

ネマティック-等方相界面を利用したマイクロマニピュレータの数値解析

Numerical simulation of a micromanipulator utilizing the nematic-isotropic phase interface

知能機械システム工学コース

流体工学研究室 1225049 堀貴裕

1. 緒言

液晶状態とは、液体の性質である流動性と結晶の性質である異方性を併せ持つ状態であり、液体状態と固体状態の間に液晶状態をとりうる物質を液晶材料という⁽¹⁾。本研究で用いる5CBは液晶材料であり、19°Cから35.17°Cの範囲でネマティック相が発現する⁽²⁾。

容器に入れた液晶材料である5CBに、ネマティック-等方相の相転移温度 T_{NI} (35.17°C)を含む温度勾配を与えることで、容器中にネマティック相、等方相両相が共存し、両相の境界に界面が発生する。また、与える温度を変化させて、液晶相を拡大することが可能であり、移動する界面上に微粒子を置いた場合、微粒子は界面に追従する。これらを利用した、ネマティック-等方相界面により微小物体を駆動させる液晶マイクロマニピュレータの開発が検討されている⁽³⁾。液晶マイクロマニピュレータは、温度制御による新たな駆動原理を持つ。また、構成要素が液晶・液晶を入れる容器・熱源のみであり装置の構造が単純なため、装置の小型化が可能であるという利点がある。また、液晶マニピュレータは柔らかい界面で駆動対象物を駆動させるため、物体の接触により傷が付きやすい細胞などの駆動に適しており、医療分野への応用が期待できる。

先行研究の実験において、5CBを用いた液晶マニピュレータの微粒子($\phi=30\mu\text{m}$)を駆動させる力である界面力の最大値が1.4nNであることを確認した⁽³⁾。液晶マニピュレータの用途拡大のためには、異なった液晶材料を用いたマニピュレータの駆動力に関する知見が必要とされる。そのため、本研究では5CBを用いた液晶マニピュレータの数値計算モデルを作成し、数値計算を行うことで液晶マニピュレータの界面力を定量的に示すと同時に、液晶の物性値等のパラメータを変更し、数値計算を行うことによって界面力向上に役立てる。

2. 理論式及び計算条件

液晶マニピュレータの界面力を算出するための方法を説明する。初めに数値計算モデルは、先行研究の実験で使用された液晶セルの一部を切り取った立方体空間の中に、微粒子を模した球状物体を配置したものであり、それを図1に示す。

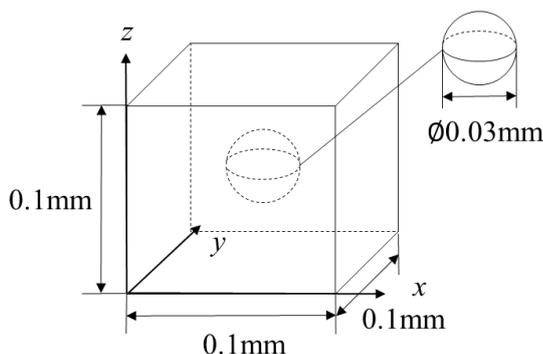


Fig.1 Numerical calculation model of liquid crystal manipulator

この数値計算モデル上に一定の温度勾配を与えることで、微小領域内の液晶分子の平均配向方向（ディレクタ） \mathbf{n} と微小領域内の分子方向の揃い具合である秩序度 S を併せ持つテンソル秩序パラメータ \mathbf{S} が、時間発展とともに変化するため、その様子を観察する。テンソル秩序パラメータは次のように表される⁽⁴⁾。

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

ただし、ここで示す $\boldsymbol{\delta}$ はクロネッカーのデルタである。

系に分布するテンソル秩序パラメータから、式(2)に示すLandau-de Gennesの自由エネルギー式⁽⁴⁾を用いて、自由エネルギー密度を算出し、系全体で積分することによって系全体の自由エネルギーを求める。

$$W = 6\eta D \left\{ \left(0.5 - \frac{U}{6} \right) \text{tr}(\mathbf{S} \cdot \mathbf{S}) - \frac{U}{3} \text{tr}(\mathbf{S} \cdot \mathbf{S} \cdot \mathbf{S}) + \frac{U}{4} \text{tr}(\mathbf{S} \cdot \mathbf{S} \cdot \mathbf{S} \cdot \mathbf{S}) \right\} + \frac{L_1}{2} (\nabla \mathbf{S}) : (\nabla \mathbf{S})^T + \frac{L_2}{2} (\nabla \cdot \mathbf{S}) \cdot (\nabla \cdot \mathbf{S}) \quad (2)$$

ここで W は自由エネルギー密度であり、 η は粘度、 D は回転拡散係数、 U はネマティックポテンシャル強度と呼ばれ、 $U=3T^*/T$ と定義される。 T は温度、 T^* は相転移温度である。 \mathbf{S} はテンソル秩序パラメータ、 L_1 、 L_2 はランダウ係数である。

温度勾配は一定のまま、ネマティック相と等方相の境界にできる相界面の位置に対する球の位置を変えて計算を行うことにより、相界面位置に対する球の位置がそれぞれ異なる場合のエネルギーを算出することができる。図2のように、球の位置がそれぞれ異なる場合のエネルギー変化を計測することで、疑似的に界面の移動によるエネルギー変化を計測することができる。そして、エネルギー変化を界面の位置変化の差分で割ることにより界面力を算出する。

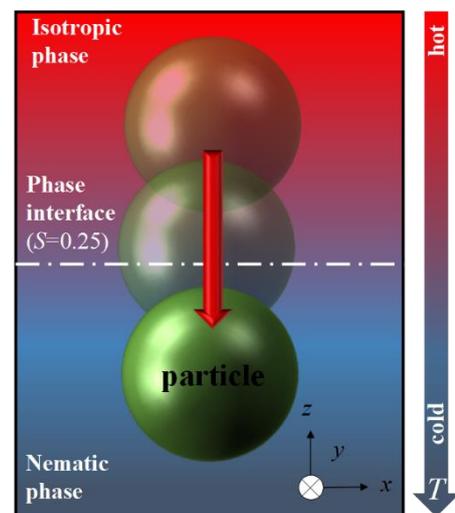


Fig.2 Position of the spherical particle and the phase interface

3. 結果及び考察

図3, 図4に微粒子周りのディレクタ及び秩序度を示す。但し, 白の破線は相界面を表す。球周りの規則正しく整列している楕円体が部分領域内のディレクタと秩序度を表しており, 楕円体の長軸の方向がディレクタ, 楕円体の色が秩序度を表している。今回は上下方向に温度勾配を与え下部にネマティック相, 上部に等方相を発現させた。図3では微粒子がネマティック相に半分程度沈んでいる場合を表しており, 図4では微粒子がネマティック相に全て沈んでいる場合を表している。

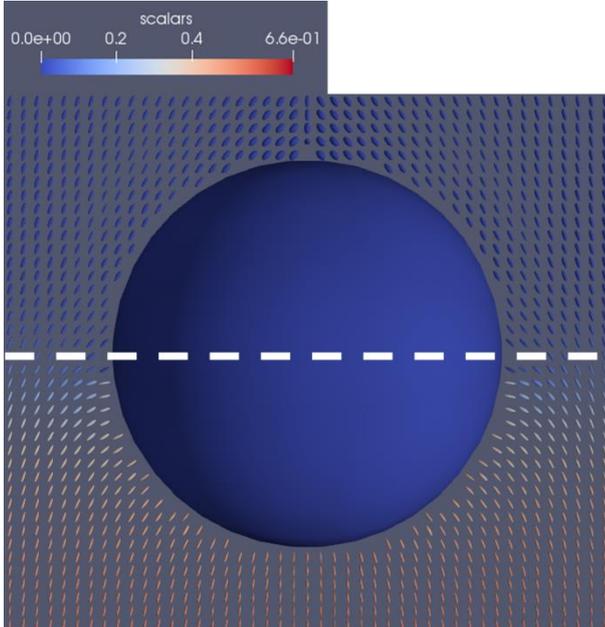


Fig.3 Director and order around the particle part1

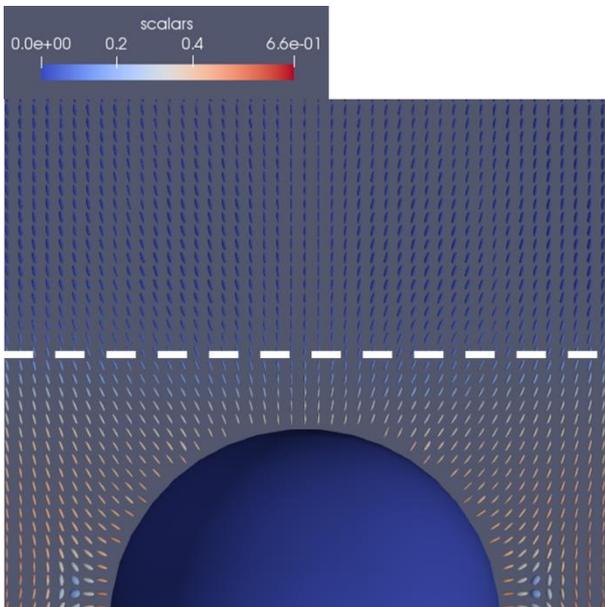


Fig.4 Director and order around the particle part2

図3では, ネマティック相において, ディレクタが微粒子に対して垂直になっていることが確認できる。図4でも図3と同様にディレクタが微粒子に対して垂直になっていることが確認できる。同時に, 微粒子の赤道付近に秩序度が著しく減少している部分が確認できる。これは, 液晶分子の配列に欠陥が生じたためであると考えられる。

図5には, 回転拡散係数を変えたそれぞれの場合で, 相界面と球の距離に対する界面力を表している。

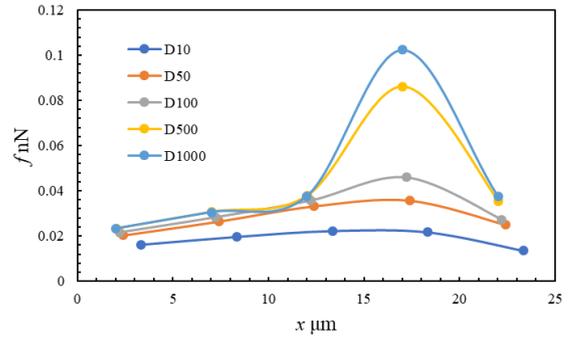


Fig.5 Interfacial force for each rotational diffusion coefficient

図5より回転拡散係数が大きくなるに従って界面力が大きくなることを確認できる。実際5CBの回転拡散係数は $0.8 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ である⁽⁶⁾が, 計算時間の都合上, 実際の値より低い回転拡散係数を用いた。今回のシミュレーションでの最大の界面力は 0.10 nN であり, 先行研究の実験で計測された界面力 1.4 nN と比べて10倍以上小さかった。その原因として回転拡散係数を低い値で計算したことが考えられる。しかし, 実際の回転拡散係数で計算するには, 多くの格子分割数と, 短い時間ステップが必要となり, 現在使用しているCPU計算でそれらを行うと膨大な計算時間が必要となる。そのため, CPU計算に比べて短期で大量の計算ができるGPU計算を行う必要があると考えられる。

また, 回転拡散係数に関係せず, 微粒子の位置が相界面位置から離れ, 微粒子がネマティック相の中に沈むに従って界面力が大きくなり, 微粒子の位置が $17 \mu\text{m}$ 付近で最大の界面力が発生していることが確認できる。

4. 結言

本研究では, ネマティック-等方相界面を用いたマイクロマンピュレータの界面力向上のため, 数値計算モデルを作成し, 数値計算を行った。以下に得られた結果を示す。

- (1) 垂直配向を施した微粒子周りの液晶分子のディレクタは微粒子に対して, 垂直に整列する。
- (2) 微粒子がネマティック相に入り込むに従って, 微粒子の赤道周りの秩序度が大きく低下する。
- (3) 回転拡散係数に関わらず, 微粒子の位置が相界面の位置から $17 \mu\text{m}$ 程度離れた場合に最大の界面力が得られる。

文献

- (1) 折原宏, 液晶の物理(2004), 内田老鶴圃。
- (2) Guenter Ahlers, David S. Cannell, Lars Inge Berge, and Sakurai, Thermal conductivity of the nematic liquid crystal 4-n-pentyl-4'-cyanobiphenyl, physical review E, Vol. 49, No.1 (1994)
- (3) 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ンピュレータの開発”, 日本機械学会論文集, Vol. 81, No. 823 (2015)
- (4) Tomohiro Tsuji, Alejandro D. Rey*, Effect of long range order on sheared liquid crystalline materials Part I: compatibility between tumbling behavior and fixed anchoring, J. Non-Newtonian Fluid Mech., 73(1997), pp. 127-152.
- (5) A.V. Zakharov, A.V. Komolkin, A. Maliniak, Rotational viscosity in a nematic liquid crystal: A theoretical treatment and molecular dynamics simulation, physical review E, Vol. 59, No.6 (1999)