

卒業論文要旨

ネマティック液晶の平行円板間せん断流れの数値シミュレーション

システム工学群

流体工学研究室 1200028 岩城 凌真

1. 緒言

近年 MEMS に注目が集まっている中で、液晶の力学的性質を利用したアクチュエータの研究が進められている。液晶アクチュエータは、複雑な機構を必要としないため小型化が容易である。

液晶を用いたアクチュエータの一つとして、液晶平板アクチュエータがある。液晶平板アクチュエータの駆動原理は、平行平板間に満たした液晶材料に電場をかけることで、背流と呼ばれる液晶流動を発生させ、その際に平板壁面にかかるせん断応力により平板が動くことによる。したがって、液晶アクチュエータの駆動特性を明らかにするうえで粘度は重要な物性値であるといえる。

液晶は、流れ方向に対する分子の方向によって粘度が変化する。液晶の粘度は回転粘度計を使用し計測しており、回転粘度計における平行円板間の分子配向状態を明らかにすることは粘度測定において重要である。しかし、粘度測定中の液晶の配向方向を計測することは容易ではない。

そのため、本研究では平行円板間での液晶の配向状態の可視化を試みる。現在液晶アクチュエータの研究で主に使われているネマティック液晶を想定し、平行円板間にせん断流れと電場をかけた状態での数値シミュレーションを行う。

2. 基礎式および計算方法

ネマティック液晶の流れを表す基礎式として、ネマティック液晶の流動解析に広く使用されている Leslie-Ericksen 理論を用いている。以下の式は連続の式、運動方程式、角運動方程式、構成方程式である。

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (1)$$

$$\rho \left\{ \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \right\} = (\varepsilon_{\perp} \mathbf{E} + \Delta \varepsilon \mathbf{E} \cdot \mathbf{E}) \cdot \nabla \mathbf{E} - \nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} \quad (2)$$

$$\mathbf{n} \times \left\{ \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{n}} - \nabla \left(\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \nabla \mathbf{n}} \right) - \Delta \varepsilon \mathbf{n} \cdot \mathbf{E} \mathbf{E} + (\alpha_3 - \alpha_2) \mathbf{N} + (\alpha_3 + \alpha_2) \mathbf{A} \cdot \mathbf{n} \right\} = 0 \quad (3)$$

$$\boldsymbol{\tau} = \alpha_1 \mathbf{n} \mathbf{n} \mathbf{n} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{n} + \alpha_2 \mathbf{n} \mathbf{N} + \alpha_3 \mathbf{N} \mathbf{n} + \alpha_4 \mathbf{A} + \alpha_5 \mathbf{n} \mathbf{n} \cdot \mathbf{A} + \alpha_6 \mathbf{A} \cdot \mathbf{n} \mathbf{n} - \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \nabla \mathbf{n}} \cdot (\nabla \mathbf{n})^T \quad (4)$$

ここで \mathbf{v} は速度ベクトル、 ρ は流体の密度、 p は圧力、 $\boldsymbol{\tau}$ は偏差応力テンソル、 \mathbf{E} は電場ベクトル、 $\alpha_1 \sim \alpha_6$ は Leslie 粘性係数、 \mathbf{n} は液晶分子の平均的方向を意味するディレクタを表す単位ベクトル、 $\Delta \varepsilon = \varepsilon_{\parallel} - \varepsilon_{\perp}$ は誘電率の異方性、 ε_{\perp} および ε_{\parallel} はそれぞれディレクタに垂直、および平行方向の誘電率、 \mathbf{A} および \mathbf{N} はそれぞれ変形速度テンソルおよびディレクタと流体との相対角速度ベクトルである。 F はディレクタ場の空間歪み

による自由エネルギー密度であり、

$$2F = K_1 (\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + K_2 (\mathbf{n} \cdot \nabla \times \mathbf{n})^2 + K_3 |\mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n}|^2 \quad (5)$$

と表される。ここで K_1, K_2, K_3 はそれぞれディレクタの空間的広がり変形、ねじれ変形、曲がり変形を表す弾性定数である。以上の式の離散化には中心差分法を使用、初期条件は全ての液晶のディレクタは垂直配向であるとし、平行円板壁面は常に垂直配向で固定している。

数値シミュレーションによる、誘電率、Leslie 粘性係数、弾性定数の物性値は、4-Cyano-4'-pentylbiphenyl (5CB)、4-Cyano-4'-n-octylbiphenyl (8CB) であり、表 1 は 5CB, 8CB の粘性係数、弾性率である。これらはある温度帯でネマティック液晶状態をとるもので、液晶アクチュエータで使用が想定されている。計算範囲は図 1 のように平行円板間の断面を想定しており、 $r=30\text{mm}$, $z=0.5\text{mm}$ の条件は実際に使用している回転粘度計の円板半径、円板間のギャップに合わせた条件である。

r 方向、 z 方向の分割数をそれぞれ m_r, m_z とし、格子数を $m_r \times m_z$ として表している。また、今回計算結果は格子数を 8CB は 2400×40 , 5CB は 1200×20 , 時間刻み幅は 5CB, 8CB 共に $dt = 1.0 \times 10^{-7}$ とし、せん断流れ γ と印加電圧 V はそれぞれ条件を変え入力、液晶分子のディレクタを示したベクトルと応力を出力している。

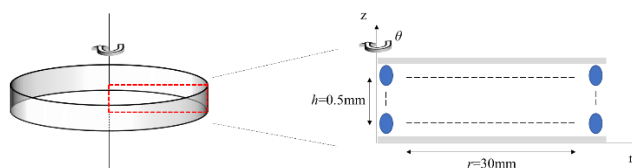


Fig.1 Calculation range diagram of parallel plate type

Table.1 Material constants of 5CB and 8CB

	5CB	8CB
Leslie Viscosities [Pa · s]		
α_1	0.0×10^{-3}	48.27×10^{-2}
α_2	-86.0×10^{-3}	-7.192×10^{-2}
α_3	-4.0×10^{-3}	4.342×10^{-2}
α_4	89.0×10^{-3}	5.859×10^{-2}
α_5	59.0×10^{-3}	6.353×10^{-2}
α_6	-31.0×10^{-3}	3.502×10^{-2}
Elastic constants [N]		
K_1	6.37×10^{-12}	1.461×10^{-11}
K_2	3.81×10^{-12}	0.705×10^{-11}
K_3	8.6×10^{-12}	1.94×10^{-11}

3. 計算結果と考察

3.1 配向方向の可視化

数値シミュレーションで各条件でのディレクタを求めた。ここから、格子点ごとのディレクタの z 成分をカラーバーで表示した。図2は使用する液晶が8CB, せん断速度 $\gamma=5$, $V=0$, 図3は使用する液晶が8CB, せん断速度 $\gamma=10$, $V=0$, 図4は使用する液晶が5CB, せん断速度 $\gamma=10$, $V=0$ での液晶ディレクタの z 成分の大小を可視化したものであり、経過時間ごとに並べて表示している。図5はディレクタの z 成分と色彩との関係である。図2, 3は8CBの z 方向ディレクタを示しており、液晶は z 方向に回転していることが分かる。これは8CBがタンブリング液晶であることが関係している。ネマティック液晶は、アライニング液晶とタンブリング液晶に大別され、前者は分子の平均配向方向が流れ方向に対して微小角を保ち、後者は流れ方向に対して回転し続ける。判別は構造式中の6つのLeslie粘性係数のうち α_3 の符号で分かり、表1にも記載しているが、5CBは $\alpha_3 < 0$ よりアライニング、8CBは $\alpha_3 > 0$ よりタンブリング液晶である。図3では再び液晶分子ディレクタの z 成分が1へと戻る様子が見られ、時間経過により回転し続けると考えられる。

図4は5CBの場合を表している。前述の通りアライニング液晶のため、8CBのような液晶分子の回転運動は確認できない。流れ方向に対する微小角を維持しているため、経過時間による変化があまり見られない。

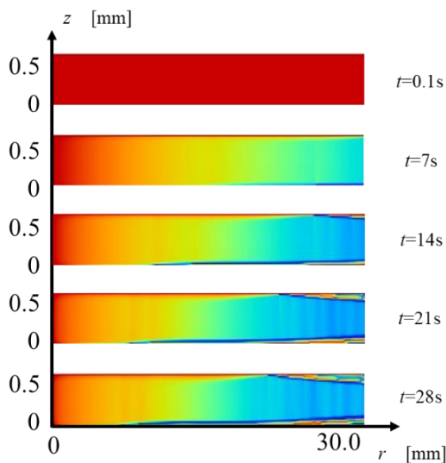


Fig.2 Liquid crystal alignment direction(8CB, $\gamma=5$, $v=0$)

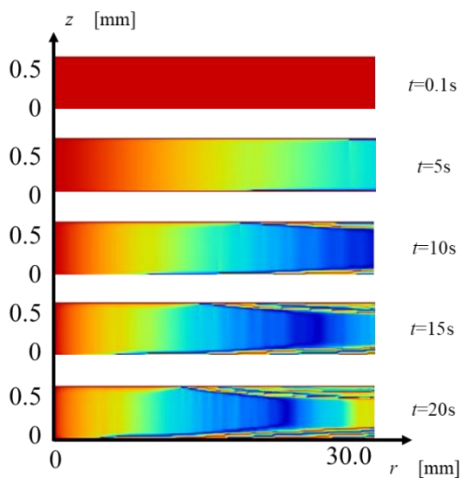


Fig.3 Liquid crystal alignment direction(8CB, $\gamma=10$, $v=0$)

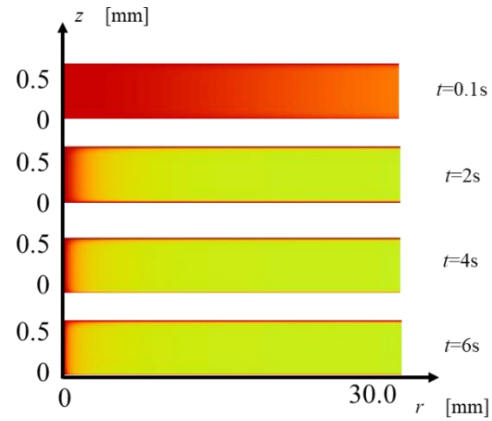


Fig.4 Liquid crystal alignment direction(5CB, $\gamma=10$, $v=0$)



Fig.5 Color diagram of scalar change

3.2 粘度

シミュレーションの計算結果として r 方向の格子点ごとに応力値を出力している。応力値から全体のトルクを求め、計算範囲全体の応力値、粘度を求めた。図5はせん断速度 $\gamma=30$, 電場 $V=0\sim60$ の条件で実験とシミュレーション双方で粘度を求め、グラフに示したものである。

シミュレーションで求めた粘度は実験値と比べて大きく異なる結果となった。これはシミュレーションでは理想的な状態を想定しており、実際の実験時の状況と液晶配向状態が大きく異なっていたことが要因としてあげられる。また、今回の数値シミュレーションでは平板壁面でのアンカリング強度について考慮していないことも、数値のずれの要因の一つと考えられる。

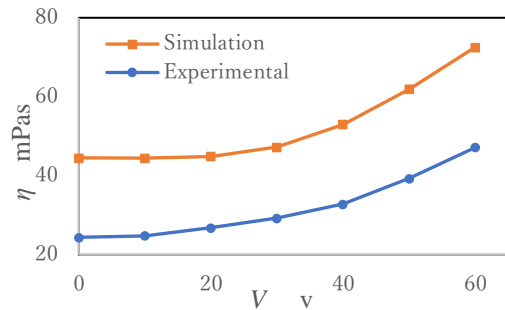


Fig.4 5cb viscosity by experiment and simulation

4. 結言

数値シミュレーションにより、タンブリング液晶特有の回転運動を8CBの結果で確認できた。

5CBの粘度をシミュレーションで求め、実験で得た粘度と比較し、シミュレーションと実験での違いを確認した。

5. 文献

- 蝶野成臣, 辻知宏, “液晶駆動型マイクロアクチュエータの開発(第5報, 平板駆動の数値計算)”, 日本機械学会文集(B編), 77巻781号
- 辻知宏, 蝶野成臣, “タンブリング液晶の二重円筒間せん断流れの数値解析”, Nihon Reeroji Gakkaishi Vol.40, No.5, 239-244