Coarse-Grained Molecular Dynamics Simulation of Liquid Crystal Shear Flow

1. 緒言

機械加工技術の発展により, マイクロ・ナノメートルオー ダーの大きさの機械要素が製作可能になっている. アクチュ エータも例外ではなく、歯車やモータといった構成部品を小 さくすることで直径数 mm 程度の大きさに小型化したもの が存在している.一方で,圧電素子や形状記憶合金などの駆 動源を用いることで小型化したものも存在している(1). その 中で液晶を駆動源に用いたアクチュエータが提案されてお り⁽²⁾,実際に液晶平板アクチュエータや液晶無定形アクチュ エータが開発されている(3).液晶を駆動源に用いる利点は, 液晶が液体状であるために小型化が容易であることがあげ られる.実際に、外筒の直径 0.20mm の液晶モータの駆動に 成功している(4). 液晶分子に電場を印可するという動作原理 上,素材が許せば,数μmサイズのアクチュエータの作成も 可能になると考えられる.液晶アクチュエータが実用されれ ば、MEMS デバイス内の機械要素として用いたり、血管内を 移動するドラッグデリバリーシステムに応用したりするな ど、多彩な分野で活用できると考えられる.

数 μm 程度の大きさのアクチュエータを考えると, アクチ ュエータ内の液晶分子の動きを目視で追うのは困難になる. 今研究では液晶にせん断流れを掛けた場合の分子の挙動を, 粗視化した液晶分子のモデルを用いて,分子動力学でシミュ レーションすることを研究目的とする.

2. シミュレーション条件

今回のシミュレーションでは、液晶分子を、球形原子3つ を接続することで粗視化したモデルを用いる.図1に粗視化 モデルの概形を示す.それぞれの原子はR=1.1ずつ離され た状態で、式(1)のポテンシャルエネルギーをもって結合され ている.図2に粗視化した分子のポテンシャルエネルギーの 分布図を示す.ポテンシャルエネルギー0の等高線とx,y軸 との交点をとると、x軸方向長さaに対してy軸方向長さb が約3倍になった.一般的に液晶の性質を示す物質の分子の アスペクト比は3以上とされていることから、このモデルは 液晶の性質を満たす.なお、異なる分子間に働く力は式(2) に表す Lennard-Jones ポテンシャルを用いて計算する.せん 断流れを加えるため、境界条件には Lees-Edwards 境界条件を 用いる.図3に境界条件の概要、表1にシミュレーションの 初期条件を示す.

3. シミュレーション結果および考察

3.1 せん断流れを加えない場合

図4は,t=0からt=8.0までの分子組の位置の時間変化を示したものである.図中の白線は計算領域を示し,点は原子,原子と同じ色の線で接続されているのが分子を示す.t=0は分子の初期配置を示している.t=0.5, 8.0では初期配置から移動し,分子の結合角が変化している様子がわかる.最終的にはt=17.0での位置に移動し,それからt=20.0までは位置をほとんど変えなかった.せん断流れを加えない場合,定常状態では分子の配向はランダムな状態をとった.

知能機械工学コース 流体工学研究室 1235092 三宅 栄一

$$U_{bkl} = K_b \sqrt{r_{kl} \cdot r_{kl} - R^2} \tag{1}$$

$$U_{ij} = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right]$$
(2)



Fig. 1 Concept of a coarse-grained molecule



Fig. 2 Potential energy of a coarse-grained molecule (R = 1.1)



Fig. 3 Lees-Edwards boundary condition

Simulation area [-]	$4 \times 4 \times 4$
Temperature of system [-]	0.4
Time step [-]	1.0×10 ⁻⁵
Total time [-]	20 (without shear), 50
Distance between molecules [-]	0.8
Velocity of shear flow [-]	0.0, 1.0
Numerical solution method	Velocity verlet method
Sets of molecules	125
Quantity of monomers	3
Length of connection [-]	1.1
Constant of connection energy [-]	1.0×10 ⁹
Connection angle [°]	180

3.2 せん断流れを加えた場合

図 5 は, t=0から t=50.0までの分子組の位置の時間変化 を示したものである.図 3 と同様に、図中の白線で囲んだ部 分が計算領域、点が原子、原子同士が同色の線で接続されて いるのが分子である.t=0では図 2 と同じ初期配置である. 計算開始直後では分子の向きが一様でない様子が見られた が、t=3.0付近から分子の向きが揃い始めた.t=20.0では分 子の向きはせん断流れの方向に一様に沿うようになった.こ れ以降は t=50.0まで揃った状態で移動し続けた.また、t=50.0 では y, z=4.0付近に「くの字」に曲がった分子が 2 つ 見られる.このような結合角が大きく変化している分子は、 シミュレーション中に時々境界面付近で見られた.

3.3 考察

せん断流れが無い場合,分子の配向はランダムな状態で定 常状態をとった.この状態では粗視化した分子の集合は液晶 としての性質を持たない可能性が高い.

せん断流れを加えた場合には分子が一様に配向しながら 移動したため、粗視化した分子の集合は液晶状態をとってい る可能性がある.

せん断流れがある状態では、境界線付近で折れ曲がった分 子の存在が確認できた.これは分子の一部が周期境界を超え ることに関係していると考えられる.

4. 結論

本研究では、液晶にせん断流れを掛けた場合の分子の挙動 を、粗視化した液晶分子のモデルを用いて、分子動力学の手 法でシミュレーションすることを研究目的とした.以下に得 られた結果を要約する.

・3 つの球形原子でアスペクト比3 を達成するためには,3 つの原子を距離1.1 ずつ離して結合すればよい.

・せん断流れを加えない場合,分子の配向はランダムな状態 をとったが,せん断流れを加えた場合,分子が一様に配向す る様子が確認できた.

・境界線付近で折れ曲がった分子はその一部が周期境界を超 えたために発生していると考えられる.



Fig. 4 Movement of molecules without shear flow



Fig. 5 Movement of molecules with shear flow

文献

- (1) 藤田博之, "マイクロアクチュエータと駆動原理",
- 日本ロボット学会誌, Vol.12, No.4, pp.525-530, 1994 (2) 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1報,流動の発生とメカニズム",日本機械学会論文集B編,Vol.72,No.715(2006),pp.656-661
 (3) 山口淳,辻知宏,蝶野成臣, "液晶を用いた無定形ア
- クチュエータの開発",流体工学部門講演会論文集, 2013
- (4) 須佐美俊和, 辻知宏, 蝶野成臣, "液晶を用いた超小型モータの開発", 日本機械学会年次大会講演論文集, Vol.8, pp.159-160, 2009