

修士論文要旨

同心二重円筒間液晶せん断流れにおける分子配向挙動の数値解析

Numerical analysis of molecular orientation behavior in shear flows of a liquid crystal between concentric cylinders

知能機械システム工学コース

流体工学研究室 1225061 吉田 伊吹

1. 緒言

近年、二重円筒間液晶せん断流れを利用した液晶発電デバイスが提案された。このデバイスでは、液晶せん断流れが分子配向場に歪みを誘起し、フレクソエレクトリック効果と呼ばれる巨視的分極が発生する。しかし、二重円筒間液晶せん断流れ中の液晶分子配向場において、線欠陥構造と呼ばれる液晶分子配向場の特異配向状態が確認されている。図1は二重円筒間流れにおける液晶分子配向場の偏光可視化画像である。図1において、線状の暗視野部が線欠陥であり、線欠陥構造の発生が液晶デバイスの性能に影響を及ぼすと考えられる。液晶線欠陥の発生およびその除去方法を知るためには、液晶分子配向の空間的局所情報が必要であり、数値シミュレーションが有効な手段である。

液晶流動に関する最も一般的な理論である Leslie-Ericksen 理論では、液晶分子の局所的な平均配向方向を表す単位ベクトル \mathbf{n} (ディレクタ) を導入することで液晶分子配向場と速度場の相互作用を表している。しかし、ベクトル型変数である \mathbf{n} は数学的に $\mathbf{n} \neq -\mathbf{n}$ であり、ディレクタの頭尾の区別はないという液晶の物理条件と矛盾する。テンソル型ディレクタ $\mathbf{m} (= \mathbf{n}\mathbf{n})$ を導入すれば、計算量は増加するものの、この矛盾を解消することができる。

そこで、本研究ではテンソル型ディレクタを用いてネマティック液晶の二重円筒間せん断流れの数値解析を行い、二重円筒間せん断流れにおける分子配向場の線欠陥構造の発生メカニズムについて調べる。



Fig. 1 Polarized light microscopic image of a nematic liquid crystal under shear flow between the concentric cylinders

2. 基礎方程式及び数値計算

本研究で扱う二重円筒せん断流路および座標系を図2に示す。本研究で用いるディレクタ場の基礎方程式を示す。径の異なる二重円筒間 (内筒の外半径 $r_{in} = 2.5\text{mm}$, 外筒の内半径 $r_{out} = 3.0\text{mm}$) に液晶を充填し、内円筒を回転することで液晶にせん断流れを与える。液晶流動においてディレクタ場

と速度場は相互作用するが、ディレクタ場から速度場への作用は小さいと仮定し、二重円筒間の速度分布には、ニュートン流体の速度分布

$$\mathbf{v} = \left(0, \frac{Er\bar{K}}{\gamma_1(r_{out} - r_{in})r_{in}^2 - r_{out}^2} \frac{r_{in}}{r} \frac{r^2 - r_{out}^2}{r}, 0 \right) \quad (1)$$

を用いる。ここで、 \bar{K} は液晶の広がり、ねじれ、曲がり変形に関する弾性係数 K_1, K_2, K_3 の平均値、 Er はエリクセン数 (液晶特有の無次元量であり、粘性力と分子場弾性力の比を表す) である。一方、ディレクタ場については Leslie-Ericksen 角運動方程式⁽¹⁾⁽²⁾を用いる。

$$\mathbf{n} \times \left\{ -\frac{\partial F}{\partial \mathbf{n}} + \nabla \cdot \left(\frac{\partial F}{\partial \nabla \mathbf{n}} \right) + \gamma_1 \mathbf{N} + \gamma_2 \mathbf{A} \cdot \mathbf{n} \right\} = \mathbf{0} \quad (2)$$

ここで、 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、 γ_1, γ_2 は粘性係数、 \mathbf{A} は変形速度テンソルである。この角運動方程式中のベクトル型ディレクタ \mathbf{n} をテンソル型ディレクタ \mathbf{m} で置き換えると、 \mathbf{m} の時間発展方程式

$$\begin{aligned} \gamma_1 \dot{\mathbf{m}} = & \frac{1}{2}(K_3 - K_2) \{ \mathbf{m} \cdot (\nabla \nabla \mathbf{m}) : \mathbf{m} + [\mathbf{m} \cdot (\nabla \nabla \mathbf{m}) : \mathbf{m}]^T \\ & + [(\nabla \mathbf{m}) : (\nabla \mathbf{m})]^T \cdot \mathbf{m} + \frac{1}{2} [\mathbf{m} \cdot (\nabla \nabla \mathbf{m}) : \mathbf{m}]^T \cdot \mathbf{m} \\ & + \mathbf{m} \cdot [(\nabla \mathbf{m}) : (\nabla \mathbf{m})]^T + \frac{1}{2} \mathbf{m} \cdot [\mathbf{m} \cdot (\nabla \nabla \mathbf{m}) : \mathbf{m}]^T \\ & + [\mathbf{m} \cdot (\nabla \mathbf{m}) \cdot (\nabla \cdot \mathbf{m})]^T + \frac{1}{2} [\mathbf{m} \cdot (\nabla \nabla \mathbf{m}) : \mathbf{m}]^T \cdot \mathbf{m} \\ & + \mathbf{m} \cdot (\nabla \mathbf{m}) \cdot (\nabla \cdot \mathbf{m}) + \frac{1}{2} \mathbf{m} \cdot [\mathbf{m} \cdot (\nabla \nabla \mathbf{m}) : \mathbf{m}]^T \\ & - \frac{1}{2} [\mathbf{m} \cdot (\nabla \nabla \mathbf{m}) : \mathbf{m}]^T \cdot \mathbf{m} - \frac{1}{2} \mathbf{m} \cdot [\mathbf{m} \cdot (\nabla \nabla \mathbf{m}) : \mathbf{m}]^T \} \\ & + (K_1 - K_2) \{ (\nabla \nabla \cdot \mathbf{m}) \cdot \mathbf{m} + [(\nabla \nabla \cdot \mathbf{m}) \cdot \mathbf{m}]^T \\ & - \frac{1}{2} [(\nabla \nabla \mathbf{m}) : \mathbf{m}] \cdot \mathbf{m} - \frac{1}{2} \mathbf{m} \cdot [(\nabla \nabla \mathbf{m}) : \mathbf{m}] \} \\ & + K_2 \{ (\nabla^2 \mathbf{m}) \cdot \mathbf{m} + [(\nabla^2 \mathbf{m}) \cdot \mathbf{m}]^T - (\nabla^2 \mathbf{m}) : \mathbf{m} \mathbf{m} \} \end{aligned} \quad (3)$$

が得られる。

以上の基礎式を用いて計算領域 ($r_{in} \leq r \leq r_{out}$, $0 \leq \theta \leq 2\theta$, $0 \leq z \leq 2.5\text{mm}$) についてのディレクタ場の解析を行う。 r 方向境界条件として内外円筒面で垂直固定配向 ($\mathbf{m}(r_{in}) = \mathbf{m}(r_{out}) = (1, 0, 0)$) を、 z 方向境界条件には周期境界条件を用いる。

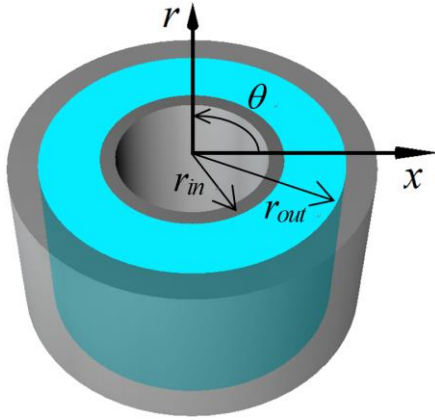


Fig. 2 The geometry of the simulation and coordinate system

また、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。

計算格子幅については円筒間隔を 100 分割、周方向を 3000 分割、円筒方向を 500 分割し、格子間隔は $\Delta r = 0.005\text{mm}$, $\Delta\theta = 0.12^\circ$, $\Delta z = 0.005\text{mm}$ である。

解析方法について、空間離散化には二次精度中心差分を、時間離散化には 2 次精度ルンゲ・クッタ法を用いる。時間ステップは $\Delta t = 0.01\text{ s}$ としている。また、ディレクタの初期値として、

$$\mathbf{m} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (4)$$

の一様配向に微小ノイズを与えた分布を用いる。

3. 計算結果と考察

図 3(a) ~ (e) 及び (f) ~ (j) は、それぞれ $Er = 100$ におけるテンソル型ディレクタを用いた場合のフランク弾性エネルギー密度 F 及び $z = 1.25\text{mm}$ における断面のディレクタ場の時間変化を表す。フランク弾性エネルギーはディレクタの空間勾配に応じて大きくなり、配向欠陥構造のようなディレクタが急変するような位置で高い値を示す。図は F がある閾値 (0.01J/m^3) を超えた場合に、内筒面から外筒面に向かって赤、緑、青と分けて示したものである。 $t = 150\text{ s}$ において F は内外筒面近傍で大きな値を示す。これは内外筒面で固定されたディレクタと、せん断流によって回転させられた流体中のディレクタとの差が壁面近傍に集中したことによると考えられる。その後、内外筒面近傍に広範囲に現れていた高エネルギー領域は、二重円筒のギャップ中心に向かって拡がるとともに、 θ および z 方向の不均一さが増加する。最終的に、 $t = 600\text{ s}$ において、線状の高エネルギー領域が現れ、図 1 に示したような線状欠陥の形成に至っている。

一方、ディレクタ場については、初期段階では $r-\theta$ 平面内の回転挙動にとどまるが、 $t = 450\text{ s}$ の時点で $r-\theta$ 面外に回転し始める Out-of-Plane 挙動画像が現れていることがわかる。この時のフランク弾性エネルギーの分布を見ると、 $t = 300\text{ s}$ のときと比較して、 F が大きな値を示す領域が減少していることがわかる。すなわち、Out-of-Plane 挙動が発生したことによりフランク弾性エネルギーが減少に転じることが分かる。

以上より、二重円筒間液晶せん断流れにおける線状欠陥構造の発生は、ディレクタの $r-\theta$ 面内回転の進行により増大したフランク弾性エネルギーをディレクタの $r-\theta$ 面外への回転により解消した結果、局所的なディレクタ場の急こう配が発生したことに起因することが分かった。

4. 結言

テンソル型ディレクタを用いて二重円筒間における液晶せん断流れの数値計算を行った。得られた結果を要約する。

- ・せん断流れの印加により、ディレクタ場に線状欠陥構造が発生する様子が分かった。
- ・せん断流れ開始後、ディレクタはせん断平面内で回転した後、せん断平面外へと逃れる Out-of-Plane 挙動へと移行する。
- ・Out-of-Plane 挙動により、系全体のフランク弾性エネルギーは減少するものの、局所的に線状の高エネルギー領域が発生し、ディレクタ場の線状欠陥構造の発生につながる。
- ・線状欠陥構造を取り除くには、電場や磁場といった外場を印加することが有効な手段として挙げられる。

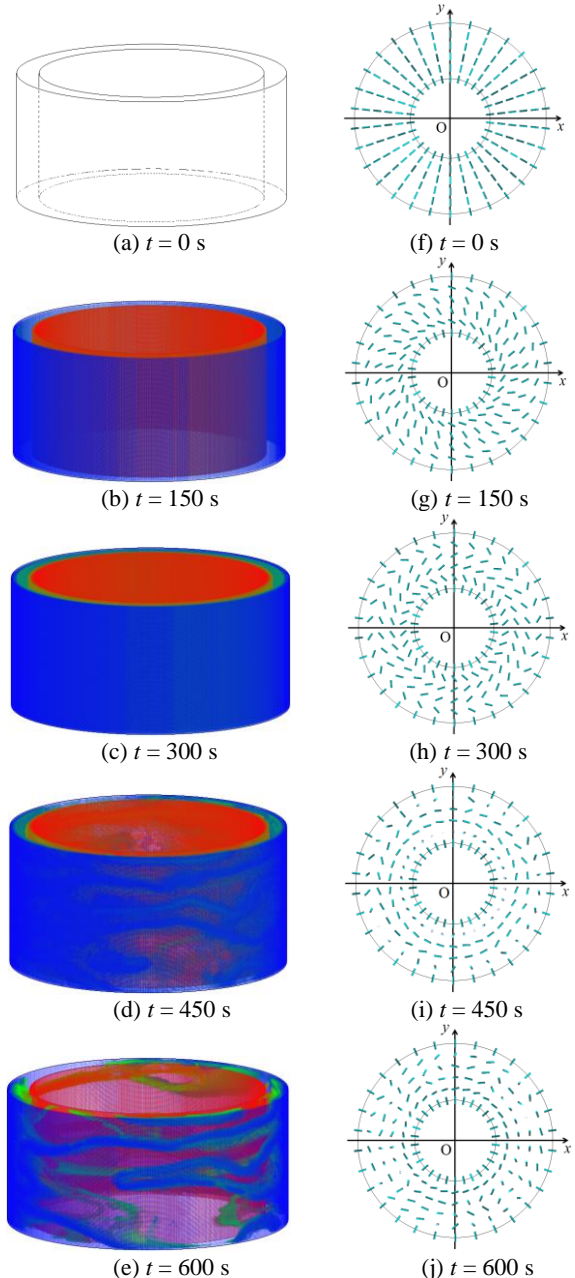


Fig. 3 Frank elasticity energy density and director distributions

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).