

磁場印加時における平行平板間ネマティック液晶の非定常挙動の数値シミュレーション C-343

Numerical Simulation of Transient Behaviors of a Nematic Liquid Crystal between Parallel Plates under Magnetic Fields

○辻知宏 (高知工大), 蝶野成臣 (高知工大), 築地徹浩 (上智大)

Tomohiro TSUJI*, Shigeomi CHONO, Tetsuhiro TSUKIJI**

*Dept. of Intelligent Systems Eng., Kochi University of Technology, Tosayamada-cho, Kochi-ken, Japan

**Dept. of Mechanical Engineering, Sophia University, 7-1, Kioi-cyo, Chiyoda-ku, Tokyo, Japan

Unsteady behaviors of a nematic liquid crystal is simulated by using the Leslie-Ericksen equations as a constitutive equation. Under a magnetic field imposed on a part of the flow domain with a transverse component. The flow is symmetric with respect to the channel centerline at small Zöcher numbers, while the director aligns with the magnetic field and the flow symmetry is broken when the Zöcher number becomes more than a critical value. This value at which a Freedericksz-like transition in director orientation is induced increases with increasing Ericksen numbers. After the transition, streamlines show a wavy pattern, especially at the boundaries of the magnetic field. The velocity profile is flat in the magnetic field, because imposition of the field induces a transverse alignment of the director near the channel centerline, resulting in a higher viscosity there and a lower viscosity near the channel walls. Furthermore, we have simulated the flow with a magnetic field imposed on the whole flow domain, and it is found that the finite extent of the magnetic field acts to retard the transition.

1. 緒言

外部からの電磁場印加が流体のレオロジー特性, 特に粘度が変化することを利用して, 機器のアクチュエータや制御に用いられている流体を ER (Electro-rheological) 流体, MR (Magneto-rheological) 流体という. 液晶は ER・MR 流体の一つとして注目されており¹⁾, 沈殿などの不均一性を生じないので, 分散系の ER・MR 流体よりも長時間の使用に対する信頼性は高く, さらなる応用が期待されている. 液晶の ER・MR 特性に関する従来の研究はほとんどが定常流に関するもので, 非定常挙動を扱った研究は極めて少ない. 液晶を応用した各種機器の精密制御や電磁場印加を比較的高い周波数で行う場合には, 電磁場印加時の非定常挙動に関するデータの蓄積が不可欠であることは言うまでもない.

築地らは^{2,3)}, 低分子ネマティック液晶を用いて電場印加時の圧力の非定常測定と可視化実験を行っている. その結果, 印加電圧が比較的小さい場合, 圧力は定常値に単調に漸近するが, 印加電圧が大きい場合には圧力は単調変化をせず一旦オーバーシュートすることが報告されている.

本研究では, ネマティック液晶の流動に関して完成度の高い理論である Leslie-Ericksen (L-E) 理論⁴⁾を構成方程式として, 築地らの実験結果を理論的な側面から検討し, 且つ, 外場印加時の液晶の非定常特性を数値的に解析することを目的とする. すなわち, 液晶の平行平板間一方向流れに, 流れに対して垂直に一樣磁場を印加した際の速度分布, 配向分布, および圧力の時間変化を調べる.

2. 計算方法

磁場の作用下における液晶の等温流れを記述する基礎式は Leslie-Ericksen 理論より,

・連続の式:

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

・運動方程式:

$$\rho \frac{D\mathbf{v}}{Dt} = \mathbf{F} - \nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} \quad (2)$$

・角運動方程式:

$$\mathbf{0} = \mathbf{n} \times \left\{ \mathbf{G} - \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{n}} + \nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \nabla \mathbf{n}} \right) + \gamma_1 \mathbf{N} + \gamma_2 \mathbf{A} \cdot \mathbf{n} \right\} \quad (3)$$

・偏差応力テンソル

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

・磁場による単位体積当たりの外力

$$\mathbf{F} = (\chi_{\perp} \mathbf{H} + \Delta \chi \mathbf{n} \cdot \mathbf{H} \mathbf{n}) \cdot (\nabla \mathbf{H}) \quad (5)$$

・磁場によるディレクタに作用する単位体積当たりの外力

$$\mathbf{G} = \Delta \chi \mathbf{n} \cdot \mathbf{H} \mathbf{H}$$

・ディレクタの弾性ひずみに基づく自由エネルギー密度

$$F = \frac{1}{2} \left\{ K_1 (\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + K_2 (\mathbf{n} \cdot \nabla \times \mathbf{n})^2 + K_3 |\mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n}|^2 \right\} \quad (6)$$

ここで \mathbf{v} は速度ベクトル, ρ は流体密度, p は圧力, D/Dt は実質微分, \mathbf{n} は液晶分子の局所的な平均配向方向を表す単位ベクトルでディレクタ, \mathbf{A} は変形速度テンソル, \mathbf{N} はディレクタと流体との相対角速度ベクトル, $\alpha_1 \sim \alpha_6$ はレズリー粘性係数, $K_1 \sim K_3$ は弾性定数, \mathbf{H} は磁場ベクトル, χ_{\perp} および χ_{\parallel} はそれぞれディレクタに垂直および平行方向の反磁性磁化率, $\Delta \chi = \chi_{\perp} - \chi_{\parallel}$ は磁化率の異方性, γ_1, γ_2 は粘性係数であり, レズリー粘性係数と以下の関係がある.

$$\gamma_1 = \alpha_3 - \alpha_2$$

$$\gamma_2 = \alpha_6 - \alpha_5 = \alpha_2 + \alpha_3$$

以上の基礎式を図 1 に示す座標系で展開した後, 無次元化し数値計算を行った. 図のように流路幅 W の平行平板間を液晶が x 方向に流動しており, 時刻 $t=0$ で y 方向に一樣磁場

$$\mathbf{H} = (0, H) \quad (7)$$

が印加されるとする. ただし H は定数である.

図のような一方向流れでは、速度ベクトル \mathbf{v} は

$$\mathbf{v} = (u(y,t), 0)^T \quad (8)$$

となる。また、ディレクタが x 軸となす角度を $\theta(y,t)$ (ディレクタの配向角) とすれば

$$\mathbf{n} = (\cos\theta(y,t), \sin\theta(y,t))^T \quad (9)$$

のようにディレクタは配向角 θ のみで表現される。

基礎式の無次元化にともない、レイノルズ数、粘性力と弾性力の比を表すエリクセン数、磁力と弾性力の比を表すゾッヘル数という3種類の無次元数が現れる。すなわち、

$$Er = \frac{\alpha_4 WU}{K_1}$$

$$Re = \frac{\rho WU}{\alpha_4}$$

$$Z = WH \sqrt{\frac{\Delta\chi}{K_1}}$$

である。基礎式を離散化するにあたり、空間方向には二次精度の中心差分法を、時間方向には二次精度のクランク・ニコルソン法を用いた。予備計算より $\Delta y = 1/100$, $\Delta t = 1/1000$ とした。式中の粘性係数および弾性定数は低分子ネマティック液晶である *p*-azoxyanisole (PAA) の物性値を用いた。密度は $\rho = 1000 \text{ kg/m}^3$ とした。また、物性値を固定するとレイノルズ数とエリクセン数は互いに独立なパラメータではなく、PAA の場合 Re は Er の約 $1/10^4$ である。以下では、 Er と Z をパラメータに選んで結果を表示する。

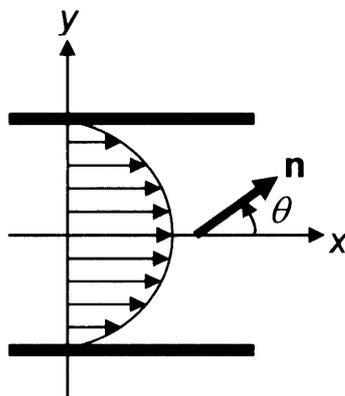
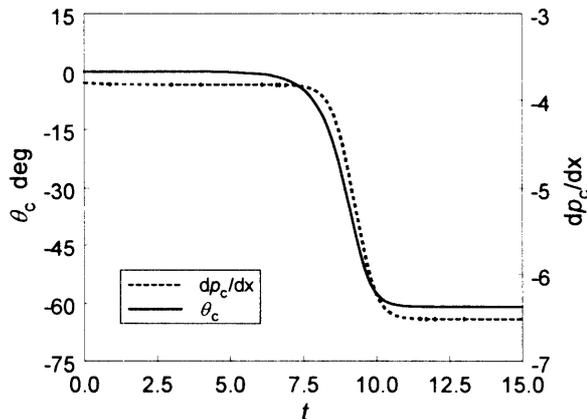


Fig.1 Flow geometry and coordinate systems

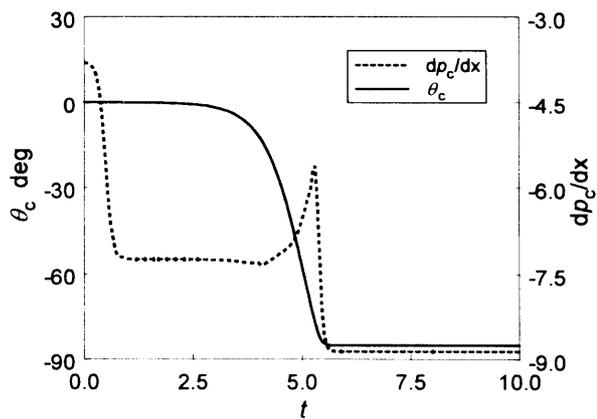
3. 結果および考察

図2 (a), (b)に、エリクセン数 $Er = 10$ 、ゾッヘル数 $Z = 5, 10$ の場合、平板中心 ($y=0$) でのディレクタの配向角 θ_c および圧力こう配 $\partial p_c / \partial x$ の時間変化を示す。 y 方向の一次元計算であるので、圧力こう配 $\partial p_c / \partial x$ の変化は、ある点 (例えば最上流位置) を基準とした圧力の変化と見なすことができる。 $Z = 1$ の計算も行ったが、 θ_c , $\partial p_c / \partial x$ とともに時間変化は全く見られなかった。これは、磁場強度がある数居値を超えて初めて、液晶分子が磁場方向に再配向する現象 (フレデリクス転移⁽¹⁾) から明らかである。図(a)の $Z = 5$ では、 θ_c は t がおよそ6まで 0° を保った後、減少し始め、 t が約10で -60° の定常値に至っている。 $\partial p_c / \partial x$ は、当然のことながら θ_c の変化と同期して変化しており、 θ_c が 0 度から -60° に変化していることは、ディレクタが流れに対して抵抗になるため、圧力こう配は減少している。

図(b)の $Z = 10$ では、 θ_c の変化は定性的には図(a)と同様であるが、減少し始める時刻および定常に至る時刻は短くなっている。また磁場強度が大きいので、 θ_c の定常値はほぼ -90° 、すなわちディレクタは y 方向 (磁場方向) に再配向していることが理解できる。一方圧力こう配の変化は図(a)と比較して複雑である。すなわち、 $\partial p_c / \partial x$ は磁場印加直後ある値まで急減し、一旦定常値に達し $t = 4$ から増加を示すが、およそ t が5を超えたところで再度急減し、定常値に至っている。



(a) $Er=10, Z=5$



(b) $Er=10, Z=10$

Fig.2 Director orientation angle and pressure gradient profiles as a function of dimensionless time

引用文献

- 1) 小山清人監修, 電気粘性 (ER) 流体の開発, シーエムシー, 1999.
- 2) 例えば, 日本学術振興会情報科学用有機材料第 142 委員会液晶部会編, 液晶辞典, (1989), 196, 培風館.
- 3) Ericksen, J. L., *Arch. Ration. Mech. Anal.*, **4** (1960), 231.
- 4) Ericksen, J. L., *Trans. Soc. Rheol.*, **5** (1961), 23.