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)

蝶野 成臣^{*1}, 辻 知宏^{*2}

Development of Microactuators Driven by Liquid Crystals (5th Report, Numerical Simulation of Driving a Plate)

Shigeomi CHONO^{*1} and Tomohiro TSUJI^{*1} Kochi Univ. Tech. Dept. of Mechanical Engineering
Tosayamada-cho, Kami-shi, Kochi, 782-8502 Japan

We have proposed a one-dimensional simple model for predicting the performance of liquid crystal actuators by combining the motion of the upper plate of a liquid crystal cell and the flow of a liquid crystal. Comparison of the motion of the plate between the numerical predictions and the experimental results reported in the previous paper shows that the proposed model is useful to predict qualitatively the motion of the upper plate. By using the model, we have studied the rotation of the molecules and the velocity profiles between two plates. As a result, it is clarified that when the electric field is released, the molecule in the middle region between two plates returns to the initial angle completely at 1 Hz of the frequency of the applied voltage, it does not return to the initial angle but it takes approximately 40 deg at 10 Hz, and it oscillates around 90 deg with a small amplitude at 100 Hz. While its profile is S shaped in lower 10 Hz frequency, the induced velocity shows a double-S shaped profile in higher 20 Hz frequency. Such the peculiar velocity profile stems from the so-called kickback effect. The maximum shear stress acting on a wall reaches 20 Pa in frequency of 20 – 30 Hz. This frequency range is coincident with the frequency at which the double-S shaped profile begins to occur.

Key Words : Non-Newtonian Fluid, Complex Fluid, Liquid Crystal, Leslie-Ericksen Theory, Microactuator, Backflow, Kickback Effect

1. 緒 言

液晶の力学的応用を目指した研究の一環として, 著者らは液晶に電圧を印加した際に発生する液晶自体の流動(背流)を利用したアクチュエータの開発を進めてきた. すなわち一連の研究の初期段階では, 2枚の平板によるサンドイッチ構造のアクチュエータを対象として, 固定された平板間の背流発生を数値的に予測するとともに実験的にこれを追認した⁽¹⁾. また分子動力学計算で分子挙動と背流の関係を明らかにした⁽²⁾. さらに数値計算で平板に作用するせん断応力や速度分布を見積もり⁽³⁾, 続いて2平板間の背流の速度分布を可視化した⁽⁴⁾. 前報では⁽⁵⁾, 壁面せん断応力を利用して可動状態にある平板を駆動することに初めて成功した. その際, 実験に使用した液晶固有の応答性に比べてかなり高い周波数の電圧を印加したとき, 平板の駆動速度は最大となった. 従って液晶分子は, 電場解放時に初期配向状態に完全に返ることなく次の回転運動に移行していると予測されるが, この点については明らかでない.

本研究では, 液晶アクチュエータを迅速, 且つ, 最適に設計するために, 平板駆動を数値的に予測できるモデルの構築を目指す. すなわち, 平板運動と液晶流動を連成したモデル化を行い, 計算結果を示すとともに, 実験

* 原稿受付 2011 年 4 月 1 日

^{*1} 正員, フェロー, 高知工科大学システム工学群(機械系)(〒782-8502 高知県香美市土佐山田町)^{*2} 正員, 高知工科大学システム工学群(機械系)

E-mail: chono.shigeomi@kochi-tech.ac.jp

結果と比較することで提案モデルの精度を検証する．さらに上述したように，液晶分子の回転挙動や速度分布を明らかにすることで液晶アクチュエータの駆動原理について考察するとともに，壁面せん断応力についても言及する．

2. 数値計算

平板駆動の概略を図1に示す．厳密には平板端面の影響を考慮した3次元モデルを提案すべきであるが，平板間隔に比して平板は十分広いので，端面の影響は無視できると考え，近似的に平板間隔方向の1次元のモデル化を行う．液晶流動の構成方程式として，低分子液晶に関して広範に用いられているLeslie-Ericksen理論^{(6)~(8)}を選んだ．

Fig. 1 Coordinate of a liquid crystalline actuator

2・1 基礎式および境界条件

電場下にある液晶の等温流れを記述する式は連続の式，運動方程式，角運動方程式，構成方程式であり，それぞれ以下のように表される．

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

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

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

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

これらの式において， $\mathbf{v}$ は速度ベクトル， ρ は流体密度， p は圧力， $\mathbf{n}$ は液晶分子の平均的方向を意味するディレクタ， $\mathbf{E}$ は電場ベクトル， $\Delta \varepsilon = \varepsilon_{\parallel} - \varepsilon_{\perp}$ は誘電率の異方性， $\varepsilon_{\perp}$ と $\varepsilon_{\parallel}$ はそれぞれディレクタに垂直，および平行方向の誘電率， $\mathbf{A}$ は変形速度テンソル， $\mathbf{N}$ は周囲の流体とディレクタとの回転角速度ベクトル， $\alpha_1 \sim \alpha_6$ は Leslie 粘性係数， 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空間的広がり変形，ねじれ変形，曲がり変形を表す弾性定数である．

上部平板には，駆動力である液晶流動によるせん断力と，運動の妨げとなる微粒子⁽⁵⁾との間の摩擦力が作用する．上部平板の質量を m ，移動速度を U ，液晶と接している面の面積を A ，微粒子との間の動摩擦係数を μ_k とすると，上部平板の運動方程式は

$$m \frac{dU}{dt} = \tau_w A - \text{sgn}(U) \mu_k mg \quad (6)$$

となる。 τ_w は上部平板に作用するせん断応力であり、

$$\tau_w = \tau_{yx} \Big|_{y=H} \quad (7)$$

である (座標系については図1参照)。なお上部平板が静止しているとき、液晶流動によるせん断力 $\tau_w A$ が静止摩擦力 $\mu_s mg$ (μ_s は静摩擦係数) 以下であれば平板は運動しないので、この場合、式(6)は適用できないことに注意を要する。

境界条件は、速度については壁面ですべり無しとし、配向については実験のプレチルト角⁽⁵⁾ ($=5^\circ$) とした。

2・2 計算方法と物性値

基礎式の離散化には、有限差分法とクランク・ニコルソン法を用いた。メッシュサイズは $\Delta y = H/100$ 、時間間隔は $\Delta t = 10^{-7}/f$ sとした。初期値として液晶と平板は静止状態、配向場はプレチルト角で規定される平衡状態の分布とした。計算条件は電圧 $V=10$ V、デューティ比⁽⁵⁾ $D=5$ %、平板間隔 $H=10$ μm に固定し、周波数を $f=1 \sim 1000$ Hzに変化させた。なお、 $1\Delta t$ sで電圧を0 Vから10 Vに増加することで電圧を印加させ、電圧解放の場合も同様に $1\Delta t$ sで電圧を10 Vから0 Vに減少させた。

前報の実験に用いたネマティック液晶 4-cyano-4'-pentyl biphenyl (5CB) の物性値 (Leslie 粘性係数、分子場弾性定数および誘電率)^{(9)~(12)}を表1に示す。密度は $\rho = 1000$ kg/m³とした。静摩擦係数については、実験セル全体を徐々に傾けた際に上部平板が滑り始めるときの角度から求め、 $\mu_s = 0.28$ を得た。なお動摩擦係数については測定が困難であったので、 $\mu_k = 0.7\mu_s$ とした。

Table 1 Material constants of 5CB

[Pa•s]						[N]			[F/m]	
α_1	α_2	α_3	α_4	α_5	α_6	K_1	K_2	K_3	$\varepsilon_{//}$	$\varepsilon_{\perp}$
					$\times 10^{-2}$			$\times 10^{-12}$		$\times 10^{-11}$
0	-8.6	-0.4	8.9	5.9	-3.1	6.37	3.81	8.60	15.7	5.7

3. 計算結果

3・1 平板の運動と駆動速度

周波数 $f=1, 10, 100$ Hzの場合の上部平板の移動距離 l の時間変化を図2(a)~(c)に示す。実線が計算結果、プロットは前報⁽⁵⁾で報告した実験結果である。なお実験に使用した上部平板の寸法は $A=10$ mm $\times$ 10 mm、質量は $m=0.047$ gである。

上部平板は、電圧印加時に前進、解放時にわずかに後退して停止するという運動を繰り返しながら移動している。電圧解放時に上部平板が後退するのは、液晶分子が電圧印加時と逆の回転をするためである。後退量は前進量に比して小さいので、結果的に平板は前進する。後退挙動は実験では確認できていないが、これはカメラの取り込み速度と空間分解能の低さが原因であると考えられる。 $f=1, 10$ Hzでは、上部平板は $t=0$ から安定した周期運動を繰り返しているのに対し、 $f=100$ Hzでは電圧印加直後しばらくは運動せず、約0.03 s後、比較的高速で運動を開始し、約0.06 sで一定の周期運動に至っている。いずれの周波数においても、数値計算は階段状の変化については実験結果を模擬できており、定性的には満足に一致している。

電圧印加直後を除く移動距離 l の傾きから平板移動速度 U を求め図3に示す。低周波数領域で U は急増し、100 ~ 200 Hz 近傍で最大値をとった後、漸減する傾向については、計算値と実験値は一致している。しかし定量的にみると、低周波数領域と700 Hzを超える高周波数領域では計算値の方が大きく、100 Hz近傍から600 Hzの間では計算値が下回っている。両者の差異は、前述したようにモデル化において表面張力や平板運動の抵抗力となる平板端面の影響を無視したことが主因であると考えられる。定量的な一致を目指すには3次元モデルの構築が必要であるが、液晶アクチュエータの概略設計においては本モデルでも十分有用であると考えている。

なお、 $f=100$ Hz近傍で計算値が不連続変化を示しているが、これについては今後検討する。

Fig. 2 Moving distance of the upper plate

Fig. 3 Effect of frequency on moving velocity of the upper plate

3・2 分子配向

電圧解放時の分子配向の緩和時間が 0.11 s であることから⁽⁵⁾, 印加電圧の周波数が約 10 Hz で効率的な平板駆動が誘起されると予想した. しかし図 3 から明らかなように, 平板の移動速度は $f=100\sim 200\text{ Hz}$ で最大になった. この理由について検討する. 図 4(a)~(c)に, 平板間中央部のディレクタ配向角 θ_m の時間変化を示す. $f=1\text{ Hz}$ では, 電圧印加で直ちに θ_m は 90° に達し, 電圧が解放されると初期配向角へ復帰する周期運動が確認できる. ただし, 解放直後に θ_m は瞬間的に 90° を越えている. これは“蹴返し効果”と呼ばれる液晶特有の挙動である (付録参照)⁽¹³⁾. $f=10\text{ Hz}$ では, 電圧印加直後の立ち上がりは $f=1\text{ Hz}$ と同様であるが, 解放時には初期配向角まで戻りきらず, θ_m は約 40° で次の繰り返し運動に移っている. 一方 $f=100\text{ Hz}$ の高周波になると, 定常状態に達した後, θ_m

は $90 \sim 96^\circ$ という微小な角度振幅で振動しており、上述の蹴返し効果が支配的な分子挙動である。このように、周波数が増加すると θ_m の振幅は減少しているが、この結果は図2に示されたように、高周波数の場合、上部平板の運動が小さな階段状変化というスムーズな運動に反映されている。なお $f=100 \text{ Hz}$ の場合、1パルス当たりの電圧印加時間が短いため、電圧印加直後1回のパルスでは 90° に達することができず、複数回の階段状変化を示している。これが、図2で示したように、電圧印加後から規則的周期運動までに一定の時間を要した理由である。

Fig. 4 Director orientation angle at the middle point between two plates

3・3 平板駆動のメカニズム

図5(a)~(c)に、完全な周期運動に達した後の1周期の初期段階における、 x 方向速度成分 u と分子配向角 θ の y 方向分布を示す。図中の t^* は1周期中の経過時間を周期 T ($=1/f$) で除した値である。 $f=1 \text{ Hz}$ では、壁面近傍で平板を牽引する速度こう配はわずかに見られるだけで、分布は平板間全域でほぼ線形である。 $f=10 \text{ Hz}$ になると、電圧を印加した直後 ($t^*=1 \times 10^{-6}$) にすでに逆S字の分布が発生しており、その後、平板を強く牽引する速度こう配が壁面近傍で見られる。さらに $f=100 \text{ Hz}$ になると、逆S字が2つ連なった速度分布が発生しており、従って壁面での速度こう配とせん断応力は当然のことながら大きくなる。これが、5CB 液晶固有の応答速度を超える周波数領域で、平板が高速に運動する理由である。

このような速度分布が誘起されるメカニズムについて、図5右側の分子の配向角分布に基づいて考察する。 $f=1 \text{ Hz}$ の場合は全域で $\theta=5^\circ$ の状態に、 $f=10 \text{ Hz}$ の場合は $\theta=0 \sim 40^\circ$ の状態に電圧が印加され、図5のように壁面近傍を除く領域で分子は 90° 方向に配向するように回転する。その結果、既報⁽¹⁾で言及したように、平板間の全ての位置で同方向の速度こう配が発生し、結果として逆S字の速度分布となる。一方 $f=100 \text{ Hz}$ の場合には、蹴返し効果のために、電場印加時に平板間中央部の分子は 90° を超えて配向する。このような配向状態に電場を印加すると、図6左側のように平板間中央部の分子は周囲と逆の回転運動をするので、ここでの速度こう配も逆となる。壁面ですべり無しの境界条件を重ね合わせると、図6右側のような逆S字が2つ連なった速度分布になる。すなわち、平板間中央部の分子が 90° を超える角度で配向することが、2連の逆S字速度分布を生み出すことになる。

Fig. 5 Velocity and orientation profiles between two plates

Fig. 6 Velocity and orientation profiles between two plates

図7に、 $f=10\sim 100\text{ Hz}$ の場合の、電圧を印加した直後 ($t^*=1\times 10^{-6}$) の速度分布を示す。図のように $f=10\text{ Hz}$ では単一の逆S字分布であるが、 $f=20\text{ Hz}$ では平板間中央部にわずかな変曲が見られ2連の逆S字分布が発生しかかっていると同時に、壁面での速度こう配が急増していることがわかる。 $f=30\text{ Hz}$ になると2連の逆S字分布が完全に確認できる。さらに周波数が増加すると、両壁面近傍のピーク値の絶対値は減少し、逆に平板間中央部の2つのピーク値の絶対値が増大する分布形状になっている。

Fig. 7 Velocity profiles between two plates at an initial stage for several frequencies of applied voltage

3・4 平板に作用するせん断応力

アクチュエータの開発において、駆動力である発生力や発生トルクの見積もりが重要であることは言うまでもない。図8に、完全な周期運動に達した後の1周期の初期段階 ($t^*=0\sim 0.1$) における、壁面せん断応力 τ_w の時間変化を示す。 $f=1\text{ Hz}$ では、 τ_w は電圧を印加してわずかな時間経過後いったん増加するが、平板が運動を開始するのですぐに急減している。 τ_w が負値となっているのは、平板の慣性によって液晶が逆に牽引されているからである。一方 $f=100\text{ Hz}$ では、実時間 t はかなり小さいので、電圧を印加すると τ_w は瞬時に約 15 Pa の値をとった後、直ちに 8 Pa 程度に半減し、その後電圧解放時 ($t^*=0.05$) まで複雑な変化を示すことなく単調減少している。いずれの周波数においても、 τ_w は電圧解放時に急減し、その後 0 Pa まで漸増する傾向を示している。

本研究ではデューティ比を5%に固定して計算を行った。図8の結果よりデューティ比の大きさについて検討する。 $f=1, 10\text{ Hz}$ では τ_w は電圧解放前に負値になり、 $f=100\text{ Hz}$ では電圧解放と τ_w が負値になる時刻はほぼ一致している。従って、 $f<100\text{ Hz}$ の周波数領域では5%よりもより小さいデューティ比でも十分に平板を駆動することができ、逆に $f>100\text{ Hz}$ ではより大きなデューティ比が駆動特性を向上させると考えられる。

Fig. 8 Transient of shear stress acting on the upper plate

図9は、1周期中の最大壁面せん断応力 $\tau_{w\max}$ と印加電圧の周波数 f の関係である。1周期中の最大値は電圧印加直後に発生するが、図8からも明らかなように正確な時刻は f によって異なる。 f が増加すると $\tau_{w\max}$ は急増し、 $f=20\sim 30\text{ Hz}$ で最大値約 20 Pa に達した後、いくぶん減少して 15 Pa 近傍で一定となっている。 $\tau_{w\max}$ が最大となる $20\sim 30\text{ Hz}$ は、図7の2連逆S字分布の発生が確認された周波数に一致する。

Fig. 9 Maximum shear stresses as a function of frequency of applied voltage

4. 結 言

本研究では平板の運動を数値的に予測可能なモデルの構築を行い、計算結果を示すとともに実験結果と比較検討した。さらに、液晶分子の回転挙動や速度分布を求めることで、液晶アクチュエータの駆動原理について考察するとともに、実測が困難な壁面せん断応力についても言及した。得られた結果を要約して以下に示す。

(1) Leslie-Ericksen 理論を構成方程式とした液晶流動と平板運動を連成したモデルを提案した。平板端面の影響を無視して平板間隔方向の1次元モデルを構築して平板の運動を数値的に求めた結果、実験結果と定性的に一致した。

(2) 印加電圧の周波数が 1 Hz の場合、電圧が解放されると液晶分子は初期配向状態に完全に戻るが、周波数が 10 Hz では平板間中央部の液晶分子は 40° 程度までにしか戻りきらず、さらに周波数が 100 Hz になると液晶分子は 90° 近傍で振幅の小さい振動挙動をする。

(3) 周波数が $1\sim 10\text{ Hz}$ の低周波数領域では平板間に発生する速度分布はS字状（本文中では逆S字状と表現している）であるが、 20 Hz を越える周波数領域では速度分布はS字を2つ連ねた形状になる。このような速度分布が発生する理由は、蹴返し効果によって平板間中央部の液晶分子が 90° を超える角度で配向するためである。

(4) 1周期中の最大壁面せん断応力は電圧印加直後に発生する。最大壁面せん断応力は周波数が $20\sim 30\text{ Hz}$ で最大値約 20 Pa に達する。この周波数は2連S字分布の発生が確認され始める周波数に一致する。

本研究の一部は、日本学術振興会科学研究費補助金（基盤研究(B)，課題番号 22360081）の補助を受けた。また、大学院学生 杉島司朗君と戸田丈浩君には計算と作図にご協力いただいた。ここに謝意を表する。

付 録（蹴返し効果）

図A1(a)の配向状態において電圧を解放すると、図A1(b)のように液晶分子は反時計回りに回転する。図5右のように θ の空間こう配 ($\partial\theta/\partial y$) は壁面近傍で最も大きい、壁面の分子はアンカリングのために回転が制限されるので、結果的に反時計回りの回転は $y=H/4$, $3H/4$ 付近で最も強く、図A1(c)のような流動が発生する。その結果、この流動は平板間中央部の分子に時計回りのトルクを及ぼす。このトルクは、中央部の弱い弾性トルクに打ち勝つので、結果として図A1(d)のように中央部の分子は瞬間的に時計回りに回転し、 θ_m は 90° 以上の値をとる。

Fig. A1 Illustration of bounce effect

参考文献

- (1) 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, 流動の発生とそのメカニズム)”, 日本機械学会論文集 B 編, Vol. 72, No. 715 (2006), pp. 656-661.
- (2) Sunarso, A. Tsuji, T. and Chono, S., “Molecular Dynamics Simulation of Backflow Generation in Nematic Liquid Crystals”, *Applied Physics Letters*, Vol.93 (2008), 244106.
- (3) 劉春波, 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2報, 各種パラメータの影響)”, 日本機械学会論文集 B 編, Vol. 72, No. 721 (2006), pp. 2235-2241.
- (4) 松見隆紀, 辻知宏, 蝶野成臣, “液晶駆動型マイクロアクチュエータの開発 (第3報, 平行平板間速度分布の可視化)”, 日本機械学会論文集 B 編, Vol. 75, No. 753 (2009), pp. 953-958.
- (5) 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4報, 平板駆動実験)”, 日本機械学会論文集 B 編, Vol. 76, No. 771 (2010), pp.1849-1854.
- (6) Ericksen, J. L., “Anisotropic Fluids”, *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, Vol.4 (1960), pp.231-237.
- (7) Ericksen, J. L., “Conservation Laws for Liquid Crystals”, *Transactions of the Society of Rheology*, Vol.5 (1961), pp.23-34.
- (8) Leslie, F. M., “Some Constitutive Equations for Liquid Crystals”, *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, Vol.28 (1968), pp.265-283.
- (9) Knepe, H., Schneider, F. and Sharma, N. K., “Rotational Viscosity γ_1 of Nematic Liquid Crystals”, *Journal of Chemical Physics*, Vol.77 (1982), pp.3203-3208.
- (10) Knepe, H., Schneider, F. and Sharma, N. K., “A Comparative Study of the Viscosity Coefficients of Some Nematic Liquid Crystals”, *Ber. Bunsenges. Phys. Chem.*, Vol.85 (1981), pp.784-789.
- (11) Karat, P. P. and Madhusudana, N. V., “Elasticity and Orientational Order in Some 4'-n-alkyl-4-cyanobiphenyls (part II)”, *Molecular Crystals and Liquid Crystals*, Vol.40 (1977), pp.239-245.
- (12) 液晶便覧編集委員会, 液晶便覧 (2000), 丸善.
- (13) Chandrasekhar, S., *Liquid Crystals, 2nd Edition* (1992), Cambridge Univ. Press.