

卒業論文要旨

ネマティック液晶のせん断流れにおける

Out-of-Plane 配向挙動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 1230161 三谷 泰正

1. 緒言

現在、新たな液晶デバイスとして、液晶発電軸受けの研究が進められている。これは液晶が流動することによって分子の配向状態が変化し起こる、液晶の巨視的な分極を利用したものである。しかし先行研究では分極によって得られた電位差は不規則であった。これは液晶分子の不規則な分子配向挙動に起因するものである。この不規則な分子配向挙動の原因として Out-of-Plane 配向挙動が挙げられる。Out-of-Plane 配向挙動とは、液晶分子のディレクタがせん断面内での回転から、ディレクタがせん断面外へ向いた回転となる挙動のことである。Out-of-Plane 配向挙動は発生条件が未解明のものも多い。そのため、液晶発電軸受けの開発には Out-of-Plane 配向挙動を制御するための発生条件の解析が必要である。

本研究では、Out-of-Plane 配向挙動の発生条件の解析ために、ディレクタ分布ではなく流動中の一つのディレクタに着目し、液晶分子配向挙動を Leslie-Ericksen 理論を用いて数値シミュレーションを行い、Out-of-Plane 配向挙動とせん断面内角度の関係性について調べる。

2. 支配方程式と数値計算

本研究ではネマティック液晶の支配方程式として、Leslie-Ericksen 理論⁽¹⁾を用いる。用いる基礎方程式を以下に示す。本研究では一つのディレクタに着目し数値シミュレーションを行うので、基礎式はディレクタ \mathbf{n} に関する角運動方程式のみである。

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

で表される。ここで \mathbf{n} は単位ベクトルである。 γ_1 と γ_2 は以下のように表される。

$$\gamma_1 = \alpha_3 - \alpha_2 \quad (2)$$

$$\gamma_2 = \alpha_6 - \alpha_5 \quad (3)$$

$\alpha_i (i=2, 3, 5, 6)$ は Leslie 粘性係数である。 \mathbf{A} は変形速度テンソル、 \mathbf{N} はディレクタと流体の相対角度ベクトルであり、以下のように表される。

$$2\mathbf{A} = (\nabla \mathbf{v})^T + (\nabla \mathbf{v}) \quad (4)$$

$$\mathbf{N} = \frac{D\mathbf{n}}{Dt} - \boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{n} \quad (5)$$

\mathbf{v} は速度ベクトル、 D/Dt は実質微分であり、 $\boldsymbol{\Omega}$ は渦度テンソルで

$$2\boldsymbol{\Omega} = (\nabla \mathbf{v})^T - (\nabla \mathbf{v}) \quad (6)$$

と表される。また F は

$$F = \frac{1}{2} K_1 (\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + \frac{1}{2} K_2 \{ \mathbf{n} \cdot (\nabla \times \mathbf{n}) \}^2 + \frac{1}{2} K_3 \{ \mathbf{n} \times (\nabla \times \mathbf{n}) \}^2 \quad (7)$$

で表される。液晶分子の空間的歪みによる液晶分子場の弾性エネルギーである。 K_1 、 K_2 、 K_3 はそれぞれスプレイ変形、ツイスト変形、バンド変形に対応するフランク弾性定数と呼ばれる定数である。

図 1 に本研究で用いた座標系について記す。

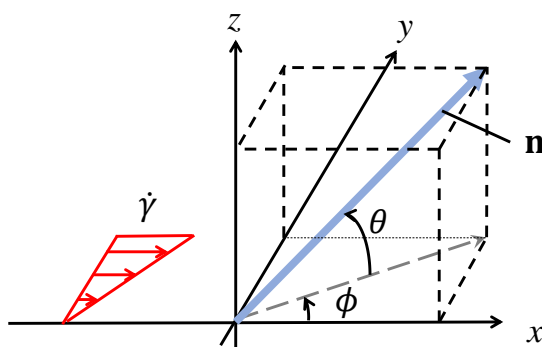


Fig.1 Coordinate system

このような座標系をとるとディレクタ \mathbf{n} は以下のように表せる。

$$\mathbf{n} = \begin{pmatrix} n_x \\ n_y \\ n_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta \cos\phi \\ \cos\theta \sin\phi \\ \sin\theta \end{pmatrix} \quad (8)$$

以上 8 つの式を用いてせん断面内角度の時間微分 $\partial\phi/\partial t$ とせん断面外角度の時間微分 $\partial\theta/\partial t$ で整理しディレクタを ϕ と θ で表すことで解析を行った。

本研究ではタンプリング液晶である 4-n-Octy-4'-cyano biphenyl (8CB) を選択した。8CB (34°C) の物性値である、Leslie 粘性係数⁽²⁾と Frank 弾性定数⁽³⁾を以下の表 1 と表 2 に示す。

Table1. Leslie viscosity coefficient Table.2 Frank elastic constant

Viscosity coefficients Pa·s		Elastic constants N	
α_2	-7.19×10^{-2}	K_1	1.46×10^{-11}
α_3	4.34×10^{-2}	K_2	0.70×10^{-11}
α_5	6.35×10^{-2}	K_3	1.94×10^{-11}
α_6	3.50×10^{-2}		

解析を行うディレクタの周囲の空間勾配 $\partial\theta/\partial y$ 、 $\partial^2\theta/\partial y^2$ 、 $\partial\phi/\partial y$ 、 $\partial^2\phi/\partial y^2$ をパラメータとして与える。本研究では解析条件として、 $\partial\phi/\partial y$ 、 $\partial\theta/\partial y$ を 10^0 、 10^2 、 10^4 、 $\partial^2\phi/\partial y^2$ 、 $\partial^2\theta/\partial y^2$ を 10^0 、 10^2 、 10^4 、 10^6 、 10^8 と 10^2 刻みに変化させることで解析する。ディレクタにはせん断速度として $\partial v_x/\partial y = 1.00$ [1/sec] を与える。ディレクタのせん断面内角度 ϕ とせん断面外角度 θ は初期値を $\phi = 0.0^\circ$ 、 $\theta = 5.7^\circ (0.1[\text{rad}])$ とする。解析時間は $t = 1000\text{s}$ までとし、時間刻み幅 dt を 0.01s とする。また、解析時間内にディレクタがせん断面外へと向き、 z 軸と平行になると終了とする。

3. 結果と考察

図2に $\partial\theta/\partial y=10^2$, $\partial\phi/\partial y=10^2$, $\partial^2\phi/\partial y^2=10^4$ に固定し, $\partial^2\theta/\partial y^2$ の値を変化させ解析を行った結果を示す. 図2の(a), (b), (c), (d), (e)はそれぞれ $\partial^2\theta/\partial y^2=10^0, 10^2, 10^4, 10^6, 10^8$ であるときのディレクタの挙動をディレクタ先端の軌跡で示している. カラーバーは時間経過を示している.

$\partial^2\theta/\partial y^2=10^0\sim 10^4$ である場合, いずれもディレクタが回転を始めると, ディレクタの n_z 成分はせん断面内角度 $\phi=0^\circ\sim 90^\circ$ で一時的に減少し, 続いて, $\phi=90^\circ\sim 180^\circ$ では増加した. さらに回転が進むと, $\phi=180^\circ\sim 270^\circ$ でもう一度 n_z の値は一時的に減少し, $\phi=270^\circ\sim 360^\circ$ では再び増加した. このようにしてディレクタは一周の中に周期性のある回転をした. さらに $\phi=0.0^\circ, 180^\circ, 360^\circ$ のとき, n_z 成分はおおよそ同じ値であり, また $\phi=90^\circ$ のときは $\phi=270^\circ$ のときと n_z 成分の値がおおよそ同じになった. またディレクタはおおよそ同じ挙動で $t=1000s$ まで回転し続けた. 一方で $\partial^2\theta/\partial y^2=10^6, 10^8$ のとき, ディレクタ挙動は $\partial^2\theta/\partial y^2=10^0\sim 10^4$ のときとは異なる挙動を示した. $\partial^2\theta/\partial y^2=10^6$ である場合, $\partial^2\theta/\partial y^2=10^0\sim 10^4$ のときにも見られたような, ディレクタが一周する中で, 周期性のある回転をしたが, 2周目以降は同じ軌道を通らず, n_z の値は一周するごとに徐々に増加していった. $\partial^2\theta/\partial y^2=10^8$ のときでは一周ごとの n_z 成分の増加量は $\partial^2\theta/\partial y^2=10^6$ のときと比べ大きくなり, 解析時間が $t=147.9s$ でディレクタは z 軸と平行となった.

$\partial^2\theta/\partial y^2$ の値が大きくなるに従い, 周囲のディレクタはせん断面外へと大きく向く. そのためディレクタ挙動は周囲のディレクタの弾性の影響によってせん断面外へと向いたと考えられる.

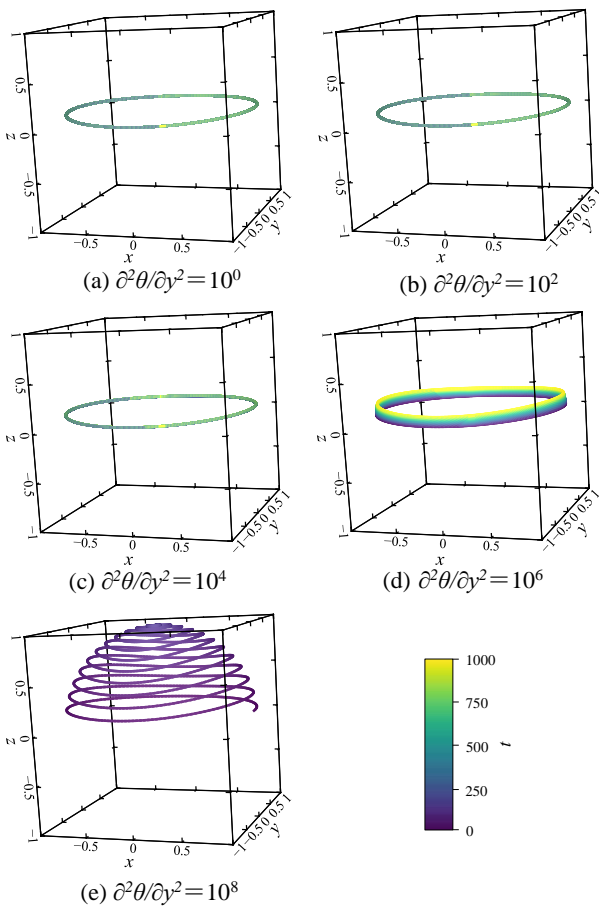
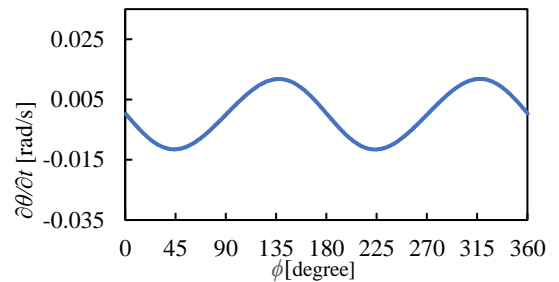
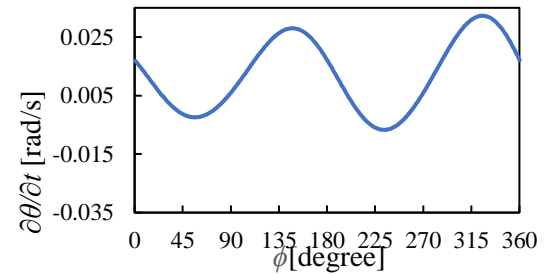


Fig.2 Directors with changed $\partial^2\theta/\partial y^2$

次にせん断面内角度と Out-of-Plane 配向挙動の関係について調べた. 図3に $t=0.0s$ の $\phi=0.0^\circ$ から $\phi=360^\circ$ までの $\partial\theta/\partial t$ の変化を示す. $\partial\theta/\partial y=10^2$, $\partial\phi/\partial y=10^2$, $\partial^2\phi/\partial y^2=10^4$ に固定し, $\partial^2\theta/\partial y^2=10^6, 10^8$ としたときをそれぞれ(a), (b)に示す. 二つの結果の最大値はそれぞれ $\phi=137^\circ$ で $\partial\theta/\partial t=1.17 \times 10^{-2}$, $\phi=325^\circ$ で $\partial\theta/\partial t=3.22 \times 10^{-2}$ となった. 一方でいずれも $\partial\theta/\partial t$ の値はせん断面内角度 ϕ が第2象限, 第4象限にあるとき極大となり, 第1象限, 第3象限にあるとき極小となった. よって Out-of-Plane 配向挙動は, ディレクタが第2象限, 第4象限にあるときに発生しやすくなると考えられる. また, $\partial\theta/\partial t$ の値がせん断面内角度の第2象限, 第4象限であるとき極大となり, 第1象限, 第3象限であるとき極小となったのはせん断流れの非回転流の影響により第1象限, 第3象限ではディレクタにせん断面内へ戻そうとする力が働き, 第2象限, 第4象限ではディレクタはせん断面外へと押し出されるためだと推察する.



(a) $\partial\theta/\partial y=10^2$, $\partial^2\theta/\partial y^2=10^6$, $\partial\phi/\partial y=10^2$, $\partial^2\phi/\partial y^2=10^4$



(b) $\partial\theta/\partial y=10^2$, $\partial^2\theta/\partial y^2=10^8$, $\partial\phi/\partial y=10^2$, $\partial^2\phi/\partial y^2=10^4$

Fig.3 Relationship between $\partial\theta/\partial t$ and ϕ .

4. 結言

本研究では Leslie-Ericksen 理論の角運動方程式を用いてせん断流れにおける Out-of-Plane 配向挙動の数値シミュレーションを行った. 得られた結果を以下に示す.

- (1) $\partial^2\theta/\partial y^2=10^6, 10^8$ のときディレクタの n_z 成分は周回を重ねるごとに増加した. これは $\partial^2\theta/\partial y^2$ の値が大きくなるに従いディレクタ挙動は周囲のディレクタの弾性の影響によってせん断面外へと向いたと推察する.
- (2) $\partial\theta/\partial t$ の値はせん断面内角度 ϕ が第2象限, 第4象限にあるとき極大となり, 第1象限, 第3象限にあるとき極小となった. Out-of-Plane 配向挙動は極大となる第2象限, 第4象限で発生しやすいと考えられる.

文献

- (1) F.M.Leslie, Arch.Ration.Mech.Anal,28,(1968),265.
- (2) H.Kneppe, F.Schneider, N.K.Sharma" A Comparative Study of the Viscosity Coefficients of Some Nematic Liquid Crystals" Volume85, Issue8, August 1981, pp. 784-789
- (3) P.P.Karat, N.V.Madhusudana "Elasticity and Orientational Order in Some 4'-n-Alkyl-4-Cyanobiphenyls: Part II" 27 Oct 1976, pp. 239-245