

卒業論文要旨

ネマティック液晶の管内流れの数値シミュレーション

Numerical simulation of nematic liquid crystal flows in pipes

システム工学群

流体工学研究室 1200134 藤原 励

1. 緒言

工業製品製造において、製品の生産効率の向上及び製品性能の向上は重要な課題である。液晶ディスプレイに代表される液晶製品では、液晶を製品に注入する過程に時間を要しており、製品の生産能力低下の要因となっている。液晶のように異方性を有している材料においては、分子の向きを一樣にすることで最大性能を発揮する。

一方、液晶製品における分子配向状態は製品に液晶を注入する過程（すなわち、流動過程）に強く依存することが知られている。そこで、液晶流動の最適化が液晶製品の生産効率および製品性能の向上のために重要である。

そこで、本研究では液晶の管内流れにおける分子配向挙動を数値計算により可視化することで流動特性を明らかにする。

2. 基礎方程式および数値計算

本研究では液晶流動に関する最も一般的な理論である Leslie-Ericksen 理論^{(1),(2)}を用いる。

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

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\tau} = & \alpha_1 \mathbf{n} \mathbf{n} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{n} + \alpha_2 \mathbf{n} \mathbf{N} + \alpha_3 \mathbf{N} \mathbf{n} + \alpha_4 \mathbf{A} + \alpha_5 \mathbf{n} \mathbf{n} \cdot \mathbf{A} \\ & + \alpha_6 \mathbf{A} \cdot \mathbf{n} \mathbf{n} - \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \nabla \mathbf{n}} \cdot (\nabla \mathbf{n})^T \end{aligned} \quad (2)$$

ここで、 $\mathbf{n}$ は液晶分子の局所的平均配向方向を表す単位ベクトル（ディレクタ）、 $\boldsymbol{\tau}$ は偏差応力テンソル、 $\mathbf{F}$ はディレクタの弾性ひずみに基づく自由エネルギー密度、 $\mathbf{N}$ はディレクタの相対角速度ベクトル、 $\mathbf{A}$ は変形速度テンソル、 γ_i は

粘性係数、 α_j はレズリー粘性係数を表す。

本研究で扱う楕円管流路断面および座標系を図 1 に示す。長軸 a とアスペクト比 $R = b/a$ をパラメータとする楕円管流路において、 z 方向に $|\partial p / \partial z| = 10000 \text{ Pa/m}$ の圧力勾配を与えることで液晶を流動させる。流路のアスペクト比を変化させる場合、流路断面積が直径 1 mm の円管流路の断面積と等しくなるように a, b の値を決定した。

配向場の発達速度に対して速度場の発達速度は極めて大きいので、速度場は定常と考えることができる。また、ディレクタ場が速度場に及ぼす影響は小さいと仮定し、速度場についてはニュートン流体の定常分布を用いる。液晶の物性値として 4-n-4'-octylcyanobiphenyl (8CB) の 34°C における値を用いる。

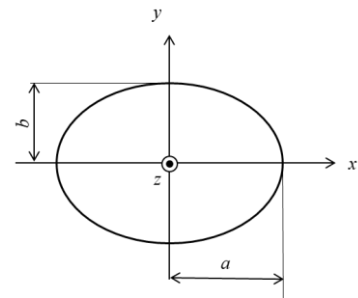


Fig1. Flow geometry and coordinate system

ディレクタの初期値の分布として、 z 方向への一様配向に x 方向成分および y 方向成分への微小乱数 $|\delta_x| \leq 0.001$, $|\delta_y| \leq 0.001$ を与える。

$$\mathbf{n} = \left(\delta_x, \delta_y, \sqrt{1 - (\delta_x^2 + \delta_y^2)} \right) \quad (3)$$

解析方法として、空間微分には 2 次精度の中心差分法、時間積分には 2 次精度のルンゲクッタ法を用いる。時間刻み幅は $\Delta t = 1.0 \times 10^{-4} \text{ s}$ とする。計算空間には境界適

合座標を用いた.

3. 結果および考察

図 2 に z 方向速度分布とディレクタの z 方向成分分布の時間変化を表す. 左側は流路アスペクト比 $R=1$ (真円) の場合で右側はアスペクト比 $R=0.51$ (楕円) の場合を示している.

$R=1$ の場合, 流動開始後, 流路中心と流路壁面の中央近傍のディレクタがせん断流れによって回転させられることで, z 軸に対して大きく傾く. 壁面におけるディレクタは固定されている一方で, 流路中心では速度勾配が 0 であるため流路中心のディレクタはその周りのディレクタからの長距離秩序効果によってのみ変化する. したがって, 流路中心近傍のディレクタ分布が z 軸周りの軸対称分布を示す限りは流路中心のディレクタは変化できず, 周りのディレクタ場の発達とともに流路中心周りのディレクタ場の歪みが増大する. 時間の経過とともに, 軸対称のディレクタ分布が対称性の低い分布へと遷移し, 流路中心近傍で増大したディレクタ場の歪みエネルギーが解消へと向かう. 一方, $R=0.51$ の場合には, 流路形状自体の幾何学的対称性が低いため, ディレクタ場も対称性が低い分布へと遷移しやすい. $t=2400$ s におけるディレクタ分布を比較すると, $R=0.51$ の場合にはディレクタの z 成分の正負の反転領域が x 軸に沿って交互に並んでいるのに対して, $R=1$ の場合には流路中心から逸脱した環状の反転領域が形成される.

以上より, 管内液晶流れにおけるディレクタ分布は流路形状に依存して複雑なパターンを示すことが分かった. 流動中のディレクタ場をコントロールするためには, 電場や磁場といった外場を印加する必要があると考えられる.

参考文献

- (1) Ericksen, J.L, *Arch Ration. Mech.Anal.*, 28 (1968), 231.
- (2) de Gennes, P.G. and Prost, J., *The Physics of Liquid Crystals*, 2nd Ed, Clarendon Press, Oxford (1993).

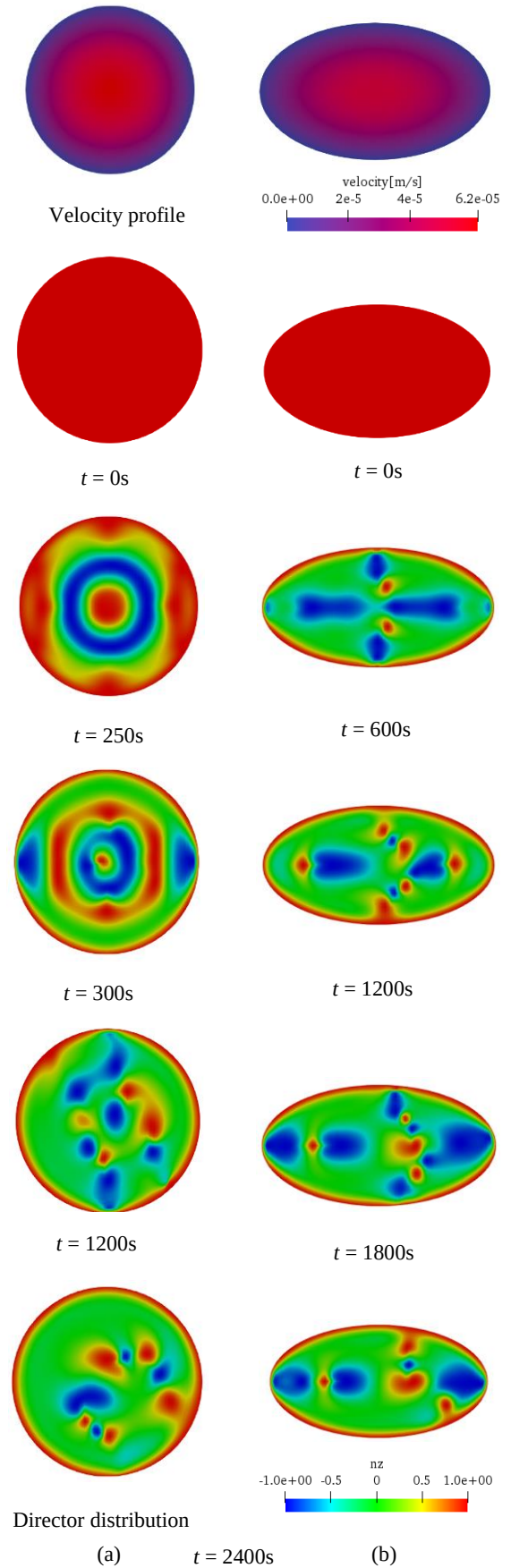


Fig2. Velocity and director distributions