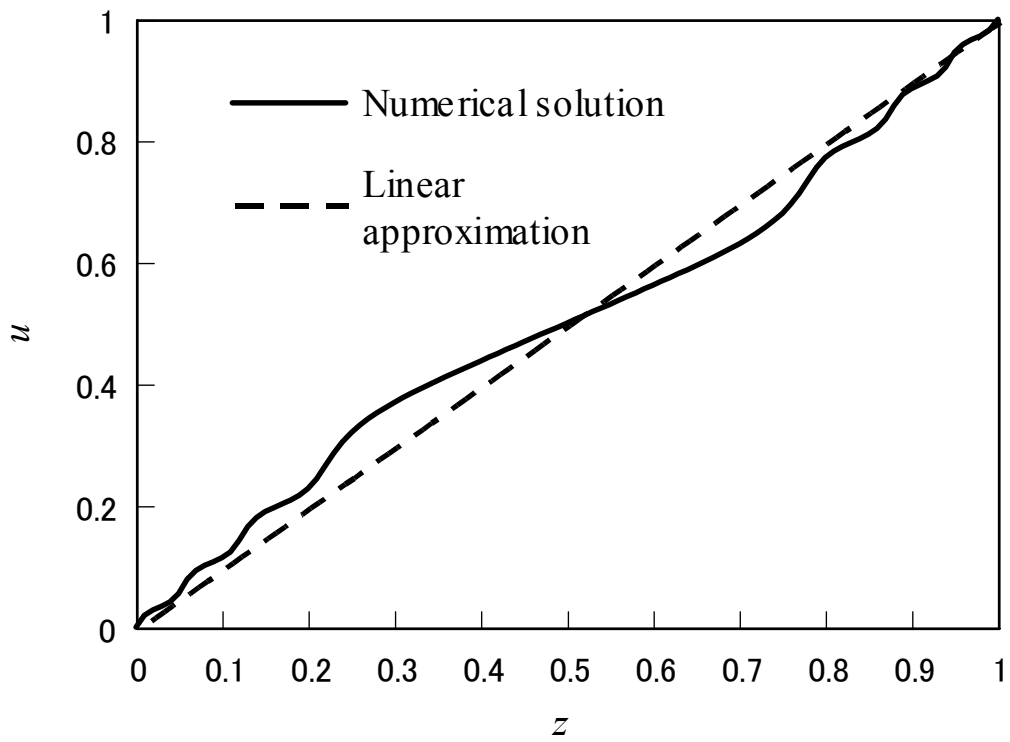
$$\phi_L = \tan^{-1} \sqrt{\frac{\alpha_3}{\alpha_2}} \quad (14)$$

となる（式(14)は有次元である）． $\phi_L$  は明らかに物質固有の角度で，この角度は Leslie 角と呼ばれている．式(14)で  $\phi_L$  が値を持つ条件は  $\alpha_2$  と  $\alpha_3$  が同符号となることである．通常  $\alpha_2$  は負であるので  $\alpha_3$  も負である．表 1 より 5CB はこの条件を満たすが，8CB では両者が異符号のため Leslie 角は存在せず，式(13)の粘性トルクがゼロになる角度は存在しない．従ってディレクタは回転し続けることになる．この現象をタンプリング挙動と呼ぶ．

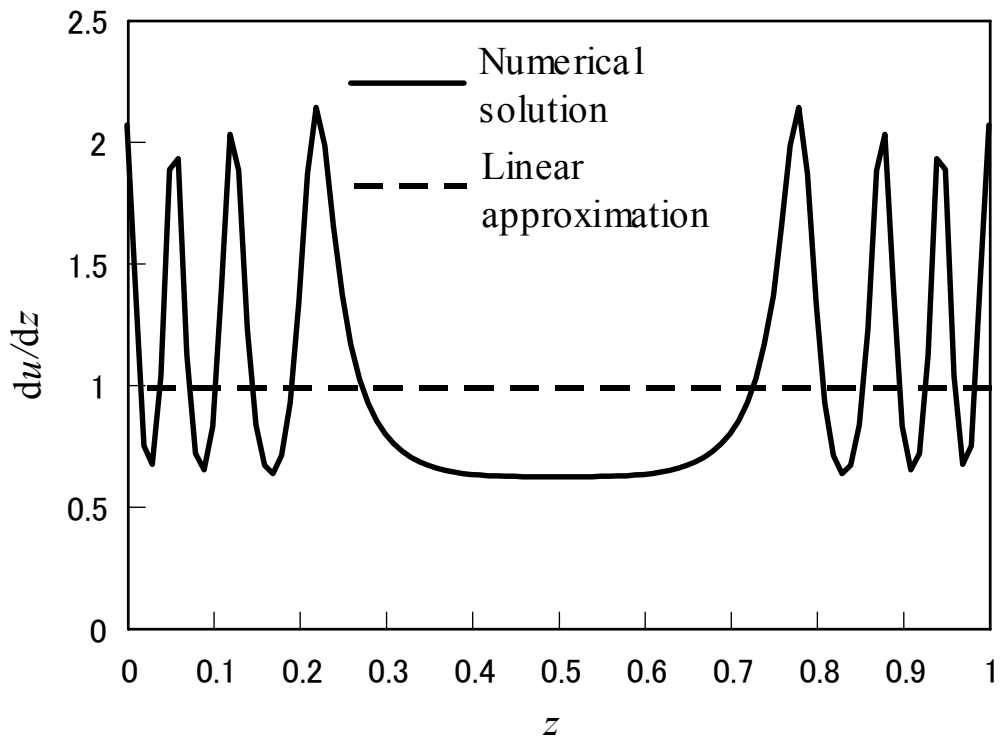
以上の議論は単純せん断流の場合であり，固体壁が存在する場合は壁面配向の束縛のためディレクタが回転し続けることはない．つまり，ディレクタの回転により空間ひずみ，すなわち弾性トルクが式(13)の粘性トルクと釣り合うまで増加し，そこで静止する．

**3・2 直線速度分布の検討** 一次元の平行平板間クエット流れを例に取り，速度分布が直線の場合と運動方程式から求めた場合の配向分布の比較検討を行う．図 4 はエリクセン数  $Er = 300$  の 8CB の結果である． $z$  は平板間の無次元座標， $u$  はせん断方向無次元速度である．結果は  $z = 0.5$  に関して対称であるので下半分のみを表示している．速度は直線分布に波状分布が重なった分布となっており，その結果，配向分布に影響を及ぼす速度こう配は場所によって大きく変化している．しかし配向分布に関する両者の差異は小さく，特に配向角の最小値（絶対値の最大値）は満足に一致している．これは，配向角は上下壁面で固定されており，且つ，配向角の局所的急変は式(7)の自由エネルギー密度の増加をもたらすので，ディレクタの急激な空間変化が抑制されるためである．

以上のことから，配向分布に注目する限り，直線速度分布の近似は妥当であるといえる．

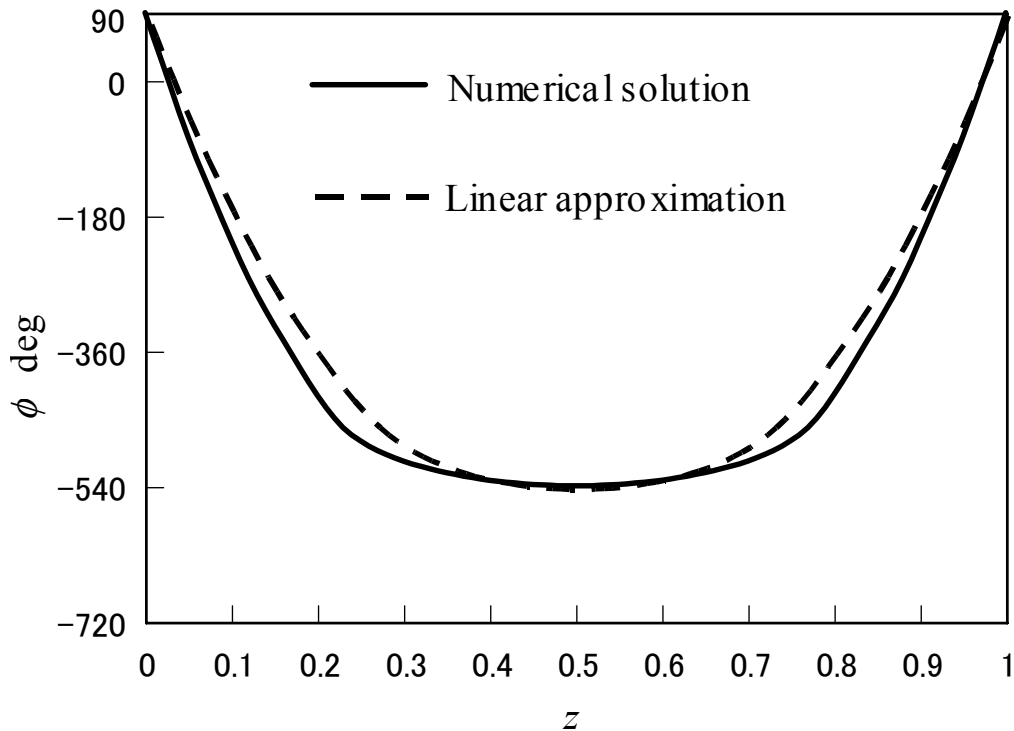


(a) Velocity profiles



(b) Velocity gradients

(c) 図は次項

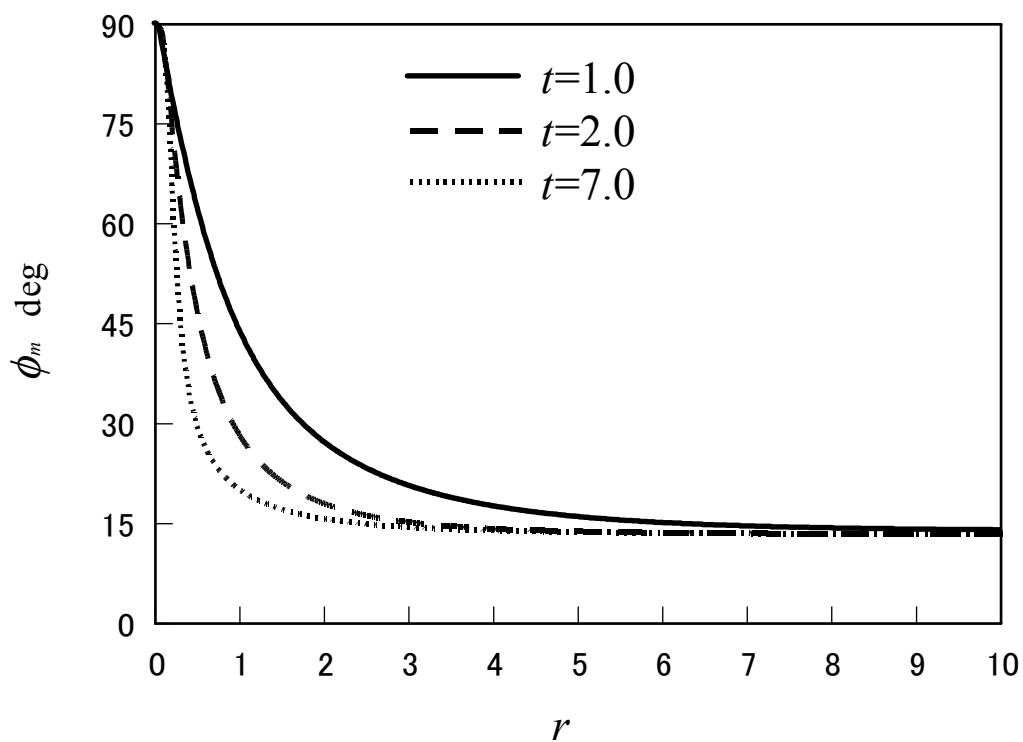


(c) Orientation angles

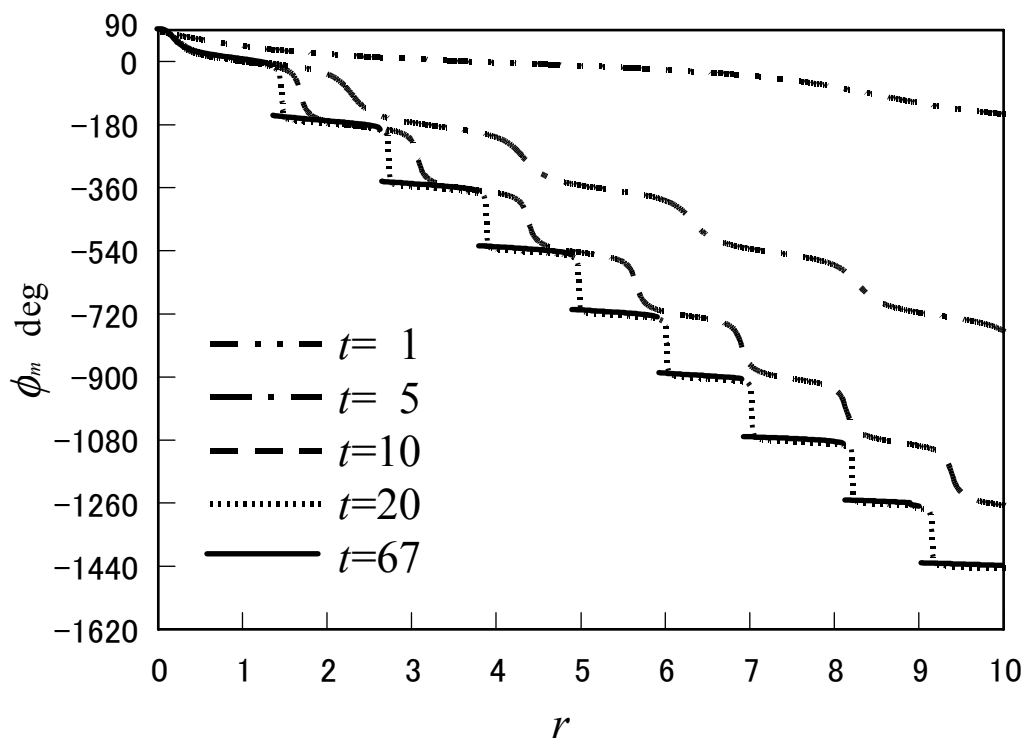
Fig. 4 Validity of a linear approximation of velocity profile  
in plane Couette flow for  $Er = 300$

**3・3 Carlsson-Skarp モデル** 二次元の計算結果を示す前に、比較のために Carlsson-Skarp モデル<sup>(7)</sup> (以下 C-S モデル) を用いた結果を示す。C-S モデルは式(11)で  $r$  微分項をゼロと置くことで得られる。図 5(a)~(c)の横軸は円板半径位置、縦軸は 2 枚の円板の中央面、すなわち  $z = 0.5$  でのディレクタの配向角  $\phi_m$  である。図(a)はエリクセン数  $Er = 50$  の 5CB, 図(b)は  $Er = 50$  の 8CB, 図(c)は  $Er = 5$  の 8CB である。本計算では、配向角分布が“ほぼ”定常と見なせる状態に達してから“完全に”定常状態に至るまでに長時間を要した。そこで各図中のパラメータの最終時刻には、“完全”定常状態における配向分布の 99.9%に至った時刻を選んだ。ちなみに、“完全”定常状態までに要した時間  $T$  を図説に示した。

図 5(a)より、円板外周に近いほど周方向せん断速度は大きくなるので、いずれの時刻においても  $\phi_m$  は  $r$  に対して単調減少を示す。初期値  $90^\circ$  からスタートした  $\phi_m$  は時間とともに減少しており、 $t = 7$  でほぼ定常状態に達した。 $\phi_m$  の定常値は円板中心近傍を除いて約  $14^\circ$  であり、これは式(14)から得られる 5CB の Leslie 角  $13.9^\circ$  に一致する。

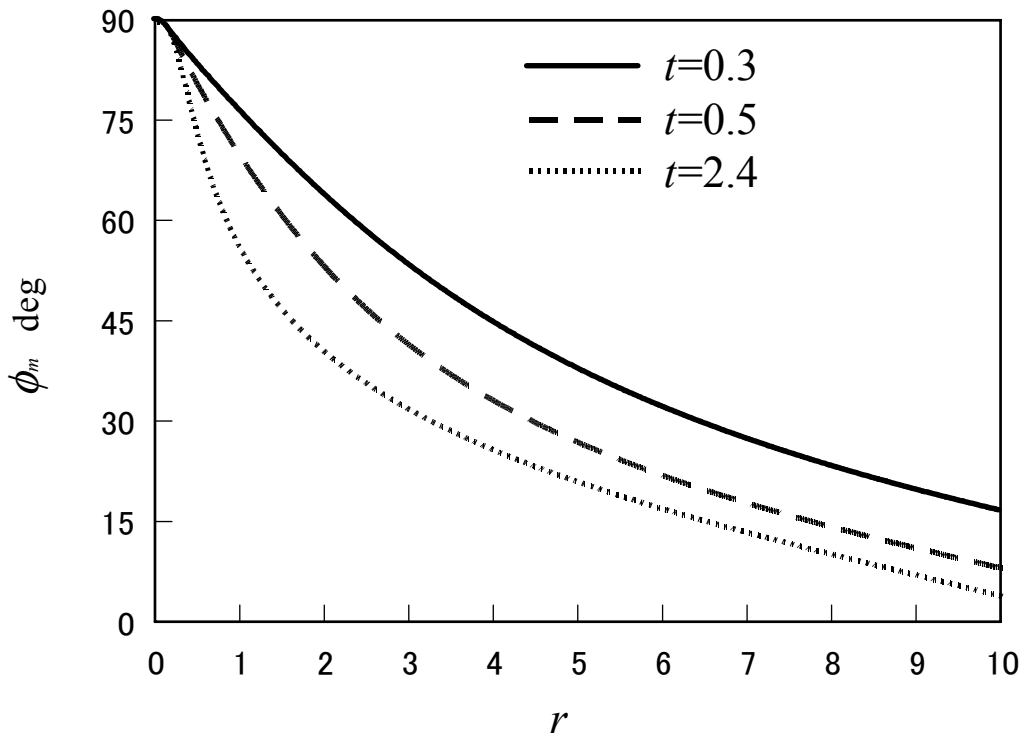


(a) 5CB ,  $Er = 50$  ,  $T = 17$



(b) 8CB ,  $Er = 50$  ,  $T = 133$

(c) 図は次項 .



(c) 8CB ,  $Er = 5$  ,  $T = 4.3$

Fig. 5 Orientation angle of the director at the midplane  
between two parallel disks for the C-S model

図(b)の 8CB では、 $\phi_m$  が時間とともに減少する傾向は図(a)と同様であるが、以下の 2 点に関して異なる。まず第一に、 $\phi_m$  の減少の割合は極めて大きく、ディレクタは時計回り(図 3 参照)に大きく回転している。その結果  $\phi_m$  は  $-1500^\circ$  にまで達している。第二は、 $t=1$  を除いて階段状の急変部分が発生していることである。この階段状部分はディレクタのタンブリング挙動であり、円板外周部から発生し中心方向に移動している。時間の経過とともにこの階段状部分の数は増加し、 $t=67$  では不連続変化になっている。

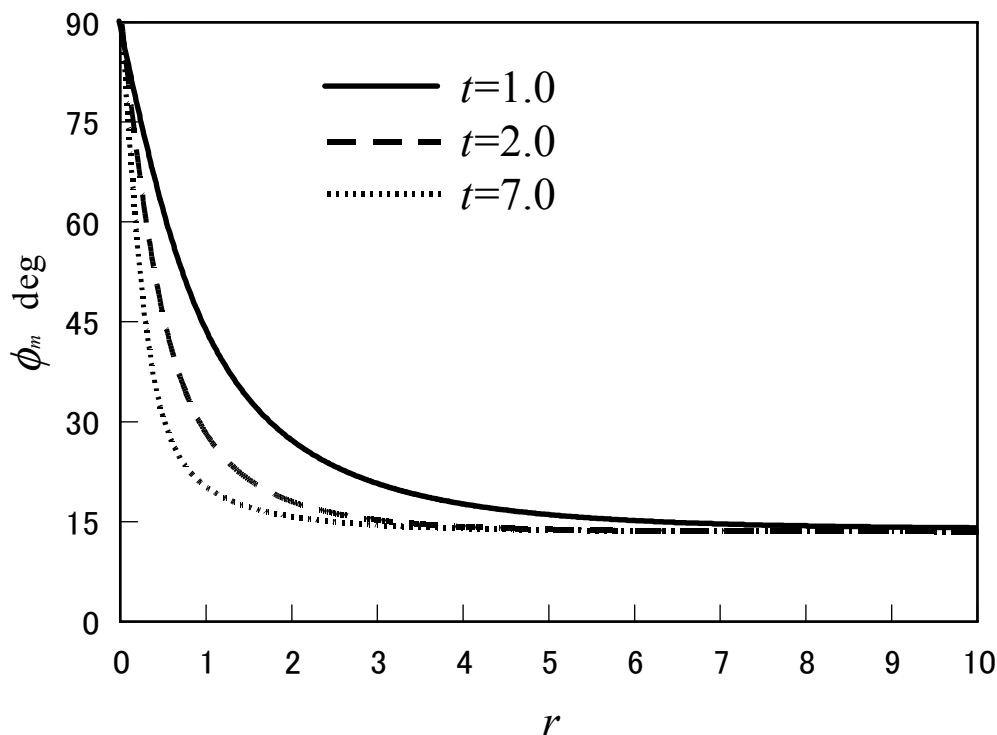
この階段状変化についてさらに検討する。いずれの時刻においても、 $\phi_m$  の半径方向変化が緩慢となっているのは、 $\phi_m$  が  $-180^\circ \times n$  ( $n=0, 1, 2, \dots$ ) 付近である。すなわち、ディレクタがせん断方向に配向することで、ディレクタに作用する流れの粘性トルクが最小となる状態である。逆に  $\phi_m$  の変化が階段状となっている所では、 $\phi_m$  は  $-180^\circ \times n - 90^\circ$  ( $n=0, 1, 2, \dots$ ) を通過しており、ディレクタがせん断方向に対して垂直に配向した状態である。粘性トルクの観点からすればこのような垂直配向状態は起こりにくいので、 $\phi_m$  の分布は階段状そして定常状態では不連続となった。回転円板では、当然のことながら外周ほ

どせん断速度は大きい。各図の設定  $Er$  は  $r = 1$  での公称エリクセン数であり、局所実質  $Er$  は  $r$  とともに直線的に増加する。従って同一時刻において、タンプリングは実質  $Er$  の大きい部分で発生するので、階段状部分は円板外周部から中心に向かって発生することが理解できる。

図(c)は図(b)において  $Er$  を 10 分の 1 にした結果である。時間とともに  $\phi_m$  の値は減少し、 $t = 2.4$  でほぼ定常状態に達した。図(b)と同様タンプリング液晶の結果であるが、設定  $Er$  が小さいためにディレクタはタンプリング現象を起こしておらず、図(a)と似た曲線が得られている。

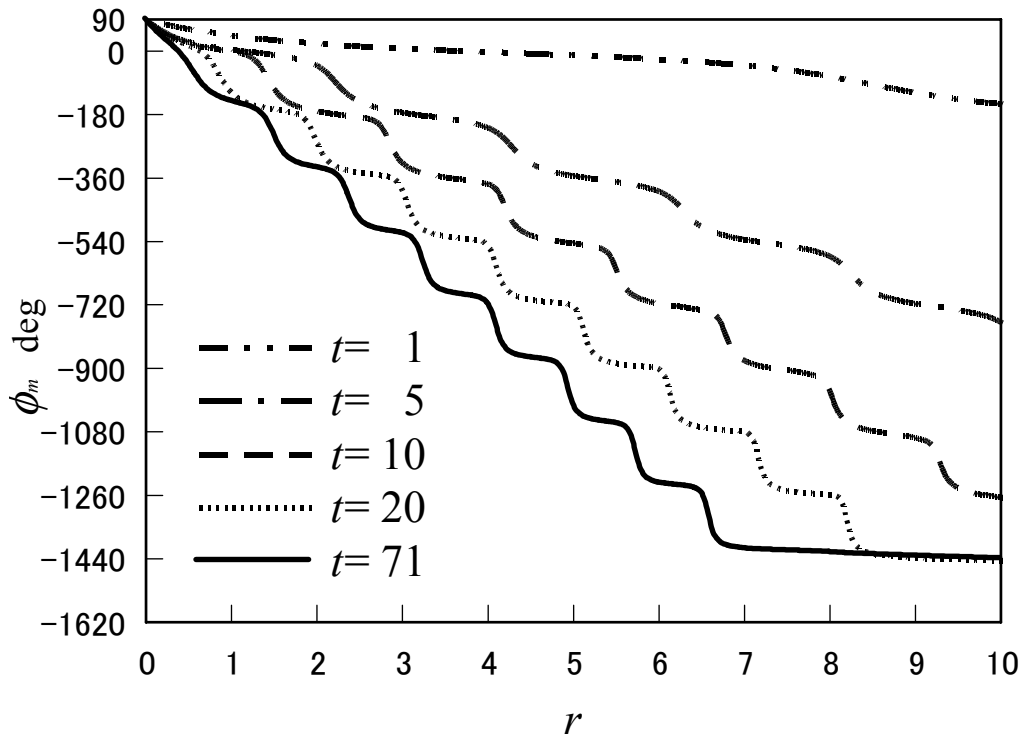
### 3・4 二次元計算

3・4・1  $\phi_m$  の分布  $\phi_m$  の  $r$  方向分布を図 6(a) ~ (c) に示す。図 6(a) ~ (c) の計算条件はそれぞれ図 5(a) ~ (c) と同じである。図 6(a) のアライニング液晶、および図 6(c) の低エリクセン数におけるタンプリング液晶では、それぞれ図 5(a), (c) と酷似した結果が得られている。従ってタンプリング現象の生じない条件では、半径方向の弾性を無視した C-S モデルは十分適用し得ることが明らかとなった。

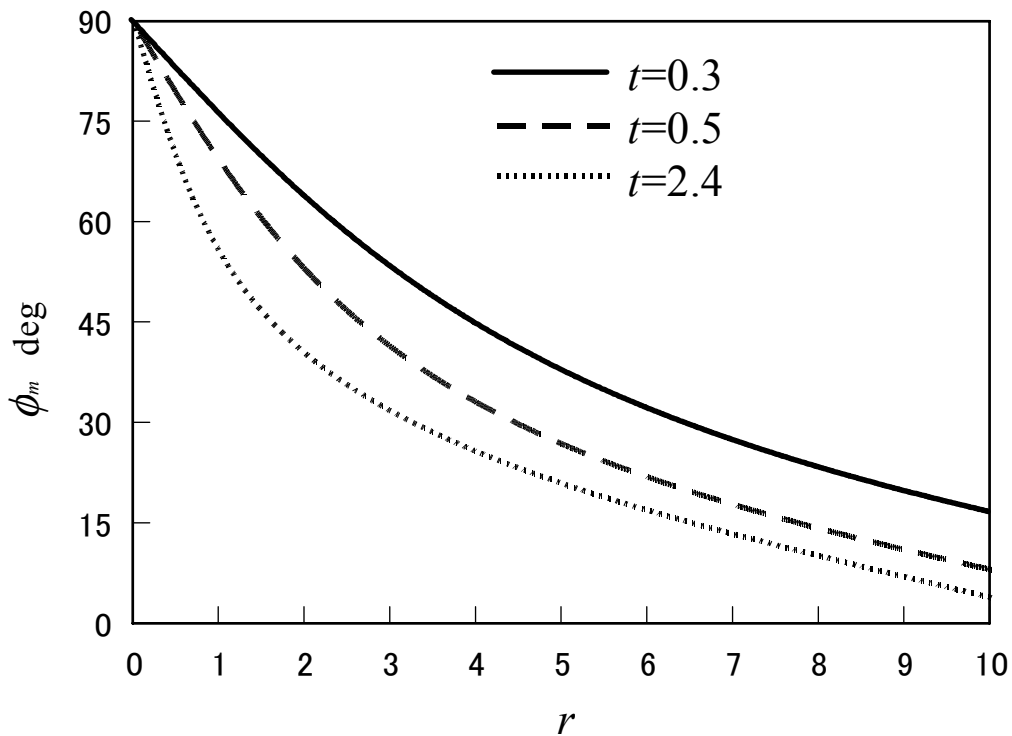


(a) 5CB,  $Er = 50$ ,  $T = 15$

(b)図, (c)図は次項。



(b) 8CB , Er = 50 , T = 126



(c) 8CB , Er = 5 , T = 4.0

Fig. 6 Orientation angle of the director at the midplane  
between two parallel disks for two-dimensional analysis

一方図 6(b)と図 5(b)を比較すると、 $\phi_m$  に階段状の変化が生じていることは両者共通しているが、時間がある程度経過すると分布に差異が見られる。まず第一に、定常状態では図 5 の場合タンプリング位置で  $\phi_m$  は不連続であったのに対し、図 6 では連続である。第二に、定常状態に近づくと  $\phi_m$  に階段状変化が生じている位置は図 5 よりも図 6 の方が中心寄りである。r 方向の弾性を考慮した計算を行ったことから、図 6 で  $\phi_m$  の r 方向分布が連続になることは当然予想された結果である。以下で、タンプリングの発生位置が円板中心方向に移動する現象について考察する。C-S モデルでは r 方向の連続性が無視されているので、せん断方向に対してディレクタが垂直配向とならざるを得ない場合、そこで不連続ジャンプすることで垂直配向を回避できる。しかし二次元計算では配向角は r 方向に連続であるので、垂直配向する領域が必然的に生じる。この場合、式(13)に示した流れの粘性トルクをできるだけ小さくするために、この垂直配向位置がせん断速度のより小さい領域、すなわち円板中心近傍に移動したと考えられる。

**3・4・2  $\phi$  の等値線図** 図 6(b)の各時刻において、 $\phi$  の等値線を  $r-z$  面上に描いたのが図 7 である。二次元平面でのタンプリングの発生位置を明確にするため、 $\phi$  の値が  $-180^\circ \times n - 90^\circ$  ( $n = 0, 1, 2, \dots$ ) を選択した。図より、時間の経過とともに円板外周部からタンプリングが発生し円板の中心方向へ移動していること、また  $z$  方向にもタンプリング位置が存在し、この数は円板外周部に近いほど多いことがわかる。

**3・4・3 透過光強度** 緒言で述べたように、Carlsson ら<sup>(7)</sup>は8CBを用いて回転円板間流れの透過光実験を行い、円板外周位置で発生した黒い同心円が時間とともに円板の中心方向に移動する現象を報告している。本研究では、ディレクタ分布の時系列データを得ることができたので、直交ニコル下における透過光強度の実験を模擬することができる。図 8 は、図 6(b)または図 7 のディレクタの配向角を用いて、下部円板の下方から  $z$  方向に投光した透過光強度  $I$  を

$$I(r, \theta) = \sin^2 2\theta \int_0^1 \cos^2 \phi(r, z) dz \quad (15)$$

で計算し、グレースケールで描いた図である。透過光強度が強い部分は白く、弱い部分は黒く描かれている。 $t = 0.5$  の図中に P と A で示したように、各図において水平および垂直方向に偏光子と検光子を設定しているので、この方向は暗視野となる。

$t = 0.5$  では円板間にタンプリングは発生しておらず、ディレクタは領域全体で主に流れ方向を向いているため十字状の暗視野のみが見られる。 $t = 1$  ではリング状の暗視野部が現



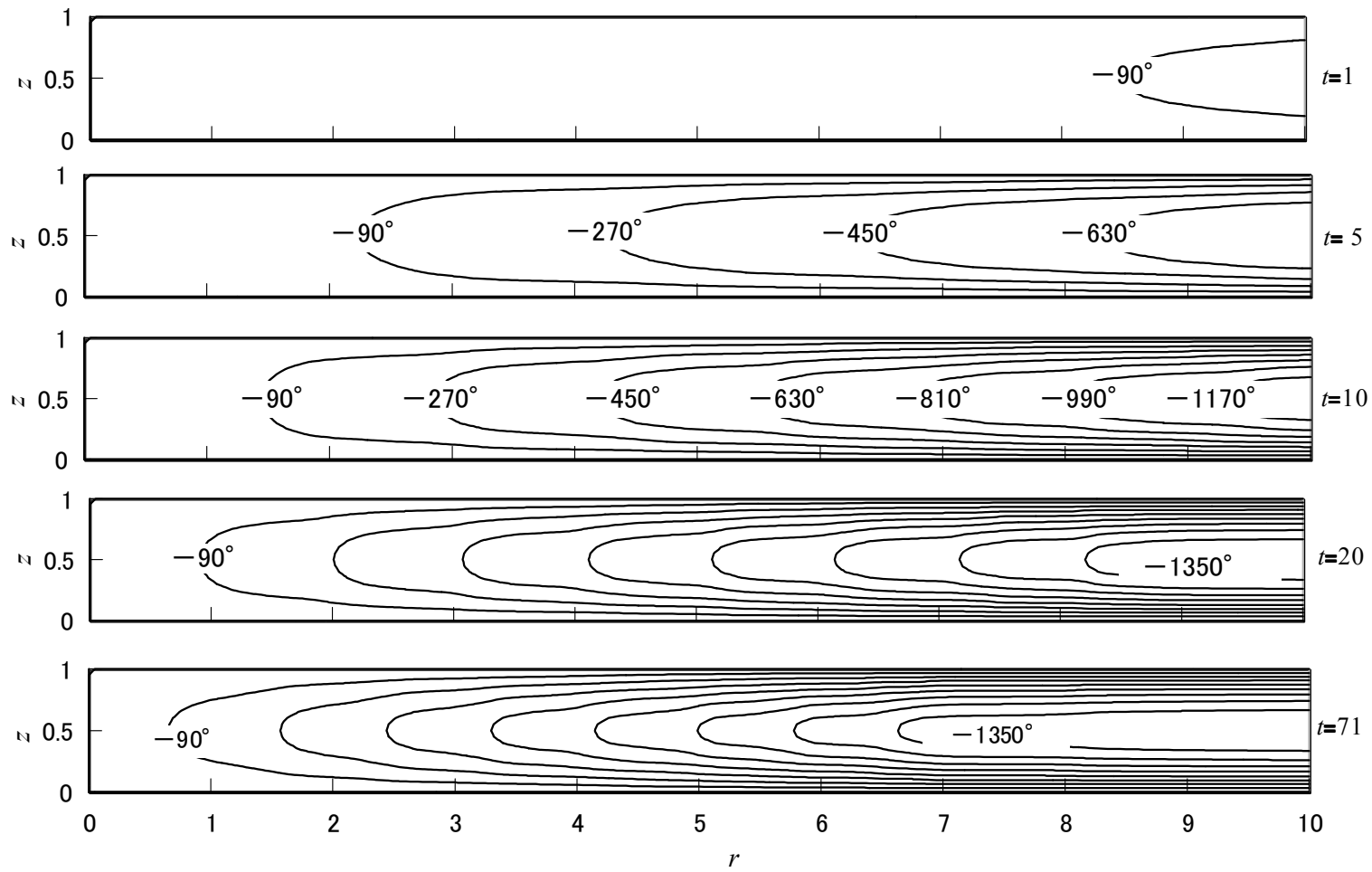
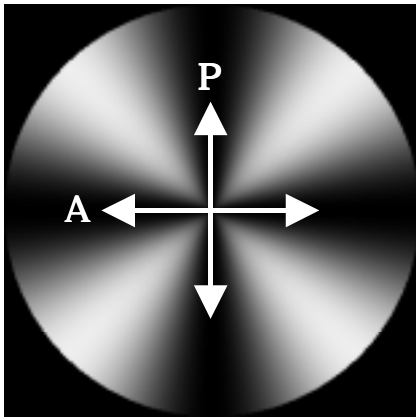
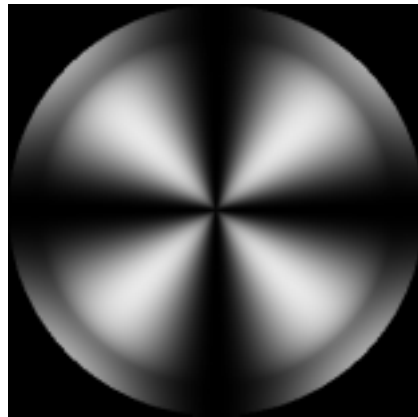


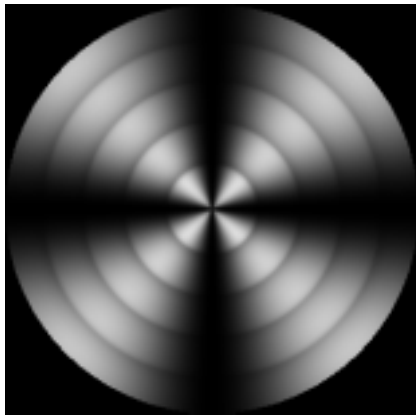
Fig. 7 Contours of orientation angle of the director depicted on the  $r-z$  plane for two-dimensional analysis



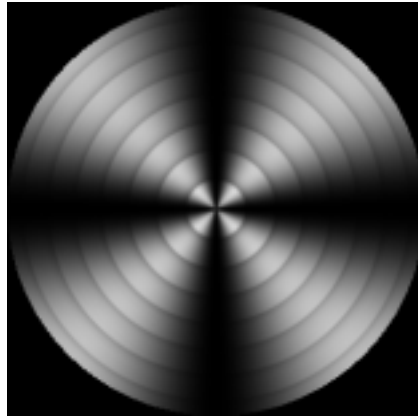
$t = 0.5$



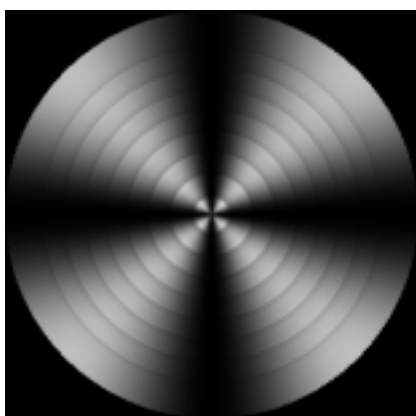
$t = 1$



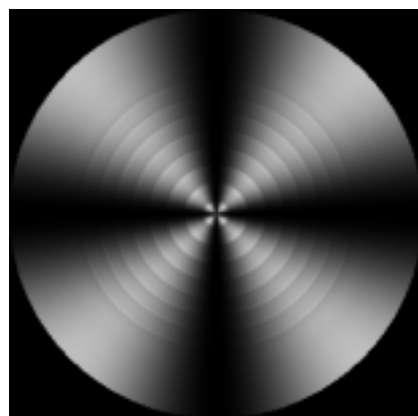
$t = 5$



$t = 10$



$t = 20$



$t = 71$

Fig. 8 Light intensity through the rotating parallel disks

れている。タンプリングが発生するとそのディレクタは $z$ 軸方向に配向するので偏光下では暗視野となる。図より、円板外周部からリング状の暗視野部が現れ、時間の経過とともに円板中心方向に移動しており、Carlsson らの実験結果を十分にシミュレートできていることがわかる。ディレクタが $z$ 方向に配向した部分が暗視野であることから、配向角が $r$ 方向に不連続ジャンプを起こす C-S モデルは、リング状暗視野の発生とその挙動を説明することは不可能であり、二次元解析が必要である。

#### 4. 結 言

本研究ではネマティック液晶の同心回転円板間流れを、円板半径方向の連続性を無視した場合 (C-S モデル) と考慮した場合について数値解析した。得られた結果をまとめて以下に示す。

- (1) タンプリング現象の生じない条件では、C-S モデルは十分適用し得る。
- (2) C-S モデルでは、ディレクタがタンプリングしている部分でディレクタの配向角に不連続ジャンプが生じる。一方半径方向の連続性を考慮した二次元計算では、タンプリング部でも配向角は連続であり、その部分は時間の経過とともに円板中心方向に移動する。
- (3) 配向角の計算値から直交ニコル下における透過光強度の実験を模擬した結果、リング状暗視野の発生とその円板中心方向への移動がシミュレートされ、Carlsson らの実験結果を十分に説明できた。

本報告では、円板間の速度分布は直線であると仮定し、速度場の計算は行わず配向場のみを扱った。速度場と配向場を連立させて数値解析し、円板に作用する粘性トルクの見積もりが今後の課題である。

#### 参考文献

- (1) 飯村一賀・浅田忠裕・安部明広, 液晶高分子 - その基礎と応用 -, (1988), 155, シグマ出版.
- (2) 液晶若手研究会, (1996), 44, シグマ出版.
- (3) 例えば, 松本正一・角田市良, 液晶の基礎と応用, (1991), 3, 工業調査会.
- (4) Pieranski, P. and Guyon, E., *Phys. Rev. Lett.*, **32** (1974), 924.
- (5) Cladis, P. E. and Torza, S., *Phys. Rev. Lett.*, **35** (1975), 1283.
- (6) Tanner, R. I., *Engineering Rheology*, (1988), 77, Oxford Univ. Press.

- (7) Carlsson, T. and Skarp, K., *Liq. Cryst.*, **1** (1986), 455.
- (8) Carlsson, T., *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, **104** (1984), 307.
- (9) Ericksen, J. L., *Arch. Ration. Mech. Anal.*, **4** (1960), 231.
- (10) Ericksen, J. L., *Trans. Soc. Rheol.*, **5** (1961), 23.
- (11) Leslie, F. M., *Arch. Ration. Mech. Anal.*, **28** (1968), 265.
- (12) Knepe, H., Schneider, F. and Sharma, N. K., *J. Chem. Phys.*, **77** (1982), 3203.
- (13) Knepe, H., Schneider, F. and Sharma, N. K., *Ber. Bunsenges. Phys. Chem.*, **85** (1981), 784.
- (14) Karat, P. P. and Madhusudana, N. V., *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, **40** (1977), 239.

## 付録 B 展開式

付録 B では本論文中で行った研究の基礎式をそれぞれの座標系で展開した式を紹介する .

### 1 . 層を固定した場合の平行平板間せん断流れ

Planar 配置の場合

$$\begin{aligned}\phi_{zz} &= ((\tau_1 - \tau_5)(v_z \cos \phi - u_z \sin \phi)) / K_2^c \\ u_{zz} &= -((\varepsilon_2(2\phi_z v_z \cos 2\phi + (-2\phi_z u_z + v_{zz}) \sin 2\phi)) / (\varepsilon_1 + \varepsilon_2 \cos 2\phi)) \\ v_{zz} &= (\varepsilon_2(2\phi_z u_z \cos 2\phi + (2\phi_z v_z + u_{zz}) \sin 2\phi)) / (-\varepsilon_1 + \varepsilon_2 \cos 2\phi)\end{aligned}$$

添え字付きの  $\phi$  ,  $u$  ,  $v$  は各物理量をの添え字が示す変数で微分した微分係数を表す .  $\varepsilon_1$  ,  $\varepsilon_2$  は以下の式で表される .

$$\begin{aligned}\varepsilon_1 &= -4\lambda_1 + 2\lambda_2 - 2\lambda_3 + 2\lambda_4 + \lambda_5 + \lambda_6 + 2\mu_0 + 2\mu_2 + \mu_4 + \mu_5 \\ \varepsilon_2 &= 2\lambda_2 - 2\lambda_3 + \lambda_5 + \lambda_6 + \mu_4 + \mu_5\end{aligned}$$

Bookshelf 配置の場合

$$\begin{aligned}\phi_{zz} &= (2u_z(\lambda_5 + \lambda_2 \sin 2\phi) + (K_1^c - K_3^c)\phi_z^2 \sin 2\phi) / (K_1^c + 2K_2^c + K_3^c + (K_1^c - K_3^c) \cos 2\phi) \\ u_{zz} &= (8\phi_z u_z(2\lambda_2 - \mu_3 \cos 2\phi) \sin 2\phi) / (4\lambda_5 + 4\mu_0 + \mu_3 + 4\mu_4 + 8\lambda_2 \cos 2\phi - \mu_3 \cos 4\phi)\end{aligned}$$

添え字付きの  $\phi$  ,  $u$  は各物理量をの添え字が示す変数で微分した微分係数を表す .

### 2 . 層を固定した場合の平行平板間入り口流れ

$$\begin{aligned}0 &= ((-K_1^c + K_3^c) \sin(2\phi) \phi_y^2 + 2\phi_y((-K_1^c + K_3^c) \cos(2\phi) \phi_x + 2\lambda_5 \psi_x) \\ &\quad + \sin(2\phi)((K_1^c - K_3^c)(\phi_x^2 - 2\phi_{xy}) + 4\lambda_2 \psi_{xy}) + (K_1^c + 2K_2^c + K_3^c)(\phi_{yy} - 2\phi_{xx}) - 2\lambda_5(\psi_{yy} + 2\psi_y \phi_x + \psi_{xx}) \\ &\quad + \cos(2\phi)((K_1^c - K_3^c)(\phi_{yy} - \phi_{xx}) + 2\lambda_2(-\psi_{yy} + \psi_{xx}))) / (4\lambda_5) \\ 0 &= (4(\lambda_5 + \mu_0) \psi_{yyyy} + \mu_3 \psi_{yyyy} + 4\mu_4 \psi_{yyyy} - 16\lambda_5 \psi_{yy} \phi_x^2 + 32\lambda_2 \cos(2\phi) \phi_y^3 \psi_x - 8\lambda_5 \phi_y^3 \psi_x \\ &\quad + 8\rho \psi_{yyy} \psi_x + 16\lambda_5 \phi_{yy} \phi_x \psi_x + 16\lambda_5 \psi_{yy} \phi_x \psi_x - 16\lambda_5 \psi_y \phi_x \psi_{xy} - 16\lambda_5 \phi_{yy} \psi_{xy} + 8\lambda_5 \psi_y \phi_{xy} - 8\rho \psi_y \psi_{xy} \\ &\quad + 16\lambda_5 \psi_{xy} \phi_{xx} - 16\lambda_5 \phi_{xy} \psi_{xx} - 16\phi_y^2(4\lambda_2 \sin(2\phi)(\phi_x \psi_x - \psi_{xy}) + 2\mu_3 \sin(4\phi) \psi_{xy} + 2\lambda_2 \cos(2\phi)(\psi_{yy} \\ &\quad + \psi_y \phi_x - \psi_{xx}) \lambda_5 \psi_{xx} + \mu_3 \cos(4\phi)(-\psi_{yy} + \psi_{xx})) - 8\lambda_5 \psi_x \phi_{xy} + 8\rho \psi_x \psi_{xy} + 8\lambda_5 \psi_{xxy} + 8\mu_0 \psi_{xxy} \\ &\quad + 2\mu_3 \psi_{xxy} + 8\mu_4 \psi_{xxy} + 8\lambda_5 \psi_y \phi_{xxx} + 8\rho \psi_y \psi_{xxx} + 8\phi_y(2\lambda_5(-\psi_x \phi_{xy} + 2\phi_x \psi_{xy} + \psi_y \phi_{xx}) \\ &\quad - 2\lambda_2 \sin(2\phi)(2\psi_{yyy} + 2\psi_y(-2\phi_x^2 + \phi_{xy}) + \psi_x(-3\phi_{yy} + \phi_{xx})) + \mu_3 \sin(4\phi)(\psi_{yyy} + 4\phi_x(-\psi_{yy} + \psi_{xx}) - 3\psi_{xy}) \\ &\quad - \mu_3 \cos(4\phi)(8\phi_x \psi_{xy} - 3\psi_{xy} + \psi_{xxx}) - 2\lambda_2 \cos(2\phi)(2\psi_x(\phi_x^2 - 2\phi_{xy}) + 3\psi_{xy} + 2\psi_y \phi_{xx} + \psi_{xxx})) \\ &\quad + 4\mu_3 \sin(4\phi)(8\phi_x^2 \psi_{xy} - 4\phi_{xy} \psi_{xy} + \psi_{xyy}) + (\phi_{yy} - \phi_{xx})(\psi_{yy} - \psi_{xx}) + \phi_x(-6\psi_{xyy} + 2\psi_{xxx}) - \psi_{xxy}) \\ &\quad - 16\lambda_2 \sin(2\phi)(-4\phi_x^2 \psi_{xy} - \psi_x \phi_{xy} + \psi_{xyy}) + \phi_{xx}(\psi_{yy} - \psi_{xx}) + \phi_{yy}(\psi_{yy} + \psi_y \phi_x - \psi_{xx}) + \psi_y \phi_{xxy} \\ &\quad + \phi_x(2\psi_x \phi_{xy} - 3\psi_y \phi_{xx} - 2\psi_{xxx}) + \psi_{xxy}) + 4\lambda_5 \psi_{xxxx} + 4\mu_0 \psi_{xxxx} + \mu_3 \psi_{xxxx} + 4\mu_4 \psi_{xxxx}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\mu_3 \cos(4\phi) (\psi_{yyyy} - 8\psi_{yyy}\phi_x + 8\psi_{xy}(-\phi_{yy} + \phi_{xx}) + 8(2\phi_x^2 - \phi_{xy})(\psi_{yy} - \psi_{xx}) \\
& + 24\phi_x\psi_{xy} - 6\psi_{xxy} + \psi_{xxx}) - 8\lambda_2 \cos(2\phi) (-\psi_{yyy} + 2\psi_{yy}\phi_x + 4\psi_{yy}\phi_x^2 - 4\psi_y\phi_x^3 + \phi_{yyy}\psi_x \\
& - 4\phi_{yy}\phi_x\psi_x + 8\psi_y\phi_x\phi_{xy} + 4\phi_{yy}\psi_{xy} - \psi_y\phi_{xy} + 4\psi_{xy}\phi_{xx} - 4\phi_x^2\psi_{xx} - \psi_x\phi_{xxy} + 6\phi_x\psi_{xxy} + \psi_y\phi_{xxx} \\
& + \psi_{xxx}) / (8\rho)
\end{aligned}$$

添え字付きの  $\phi$  ,  $\psi$  は各物理量をの添え字が示す変数で微分した微分係数を表す .

### 3 . 層変化を考慮した場合

$$\mathbf{f} = (f_x, f_y, f_z)^T$$

$$\begin{aligned}
f_x = & -(2(\tau_5 - \lambda_6 a_x c_x) \dot{c}_x - 2\lambda_6 c_x (a_y \dot{c}_y - a_z \dot{c}_z) + (a_y (\lambda_1 - \lambda_4 + 2\tau_3 a_x c_x + (\lambda_3 - \lambda_6) c_x^2) \\
& + (\tau_2 - \tau_5 + (\lambda_3 + \lambda_6) a_x c_x + 2\tau_4 c_x^2) c_y) \dot{\eta}) / (2\lambda_4)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
f_y = & -(2\tau_5 \dot{c}_y - 2\lambda_6 c_y (a_x \dot{c}_x + a_y \dot{c}_y + a_z \dot{c}_z) + (a_x (\lambda_1 + \lambda_4 + 2\tau_3 a_y c_y + (\lambda_3 + \lambda_6) c_y^2) \\
& + c_x (\tau_2 + \tau_5 + (\lambda_3 - \lambda_6) a_y c_y + 2\tau_4 c_y^2) \dot{\eta}) / (2\lambda_4)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
f_z = & -(2\tau_5 \dot{c}_z - 2\lambda_6 c_z (a_x \dot{c}_x + a_y \dot{c}_y + a_z \dot{c}_z) + (a_x (2\tau_3 a_y + (\lambda_3 + \lambda_6) c_y) + c_x ((\lambda_3 - \lambda_6) a_y \\
& + 2\tau_4 c_y) c_z) \dot{\eta}) / (2\lambda_4)
\end{aligned}$$

$$\mathbf{g} = (g_x, g_y, g_z)^T$$

$$g_x = (-2\tau_5 \dot{a}_x + ((-\tau_1 + \tau_5) a_y + (-\lambda_2 + \lambda_5) c_y) \dot{\eta}) / (2\lambda_5)$$

$$g_y = (-2\tau_5 \dot{a}_y + ((-\tau_1 + \tau_5) a_x + (\lambda_2 + \lambda_5) c_x) \dot{\eta}) / (2\lambda_5)$$

$$g_z = -\tau_5 \dot{a}_z / \lambda_5$$

ここで , ドット付きの  $a_x$  ,  $a_y$  ,  $a_z$  および  $c_x$  ,  $c_y$  ,  $c_z$  はそれぞれの時間微分を表す .

## 謝 辞

研究を遂行し、本論文を執筆するにあたり、終始、多大かつ明瞭なるご指導を賜りました高知工科大学工学部知能機械システム工学科蝶野成臣教授、辻知宏助教授に対し深く感謝を申し上げます。

また、知能流体力学研究室の皆様には日々ご援助、ご協力を賜りましたことを深く感謝いたします。

2005年3月