

## ネマティック液晶の欠陥対消滅過程の数値解析

## Numerical Analysis of Annihilation Process of a Paired Nematic Liquid Crystalline Defects

- 田村 匡史, 高知工科大院, 高知県香美市土佐山田町, 135030h@gs.kochi-tech.ac.jp:  
 辻 知宏, 高知工科大, 高知県香美市土佐山田町, tsuji.tomohiro@kochi-tech.ac.jp:  
 蝶野 成臣, 高知工科大, 高知県香美市土佐山田町, chono.shigeomi@kochi-tech.ac.jp:  
 Tadashi Tamura, Graduate School of Kochi Univ. Tech., Tosayamada-cho, Kami-shi, Kochi  
 Tomohiro Tsuji, Kochi Univ. Tech., Tosayamada-cho, Kami-shi, Kochi  
 Shigeomi Chono, Kochi Univ. Tech., Tosayamada-cho, Kami-shi, Kochi

The numerical analysis of the annihilation process of a paired nematic liquid crystalline defects has been performed using the Doi theory with the Marrucci-Greco nematic potential. The defects with the defect strength  $+1/2$  or  $-1/2$  have an orientation, since they do not show the rotational symmetry of the molecular orientation configuration. When the orientation of one of the paired defects is rotated at the initial state, the defect shows both translational and rotational motions during the annihilation process and the path of the defects is complex in comparison with the case that the defect is not rotated. It is found that the liquid crystalline flow is induced not only by the translational motion of the defects, but also by the rotational motion of the defects.

## 1. 緒言

液晶欠陥とは、液晶分子の配向分布が乱れた構造を指し、熱や電場などの印加に伴い液晶中に発生することが知られている。対の分子配向分布を持つ欠陥同士は互いに引き寄せ合い、最終的に対消滅する。この対消滅過程において、配向分布の変化に伴い流動が発生する。欠陥対消滅時に誘起される流動を利用することで、新たな液晶デバイスを開発できると考えられる。

液晶欠陥対消滅過程に関するこれまでの研究では、欠陥が並進運動をする場合のみを取り扱ってきた。しかし、幾何学的に回転対象性を持たない欠陥構造に回転を与えた状態で配置すると、欠陥は対消滅過程において回転運動を示すと考えられる。そこで本研究では、回転対象性を持たない欠陥に回転を与えた構造での対消滅過程を数値解析により明らかにする。

## 2. 基礎方程式と数値計算

本研究では速度場の計算には連続の式、運動方程式に流れ関数-渦度法を適用し、計算する。分子配向場の計算には、配向分布関数  $f$  を用いる。以下に配向分布関数の時間発展方程式<sup>(1)</sup>を示す。

$$\frac{Df}{Dt} = \bar{D}\nabla_{\mathbf{u}} \cdot \left( \nabla_{\mathbf{u}} f + \frac{f}{kT} \nabla_{\mathbf{u}} V \right) - \nabla_{\mathbf{u}} \cdot \{ f(\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{u} - \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{u}) \} \quad (1)$$

式中の  $t$  は時間、 $D/Dt$  は実質微分、 $\bar{D}$  は回転拡散係数、 $\nabla_{\mathbf{u}}$  は単位球面上での微分演算子、 $k$  はボルツマン定数、 $T$  は絶対温度、 $V$  はネマティック Marrucci-Greco ポテンシャル<sup>(2)</sup>、 $\boldsymbol{\kappa}$  は速度勾配テンソル、 $\mathbf{u}$  は着目した棒状の液晶分子に平行な単位ベクトルである。また、物理空間 1 点での配向分布関数を離散化により求めると多大な計算時間を要するため、球面調和関数  $Y_{lm}(\mathbf{u})$  の有限級数を用いて以下のように近似し<sup>(3)</sup>、計算を行う。

$$f(x, z, t; \mathbf{u}) = \sum_{l=0}^{l_{\max}} \sum_{m=-l}^l C_{lm}(x, z, t) Y_{lm}(\mathbf{u}) \quad (2)$$

式中の  $C_{lm}(x, z, t)$  は  $Y_{lm}(\mathbf{u})$  の係数、 $l_{\max}$  は方位量子数の最大値で級数解の項数を決定するパラメータである。

本研究では図 1(a)に示すように  $x, z$  方向に長さ  $H$  の 2 次元正方形領域を考える。図中の線分は、その位置での液晶分子の平均的な配向方向を示す。領域中の座標 A, B にそれぞれ欠陥強度  $s = \pm 1/2$  の欠陥構造を発生させ、回転を与えた状態を初期配向とす。図 1(b)は初期配向での分子配向場を示す。

## 3. 計算結果および考察

図 2 は欠陥の  $z$  方向位置の時間変化である。図より右側の欠陥位置は左側の欠陥位置よりも下方を通過し、対消滅に至っている。図 1(b)において欠陥核間の明視野領域は  $z = 0.5H$  から大きく下方に歪んでいる。欠陥対消滅過程では、欠陥核は明視野に沿って移動する傾向にあり、欠陥位置は下方へ移動すると考えられる。

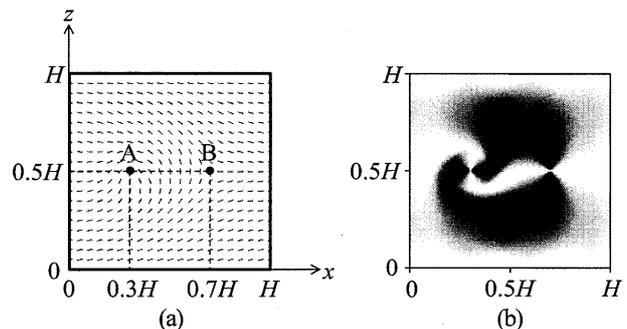


Fig. 1 Coordinate system and initial defects position and molecular orientation fields

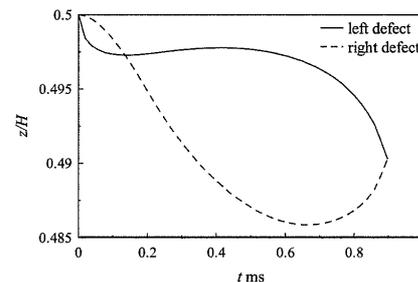


Fig. 2 Position of the defects as a function of time

## 4. 結言

本研究では幾何学的に回転対象性を持たない、 $s = \pm 1/2$  の欠陥構造に、例えば磁場や電場を用いて回転を与えた場合についての、欠陥対消滅過程の数値解析を行った。その結果、対欠陥は並進的な挙動に加え、回転を含んだ挙動を示すことが確認された。

## 参考文献

- (1) Doi, M., J. Poly. Sci., Poly. Phys. Ed., 19(1981), 229  
 (2) Marrucci, G and Greco, F., Mol. Cryst. Liq. Cryst., 206(1991), 17.  
 (3) Larson, R. G. Macromolecules, 23(1990), 3983.