ネマチック–等方相転移点上の液晶における粒子の摩擦力

産業技術総合研究所 ナノテクノロジー研究部門[a]
JST ERATO 横山液晶微界面プロジェクト[b]
Universität Konstanz[c]
福田 順一[a,b] [1], Holger Stark[c], 横山 浩[a,b]

液晶を分散媒としたコロイド系 [1, 2] が、近年新しいタイプの複合材料として着目されている。液晶の自由度と分散粒子の自由度との結合により、通常のコロイド系に見られない様々な構造や性質が発現することが知られている。1つの興味深い例として、液晶を等方相からネマチック相に転移させることによって、コロイド系全体としての弾性的な性質が劇的に変化し、系が柔らかい固体として振る舞うことが実験的に確認されている [2]。このように、液晶の相転移に伴って、粒子を含む液晶系がどのように振る舞いを変化させるかという問題は興味深いものがある。

本研究では、そのような問題の1つとして、ネマチック–等方 (N–I) 相転移点近傍において、粒子が液晶からどのような摩擦力を受けるかを数値的に調べる。液晶中のブラウン運動を観測した実験 [3] によれば、等方相から温度を下げると、N–I 転移点に近付くにつれて、Stokes-Einstein の関係式から導かれる実効的な粘性が増大することが知られている。しかし、粒子を含んだ液晶系の流体力学的な研究は決して十分ではなく、特に相転移を伴う問題は全く手がつけられていないのが現状である。本研究では、そのような問題に取り組む第一歩として、1つの粒子のまわりの N–I 転移点近傍の液晶が、一様な流れ場の中でどのように振る舞い、その結果として粒子がどのような摩擦力を受けるかということを調べる。

液晶中に半径 R_0 の1つの球状粒子を固定し、無限遠では速さ v_∞ の一様流になっている系を考える。液晶の配向秩序を記述するために，テンソルの秩序変数 $Q_{\alpha\beta}$ を導入する．$Q_{\alpha\beta}$ と流れ場 $\boldsymbol{v}$ を支配する方程式は、Olmsted & Goldbart[4] のものを用いる。適当な規格化の後に、それらの方程式は以下のように書ける。

$$Re\left(\frac{\partial}{\partial t}+\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{\nabla}\right)v_\alpha=\partial_\gamma\left[2\kappa^{[s]}_{\gamma\alpha}+\frac{1}{Er^*}\left(-\beta_1 H^{[s]}_{\gamma\alpha}+\sigma^{i[a]}_{\gamma\alpha}+\sigma^{d}_{\gamma\alpha}\right)-p\delta_{\gamma\alpha}\right], \tag{1}$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{\nabla}\right)Q_{\alpha\beta}+\left(\kappa^{[a]}_{\alpha\gamma}Q_{\gamma\beta}-Q_{\alpha\gamma}\kappa^{[a]}_{\gamma\beta}\right)=\beta_1\kappa^{[s]}_{\alpha\beta}+\frac{1}{\beta_2 Er^*}H^{[s]}_{\alpha\beta}. \tag{2}$$

ここで，長さと時間の単位はそれぞれ $R_0, R_0/v_\infty$ であり，$\kappa_{\alpha\beta}\equiv\partial_\alpha v_\beta$ は速度勾配テンソル，$[s],[a]$ はテンソルのそれぞれ対称，反対称成分，β_1,β_2 は運動係数，$\sigma^{i[a]}_{\alpha\beta}=H^{[s]}_{\alpha\gamma}Q_{\gamma\beta}-Q_{\alpha\gamma}H^{[s]}_{\gamma\beta}$ は，流れ場と配向秩序のカップリングから来るストレステンソルへの寄与のうちの反対称成分，$\sigma^{d}_{\alpha\beta}=$

[1] E-mail:fukuda.jun-ichi@aist.go.jp

$-(\partial F/\partial(\partial_\alpha Q_{\mu\nu}))\partial_\beta Q_{\mu\nu}$ は液晶の弾性変形から来るストレステンソルである．また分子場 $H_{\alpha\beta} = -\delta F/\delta Q_{\alpha\beta}$ は，自由エネルギー F に Landau-de Gennes の形を仮定すると，再び適当な規格化のもとで以下のように書ける．

$$H_{\alpha\beta} = -\tau Q_{\alpha\beta} + \frac{3\sqrt{6}}{4} Q_{\alpha\gamma} Q_{\gamma\beta} - (\mathrm{TrQ}^2) Q_{\alpha\beta} + {\xi_R}^2 \nabla^2 Q_{\alpha\beta} + \lambda \delta_{\alpha\beta}. \tag{3}$$

最初の3項がバルクのエネルギー由来の項 (τ は還元温度)，第4項が弾性エネルギー (一変数近似，ξ_R はネマチックの相関長)，最後の項は TrQ =0 を保証するための Lagrange の未定乗数の項である．また流れの強さを表す無次元量 (流体の粘性力/液晶の弾性力) として，Ericksen 数 Er^* が現れる (通常の意味での Ericksen 数は $Er = Er^*/{\xi_R}^2$ である)．また，Reynolds 数 Re は，ここではゼロの極限を取る．

ここでは、バルクの液晶が等方相にある場合を考え、無限遠では $Q_{\alpha\beta} = 0$ と取る。上の分子場の形から、ネマチック–等方相転移点は $\tau = 1/8$ となるので、$\tau \geq 1/8$ の場合を考えることに相当する。また、粒子表面では強い垂直配向を仮定し、秩序変数の値を $Q_{\alpha\beta} = Q_0(\nu_\alpha \nu_\beta - (1/3)\delta_{\alpha\beta})$ に固定する ($\boldsymbol{\nu}$ は法線方向の単位ベクトル)。以上をふまえると、重要な可変パラメータは、粒子表面の秩序度 Q_0、還元温度 τ、無次元化した粒子半径（ここでは ξ_R^{-1} がそれに相当する)、および Ericksen 数 Er である。また、粒子に働く摩擦力は、摩擦力に釣り合う外力のする仕事率が、定常状態では液晶中における単位時間あたりの散逸に等しいという関係を用いて決定する。

予備的な数値計算の結果、Ericksen 数が 1 より小さい場合には、液晶の配向の様子はほとんど流れ場によって影響を受けないのに対し、Ericksen 数を大きく取ると、粒子の背後にネマチック秩序が誘起されることが見い出された。摩擦力の具体的な計算結果、特に上記の可変パラメータに対する依存性の詳細については、講演において紹介する。

参考文献

[1] P. Poulin *et al.*, Science **275** (1997), 1770.

[2] S.P. Meeker *et al.*, Phys. Rev. E **61** (2000), R6083.

[3] A. Böttger *et al.*, Liq. Cryst. **2** (1987), 539.

[4] P.D. Olmsted and P. Goldbart, Phys. Rev. A **41** (1990), 4578.