

科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成24年 6月 1日現在

機関番号：26402

研究種目：基盤(C)

研究期間：2009～2011

課題番号：21560192

研究課題名（和文） 液晶メカニズムに基づいた液晶発電システムの開発

研究課題名（英文） Development of Power Generator Based on Mechanism of Liquid Crystal

研究代表者

辻 知宏 (TSUJI TOMOHIRO)

高知工科大学・工学部・准教授

研究者番号：60309721

研究成果の概要（和文）：

液晶を用いた発電システムの開発を目的として、2重円筒間液晶せん断流れにおける液晶分子の配向挙動を数値シミュレーションおよび実験の両面から調べた。数値シミュレーションには Leslie-Ericksen 連続体理論を用い、2重円筒間せん断流れ中で液晶分子が4種類の異なる配向挙動を示すことを明らかにした。また、4種類の配向挙動の内、配向周期挙動が発電システムに適していることを見出した。実験では、2重円筒間せん断流れ中で液晶分子がせん断面から逃れる挙動を示し、シミュレーション結果と定性的に一致することを明らかにした。

研究成果の概要（英文）：

To develop the power generator using the flexoelectric effect of liquid crystals, we have investigated the liquid crystalline shear flow between concentric cylinders by means of numerical simulations and experiments. The Leslie-Ericksen continuum theory is used for the numerical simulations, and it is found that there are four different types of flow orientation modes. It is also found that a periodic type of flow orientation modes is the appropriate mode for the power generator. The experimental results qualitatively agree with the simulation results.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
21年度	1,300,000	390,000	1,690,000
22年度	1,500,000	450,000	1,950,000
23年度	800,000	240,000	1,040,000
年度			
年度			
総計	3,600,000	1,080,000	4,680,000

研究分野：工学

科研費の分科・細目：機械工学・流体力学

キーワード：非ニュートン流

1. 研究開始当初の背景

液晶材料の表示素子への応用が発見されて以来、液晶材料の光学的性質や電気的性質について盛んに研究が行われてきた。その結果、液晶ディスプレイは従来のブラウン管型ディスプレイにとって代わり、フラットパネ

ルディスプレイ（FPD）という新規産業分野が創出された。一方、ELディスプレイやプラズマディスプレイなどの優れた FPD の開発が進んでおり、液晶産業にとって脅威となっている。しかし、液晶ディスプレイ技術はほぼ成熟しきっており、後発の FPD にその

シェアを徐々に奪われていくことは容易に予測がつく。そこで、液晶産業の活性化のためには、液晶材料の新規応用分野の開拓が急務であると考えられる。近年、申請者らは液晶材料を利用したマイクロアクチュエータに関する提案（平成13年10月特許出願、平成16年8月登録、現在国際特許出願中）を行ったが、固体、液体、気体に次ぐ第4の状態と言われる液晶の利用用途は他にも多岐にわたって存在するはずである。図1は液晶材料への外部からの入力因子とそれにもなう外部への出力因子を表す。例えば、液晶ディスプレイの場合には液晶に電場を与え、液晶分子の配向方向の変化を引き起こすことにより、光の変化を得ている（電場→液晶分子配向場の変化→光の変化）。また、液晶駆動型アクチュエータの場合には、液晶に電場あるいは磁場を入力し、流動を出力する仕組みである（電場・磁場→液晶分子配向場の変化→流動）。一方で、図1に示すように3つの入力因子と3つの出力因子が存在すれば、単純に $3 \times 3 = 9$ 通りの組み合わせがあり、上述の2つ（ディスプレイとアクチュエータ）を除いても7通りもの液晶利用法の可能性がある。そこで本研究では、これまでに行われていない入力因子と出力因子の組み合わせについて理論および実験の両面からアプローチすることによって、全く新しい液晶デバイスの開発を目指す。

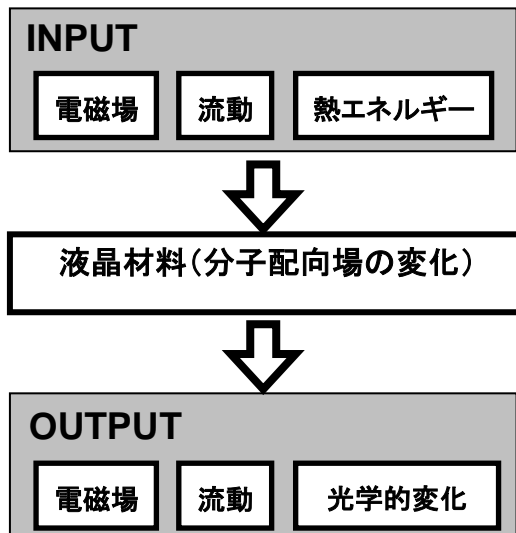


図1 液晶への入力因子および出力因子

2. 研究の目的

本研究では流動→液晶分子配向場の変化→電磁場にターゲットを絞って、液晶流動を利用した液晶発電システムの開発を目指す。研究概要と目的を以下に記す。近年、固体圧電材料を用いた発電システムに関する研究が行われるようになってきた。圧

電材料と同様に、液晶材料でも分子配向場にある種の歪みを生じさせることにより、巨視的な分極が生じることが知られている (R.B. Mayer, Phys. Rev. Lett., 22, 918 (1969)). さらに、申請者らは、固体圧電材料の場合には歪み量のみ依存して分極が発生するのに対して、液晶材料の場合には材料の歪み量だけでなく歪み速度によっても巨視的分極を発生させることが可能であることをシミュレーションによって確認した (T. Nagae, T. Tsuji and S. Chono, Journal of Fluid Science and Technology, 2, 258-269 (2007)). 液晶材料の巨視的分極の歪み速度依存性と形状適合性を利用することにより、固体圧電材料では実現不可能な、全く新しい発電システムが開発可能である。例えば、回転軸の軸受けに液晶材料を用いることにより、潤滑と発電を同時もしくは切り換えて行えるようなデバイスを開発できるであろう。具体的には、

- ・液晶の巨視的分極値の流動依存性の理論的解明
- ・流動によって誘起される液晶分極の実験的検証
- ・液晶発電システムの実用化に向けた提案を行う。

3. 研究の方法

本研究では、(1)連続体理論を用いた液晶流れの数値シミュレーションおよび(2)液晶せん断流れの実験の両面から液晶発電デバイスの開発にアプローチした。

(1)液晶流のシミュレーション

液晶流動の基礎方程式を以下に示す。

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$$

$$\rho \frac{D\mathbf{v}}{Dt} = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}$$

$$\boldsymbol{\tau} = \alpha_1 \mathbf{n} \mathbf{n} \mathbf{n} \cdot \mathbf{D} \cdot \mathbf{n} + \alpha_2 \mathbf{n} \mathbf{N} + \alpha_3 \mathbf{N} \mathbf{n} + \alpha_4 \mathbf{D} + \alpha_5 \mathbf{n} \mathbf{n} \cdot \mathbf{D} + \alpha_6 \mathbf{D} \cdot \mathbf{n} \mathbf{n}$$

$$- \frac{\partial F}{\partial \nabla \mathbf{n}} \cdot (\nabla \mathbf{n})^T$$

$$\left((\alpha_3 - \alpha_2) \mathbf{N} + (\alpha_6 - \alpha_5) \mathbf{D} \cdot \mathbf{n} + \frac{\partial F}{\partial \mathbf{n}} - \nabla \cdot \frac{\partial F}{\partial \nabla \mathbf{n}} \right) \times \mathbf{n} = \mathbf{0}$$

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

ここで、 \mathbf{v} は速度ベクトル、 ρ は流体密度、 D/Dt は実質微分、 p は圧力、 $\boldsymbol{\tau}$ は偏差応力テンソルである。 \mathbf{n} は液晶分子の平均的な配向方

向を表すディレクタと呼ばれる単位ベクトル, α_i は Leslie 粘性係数, \mathbf{D} は変形速度テンソル, \mathbf{N} はディレクタと流体の相対角速度ベクトル, \mathbf{F} は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.

以上の基礎式を円筒座標系に展開し, 液晶の2重円筒間せん断流れの数値シミュレーションを行う.

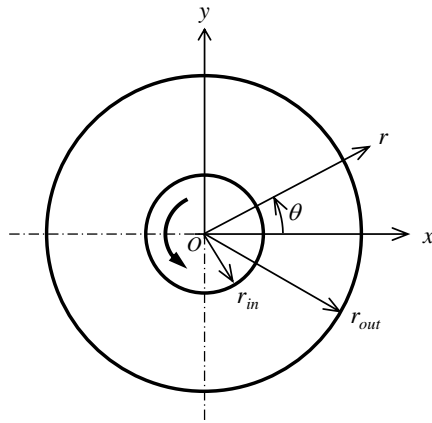


図2 流れ領域および座標系

(2) 2重円筒間せん断流れの実験

図3に製作した実験装置の概略図を示す. 外円筒②と内円筒③の間に液晶材料を挿入し, プーリーベルトで接続されたモータで内円筒を回転させることによって, 円筒間の液晶にせん断流れを与える. 流動中の液晶材料を外円筒側面から偏光顕微鏡観察を行うことによって, 流動中の液晶分子の挙動を観察する.

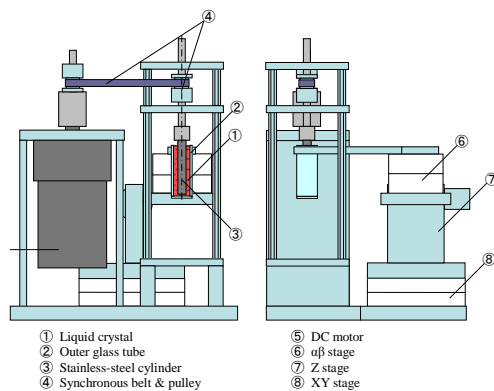


図3 2重円筒間せん断流れ実験装置

4. 研究成果

(1) 液晶せん断流れの数値シミュレーション
シミュレーション結果より, 以下に示す4種類の液晶分子配向挙動を見出した.

・面内挙動

図4は粘性力と弾性力の比であるエリクセン数 $Er=10$ におけるディレクタ配向分布の時間変化を $t=7000s$ まで $500s$ ごとに表したものである. 図中の矢印がディレクタを表し,

紙面手前方向が $+z$ 方向である. せん断開始後, ディレクタはせん断平面 ($r-\theta$ 平面) 内で時計回りに回転し始める. ディレクタのせん断平面内での回転は $t=3000s$ で終了し, ディレクタ場が定常に至っている. このとき, ディレクタの回転量は流路中心位置で最大となり, 流路壁面近傍では壁面での固定配向条件の影響によってディレクタの回転量はわずかである.

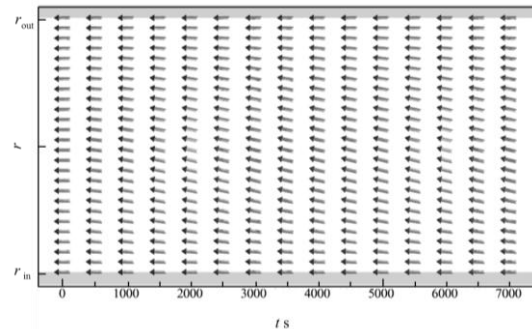
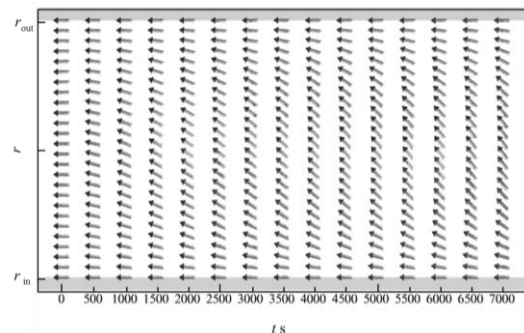


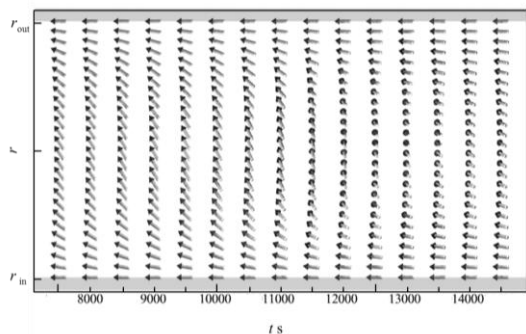
図4 面内挙動

・0ねじれ角面外挙動

$Er=20$ におけるディレクタ配向分布の時間変化を $500s$ 間隔で表したものを図5に示す. 図5(a)は $t=0\sim 7000s$ の時間変化, (b)は $t=7500\sim 14500s$ である. 面内挙動の場合と同様に, せん断印加直後には, ディレクタはせん断平面内で時計回りに回転し始める. せん断平面内でのディレクタの回転は $t=8000s$ あたりまで継続し, その後ディレクタがせん断平面外へと逃れる面外挙動へと移行する. 最終的に, 流路中心近傍のディレクタは z 軸とほぼ平行な配向に至り, ディレクタのせん断平面内での回転よりも面外への回転(ねじれ)が支配的な分布となる. しかしながら, ディレクタがほぼ定常に至った図5(b)の右端のディレクタ分布に着目すると, 内円筒側から流路中心に向けてディレクタは $-z$ 軸方向に回転し, 流路中心から外円筒に向けてはこれと逆向きに回転しており, 結局, 面外への回転角度(ねじれ角)の流路全体の積分量は0である.



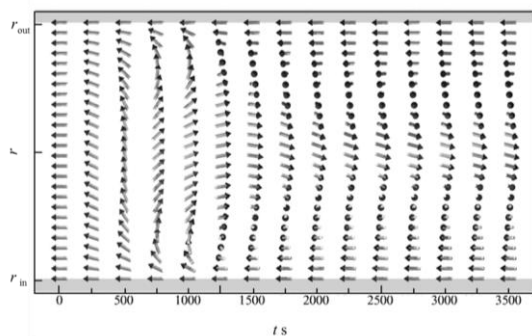
(a) $t=0\sim 7000s$



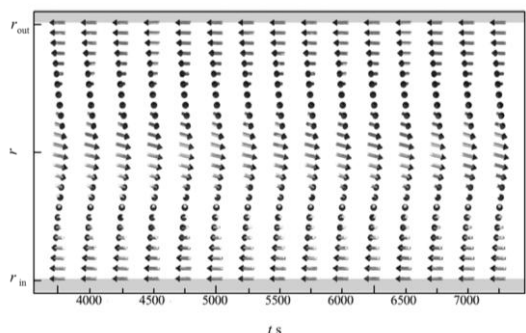
(b) $t=7500\sim 14500$ s
 図5 0ねじれ角面外挙動

・ 2π ねじれ角面外挙動

図6に $Er=60$ におけるディレクタ配向分布の時間変化を250s間隔で示す。図6(a)には $t=0\sim 3500$ sを、(b)には $t=3750\sim 7250$ sを示す。図6(a)より、せん断開始から $t=750$ sまでディレクタはせん断面内で時計回りに回転している。その後、 $t=1000$ sで両円筒近傍のディレクタは僅かに z 軸方向に逃げ始め、 $t=1250$ sでは z 軸とほぼ平行な状態に至る。さらに時間が経過すると、 z 軸と平行なディレクタ配向の位置が流路中心方向へと移動するが、流路中心には達しない状態で定常に至る。また、内円筒側のディレクタが $-z$ 方向を向いているのに対して、外円筒側のディレクタが $+z$ 方向を向き、面外への回転角度(ねじれ角)の流路全体での積分量は 2π となる。



(a) $t=0\sim 3500$ s

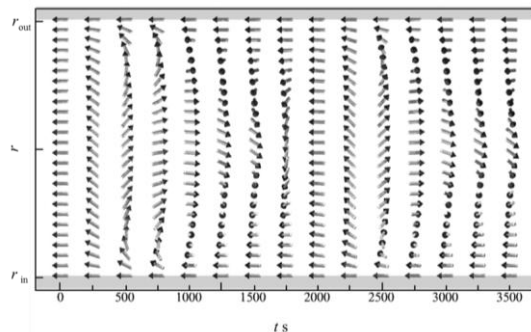


(b) $t=3750\sim 7250$ s
 図6 2π ねじれ角面外挙動

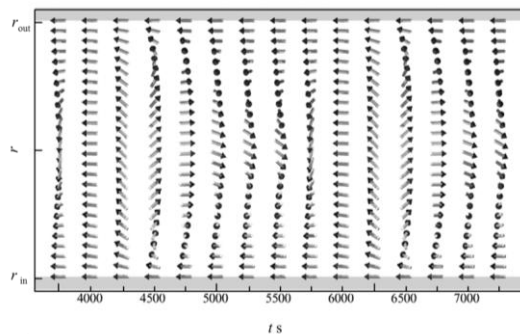
・面外周期挙動

図7に、 $Er=80$ におけるディレクタ配向分布の時間変化を250s間隔で示す。Fig. 8(a)には $t=0\sim 3500$ sを、(b)には $t=3750\sim 7250$ sを示す。図7(a)より、前項の 2π ねじれ角面外挙動の場合と同様に、せん断開始から $t=500$ sまでディレクタはせん断面内で時計回りに回転した後、両円筒近傍のディレクタが z 軸方向に逃げ始め、 $t=1000$ sでは z 軸とほぼ平行な状態に達する。この分布は、図6の定常状態と酷似している。しかし、ディレクタ場は定常状態に至らず、流路中心近傍のディレクタはせん断平面内の回転を継続し、 $t=2000$ sでディレクタ場は初期状態へ復帰する。その後は 2π ねじれ角面外分布への発展と初期状態への復帰を繰り返す周期挙動を示す。すなわち、面内分布と 2π ねじれ角面外分布を周期的に繰り返す。

図8に0ねじれ角面外挙動と面外周期挙動の場合の分子配向場によって誘起される巨視的分極値の時間変化を示す。0ねじれ角面外挙動の場合には、最終的に巨視的分極値が一定の値へと収束するのに対して、面外周期挙動の場合には、巨視的分極値が分子配向挙動に対応して周期的に変化し続ける。この巨視的分極値の周期的変化ゆえに、面外周期挙動は4種類の配向挙動の中で最も液晶発電システムに適していると結論付けることができる。



(a) $t=0\sim 3500$ s



(b) $t=3750\sim 7250$ s
 図7 面外周期挙動

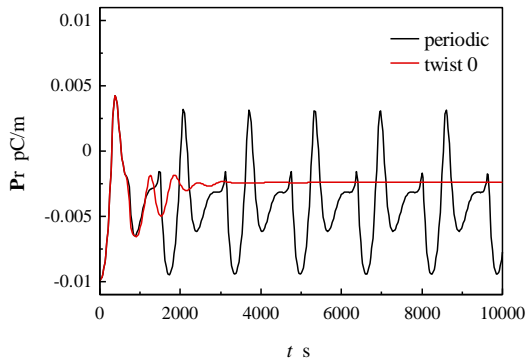


図8 分極値の時間変化

(2) 2重円筒間せん断流れの実験

図9に実験結果の一例として、内円筒の回転数が0.89rpmの場合の、面外挙動発生前(図9(a))および発生後(図9(c))の偏光顕微鏡映像を示す。せん断流れ印加開始直後(すなわち、面外挙動発生前)には、映像の中央部近傍ではほぼ均一な分子配向場を示している。一方、せん断流れ印加後十分に時間が経過すると、分子配向場に帯あるいは紐状の組織構造が現れる。この帯状組織は、分子配向場の面外挙動によるものであり、シミュレーション結果が定性的に実験結果を表すことが確認された。



(a) 面外挙動発生前



(c) 面外挙動発生後

図10 偏光顕微鏡映像

数値シミュレーション結果と実験結果を総合して、液晶流動が分子配向の周期挙動を誘起し、その結果、液晶に周期的な巨視的分極が発生することが明らかになり、この原理を用いた液晶発電システムが開発可能であることを見出した。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

〔雑誌論文〕(計5件)

- 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5報, 平板駆動の数値計算), 日本機械学会論文集, B 偏, 査読有, 77, 2011, 1758-1766
- ② 辻知宏, 蝶野成臣, 山崎 一, ハイブリッド配向液晶セル内の背流速度分布, 日本機械学会論文集, B 偏, 査読有, 77, 2011, 1420-1428
- ③ 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 偏, 査読有, 76, 2010, 1849-1854
- ④ A. Sunarso, T. Tsuji, S. Chono, GPU-accelerated molecular dynamics simulation for study of liquid crystalline flows, Journal of Computational Physics, 査読有, 229, 2010, 5586-5497
- ⑤ 辻知宏, 蝶野成臣, 山崎 一, ネマティック液晶の二重円筒間周方向背流の数値計算, 日本機械学会論文集, B 偏, 査読有, 75, 2009, 2413-2420

〔学会発表〕(計5件)

- ① 辻知宏, 蝶野成臣, 液晶流動が誘起する分極の数値計算, 日本機械学会第3回マイクロ・ナノ工学シンポジウム, 2011年9月27日, タワーホール船堀
- ② 辻知宏, 蝶野成臣, ネマティック液晶のout-of-plane現象の数値解析, 日本機械学会2011年度年次大会, 2011年9月14日, 東工大
- ③ 辻知宏, 蝶野成臣, テンソル型Leslie-Ericksen理論を用いた液晶流の数値解析, 日本流体力学会年会2011, 2011年9月9日, 首都大
- ④ 辻知宏, 蝶野成臣, ハイブリッド配向液晶セル内の背流速度分布, 日本機械学会2010年度年次大会, 2010年9月8日, 名工大
- ⑤ 井上大樹, 辻知宏, 蝶野成臣, 同心二重円筒内せん断流れにおける液晶分子のタンプリング挙動, 日本流体力学会年会2009, 2009年9月3日, 東洋大学白山キャンパス

〔図書〕（計0件）

〔産業財産権〕

○出願状況（計0件）

○取得状況（計0件）

〔その他〕

ホームページ等

6. 研究組織

(1) 研究代表者

辻 知宏 (TSUJI TOMOHIRO)

高知工科大学・システム工学群・准教授

研究者番号：60309721

(2) 研究分担者

蝶野成臣 (CHONO SHIGEOMI)

高知工科大学・システム工学群・教授

研究者番号：20155328