

平成 19 年度 3 月修了
博士（工学）学位論文

流動誘起型液晶圧電効果の
数値解析

Numerical Simulation of Piezoelectric Effects
Induced by Liquid Crystalline Flow

平成 18 年 12 月 18 日

高知工科大学大学院 工学研究科 基盤工学専攻（基盤工学コース）

学籍番号 1086106

永江 貴憲

Takanori Nagae

博士論文要旨

本研究では、流動が誘起するフレクソエレクトリック効果(以下、フレクソ効果と略す)に関する基礎研究として、Leslie-Ericksen 理論を用い、平行平板間ネマティック液晶のせん断流れの数値シミュレーションを行っている。また得られた結果より、平行平板間の液晶にせん断流動を与えた場合における液晶の分子配向がフレクソ分極に与える影響を調べる。本論文は全 4 章から構成されている。各章の要旨を以下に示す。

第一章 緒言

本章では本研究の背景及び研究対象であるネマティック液晶について解説を行った後に、研究目的について述べる。

第二章 In-plane 成分のみの場合

本章ではディレクタの In-plane 仮定の下での平行平板間ネマティック液晶のせん断流れの数値シミュレーションを行う。2枚の平行平板の間に液晶を封入し、上部平板を速度 U で x 軸方向に動かすことで液晶に流動を発生させる。第二章ではディレクタの In-plane 仮定を有しているためにディレクタがせん断面外成分 (z 方向成分) を有しない。基礎方程式を展開した後、代表物理量で無次元化を行う。このときエリクセン数 (Er) と呼ばれる、弾性力に対する粘性力の比を表す液晶特有の無次元数、及び壁面におけるディレクタの束縛力に対する弾性力の比を表す無次元数 (Ae) が無次元パラメータとして現れる。液晶の物性値と平板間隔を固定した場合、 Er は上部平板の移動速度 U 、 Ae は壁面におけるディレクタの束縛力にそれぞれ対応している。

無次元化を行った基礎方程式を空間に関して 2 次精度の中心差分法、時間に関して 2 次精度の Runge-Kutta 法を用いて離散化し、非定常計算を行った。特に明記のない場合、以後の物理量は無次元量とする。

速度場の境界条件として、上部壁面上では $u(1)=1$ 、下部壁面上では $u(0)=0$ のすべりなし条件とした。一方、配向場の境界条件については、上部平板面では弱アンカリング条件、下部平板面では強アンカリング条件を与えた。初期条件として、平板間全体でディレクタが x 軸方向を向いている状態と仮定した。本研究では、アライニング液晶として N-(p-methoxybenzylidene)-p'-butylaniline (MBBA)、タンブリング液晶として 4'-n-Octyl-4-cyanobiphenyl (8CB) を選択した。

アライニング液晶における配向角の空間変化は時間が経過とともに下部平板を除いて、配向角は増加している。しかし、上部平板における配向角は平板中央付近の配向角と比べて小さい。これは、上部平板面

における x 軸方向の弱アンカリング条件の影響である。中央付近における配向角が Leslie 角に達したときダイレクタは、静止する。

アライニング液晶におけるフレクソ分極値の時間変化は、時間の経過とともに、増加し、定常に至っている。

タンブリング液晶における上部平板面における配向角の時間変化は低エリクセン数の場合では初期配向状態からわずかに回転して、定常に至っている。しかし、高エリクセン数 E_r の場合、上部平板面における配向角は階段状に減少し、 $-\pi$ の整数倍の角度で定常に至っている。

タンブリング液晶におけるフレクソ分極値の時間変化は、低エリクセン数 E_r の場合、時間が経過するにつれ僅かに増加し、定常に至る。しかし、高エリクセン数 E_r の場合におけるフレクソ分極は、上下平板面における配向角が垂直状態になったときに最大になり、上部平板面における配向角が $\phi = -90^\circ \times n$ (n は奇数) を示す時間とフレクソ分極値のピークを示す時間が一致している。

第三章 Out-of-plane 成分を含む場合

本章は第二章とは異なり、ダイレクタの In-plane 仮定を用いていないため、ダイレクタがせん断面外成分 (z 方向成分) を有している。

上部平板面におけるダイレクタの配向角 ϕ はいずれのエリクセン数 E_r に対しても階段状に減少し、 $-\pi$ の整数倍の角度で定常に至っている。これは壁面において x 方向に弱固定配向状態であることと、ダイレクタが x 軸と平行になるときにダイレクタに働くトルクが最小になることに起因している。これにより壁面配向強度 A_e を一定にし、エリクセン数 E_r を変化させることによって上部平板面のダイレクタが定常に至る配向角を任意に変化させることが可能である。

フレクソ分極値は回転挙動に応じたパルス状に発生している。フレクソ分極は、第 2 章でも述べたように上下平板面における配向角が垂直状態になったときに最大になり、上部平板面におけるダイレクタ角が $\phi = -90^\circ \times n$ (n は奇数) を示す時間とフレクソ分極値のピークを示す時間が一致している。しかし、ダイレクタの In-plane 仮定した場合と比較して、壁面配向束縛強度 A_e の影響がより強く出るためにダイレクタは徐々に x - y 平面内から逃れ、 z 軸方向へと傾き、回転挙動を示すことにより、発生したフレクソ分極値に影響を及ぼしている。

第四章 総括

本章では本研究の総括を行う。

目次

博士論文要旨

目次

第1章 序論	1
1・1 本研究の概要	1
1・2 研究の目的および背景	1
1・3 液晶	2
1・4 ネマティック液晶	3
1・5 アライニング・タンブリング液晶	3
1・6 表面束縛 (Surface Anchoring)	4
1・7 フレクソエレクトリック効果	5
1・8 本論文の構成	6
参考文献	7
第2章 In-plane 成分のみの場合	9
2・1 基礎方程式及び座標系	9
2・1・1 流れ構造および座標系	9
2・1・2 基礎方程式	10
2・2 数値計算	11
2・2・1 無次元化と無次元数	11
2・2・2 計算方法	12
2・2・3 境界条件及び初期条件	12
2・2・4 物性値	13
2・3 計算結果及び考察	16
2・3・1 アライニング液晶	16
2・3・1・1 配向場	16

2・3・1・2	速度場	23
2・3・1・3	分極値	26
2・3・2	タンブリング液晶	29
2・3・2・1	配向場	29
2・3・2・2	速度場	47
2・3・2・3	分極値	53
2・4	結言	57
	参考文献	58
第3章	Out-of-plane 成分を含む場合	59
3・1	流れ場及び座標系	59
3・2	計算結果及び考察	60
3・2・1	配向場	60
3・2・2	速度場	74
3・2・3	壁面配向束縛力	78
3・2・4	分極値	80
3・3	結言	82
第4章	総括	83
	謝辞	85

第 1 章 序論

1・1 本研究の概要

本研究は液晶の圧電効果（フレクソエレクトリック効果）⁽¹⁾⁽²⁾を利用した新しい圧電デバイスの開発を目的とし、その基礎研究として液晶の圧電効果に深く関係している液晶分子の挙動を Leslie-Ericksen 理論⁽³⁾⁻⁽⁵⁾を用い、平行平板間ネマティック液晶のせん断流れの数値シミュレーションを行う。そこで得られた結果より、平行平板間の液晶にせん断流動を与えた場合における液晶の分子配向がフレクソ分極に与える影響を調べる。また壁面での配向束縛強度及び上部平板のせん断速度が分極に与える影響についても明らかにした。

1・2 研究の目的および背景

これまでの液晶は液晶ディスプレイを筆頭に様々な工業製品に応用されてきた。これらの液晶製品の核となっているのが液晶の光学的、力学的、電気的性質である。液晶が低電圧、シンプルな形状のために、液晶ディスプレイの市場は過去 10 年の間に成長してきた。しかし、プラズマディスプレイや有機 EL ディスプレイが台頭してきたことによって、近年液晶ディスプレイの占める割合が低下してきている。そこで工学的観点からの液晶材料の応用例が、蝶野ら⁽⁶⁾⁽⁷⁾によって提案された。彼らは、様々なアンカリング状態のもとで液晶に電場を印加することによって誘起された液晶流動の研究を数値解析、実験の両方の視点から行っている。この誘起した流れを用いることによって、液晶の新たな応用例として液晶アクチュエータが提唱された。このアクチュエータはサイズ・形において制約がなく、マイクロロボットやマイクロマシンとして利用することができる。しかし、液晶は固体（結晶）と液体の両方の性質を兼ね備えた状態であり、他に多くの液晶の応用例が出ることが予測できる。しかし、まだそれに対する応用例はまだまだ少ない。

近年、液晶の圧電効果（フレクソエレクトリック効果）⁽¹⁾⁽²⁾が発見された。現在、固体材料における圧電効果は広い範囲で応用されており、液晶材料としての圧電効果も応用の可能性を秘めている。そこで液晶の圧電効果に関して多岐にわたる基礎研究が必要とされるが、従来の液晶の圧電効果に関する研究はその実験的な検証⁽⁸⁾⁻⁽¹¹⁾に重みが置かれてきた。流動によって分極が誘起されるような動的なネマティック液晶のフレクソエレクトリック

効果に関する研究は行われていない。

そこで本研究では、Leslie-Ericksen 理論⁽³⁾⁻⁽⁵⁾を用い、平行平板間ネマティック液晶のせん断流れ数値シミュレーションを行った。そこで得られた結果より、平行平板間の液晶にせん断流動を与えた場合における液晶の分子配向がフレクソ分極に与える影響を調べる。

この研究によって工学的に期待される結果は1)液晶の流動性を活かした圧電デバイス、2) 流動を入力とし分子配向を動的に変化させ分極値を出力するようなデバイス、3) 結晶の圧電効果を用いた圧電デバイスでは不可能であった大変形することが可能な圧電デバイス、4) 圧電材料が極少量で効果を発揮できる圧電デバイスなどの開発、などが可能になると考えられる。

1・3 液晶^{(12),(13)}

一般に物質には三つの状態（固体（結晶）、液体、気体）が存在することが広く知られている。しかし、ある種の物質にはこの物質の三態の他に、全く異なった状態を持つものが存在する。これが三態に次ぐ第四の状態、液晶状態であり、液体と固体（結晶）の中間に位置する状態である。一般に使われている「液晶」という言葉は「液晶製品」そのものを指すが、正確には液晶状態を持つ物質の「液晶状態」を指す言葉である。

ここで液晶状態の発現条件は以下の通りである。通常、液晶状態を持つ物質の分子は棒状またはそれに近い形状である。このことが液晶状態を発現させる要因となる。棒状であることからその配列には分子の重心の位置の「位置の秩序」と分子の長軸が向く方向の「方向の秩序」が存在する。図1に棒状分子の分子配列を示した。固体状態では図1(a)のように分子は規則正しく配列している。また液体状態では図1(c)のように無秩序に配列している。しかし、棒状分子においては「位置の秩序」の他に「方向の秩序」が存在するため、固体状態から液体状態に移行する過程において図1(b)のように「位置の秩序」は崩れているが、「方向の秩序」は大体整っているという状態が存在する。これが液晶状態であり、「方向の秩序」がある為に「異方性」を有し、「位置の秩序」が崩れている為に「流動性」を持っている。ゆえに液晶状態を持つ流体を異方性流体とも呼ばれる。

さらに液晶状態は物質の温度や濃度の変化によって「位置の秩序」と「方向の秩序」の度合いが変化し、サーモトロピック液晶、ライオトロピック液晶に分けられる。

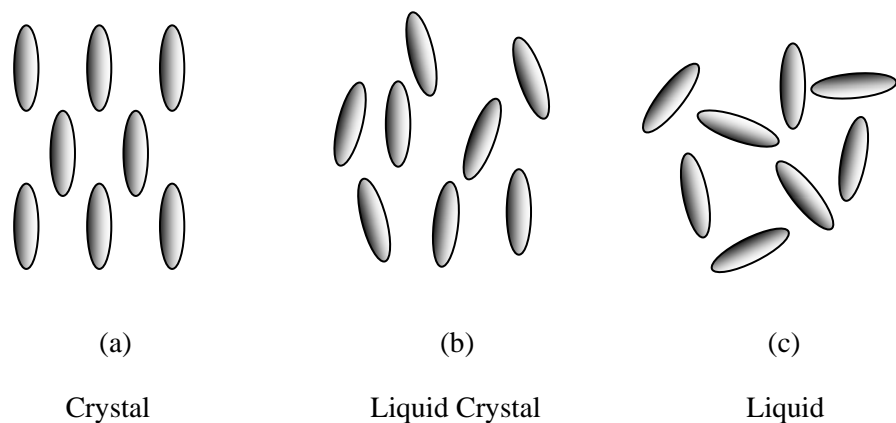


Fig.1 Molecular arrangement of sphere and columnar shape molecules

1・4 ネマティック液晶^{(12),(13)}

液晶はその構成分子の配向状態により、ネマティック液晶(nematic phase)、コレステリック液晶(cholesteric phase)、スメクティック液晶(smectic phase)の3種類の相に大別される。本研究において使用したネマティック液晶は、最も分子の対称性が高い液晶であり、分子の「方向の秩序」は一様で、「位置の秩序」は全く無く液体と同じである。また、ネマティック液晶は温度を上げることによって等方相（液体状態）に、逆に温度を下げることによって異方相（固体状態）に相転移する。このネマティック液晶は液晶ディスプレイの材料として、工業的に最も用いられている液晶相である。液晶ディスプレイは、液体と固体の側面を同時に併せ持つネマティック液晶の性質を上手く利用することによって光の透過を制御しているものである。

1・5 アライニング・タンブラリング液晶⁽¹⁴⁾⁻⁽¹⁷⁾

液晶を流体力学的な観点から分類した場合、流れ中の液晶分子の挙動に対して、アライニング液晶 (aligning liquid crystals) とタンブラリング液晶 (tumbling liquid crystals) に分類することができる。これらは、液晶分子の局所的な平均配向方向を表す単位ベクトルであるディレクタ (director) が単純せん断流中における流動方向に対して、ある角度で静止する挙動を示す液晶をアライニング液晶、ディレクタがせん断平面内で回転し続ける挙動を示す液晶をタンブラリング液晶と定義されている。これらの現象は、物質固有のものであり、どちらの挙動をとるかは液晶の物性値に依存している。この詳細は、以下の通りである。

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 Γ は、

$$\Gamma = \dot{\gamma}(\alpha_3 \cos^2 \phi - \alpha_2 \sin^2 \phi) \quad (1-1)$$

となる。式中で α_2 , α_3 は Leslie 粘性係数、 ϕ はディレクタとせん断方向の間の角度を表している。粘性トルクがゼロとなり、ディレクタが静止する角度 ϕ_L は、上式で $\Gamma=0$ とすれば、

$$\phi_L = \tan^{-1} \sqrt{\alpha_3/\alpha_2} \quad (1-2)$$

となる。 ϕ_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。上式で ϕ_L が存在する条件は、 α_2 と α_3 が同符号になる場合である。通常、 α_2 は負の値であるので α_3 も負である。アライニング液晶では両者の符号が同符号であるために、この条件を満たし、Leslie 角 ϕ_L は、存在する。しかし、タンブリング液晶では、両者が異符号となるため、粘性トルクがゼロになる角度 (Leslie 角) は存在しない。したがってディレクタは回転し続けることになる。この現象がタンブリング挙動と呼ばれている。これは、単純せん断流中の場合であり、固体壁が存在する場合は壁面配向の束縛の影響により、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上式の粘性トルク Γ と釣り合うまで増加し、そこで静止する。

1・6 表面束縛 (Surface Anchoring) ⁽¹⁸⁾⁻⁽²²⁾

液晶ディスプレイを代表とする現代の液晶製品において、その核となっているのは液晶の光学的、力学的、電気的性質である。その性質を生かす技術としてラビング処理という技術がある。これは液晶セル基板を直接、または基板上に設けた配向膜を毛足の長い布などで一方向に擦ることにより液晶への配向能力を得させることができる技術である。この液晶分子を一定の方向へ配向させることを表面束縛 (Surface Anchoring)、あるいは単に束縛 (Anchoring) ともいう。ネマティック液晶の配向方向は自由エネルギーに無関係で配向ベクトルはどこを向くかは決まらない。したがって電界や磁界などの外場が存在しない場合は、液晶分子と固体基板との界面において、固体基板面上の処理が液晶試料の配向ベクトルの配向方向を決め、一定の配向を持ったセルが実現される。それゆえ固体基板による液晶分子の配向の束縛は表示素子への応用や実験用セルの作製上きわめて重要な技術である。またそのラビング処理を施した基板表面上の液晶分子に電場などといった外力を加えたとき、その配向状態が変化しない場合の束縛を強固定配向 (Strong Anchoring) といい、配向

状態が変化する場合の束縛を弱固定配向 (Weak Anchoring) という。先程も触れたが液晶を利用した製品を開発しようとしたときとこの表面束縛という条件を考慮する過程を避けて通ることは出来ない。

1・7 フレクソエレクトリック効果^{(1),(2)}

固体物質にひずみを加えることにより電圧が発生する場合がある。これを圧電効果 (Piezoelectric Effect) と呼ぶ。しかし物質が液体や気体の場合、たとえ個々の分子が永久双極子モーメントを持っていたとしてもその自由な分子運動のため、その向きはランダムになり、巨視的な分極は発生しないものとされてきた。しかしながら液晶は流動性を持っているが、分子配向の秩序を持っていることから、分極が発生する。本研究で用いたネマティック液晶は、個々の分子は永久双極子モーメントを持ち分極しているが、分子配列の対称性から平衡状態では巨視的な分極を発生することは無い。しかし、分子の配向場にひずみを加えることにより、分子配列の対称性が崩れて巨視的な分極が発生することがある。これをフレクソエレクトリック効果 (Flexoelectric Effect) と呼ぶ (以下フレクソ効果と略す)。フレクソ効果は、固体物質における圧電効果とは明確に区別されるべきものである。すなわち、圧電効果はひずみの量により誘起されるものであるのに対して、フレクソ効果は、ひずみの空間的变化、もしくは時間的变化により発現するものである。

フレクソ効果の発生メカニズムは、以下の通りである。図 2 (a), (b)はフレクソ分極のメカニズムの概略図を表している。図中で、四角は液晶分子、その中の矢印は分極方向を表している。図 2 (a)に示すように液晶材料を平行平板間に封入し、分子配向場が平行平板に対して、同一方向で平行に配列するとき分極方向に秩序を持たず、巨視的な分極は発現しない。しかし、図 2 (b)に示すように、もし液晶材料が楔形の平板に封入されているとき、分子配向場に歪みが生じ、結果として巨視的なフレクソ分極が分極方向の対称性が崩れることによって生じる。これまでのフレクソ効果に関する研究は、液晶のフレクソ分極が発見されたあと多くのフレクソ分極における基礎研究が理論、実験の両面から行われてきた⁽⁸⁾⁻⁽¹¹⁾。流動は、分子配向場における歪みを発生させる効果を持っている。故に、流動が巨視的なフレクソ分極を誘導させることが期待される。しかし、流動によって誘起されるフレクソ分極に関する研究は、殆ど行われていない。そこで本研究では Leslie-Ericksen 理論⁽³⁾⁻⁽⁵⁾を用い、平行平板間ネマティック液晶のせん断流れの数値シミュレーションを行う。そ

ここで得られた結果より，平行平板間の液晶にせん断流動を与えた場合における液晶の分子配向がフレクソ分極に与える影響を調べる．

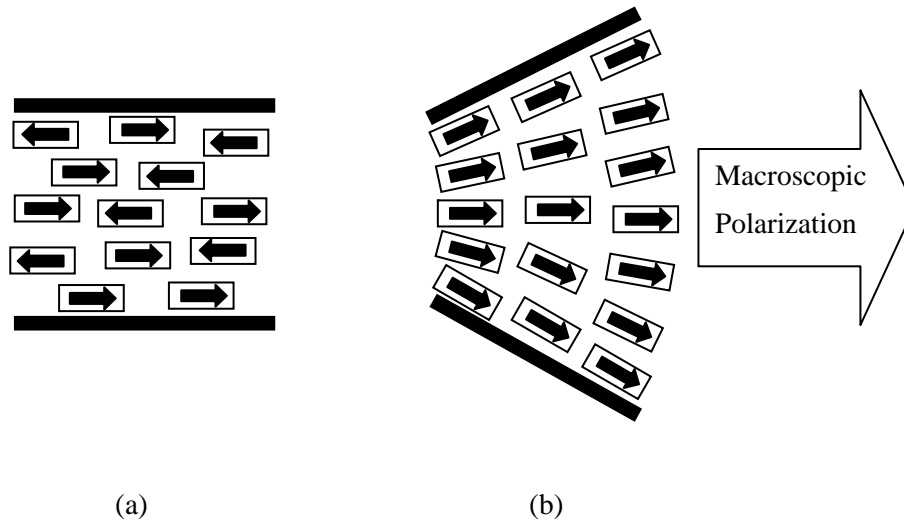


Fig.2 Molecular model of Flexoelectric Effect for wedge-type

1・8 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及び背景を述べた．第 2 章ではネマティック液晶の連続体理論の基礎式，無次元化の方法，無次元数，数値計算方法，及び計算条件を説明した後，In-plane 仮定の下での平行平板間ネマティック液晶のせん断流れの数値シミュレーションを行う．得られた結果より，平行平板間の液晶にせん断流動を与えた場合の液晶分子配向がフレクソエレクトリック分極に及ぼす影響を明らかにする．第 3 章では第 2 章で用いた In-plane 仮定を排した場合における，平行平板間の液晶にせん断流動を与えた場合の液晶分子配向がフレクソエレクトリック分極に及ぼす影響を明らかにする．最後に第 4 章で本研究の総括を行う．

参考文献

- (1) Meyer, R.B., *Piezoelectric Effects in Liquid Crystals*, *Phys. Rev. Lett.*, Vol.22(1969), pp.918-921.
- (2) de Gennes, P.G., *The Physics of Liquid Crystals*, 1974, P.135, Clarendon, Oxford.
- (3) Leslie, F.M., *Some Constitutive Equations for Liquid Crystals*, *Arch. Ration.Mech.Anal.*, Vol.28, No.4 (1968), pp.265-283.
- (4) Ericksen, J.L., *Anisotropic fluids*, *Arch. Ration. Mech. Anal.* 4, Vol. 28(1960), pp.231.
- (5) Ericksen, J.L., *Conservation Laws for Liquid Crystals*, *Trans. Soc. Rheol.*, Vol. 5(1961), pp. 23-24.
- (6) Chono, S. and Tsuji, T., *Development of Micro-Actuators Driven by Liquid Crystals (1st Report, Generation of Flow and Its Mechanism)*, *Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers, Series B*, Vol.72, No.715 (2006), pp.96-101.
- (7) Liu, C. et.al., *Development of Micro-Actuators Driven by Liquid Crystals (2nd Report, Effect of Various Parameters)*, *Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers, Series B*, Vol.72, No.721 (2006), pp.2235-2241.
- (8) Valenti, B. et al., *Flexoelectricity in the Hybrid Aligned Nematic Cell*, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, Vol.146 (1987), pp. 307-320.
- (9) Madhusudana, N. V. and Durand, G., *Linear flexo-electro-optic effect in a hybrid aligned nematic liquid crystal cell*, *J. Phys. Lett.*, Vol. 46(1985), pp.L-195-L-200.
- (10) Stelzer, J. et al., *Flexoelectric effects in liquid crystals formed by pear-shaped molecules. A computer simulation study*, *Chem. Phys. Lett.*, Vol.299 (1999), pp.9-16.
- (11) Billeter, J.L. and Pelcovits, R.A., *Molecular shape and flexoelectricity*, *Liq.Cryst.*, Vol.27, No.9(2000), pp.1151-1160.
- (12) 折原宏, 液晶の物理, (2004),4,内田老鶴圃.
- (13) 液晶便覧編集委員会,液晶便覧,(2000),60,丸善株式会社.
- (14) Pieranski, P. and Guyon, E., *Two Shear-Flow Regimes in Nematic p-n-Hexyloxybenzilidene-p'-aminobenzonitrile*, *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 32(1974), pp.924-926.
- (15) Cladis, P. E. and S. Torza, S., *Stability of Nematic Liquid Crystals in Couette Flow*, *Phys. Rev. Lett.*, Vol.35 (1975), pp.1283-1286.
- (16) Carlsson, T. and Skarp, K., *Observation of the tumbling instability in torsional shear flow of a nematic liquid crystal with $\alpha_3 > 0$* , *Liq.Cryst.*, Vol.1, No.5(1986), pp.455-471.
- (17) Carlsson, T., *Theoretical Investigation of the Shear Flow of Nematic Liquid Crystals with the Leslie Viscosity $\alpha_3 > 0$: Hydrodynamic Analogue of First Order Phase Transitions*, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, Vol.104 (1984), pp.307-334.

- (18) Warenghem, M., *Grandjean-Cano Texture under Weak Anchoring Conditions in Cholesteric Cells*, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, Vol. 220(1992), pp.39-51.
- (19) Sato, Y et al., *Relationship between Rubbing Strength and Surface Anchoring of Nematic Liquid Crystal*, *Appl. Phys.* Vol. 31(1992), pp.L579-L581.
- (20) Yokoyama, H. and van Sprang, H. A., *A novel method for determining the anchoring energy function at a nematic liquid crystal-wall interface from director distortions at high fields*, *J. Appl. Phys*, Vol. 57(1985), pp.4520-4526.
- (21) Yokoyama, H et al., *Temperature dependence of the anchoring strength at a nematic liquid crystal-evaporated SiO interface*, *J. Appl. Phys*, Vol. 61(1987), pp.4501-4518.
- (22) Yokoyama, H., *Surface Anchoring of Nematic Liquid crystals*, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, Vol.165 (1988), pp.265-316.

第2章 In-plane 成分のみの場合

2・1 基礎方程式及び座標系

2・1・1 流れ構造および座標系

図3に本研究で用いた平行平板せん断流れ構造および座標系を示す。本研究では流れ構造として一次元の平行平板間せん断流れ構造を用いた。2枚の平行平板の間に液晶を封入し、上部平板を速度 U で x 軸方向に動かすことで液晶に流動を発生させる。故に、せん断速度は U/H となる。本研究では数値計算の簡略化のために、第2章ではディレクタのIn-plane 仮定を用いている。その為、ディレクタは x, y 方向成分によって以下のように表すことができる。

$$\mathbf{n} = (n_x, n_y, 0) = (\cos \phi, \sin \phi, 0) \quad (1)$$

ここで、 ϕ はディレクタと x 軸との間の角である。またディレクタのIn-plane 仮定における速度ベクトルは、

$$\mathbf{v} = (u, 0, 0) \quad (2)$$

と表すことができる。

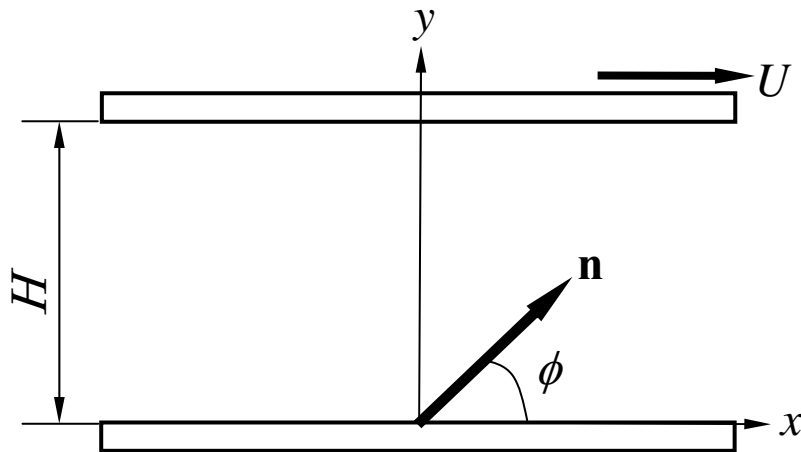


Fig.3 Flow geometry and coordinate systems.

2・1・2 基礎方程式

本研究で用いた基礎方程式を以下に示す。

非圧縮性流体の基礎式である連続の式および運動方程式は以下のように表される。

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (3)$$

$$\rho \frac{D\mathbf{v}}{Dt} = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} \quad (4)$$

式中の \mathbf{v} は速度ベクトルを, ρ は流体密度を, $D\mathbf{v}/Dt$ は実質微分, p は圧力, $\boldsymbol{\tau}$ は偏差応力テンソルで, Leslie-Ericksen 理論⁽¹⁾⁻⁽³⁾を用いて以下のように表される。

$$\boldsymbol{\tau} = \alpha_1 \mathbf{nn} \cdot \mathbf{D} \cdot \mathbf{n} + \alpha_2 \mathbf{nN} + \alpha_3 \mathbf{Nn} + \alpha_4 \mathbf{D} + \alpha_5 \mathbf{nn} \cdot \mathbf{D} + \alpha_6 \mathbf{D} \cdot \mathbf{nn} - \frac{\partial F}{\partial \nabla \mathbf{n}} \cdot (\nabla \mathbf{n})^T \quad (5)$$

式中の \mathbf{n} はディレクタと呼ばれる分子の局所平均配向を表す単位ベクトルである。以下, 本研究では分子配向とディレクタは同等として扱う。 α_i ($i=1\sim 6$) はネマティック液晶の Leslie 粘性係数, \mathbf{D} は変形速度テンソル, \mathbf{N} は流れとディレクタの相対角速度ベクトルでそれぞれ次のように表される。

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2} \left\{ (\nabla \mathbf{v})^T + \nabla \mathbf{v} \right\} \quad (6)$$

$$\mathbf{N} = \frac{D\mathbf{v}}{Dt} - \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n} \quad (7)$$

$\boldsymbol{\omega}$ は渦度テンソルで以下のように定義される。

$$\boldsymbol{\omega} = \frac{1}{2} \left\{ (\nabla \mathbf{v})^T - \nabla \mathbf{v} \right\} \quad (8)$$

また, F は Frank の自由エネルギー密度で, 以下のように表される。

$$2F = K_{11} (\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + K_{22} (\mathbf{n} \cdot \nabla \times \mathbf{n})^2 + K_{33} |\mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n}|^2 \quad (9)$$

ここで K_{ii} ($i=1,2,3$) はネマティック液晶の Frank 弾性定数を表す。

通常等方性流体では, 連続の式と運動方程式の保存則で流れ場は決定されるが, Leslie-Ericsen 理論⁽¹⁾⁻⁽³⁾ではネマティック液晶は分子場と流れ場がお互いに影響しあうため, 運動方程式のほかに以下のディレクタの角運動方程式を導入する必要がある。

$$\Gamma^v + \Gamma^e = 0 \quad (10)$$

この式において, Γ^v は流体から受ける粘性トルク, Γ^e はディレクタ場の歪みから生じる弾性トルクで以下通りである。

$$\Gamma^v = \lambda_1 \mathbf{N} + \lambda_2 \mathbf{D} \cdot \mathbf{n} \quad (11)$$

$$\Gamma^e = \frac{\partial F}{\partial \mathbf{n}} - \nabla \cdot \frac{\partial F}{\partial \nabla \mathbf{n}} \quad (12)$$

λ_1 , λ_2 は Leslie 粘性係数と以下の関係にある粘性係数であり, 流体の回転と歪みによって誘起される影響の重みを表している.

$$\lambda_1 = \alpha_3 - \alpha_2 \quad (13)$$

$$\lambda_2 = \alpha_6 - \alpha_5 \quad (14)$$

また, 式 (9), 式 (10), 式 (11) より以下の式が導かれる

$$0 = \mathbf{n} \times \left\{ \frac{\partial F}{\partial \mathbf{n}} - \nabla \cdot \left(\frac{\partial F}{\partial \nabla \mathbf{n}} \right) + (\alpha_3 - \alpha_2) \mathbf{N} + (\alpha_6 - \alpha_5) \mathbf{D} \cdot \mathbf{n} \right\} \quad (15)$$

得られた分子配向より以下の式からフレクソ分極値を算出する.

$$\mathbf{P}_f = e_{11} \mathbf{n} (\nabla \cdot \mathbf{n}) + e_{33} (\nabla \times \mathbf{n}) \times \mathbf{n} \quad (16)$$

e_{11} , e_{33} はフレクソ係数⁽⁴⁾である.

2・2 数値計算

2・2・1 無次元化と無次元数

先ほど述べた基礎方程式を図 2 の座標系で展開後, 式中の物理量をそれぞれの代表物理量で無次元化を行う. 代表長さとして平板間隔 H , 代表速度として上部平板の移動速度 U , 代表粘性係数に $(\alpha_3 - \alpha_2)$, 代表弾性係数には $\bar{K} = (K_{11} + K_{22} + K_{33})/3$ を用いた.

各代表無次元量を用いて以下のように有次元量を無次元化する.

$$v^* = \frac{v}{U}, \quad y^* = \frac{y}{H}, \quad t^* = \frac{t}{H/U}, \quad \mu^* = \frac{\mu}{(\alpha_3 - \alpha_2)}, \quad K_{ii}^* = \frac{K_{ii}}{\bar{K}},$$

全ての物理量を無次元化すると以下の二つの無次元パラメータが現れる.

$$\text{Re} = \frac{\rho L U}{\alpha_3 - \alpha_2} = \frac{\rho \bar{K}}{(\alpha_3 - \alpha_2)^2} \text{Er} \quad (17)$$

$$\text{Er} = \frac{(\alpha_3 - \alpha_2) H U}{\bar{K}} \quad (18)$$

Re はレイノズル数と呼ばれ慣性力と粘性力の比を表す流体力学の代表的な無次元数である. また Er はエリクセン数と呼ばれ粘性力と弾性力の比を表す液晶固有の無次元数である. 本研究において平行平板の間隔 H は一定, 粘性定数は物質固有の物性値より固定値なので,

エリクセン数 E_r を変化させることは上部平板の移動速度を変化させることにつながる。

2・2・2 計算方法

無次元化を行った基礎式を空間に関して 2 次精度の中心差分法，時間に関して 2 次精度の Runge-Kutta 法を用いて離散化し，非定常計算を行った。

2・2・3 境界条件及び初期条件

図 4 に本研究で用いた境界条件及び初期条件を示す。1・7 で述べたようにフレクソ分極の原因は，ディレクタ場の変形である。けれども，ディレクタが上部平板と下部平板で同じ配向状態になっているとき，液晶が局所的に分極していたとしても，巨視的なフレクソ分極は，ゼロになってしまう。言い換えれば，巨視的なフレクソ分極は上部平板面と下部平板面におけるディレクタの姿勢の差によって決定される。フレクソ分極の動的な振る舞いを得るために，本研究ではディレクタの境界条件として下部平板面 ($y=0$) で x 方向にディレクタが向いた状態である強固定配向(Strong Anchoring)

$$\mathbf{n}(0) = (1,0,0) \quad (20)$$

を，上部平板面 ($y=H$) では x 方向の弱固定配向(Weak Anchoring)を仮定した。境界平面におけるディレクタの束縛は，ラビング処理といったような表面処理によって実現することが可能である。この表面処理は，液晶ディスプレイ産業界では実際に用いられている手法である。そして，平板面におけるディレクタの束縛強度もラビング処理といった配向処理における処理条件によって変化させることが可能である。理論上で上部平板面におけるディレクタの弱固定配向 (weak anchoring) は以下の表面エネルギーの式をフランクの自由エネルギーの式 (9) に付け加えることによって考慮することができる。

$$2F^{surface} = A\{1 - (\mathbf{n}_A \cdot \mathbf{n}_W)^2\} \quad (21)$$

ここで， A はディレクタの束縛強度， \mathbf{n}_A は平板面におけるディレクタに外場が一切ない得の配向角， \mathbf{n}_W は表面における実際のディレクタの配向角を表している。上式は，表面エネルギーが $\mathbf{n}_A \parallel \mathbf{n}_W$ の場合，最小になり， $\mathbf{n}_A \perp \mathbf{n}_W$ の場合，最大になることを表している。ディレクタ \mathbf{n}_A は束縛強度 A が無限大なれば，完全に固定される。ここで束縛強度 A は基礎方程式の場合と同じように代表物性値で無次元化を行う。その時，エリクセン数 E_r と同様に，無次元化パラメータが以下のように現れる。

$$Ae = \frac{AH^2}{K} \quad (22)$$

Ae は、壁面におけるディレクタの束縛力と弾性力の比を表し、無次元化ディレクタ束縛強度である。Er の場合と同様に本研究において平行平板の間隔 H は一定、粘性定数は物質固有の物性値より固定値なので、壁面配向束縛力 Ae を変化させることは上部平板の移動速度を変化させることにつながる。また、 \mathbf{n}_A は、

$$\mathbf{n}_A = (1,0,0) \quad (23)$$

としている。そして初期条件として、空間的には平板間を y 軸方向に 100 分割 ($\Delta y = 0.01$) し全領域にわたってディレクタが x 方向を向いている状態で

$$\mathbf{n} = (1,0,0) \quad (24)$$

を仮定し、時間的には時間ステップを $\Delta t = 10^{-9}$ とし非定常計算を行った。

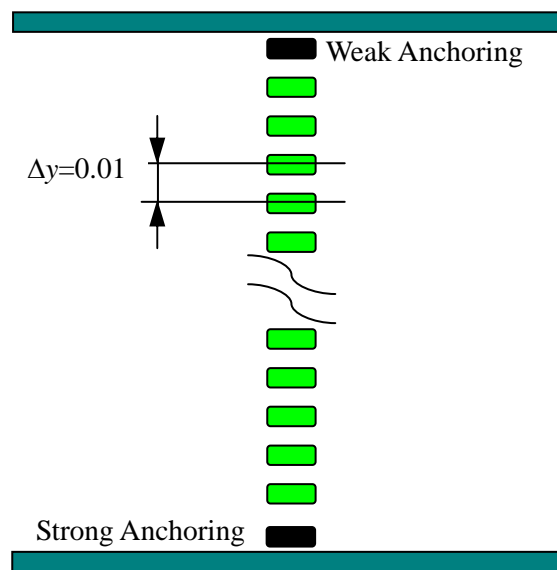


Fig.4 Boundary condition and initial condition

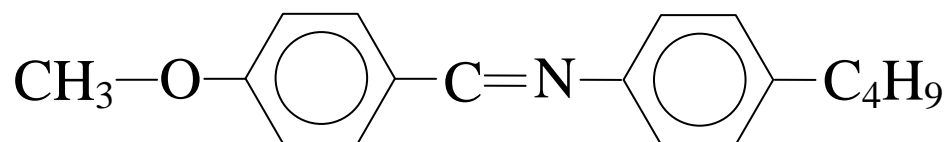
2・2・4 物性値

本研究において用いた液晶として、アライニング液晶は、MBBA (N-(p-methoxybenzylidene)-p'-butylaniline) ⁽⁵⁾⁻⁽⁷⁾, タンブリング液晶は、8CB (4-n-Octyl-4'-cyanobiphenyl) ⁽⁸⁾⁻⁽¹¹⁾を用いた。その Leslie 粘性係数と Frank の弾性定数とフレクソ係数を

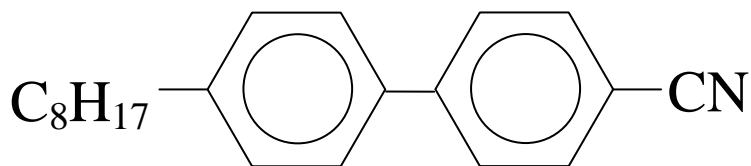
表 1 (有次元) に示す. また, MBBA⁽¹²⁾や 8CB⁽¹³⁾の化学構造を図 5 に示す. なおアライニング液晶とは, ディレクタ (director) が単純せん断流中で流れ方向に対して, ある角度で静止する挙動 (アライニング挙動) を示す液晶, タンブリング液晶とはせん断流れ中で液晶分子が回転挙動 (タンブリング挙動) を示す液晶である. アライニング, タンブリング挙動のどちらを示すかはその液晶の物性値によって決定される.

Table.1 Material constants

MBBA (298 K)		8CB (310 K)
Viscosity Constants (Pa · s)		
α_1	-0.0181	0.0382
α_2	-0.1104	-0.05875
α_3	-0.001104	0.00305
α_4	0.0826	0.052
α_5	0.0779	0.04725
α_6	-0.0336	-0.00845
Elastic Constants (N)		
K_{11}	6.0×10^{-12}	1.15×10^{-11}
K_{22}	3.8×10^{-12}	0.52×10^{-11}
K_{33}	7.5×10^{-12}	1.13×10^{-11}
Flexoelectric Constants (C/m)		
$e_{11} + e_{33}$	-5.4×10^{-11}	1.32×10^{-11}



(a) MBBA



(b) 8CB

Fig. 5 Chemical structure

2・3 計算結果及び考察

2・3・1 アライニング液晶

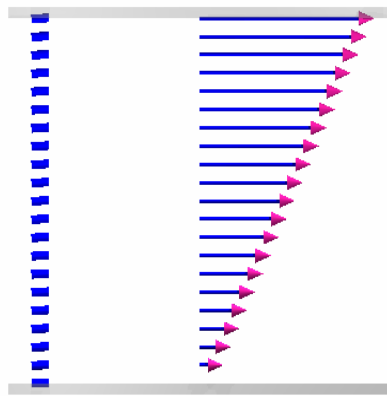
2・3・1・1 配向場

1・5 で述べたように、アライニング液晶において、せん断流のもとでは2つの Leslie の粘性係数 (α_2 , α_3) に依存してディレクタは、Leslie 角 ϕ_L ($= \tan^{-1} \sqrt{\alpha_3/\alpha_2}$) で静止する。

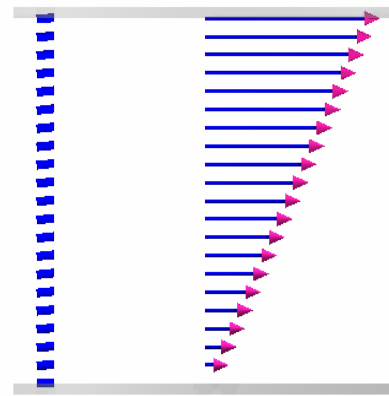
図 6-1, 2 は、 $Er=500$, $Ae=100$ におけるシミュレーション結果である。図 6 中で円柱はディレクタ、矢印は速度分布、 t は無次元時間を表している。なお、図のディレクタは平板間を 100 分割して計算した結果を 5 step ずつ抜き出して表示させたものである。シミュレーション結果より平板間全体で計算開始直後に初期配向状態 ($\phi=0^\circ$) から若干だけ傾き、 $t=40$ で定常に至っている。定常に至ったあと、ディレクタが再び回転挙動を示すことは無い。図中の矢印、速度分布は直線分布から殆ど変化することなく、定常状態に至っている。これは、速度分布に影響を与えているディレクタ分布が初期配向状態から殆ど変化することなく定常に至っているためである。図 7 は $Er=500$, $Ae=300$ におけるシミュレーション結果である。図の概要は図 4 と同様である。シミュレーション結果より図 6 ($Er=500$, $Ae=100$) の場合と同様に平板間全体で計算開始直後に初期配向状態から若干だけ傾き、 $t=28$ で定常に至っている。しかし、上部平板面に着目してみると、壁面配向束縛力 Ae の影響を受け、図 6 ($Er=500$, $Ae=100$) に比べ、上部平板面における配向角が小さくなっている。図 8 は $Er=500$, $Ae=500$ におけるシミュレーション結果である。図の概要は図 4 と同様である。シミュレーション結果より図 4, 5 の場合と同様に平板間全体で計算開始直後に初期配向状態から若干だけ傾き、 $t=25$ で定常に至っている。しかし上部平板面に着目してみると壁面配向束縛力 Ae の影響を図 5 より更に受け、上部平板面における配向角が更に小さくなっている。ここでシミュレーション結果では、壁面配向束縛力 Ae の影響が分からないので、以下で、各壁面配向束縛力 Ae におけるある時間の配向角の空間変化を示し、より詳しく説明を行う。

図 9 は $Er=500$, $Ae=100$ の場合での無次元時間 $t=5, 10, 40$ における配向角の空間変化を表している。横軸は平板間での位置、縦軸はディレクタ \mathbf{n} の x 軸からの角度 ϕ を示している。時間が経過するにつれ、ディレクタ角は下部平板面におけるディレクタ角を除き、増加し、 $t=40$ で定常状態に至っている。これは境界条件の影響で、下部平板面においてディレクタは x 軸方向の強固定配向 (Strong anchoring) 条件で $\phi=0^\circ$ と固定されているためである。一

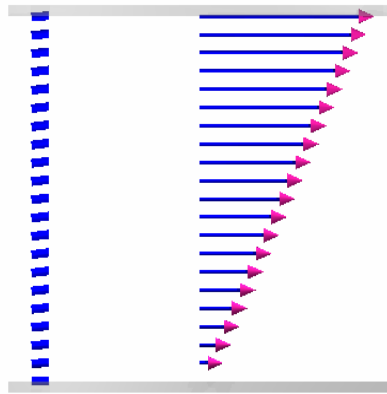
方で、上部平板におけるディレクタ角の増加は、弱固定配向 (weak anchoring) の境界条件の為に平板中央付近に比べると小さい。平板中央付近におけるディレクタが Leslie 角 ($\phi \approx 5.71^\circ$) になったとき、ディレクタの回転が止まる。図 10 は $Er=500, Ae=300$ の場合での無次元時間 $t = 4, 12, 28$ における配向角の空間変化を表している。図の概要は図 9 と同様である。図 9 ($Er=500, Ae=100$) の場合と同様に、時間が経過するにつれ、ディレクタ角は下部平板面におけるディレクタ角を除き、増加し、 $t = 28$ で定常状態に至っている。また、上部平板におけるディレクタ角の増加は、弱固定配向 (weak anchoring) の境界条件の為に平板中央付近に比べて小さいけれども、 $Er=500, Ae=100$ の結果と比較すると、その上部平板面における配向角の値は、上部平板面における壁面配向束縛力 (Ae) の増加したことによって、配向角はその束縛力の影響を受け、より小さくなっていることが分かる。図 11 は $Er=500, Ae=500$ の場合での無次元時間 $t = 5, 10, 25$ における配向角の空間変化を表している。図の概要は図 9 と同様である。図 9 ($Er=500, Ae=100$)、図 10 ($Er=500, Ae=300$) の場合と同様に、時間が経過するにつれ、ディレクタ角は下部平板面におけるディレクタ角を除き増加し、 $t=25$ で定常状態に至っている。しかし上部平板におけるディレクタ角の増加は、上部平板面における弱固定配向 (weak anchoring) の境界条件の為に平板中央付近に比べて小さい、さらに $Er=500, Ae=100, 300$ の結果と比較すると、その上部平板面における配向角の値は、上部平板面における壁面配向束縛力 (Ae) が増加したことによって、配向角はその束縛力の影響を更に受け、より小さくなっていることが分かる。以上のことをまとめると、上部平板面における最大配向角は、アライニング液晶 (MBBA) が Leslie 角までしかディレクタが変化しない。よって上下平板面におけるディレクタの姿勢の差は殆ど生じず、この差は壁面配向束縛力 (Ae) が増加するにつれて、より顕著に現れている。また上下平板面におけるディレクタの差は $Ae=100$ では $\phi \approx 2.42^\circ$ 、 $Ae=300$ では $\phi \approx 0.96^\circ$ 、 $Ae=500$ では $\phi \approx 0.59^\circ$ となっている。



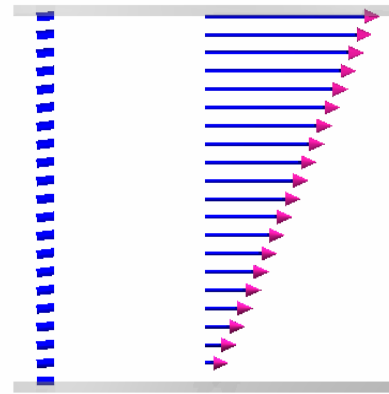
$t=5$



$t=10$

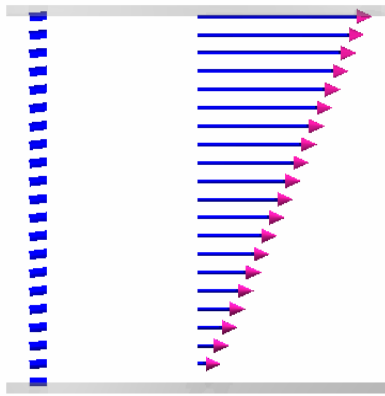


$t=15$

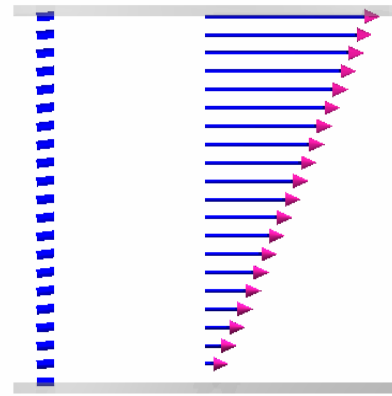


$t=20$

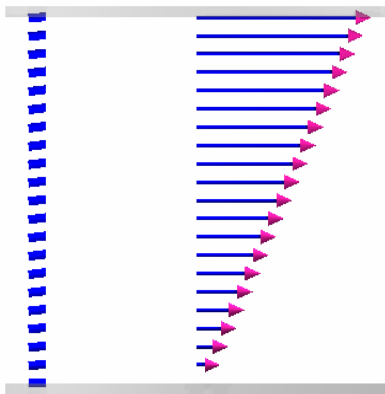
Fig. 6-1 Behavior of director and velocity distribution for $Er=500$, $Ae=100$ of MBBA.



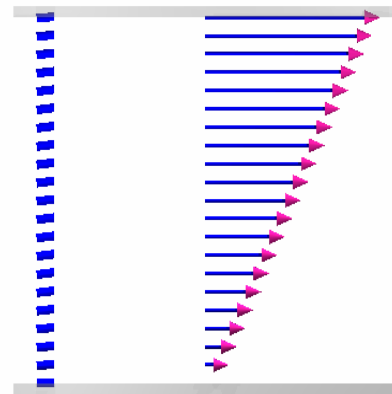
$t = 25$



$t = 30$



$t = 35$



$t = 40$

Fig. 6-2 Behavior of director and velocity distribution for $Er=500$, $Ae=100$ of MBBA.

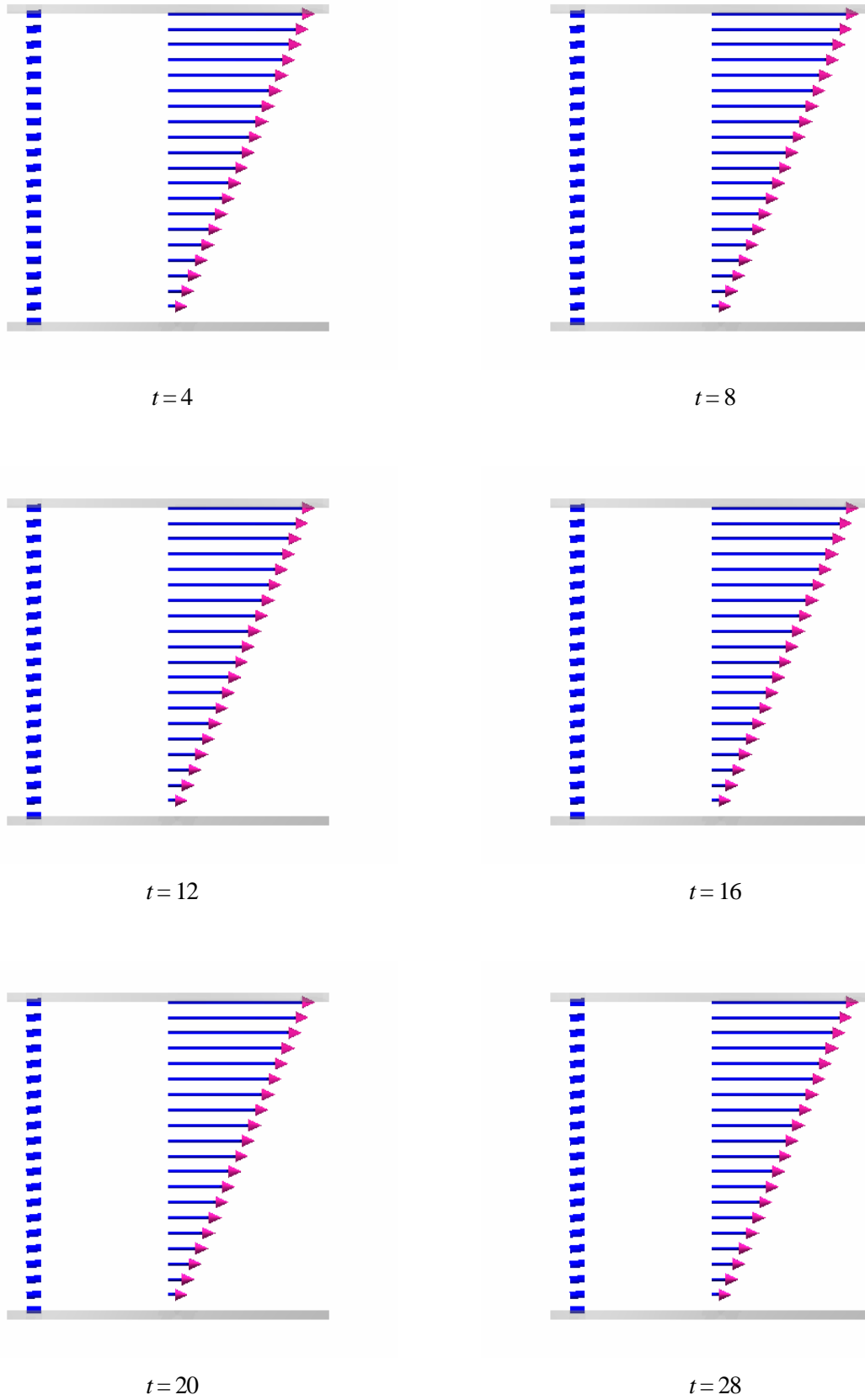


Fig. 7 Behavior of director and velocity distribution for $Er=500$, $Ae=300$ of MBBA.

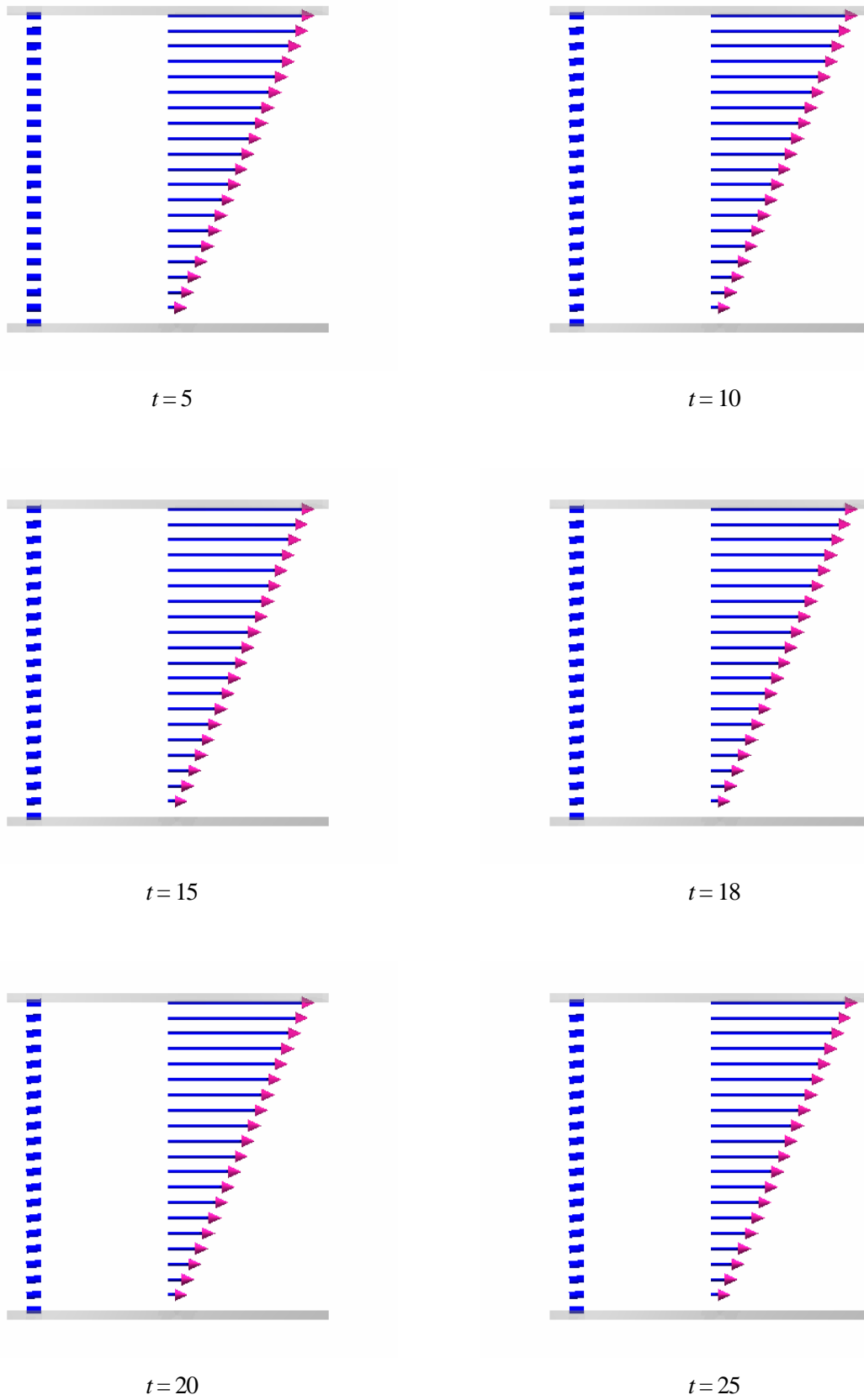


Fig.8 Behavior of director and velocity distribution for $Er=500$, $Ae=500$ of MBBA.

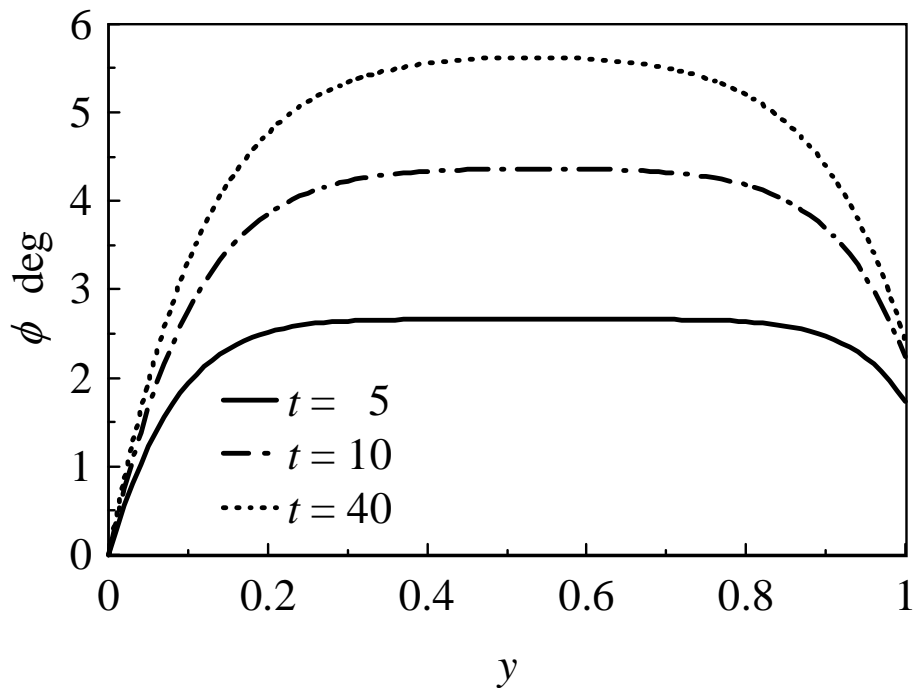


Fig. 9 Director angle profiles at Er=500, Ae=100

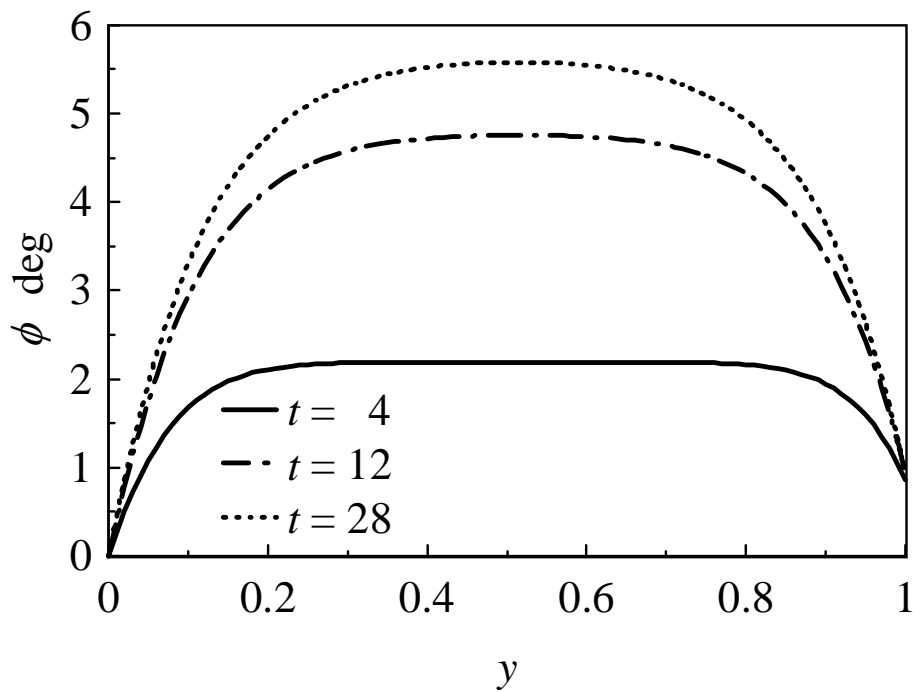


Fig. 10 Director angle profiles at Er=500, Ae=300

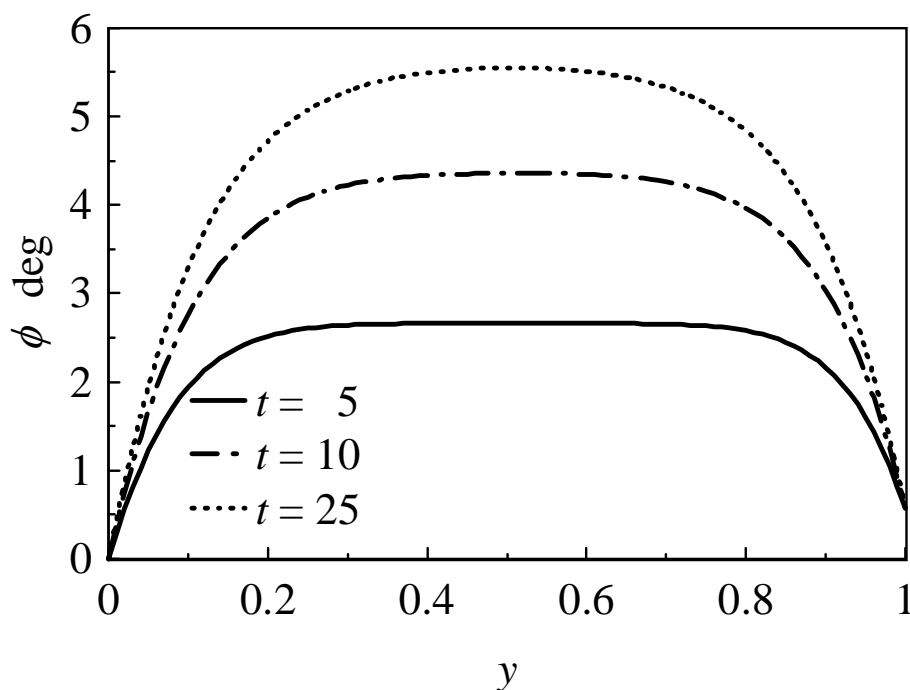


Fig. 11 Director angle profiles at $Er=500, Ae=500$

2・3・1・2 速度場

図 12 は $Er=500, Ae=100$ の場合の無次元時間 $t = 5, 10, 40$ における x 方向速度の空間変化を表している。横軸は平板間の無次元座標、縦軸はせん断方向の無次元速度を表している。図より、平板間全体で直線状の速度勾配になっている。またこの傾向は、図 6 のシミュレーション結果における右側の矢印 (速度勾配) の時間変化からも分かるように速度分布は時間が経過しても直線形状を乱すことなく、定常に至っている。これは平板間の速度分布に影響を及ぼす配向角の変化が初期配向状態から殆ど変化することなく、定常に至ってしまったために、速度分布は直線状の速度勾配から変化しなかったからである。図 13 は $Er=500, Ae=300$ の場合の無次元時間 $t = 4, 12, 28$ における x 方向速度の空間変化を表している。図の概要は図 12 と同様である。図より図 12 ($Er=500, Ae=100$) と同様に平板間全体で直線状の速度勾配になっている。またこの傾向は、図 7 のシミュレーション結果における右側の矢印 (速度勾配) の時間変化からも分かるように直線分布は時間が経過しても直線形状を乱すことはなく、定常に至っている。この結果も $Er=500, Ae=100$ の結果と同様に平板間の速度分布に影響を及ぼすディレクタの変化が初期配向状態から殆ど変化していないまま、定常に至っており、速度分布に影響を与えなかったためだと考えられる。図 14 は $Er=500, Ae=500$ の場合の無次元時間 $t = 5, 10, 25$ における x

方向速度の空間変化を表している。図の概要は図 12 と同様である。計算結果より $Er=500, Ae=100, 300$ の場合と同様に扉万感全体で直線状の速度勾配になっている。またこの結果は、図 8 のシミュレーション結果における右側の矢印（速度勾配）の時間変化からも分かるように速度分布の直線形状は、時間が経過しても形状が変化することは無く、定常に至っている。この結果も $Er=500, Ae=100, 300$ の結果と同様に平板間の速度分布に影響を及ぼすディレクタの変化が初期配向状態から殆ど変化していません。定常に至っており、速度分布に影響を与えなかったためだと考えられる。以上の結果をまとめると、アライニング液晶（MBBA）における、ディレクタの配向場において、ディレクタはレズリ一角までしか変化しないために、速度場にまで影響を及ぼさず、速度分布は直線形状のまま定常状態に至っている。この現象は、上部平板面における壁面配向束縛力（ Ae ）が増加した場合においても同様のことが言え、平板間全体で直線状の速度勾配になっていて、速度勾配の時間変化も発生していない。言い換えれば、上部平板面における壁面配向束縛力（ Ae ）の変化が速度分布に対する影響していない。

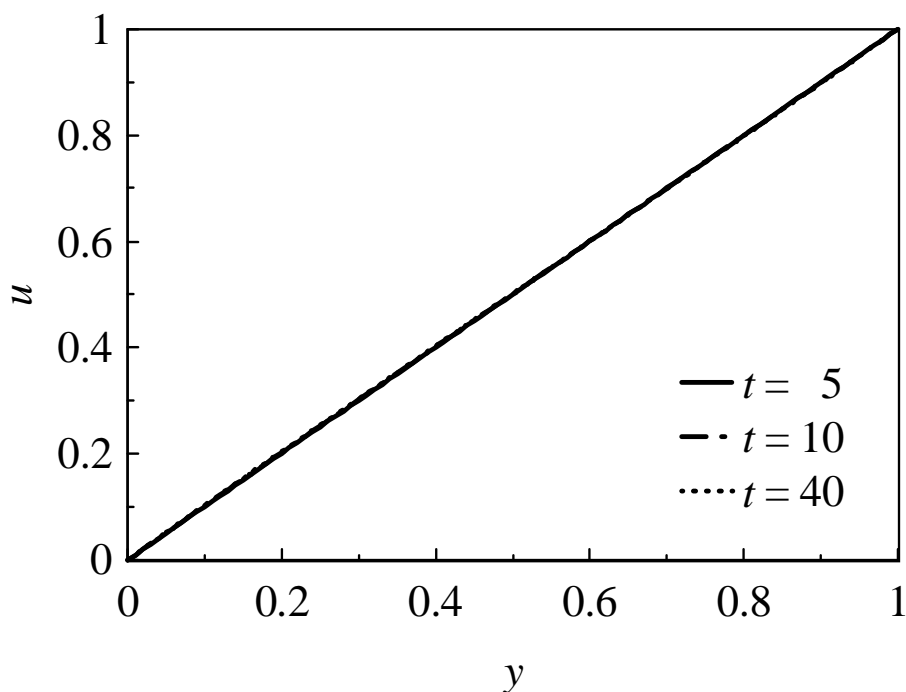


Fig. 12 Velocity change profiles for $Er=500, Ae=100$ of MBBA.

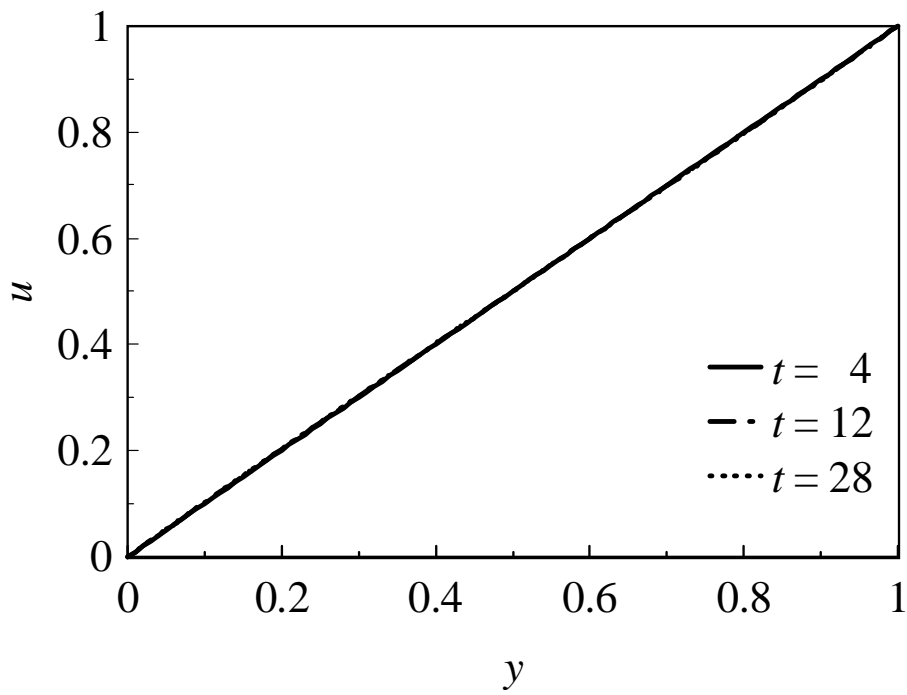


Fig. 13 Velocity change profiles for Er=500, Ae=300 of MBBA.

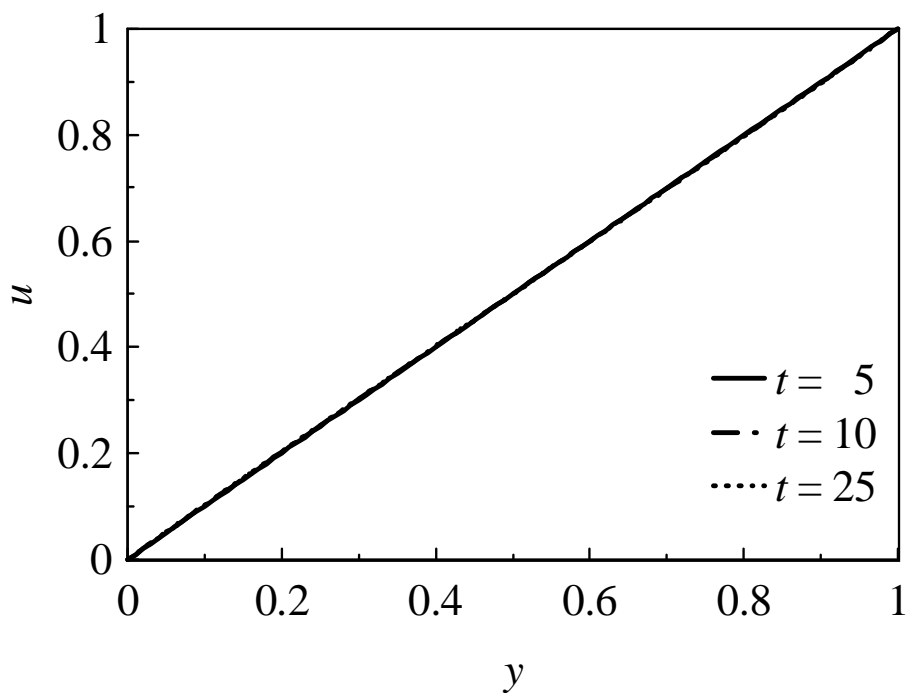


Fig. 14 Velocity change profiles for Er=500, Ae=500 of MBBA.

2・3・1・3 分極値

図 15 に $Ae=100, 300, 500$ において上部平板でのディレクタ角 ϕ の時間変化を示す。横軸は無次元時間、縦軸はディレクタの x 軸からの角度 ϕ を表している。時間の経過とともに、上部平板面におけるディレクタ角は単調に増加し、 $Ae=100$ では $t=40$ 、 $Ae=300$ では $t=28$ 、 $Ae=500$ では $t=25$ で漸近的に定常に至る。また、 Ae が増加するにつれて、ディレクタ角の変化は緩やかになっている。上部平板におけるディレクタは、表面アンカリング効果、せん断流効果、長距離弾性効果の相互作用によって決定される。 Ae が限りなくゼロに近づいた場合、上部平板面におけるディレクタの配向束縛する力は無くなり、表面アンカリング効果は消滅する。その結果、バルク領域のディレクタから上部平板面におけるディレクタの配向状態は平坦になる。一方、 Ae が無限大になった場合、上部平板面におけるディレクタの配向束縛が強くなり、ディレクタは回転ができなくなる。その結果、バルク領域のディレクタから上部平板面におけるディレクタまでのディレクタの変化は、下部平板付近のディレクタの配向状態のようになり、ディレクタの空間変化は平板中央に関して左右対称なる。ここで平板間における巨視的なフレクソ分極は、2・3・1 の式 (16) のフレクソ分極ベクトルの y 方向成分を平板間方向に積分することによって導くことができ、以下の式のように表現することができる。

$$\langle P_y \rangle = \int_0^1 P_y(y) dy = \frac{1}{2} (n_y^2(1) - n_y^2(0)) = \frac{1}{2} n_y^2(1). \quad (25)$$

上式より、フレクソ分極はディレクタ場の変化で発生するというメカニズムであるということが出来る。また上下平板面におけるディレクタの姿勢が同じとき、フレクソ分極は、ディレクタが局所的に分極していたとしても、ゼロになる。言い換えれば、フレクソ分極は上下平板面のディレクタの姿勢の差によって決定される。本研究では、下部平板面におけるディレクタは固定されているので、フレクソ分極は上部平板面における配向状態によって決定される。

図 16 は $Er=500, Ae=100, 300, 500$ におけるフレクソ分極の時間変化を表している。横軸は無次元時間、縦軸はフレクソ分極ベクトルの y 方向成分の平板間積分値を表している。フレクソ分極値は時間の経過とともに増加し、漸近的に定常に至る。式 (25) より、フレクソ分極値はバルク領域におけるディレクタの配向状態には全く無関係であることが明らかである。本研究において、下部平板面におけるディレクタは固定されているので、フレクソ分極は上部平板面におけるディレクタの配向状態に依存している。そのために、 Ae が大きい場合、図 15 より上部平板面におけるディレクタの配向状態に変化が生じないために、上下平板面におけるディレクタの配向角度の差（姿勢の差）がほとんど生じな

い. その結果, フレクソ分極値は低くなっている. 図 17 にフレクソ分極値に対するエリクセン数 Er の効果を示している. 低エリクセン数 Er (≤ 1000) 領域ではエリクセン数 Er が増加するにつれて, フレクソ分極は著しく増加している. 一方で高エリクセン数 Er (≥ 1000) 領域ではフレクソ分極の増加は, 緩やかになっている. これはアライニング液晶において, 高エリクセン数 Er になると上部平板面におけるディレクタの配向角度 ϕ が Leslie 角に近まり, 上下平板面におけるディレクタの配向角度の差 (姿勢の差) の変化がほとんど無くなったためであると考えられる. さらにアライニング液晶において, 上部平板面におけるディレクタ角は, 最大でも Leslie 角までにしかならず, 最大フレクソ分極値は以下のように概算することができる.

$$\langle P_y \rangle \Big|_{Er \rightarrow \infty} = \frac{1}{2} \sin^2 \phi_L = 6.42 \times 10^{-3}.$$

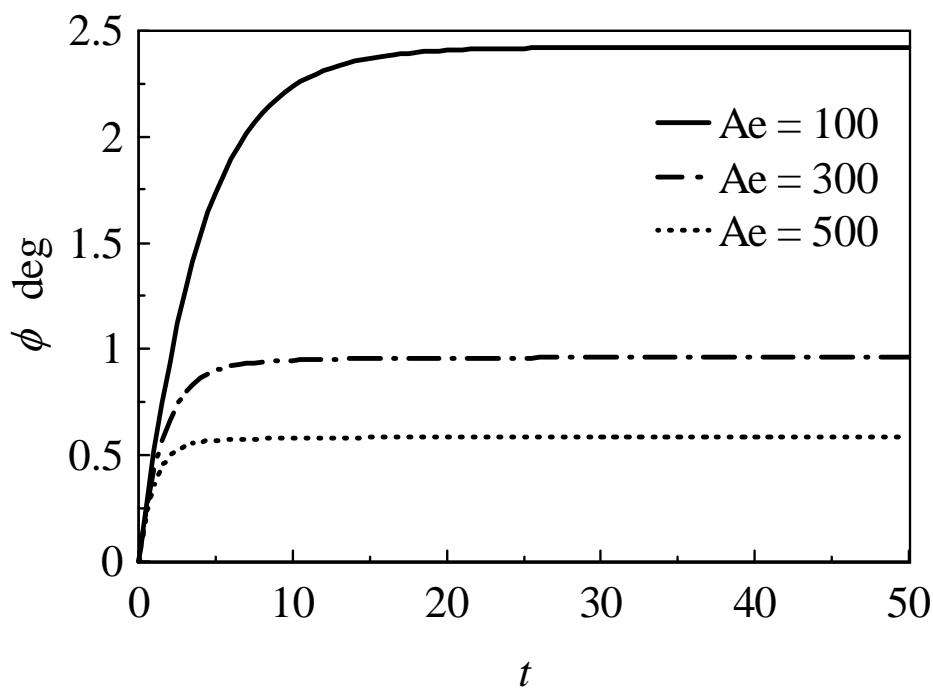


Fig. 15 Transient behaviors of director angle ϕ at upper plate for $Er=500$ of MBBA.

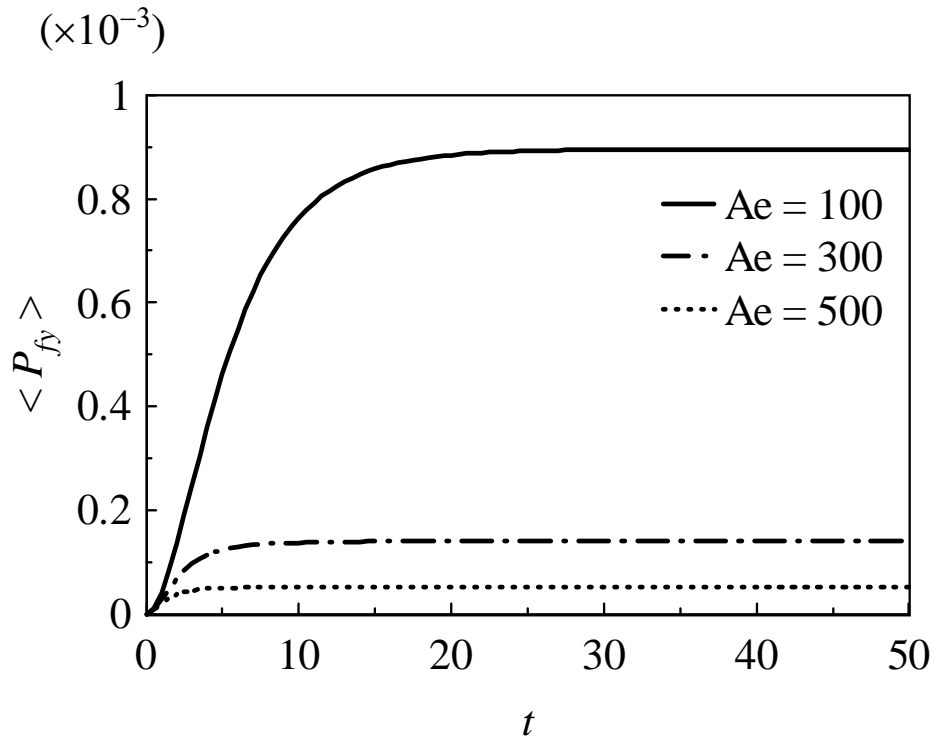


Fig. 16 Transition of flexoelectric polarization along y-direction for Er=500 of MBBA.

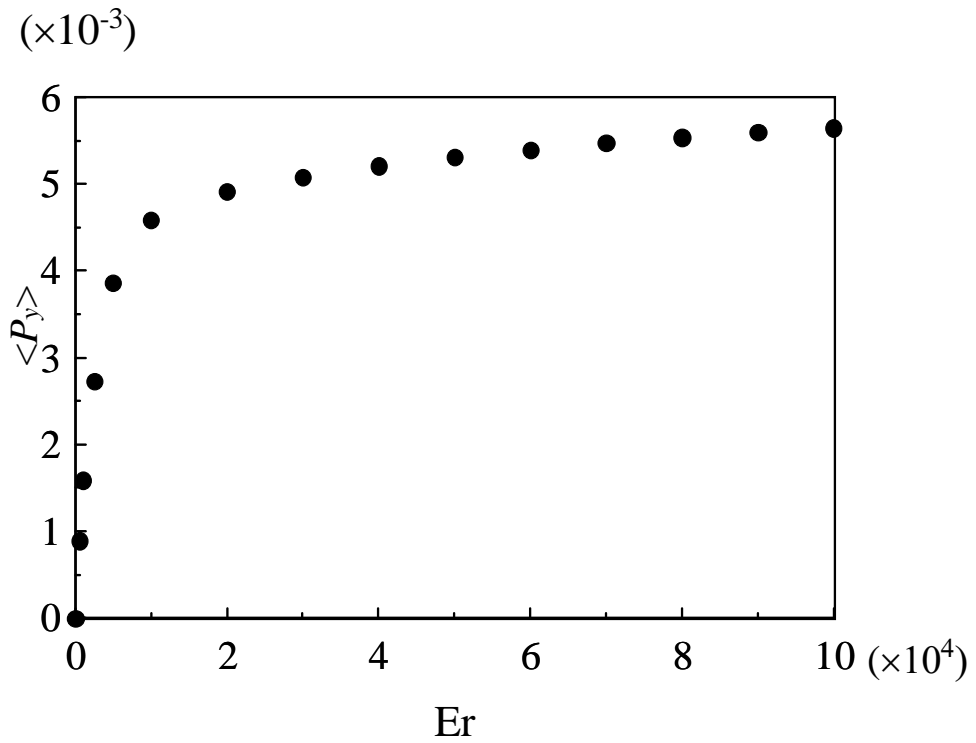


Fig. 17 The effect of Er on the flexoelectric polarization for Ae=100 of MBBA.

2・3・2 タンブリング液晶

2・3・2・1 配向場

タンブリング液晶において、Leslie 粘性係数のひとつである α_3 が α_2 の符号と異なる (α_2 が負で、 α_3 が正) ため、粘性トルクがゼロとなるような Leslie 角は存在しない。よってディレクタは回転しつづける。しかし、本研究では固体壁が存在するために壁面配向の束縛の為に回転し続けることはなく、ディレクタの回転による空間ひずみ及び弾性トルクが釣り合うまで回転し、定常状態に至る。

図 18 は $Er=25, Ae=100$ におけるシミュレーション結果である。図 18 中で円柱はディレクタ、矢印は速度分布、 t は無次元時間を表している。なお、図のディレクタは平板間を 100 分割して計算した結果を 5 step ずつ抜き出して表示させたものである。壁面配向束縛力の影響を受けない、平板中央付近でディレクタが傾く。時間が経過すると上部平板付近におけるディレクタが若干傾く。これは、上部平板面においてディレクタは弱固定配向 (Weak anchoring) 条件としているために、表面アンカリング効果及び長距離弾性効果の影響がせん断流効果の影響に対して強く、ディレクタは殆ど回転しない時間の経過とともにせん断流効果が増加し、ディレクタが若干回転するに至ったと考えられる。しかし下部平板面におけるディレクタは、強固定配向 (Strong anchoring) 条件を設けているために時間が経過しても回転することはない。図中の矢印、速度分布は直線分布から殆ど変化することなく、定常状態に至っている。これは、速度分布に影響を与えているディレクタ分布が初期配向状態から殆ど変化することなく定常に至っているためである。

図 19-1, 2 は $Er=50, Ae=100$ におけるシミュレーション結果である。表面アンカリング力の影響を受けない、平板中央付近でディレクタが回転し、約半回転したところで定常に至っている。上部平板面におけるディレクタは弱固定配向 (Weak anchoring) の影響で、平板中央と比べると、回転に至るまでの時間はかかり、定常に至る角度も小さい。しかし、 $Er=25$ の場合と比較するとせん断流効果が増加するため、ディレクタの定常角は大きくなっている。下部平板面におけるディレクタは、 $Er=25$ における計算結果と同様に強固定配向 (Strong anchoring) 条件を設けているために時間が経過しても回転することはない。図中の矢印、速度分布は $Er=25$ の場合と比較して直線分布から若干変化し、直線分布に波状分布が重なった形になっている。これは、速度分布に影響を与えているディレクタ分布が初期配向状態から若干変化したためである。

図 20 は $Er=100, Ae=100$ におけるシミュレーション結果である。表面アンカリング力の影響を受けない、平板中央ではディレクタが回転し、約 320° 回転したところで定常に至っている。上部平板面におけるディレクタは弱固定配向 (Weak anchoring) の影響で、平板中央と比較すると回転に至るまでの時

間はかかり、定常に至る角度も小さい。しかし、 $Er=25, 50$ の場合と比較するとせん断流効果が増加するため、ディレクタの定常角は大きくなっている。下部平板面におけるディレクタは $Er=25, 50$ における計算結果と同様に強固定配向 (Strong anchoring) 条件を設けているために時間が経過しても回転しない。図中の矢印、速度分布は $Er=25, 50$ の場合と比較して、計算を開始して下部平板付近において直線分布から若干変化し、直線分布に波状分布が重なった形になっている。時間が経過するにつれて平板間全体における速度分布が直線分布に波状分布が重なった形になっている。これは、速度分布に影響を与えているディレクタ分布の変化と速度分布が一致している。

図 21-1~3 は $Er=125, Ae=100$ におけるシミュレーション結果である。表面アンカリング力の影響を受けない、平板中央ではディレクタが回転し、約一回転したところで定常に至っている。上部平板面におけるディレクタは弱固定配向 (Weak anchoring) の影響で、平板中央と比較すると回転に至るまでの時間はかかっているが、定常に至ったときの上部平板面における配向角度は平板中央と比べ、大きくなっている。下部平板面におけるディレクタは $Er=25, 50$ における計算結果と同様に強固定配向 (Strong anchoring) 条件を設けているために時間が経過しても回転しない。図中の矢印、速度分布は $Er=25, 50$ の場合と比較して、計算を開始して下部平板付近において直線分布から若干変化し、直線分布に波状分布が重なった形になっている。時間が経過するにつれて平板間全体における速度分布が直線分布に波状分布が重なった形になっている。これは、速度分布に影響を与えているディレクタ分布の変化と速度分布が一致している。

図 22-1~4 は $Er=150, Ae=100$ におけるシミュレーション結果である。表面アンカリング力の影響を受けない、平板中央ではディレクタが回転し、約一回転したところで定常に至っている。上部平板面におけるディレクタは弱固定配向 (Weak anchoring) の影響で、平板中央と比較すると回転に至るまでの時間はかかっているが、定常に至ったときの上部平板面における配向角度は平板中央と比べ、大きくなっている。下部平板面におけるディレクタは $Er=25, 50, 100, 125$ における計算結果と同様に強固定配向 (Strong anchoring) 条件を設けているために時間が経過しても回転しない。図中の矢印、速度分布は $Er=25, 50$ の場合と比較して、計算を開始して下部平板付近において直線分布から若干変化し、直線分布に波状分布が重なった形になっている。時間が経過するにつれて $Er=100, 125$ の場合と同様に平板間全体における速度分布が直線分布に波状分布が重なった形になっている。これは、速度分布に影響を与えているディレクタ分布の変化と速度分布が一致している。

図 23 は $Er=25, Ae=100$ の場合の $t=1, 5, 20$ におけるディレクタの空間分布である。ディレクタ角は、下部平板面におけるディレクタ角を除いて、時間の経過とともに減少し、最終的に平板間中央付近で $\phi \approx -10^\circ$ 付近にまで達する。そして $t=20$ のときに定常に至っている。定常状態に至ったときの上下平板面の配向角の差は -0.76° となっている。

図 24 は $Er=50, Ae=100$ の場合の $t=5, 10, 40$ におけるディレクタの空間分布である。ディレクタ角は、 $Er=25$ らの場合と同様に下部平板面におけるディレクタ角を除いて、時間の経過とともに減少し、最終的に平板間中央付近で $\phi \approx -150^\circ$ 付近まで達する。そして $t=40$ の時に定常に至っている。定常に至ったときの配向角の差は -18.69° となっている。

図 25 は $Er=100, Ae=100$ の場合の $t=5, 15, 80$ におけるディレクタの空間分布である。ディレクタ角は、 $Er=25$ らの場合と同様に下部平板面におけるディレクタ角を除いて、時間の経過とともに減少し、最終的に平板中央から上部平板の方向へずれた位置で、 $\phi \approx -365^\circ$ 付近まで達する。 $t=80$ の時に定常に至っている。定常状態に至ったときの上部平板面でのディレクタ角 ϕ は与えられたアンカリング角から大きくずれ、上下平板面の配向角の差は -365° となっている。

図 26 は $Er=125, Ae=100$ の場合の $t=10, 35, 80$ におけるディレクタの空間分布である。ディレクタ角は、 $Er=25$ らの場合と同様に下部平板面におけるディレクタ角を除いて、時間の経過とともに減少し、最終的に上部平板面付近で、 $\phi \approx -360^\circ$ 付近まで達する。そして $t=80$ の時に定常に至っている。定常状態に至ったときの上部平板面でのディレクタ角 ϕ は $Er=100$ の場合より、与えられたアンカリング角からより大きくずれ、上下平板面の配向角の差は -366° 、つまり上部平板面におけるディレクタは与えられたアンカリング角から 1 回転したことになる。

図 27 は $Er=150, Ae=100$ の場合の $t=10, 50, 150$ におけるディレクタの空間分布である。ディレクタ角は、 $Er=25$ らの場合と同様に下部平板面におけるディレクタ角を除いて、時間の経過とともに減少し、最終的に上部平板面付近で、 $\phi \approx -550^\circ$ 付近まで達する。そして $t=150$ の時に定常に至っている。定常状態に至ったときの上部平板面でのディレクタ角 ϕ は $Er=125$ の場合より、与えられたアンカリング角からより大きくずれ、定常状態に至ったときの上下平板面の配向角の差は -548° となっている。つまり、上部平板面におけるディレクタは与えられたアンカリング角から 1 回転半したことになる。

以上のことから低エリクセン数 ($Er=25$) の場合ではせん断流効果が低いために、下部平板面を除く平板間全体でディレクタは殆ど変化をしていない。同様に速度分布においても速度分布に強く影響するディレクタの変化が殆どないために、速度分布は直線状のままである。しかし高エリクセン数にな

るにつれてせん断流効果が増加し，下部平板面を除く平板間全体で，ディレクタは回転挙動を示す．配向角の空間変化においては，低エリクセン数の場合では，上部平板面においてせん断流効果が表面アンカリング効果に比べて小さいために配向角は平板中央付近で最大になっている．しかし高エリクセン数になるにつれてせん断流効果が増大し，上部平板面における表面アンカリング効果に比べて大きくなり，配向角が平板中央付近で最大であったものが，上部平板付近で最大になっている．速度分布においては，速度分布に強く影響しているディレクタが変化をしているために，速度分布は直線分布に波状分布を重ね合わせた形状になっている．

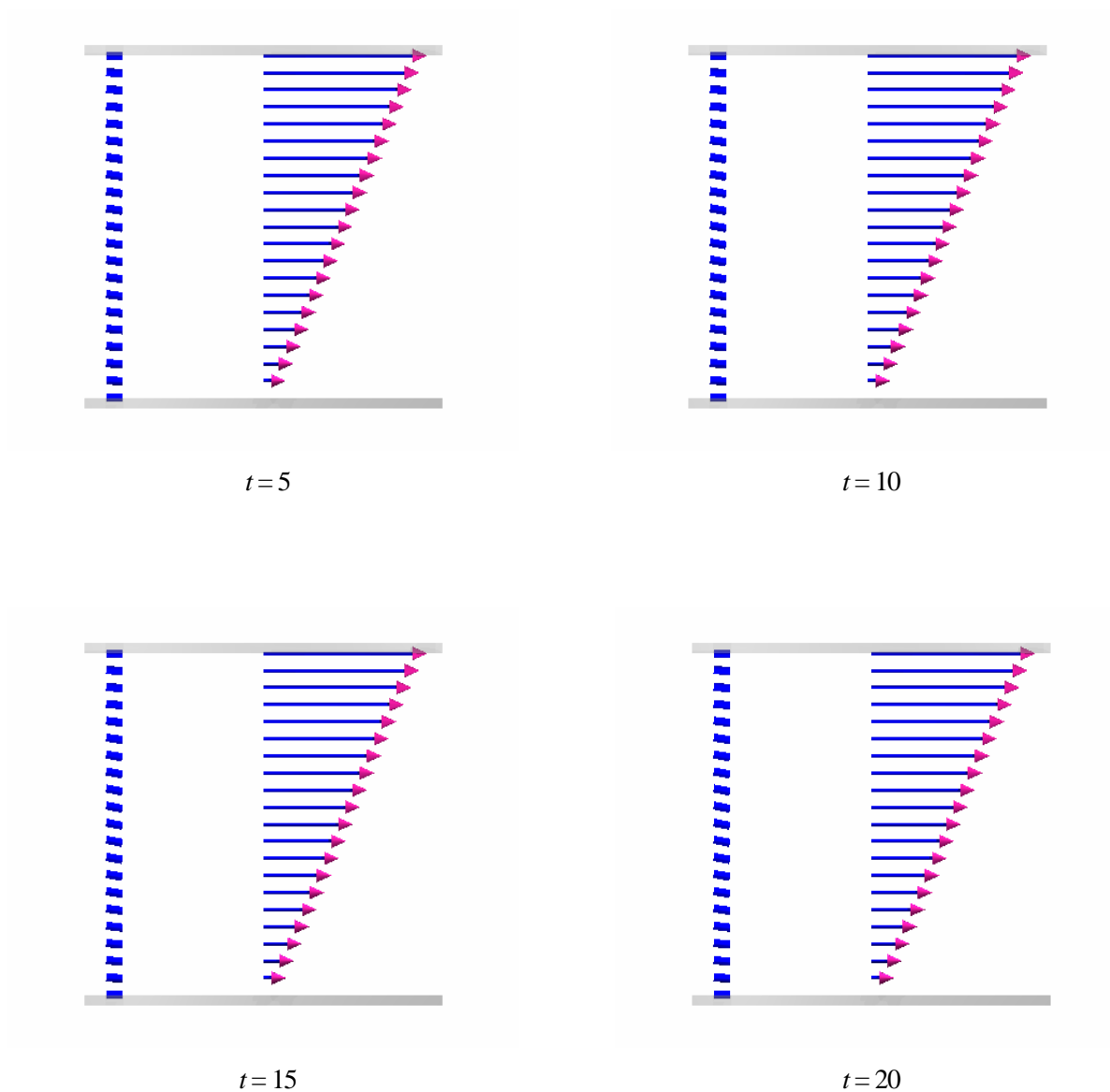


Fig.18 Behavior of director and velocity distribution for $Er=25$, $Ae=100$ of 8CB.

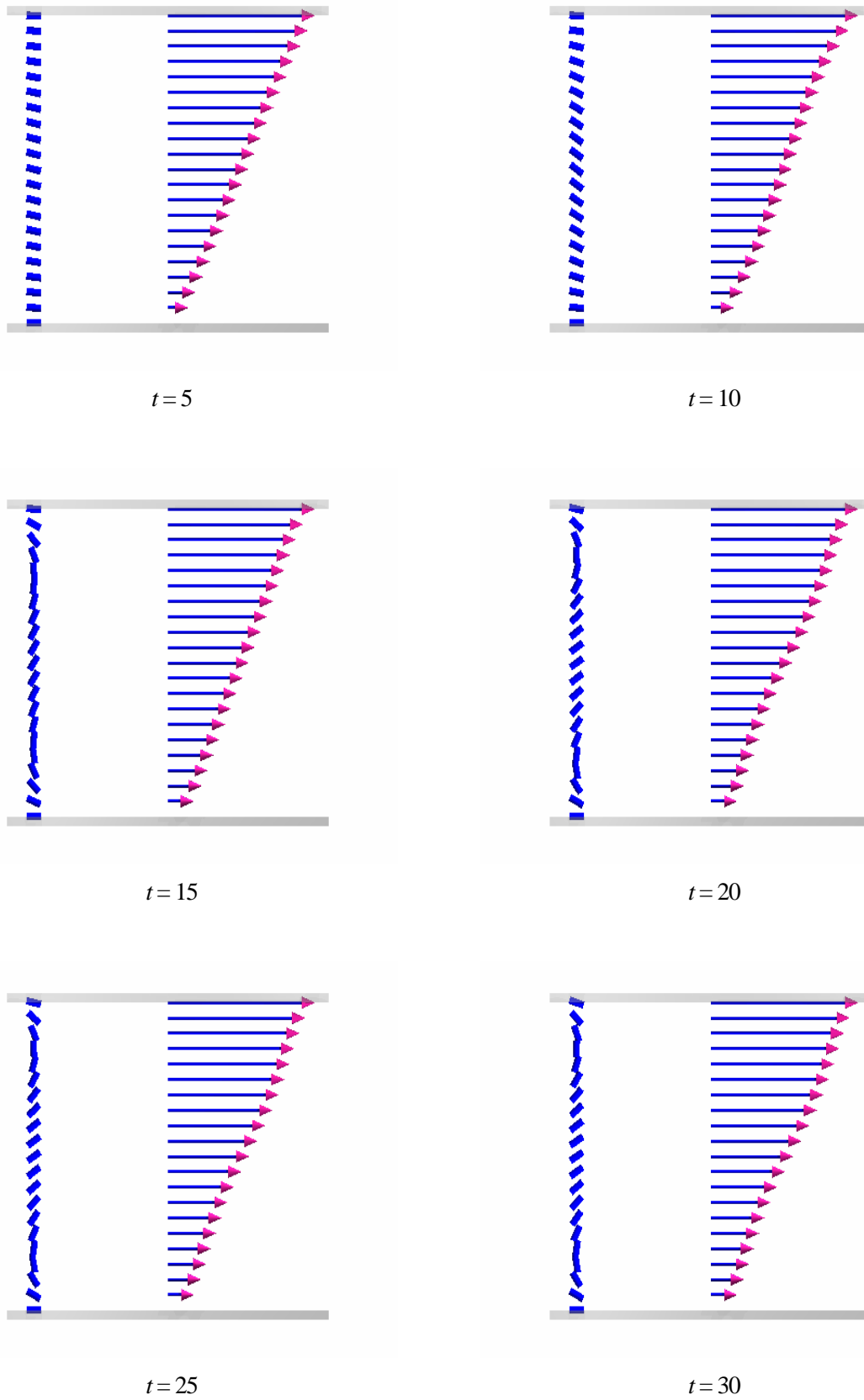
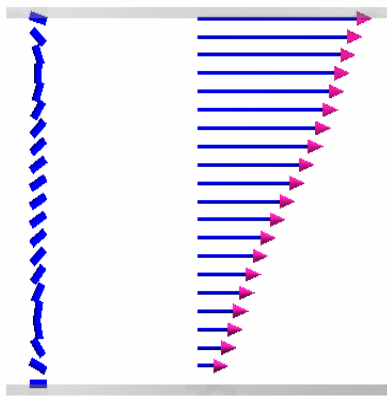
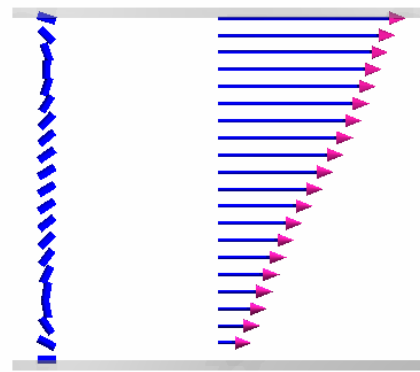


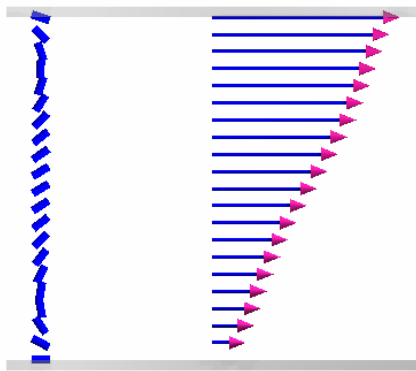
Fig.19-1 Behavior of director and velocity distribution for $Er=50$, $Ae=100$ of 8CB.



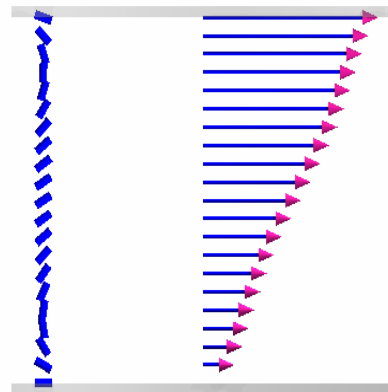
$t=33$



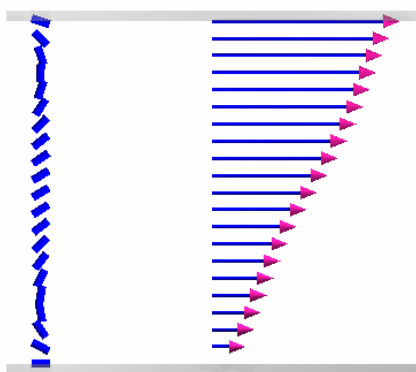
$t=35$



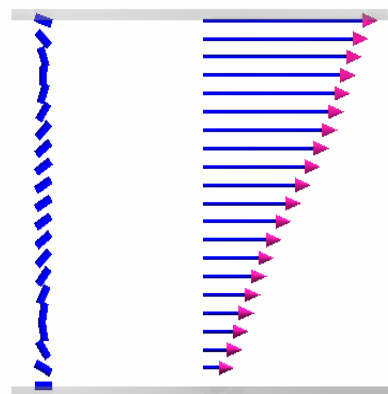
$t=40$



$t=43$



$t=45$



$t=50$

Fig.19-2 Behavior of director and velocity distribution for $Er=50$, $Ae=100$ of 8CB.

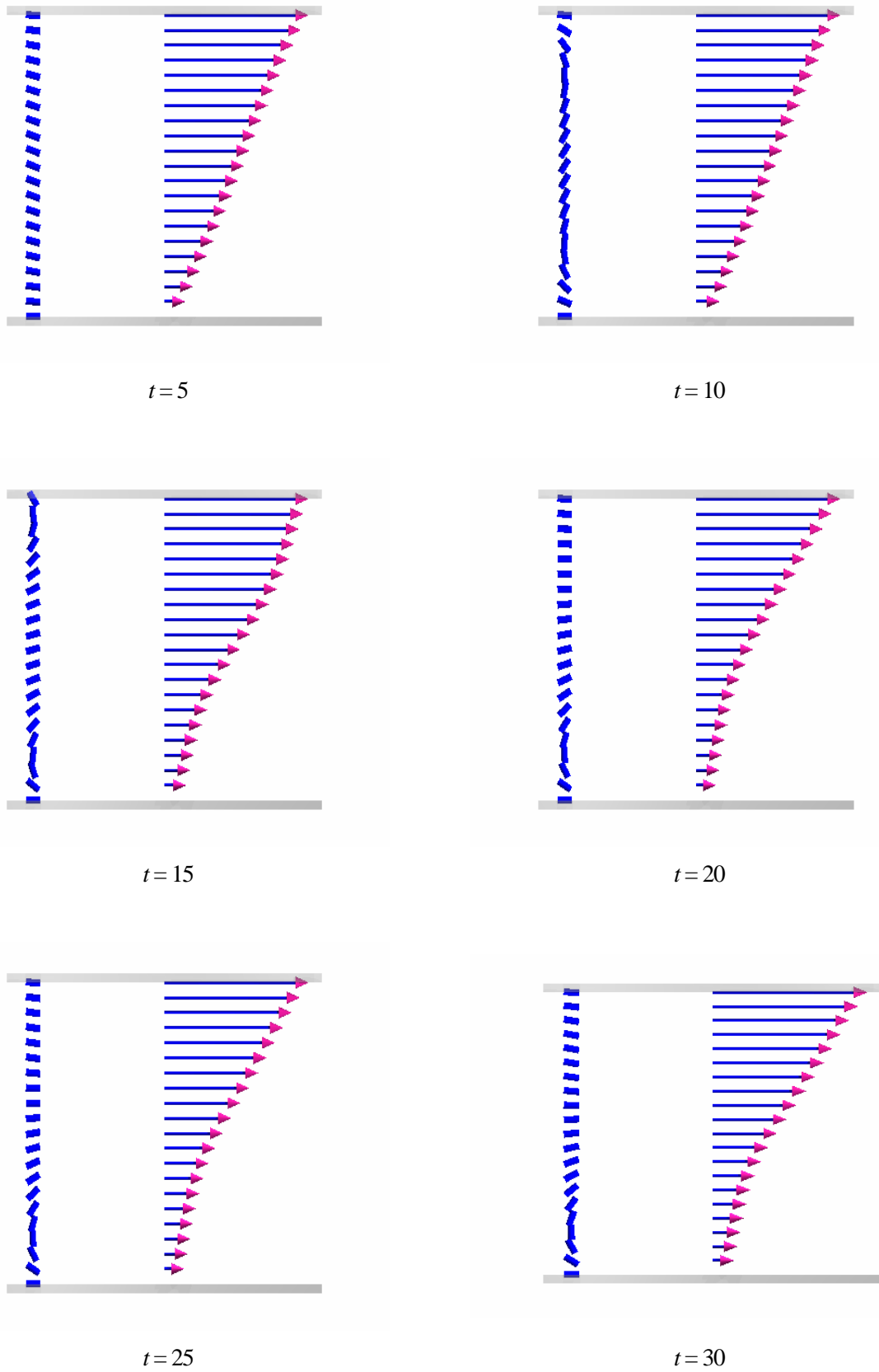


Fig.20-1 Behavior of director and velocity distribution for $Er=100$, $Ae=100$ of 8CB.

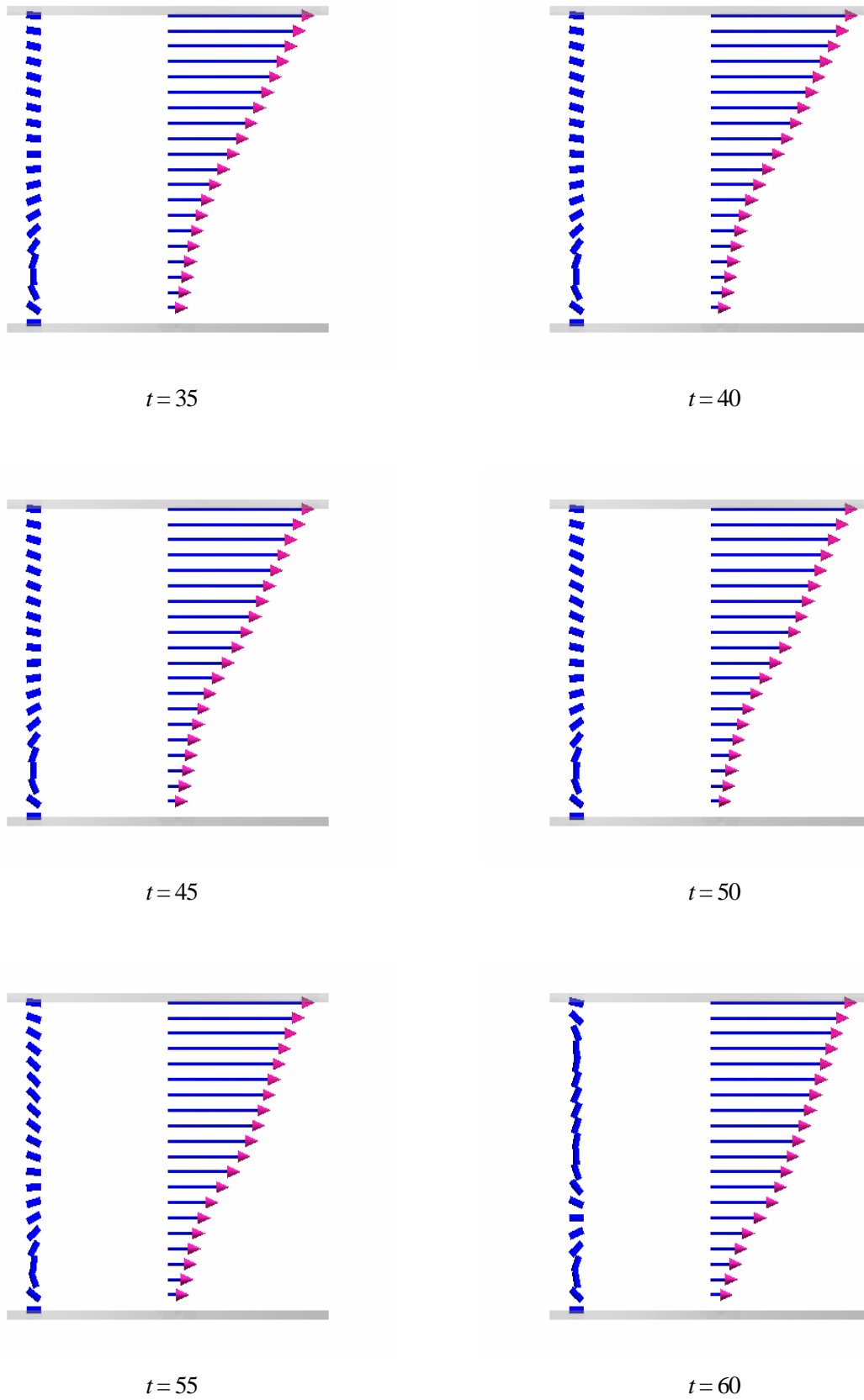


Fig.20-2 Behavior of director and velocity distribution for $Er=100$, $Ae=100$ of 8CB.

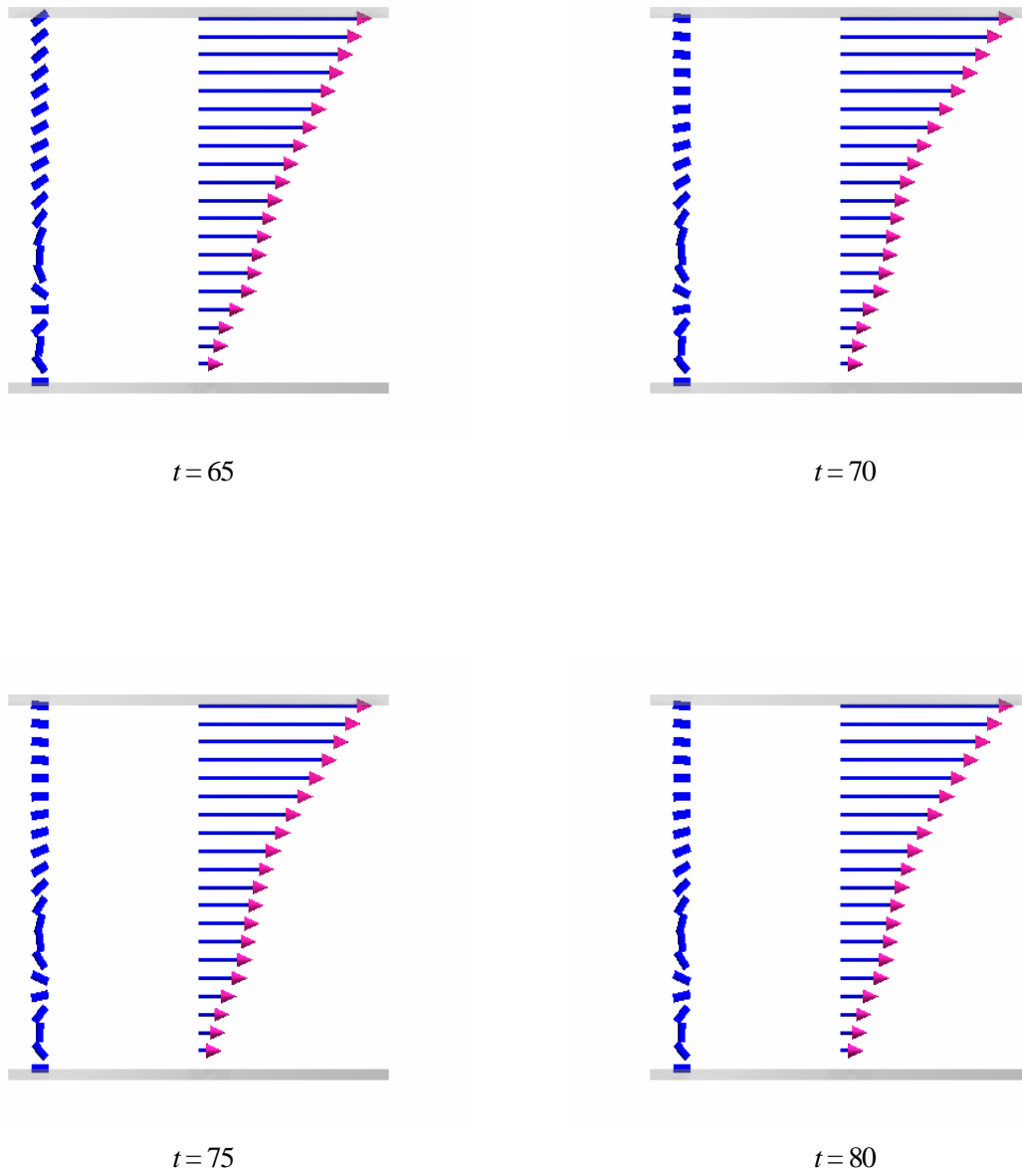


Fig.20-3 Behavior of director and velocity distribution for $Er=100$, $Ae=100$ of 8CB.

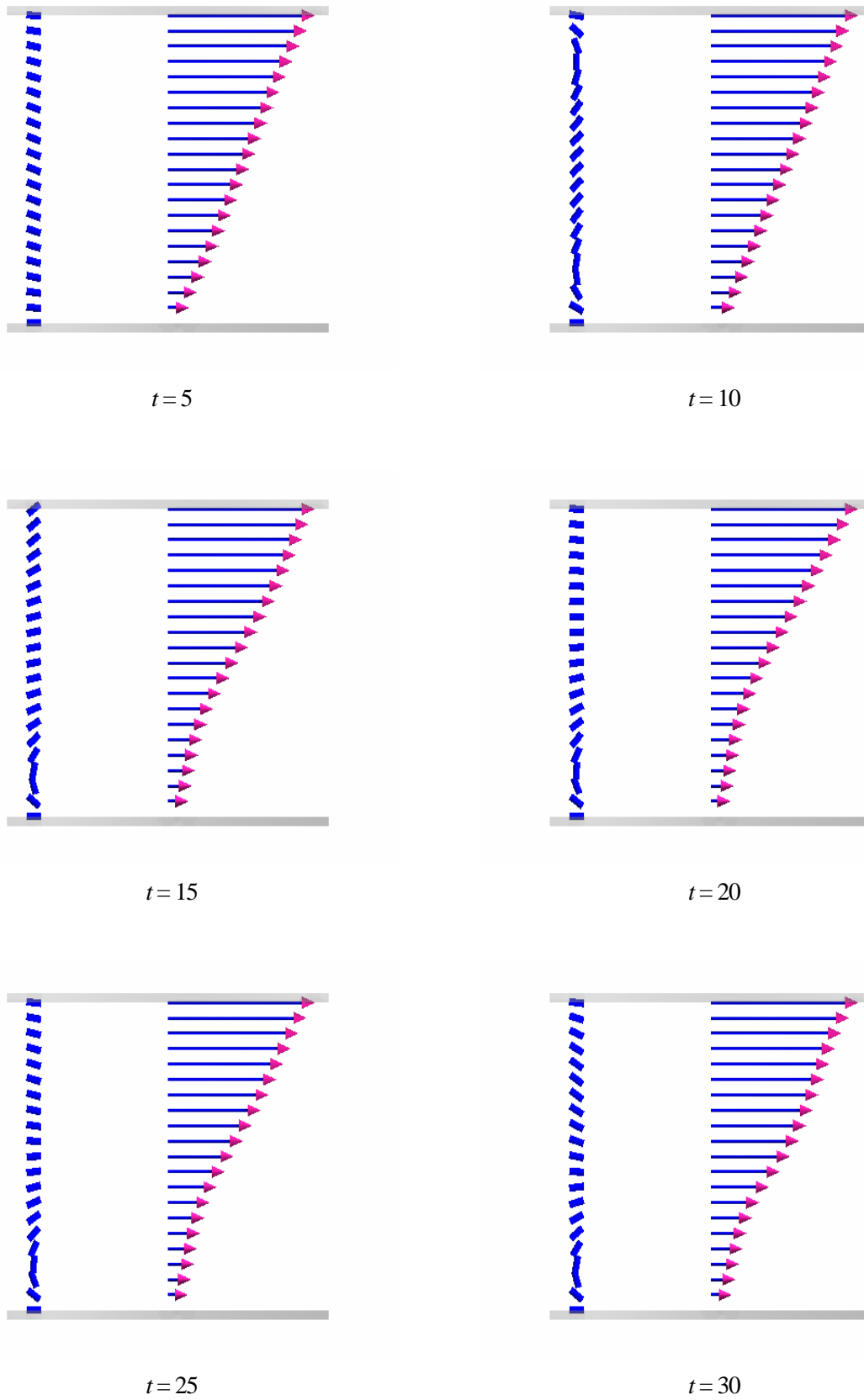
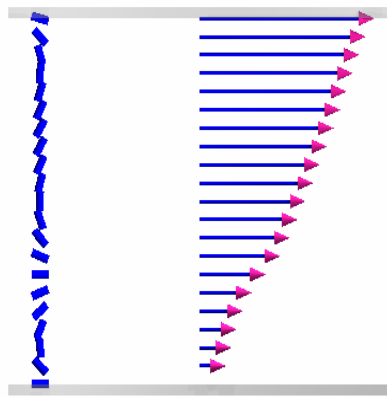
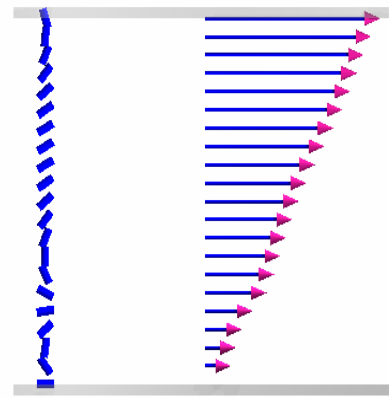


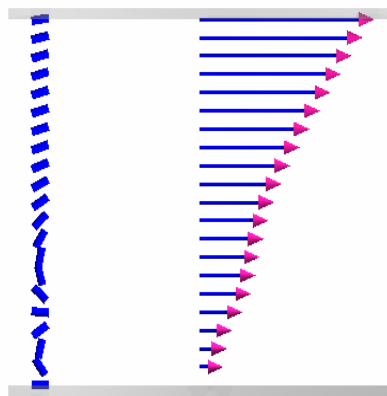
Fig.21-1 Behavior of director and velocity distribution for $Er=125$, $Ae=100$ of 8CB.



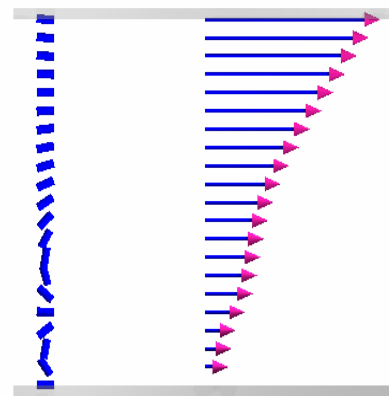
$t=35$



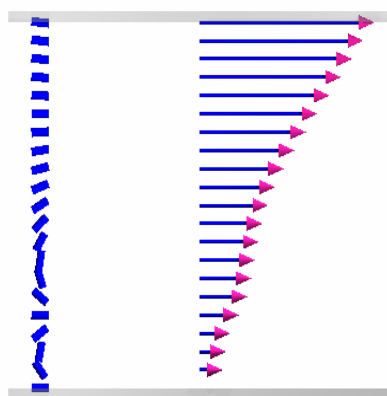
$t=38$



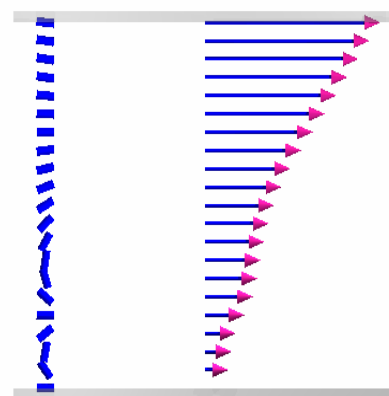
$t=40$



$t=43$



$t=45$



$t=48$

Fig.21-2 Behavior of director and velocity distribution for $Er=125$, $Ae=100$ of 8CB.

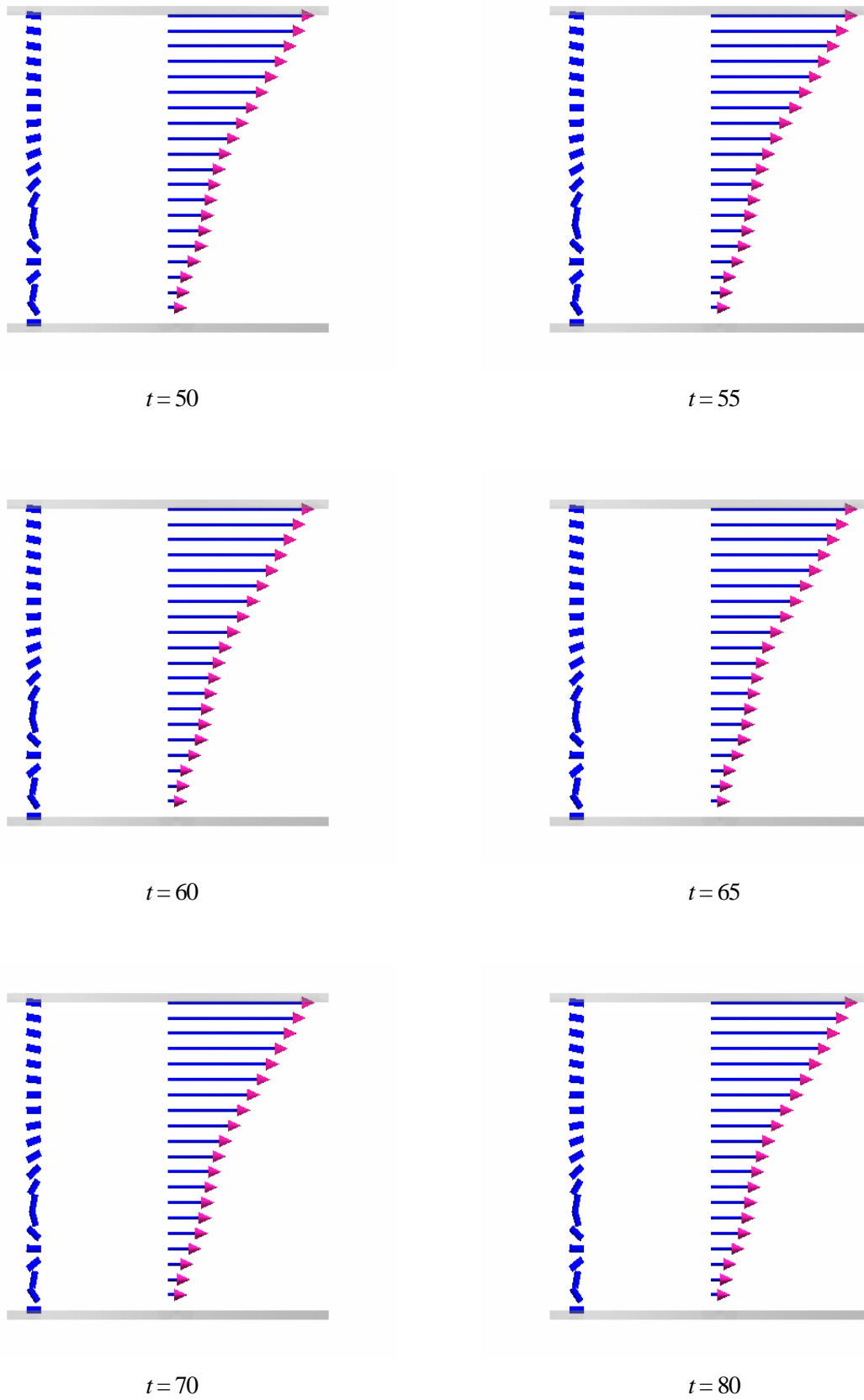


Fig.21-3 Behavior of director and velocity distribution for $Er=125$, $Ae=100$ of 8CB.

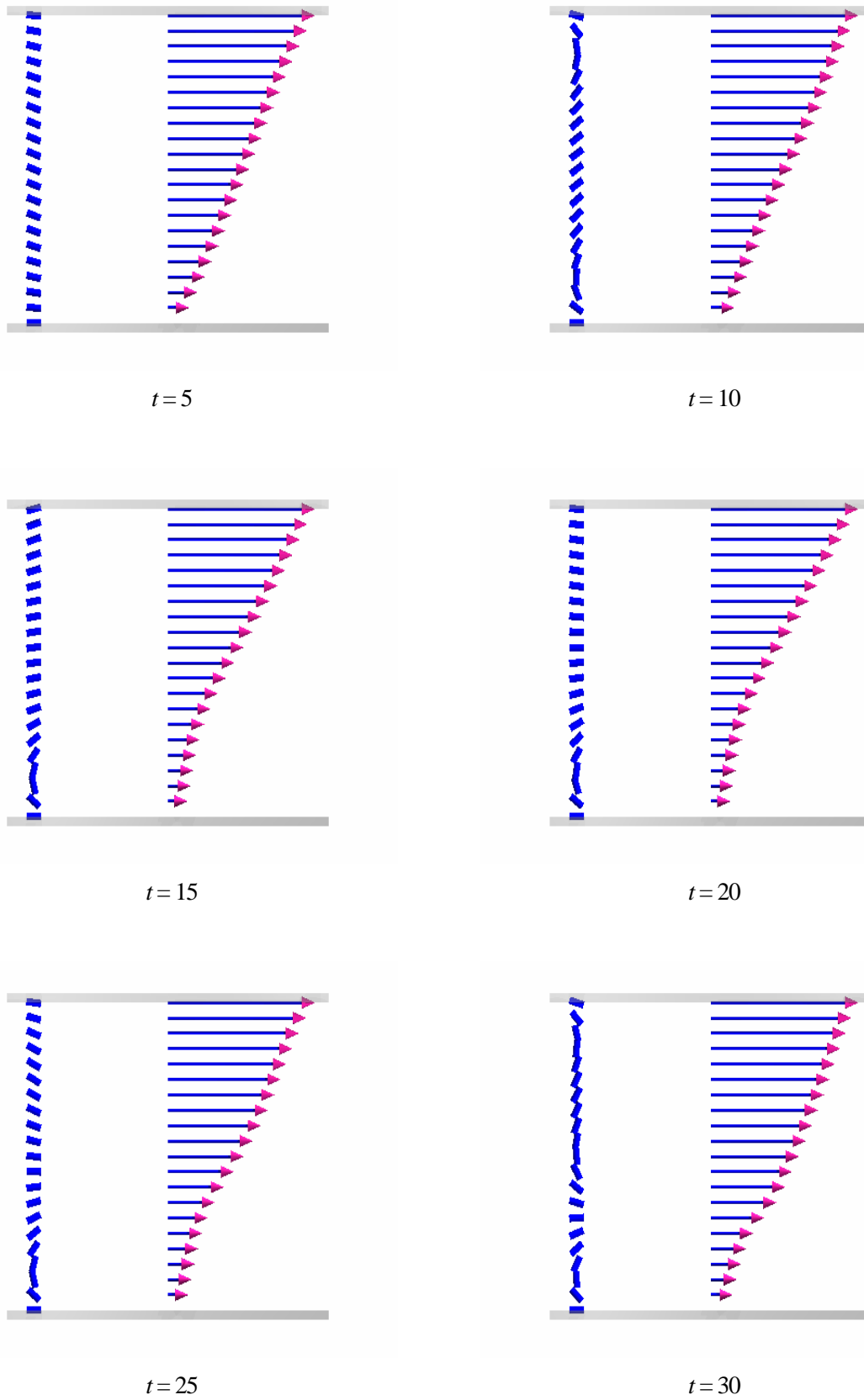


Fig.22-1 Behavior of director and velocity distribution for $Er=150$, $Ae=100$ of 8CB.

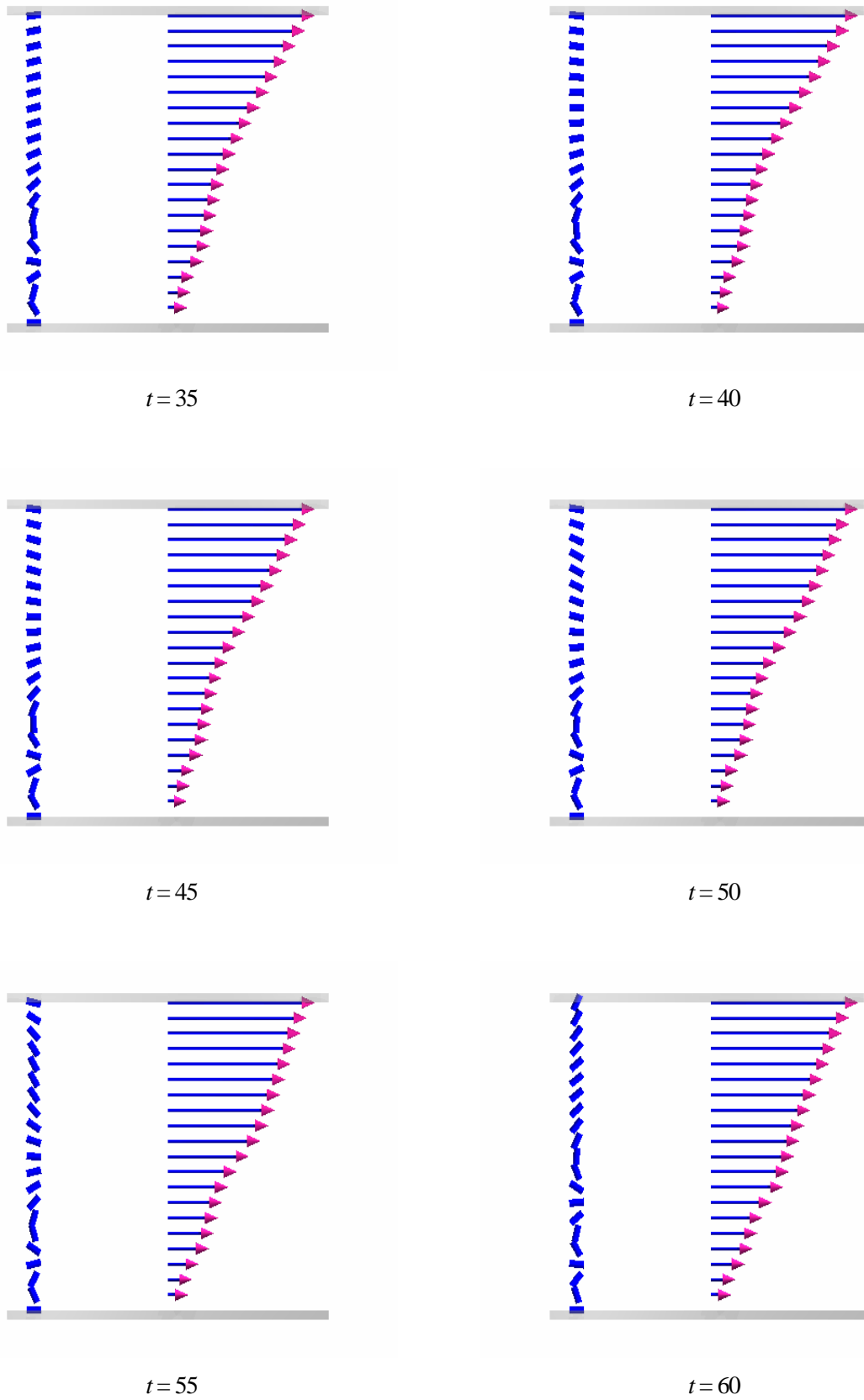
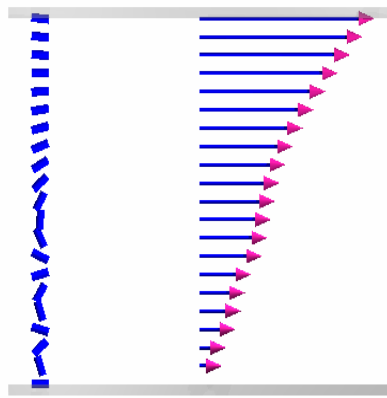
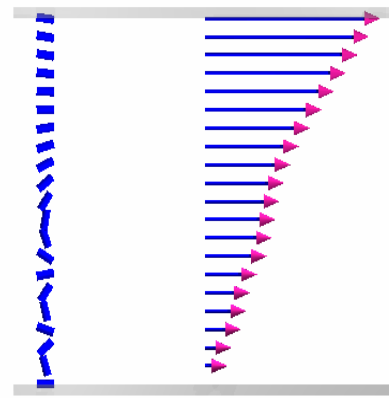


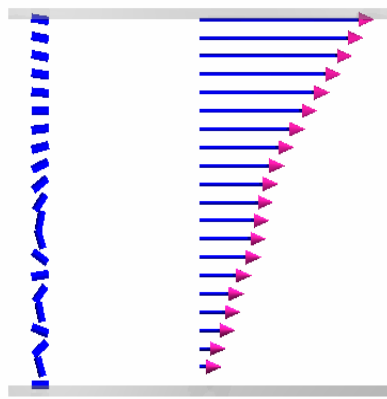
Fig.22-2 Behavior of director and velocity distribution for $Er=150$, $Ae=100$ of 8CB.



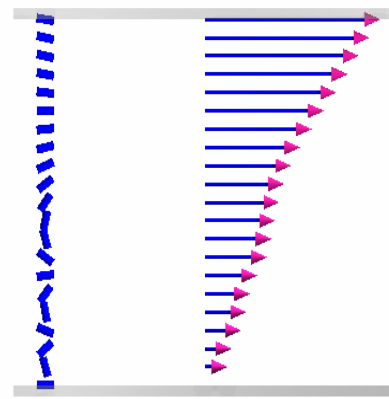
$t = 65$



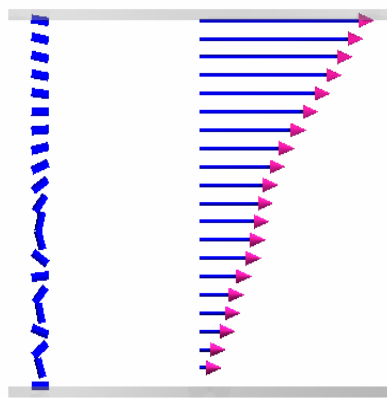
$t = 70$



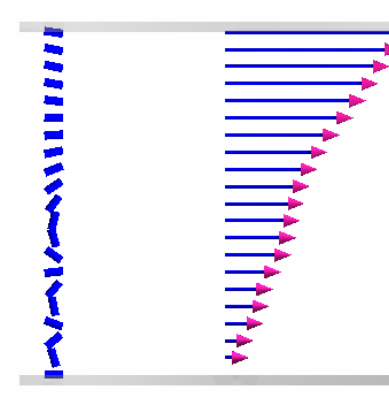
$t = 75$



$t = 80$



$t = 85$



$t = 90$

Fig.22-3 Behavior of director and velocity distribution for $Er=150$, $Ae=100$ of 8CB.

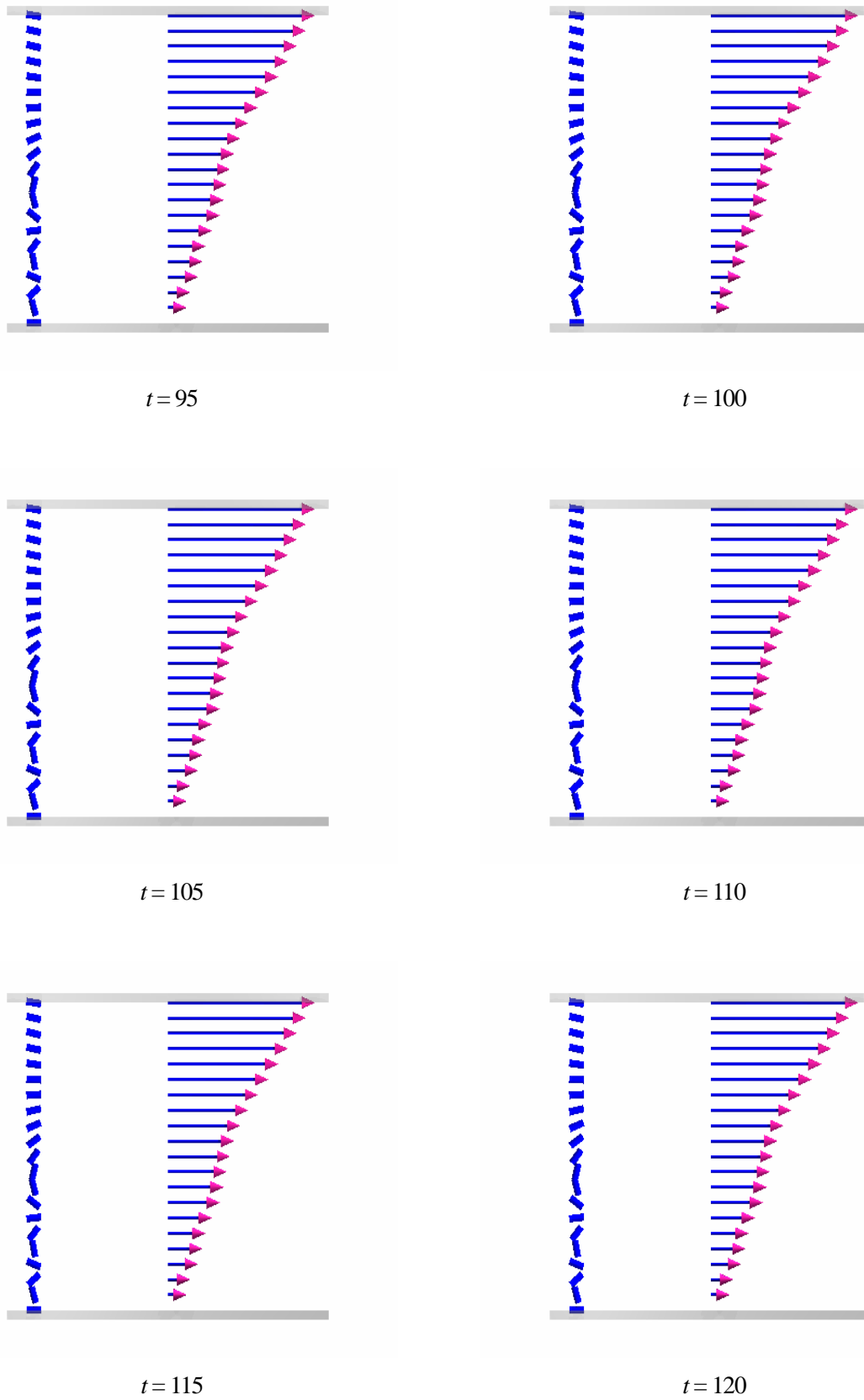


Fig.22-4 Behavior of director and velocity distribution for $Er=150$, $Ae=100$ of 8CB.

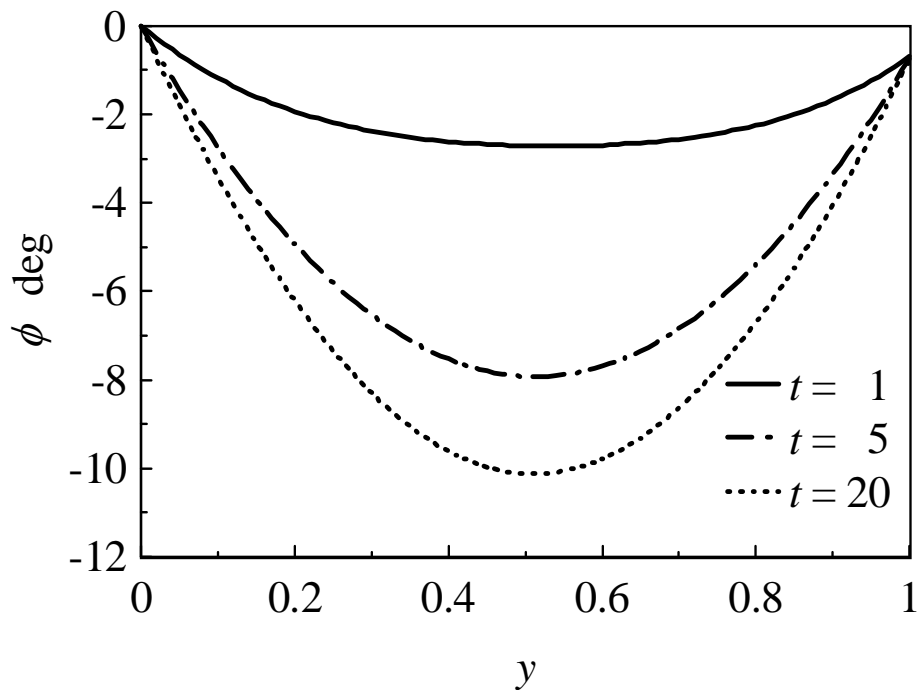


Fig. 23 Director angle profiles at $Er=25, Ae=100$

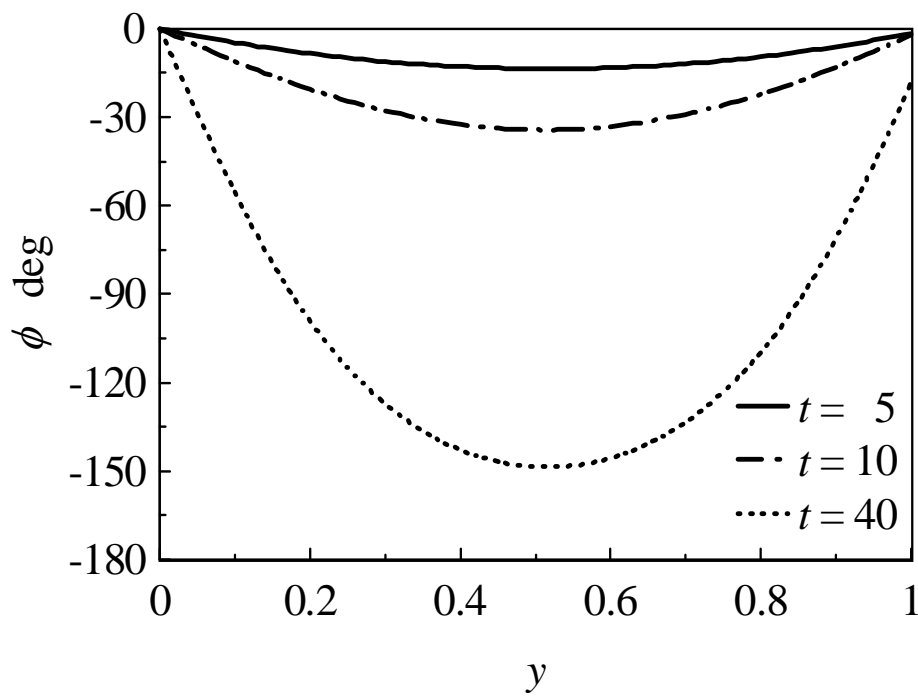


Fig. 24 Director angle profiles at $Er=50, Ae=100$

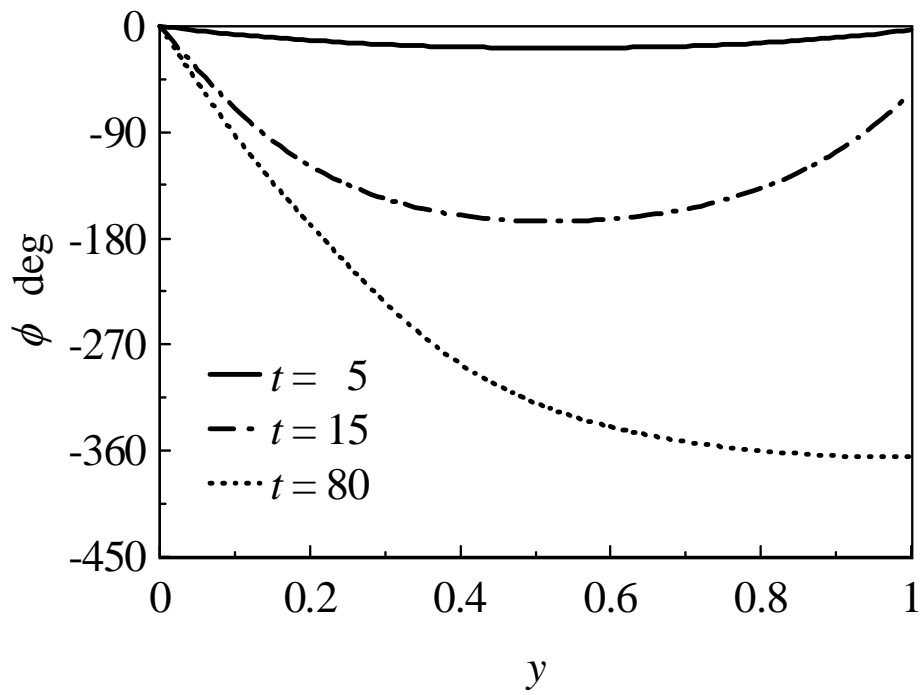


Fig. 25 Director angle profiles at $Er=100, Ae=100$

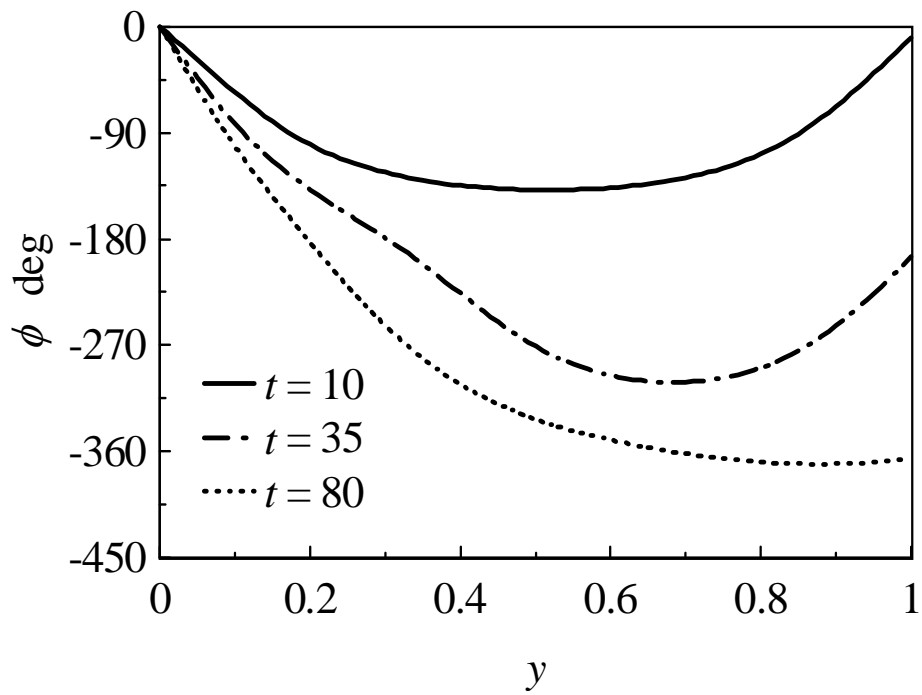


Fig. 26 Director angle profiles at $Er=125, Ae=100$

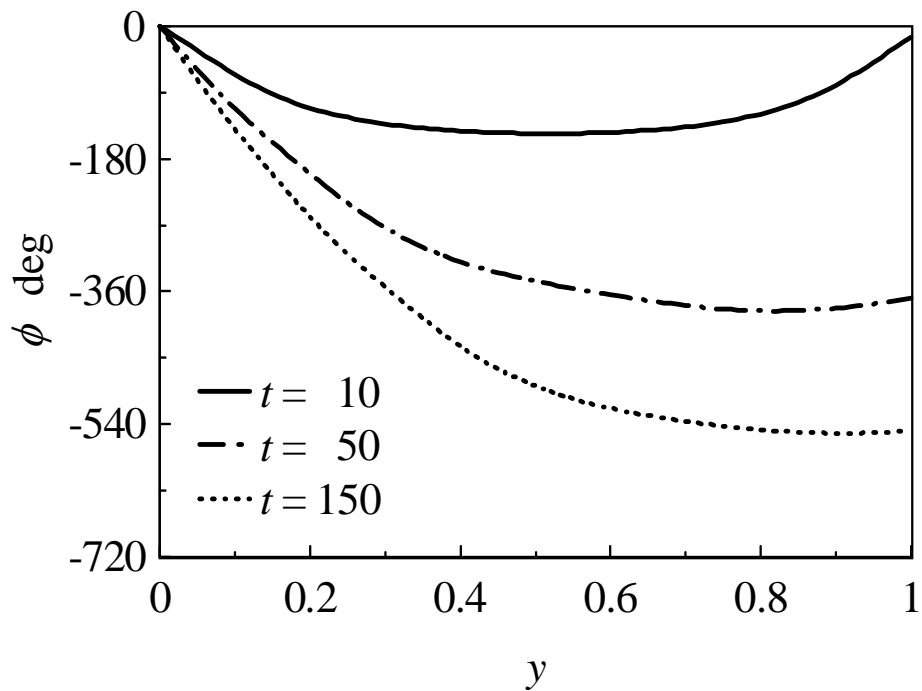


Fig. 27 Director angle profiles at $Er=150$, $Ae=100$

2・3・2・2 速度場

図 28 は $Er=25$, $Ae=100$ の場合の無次元時間 $t = 5 \sim 20$ における x 方向速度の空間変化を表している。横軸は平板間の無次元座標、縦軸はせん断方向の無次元速度を表している。図より、平板間全体で直線状の速度勾配になっている。またこの傾向は、図 16 における右側の矢印（速度勾配）の時間変化からも分かるように、時間が経過しても殆ど変化しない。これは平板間の速度分布に影響を及ぼすディレクタ角の変化が殆どなかったためである。

図 29 は $Er = 50$, $Ae = 100$ の場合の無次元時間 $t = 10 \sim 50$ における x 方向速度の空間変化を表している。図 28 の結果と比較すると、時間が経過するにつれ、平板間全体で直線状の速度勾配であったものが、速度は直線分布に波状分布が重なった分布となっている。その結果、配向分布に影響を及ぼす速度勾配は場所によって大きく変化している。

図 30 は $Er = 100$, $Ae = 100$ の場合の無次元時間 $t = 10 \sim 80$ における x 方向速度の空間変化を表している。図 28, 29 の結果と比較すると、時間が経過するにつれ、平板間全体で直線状の速度勾配であった

ものが、速度は直線分布に波状分布が重なった分布となっている。その結果、配向分布に影響を及ぼす速度勾配は場所によって大きく変化している。

図 31-1, 2 は $Er = 125, Ae = 100$ の場合の無次元時間 $t = 10 \sim 80$ における x 方向速度の空間変化を表している。図 28 の結果と比較すると、時間が経過するにつれ、平板間全体で直線状の速度勾配であったものが、速度は直線分布に波状分布が重なった分布となっている。その結果、図 30 の結果と同様に配向分布に影響を及ぼす速度勾配は場所によって大きく変化している。

図 32-1, 2, 3 は $Er = 150, Ae = 100$ の場合の無次元時間 $t = 10 \sim 120$ における x 方向速度の空間変化を表している。図 28 ($Er=25, Ae=100$) の結果と比較すると、時間が経過するにつれ、平板間全体で直線状の速度勾配であったものが、速度は直線分布に波状分布が重なった分布となっている。その結果、図 30, 31 の結果と同様に配向分布に影響を及ぼす速度勾配は場所によって大きく変化している。

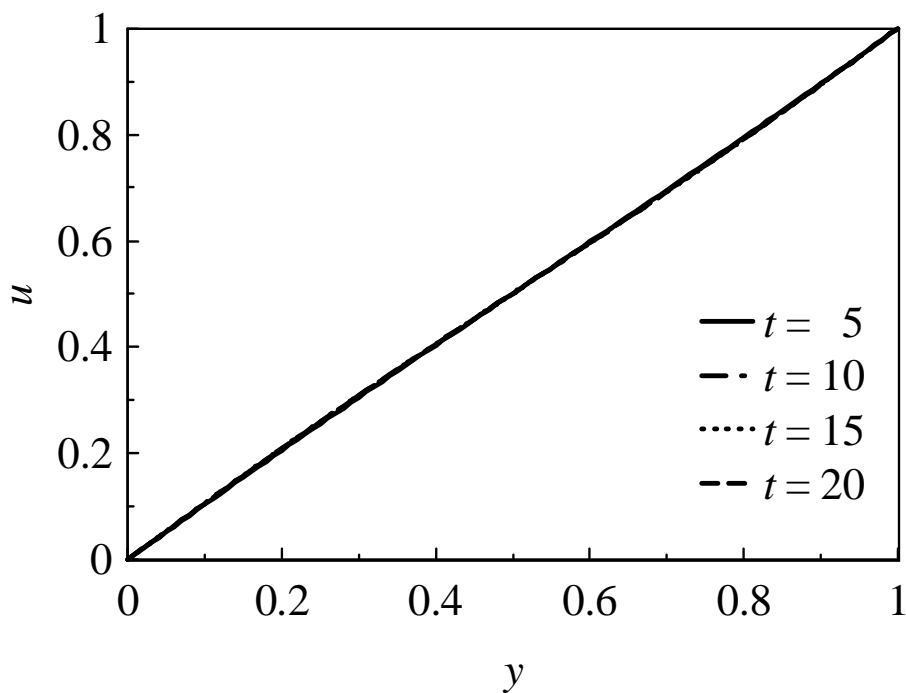


Fig. 28 Velocity change profiles for $Er=25, Ae=100$ of 8CB.

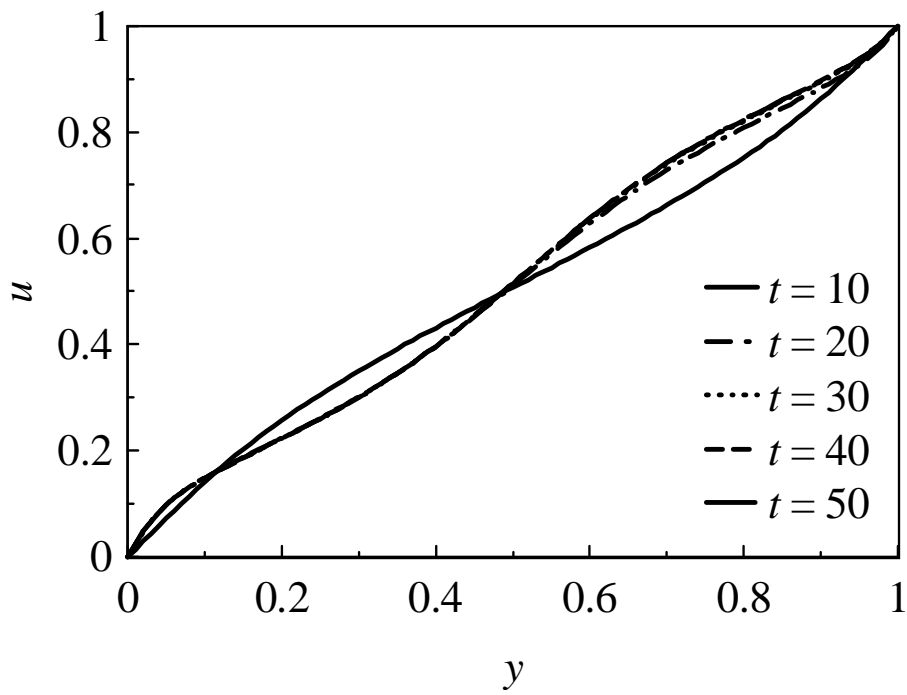


Fig. 29 Velocity change profiles for Er=50, Ae=100 of 8CB.

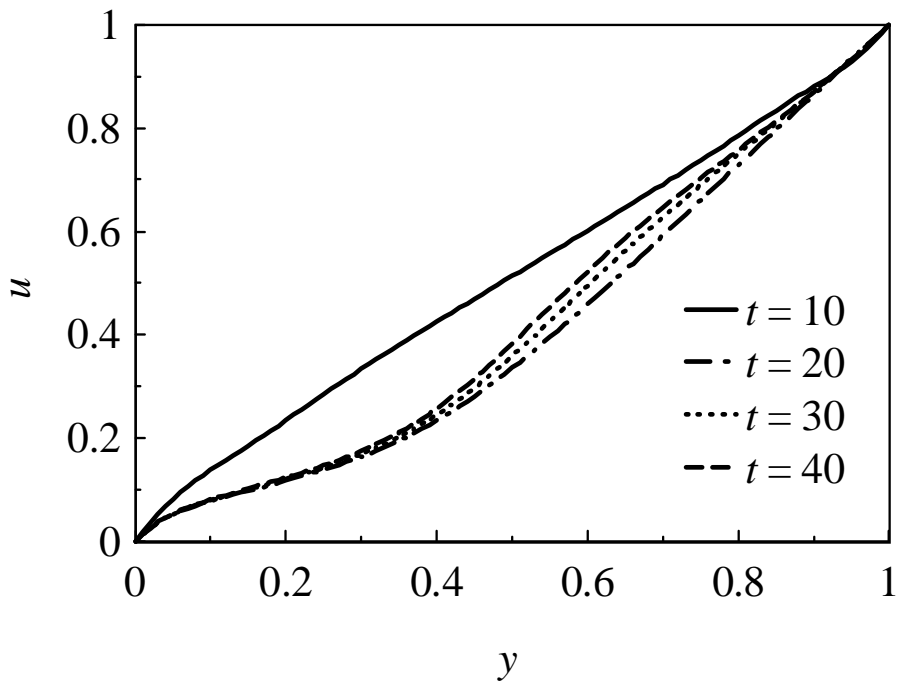


Fig. 30-1 Velocity change profiles for Er=100, Ae=100 of 8CB.

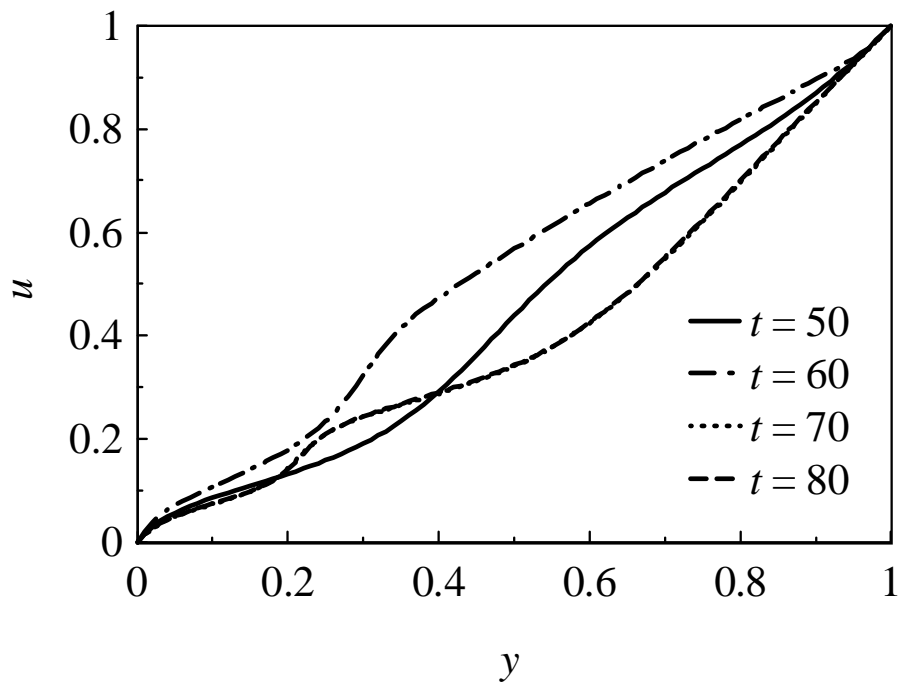


Fig. 30-1 Velocity change profiles for $Er=100$, $Ae=100$ of 8CB.

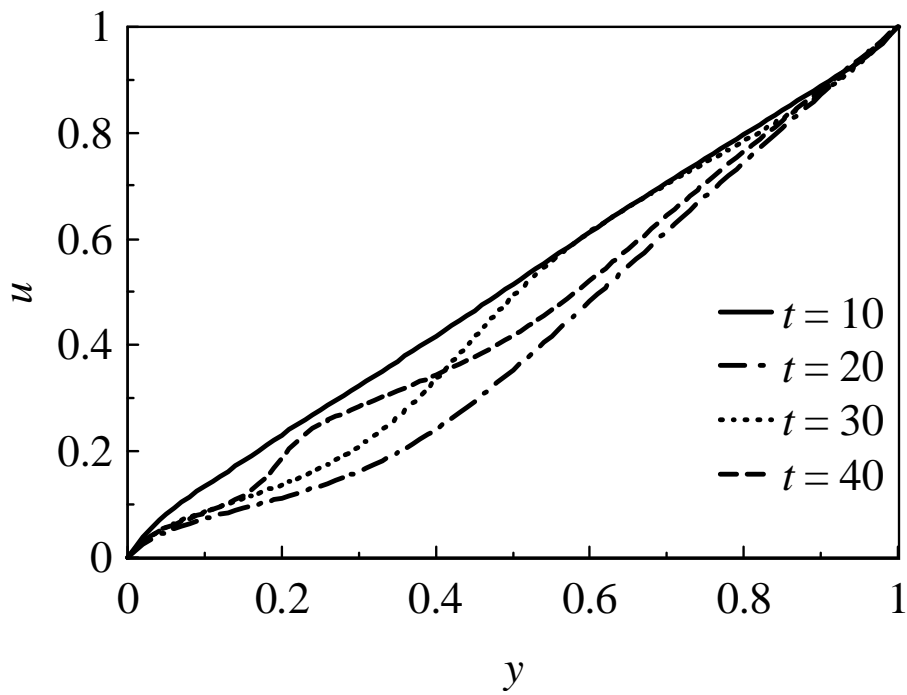


Fig. 31-1 Velocity change profiles for $Er=125$, $Ae=100$ of 8CB.

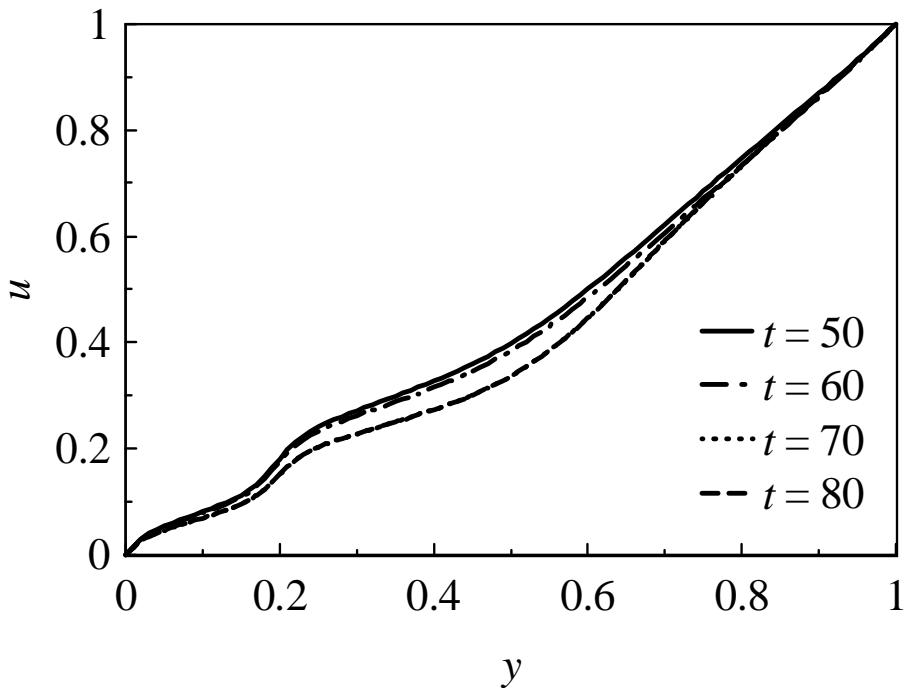


Fig. 31-2 Velocity change profiles for $Er=125$, $Ae=100$ of 8CB.

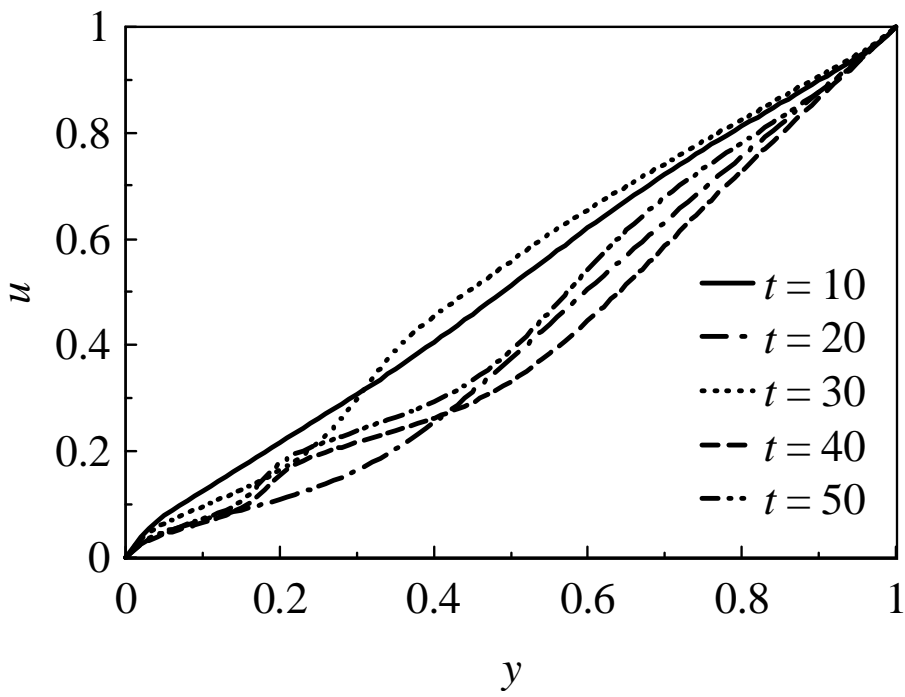


Fig. 32-1 Velocity change profiles for $Er=150$, $Ae=100$ of 8CB.

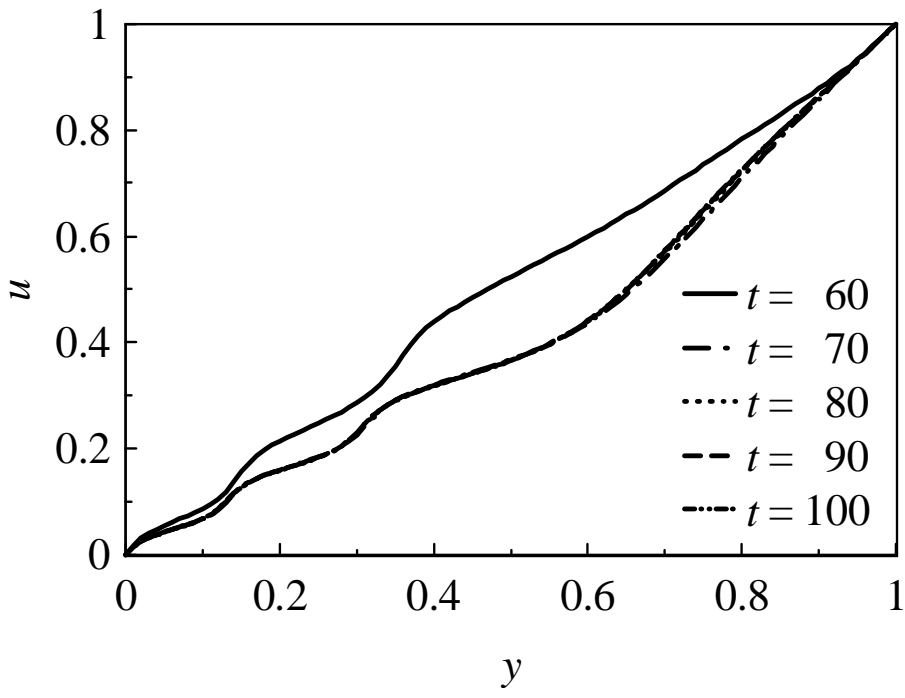


Fig. 32-2 Velocity change profiles for $Er=150$, $Ae=100$ of 8CB.

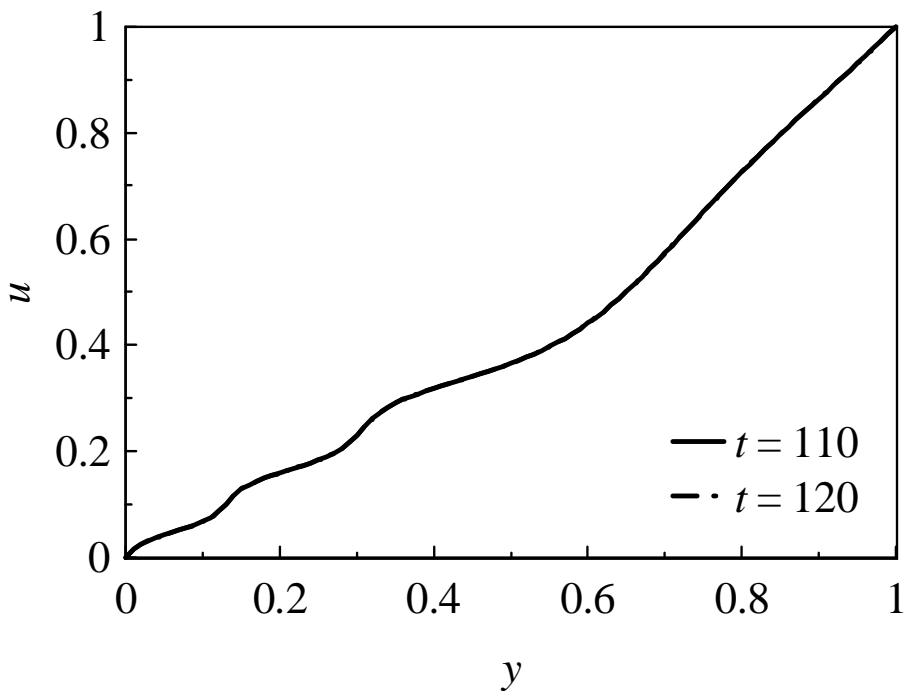


Fig. 32-3 Velocity change profiles for $Er=150$, $Ae=100$ of 8CB.

2・3・2・3 分極値

図 33-1 は $Er=25, 50, 75, 100, 125$ の場合の上部平板面におけるディレクタの時間変化を表している。 $Er=25$ の場合は、初期配向状態の $\phi = 0^\circ$ からほとんど回転せずに定常に至っている。 $Er=50$ の場合も同様に初期配向状態の $\phi = 0^\circ$ からわずかに回転して、 -18.69° (無次元時間 $t = 40$) で定常に至っている。しかし、 $Er = 100$ の場合では $t \approx 20, 60$ でディレクタ角は急激に減少し、 $\phi \approx -365^\circ$ (無次元時間 $t = 80$) で定常に至っている。そして $Er = 125$ の場合では $t \approx 15, 40$ の 2ヶ所でディレクタ角は急激に減少し、 $\phi \approx -365^\circ$ (無次元時間 $t = 80$) で定常に至っている。またディレクタ角が急激に減少するという現象の回数は、高いせん断速度になるにつれて多く現れ、 $Er = 150$ (図 33 - 2) では 3ヶ所でディレクタは急激に減少し、 $\phi \approx -540^\circ$ (無次元時間 $t = 150$) で定常に至っている。ここで上部平板面におけるディレクタに対するエリクセン数 Er の影響を説明するために、図 34 に上部平板面におけるディレクタに対するエリクセン数 Er の関連性を示す。上部平板面におけるディレクタ角 ϕ はエリクセン数 Er が増加するにつれて減少している。そのディレクタ角は $Er \approx 56.5, 95.5$ の時に不連続な減少を示す。そしてその定常に至るディレクタ角は $-180^\circ \times n$ (n は整数) で収束していることが分かる。これはディレクタが流動方向を向いたとき、ディレクタに働く粘性トルクが最小になり、ディレクタがせん断面方向に水平に向いたとき、ディレクタに働く粘性トルクが最大になることに起因している。次に上部平板面におけるディレクタに対する Ae の影響を説明するために、図 35 に上部平板面におけるディレクタに対する Ae の関係性を示す。上部平板面におけるディレクタ角 ϕ の不連続な減少が Ae の増加とともに観察される。しかし、 Ae の増加とともにアンカリングトルクも増加しているため、上部平板面のディレクタに対する Ae の影響はエリクセン数 Er の影響を見た場合における結果と逆の関係になっていることが分かる。以上のことから壁面配向強度、及び上部壁面のせん断速度を変化させることで、上部平板のディレクタの定常に至るときの配向角を任意の角度に配向させることが可能である。

図 36-1 に $Er=50, 100, 125$ の場合のフレクソ分極の時間変化を示す。 $Er=50$ の場合、時間が経過するにつれ僅かに増加し定常に至る。2・3・1・3 で述べたように、フレクソ分極は上下平板面の配向角の差で決定され、本研究では上部平板面におけるディレクタの配向角状態で決定されるので、分極状態は図 33-1, 上部平板面の配向状態にかなり似ている。しかし、 $Er=100, 125$ の場合について分極の状態は配向状態と異なっている。フレクソ分極は、上下平板面における配向角が垂直状態になったときに最大になるので、上部平板面におけるディレクタ角が $\phi = -90^\circ \times n$ (n は奇数) を示す時間とフレクソ分極値のピークを示す時間が一致している。また、分極のピーク値は $Er=100, 125$ の場合で 2 回現れている。これらの現象は、高いせん断速度の場合 ($Er=150$ (図 33 - 2)) でも同様に一致し、分極のピーク値が

$Er=150$ の場合で 3 回現れる。以上のことから本研究においてフレクソ分極は上部平板面におけるディレクタの配向角状態で決定されるので上部平板面におけるディレクタ角が $\phi = -90^\circ \times n$ (n は奇数) を示す時間とフレクソ分極値のピークを示す時間が一致している。そして、フレクソ分極の定常値は、の定常に至る配向角が $-180^\circ \times n$ (n は整数) で収束しているの、ゼロに近くなっている。

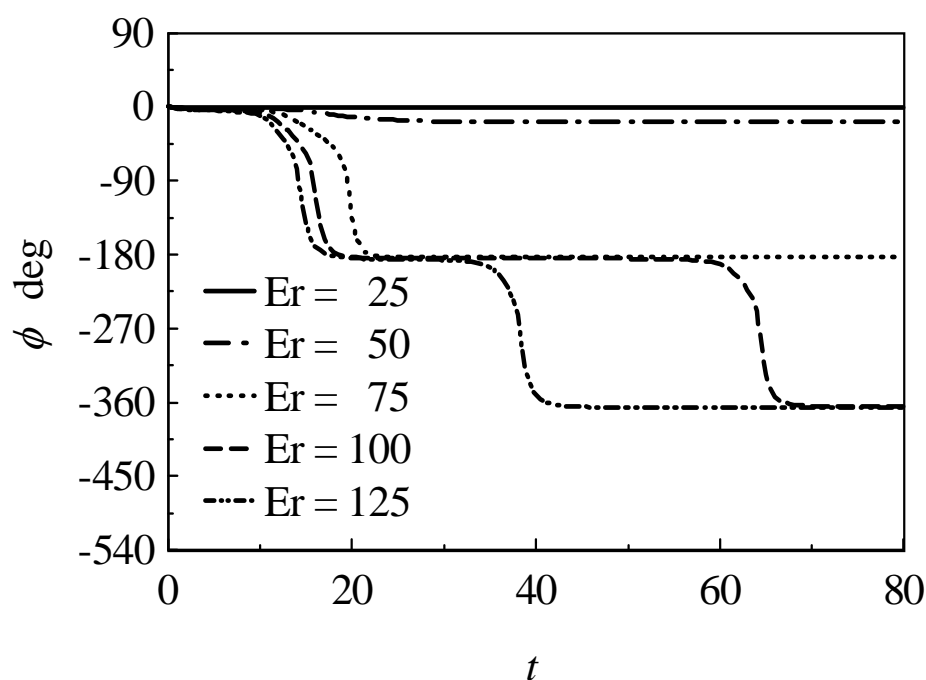


Fig. 33-1 Transient behaviors of director angle ϕ at upper plate for $Ae=100$.

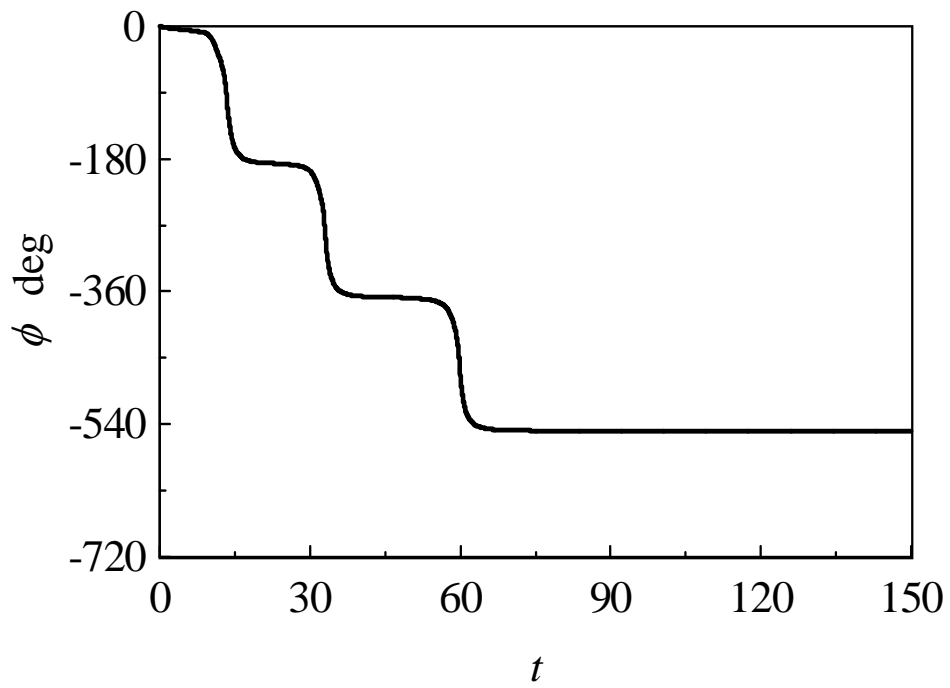


Fig. 33-2 Transient behaviors of director angle ϕ at upper plate for $Er=150$, $Ae=100$.

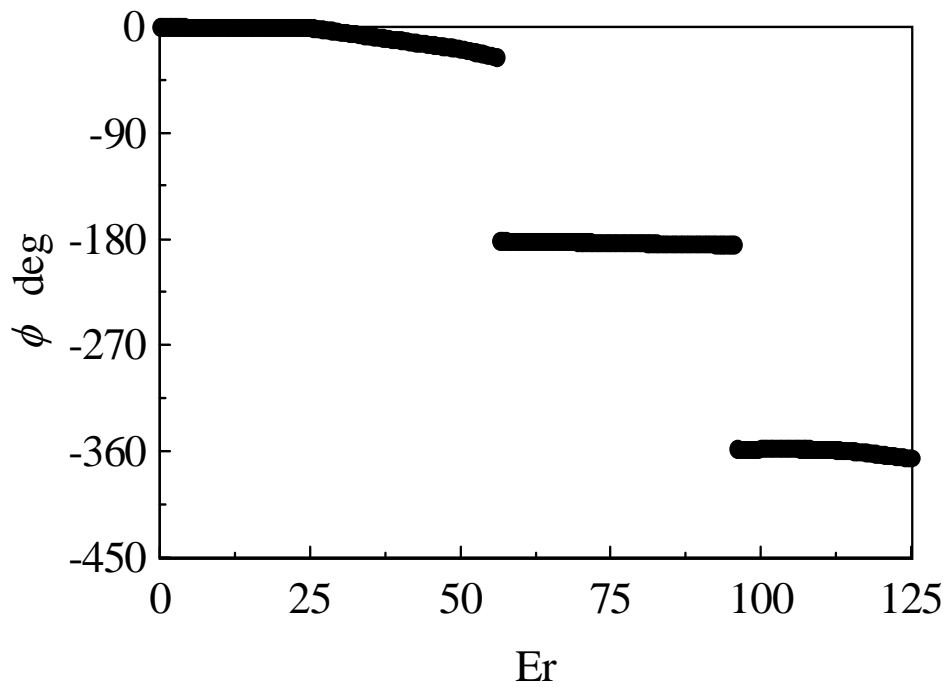


Fig. 34 Behavior of director for Er at $Ae=100$.

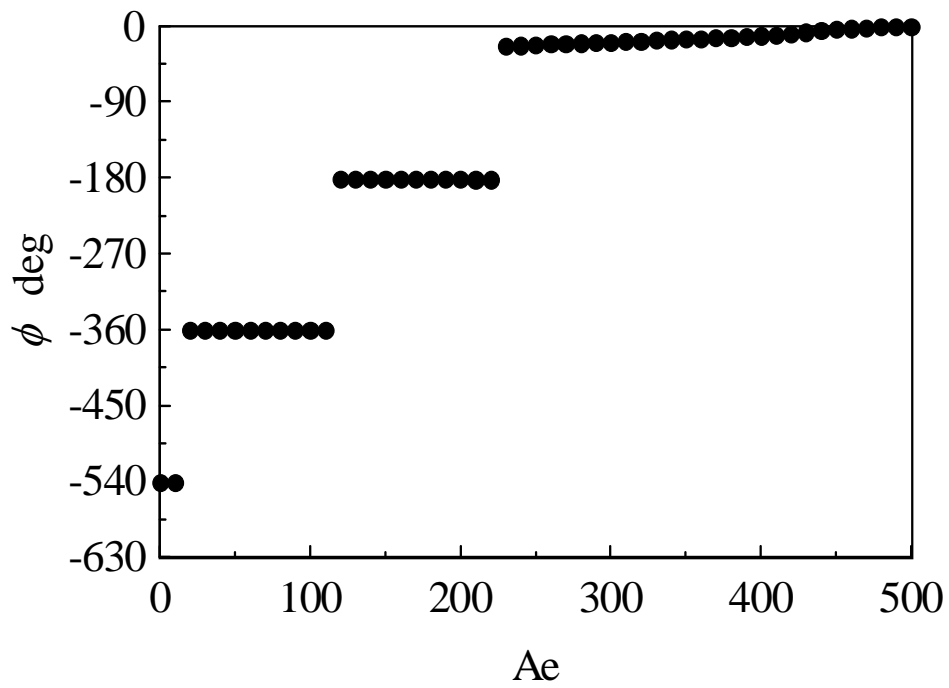


Fig. 35 Behavior of director for Ae at Er=100.

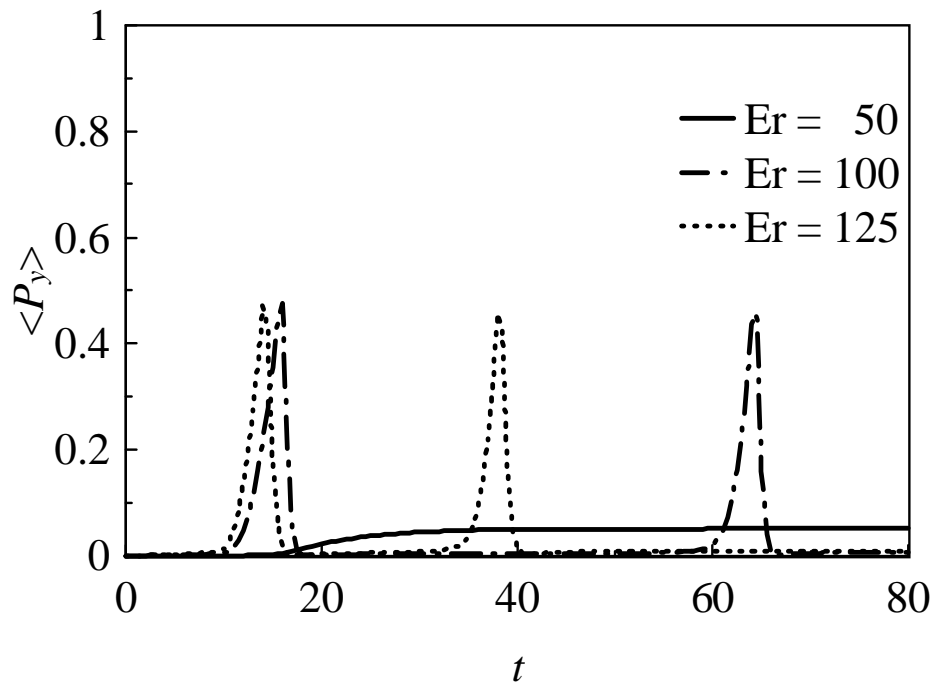


Fig. 36-1 Transition of flexoelectric polarization along y-direction for Ae=100 of 8CB.

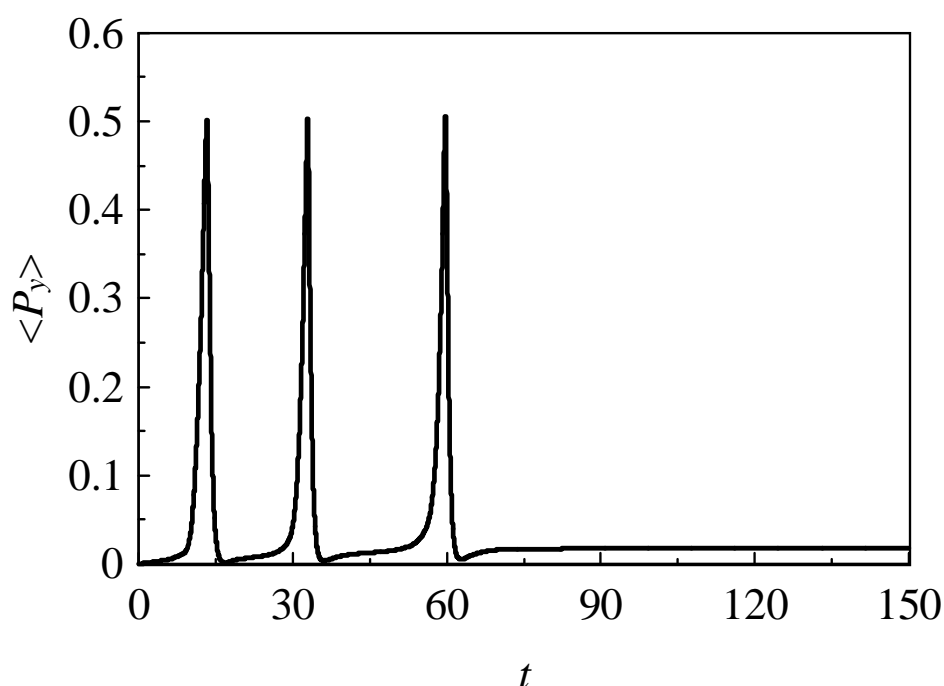


Fig. 36-2 Transition of flexoelectric polarization along y-direction for $A_e=100$ of 8CB.

2・4 結言

第2章では、In-plane 仮定を用いた場合の平行平板間せん断流中におけるネマティック液晶の流動誘起型フレクソエレクトリック効果についての数値シミュレーションを行った。得られた結果を以下にまとめる。

- 1) フレクソエレクトリック分極は上下平板面における配向角の姿勢の差に依存するので、回転挙動を示すタンブラリング液晶の方がアライニング液晶に比べ分極が大きく発生する。
- 2) 流動によって誘起される平板間分極値は、エリクセン数 E_r 及び壁面配向束縛力 A_e に依存する。言い換えると、エリクセン数 E_r 及び壁面配向束縛力 A_e を変化させることによって誘起される分極値をコントロールすることができる。
- 3) アライニング液晶とタンブラリング液晶を比較した場合、アライニング液晶における分極値の時間変化は単調であるのに対して、タンブラリング液晶ではエリクセン数 E_r に依存して分極値が大ききなピークを示す。
- 4) タンブラリング液晶の場合、弱アンカリング (weak anchoring) が施された上部平板面におけるディレクタ角が π の整数倍の値で定常に至る。そのため分極値の定常値は低い値をとる。

5) エリクセン数 E_r と壁面配向束縛力 A_e が上部平板面における配向角に対する影響は、ほぼ逆の関係になる。

参考文献

- (1) Leslie, F.M., *Some Constitutive Equations for Liquid Crystals*, Arch. Ration.Mech.Anal., Vol.28, No.4 (1968), pp.265-283.
- (2) Ericksen, J.L., *Anisotropic fluids*, Arch. Ration. Mech. Anal. 4, Vol. 28(1960), pp.231.
- (3) Ericksen, J.L., *Conservation Laws for Liquid Crystals*, Trans. Soc. Rheol., Vol. 5(1961), pp. 23-24.
- (4) Meyer, R.B., *Piezoelectric Effects in Liquid Crystals*, Phys. Rev. Lett., Vol.22(1969), pp.918-921.
- (6) Takahashi, T et al., *Novel Measurement Method for Flexoelectric Coefficients of Nematic Liquid Crystals*, Jpn. J.Appl. Phys, Vol.37, No. 4A(1998), pp.1865-1869.
- (6) Knepe, H. et al., *Rotational viscosity γ_1 of nematic liquid crystals*, J. Chem. Phys, Vol.77(1982), pp.3203-3208.
- (7) Haller, I., *Elastic Constants of the Nematic Liquid Crystalline Phase of p-Methoxybenzylidene-p-n-Butylaniline (MBBA)*, J. Chem. Phys., Vol.57(1972), pp.1400-1405.
- (8) Karat, P.P., and Madhusudana, N.V., *Elasticity and orientational order in some 4'-n-alkyl-4-cyanobiphenyls*, Mol. Cryst. Liq. Cryst., Vol.40(1977), pp.239-245.
- (9) Knepe, H et el., *A comparative study of the viscosity coefficients of some nematic liquid crystals*, Ber.Bunsenges.Phys.Chem, Vol.85(1981), pp.784-789.
- (10) Maheswara, P. R. Murthy et al., *Experimental determination of the flexoelectric coefficients of some nematic liquid crystals*, Liq. Cryst., Vol. 14, No.2(1993), pp.483-496.
- (11) Zakharov, A. V. and Thoen, J., *Surface-induced smectic-ordering effect in thin nematic liquid - crystal cell*, Eur. Phys. J. E, E9(2002), pp.461-466.
- (12) W.H.de Jeu, 液晶の物性, 97(1991), 共立出版
- (13) 液晶便覧編集委員会,液晶便覧,(2000),60,丸善株式会社.

第3章 Out-of-plane 成分を含む場合

3・1 流れ場及び座標系

図 37 に第 3 章で用いた平行平板せん断流れ構造および座標系を示す。第 3 章においても第 2 章と同様に流れ構造として一次元の平行平板間せん断流れ構造を用いている。2 枚の平行平板の間に液晶を封入し、上部平板を速度 U で x 軸方向に動かすことで液晶に流動を発生させる。故に、せん断速度は U/H となる。第 3 章ではディレクタの out-of-plane 成分まで考慮した計算を行う。その為、ディレクタは x , y , z 方向成分を用いることによって以下のように表すことができる。

$$\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z) = (\cos \phi, \sin \phi, \cos \theta) \quad (26)$$

ここで、 ϕ はディレクタと x 軸との間の角、また θ はディレクタと z 軸との間の角である。また、速度ベクトルは、

$$\mathbf{v} = (u, 0, 0) \quad (27)$$

と表すことができる。

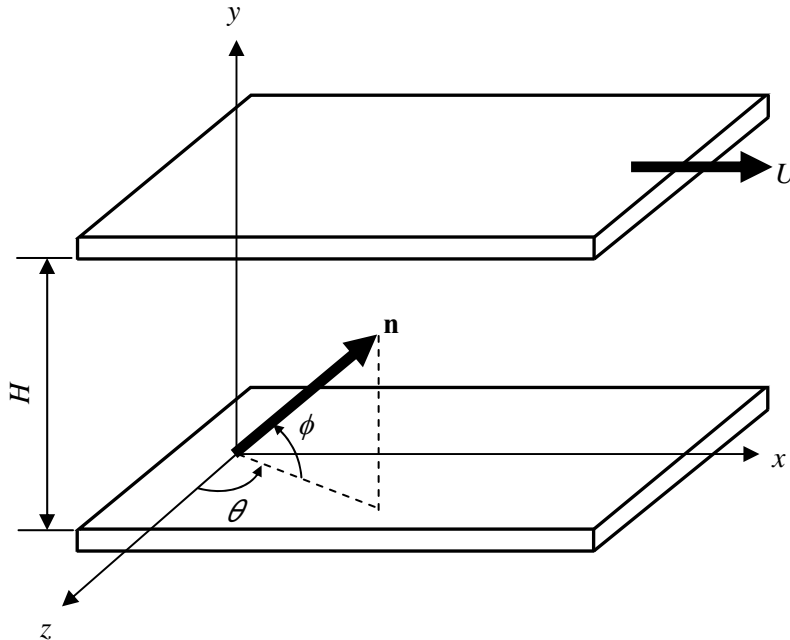


Fig.37 Flow geometry and coordinate systems.

3・2 計算結果及び考察

3・2・1 配向場

図 38-1, 2 に $Er=100$, $Ae=100$ の場合におけるディレクタの挙動を示す。図の今までのシミュレーション結果と同様に上部平板は常に x 方向に動いており、つねに x 方向のせん断が掛けられている状態である。図左の筒状のものがディレクタの配向を表し、図右の矢印がその場でのせん断速度を表している。なお、図のディレクタは平板間を 100 分割して計算した結果を 5 step ずつ抜き出して表示させたものである。

上部平板を速度 U で x 方向に動かすことで初期配向として全領域にわたって x 方向を向いているディレクタが回転挙動を始める。初期配向の 0° からせん断を受け徐々に時計回りに回転していく。このとき、上下平板近傍を除くほとんどの場所では同じ挙動を示しているが、弱固定配向(weak anchoring)の影響により上部平板面近傍では少し遅れて回転し、強固定配向(strong anchoring)の影響で下部平板面近傍では遅れ、下部平板面では全く回転しない現象が起こっている。さらにせん断を受けていくと、下部平板近傍で遅れて回転していたディレクタが x - y 平面内(in-plane)から z 軸方向(out-of-plane)へ飛び出る現象が起きる。これは下部平板面近傍においてディレクタが x 方向への強固定配向 (strong anchoring) の影響を受けている為、エネルギーが多く必要となる x - y 平面内 (in-plane) で回転するより、 z 軸方向(out-of-plane)へ飛び出て回転したときにエネルギーが少なくてすむことから起きる現象である。また、ディレクタが回転し配向方向が変化することにより速度場にも影響が現れた。本来、単純せん断流れにおいて速度分布は直線形状になるが、ディレクタが回転するに従い、液晶分子が棒状の形状をしていることや液晶の配向場の変化が速度場に対して影響を及ぼすことにより、その形状は直線形状に波状形状を重ねたものになっている。

図 39-1, 2, 3 に $Er=300$, $Ae=100$ の場合におけるディレクタの挙動を示す。上部平板を速度 U で x 方向に動かすことで初期配向として全領域にわたって x 方向を向いているディレクタが回転挙動を始める。図 38 と同様に初期配向の 0° からせん断を受け徐々に時計回りに回転していく。このとき、上下平板近傍を除くほとんどの場所では同じ挙動を示しているが、弱固定配向(weak anchoring)の影響により上部平板面近傍では少し遅れて回転し、強固定配向(strong anchoring)の影響で下部平板面近傍では遅れ、下部平板面では全く回転しない現象が起こっている。しかし下部平板近傍で遅れて回転していたディレクタが x - y 平面内(in-plane)から z 軸方向(out-of-plane)へ飛び出るといった現象が起きる。これは下部平板面近傍においてディレクタが x 方向への強固定配向 (strong anchoring) の影響を受けている為、エネルギーが多く必要となる x - y 平面内 (in-plane) で回転するより、 z 軸方向(out-of-plane)へ飛び出て

回転したときにエネルギーが少なくすむことから起きる現象である。上部平板面におけるディレクタの挙動は、図 38 の場合と比較すると $x - y$ 平面内 (in-plane) で回転するより、 z 軸方向(out-of-plane)へ飛び出て回転するという挙動が起きるまでに要する時間は長くなっている。これは上部平板面における弱固定配向 (weak anchoring) の表面アンカリング効果による影響に対して、せん断流効果による影響が強くなったために $x - y$ 平面内 (in-plane) で回転する時間が長くなったためである。ディレクタが回転し配向方向が変化することにより速度場にも影響が現れた。本来、単純せん断流れにおいて速度分布は直線形状になるが、ディレクタが回転するに従い、液晶分子が棒状の形状をしていることや液晶の配向場の変化が速度場に対して影響を及ぼすことにより、その形状は直線形状に波状形状を重ねたものになっている。

図 40-1 ~ 5 に $Er=500$, $Ae=100$ の場合におけるディレクタの挙動を示す。上部平板を速度 U で x 方向に動かすことで初期配向として全領域にわたって x 方向を向いているディレクタが回転挙動を始める。図 38, 39 と同様に初期配向の 0° からせん断を受け徐々に時計回りに回転していく。このとき、上下平板近傍を除くほとんどの場所では同じ挙動を示しているが、弱固定配向(weak anchoring)の影響により上部平板面近傍では少し遅れて回転し、強固定配向(strong anchoring)の影響で下部平板面近傍では遅れ、下部平板面では全く回転しない現象が起こっている。しかし下部平板面近傍で遅れて回転していたディレクタが $x - y$ 平面内(in-plane)から z 軸方向(out-of-plane)へ飛び出るといった現象が起きる。これは下部平板面近傍においてディレクタが x 方向への強固定配向 (strong anchoring) の影響を受けている為、エネルギーが多く必要となる $x - y$ 平面内 (in-plane) で回転するより、 z 軸方向(out-of-plane)へ飛び出て回転したときにエネルギーが少なくすむことから起きる現象である。上部平板面におけるディレクタの挙動は、図 38, 39 の場合と比較すると $x - y$ 平面内 (in-plane) で回転するより、 z 軸方向(out-of-plane)へ飛び出て回転するという挙動が起きるまでに要する時間は長くなっている。これは上部平板面における弱固定配向 (weak anchoring) の表面アンカリング効果による影響に対して、せん断流効果による影響が強くなったために $x - y$ 平面内 (in-plane) で回転する時間が長くなったためである。ディレクタが回転し配向方向が変化することにより速度場にも影響が現れた。本来、単純せん断流れにおいて速度分布は直線形状になるが、ディレクタが回転するに従い、液晶分子が棒状の形状をしていることや液晶の配向場の変化が速度場に対して影響を及ぼすことにより、その形状は直線形状に波状形状を重ねたものになっている。

以上の結果よりエリクセン数 Er が大きいほど $x - y$ 平面内 (in-plane) で回転するより、 z 軸方向 (out-of-plane)へ飛び出て回転するという挙動が起きるまでに要する時間を要している。その後、再びせん断を受け回転を続けるが、一度 z 軸方向 (out-of-plane) へ飛び出るとそちら側の回転を示しやすくなる。

図 41-1 に上部平板面におけるディレクタ \mathbf{n} の x 軸からの角度 ϕ , 図 41-2 にディレクタ \mathbf{n} の z 軸からの角度 θ の挙動を示す。図 41-1 より $Er = 300$ のとき $\phi = -540^\circ$, $Er = 200$ のとき $\phi = -360^\circ$, $Er = 100$ のとき $\phi = -180^\circ$ で上部平板面におけるディレクタの配向角がそれぞれ定常に至っていることが分かる。また $Er = 400, 500$ の場合も同様の挙動を示し、 $Er = 400$ のとき $\phi = -900^\circ$ (無次元時間 $t \approx 100$) , $Er = 500$ のとき $\phi = -1280^\circ$ (無次元時間 $t \approx 170$) で上部平板面におけるディレクタの配向角がそれぞれ定常に至る。いずれのエリクセン数 Er においても上部平板面におけるディレクタの配向角 ϕ は階段状に減少し、 π の整数倍の角度で定常に至っている。これは壁面において x 方向に弱固定配向 (weak anchoring) 状態であることと、ディレクタが x 軸と平行になるときにディレクタに働くトルクが最小になることに起因している。さらにディレクタの配向角 ϕ が定常に至った後は、時間が経過してもディレクタは再び回転挙動を示すことはなく、定常状態のまま変化することはない。これにより壁面配向強度 Ae を一定にし、エリクセン数 Er を変化させることによって上部平板面のディレクタが定常に至る配向角を任意に変化させることが可能である。図 41-2 よりエリクセン数 Er が高いほどせん断平面から逃れ、 z 軸方向へと傾くのに要する時間が増加することが分かる。また、 θ の負のピークは ϕ における急減少が生じる時間と一致している。

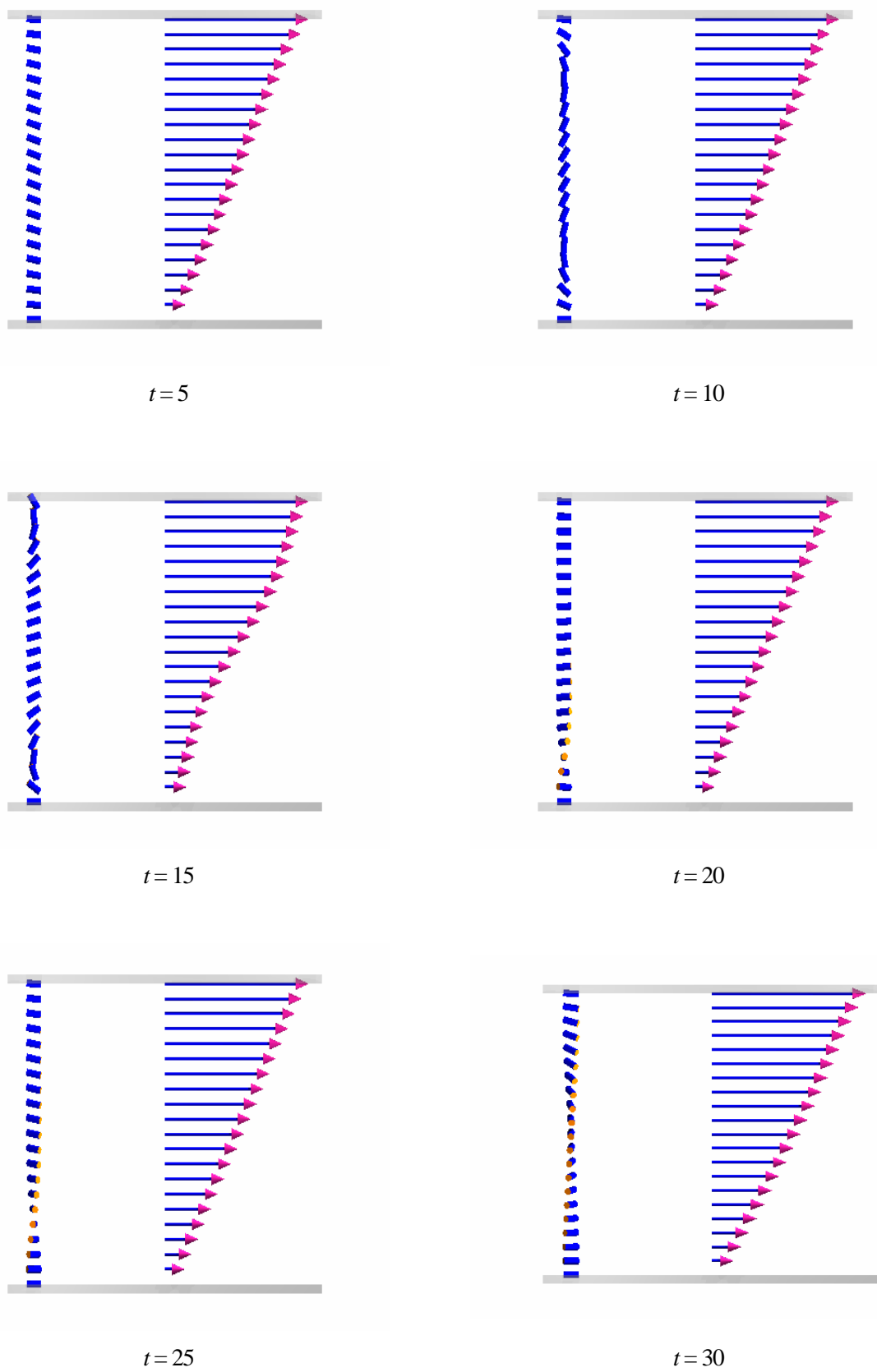
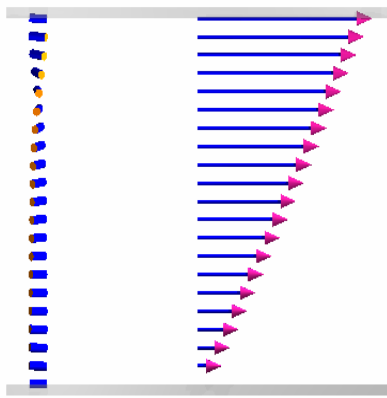
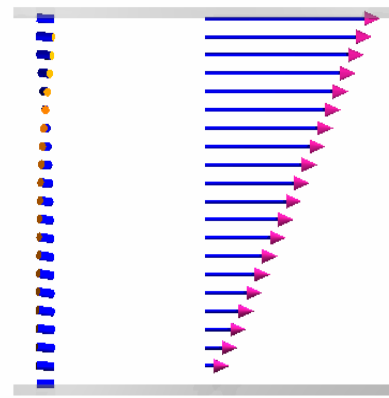


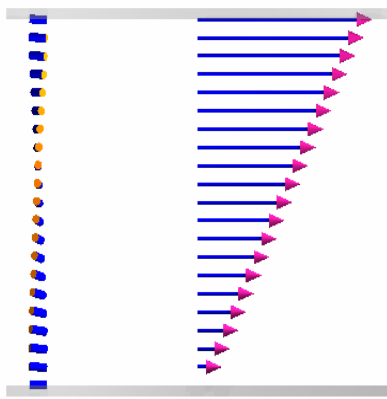
Fig.38-1 Behavior of director and velocity distribution for $Er=100$, $Ae=100$ of 8CB.



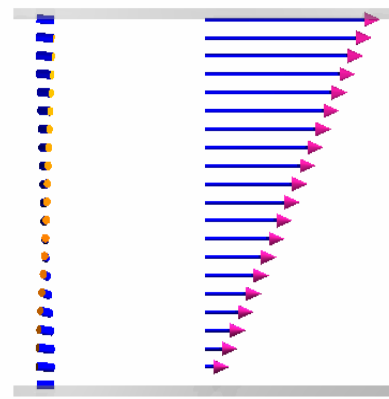
$t=35$



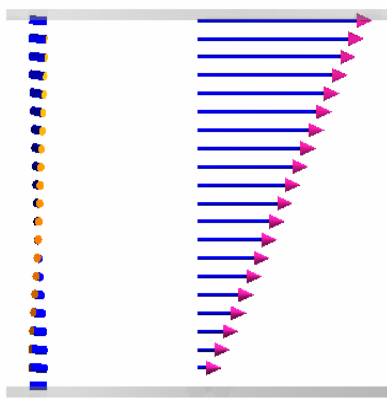
$t=40$



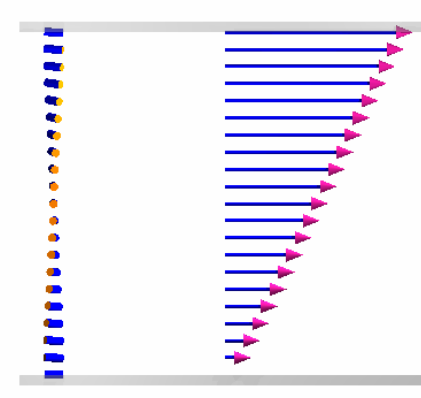
$t=45$



$t=50$



$t=55$



$t=60$

Fig.38-2 Behavior of director and velocity distribution for $Er=100$, $Ae=100$ of 8CB.

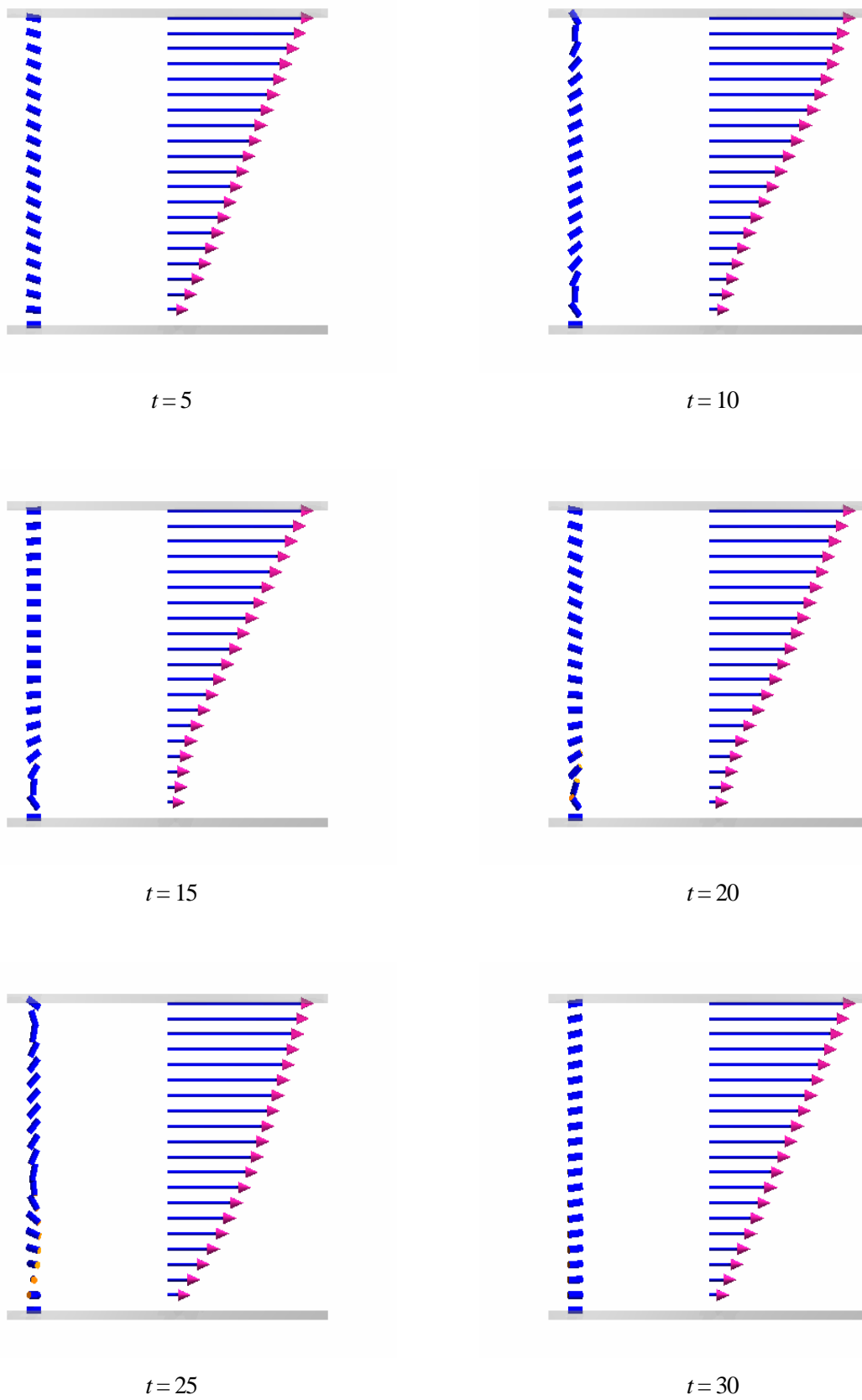


Fig.39-1 Behavior of director and velocity distribution for $Er=300$, $Ae=100$ of 8CB.

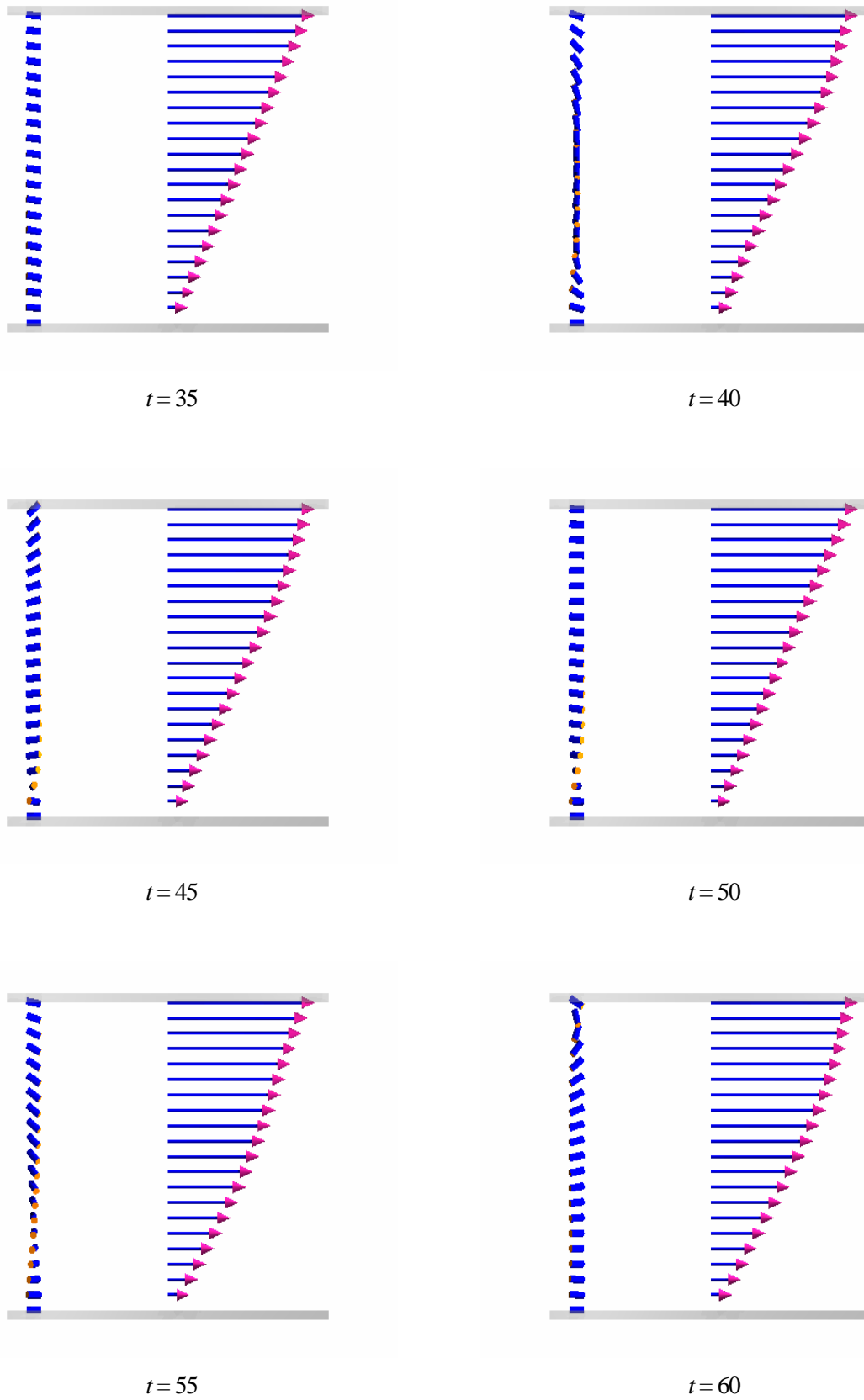
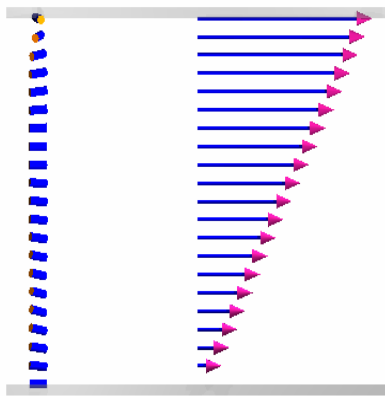
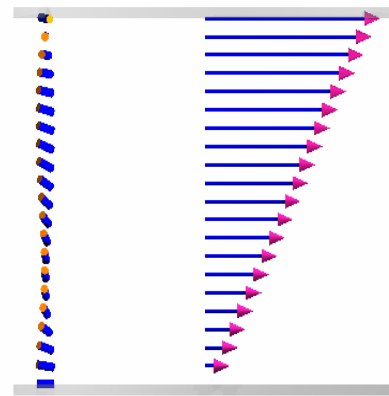


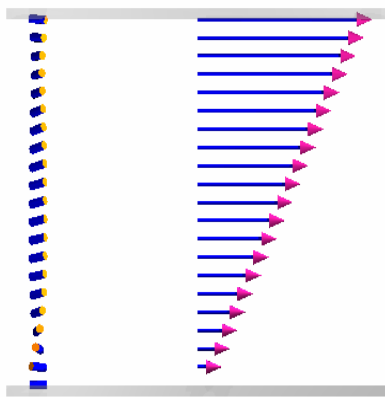
Fig.39-2 Behavior of director and velocity distribution for $Er=300$, $Ae=100$ of 8CB.



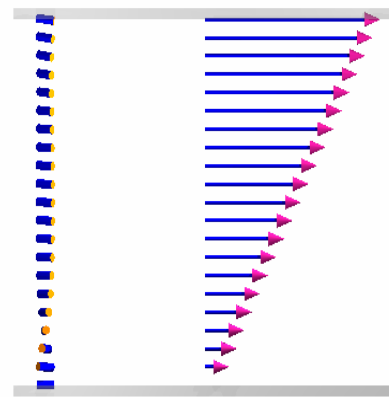
$t = 65$



$t = 70$



$t = 75$



$t = 80$

Fig.39-3 Behavior of director and velocity distribution for $Er=300$, $Ae=100$ of 8CB.

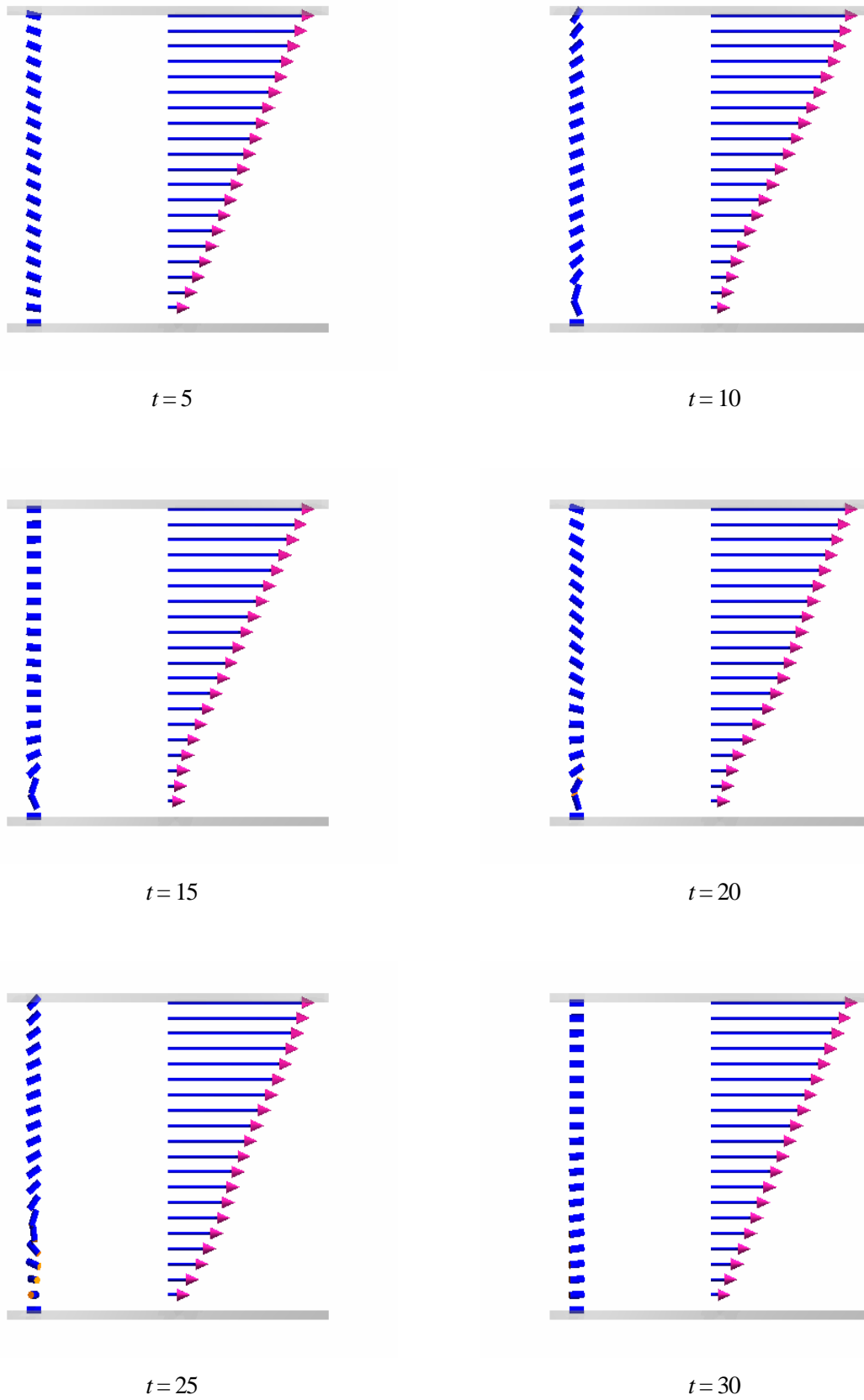


Fig.40-1 Behavior of director and velocity distribution for $Er=500$, $Ae=100$ of 8CB.

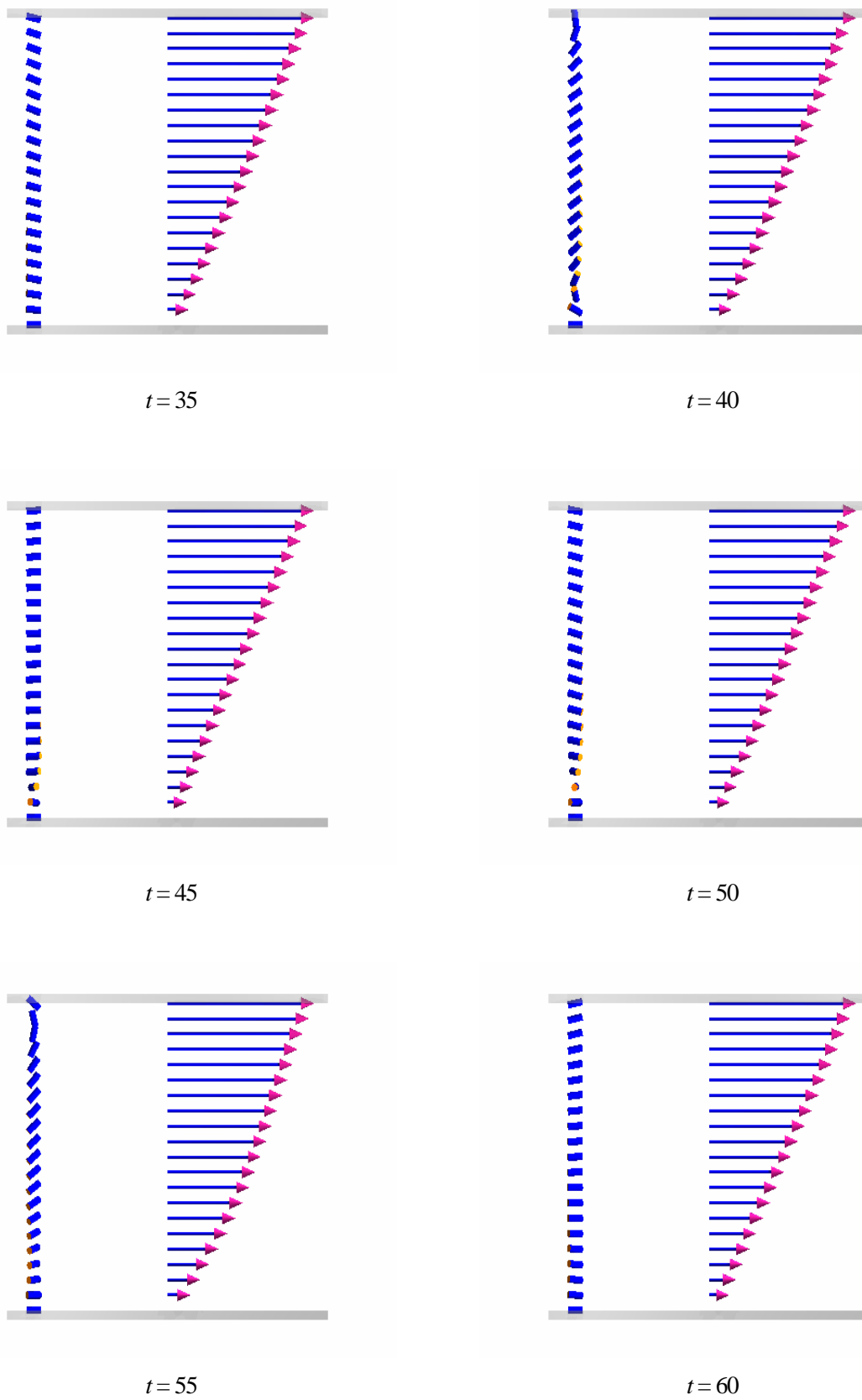
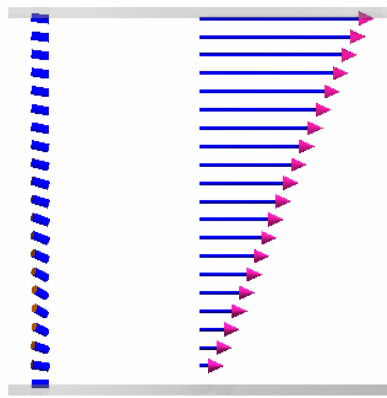
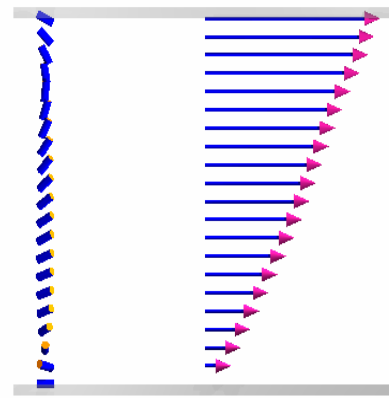


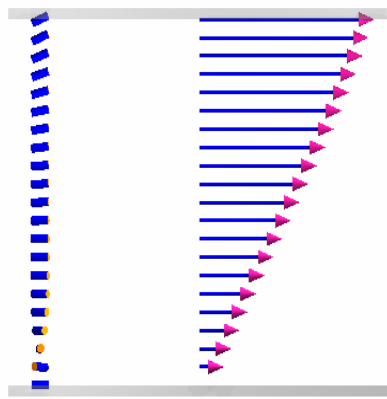
Fig.40-2 Behavior of director and velocity distribution for $Er=500$, $Ae=100$ of 8CB.



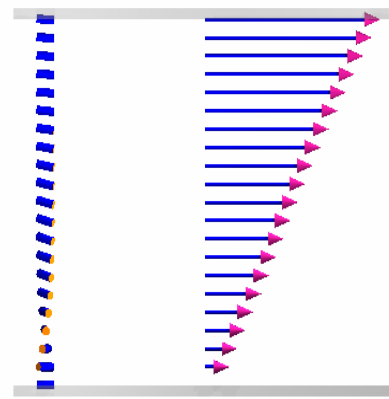
$t = 65$



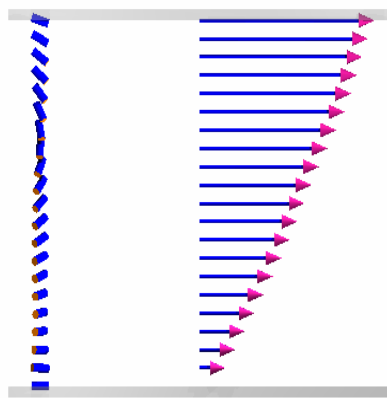
$t = 70$



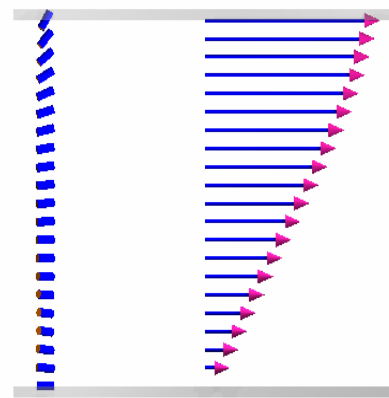
$t = 75$



$t = 80$



$t = 85$



$t = 90$

Fig.40-3 Behavior of director and velocity distribution for $Er=500$, $Ae=100$ of 8CB.

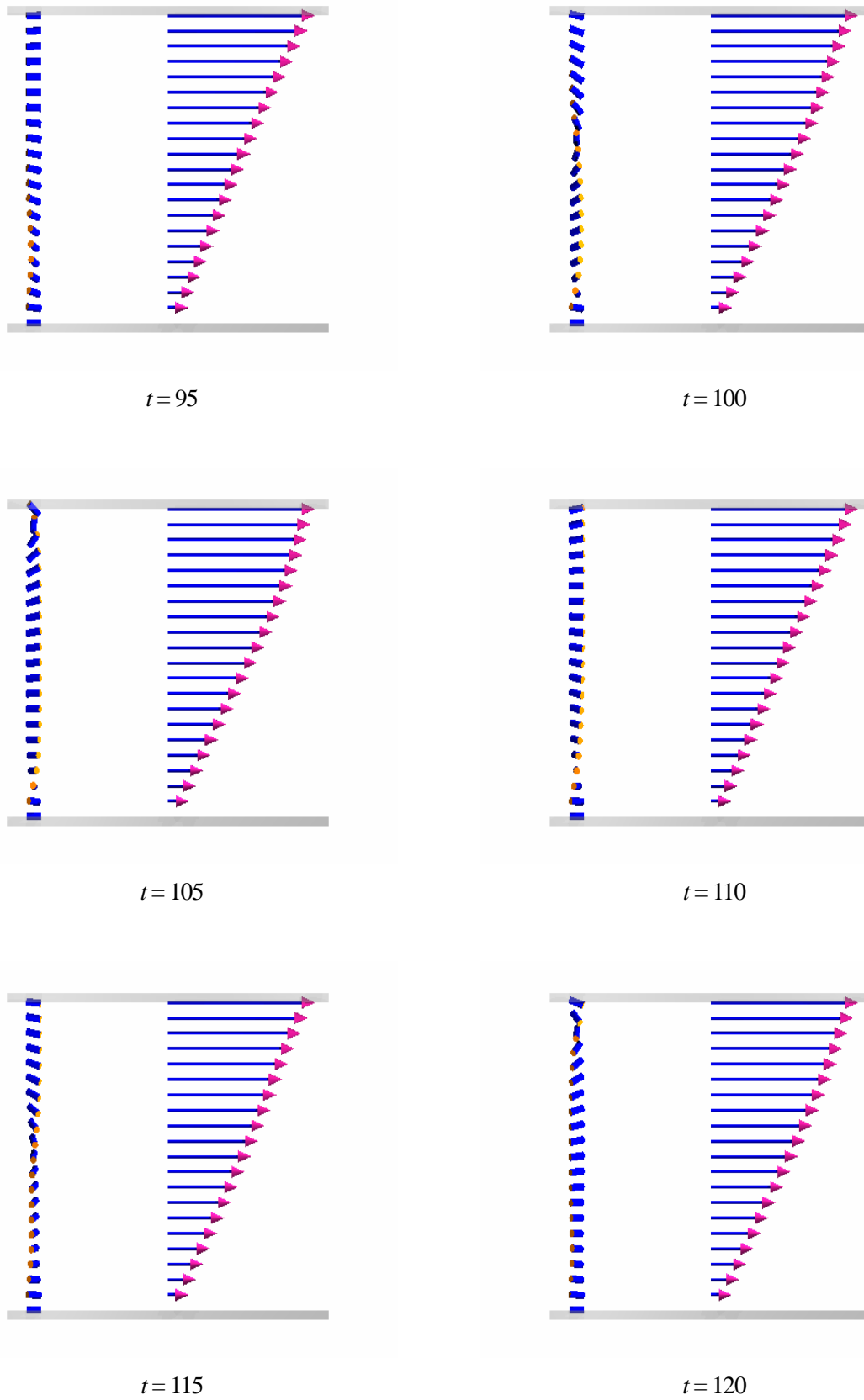
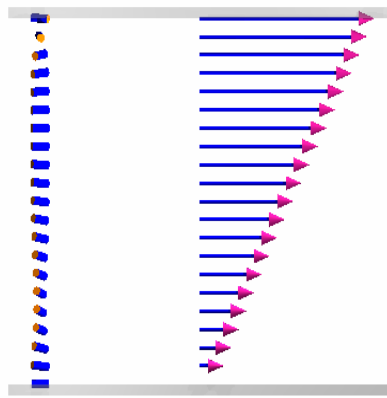
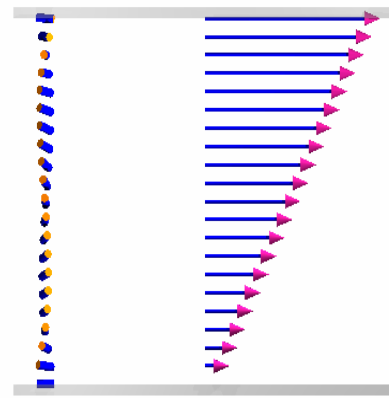


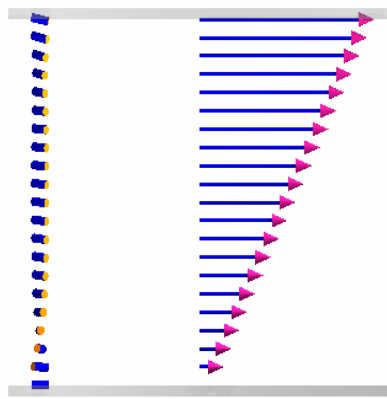
Fig.40-4 Behavior of director and velocity distribution for $Er=500$, $Ae=100$ of 8CB.



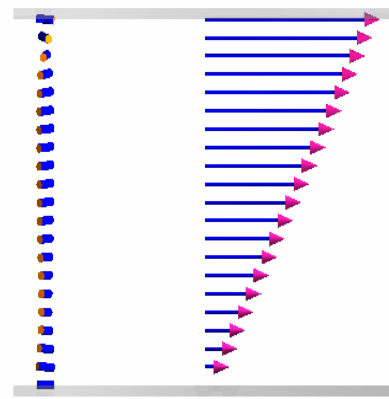
$t = 125$



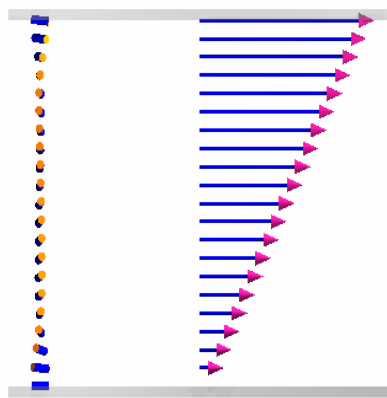
$t = 130$



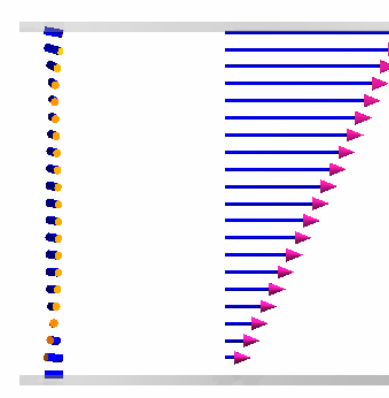
$t = 140$



$t = 150$



$t = 160$



$t = 170$

Fig.40-5 Behavior of director and velocity distribution for $Er=500$, $Ae=100$ of 8CB

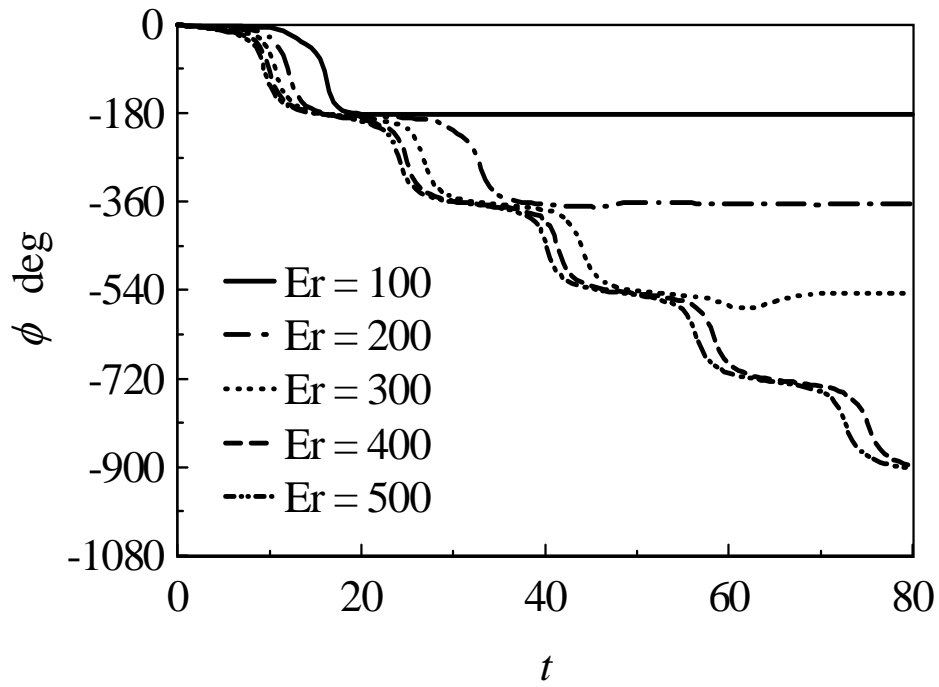


Fig.41-1 ϕ at the upper plate for $Ae=100$

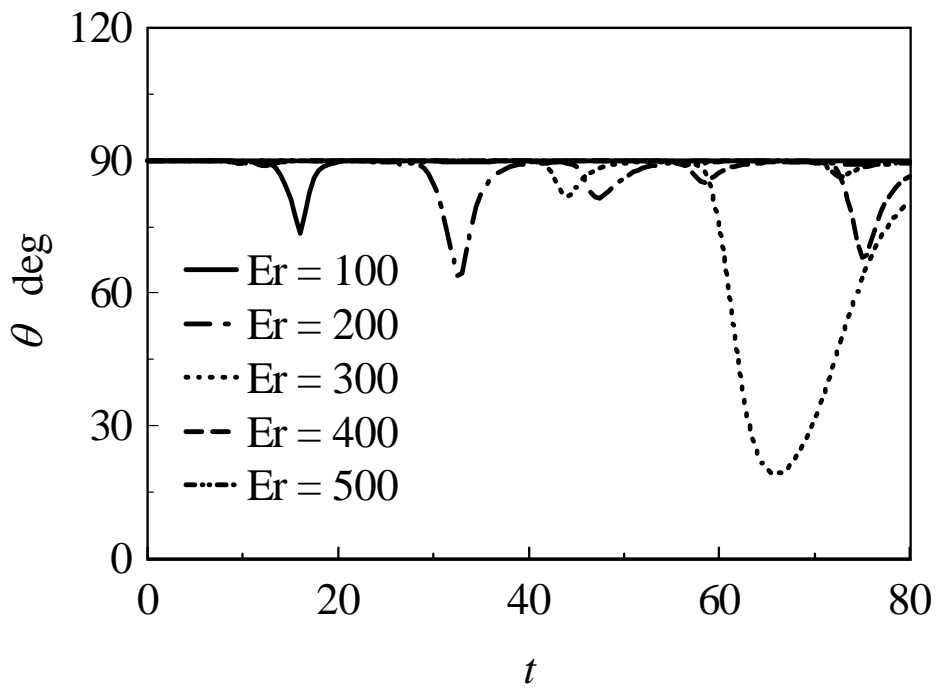


Fig.41-2 θ at the upper plate for $Ae=100$

3・2・2 速度場

図 42 に $Er = 100$, $Ae = 100$ の場合での無次元時間 t における x 方向速度の空間変化を示す。縦軸は平板間での位置を表し、 $y = 0$ で下部平板面、 $y = H = 1$ で上部平板面を表している。また、横軸は x 方向速度の空間勾配を表し、 $y = 0$ に下部平板面を固定させ、上部平板を x 方向に動かすことによって液晶に流動を発生させているので、下部平板 ($y = 0$) における x 方向速度が $u = 0$ 、上部平板面 ($y = H$) における x 方向速度が $u = 1$ となっている。 x 方向速度の空間勾配は無次元時間 t の経過と共に変化し、直線分布に波状分布が重なった分布をとり、ディレクタの x 軸からの配向角 ϕ が定常に至ると共にほぼ一定の状態に収束する。

図 43-1, 2 に $Er = 300$, $Ae = 100$ の場合での無次元時間 t における x 方向速度の空間変化を示す。 x 方向速度の空間勾配は無次元時間 t の経過と共に変化し、直線分布に波状分布が重なった分布をとり、ディレクタの x 軸からの配向角 ϕ が定常に至ると共にほぼ一定の状態に収束する。しかし、 $Er = 100$ の場合と比較して、速度勾配の変化は大きくなっている。これは下部平板面を除く平板間全体でせん断流効果が増大したために、ディレクタの配向状態が変化したことによって速度場に影響したからである。

図 44 - 1 ~ 4 に $Er = 500$, $Ae = 100$ の場合での無次元時間 t における x 方向速度の空間変化を示す。 x 方向速度の空間勾配は無次元時間 t の経過と共に変化し、直線分布に波状分布が重なった分布をとり、ディレクタの x 軸からの配向角 ϕ が定常に至ると共にほぼ一定の状態に収束する。しかし、 $Er = 100$ の場合と比較して、速度勾配の変化は大きくなっている。これは下部平板面を除く平板間全体でせん断流効果が増大したために、ディレクタの配向状態が変化したことによって速度場に影響したからである。

以上ことから速度の空間勾配は時間の経過と共に変化し、ディレクタの配向状態が変化すると速度分布は直線分布に波状分布が重なった分布をとる。そしてディレクタの配向状態が定常に至ると、速度分布も一定の状態に収束する。またエリクセン数 Er が大きくなるにつれて速度勾配の変化は大きくなった。これらのことから x 方向速度の空間変化はディレクタの x 軸からの配向角 ϕ の変化に依存していることが分かる。

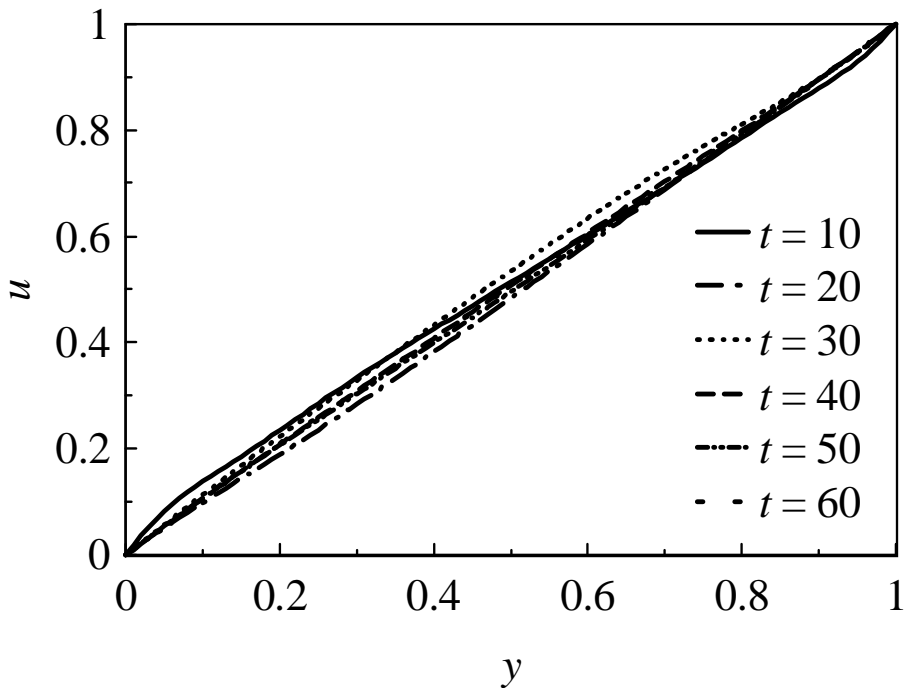


Fig.42 Velocity change profiles at $Er=100$, $Ae=100$

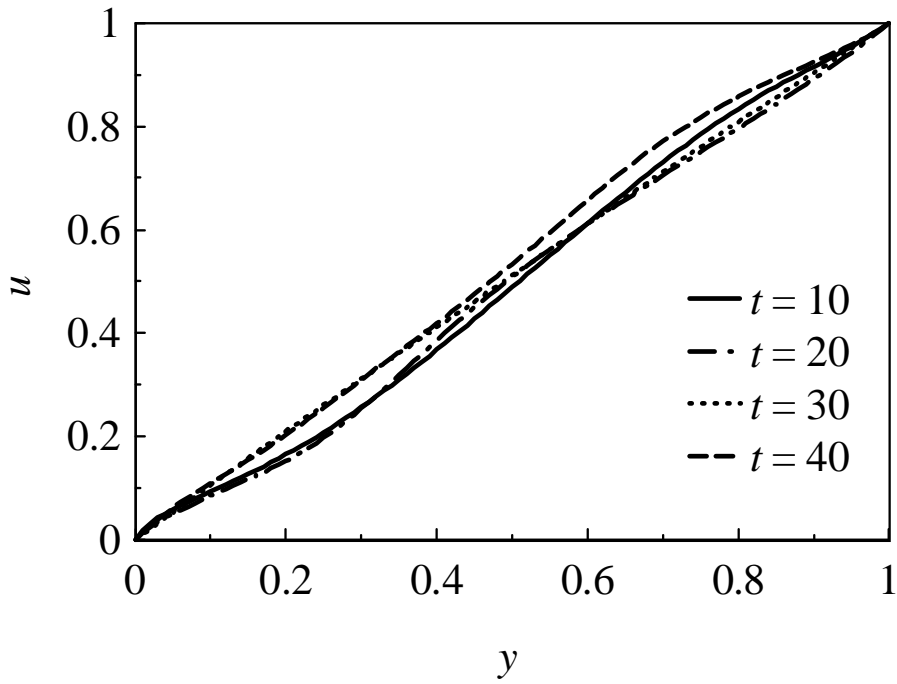


Fig.43-1 Velocity change profiles at $Er=300$, $Ae=100$

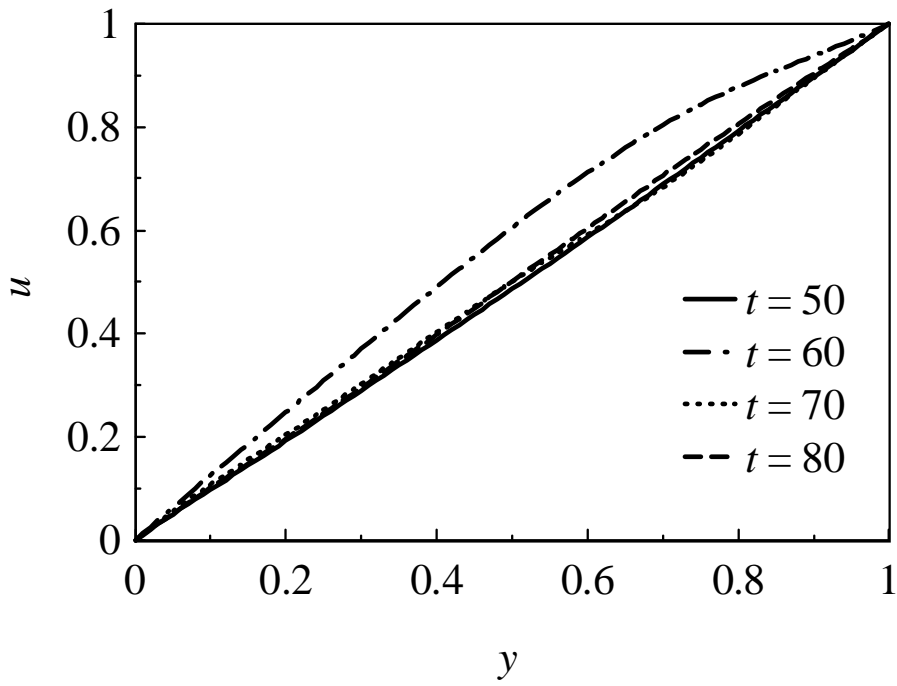


Fig.43-2 Velocity change profiles at $Er=300, Ae=100$

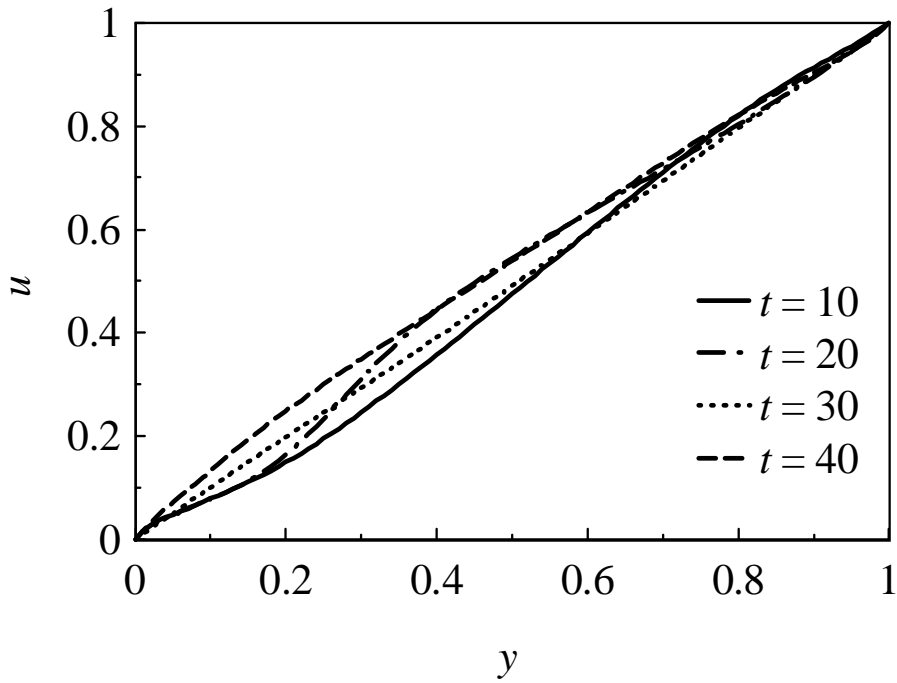


Fig.44-1 Velocity change profiles at $Er=500, Ae=100$

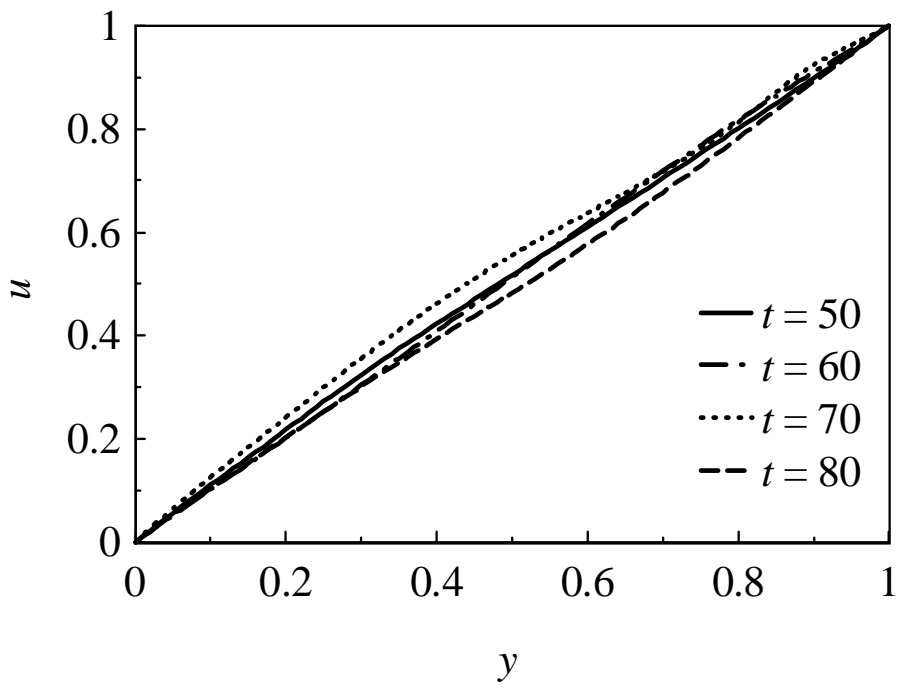


Fig.44-2 Velocity change profiles at $Er=500$, $Ae=100$

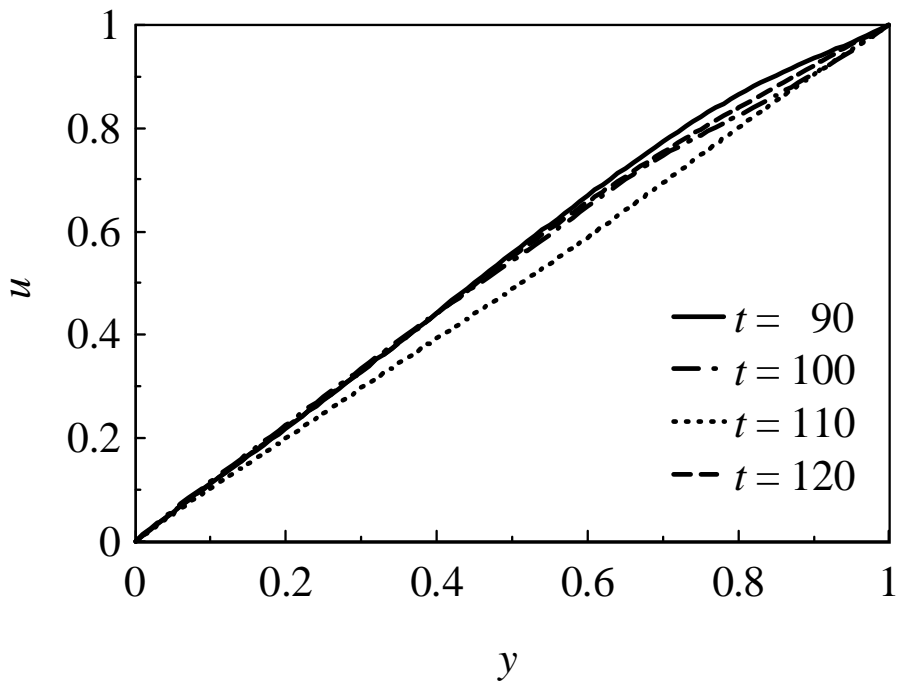


Fig.44-3 Velocity change profiles at $Er=500$, $Ae=100$

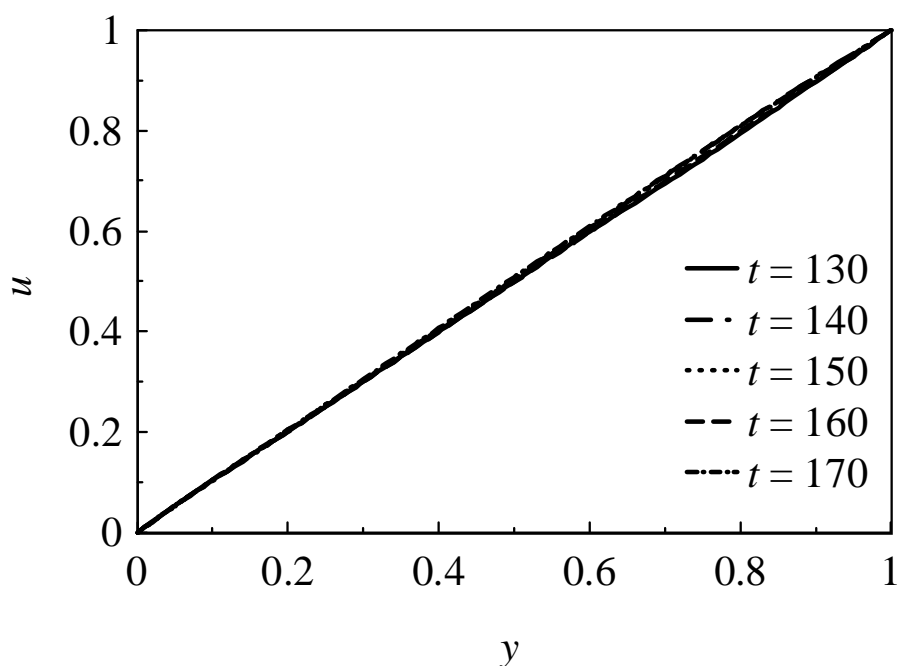


Fig.44-4 Velocity change profiles at $Er=500$, $Ae=100$

3・2・3 壁面配向強度

図 45-1 に $Er=500$ の場合の上部平板面におけるディレクタの x 軸からの角 ϕ の時間変化を示す。縦軸は x 軸からの配向角 ϕ ，横軸は無次元時間 t の変化を示している。初期配向の 0° からせん断を受け時計回りに回転を始め、 $Ae = 500, 400$ のとき $\phi = 0^\circ$ ， $Ae = 300$ のとき $\phi = -180^\circ$ ， $Ae = 200$ のとき $\phi = -540^\circ$ で上部平板面のディレクタの配向角度はそれぞれ定常に至っている。また $Ae = 100$ の場合は回転挙動を示し続けているが壁面の影響があるためやがて同様に定常に至ると予測される。

いずれの Ae においても上部平板面のディレクタの x 軸からの配向角 ϕ は階段状に減少し、 $-\pi$ の整数倍の角度で定常に至っている、これは上部平板面の境界条件が弱固定配向で、またその配向方向が x 方向であること、そしてディレクタが x 軸と平行になるときにディレクタに働くトルクが最小になることが起因している。なお定常に至ったディレクタの x 軸からの配向角 ϕ は時間が経過しても定常角度から変化することは無く定常状態を保つ。図 45-2 に $Er = 500$ の場合の上部平板面におけるディレクタの z 軸からの角度 θ の時間変化を示す。せん断流れを受け回転挙動を示していたディレクタが、上下平板面近傍で x - y 平面内(in-plane) から z 軸方向(out-of-plane) へと飛び出る現象は Ae が大きいほど

顕著に現れた。また壁面配向強度 A_e が高いほどせん断平面から逃れ、 z 軸方向へと傾くのに要する時間が増加することが分かる。また、 θ の負のピークは ϕ における急減少が生じる時間と一致している。

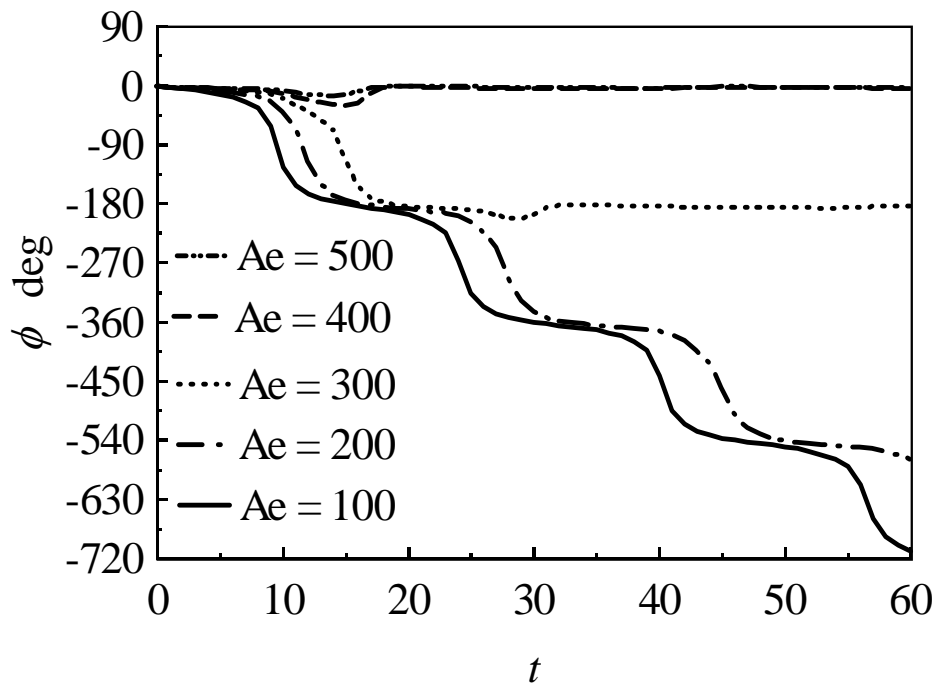


Fig. 45-1 The A_e effect for ϕ

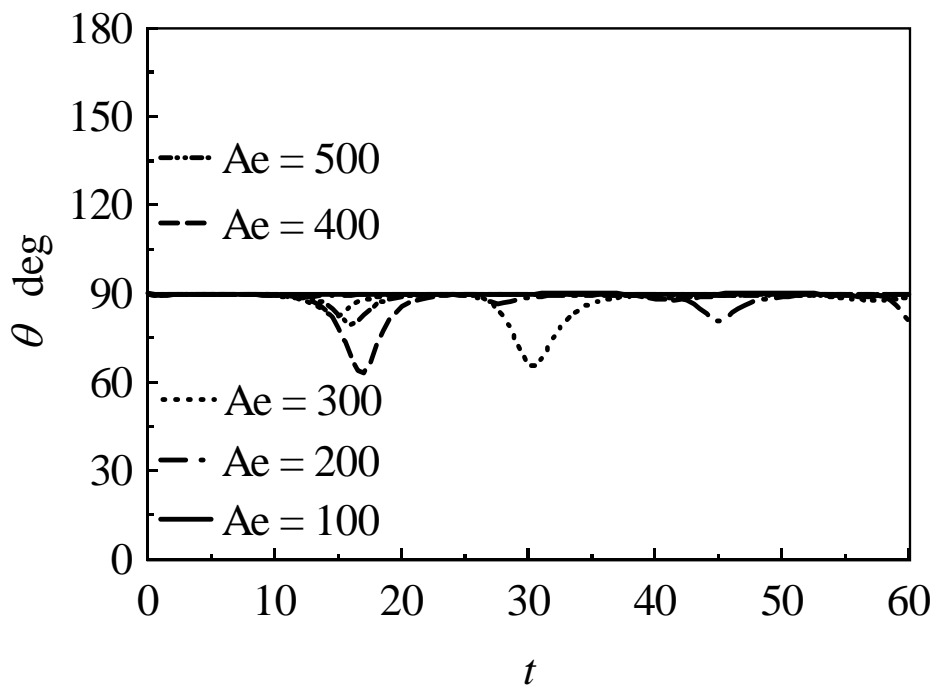


Fig. 45-2 The A_e effect for ϕ

3・2・4 分極値

図 46 は $A_e=100, E_r=100, 300, 500$ の場合におけるフレクソ効果によって生じる分極の y 方向成分の平板間積分値を表している。縦軸は分極の y 方向成分の平板間積分値、横軸は無次元時間である。フレクソ分極値は回転挙動に応じたパルス状に発生している。フレクソ分極は、第 2 章でも述べたように上下配向角の姿勢の差で決定され、そのため上下平板面における配向角が垂直状態になったときに最大になるので、上部平板面におけるディレクタ角が $\phi = -90^\circ \times n$ (n は奇数) を示す時間とフレクソ分極値のピークを示す時間が一致している。またフレクソ分極の定常値は、上部平板面におけるディレクタ角が $\phi = -180^\circ \times n$ (n は整数) で定常に至るために、上下平板面における配向角の姿勢に差が生じないので、殆どゼロとなっている。しかし、ディレクタの in-plane 仮定した場合と違い、壁面配向強度の影響がより強く出ているためディレクタは徐々に x - y 平面内(in-plane)から逃れ z 軸方向(out-of-plane)へと傾いていくため分極値も徐々に減少し、定常に至っている。

図 47 は $E_r=500, A_e=100, 300, 500$ の場合におけるフレクソ効果によって生じる分極の y 方向成分の平板間積分値を表している。縦軸は分極の y 方向成分の平板間積分値、横軸は無次元時間である。フレクソ分極値は図 51 の場合と同様にパルス状に発生している。フレクソ分極は、第 2 章でも述べたように上下平板面における配向角が垂直状態になったときに最大になるので、上部平板面におけるディレクタ角が $\phi = -90^\circ \times n$ (n は奇数) を示す時間とフレクソ分極値のピークを示す時間が一致している。またフレクソ分極の定常値は、上部平板面におけるディレクタ角が $\phi = -180^\circ \times n$ (n は整数) で定常に至るために、上下平板面における配向角の姿勢に差が生じないので、殆どゼロとなっている。

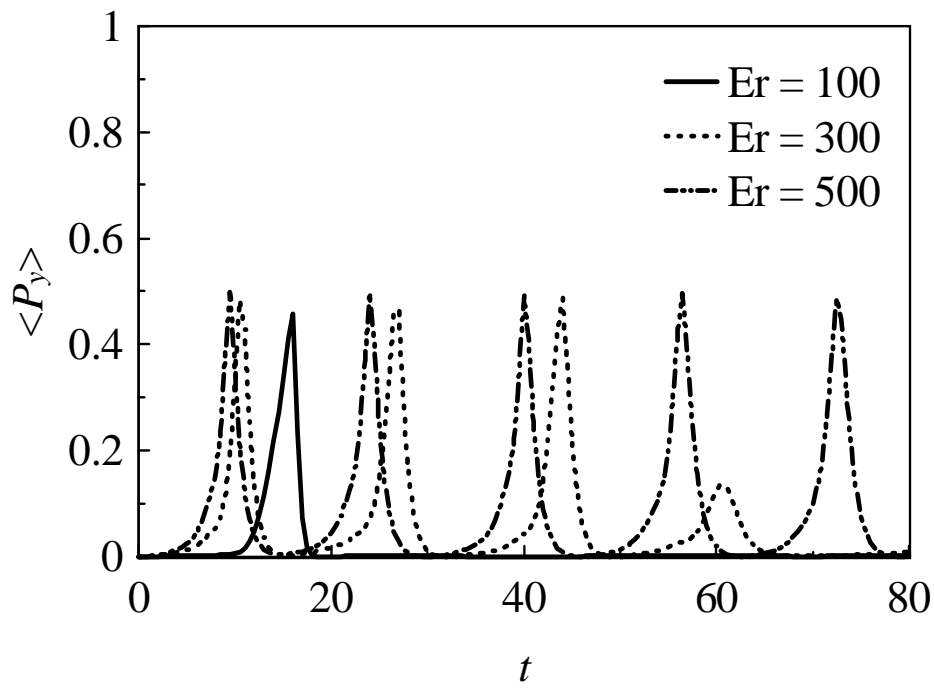


Fig. 46 Transition of flexoelectric polarization along y-direction for $Ae=100$.

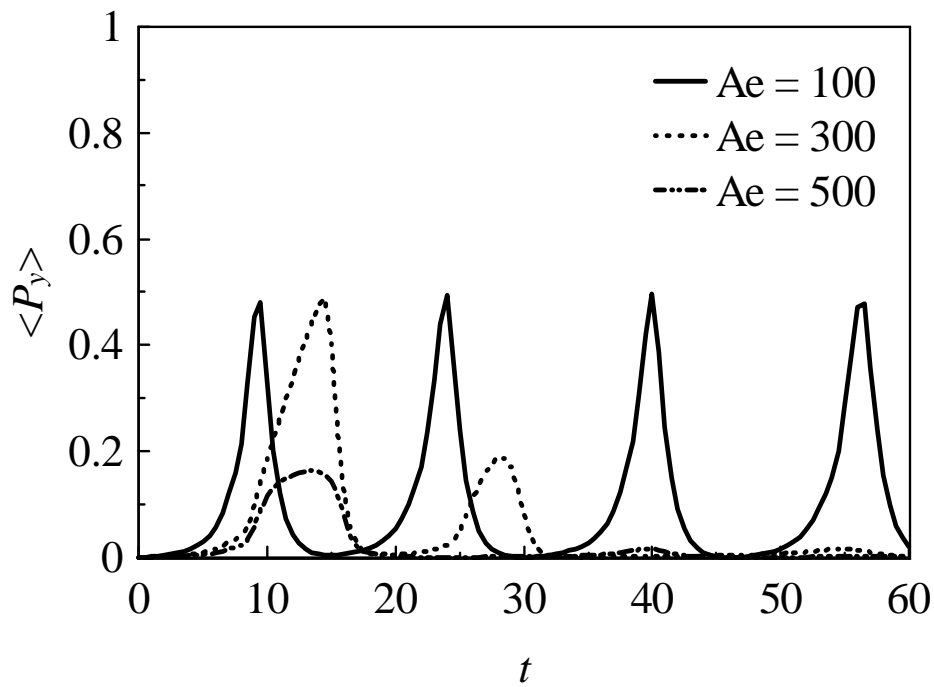


Fig. 47 Transition of flexoelectric polarization along y-direction for $Er=500$.

3・3 結言

第3章では液晶の圧電効果を利用した新しい圧電デバイスを開発することを目的とし、その基礎研究としてダイレクタの In-plane 仮定を排した場合の数値シミュレーションを行い、壁面配向強度及び上部平板のせん断速度がダイレクタの挙動と平板間の速度に与える影響、及びその計算結果よりもたらされるフレクソエレクトリック分極値について明らかにした。得られた結果を以下に示す。

- 1) ダイレクタの In-plane 仮定を排した場合、平行平板間のダイレクタは $x-y$ 平面内(in-plane)で回転挙動(タンブリング挙動)を示し、十分に時間が経過した後、壁面配向強度に応じた定常角に達した。また、ダイレクタに対して壁面配向強度が強く影響を及ぼした場合、ダイレクタが $x-y$ 平面内(in-plane)から z 軸方向(out-of-plane)へ傾く挙動を示した。
- 2) 数値シミュレーションより得られたダイレクタの配向より、各条件に応じたパルス状の分極が確認された。また壁面配向強度、及び上部壁面のせん断速度を変化させることで、上部平板のダイレクタの定常に至るときの配向角を任意の角度に配向させることが可能である。
- 3) 壁面配向強度、及び上部壁面のせん断速度を変化させることで、任意の分極を得られる、電圧の調整が出来るということにつながる。

以上のことから液晶の圧電効果を用いた圧電デバイスの開発が可能であると考えられる。

第4章 総括

本研究において、第二章では In-plane 仮定を用いた場合の平行平板間せん断流中におけるネマティック液晶の流動誘起型フレクソエレクトリック効果についての数値シミュレーションを行った。得られた結果を以下にまとめる。

- 1) フレクソエレクトリック分極は上下平板面における配向角の姿勢の差に依存するので、回転挙動を示すタンブリング液晶の方がアライニング液晶に比べ分極が大きく発生する。
- 2) 流動によって誘起される平板間分極値は、エリクセン数 E_r 及び壁面配向束縛力 A_e に依存する。言い換えると、エリクセン数 E_r 及び壁面配向束縛力 A_e を変化させることによって誘起される分極値をコントロールすることができる。
- 3) アライニング液晶とタンブリング液晶を比較した場合、アライニング液晶における分極値の時間変化は単調であるのに対して、タンブリング液晶ではエリクセン数 E_r に依存して分極値が大きなピークを示す。
- 4) タンブリング液晶の場合、弱アンカリング (weak anchoring) が施された上部平板面におけるディレクタ角が π の整数倍の値で定常に至る。そのため分極値の定常値は低い値をとる。
- 5) タンブリング液晶の場合、上部平板面における配向角は高エリクセン数 E_r (低壁面配向束縛力 A_e) に対して不連続な増加を示す。
- 6) エリクセン数 E_r と壁面配向束縛力 A_e が分極に及ぼす影響は、ほぼ逆の関係になる。

本研究で第三章では In-plane 仮定を用いない場合の平行平板間せん断流中におけるネマティック液晶の流動誘起型フレクソエレクトリック効果についての数値シミュレーションを行った。得られた結果を以下にまとめる。

- 1) 平行平板間のディレクタは $x-y$ 平面内(in-plane)で回転挙動(タンブリング挙動)を示し、十分に時間が経過した後、壁面配向強度に応じた定常角に達した。また、ディレクタに対して壁面配向強度が強く影響を及ぼした場合、ディレクタが $x-y$ 平面内(in-plane)から z 軸方向(out-of-plane)へ傾く挙動を示した。
- 2) 数値シミュレーションより得られたディレクタの配向より、各条件に応じたパルス状の分極が確認された。また壁面配向強度、及び上部壁面のせん断速度を変化させることで、上部平

板における定常に至る配向角を任意の角度に配向させることが可能である。

- 3) 壁面配向強度，及び上部壁面のせん断速度を変化させることで，任意の分極を得られる，電圧の調整が出来るということにつながる。

以上のことから液晶の圧電効果を用いた圧電デバイスの開発が可能であると考えられる。

謝辞

本研究を遂行するにあたり，終始，多大なるご指導を賜りました高知工科大学知能機械システム工学科蝶野成臣教授，ならびに辻知宏助教授に対し，深く感謝いたします．また高知工科大学知能機械システム工学科知能流体力学研究室の皆様方にはご援助，ご協力を賜りましたことを深く感謝いたします．