Numerical simulations of molecular orientation behavior of liquid crystal flows in elliptical pipes

1. 緒言

液晶は棒状分子の配向場と流れの速度場が相互作用する 異方性流体である.液晶の注入過程において,液晶の分子配 向場は流動により乱される.この乱れは製品の製造効率や性 能に影響を及ぼす.これらの最適化には液晶流動における分 子配向場と速度場の関係を明らかにする必要がある.しかし, 流動中の液晶分子の局所的挙動を実測することは困難であ り,数値シミュレーションが有効な手段である.

液晶流動を記述する理論として,Leslie-Ericksen (L-E)理論⁽¹⁾⁻⁽³⁾がある.L-E 理論では,液晶分子の局所的平均配向方向を表す単位ベクトルであるディレクタ**n**を用いて液晶分子の配向挙動を記述している.

本研究では液晶の楕円管内流れにおける分子配向挙動の 数値シミュレーションを行い,速度場がディレクタ場(分子 配向場)に及ぼす影響について調べる.

2. 基礎式および数値計算

2.1 基礎式

本研究では、ディレクタ場の挙動を解析するために、 Leslie-Ericksen 角運動方程式

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

を用いる.ここで、N はディレクタの相対角速度ベクトル, A は変形速度テンソル、 γ_i は粘性係数を表す. F はディレク タの弾性ひずみに基づく自由エネルギ密度で

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

で与えられる.ここで, K₁, K₂,およびK₃はそれぞれディレクタ場の広がり,ねじり,曲がりに関する弾性係数である. 速度場については,ディレクタ場が速度場に及ぼす影響は小 さいと仮定し,ニュートン流体の速度場を用いる.

2.2 境界条件および計算方法

$$\mathbf{n}_{\text{wall}} = (0, 0, 1)^{\text{T}}$$
(3)

知能機械工学コース

流体工学研究室 1245024 藤原 励

を与える. vの境界条件には、すべり無し条件を与える. nの初期値には、液晶分子の熱揺らぎを考慮し、z方向への 一様配向に x 方向成分および y 方向成分への微小乱数 $|\delta_x| \leq 0$. 01、 $|\delta_v| \leq 0.01$ を与える. すなわち、

$$\mathbf{n} = \left(\delta_x, \delta_y, \sqrt{1 - (\delta_x^2 + \delta_y^2)}\right)^{\mathrm{T}}$$
(4)

を用いる.また、vについてはディレクタ場の発達速度が速 度場の発達速度に比べ遅いことから定常流

$$\mathbf{v} = (0, 0, v_z)^{\mathrm{T}}$$
 (5)

を用いる.

数値計算法として,時間積分には2次精度ルンゲクッタ法, 空間の離散化には2次精度の中心差分法(境界付近では不均 等差分法)を用いた.空間刻み幅はdx = dy = 0.01hx [m], 時間刻み幅は $\Delta t = 10^{-4}$ s とした.

なお,液晶の物性値として 4-n-4'-octylcianobiphenyl (8CB) の 34℃における値を用いた.



Fig. 1 Flow geometry and coordinate system

結果および考察

まず,アスペクト比 *R* = 1.0 すなわち円管流路の場合についての結果の一例を示す.

図 2 に|dp/dz| = 1.0, R = 1.0 におけるディレクタの流れ方 向成分n₂の平均値n₂の時間変化を示す.図 2 で示すように 5000s の間に 3 パターンの挙動が確認された.(1),(2)は定常 に至る場合,(3)は振動し定常に至らない場合である.



Fig. 2 Evolution of average of n_z for |dp/dz| = 1.0and R = 1.0

先に述べた3通りのディレクタ分布を図3に示す.なお, ディレクタの流れ方向成分n₂を図のカラーバーで示してお り,紙面手前方向が+z方向である.パターン(1)では,流路中 心でディレクタが流れ方向正の向き,パターン(2)では負の向 きに向いている.一方,パターン(3)はディレクタ場が定常に ならない場合でディレクタ反転領域が交互に現れており,軸 対称性が崩れている.また,ディレクタ場の定常分布におい て,流路中心および壁面近傍を除くほとんどの領域で,ディ レクタの流れ方向成分がほぼ0であり,ディレクタがせん断 面と直交していることが分かる.これは,ディレクタがせん 断面内で回転することによるディレクタ場の長距離弾性エ ネルギの増大を回避するために,ディレクタがせん断面外へ と逃れる out-of-plane 挙動に起因する.



Fig. 3 Evolution of director field for |dp/dz| = 1.0 and R = 1.0

図4に円管(R = 1.0)の場合の,圧力勾配をパラメータとしたときの n_z の平均値 \bar{n}_z の時間変化を示す.ただし,示したグラフはパターン(1)の定常状態に至る場合の一例である. |dp/dz| = 0.4, |dp/dz| = 1のグラフ形状を比較すると,圧力勾配が大きい方が振幅は小さく,波長は短い.また,流動開始後, \bar{n}_z は急激に減少している.一方,|dp/dz| = 10では極小値が $\bar{n}_z = -0.1$ 程度にとどまっており,定常に至るまで細かい振動を続けている.これら3通りの圧力勾配での定常状態を比較すると,|dp/dz|が大きいほど, \bar{n}_z は0に近づいている. |dp/dz| = 0.1ではゆるやかに減少し,負の値になることはない.また,定常に至るまでの時間に着目すると,|dp/dz| = 1では,1500sほどでグラフは振動しなくなるが,|dp/dz| = 0.4,|dp/dz| = 10では,定常に至るまでの時間は圧力勾配の大きさに依存しないと考えられる.



Fig. 4 Evolution of average of n_z for R = 1.0

先述したようにディレクタの初期値に乱数を用いた微小 摂動を与えており、シミュレーションの解が一意には決まら ない.各計算パラメータに対して、異なった一様乱数の微小 摂動を用いた初期値で18回の計算を行い、その結果から各 ディレクタ挙動の発生確率を求めた.

図5にR=1.0の場合の種々の圧力勾配に対するディレク タ挙動の発生確率を示す.横軸は圧力勾配,縦軸は発生確率 である. |dp/dz|=0.4以上で,パターン(1)およびパターン(3) の挙動が確認された.これは,圧力勾配が大きくなるほど, ディレクタ場に与える影響が大きいことを示している.なか でも,微小摂動の影響がこのような結果の違いを生み出して いると考えられる.また,圧力勾配が大きいほどパターン(3) の発生確率が増える傾向にある.換言すると,out-of-plane 領 域が大きいほどディレクタ場は定常に至りにくい.この理由 について,弾性より粘性の影響が強くなり,これらのトルク がつり合いづらいことが考えられる.これは,圧力勾配が大 きい流れでは弾性より粘性の影響が支配的になること,outof-plane 領域が拡大することで弾性エネルギの増大を回避す る領域が増えて,粘性の影響を強く受けることに起因する.





|*dp*/*dz*|=0.2以下の低圧力勾配では、上記の3つのパターンとは異なるパターンが確認された.その主なパターンを図6に示す.(b),(d)のようなディレクタ分布から円の中心を軸に、わずかに回転し続けるパターンや,(c)のような対称性の低いディレクタ分布で定常となるパターンが見られた.また,(a)はせん断面内のみの回転ののち、定常に至った例で、|*dp*/*dz*|=0.1ではこの挙動以外確認されなかった.



Fig. 6 Director distributions for R = 1.0

圧力勾配の違いや初期値の影響により,様々なパターンの ディレクタ挙動が発現することが分かった.次に管形状の違いがディレクタ挙動に及ぼす影響を調べる.

圧力勾配を|dp/dz|=1.0とした場合において, 流路アスペクト比をパラメータとして計算を行った.図7で示すグラフはパターン(3)の定常に至らない場合の一例である.流動開始後1000sまでの振動の波長に着目すると,アスペクト比が小さくなるほど,長くなっている.また,極小値についてはアスペクト比が小さくなるほど小さい.





Fig. 7 Evolution of average of n_z for |dp/dz| = 1.0



Fig. 8 Director distributions for |dp/dz| = 1.0

図 9 に計算パラメータに対する各ディレクタ挙動発生確 率を示す. 扁平管である *R*=0.51, *R*=0.7, *R*=0.83 では. |*dp/dz*| = 2以上ではパターン(3)の挙動しか示さなかった. *R*=0.7 では|*dp/dz*| = 0.5, 0.7で定常流が確認されたが,それぞ れ 18 回の計算で1回の確率にとどまった. 一方, *R*=0.51 で はどの圧力勾配に対してもパターン(3)の挙動を示した.

図 10 に R = 0.51 において圧力勾配をパラメータとしたと きの n_z の平均値 \bar{n}_z の時間変化を示す. 円管の時と同様に圧力 勾配が大きいほど,振幅は小さく,波長は短くなっている.

図 11 に R = 0.51 のディレクタ分布の一例を示す. |dp/dz|が大きいほど、流れ方向領域の塊が小さくなり、正負を交互に繰り返す間隔が狭くなる.



Fig. 9 Probability of emergence of director behaviors



Fig. 10 Evolution of average of n_z for R = 0.51



Fig. 11 Director distributions for R = 0.51

流路形状の違いがディレクタ挙動に及ぼす影響について 考察する.アスペクト比が小さいほど,パターン(3)の振動挙 動の発生確率が上がった.これは,流量一定の条件において, 扁平率が高いと局所せん断速度が高くなるためである.

以上の結果から,定常流を発現させるには,楕円流路を真 円に近づけ,低圧力勾配を与えればよいと考えられる.

また,流動中のディレクタ場をコントロールするためには, 電場や磁場といった外場を印加する必要があると考えられ る.

4. 結言

本研究では、楕円管内液晶流れにおける分子配向挙動を Leslie-Ericksen 理論に基づく数値計算により求めた. 圧力勾 配と流路形状の違いから以下のことが分かった.

・速度場がディレクタ場に及ぼす影響が大きく、定常ディレ クタ場は流路中心および壁面近傍の流れ方向配向領域と流 路の大部分を占める流れに垂直配向領域に分かれる.また、 その領域は圧力勾配が大きいほど大きくなる.

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).