

ネマティック液晶の粘度測定における分子配向の数値シミュレーション

Numerical simulation of molecular orientation in viscosity measurement of nematic liquid crystals

航空宇宙工学コース

流体工学研究室 1245035 岩城 凌真

1. 緒言

近年、MEMS への注目が集まっている。そんな中、液晶の力学的特性を利用したアクチュエータが研究されている。液晶アクチュエータは形状に制限が少ない、構造がシンプルで部品が少ないため小型化が容易である、駆動が高精度である点などが従来の静電気や電磁力を使用したアクチュエータに比べて優れている。

液晶分子は誘電異方性を持ち、電場の向きによって分子配向が変化する性質がある。電場を印加し液晶分子配向に変化が生じた際、液晶分子の周囲に速度勾配が発生し、液晶流動が起こる。この現象は背流と呼ばれており、物性値の一つである粘度が重要なパラメータである。

液晶の粘度は、液晶分子の配向方向によって変化する。そのため、液晶分子の配向挙動を明らかにすることが粘度測定において重要である。しかし、回転粘度計を使用した粘度測定時の配向挙動を確認することは容易ではない。

本研究では、回転粘度計を使用した液晶粘度測定時の分子配向挙動をシミュレーションによって計算し可視化、配向方向から粘度の計算を試みる。現在液晶アクチュエータの研究で主に使われているネマティック液晶を想定し、平行円板間にせん断流れと電場を印加した状態での数値シミュレーションを行う。

2. 基礎式及び計算方法

ネマティック液晶の流動解析に広く使われている Leslie-Ericksen 理論を基礎式に用いる。以下の式は連続の式、運動方程式、角運動方程式、構成方程式である。

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (1)$$

$$\rho \left\{ \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \right\} = (\epsilon_{\perp} \mathbf{E} + \Delta \epsilon \mathbf{n} \mathbf{E}) \cdot \nabla \mathbf{E} - \nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} \quad (2)$$

$$\mathbf{n} \times \left\{ \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{n}} - \nabla \left(\frac{\partial F}{\partial \Delta \mathbf{n}} \right) - \Delta \epsilon \mathbf{n} \cdot \mathbf{E} \mathbf{E} + (\alpha_3 - \alpha_2) \mathbf{N} + (\alpha_3 + \alpha_2) \mathbf{A} \cdot \mathbf{n} \right\} = 0 \quad (3)$$

$$\boldsymbol{\tau} = \alpha_1 \mathbf{n} \mathbf{n} \mathbf{n} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{n} + \alpha_2 \mathbf{n} \mathbf{N} + \alpha_3 \mathbf{N} \mathbf{n} + \alpha_4 \mathbf{A} + \alpha_5 \mathbf{n} \mathbf{n} \cdot \mathbf{A} + \alpha_6 \mathbf{A} \cdot \mathbf{n} \mathbf{n} - \frac{\partial F}{\partial \nabla \mathbf{n}} \cdot (\nabla \mathbf{n})^T \quad (4)$$

ここで $\mathbf{v}$ は速度ベクトル、 ρ は流体の密度、 p は圧力、 $\boldsymbol{\tau}$ は偏差応力テンソル、 $\mathbf{E}$ は電場ベクトル、 $\alpha_1 \sim \alpha_6$ は Leslie 粘性係数、 $\mathbf{n}$ は液晶分子の平均的方向を意味するディレクタを表す単位ベクトル、 $\Delta \epsilon = \epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}$ は誘電率の異方性、 $\epsilon_{\perp}$ および $\epsilon_{\parallel}$ はそれぞれディレクタに垂直、および平行方向の誘電率、 $\mathbf{A}$ および $\mathbf{N}$ はそれぞれ変形速度テンソルおよびディレクタと流体との相対角速度ベクトルである。 F はディレクタ場の空間歪みによる自由エネルギー密度であり、

$$2F = K_1 (\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + K_2 (\mathbf{n} \cdot \nabla \times \mathbf{n})^2 + K_3 |\mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n}|^2 \quad (5)$$

と表される。ここで K_1, K_2, K_3 はそれぞれディレクタの変形である広がり、ねじれ、曲がりで定義されているフランク弾性定数である。

以上の式の離散化について、空間微分には中心差分法、時間微分には 2 次精度ルンゲクッタ法を用いている。また、初期条件は全ての液晶分子ディレクタは垂直配向であるとし、平行円板壁面は常に垂直配向で固定している。

本研究は、回転粘度計を使用した粘度測定を想定している。そのため、回転粘度計モデルの中心を原点とする円筒座標系を用いて、液晶分子の局所的な平均配向ディレクタ $\mathbf{n} = (n_r, n_{\theta}, n_z)$ と $\mathbf{v} = (v_r, v_{\theta}, v_z)$ 分布について計算を行う。今回使用している回転粘度系モデルは、 z 軸周りに対称性を持つため、円筒座標系の簡略化が可能であることから、 θ 方向を無視することができる。そのため、計算領域は r - z 座標系であり、図 1 のように回転粘度計モデルの断面を切り取った形状で簡略化されている。

表 1 は数値シミュレーションを行う際に設定するせん断速度 $\dot{\gamma}$ 、印加電圧 V を示している。また、格子サイズ $dr = dz = 0.025 [\text{mm}]$ 、時間ステップ $dt = 1.0 \times 10^{-7} [\text{s}]$ を設定し数値シミュレーションを行う。

液晶材料は 4-Cyano-4'-pentylbiphenyl(5CB)、4-Cyano-4'-n-octylbiphenyl(8CB)の 2 種を使用している。以下、5CB、8CB とそれぞれ呼称する。表 2 は 5CB、8CB それぞれの誘電率、Leslie-Ericksen 粘性係数、フランク弾性係数である。ここで表 2 の α_3 の値に注目すると、5CB は $\alpha_3 < 0$ であるのに対し、8CB は $\alpha_3 > 0$ となっている。本研究で使用するネマティック液晶はアライニング液晶とタンブラリング液晶に大別され、前者は流れに対して微小角を保ち、後者は流れに対して回転し続ける性質を持つ。アライニング液晶かタンブラリング液晶かは α_3 の正負で判別することができ、5CB はアライニング液晶、8CB はタンブラリング液晶である。

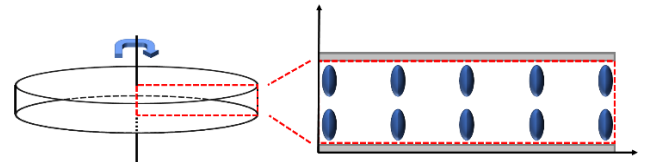


Fig.1 Calculation range diagram of parallel plate type

Table.1 Calculation condition

	5CB	8CB
$\dot{\gamma}$	5,10,30,50,100[s ⁻¹]	1,2,3,4,5[s ⁻¹]
V	0,10,20,30,40,50,60[V]	0.10,20,30,40,50,60[V]

Table.2 Material constants of 5CB and 8CB

5CB(25°C)		8CB(34°C)
Leslie Viscosities [Pa · s]		
α_1	0.0×10^{-3}	48.27×10^{-2}
α_2	-86.0×10^{-3}	-7.192×10^{-2}
α_3	-4.0×10^{-3}	4.342×10^{-2}
α_4	89.0×10^{-3}	5.859×10^{-2}
α_5	59.0×10^{-3}	6.353×10^{-2}
α_6	-31.0×10^{-3}	3.502×10^{-2}
Elastic constants [N]		
K_1	6.37×10^{-12}	1.461×10^{-11}
K_2	3.81×10^{-12}	0.705×10^{-11}
K_3	8.6×10^{-12}	1.94×10^{-11}

3. 結果, 考察

3.1 配向評価

シミュレーションで求めた液晶分子ディレクタ $\mathbf{n}=(n_r, n_\theta, n_z)$ から液晶分子の配向方向を $-90^\circ \sim 90^\circ$ で表すことができる。各ディレクタから回転ベクトルは3種求めることができるが、配向評価の視点から r 軸を回転軸とした θ 方向の回転に注目する。

可視化は2次元画像ソフトを使用し、色の変化で分子配向の角度を示している。液晶は棒状分子形状をしており、長軸の上下に区別はない。そのため、図2のように赤色に近付くと垂直配向方向、青色に近付くと水平配向方向が表示される。

図3-7は上記の方法で配向挙動を可視化したものであり、各条件の結果を経過時間で並べている。

図3, 4は5CBの配向挙動を示している。流れ方向に対して微小角を保っており、経過時間によって変化があまり見られない。5CBは前述の通りアライニング液晶に分類されており、図よりアライニング液晶の挙動が確認できる。また、図3, 4を比較すると、図4の配向挙動のほうが赤色に近く、より垂直配向方向に近付いていることがわかる。

図5-7は8CBの配向挙動を示している。8CBは前述の通りタンブリング液晶であるため、流れに対して回転し続ける挙動が確認できる。

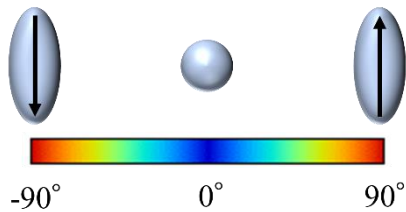
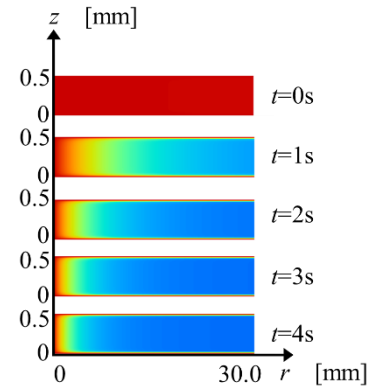
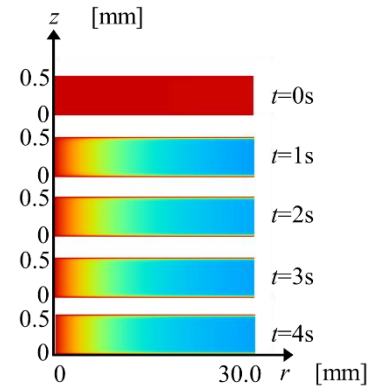
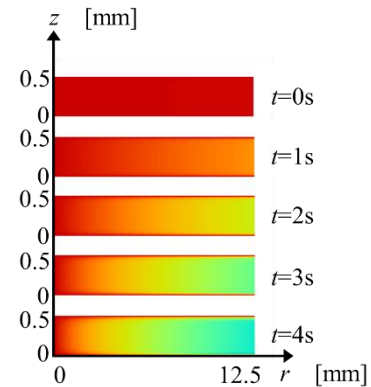
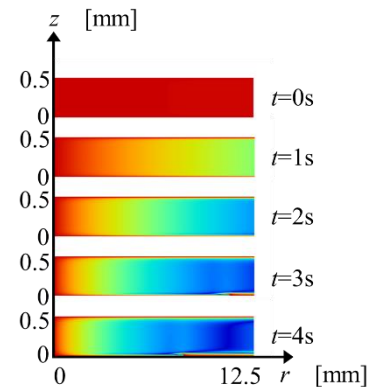


Fig.2 Color diagram of scalar change

Fig.3 Liquid crystal alignment direction(5CB, $\dot{\gamma}=30$, $V=0$)Fig.4 Liquid crystal alignment direction(5CB, $\dot{\gamma}=30$, $V=40$)Fig.5 Liquid crystal alignment direction(8CB, $\dot{\gamma}=1$, $V=0$)Fig.6 Liquid crystal alignment direction(8CB, $\dot{\gamma}=3$, $V=0$)

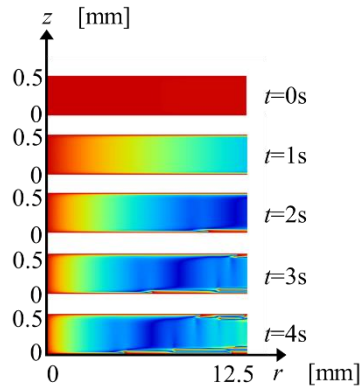


Fig.7 Liquid crystal alignment direction(8CB, $\dot{\gamma}=5$, $V=0$)

3.2 粘度評価

粘度計算で使用する式は以下の通りである.

$$T = \int_0^m \int_0^{2\pi} \tau_m r_m^2 dr d\theta \quad (6)$$

$$\tau = \frac{2T}{\pi r^3} \quad (7)$$

$$\eta = \frac{\tau}{\dot{\gamma}} \quad (8)$$

ここで T はトルク, τ はせん断応力, r は半径, m は回転円板モデルの中心側から円周側にかけての格子番号, η は粘度, $\dot{\gamma}$ はせん断速度となっている. 式(6)よりトルクを, 式(7)よりせん断応力を, 式(8)よりせん断応力とせん断速度から各条件での粘度を求めている.

液晶の粘度は液晶分子の配向方向によって大きく変化するため, 粘度測定時の液晶配向挙動は定常であることが望ましい. 5CB はアライニング液晶の挙動性質から定常値を求めることは容易であるが, タンブラング液晶である 8CB は回転し続ける挙動性質より定常を取ることは容易でない. そのため, 経過時間と粘度の関係をグラフに表し, 粘度値を推定する手法を取る,

図 8, 図 9 は 5CB の各条件粘度を示したものであり, 図 8 は横軸がせん断速度, 縦軸に粘度を示したものの, 図 9 は横軸が印加電圧, 縦軸に粘度を示したものである. 図 8 よりせん断速度が上がるにつれて粘度が減少することがわかる. 図 9 からは電圧が上がるにつれて粘度も増加することがわかる.

図 10-12 は横軸に経過時間, 縦軸に各条件での 8CB の粘度を求めたグラフである. それぞれの液晶配向挙動は図 5-7 に対応している. グラフより, 粘度が非定常であることが分かる. 時間経過とともに一度は定常に近い粘度が出るものの, その後大きく粘度が変化する. 大きく変化していることについては, 図 6 より回転粘度計モデルの円周($r=12.5$ [mm])付近で配向挙動が乱れていることが影響していることが考えられる.

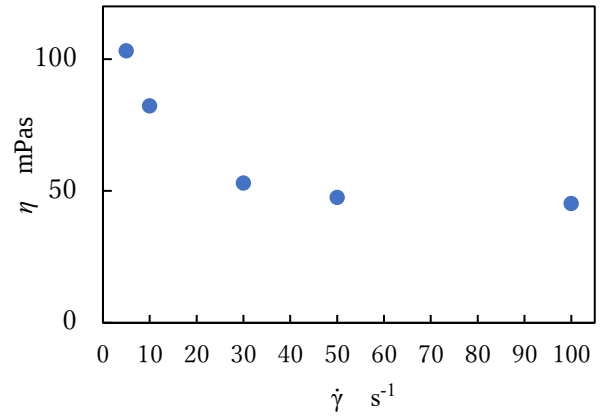


Fig.8 5CB viscosity($\dot{\gamma}=5\sim 100$, $V=40$)

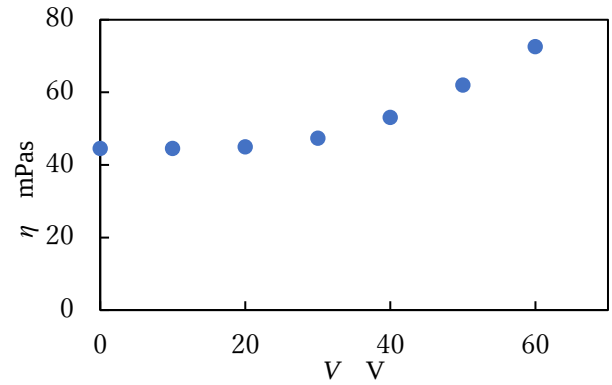


Fig.9 5CB viscosity($\dot{\gamma}=30$, $V=0\sim 60$)

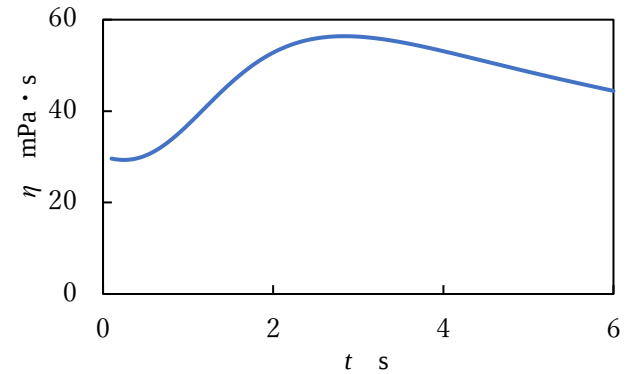


Fig.10 8CB viscosity($\dot{\gamma}=1$, $v=0$)

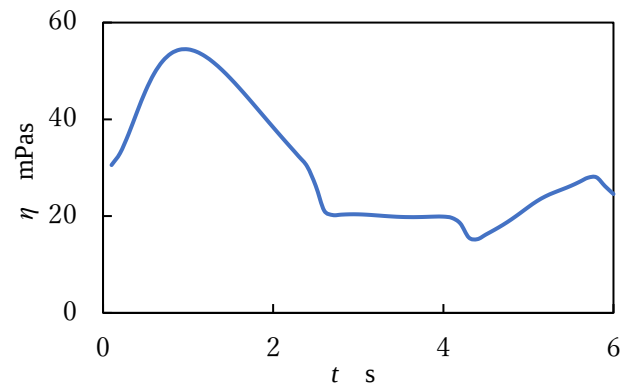


Fig.11 8CB viscosity($\dot{\gamma}=3$, $v=0$)

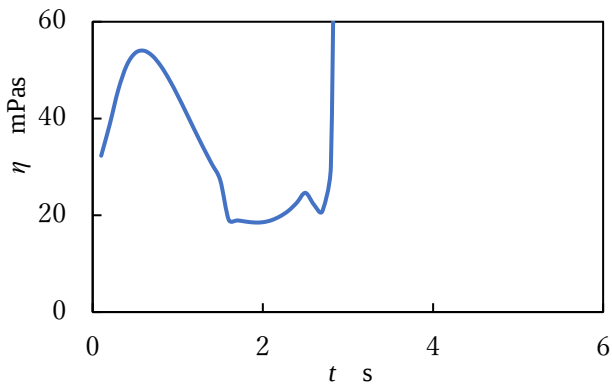


Fig.12 8CB viscosity($\dot{\gamma}=5$, $v=0$)

4. 結言

数値シミュレーションを用いて求めた液晶分子ディレクタを可視化することでアライニング液晶，タンブラリング液晶の両配向挙動を確認できた。

5CB の粘度について，せん断速度依存性と電圧依存性が確認できた。

8CB の粘度について，5CB よりもせん断速度を低く設定することで非定常粘度を計算することができた。

5. 参考文献

- (1) 折原宏，“液晶の物理”，内田老鶴園(2004)
- (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 流動の発生のメカニズム”，日本機械学会論文集 B 編，Vol.72(2006)，pp.656-661
- (3) 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5報 平板駆動の数値計算”，日本機械学会論文集 B 編，Vol.77
- (4) 蝶野成臣，辻知宏，“タンブラリング液晶の二重円筒間せん断流れの数値解析”，Nihon Reorogi Gakkaishi，Vol.40(2011)，No.5，pp.239-244
- (5) 蝶野成臣，辻知宏，Moeton M.Denn，“Spatial development of director orientation of tumbling nematic liquid crystal in pressure-driven channel flow”，Non-newtonian Fluid Mech.79(1998)，pp.515-527
- (6) 東京化成工業株式会社，“液晶材料”，東京化成工業株式会社 HP
- (7) 液晶便覧編集委員会，“液晶便覧”丸善(2000)