平行平板間入口流れにおけるネマティック液晶の タンブリング挙動*

辻 知 宏^{*1}, 蝶 野 成 臣^{*2}

Tumbling Behavior of a Nematic Liquid Crystal in Inlet Flow between Parallel Plates

Tomohiro TSUJI and Shigeomi CHONO

Two-dimensional tumbling behavior is investigated numerically by calculating inlet flows of a tumbling-type nematic liquid crystal between parallel plates. Calculations are performed for various Ericksen numbers. At the comparatively small Ericksen number of $Er=10$, the director in the upper half space of the channel rotates counter-clockwise before reaching the fully developed value. At $Er=50$, the director shows an abrupt rotation just after the inlet section. The rotation is not only convected to the downstream area but propagated from the region near the channel wall where shear rate is large to the center region. When Er is increased further to 100, the director profile does not indicate a monotonic development but a two-step one. In this case, the velocity profile in the main flow direction is wavelike. It is found that the effect of director orientation is strongly reflected on the velocity field, while the reverse effect is weak.

Key Words: Numerical Analysis, Non-Newtonian Fluid, Nematic Liquid Crystal, Tumbling, Aligning, Leslie-Ericksen, Inlet Flow

1. 緒 言

液晶は一般に、分子の配列構造や生成条件の違いによって、それぞれネマティック、コレステリック、スメクティック液晶、およびサーモトロピック、ライオトロピック液晶に分類されるが⁽¹⁾、流れ挙動の違いによっても、アライニング(aligning)液晶とタンブリング(tumbling)液晶に分類される。

壁面配向角をせん断方向に設定したクエット流れ中で、アライニング液晶では、分子はせん断方向と大差ない方向に配向する。一方タンブリング液晶では、分子の配向角はアライニング液晶に比して大きく、さらにあるせん断速度を臨界値として極めて大きい配向角へ不連続ジャンプする。Gahwiller⁽²⁾⁽³⁾によって発見されたこのタンブリング挙動は、その後さまざまな研究者によりその存在が確認され、この挙動が温度変化による物性値の符号の変化によって起こることが明らかにされた⁽⁴⁾⁽⁵⁾。すなわち、わずかな温度変化によってまったく異なった流れ挙動に遷移することから、この挙動の解析は流体力学的に興味深いだけでなく、実用的

な見地からも重要である。

ネマティック液晶の流動を記述し得る Leslie-Ericksen (L-E) 方程式の確立⁽⁶⁾以後、アライニング液晶の流動に関する理論的研究が数多くなされてきた⁽⁷⁾⁻⁽¹³⁾。一方 L-E 方程式は、アライニング挙動のみならずタンブリング挙動も表すことが可能である。Manneville⁽¹⁴⁾は、平行平板間クエット流れにおけるタンブリング挙動を数値解析した。Carlsson⁽¹⁵⁾はこの結果を詳細に吟味し、さらに同心回転円板間流れの実験結果と比較検討している⁽¹⁶⁾。非定常⁽¹⁷⁾および振動⁽¹⁸⁾クエット流れの解析も試みられている。また Rey⁽¹⁹⁾は、Hamel 流の計算を行い、伸長作用がタンブリング挙動に及ぼす影響について議論している。

しかしこれらアライニング、タンブリング挙動の解析は、すべて一方向流れに関するものである。最近、アライニング液晶の平行平板間入口流れ⁽²⁰⁾、急縮小流れ⁽²¹⁾、L 形流れ⁽²²⁾といった二次元解析の報告もなされているが、タンブリング液晶の二次元解析例は皆無である。

そこで本研究では、まずタンブリング挙動について触れた後、タンブリングネマティック液晶の平行平板間入口流れを数値解析し、分子配向と速度場の関係およびそれらの空間的発達について検討する。タンプリ

* 原稿受付 1994 年 10 月 21 日。

^{*1} 正員、福井大学大学院 (〒910 福井市文京 3-9-1)。

^{*2} 正員、福井大学工学部。

ング挙動と対比するため、アライニング液晶の入口流れについても簡単に言及する。

おもな記号

- Er : エリクセン数
 H : 流路幅
 K_i : 弾性係数 ($i=1\sim 3$)
 n : ディレクタ
 Re : レイノルズ数
 U : 流入部 x 方向速度
 u : x 方向速度
 v : y 方向速度
 $\mathbf{v}$: 速度ベクトル
 α_i : レズリ粘性係数 ($i=1\sim 6$)
 θ : ディレクタの配向角
 θ_L : レズリ角
 ψ : 流れ関数

2. 基礎式と計算方法

2.1 基礎式 ネマティック液晶の流れを記述するために必要な基礎式は、L-E 理論⁽⁶⁾を用いると、

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

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

$$\mathbf{n} \times \left(\frac{\delta F}{\delta \mathbf{n}} + \lambda_1 \mathbf{N} + \lambda_2 \mathbf{A} \cdot \mathbf{n} \right) = 0 \quad \dots\dots (3)$$

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

$$2F = K_1 (\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + K_2 (\mathbf{n} \cdot \nabla \times \mathbf{n})^2 + K_3 |\mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n}|^2 \quad \dots\dots (5)$$

$$\mathbf{N} = \frac{G\mathbf{n}}{Gt} = \frac{D\mathbf{n}}{Dt} - \boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{n} \quad \dots\dots (6)$$

である。 $\mathbf{v}$ は速度ベクトル、 ρ は流体の密度、 D/Dt は実質微分、 p は圧力、 δ は単位テンソル、 $\boldsymbol{\tau}$ は偏差応力テンソル、 $\mathbf{n}$ はディレクタ、 F はフランクの自由エネルギー密度、 $\delta/\delta \mathbf{n}$ は汎関数微分、 $\mathbf{A}$ 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、 α_i ($i=1\sim 6$) はレズリ粘性係数、 K_i ($i=1\sim 3$) は弾性係数、 G/Gt は共回転微分、 $\boldsymbol{\Omega}$ は渦度テンソルである。 λ_1 、 λ_2 は、それぞれ流体の回転と変形が、ディレクタの配向に影響を及ぼす場合の粘性係数で、レズリ粘性係数と

$$\lambda_1 = \alpha_3 - \alpha_2 \quad \dots\dots (7)$$

$$\lambda_2 = \alpha_3 + \alpha_2 \quad \dots\dots (8)$$

の関係にある。

2.2 基礎式の展開 以上の基礎式を、図 1 に示す x - y 座標系で展開し、流れ関数 ψ を導入して連続の式(1)を消去した後、流路幅 H 、平均流速 U 、代表弾性係数 K_1 、代表粘性係数 $|\lambda_2|$ で無次元化すると(以後の物理量は無次元である)、

$$Re \left(u \frac{\partial \omega}{\partial x} + v \frac{\partial \omega}{\partial y} \right) = \frac{\alpha_4}{2} \nabla^2 \omega - \frac{f}{Er} + g \quad \dots\dots (9)$$

$$\nabla^2 \psi = -\omega \quad \dots\dots (10)$$

$$\begin{aligned} Er \lambda_1 \left(u \frac{\partial \theta}{\partial x} + v \frac{\partial \theta}{\partial y} \right) = & \frac{1+K_3}{2} \nabla^2 \theta + \frac{Er}{2} \lambda_1 \omega \\ & + \frac{1-K_3}{2} \sin 2\theta \left\{ \left(\frac{\partial \theta}{\partial x} \right)^2 - 2 \frac{\partial^2 \theta}{\partial x \partial y} - \left(\frac{\partial \theta}{\partial y} \right)^2 \right\} \\ & - \frac{1-K_3}{2} \cos 2\theta \left(\frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + 2 \frac{\partial^2 \theta}{\partial x \partial y} - \frac{\partial^2 \theta}{\partial y^2} \right) \\ & - Er \left\{ \sin 2\theta \frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial y} + \frac{1}{2} \cos 2\theta \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \right) \right\} \end{aligned} \quad \dots\dots (11)$$

を得る。 ω は渦度、 θ はディレクタが x - y 平面内に存在すると仮定した場合の、 x 軸となす角度(配向角)、 u, v はそれぞれ x 方向および y 方向速度である。また Re, Er はレイノルズ数ならびにエリクセン数であり、

$$Re = \rho H U / |\lambda_2| \quad \dots\dots (12)$$

$$Er = |\lambda_2| H U / K_1 \quad \dots\dots (13)$$

である。関数 f, g は既報⁽²¹⁾に示してあるので、再録を省略する。

2.3 境界条件 図 1 のように流路が x 軸に関して上下対称であるため、流路の上半分を計算領域とする。

境界条件として入口では、 $u=U$ (一定)、 $v=0$ の一様流速と、 $\theta=0^\circ$ の一様配向を与え、出口では両者ともに主流方向に変化がないとした。中心線上では、流路の対称性と、ここでは伸長作用のみが働くことを考慮して、 $\theta=0^\circ$ を与えた。壁面配向角については、ラビング法などの前処理によって任意に設定できる⁽²³⁾。既報⁽²²⁾で壁面配向角の影響が大きいことを明らかにしたが、本研究では、タンプリングの二次元挙動の解明を目的としていることから、壁面配向角としてもっと

図 1 計算領域と座標系

表 1 物性値

8CB		PAA	
Leslie viscosities		Leslie viscosities	
α_1	0 Pa·s	α_1	4.3×10^{-3} Pa·s
α_2	-7.0×10^{-2}	α_2	-6.9×10^{-3}
α_3	1.4×10^{-2}	α_3	-0.2×10^{-3}
α_4	6.0×10^{-2}	α_4	6.8×10^{-3}
α_5	4.9×10^{-2}	α_5	4.7×10^{-3}
α_6	-0.7×10^{-2}	α_6	-2.3×10^{-3}
Elastic constants		Elastic constants	
K_1	1.28×10^{-11} N	K_1	0.49×10^{-11} N
K_3	1.37×10^{-11}	K_3	1.05×10^{-11}

も単純な $\theta=0^\circ$ のみとする。この場合、入口での一様配向 $\theta=0^\circ$ は基礎式(3)を満足する。

2・4 数値計算 式(9)～(11)を差分法で離散化し、数値計算を行った。助走長さは、エリクセン数の値に依存して、流路幅の10～45倍とした。差分格子サイズに関する予備計算の結果、 x 方向には流路半幅を10分割、 y 方向には流路半幅を50分割した。計算打ち切り条件は、相対残差の平均値が流れ関数と配向角に関しては 10^{-5} 、渦度に関しては 10^{-4} である。

計算には、タンブリング液晶として 35°C における 8CB(4-*n*-octyl-4'-cyano biphenyl)^{(24)～(26)} を用いた。また比較のため、アライニング液晶である PAA(*p*-azoxy-anisole)⁽¹⁰⁾ の計算も行った。表1に、これらの液晶の物性値(有次元)を示す。なお Re と Er の比は、8CB で約 4×10^{-6} 、PAA で約 10^{-4} である。

3. 結果および考察

3・1 タンブリング挙動 二次元流れの計算結果を提示する前に、タンブリング挙動について説明する。

まず大きさ $\dot{\gamma}$ の単純せん断流中では、せん断方向と ϕ の角度をなすディレクタが流体から受ける粘性トルク Γ は、

$$\Gamma = (\alpha_3 \cos^2 \phi - \alpha_2 \sin^2 \phi) \dot{\gamma} \quad \dots\dots\dots (14)$$

と表され、 $\Gamma/\dot{\gamma}$ と ϕ の関係は図2のようになる。アライニング液晶の場合、表1より、 α_2, α_3 の値がともに負であるので、トルク Γ が0となる角度(符号はせん断速度の符号に依存して、一方のみが安定)が存在する。この角度はレズリ角と呼ばれ、式(14)より容易に

$$\tan^2 \theta_L = \alpha_3 / \alpha_2 \quad \dots\dots\dots (15)$$

で与えられ、物性値のみに依存する。一方、タンブリング液晶の場合には、 α_2 は負であるが、 α_3 は正值をとるため、ディレクタはいかなる角度においても粘性トルクを受ける。換言すると、式(15)の右辺は負となり、こ

図 2 粘性トルクと配向角の関係

図 3 最大配向角とエリクセン数の関係

の式を満足する θ_L は存在しない。すなわち単純せん断流中で、アライニング液晶はレズリ角方向に配向するが、タンブリング液晶ではディレクタは定常状態に至らず回転し続ける。

次に平行平板間の十分発達した一方向流れを考える。この場合上述の単純せん断流と異なり、壁面配向角の影響が液晶の有する弾性トルクによって流体中へ伝播される。その結果タンブリング液晶でも定常状態に達する。すなわち、アライニング液晶では粘性トルク自体で定常状態に達するが、タンブリング液晶では粘性トルクと弾性トルクの釣り合いによって定常状態に保たれる。図3に、エリクセン数 Er と平板間におけるディレクタの最大配向角 θ_m の関係を示す。ただし、流路上半分(せん断速度は負)の結果である。アライニング液晶の場合、 Er の増加とともに θ_m が緩やかに減少し、 $Er \rightarrow \infty$ で上述のレズリ角 θ_L (本研究で用いた物性値では約 -9.7°) に至る。一方タンブリング液晶

では、 $Er=20$ 付近でこの配が急増し、 $Er=85$ で不連続ジャンプを示す。さらに、 $65 < Er < 85$ で θ_m が 2 価をとるといった特異現象も示す。

3・2 二次元入口流れ 図 4 に、二次元流れの結果を示す。図 4 (a) は $Er=50$ におけるアライニング液晶、図 4 (b)～(d) は、それぞれ $Er=10, 50, 100$ におけるタンプリング液晶の結果である。各図の上半分にはディレクタの配向分布を、下半分には流れ関数の値が 0.05 間隔の流線を示す。いずれの図も、流路幅方向を 5 倍に拡大している。図 4 (a) のアライニング液晶の場合、入口で 0° を向いているディレクタは、入口直後わずかに反時計回りに回転するが、直ちに 0° に戻り、その後小さい負値をとって発達した状態へ至っている。壁面と管中心でディレクタは 0° に固定されていることから、上述の空間的变化は両者の中間(すなわち、 $y=0.25$ 付近)でおもに起こっている。流線には

特異な挙動はみられず、ニュートン流体の入口流れと定性的に大差ない。アライニング液晶の場合 $|\lambda_1| < |\lambda_2|$ であり、式(3)から明らかなように、ディレクタは流体のひずみの影響を大きく受ける。管中心近傍を除いて圧縮作用が働くため、液晶分子は流線に直交する方向に配向しようとする傾向をもつ。入口直後のディレクタの反時計回りの挙動は、この結果と考えられる。

一方タンプリング液晶では、 $Er=10$ の場合、反時計回りに回転したディレクタは、そのまま発達した分布へ至っている。タンプリング液晶の場合には $|\lambda_1| > |\lambda_2|$ であるため、アライニング液晶と異なりディレクタは流体の回転の影響を強く受ける。式(3)の λ_1 と式(6)の渦度の回転方向を考慮すれば、ディレクタの反時計方向の回転が理解できる。 $Er=50$ に増加するとディレクタは入口直後に急激に回転する。この回転は流体のせん断が強い流路壁面付近から流路中心方向

図 4 配向分布と流線

へ、下流方向への対流とともに伝播し、 $x=3$ 付近で速度場、配向場ともに発達した状態に至る。さらに Er が増加して $Er=100$ では、 x が約 5 までは $Er=50$ の場合と同様の発達過程をたどるが、いったんなだらかになったディレクタ分布は $x=7$ 付近で再び急激な回転を始める。すなわち、ディレクタは発達した配向分布へ単調には至らず、図 3 のような 2 段階の発達過程を経ている。この 2 回目のディレクタの急変化は速度場にも強く反映されており、 $x=7$ で流線がゆがんでいる。なお最初の急回転は、 $Er=50$ よりも若干上流位置で起こっており、下流部での配向分布の影響が及んでいると予想される。

ディレクタの流れ方向の発達過程を詳細に調べるため、 $Er=50$ の場合の、 $y=0.12, 0.25, 0.37$ における配向角 θ の流れ方向分布を図 5 に示す。入口で 0° のディレクタは、せん断流の影響を受け、壁面に近い位置から回転する。したがって $x=1.5$ 付近までは、もっとも壁面寄りの $y=0.37$ の位置で θ は大きな値をとるが、その後 $y=0.25$ での値が上回る。これは、入口直後では壁面近傍のみで生じていたせん断流が、前述したように流路の中心方向へ広がること、および壁面配向角 ($=0^\circ$) の制約が当然のことながら $y=0.25$ のほうが弱いことに起因している。流路中心に近い $y=0.12$ では、せん断速度が小さいだけでなく x 方向への伸長も働くため、本来ならばほぼ 0° 方向を向くと考えられるが、 $y=0.25$ 付近の配向角の影響を受けて比較的大きな角度を示している。ただし三者の中ではもっとも小さい。

$Er=50$ の場合の、 $x=0.1, 1, 5$ における、配向角 θ および x 方向速度 u の y 方向分布を図 6 に示す。流入直後の $x=0.1$ では、 θ は壁面付近で最大値をとり、流路中心に近づくにしたがって 0° へと漸近する。このときの u には一様分布が残されている。 $x=1$ の場合には θ の最大値は 90° を超え、その位置はより流路中

心側に移動する。さらに $x=5$ では θ の最大値は 180° 近くにまで達し、対応する u の分布に顕著なゆがみがみられる。これは、ディレクタが主流方向と直交する位置では流体の局所粘性が増加し、速度が低下するためである。

図 7 は、 $Er=100$ の場合の θ の x 方向変化である。入口直後の θ の立上りは $Er=50$ の場合と同様であるが、その後 θ は比較的緩やかなこう配で増加し、 $x=7$ で再度急増して発達した値に至っている。この 2 段階の急増現象は、粘性トルクの影響によると考えられる。すなわち図 2 において、タンプリング液晶の粘性トルクは、ディレクタがせん断方向と直交するとき最大となる。 $y=0.25$ におけるディレクタが約 360° ま

図 6 配向角と速度分布 ($Er=50$)

図 5 配向角の流れ方向変化 ($Er=50$)

図 7 配向角の流れ方向変化 ($Er=100$)

 図 8 配向角と速度分布 ($Er=100$)

で発達する間にトルクの極大値が 2 回存在することを考慮すれば、上述の現象は容易に理解できる。

$Er=100$ の場合の、 $x=4, 7.5, 15$ における、配向角 θ および x 方向速度 u の y 方向分布を図 8 に示す。両図を比較すると、 θ の分布はなめらかであるのに対し、 u の分布は波状になっていることがわかる。すなわち、配向場の影響は速度場に大きく反映されるが、逆の影響は小さい。

4. 結 論

本研究では、タンブリングネマティック液晶の平行平板間入口流れの数値計算を行うことにより、二次元のタンブリング挙動について調べた。結果は以下のとおりである。

(1) エリクセン数が比較的小さい $Er=10$ の場合、入口で反時計回りに回転したディレクタは、そのまま発達した分布へ至る。 Er が 50 に増加すると、デ

ィレクタは入口直後に急激に回転する。この回転はせん断速度の大きい流路壁面付近から流路中心方向へ、対流とともに伝播する。さらに $Er=100$ では、ディレクタは発達した分布へ単調には至らず、2 段階の発達過程を示す。

(2) ディレクタが流れ方向と直交するような位置では、流体の局所粘度が増加し速度が低下する。そのため、複雑なディレクタ分布を示す $Er=100$ では、主流方向速度分布は波状になる。

(3) 配向場の影響は速度場に大きく反映されるが、逆の影響は小さい。

文 献

- (1) 例えば、松本・角田、液晶の基礎と応用、(1991)、3、工業調査会。
- (2) Gahwiller, C., *Phys. Lett.*, **36A**(1971), 311.
- (3) Gahwiller, C., *Phys. Rev. Lett.*, **28**(1972), 1554.
- (4) Pieranski, P. and Guyon, E., *Phys. Rev. Lett.*, **32**(1974), 924.
- (5) Cladis, P. E. and Torza, S., *Phys. Rev. Lett.*, **35**(1975), 1283.
- (6) Leslie, F. M., *Arch. Ration. Mech. Anal.*, **28**(1968), 265.
- (7) de Gennes, P. G., *The Physics of Liquid Crystals*, (1974), 1, Oxford Univ. Press.
- (8) Leslie, F. M., *Adv. Liq. Cryst.*, **4**(1979), 1.
- (9) Currie, P. K., *Arch. Ration. Mech. Anal.*, **37**(1970), 222.
- (10) Tseng, H. C., ほか 2 名, *Phys. Fluids*, **15**(1972), 1213.
- (11) Currie, P. K., *Rheol. Acta*, **14**(1975), 688.
- (12) Rey, A. D. and Denn, M. M., *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **27**(1988), 375.
- (13) Rey, A. D., *J. Rheol.*, **34**(1990), 425.
- (14) Manneville, P., *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, **70**(1981), 223.
- (15) Carlsson, T., *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, **104**(1984), 307.
- (16) Carlsson, T. and Skarp, K., *Liq. Cryst.*, **1**(1986), 455.
- (17) Burghardt, W. R. and Fuller, G. G., *J. Rheol.*, **34**(1990), 959.
- (18) Burghardt, W. R., *J. Rheol.*, **35**(1991), 49.
- (19) Rey, A. D. and Denn, M. M., *Liq. Cryst.*, **4**(1989), 253.
- (20) 森・ほか 2 名, 機論, **59**-560, B(1993), 1049.
- (21) 蝶野・ほか 2 名, 機論, **60**-574, B(1994), 1944.
- (22) 蝶野・辻, 機論, **61**-585, B(1995), 1600.
- (23) 例えば、文献(1)の 97 ページ。
- (24) Knepe, H., Schneider, F. and Sharma, N. K., *J. Chem. Phys.*, **77**(1982), 3203.
- (25) Knepe, H., Schneider, F. and Sharma, N. K., *Ber. Bunsenges. Phys. Chem.*, **85**(1981), 784.
- (26) Karat, P. P. and Madhusudana, N. V., *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, **40**(1977), 239.