

卒業論文要旨

単純せん断流における高分子液晶の分子配向挙動の数値シミュレーション

Numerical simulation of molecular orientation behavior of polymeric liquid crystals under simple shear flows

システム工学群

流体工学研究室 1230039 小島 颯太

1. 緒言

液晶プラスチックはスーパーエンブラに分類され、基板などの電子部品、航空機の軽量複合材、耐震補強材など幅広い用途で使われている。また、液晶プラスチックは高強度、高弾性、低熱膨張率という3つの特徴を持つ。これらの特徴は分子の自発的配向性による⁽¹⁾。これらの特徴により、液晶プラスチックは高い性能が期待できるが、現在は20%しか発揮できていない状況である。それはスキン-コア構造によると考えられる。図1に液晶プラスチックの線状成形物(外径5mm)の縦断面の電子顕微鏡画像を示す。

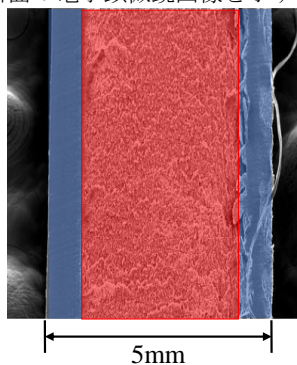


Fig.1 Electron microscope image of longitudinal cross-section polymeric liquid crystalline fiber

表面近傍の青い部分をスキン部、中心部分の赤い部分をコア部という。スキン部は高せん断速度領域で高配向状態、コア部は低せん断速度領域で低配向状態である。高配向状態では高い性能が期待できるが、低配向状態では期待できない。本研究では、配向秩序パラメータテンソル理論の時間発展方程式を用いて、分子配向挙動について明らかにする。その後、液晶高分子の流動方向への配向度合いから、各パラメータに対する、分子配向状態の関係を調べる。

2. 支配方程式

無次元化した配向秩序パラメータテンソル理論の時間発展方程式⁽²⁾は

$$\frac{GS}{Gt^*} = -\frac{6}{\{1 - \frac{3}{2}S:S\}^2} \left\{ \left(1 - \frac{U}{3}\right)S - U \left[S \cdot S - \frac{1}{3}(S:S)I \right] + U(S:S)S \right\} + \left[\frac{2}{3}\beta A^* + \beta \left\{ A^* \cdot S + S \cdot A^* - \frac{2}{3}(A^*:S)I \right\} \right] - \frac{1}{2}\beta \{ (A^*:S)S + A^* \cdot S \cdot S + S \cdot A^* \cdot S + S \cdot S \cdot A^* - [A^*:S]I \} \quad (1)$$

と表される。ここで、 U はネマティックポテンシャルエネルギー、 β は形状関数、 I は単位ベクトル、 A^* は無次元化した変

形速度テンソルである。式(1)の第一項は短距離秩序度効果、第二項は粘性効果を表す。

ここで、形状関数は $\beta = (p^2 - 1)/(p^2 + 1)$ で表され、 p はアスペクト比である。

二軸配向性を考慮した配向秩序パラメータテンソルは

$$S = \mu_1 nn + \mu_2 mm + \mu_3 ll \quad (2)$$

で表せる。この時、 μ_1, μ_2, μ_3 は固有値であり、 n, m, l は S の固有ベクトルである。

3. 数値計算

時間積分法には4次精度のルンゲクッタ法を用いて計算を行った。図2にせん断流れおよび座標系を示す。

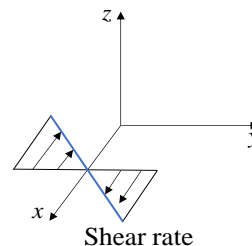


Fig.2 Shear Flow geometry and Coordinate Systems

せん断速度 $\dot{\gamma}$ が x - y 平面に流れている。また、初期条件として平衡状態における秩序度かつ主配向方向が流動方向(x 軸方向)からわずかに傾いた状態とする。つまり、

$$S = \begin{pmatrix} S_{eq} \left(\cos^2 \delta - \frac{1}{3} \right) & 0 & \frac{S_{eq}}{2} \sin 2\delta \\ 0 & -\frac{S_{eq}}{2} & 0 \\ \frac{S_{eq}}{2} \sin 2\delta & 0 & S_{eq} \left(\sin^2 \delta - \frac{1}{3} \right) \end{pmatrix} \quad (3)$$

である。ここで δ は微小摂動であり、 S_{eq} は平衡状態における秩序度である。

また、解析したパラメータとして、ネマティックポテンシャルエネルギー $U=4.0\sim 6.0$ (0.5刻み)、形状関数 β を0.85~1.00(0.01刻み)、せん断速度 $\dot{\gamma}^*$ は1~100および1~200とし、ネマティックポテンシャルエネルギーによる。また、時間刻み幅は $\Delta t^* = 0.00001/\dot{\gamma}^*$ とした。 $t^*\dot{\gamma}^*$ はせん断流れ印加後の経過した時間を表す。

4. 結果および考察

図3に分子配向挙動の模式図を示す。青い楕円形は分子の主配向ベクトルを示し、オレンジの矢印は主配向ベクトルの動き方、青の矢印は x - y 平面でのせん断流れを示す。(a)は主

配向ベクトルが回転し続ける挙動で、タンブリング挙動と呼ばれる。(b)は、主配向ベクトルが振動する挙動で、ワギング挙動と呼ばれる。(c)は主配向ベクトルが静止している挙動で、アライニング挙動と呼ばれる。(d)はせん断面外で主配向ベクトルが回転する挙動で、カヤッキング挙動と呼ばれる。

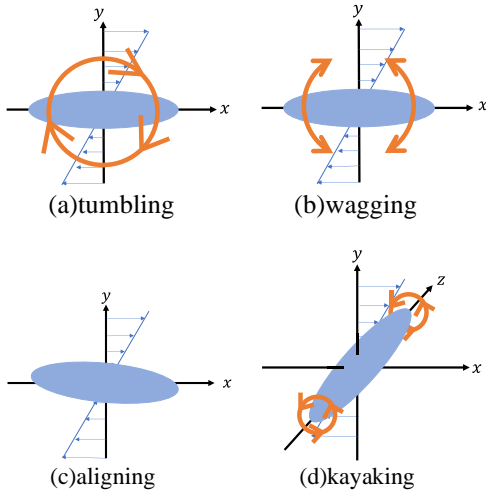


Fig.3 Molecular orientation behavior

図4は $\dot{\gamma}^*$ に対する、計算結果から得られた \mathbf{S} より求めた固有ベクトルの軌跡およびそれに対応する固有値を示す。 $\beta = 0.87$, $U=5.0$, $\dot{\gamma}^*=53$ で時間は $t^*\dot{\gamma}^*=99600\sim 100000$ であり、固有値の大きさは赤～緑～青の順に大きくなっており、カラーバーは固有値を示す。 $x=\pm 0.2$, $y=0$ 付近で固有値が最大を示す。このようなせん断面外での周期挙動は報告例がない。

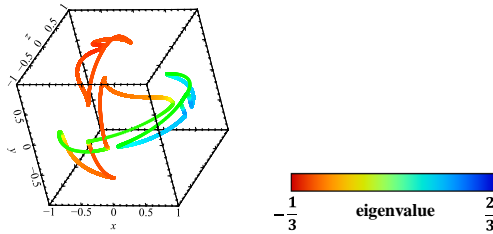


Fig.4 Trajectories of orientation of three eigenvalues $\{\mu_1, \mu_2, \mu_3\}$ and of three eigenvector $\{\mathbf{n}, \mathbf{m}, \mathbf{l}\}$

次に、 S_{11} は \mathbf{S} の成分であり、液晶分子の流れ方向への配向度合いの目安となる。時間 $t^*\dot{\gamma}^*=90000\sim 100000$ での流動方向への配向の度合いの平均である $\overline{S_{11}}$ と $\dot{\gamma}^*$ との関係を示す。

次に、図5に $U=5.0$, $\beta=0.90$ と $\beta=0.93$ における $t^*\dot{\gamma}^*$ での $\overline{S_{11}}$ を示す。縦軸を $\overline{S_{11}}$ 、横軸を $\dot{\gamma}^*$ である。 $\dot{\gamma}^*=14$ の時に $\overline{S_{11}}$ が不連続に変化し、増加している。その時の分子配向挙動はワギング挙動であった。 $\dot{\gamma}^*=60$ 以下では $\dot{\gamma}^*=14$ の時を除き、 $\overline{S_{11}}=-0.15$ 付近を示し、カヤッキング挙動をはじめとするせん断面外での周期挙動を示した。また、 $\dot{\gamma}^*=61$ で $\overline{S_{11}}$ が不連続に変化し、増加している。その時、分子配向挙動はアライニング挙動であった。以上のことより、 $\overline{S_{11}}$ が不連続に増加する所では、分子配向挙動の遷移を伴う。

そこで、図6に $U=5.0$, $\beta=0.85\sim 1.00$ で時間 $t^*\dot{\gamma}^*=90000\sim 100000$ での $\overline{S_{11}}$ の相図を示す。縦軸は β で横軸は $\dot{\gamma}^*$ を表し、カラーバーは $\overline{S_{11}}$ の範囲を表している。図6より、この範囲での低配向状態でカヤッキング挙動などのせん断面外での周期挙動が見られた。また、 $\beta=0.92$ 以上はせん断面速度に依存せず、高配向状態を示し、アライニング挙動であった。さらに、

$\beta=0.85\sim 0.92$ の範囲での低せん断速度領域で高配向状態を示す時にはワギング挙動などのせん断面内での周期挙動が見られた。せん断面内での周期挙動であるため、高配向状態を示すと考えられる。

β の値が0.85より小さくなると、低配向状態を示す範囲がさらに大きくなると考えられる。

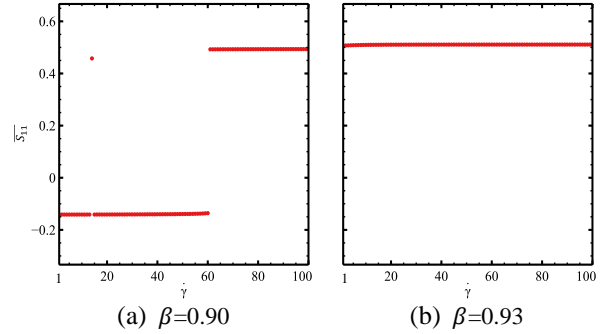


Fig.5 Averaged flow direction component S_{11} of orientation order parameter tensor \mathbf{S} spanned by the shape factor $\beta=0.90, 0.93$ and the shear rate $\dot{\gamma}^*=1\sim 100$ when the nematic potential intensity $U=5.0$

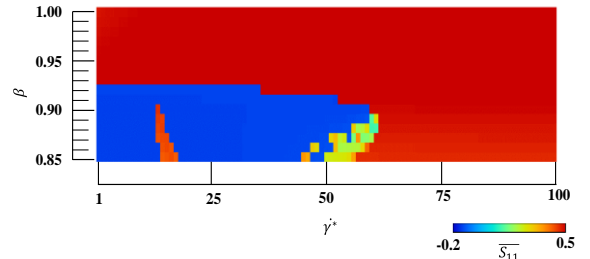


Fig.6 Averaged flow direction component S_{11} of orientation order parameter tensor \mathbf{S} spanned by the shape factor $\beta=0.85\sim 1.00$ and the shear rate $\dot{\gamma}^*=1\sim 100$ when the nematic potential intensity $U=5.0$

5. 結言

本研究では、無次元化したテンソル秩序パラメータの時間発展方程式を用いて単純せん断流れにおける高分子液晶の分子配向挙動の数値シミュレーションを行った。 $U=4.0\sim 6.0$, $\beta=0.85\sim 1.00$ での結果を以下に要約する。

- (1) 既知の分子配向挙動に加え、新たな配向挙動が見られた。
- (2) $\overline{S_{11}}$ は $\dot{\gamma}^*$ によらず、大きな変化はなかった。さらに、全せん断速度領域でアライニング挙動を示した。

以上のことから、 $t^*\dot{\gamma}^*=90000\sim 100000$ における流動方向への配向の度合いである $\overline{S_{11}}$ は形状関数 β が全せん断速度領域でアライニング挙動を示すときかつ、 β が増加するほど理想的な高配向状態となり、スキン部の領域が大きくなると推察できる。

文献

- (1) 蝶野成臣, 辻知宏, 谷口聡, 「高分子液晶のレオロジーの数値解析(第一報, せん断流特性)」, 日本機械学会論文集 (B編)62巻594号(1996-2), No.95-1240, p190-196
- (2) Tomohiro Tsuji, Alejandro D. Rey*, "Effect of long range order on sheared liquid crystalline materials Part 1: compatibility between tumbling behavior and fixed anchoring", J.Non-Newtonian Fluid Mech.,73(1997)127-152