

卒業論文要旨

ネマティック液晶の平行平板間非等温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 1210041 沖本 悠希

1. 緒言

液晶は、液体の流動性と結晶の光学的、力学的異方性を併せ持つ異方性流体である。近年、液晶の力学的異方性を利用した液晶駆動型のマイクロマニピレータの研究が行われている。⁽¹⁾液晶駆動型のマイクロマニピレータは液晶に温度勾配を加え、液晶相と等方相の相転移を起こし、その相界面に働く界面力を利用して対象物を捕捉し移動させるものである。しかし、現在、液晶駆動型のマイクロマニピレータの数値シミュレーションでの先行研究では、温度は場所固定されているため実際の現象とは異なるという問題がある。そこで、実際に温度変化のある流れを熱伝導方程式を用いて数値シミュレーションを行い液晶の挙動の解析をすることで液晶駆動型のマイクロマニピレータの研究開発につながると思われる。

よって本研究では、平行平板間の非等温流れにおける液晶分子の挙動解析を目的とした数値シミュレーションを行う。

2. 数値計算

液晶の分子配向場は以下の方程式で表される。

$$\mathbf{S} = S \left(\mathbf{n}\mathbf{n} - \frac{1}{3}\delta \right) \quad (1)$$

ここでの $\mathbf{S}$ は液晶分子の平均の配向方向を表すテンソル秩序パラメータ、 S は配向の程度を表す配向秩序度、 $\mathbf{n}$ は棒状液晶分子の長軸方向の平均の配向方向を表す単位ベクトルでありディレクタと呼ばれる。テンソル秩序パラメータの時間発展方程式を以下に示す。⁽²⁾

$$\begin{aligned} \frac{G\mathbf{S}}{Gt} = & -\frac{6D}{\left(1 - \frac{3}{2}\mathbf{S}:\mathbf{S}\right)^2} \left\{ \left(1 - \frac{U}{3}\right)\mathbf{S} - U \left[\mathbf{S} \cdot \mathbf{S} - \frac{1}{3}(\mathbf{S}:\mathbf{S})\delta \right] \right. \\ & \left. + U(\mathbf{S}:\mathbf{S})\mathbf{S} \right\} \\ & + \frac{L_1}{\eta} \nabla^2 \mathbf{S} + \frac{L_2}{\eta} \left\{ \nabla(\nabla \cdot \mathbf{S}) + [\nabla(\nabla \cdot \mathbf{S})]^T - \frac{2}{3} \text{tr}[\nabla(\nabla \cdot \mathbf{S})]\delta \right\} \\ & + \frac{2}{3}\beta \mathbf{A} + \beta \left\{ \mathbf{A} \cdot \mathbf{S} \cdot \mathbf{S} \cdot \mathbf{A} - \frac{2}{3}(\mathbf{A}:\mathbf{S})\delta \right\} \\ & - \frac{1}{2}\beta \{ (\mathbf{A}:\mathbf{S})\mathbf{S} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{S} \cdot \mathbf{S} + \mathbf{S} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{S} + \mathbf{S} \cdot \mathbf{S} \cdot \mathbf{A} - [(\mathbf{A}:\mathbf{S})\delta] \} \end{aligned} \quad (2)$$

上式において、右辺の第1項は相転移や配向秩序度の空間変化を表す単距離秩序効果、第2項第3項は固定壁での配向状態を内部に反映する長距離秩序効果、第4項第5項第6項は流動が引き起こす粘性効果を表している。⁽³⁾また、 D は回転拡散係数、 U はネマティックポテンシャル強度、 L_1 、 L_2 はランダウ係数、 η は粘度、 $\mathbf{A}$ は変形速度テンソル、 β は形状係数を表している。

ネマティックポテンシャル強度は温度 T と以下の関係がある。

$$U = \frac{3T_{NI}}{T} \quad (3)$$

ここでの T_{NI} はネマティック液晶の等方相からネマティック相へ相転移する際の温度であり相転移温度と呼ばれる。また、この時の温度 T は熱伝導方程式から、

$$\frac{DT}{Dt} = a(\nabla^2 T) \quad (4)$$

で与えられる。ここでの a は熱拡散率である。

図1に本研究での計算領域および座標系を示す。平行平板間に液晶を満たし、温度勾配を加える。液晶流れの速度分布はニュートン流体の平行平板間のポアゼユ流れで近似する。

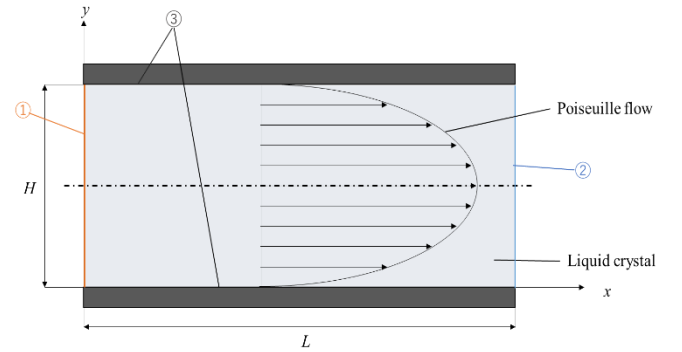


Fig.1 Calculating area and coordinate system

$H = 1\text{mm}$, $L = 20\text{mm}$, z 軸方向長さを 10mm とする。

z 軸方向への変化はなく一様とし z 軸方向へは周期境界条件を用いた。図1の①～③での温度とテンソル秩序パラメータの境界条件を以下に示す。

$$\begin{aligned} \textcircled{1} \quad T &= 105.6^\circ\text{C} \quad \mathbf{S} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \textcircled{2} \quad T &= 17.6^\circ\text{C} \quad \frac{\partial S}{\partial x} = 0 \\ \textcircled{3} \quad T &= 20.0^\circ\text{C} \quad \frac{\partial^2 S}{\partial y^2} = 0 \end{aligned} \quad (5)$$

初期条件として、温度を 20.0°C 、配向秩序度を等方相と液晶相が存在するように設定する。また、ディレクタは平行平板に水平になるように設定する。

平行平板間の定常流れとして近似したポアゼユ流れは流線が厳密に平行となるような1方向の流れであり、最大速度は以下のように示される。

$$v_{x\max} = \frac{3Q}{2A} \quad (6)$$

ここでの Q は流量、 A は断面積である。本研究では最大速度 $v_{x\max}$ を計算パラメータとする。

空間発展の数値計算法に2次精度中心差分法、時間発展の数値計算法に2次精度ルンゲクッタ法を用いる。この際の計算格子の分割数は x 軸方向に400分割、 y 軸方向に20分割、 z 軸方向に200分割とする。また、時間刻み幅は0.0001sとする。数値計算には、ネマティック液晶である4-n-pentyl-4'-cyanobiphenyl(5CB)の物性値を用いる。

3. 結果および考察

図2に、平行平板間のネマティック液晶に非等温流れを加えた時の xy 平面での温度分布を示す。(a)が初期状態、(b)から(d)は温度変化が見られなくなった各計算パラメータでの温度分布である。

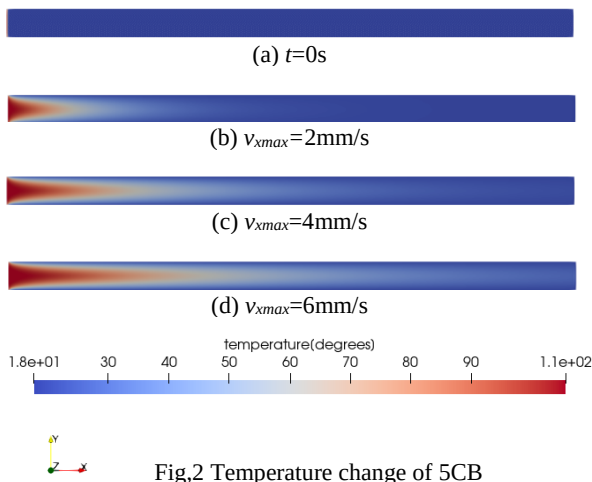


Fig.2 Temperature change of 5CB

図2から最大速度が大きいほど、平行平板間の中心の温度は上昇する。これは、平行平板の左端で温められた液晶分子が流れ方向の下流に運ばれるからである。

図3に、平行平板間のネマティック液晶に非等温流れを加えた時の xy 平面での配向秩序度分布を示す。(a)が初期状態、(b)から(d)は配向秩序度に変化が見られなくなった時の各計算パラメータでの配向秩序度の分布である。

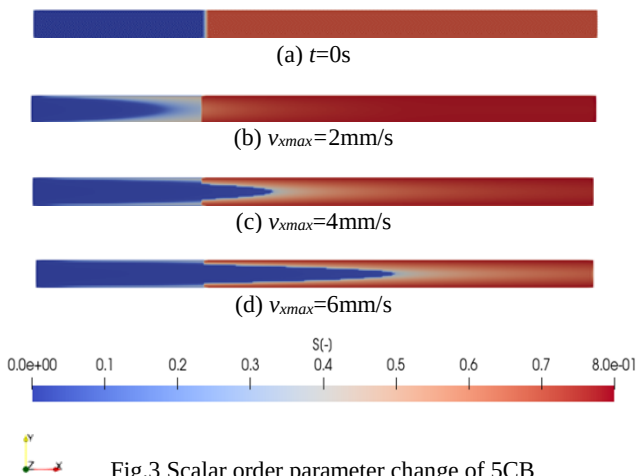


Fig.3 Scalar order parameter change of 5CB

図3内 S は配向秩序度を表しており、この配向秩序度は $S=0$ で等方相を、 $0 < S < 1$ で液晶相を表している。

図3より平行平板間の液晶は液晶相から等方相への相転移がみられる。しかし、初期状態が液晶相であった平行平板の壁面付近では、相転移はみられない。これは、非等温流れであるポアゼユ流れが壁面付近では速度が小さいために、速度が大きい平行平板中心付近のように温度が上昇しないためだと考えられる。また、流れを加えることによって液晶相と等方相の相界面の面積が拡大するということが分かる。

図4は横軸に計算パラメータである最大速度をとり、縦軸に最大速度をとる平行平板の中心で配向秩序度が0.5をとる時の x の値をとっている。配向秩序度が0.5をとる時の x の値をみることで相転移の位置が確認できる。

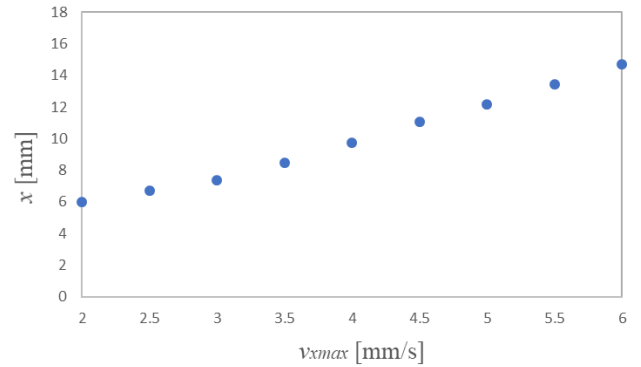


Fig.4 Relationship between $v_{x\max}$ and location of phase transition

図4から最大速度が大きくなるに従い x の値も大きくなっていることがわかる。このことから最大速度が大きくなるに従い、相転移の位置は流れ方向の下流にずれるということが確認できる。

4. 結言

本研究では、平行平板間の非等温流れにおける液晶分子の挙動解析を行い、その結果を以下にまとめる。

- 最大速度が大きくなるに従い、上流の高温域が対流によって下流へと拡大するが壁面付近では流速が低い高い配向秩序度を保つ。
- 流れによって相界面の面積が拡大する。
- 最大速度が大きくなるに従い、相転移の位置は流れ方向下流に移動する。

文献

- (1) 亀井和正, 辻知宏, 蝶野成臣, 液晶のネマティック相と等方相の相界面を利用したマイクロマニピレータの開発(2015)
- (2) Tomohiro Tuji and Alejandro D.Rey “Effect of long range order on sheared liquid crystalline materials Part 1: compatibility between tumbling behavior and fixed anchoring”, J.Non-Newtonian Fluid Mech, 73(1997) pp.127-152
- (3) 辻知宏, 蝶野成臣, ネマティック液晶の欠陥構造と流動の影響, 日本機械学会誌 1997.7, vol.102, No.968