

ネマティック液晶の二重円筒間せん断流れにおける

分子配向場の非定常挙動の数値シミュレーション

Numerical simulations of transient behaviors of molecular orientation field of nematic liquid crystal under shear flows between concentric cylinders

知能機械工学コース

流体工学研究室 1255006 鬼丸 直也

1. 緒言

液晶流動中の配向状態は、流動による粘性効果および液晶特有の分子配向場の長距離弾性効果によって決定される。前者の粘性効果は、流量を通じてその強さをコントロールできる。一方、後者の長距離弾性効果は、液晶の物性値と分子配向場の空間勾配のみに依存するため、その直接的コントロールは困難である。そこで、流路壁面におけるアンカリングに着目する。アンカリングとは、固体壁面に配向膜を製膜することで壁面における分子配向方向を任意の方向に固定する技術であり、液晶ディスプレイにおいても一般的に用いられている。図1は、アンカリング処理を施した2枚の平板間に充填された液晶の平衡状態における分子配向分布の模式図である。図中、円筒は液晶の棒状分子を模擬しており、円筒軸の方向に棒状分子の長軸が向いているとする。緑色の円筒で示されている上下平板面のアンカリング条件の組み合わせ(①上下ともに平板面に垂直、②上部平板面で平板面に垂直かつ下部平板面で平板面に平行、③上下ともに平板面に平行かつ同じ方向、④上下ともに平板面に平行かつ直交方向)により、液晶内部の分子配向状態が決定される。これらの空間分布を①Homeotropic分布、②Hybrid分布、③Planar分布、④Twist分布と呼ぶ。分子配向の分布の違いは分子配向場の長距離弾性効果の違いを生じさせることから、間接的かつ限定的ではあるがアンカリング条件を通じて長距離弾性効果をコントロール可能であると言える。

本研究では Leslie-Ericksen 連続体理論を用いて、2重円筒間せん断流れにおける液晶分子配向挙動の数値シミュレーションを行い、流量(粘性力)およびアンカリング条件(分子場弾性力)が分子配向場の非定常挙動である、配向欠陥構造に及ぼす影響を明らかにする。

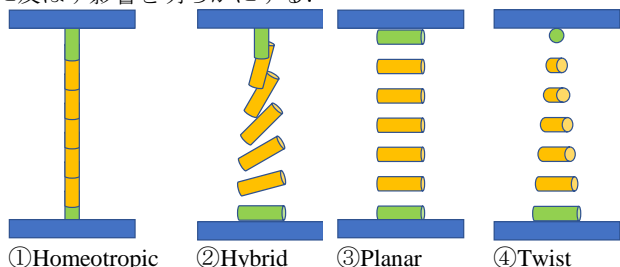


Fig. 1 Anchoring case.

2. 数値計算

ディレクタ場を記述する Leslie-Ericksen 角運動方程式⁽¹⁾は以下のように表される。

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

ここで、 \mathbf{n} はディレクタであり、棒状の液晶分子の長軸方

向の局所的な空間平均配向を表す単位ベクトルである。粘性係数 γ_1, γ_2 は Leslie 粘性係数 $\alpha_2, \alpha_3, \alpha_5, \alpha_6$ を用いて、 $\gamma_1 = \alpha_3 - \alpha_2, \gamma_2 = \alpha_6 - \alpha_5$ と表される。

\mathbf{A} は変形速度テンソル、 \mathbf{N} はディレクタ流体の相対角速度ベクトルであり、 F はディレクタ場の歪みによって生じる液晶分子場の弾性エネルギー

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

である。 K_1, K_2, K_3 はフランクの弾性定数である。一方、速度場については、配向場が速度場に与える影響は小さいため、ニュートン流体の二重円筒間クエット流れの速度場を与える。図1に同心2重円筒間流れの計算領域および座標系を示す。内筒を回転させ、円筒間の液晶にせん断流れを印加した場合について考える。本研究では内筒半径 $r_{in}=2.5\text{mm}$ 、外筒半径 $r_{out}=3.0\text{mm}$ とする。 z 方向の計算領域については $L=2.5\text{mm}$ として周期境界条件を与える。円筒座標系で式(1)を展開した後、内円筒速度を与えて、ディレクタ場について数値計算を行う。ここで、エリクセン数 Er は粘性力と分子場弾性力の比を表す無次元量であり、平均弾性定数の $\bar{K} = (K_1 + K_2 + K_3)/3$ を用いて以下の式で定義される。

$$Er = \frac{\gamma_1 \left(\frac{r_{out}}{r_{in}} - 1 \right) \omega}{\bar{K}} \quad (3)$$

アンカリング条件として、ディレクタが壁面に対して垂直方向に配向している垂直配向、壁面に対して水平方向であり θ 軸方向に配向している θ 軸水平配向の2種類を条件として用いる。表1にアンカリング条件の組み合わせを示す。

初期条件として、微小ノイズを与えた液晶分子配向場とするので数値計算では、乱数により微小ノイズを与えている。

本研究では図2に示す計算領域で円筒座標系を採用する。数値計算法として空間離散化には二次精度中心差分を、時間積分には二次精度ルンゲクッタ法を用いた。計算格子幅は r 方向を100分割、 θ 方向を3000分割、 z 方向を500分割とする。時間ステップ $\Delta t=0.01\text{s}$ とした。物性値として、タンプリング液晶である4-octyl-4'-cyanobiphenyl(8CB)の値を用いる。

Table 1 Combination of anchoring conditions

	$\mathbf{n}(r_{in})$	$\mathbf{n}(r_{out})$
Homeotropic	(1, 0, 0)	(1, 0, 0)
Hybrid	(1, 0, 0)	(0, 1, 0)
Planar	(0, 1, 0)	(0, 1, 0)
Twist	(0, 1, 0)	(0, 0, 1)

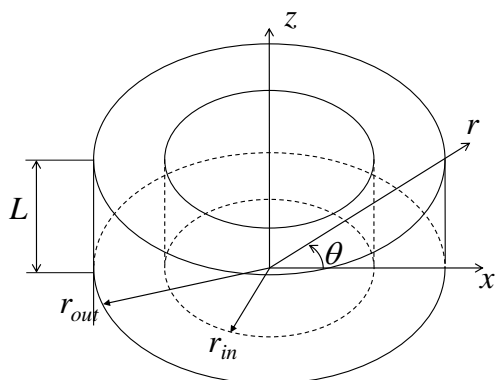


Fig. 2 Flow geometry and coordinate system.

3. 計算結果及び考察

図3は、Homeotropicの場合の $Er=150$ における二重円筒間せん断流れ中のディレクタの z 方向成分である n_z の空間分布の時間変化を示す。赤色および青色の面は -0.5 , および $+0.5$ の等値面を表す。 $t=0s$ の平衡状態において、ディレクタは r 軸方向に配向した一様分布であり、 ± 0.5 の等値面は現れない。せん断流れ印加後、ディレクタはせん断面内にて回転し、 $t=190s$ において、内円筒近傍に青と赤の等値面が不規則に現れる。流動による円筒間隔付近のディレクタの回転が大きくなり、円筒面でのアンカリング条件との間でディレクタの大きな空間勾配を生じる。ディレクタの空間勾配がある臨界値を超えると、ディレクタがせん断面外へと逃れることで式(2)で示されるフランク弾性エネルギーを低減する Out-of-Plane 挙動を示すことが知られている。せん断面である $r-\theta$ 平面からの逃れが $+z$ 方向であるか $-z$ 方向であるかは確率的に等価であり、 $\pm z$ 領域が空間的にランダムに現れる。その後、 $t=380s$ では円筒間隔全体でディレクタがせん断面外に大きく向き、 $t=500s$ では正負の領域の間隔が一旦拡大するものの、 $t=1000s$ では領域の間隔は再び狭くなっている。その後、 n_z 分布における正負の領域パターンは流れ方向に延伸されたような構造へと遷移する。

次に、乱流渦構造の可視化手法と類似の手法を用いて配向欠陥構造の可視化を試みる。すなわち、ディレクタ勾配テンソル $\mathbf{D}(\nabla\mathbf{n})$ の第二不変量 I_D を利用して、配向欠陥構造を抽出する。図4は $I_D=3 \times 10^8$ の等値面(緑色)の時間変化を示す。 $t=190s$ で配向欠陥構造が現れ始め、 $t=380s$ にかけて配向欠陥構造の空間密度が上昇する。さらに、 $t=500s$ で欠陥密度が低下した後、 $t=1000s$ において欠陥密度の上昇が確認できる。その後も、欠陥密度の低下および上昇を繰り返しながら、線状の欠陥が流れ方向を向くように再構成され、最終的に円周を一周するような欠陥組織構造へと至る。

図5は $Er=150$ の場合の Homeotropic, Hybrid, Planar, Twist における透過光強度分布図である。Homeotropic では、ディレクタ場の組織構造パターンとして、暗視野領域が明視野領域を分断するように線状化している。Hybrid では、Homeotropic の場合と比較して細かくなっている。これは、平衡状態においてディレクタ場に歪みが存在しており、分子場弾性力による分子配向場の一様化作用が小さくなったためであると考えられる。Planar での組織構造については、流れ方向に延伸されたような特徴的なパターン形成が発現している。せん断流れ中のディレクタに働く粘性力の影響は、ディレクタが流れ方向に向く場合に最も低くなる。粘性力の影響の低下にともなって対流の影響を強く受け流れ方向に延伸されたようなディレクタ場の組織構造パターンが形成されたと考えられる。

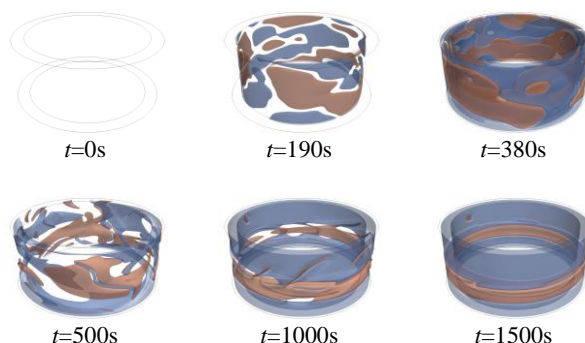


Fig. 3 Evolution of n_z field under shear flow between concentric cylinders.

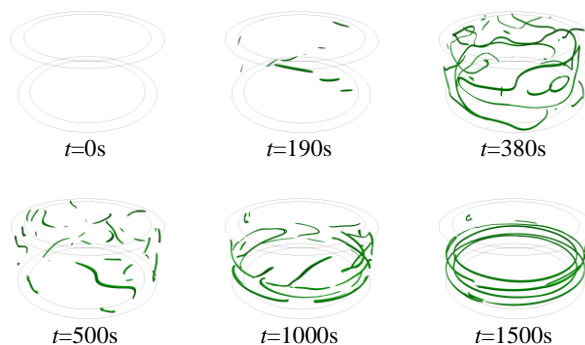


Fig. 4 Spatial distributions of I_D for $Er=150$ and the homeotropic case.

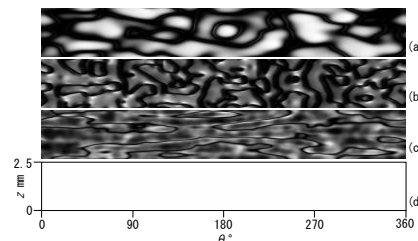


Fig. 5 Distributions of transmitted polarized light of $Er=150$ for (a) homeotropic at $t=190s$, (b) hybrid at $t=190s$, (c) planar at $t=140s$ and (d) twist at $t=40s$.

4. 結言

本研究ではネマティック液晶の二重円筒間せん断流れの数値シミュレーションを行い、分子配向場の非定常挙動について調べた。得られた結果を以下に要約する。

- 二重円筒間せん断流れにおけるディレクタ挙動として、せん断流れ印加後にせん断面内における回転挙動を示す。その後、時間の経過に伴い Out-of-Plane 挙動の発生と不規則な $\pm n_z$ 領域が形成される。そして、 n_z の異符号領域の境界の中でも、ディレクタ場が急激に変化している領域において配向欠陥構造が形成され、さらには欠陥構造が円周方向に連なるような線欠陥構造の形成へと至る。

- 二重円筒せん断流れにおけるネマティック液晶の分子配向場の組織構造は内外円筒壁面におけるアンカリング条件に強く依存する。

文献

- (1) F.M.Leslie, Arch. Ration. Mech. Anal, 28, (1968), 265.