

液晶ディスプレイにおける液晶分子配向の基礎研究

岡野 光治

東京大学 名誉教授

信州大学教育学部 教授

1. はじめに

液晶ディスプレイ (LCD) は現在OA機器などに広く用いられているが、薄膜トランジスタ (TFT) 技術と結合して21世紀の高度情報化社会を支えるキーデバイスとして現在活発な研究開発が行われている。

本研究の目的はLCDの基礎研究の一環として、液晶表示セル基板面の凹凸や配向束縛 (アンカリング) 特性の不連続変化にともなう液晶分子配向場のみだれを関数論の手法により解析することである。

2. 配向場の等角写像

関数論の適用を可能にするために本研究では次の場合を取扱う: 1)液晶の配向場は座標 X, Y のみの関数であって、 XY 面に垂直な方向に関しては配向場は一様であるとする。2)フランクの弾性定数 K_1, K_2, K_3 はいずれも等しい値 (それを K とする) を持つものとする (一定数近似)。

液晶分子の配向方向を表わす単位ベクトルを配向ベクトル (director) という。本報告では配向ベクトル \vec{n} は XY 面内の成分のみを持ち

$$\vec{n} = (\cos\phi, \sin\phi, 0) \quad (1)$$

のように表わされる場合について記述する。しかし、以下の解析は

$$\vec{n} = (\cos\phi, 0, \sin\phi) \quad (2)$$

の場合についてもそのまま成り立つ、いずれの場合にも $\phi (X, Y)$ は \vec{n} が X 軸となす角である。

一定数近似のもとでは平衡状態の配向角 ϕ は与えられた境界条件のもとでラプラスの方程式:

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = 0 \quad (3)$$

をみたす調和関数である⁽¹⁾。そこで、複素座標 $Z = x + iy$ を導入し、 Z の任意の正則関数 Φ を考えると、関数論の基本定理から Φ の実部、虚部ともに(3)を満足するが、以下においては虚部が境界条件をみたすような正則関数を考える。すると、 Φ の虚部が配向場を与える。しかし、 Z 平面上で虚部が境界条件をみたす正則関数を直接求めることは必ずしも容易ではない。そこで、 Z の適当な正則関数:

$$w = f(z), w = u + iv \quad (4)$$

により w 平面に写像する。 w 平面で虚部が境界条件をみたす正則関数 $\Phi(w)$ が見つかったとすると、独立変数を Z へもどし

$$\Phi(f(z)) = \varphi + i\phi \quad (5)$$

とすれば、虚部 ϕ は Z 平面で境界条件をみたす調和関数、すなわち平衡状態の配向角である。このとき、配向場の歪みの弾性エネルギー F は Φ の実部と虚部を用いて

$$F = \frac{1}{2}K \iint \left\{ \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \phi}{\partial y} \right)^2 \right\} dx dy = \frac{1}{2}K \iint d\varphi d\phi \quad (6)$$

により計算される。

3. アンカリング特性の不連続線と配向場

平坦な基板面を持つ厚さ d の液晶セルを考える。上下の基板面をそれぞれ Z 平面上の直線 $y = d$ 、および $y = 0$ (x 軸) に対応させる。この場合

$$w = \exp\left(\frac{\pi}{d}z\right) \quad (7)$$

による写像が便利である。(7)式は Z 平面上の液晶領域 $0 \leq y \leq d$ を w 平面の上半分 ($v \geq 0$) に写像する。その際、下の基板に対応する x 軸は u 軸の右半分 ($u > 0$) に、また、上の基板に対応する直線 $y = d$ は u 軸の左半分 ($u < 0$) に写像される。以下、具体例として「上下の基板面において、 $|x| < a$ で $\phi = 0$ 、 $|x| > a$ で $\phi = \frac{\pi}{2}$ 」の場合を取扱ってみよう。

w 平面における境界条件は、 u 軸上の条件：

$$\left. \begin{aligned} \exp\left(\frac{\pi}{d}a\right) < |u| \quad & \text{で} \quad \phi = \frac{\pi}{2}, \\ \exp\left(-\frac{\pi}{d}a\right) < u < \exp\left(\frac{\pi}{d}a\right) \quad & \text{で} \quad \phi = 0, \\ |u| < \exp\left(-\frac{\pi}{d}a\right) \quad & \text{で} \quad \phi = \frac{\pi}{2}, \\ -\exp\left(\frac{\pi}{d}a\right) < u < -\exp\left(-\frac{\pi}{d}a\right) \quad & \text{で} \quad \phi = 0 \end{aligned} \right\} (8)$$

となる。虚部がこの条件をみたすwの正則関数は容易にみつき、(7)式を用いてZ平面にもどすと

$$\Phi = -\frac{1}{2} \log \tanh \frac{\pi}{2d}(z-a) + \frac{1}{2} \log \tanh \frac{\pi}{2d}(z+a) + \frac{\pi}{d}i \quad (9)$$

をうる。これにより配向角は

$$\phi = \text{Im}\Phi = \frac{\pi}{2} - \frac{1}{2} \tan^{-1} \left\{ \frac{\sin \frac{\pi}{d}y}{\sinh \frac{\pi}{d}(x-a)} \right\} + \frac{1}{2} \tan^{-1} \left\{ \frac{\sin \frac{\pi}{d}y}{\sinh \frac{\pi}{d}(x+a)} \right\} \quad (10)$$

となる。ただし、 \tan^{-1} は0と π の間の分枝をとる。計算された配向場を図1に示す。

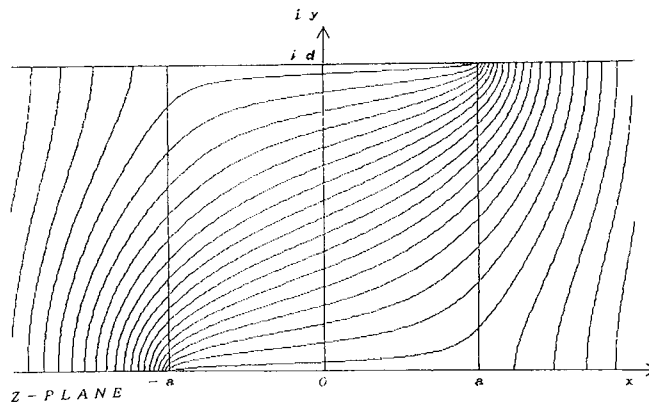


図1

図から明らかなように、基板面におけるアンカリングの不連続線は指数 $\pm \frac{1}{2}$ の表面転傾(surface disclination)になっている。なお、同じ境界条件をみたす図2のような配向場も存在する。

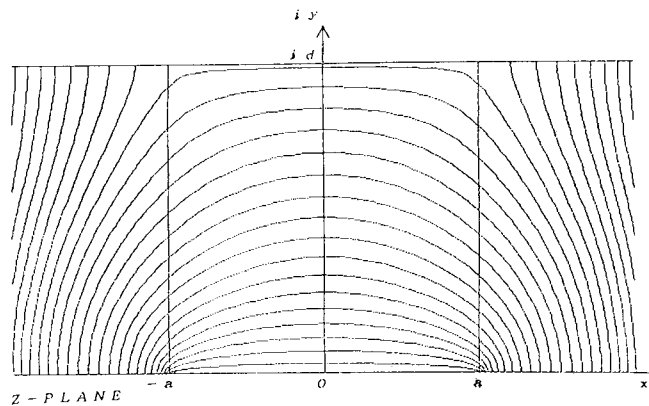


図2

しかし、弾性エネルギーを計算すると、この場合のエネルギーは図1の配向場合のそれより高く、実際に発現する配向場は図1のそれである。このことは、図2の場、符号の等しい表面転傾が隣合っていることから物理的に明かである。

4. Schwarz-Christoffel変換の応用

Z平面上の多角形領域をw平面上の上半分に写像するSchwarz-Christoffel変換⁽²⁾を用いると基板上の凹凸や角の存在にともなう配向場のみだれを解析することができる。その例を以下に示す。

(4-1) 基板上に厚さが無視できる高さ ℓ の突起がある場合 (図3 a)

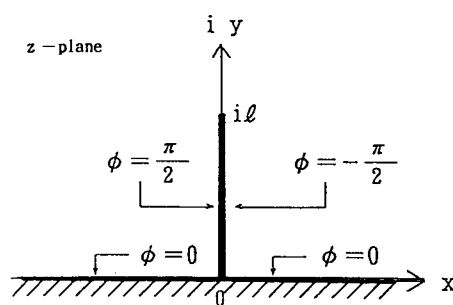


図3 a

図3 aの領域をw平面の上半分に写像する正則関数はSchwarz-Christoffelの方法により

$$z = \ell \sqrt{w^2 - 1} \quad (11)$$

と求まる。図3 aに示されたZ平面上の境界条件は、w平面では図3 bに示すようなu軸上の条

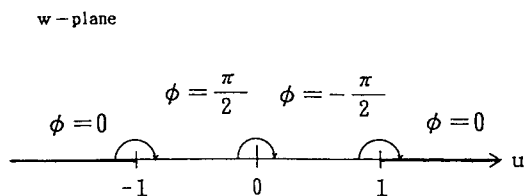


図3 b

件に写像される。これをみたす正則関数は

$$\Phi = -\frac{1}{2} \log(w+1) + \log w - \frac{1}{2} \log(w-1) \quad (12)$$

とみっかり、写像関数(11)式を用いると、

$$\Phi(z) = -\log \frac{z}{\ell} + \frac{1}{2} \log \left\{ \left(\frac{z}{\ell} \right)^2 + 1 \right\} \quad (13)$$

となる。これより配向角は

$$\phi = \text{Im} \Phi = -\tan^{-1} \frac{y}{x} + \frac{1}{2} \tan^{-1} \frac{y-\ell}{x} + \frac{1}{2} \tan^{-1} \frac{y+\ell}{x} \quad (14)$$

となる。これは、無限にひろがった液晶中の原点 $(0, 0)$ に指数 -1 の転傾が、また点 $(0, \ell)$ および $(0, -\ell)$ にそれぞれ指数 $+\frac{1}{2}$ の転傾が存在する場合の配向場と同じであることを示している。計算された配向場を図4に示す。なお、物理的に同じ境界条件に対して、図5のような配向場もまた可能である。しかも、この場合の歪みの弾性エネルギーは図4の場合と同じである。

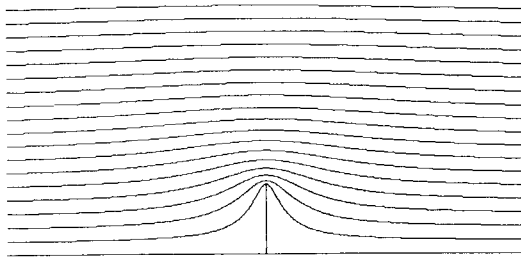


図4

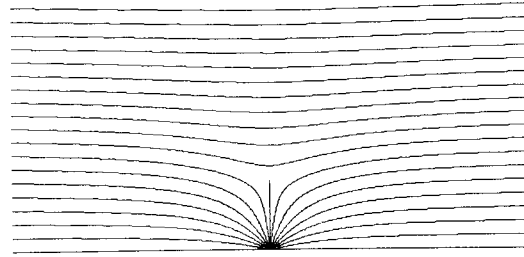


図5

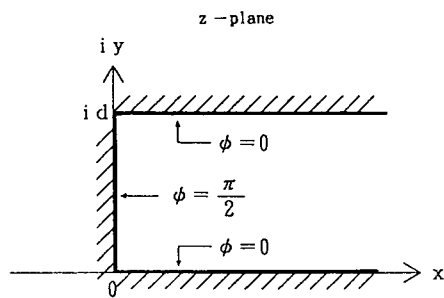


図6 a

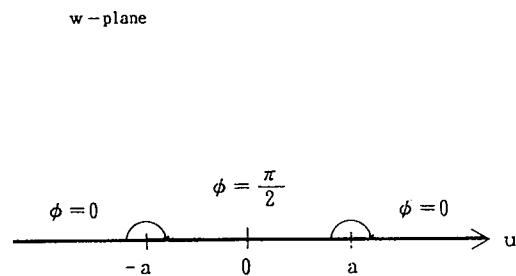


図6 b

(4-2) セルの角による配向場のみだれ

図 6 a の半無限の長方形領域を w 平面の上半分に写像する関数は Schwarz-Christoffel の方法により

$$w = a \cosh \frac{\pi}{d} z \quad a \text{ は正の実数} \quad (15)$$

と求まる。一方、 w 平面上の境界条件 (図 6 b) をみたす正則関数は

$$\Phi = -\frac{1}{2} \log(w+a) + \log(w-a) \quad (16)$$

とみつき、写像関数(15)式を用いて Z 平面にもどすと

$$\Phi(z) = \log \tanh \frac{\pi}{2d} z \quad (17)$$

となる。配向角は

$$\phi = \text{Im } \Phi = \tan^{-1} \left(\frac{\sin \frac{\pi}{d} y}{\sinh \frac{\pi}{d} x} \right) \quad (18)$$

となる。ここでも \tan^{-1} は 0 と π の間の分枝をとる。計算された配向場を図 7 に示す。この場合にも、物理的に同等な境界条件に対して異なる配向場、図 8、図 9 が存在する。しかし、図 8、図 9 の配向場の歪の弾性エネルギーは無限大で、これらの配向場が実現することはない。

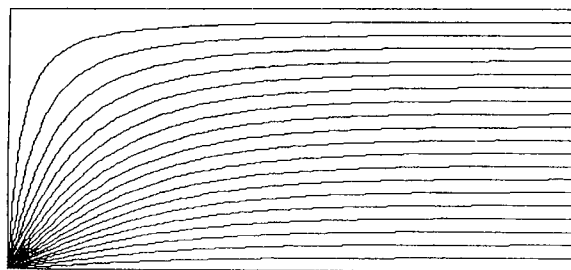


図 7

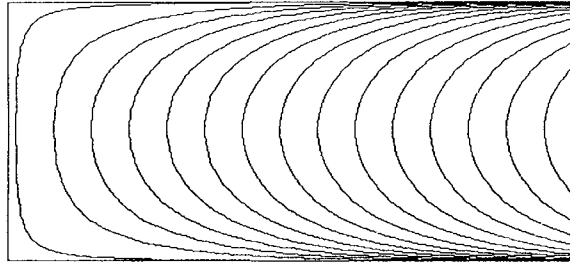


図 8

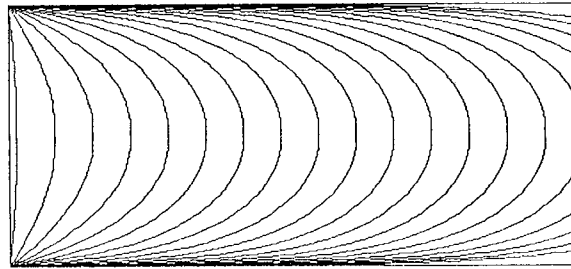


図 9

5. おわりに

ここに定式化した液晶の配向場の解析への関数論の応用は、正則関数 Φ の虚部 ψ のみが（配向角という）物理的な意味を持ち、実部 ϕ は物理的な対応物を持たないという点で、流体力学や電磁気学への応用ほど直接的ではない。しかし、実部 ϕ は(6)式によって、その領域の境界がエネルギーの計算に必要であるという点で、間接的ではあるが物理的に重要な役割をはたしている。配向場を数値計算法によって直接計算することも可能であるが、本研究の方法は、それが適用可能な場合には物理的な見通しを与える点ですぐれていると思う。

最後に、多大なご支援をいただいた(財)高柳記念電子科学技術振興財団および財団の関係者の皆様に厚く御礼申し上げます。

参考文献

- [1] P. G. de Gennes: The Physics of Liquid Crystals, Oxford Univ. Press, 1974.
- [2] R. V. Churchill, J. W. Brown and R. F. Verhey: Complex Variables and Applications, 3rd Ed., McGraw-Hill Inc., 1974.