

卒業論文要旨

ネマティック液晶の矩形管内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 1220110 中岡 健人

1. 緒言

液晶は、液体のように流動性を持ちつつ、結晶のような異方性を有した物質であり、この特性によって、液晶は様々な工業製品に利用されている。また、液晶は構成する分子の並び方の違いにより、ネマティック液晶、スメクティック液晶などに分けられる。中でも流動性に富んだネマティック液晶は、製造過程で液晶の充填が必要となるディスプレイなどに利用されている。したがって製品への液晶充填過程における流動挙動を知ることは、品質向上を目指すうえで不可欠である。

流動挙動を調べるうえで、実際に流動中の液晶分子配向挙動を観察することは困難であることから、数値シミュレーションが有効な手段である。

本研究では Leslie-Ericksen (L-E) 理論^{(1)~(3)}を用いて、ネマティック液晶である 8CB(4-octyl-4'-cyanobiphenyl) の矩形管内流れに対して数値シミュレーションを行い、速度場が分子配向場に与える影響を考える。

2. 二次元定常流の数値解析

2.1 基礎方程式

本研究で扱う L・E 理論では、分子配向場の計算に以下の角運動方程式

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

を用いる。ここで、 $\mathbf{n}$ はディレクタと呼ばれる分子の局所的な向きを表す単位ベクトルである。また $\mathbf{N}$ 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、 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であり、

$$2F = K_1 (\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + K_2 (\mathbf{n} \cdot \nabla \times \mathbf{n})^2 + K_3 |\mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n}|^2 \quad (2)$$

と表される。なお、 K_1 、 K_2 、 K_3 は弾性係数であり物性値に依存する、

図 1 に流路断面の寸法と座標系を示す。

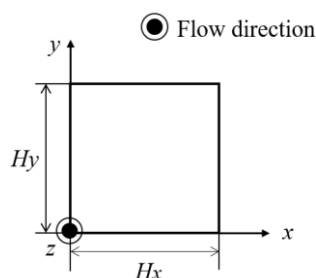


Fig.1 Flow geometry and coordinate system

2.2 物理条件

本研究では、速度場 $\mathbf{v}$ はニュートン流体の定常分布と

し、圧力勾配 $|dp/dz|$ を計算パラメータとする。また、 $\mathbf{v}$ 、 $\mathbf{n}$ は流れ方向に変化しないものとする。

境界条件として、壁面において、 $\mathbf{n}$ は流れ方向を向いているものとし、すなわち $\mathbf{n} = (0, 0, 1)$ とする。 $\mathbf{v}$ はノンスリップ条件を用いる。

$\mathbf{n}$ の初期条件には、流れ方向に一様配向としたうえで、内部においては式 (3) のように熱揺らぎなどによる微小摂動を考慮した値を考える。

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

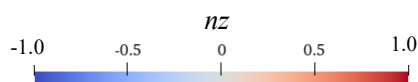
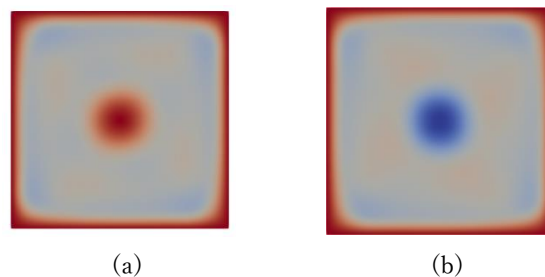
δ_x, δ_y ($|\delta_x| \leq 0.01, |\delta_y| \leq 0.01$) は、 x 軸方向、 y 軸方向の微小摂動である。

2.3 計算条件

計算には、空間微分に二次精度中心差分法を使用し、時間積分に二次精度ルンゲクッタ法を使用した。 Hx 、 Hy は 1mm とする。空間刻み幅は x 方向、 y 方向ともに 1.25×10^{-2} mm とし、時間刻み幅 dt は 1.0×10^{-4} s とする。

3. 計算結果および考察

図 2 は $|dp/dz| = 1.0$ Pa/m とし、4000s でのディレクタの z 方向成分 n_z を示したものである。また、(a)~(d) は初期値を変化させて計算を行ったものである。数値シミュレーションの結果、挙動は定常と非定常に分かれた。図 2(a)、(b) は定常状態を示しており、図 2(c)、(d) は非定常状態を示している。図 2(a) より、定常状態での分子配向場は、流路中心では流れ方向を向き、壁面と流路中心の間では、 n_z は小さくなっている。図 2(c) より、非定常状態では中心と壁面との間に、 n_z が定常状態のような 0 に近い値ではなく、 $|0.5|$ を超えるような値を持つ領域がある。また、流路中心では、図 2(b)、(d) が示すように、初期配向と逆方向の配向がある。



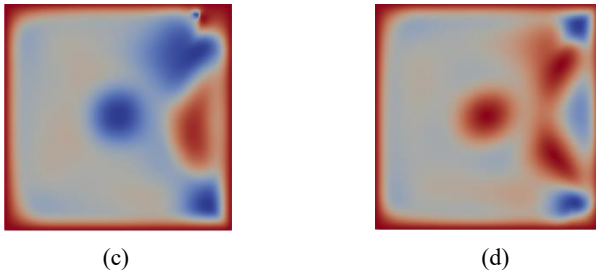


Fig.2 Channel cross section of n_z for 1.0 Pa/m

次に、異なる圧力勾配での定常状態の違いを見る。図 3(a)は、 $|dp/dz|=30\text{Pa/m}$ としたときの定常状態を示したものである。図 2(a)に比べ、流路中心ではディレクタが流れ方向を向く範囲が小さく、壁面付近では、壁面の固定配向が及ぼす影響が小さい。したがって、低圧力勾配時に比べ高圧力勾配時は、せん断面外に配向する領域が増加する。

非定常状態の違いを考える。高圧力勾配時は低圧力勾配時に比べ、 $|n_z| \leq 0.5$ となる領域が細長く、 n_z が正負反転する間隔が短くなっている。

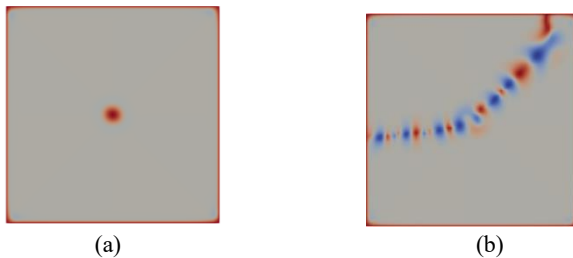


Fig.3 Channel cross section of n_z for 30 Pa/m

図 3は横軸に圧力勾配 $|dp/dz|$ 、縦軸に先述した定常状態での 2 パターンと、非定常状態の発生確率を示す。また、図 2(a)のように中心が流れ方向を向いているものを定常状態 (A)、図 2(b)のように逆方向を向いているものを定常状態 (B) とする。なお、本研究では各圧力勾配に対して、15 通りの初期値を設定し、シミュレーションを行っている。図 3 より、0.1 Pa/m ではすべて定常となっており、圧力勾配を増加させると非定常状態が発生する。また、5 Pa/m のとき、定常状態の確率が急激に減少しており、3 Pa/m 時の 3 分の 1 以下となっている。圧力勾配をさらに増加させると、定常状態となる確率は、30 Pa/m 時まで増加の傾向を見せている。

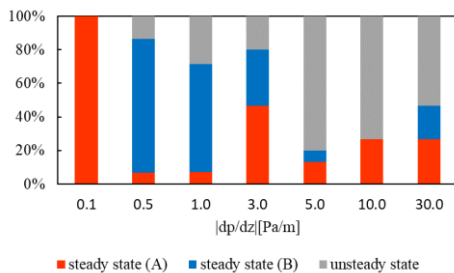


Fig.3 Probability of steady state occurrence

図 4 に、 n_z の平均値 ($\bar{n}_z$) の時間変化を示す。また、 $|dp/dz| = 1.0\text{Pa/m}$ としたときの定常状態、非定常状態に至るまでの分子挙動を示す。図 4 に注目すると、開始から 900s 付近まではどちらも振幅は減少しており、定常状態を取る場合は、1200s ほどで定常となる。一方で、非定常となる場合は、一度小さくなった振幅がもう 1 度大きくなり、定常に至ることはない。

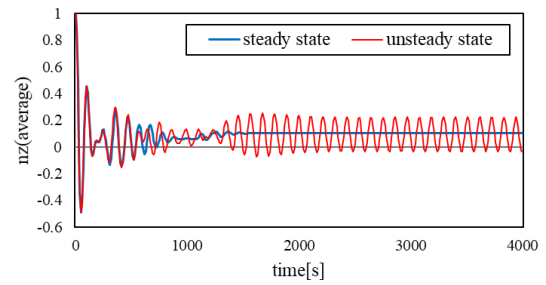
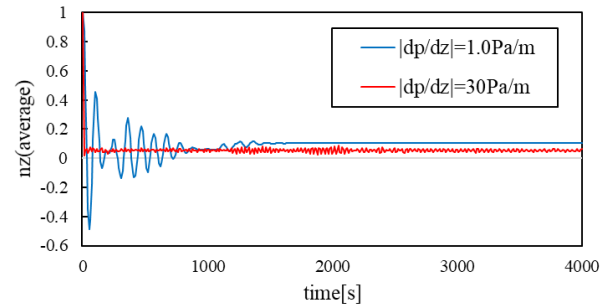
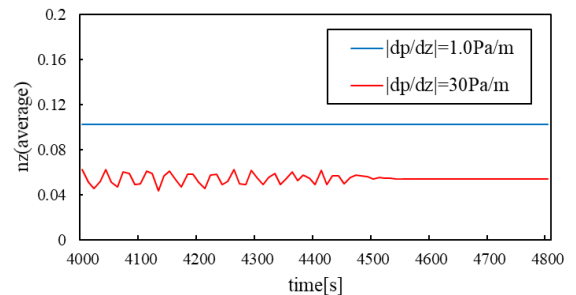


Fig.4 Relationship between time and average of n_z for 1.0 Pa/m

次に、高圧力勾配時での定常状態に至るまでの配向挙動の違いを見る。図 5 に、 $|dp/dz|=1.0, 30\text{Pa/m}$ とした時の n_z の平均値の時間変化を示す。図 5(a)は 4000s までの変化、図 5(b)は 4000s から 4800s までの変化を示す。図 5(a)から、30 Pa/m 時は 1.0 Pa/m 時に比べ、振幅が小さく、振動周期が短いことがわかる。また、図 5(b)より 30 Pa/m 時は、4500s ほどで定常状態になっていることがわかる。1.0 Pa/m 時に比べ、3 倍ほどの時間がかかっている。



(a)



(b)

Fig.5 Relationship between time and average of n_z for 1.0 Pa/m and 30 Pa/m

以上の結果から、低圧力勾配時では高圧力勾配時と比べて、定常状態の発生確率が高いことが確認できた。また、高圧力勾配時では、定常になるまでの時間が 4000s を超えるものが存在する。

これらのことから、高圧力勾配時におけるネマティック液晶の充填には、充填時間を長くとり、定常状態を作り出す必要がある。

参考文献

- (1) Ericksen, J.L., Arch. Ration. Mech. Anal., 4 (1960), 231.
- (2) Leslie, F.M., Arch. Ration. Mech. Anal., 28 (1968), 265.
- (3) de Gennes, P.G. and Prost, J., The Physics of Liquid Crystals, 2nd Ed, Clarendon Press, Oxford (1993).