

Effect of Hydrodynamic Flow on Kinetics of Nematic-Isotropic Transition 液晶の Nematic-Isotropic 転移に流体力学的効果が及ぼす影響

京都大学理学部 福田順一 (FUKUDA, Jun-ichi)

液晶の Nematic-Isotropic 転移のダイナミクスは、連続的な対称性を持つ系の相転移の 1 つの例として実験的にも理論的にも精力的に研究がなされてきたが、そのダイナミクスに流体力学的効果がどのような影響を及ぼすかといった観点からの研究はこれまでほとんどなされていない。そこで、本研究では、液晶の Nematic-Isotropic 転移に流体力学的効果がどのような影響を及ぼすかを、主に数値計算を用いて調べた。

液晶の配向秩序を表す秩序変数としては 3×3 テンソル $Q_{\alpha\beta}$ を用いる。 $Q_{\alpha\beta}$ の dynamics を記述する式 [1] は、速度場を v_α として

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + v_\gamma \partial_\gamma\right) Q_{\alpha\beta} + \kappa_{\alpha\nu}^{[a]} Q_{\nu\beta} - Q_{\alpha\nu} \kappa_{\nu\beta}^{[a]} = \beta_1 \kappa_{\alpha\beta}^{[s]} + \frac{1}{\beta_2} H_{\alpha\beta}^{[s]}, \quad (1)$$

と書ける ($[s]$ はテンソルの対称かつ traceless な成分、 $[a]$ は反対称成分。 $\kappa_{\alpha\beta} \equiv \partial_\alpha v_\beta$ 、 $F\{Q_{\alpha\beta}\}$ は系の free energy、 $H_{\alpha\beta} \equiv -\delta F/\delta Q_{\alpha\beta}$ は molecular field)。流体は非圧縮 ($\partial_\alpha v_\alpha = 0$) を仮定している。速度場の従う式は $\rho(\partial/\partial t + v_\gamma \partial_\gamma)v_\alpha = \partial_\gamma \sigma_{\gamma\alpha}$ であり、stress tensor は $\sigma_{\alpha\beta} = \sigma_{\alpha\beta}^{i[s]} + \sigma_{\alpha\beta}^{i[a]} + \sigma_{\alpha\beta}^d - p\delta_{\alpha\beta}$ と表される。ただし、 $\sigma_{\alpha\beta}^{i[s]} = \beta_3 \kappa_{\alpha\beta}^{[s]} - \beta_1 H_{\alpha\beta}^{[s]}$ は dissipative part、 $\sigma_{\alpha\beta}^{i[a]} = H_{\alpha\nu}^{[a]} Q_{\nu\beta} - Q_{\alpha\nu} H_{\nu\beta}^{[a]}$ は torque part、 $\sigma_{\alpha\beta}^d = -\frac{\delta F}{\delta(\partial_\alpha Q_{\mu\nu})} \partial_\beta Q_{\mu\nu}$ は distortion part であり、 p は流体の非圧縮性を保証する Lagrange multiplier である [1]。系の free energy [2] は

$$F\{Q_{\alpha\beta}\} = \int dr \left(\frac{1}{2} A Q_{\alpha\beta} Q_{\alpha\beta} + \frac{1}{3} B Q_{\alpha\beta} Q_{\beta\gamma} Q_{\gamma\alpha} + \frac{1}{4} C (Q_{\alpha\beta} Q_{\alpha\beta})^2 + \frac{1}{2} L_1 \partial_\alpha Q_{\beta\gamma} \partial_\alpha Q_{\beta\gamma} + \frac{1}{2} L_2 \partial_\alpha Q_{\alpha\beta} \partial_\gamma Q_{\gamma\beta} \right) \quad (2)$$

とする。第 1 行は Landau-de Gennes 型の bulk energy、第 2 行は distortion energy である。

数値計算は周期境界条件を課した 1 辺 256 の 2 次元正方格子で行なった。用いた parameter は $A = -4.5$, $B = -6$, $C = 5$, $L_1 = 0.5$, $L_2 = 0$, $\beta_1 = \beta_2 = 1$, $\Delta x = 0.5$, $\Delta t = 0.05$ である。流体に関しては Stokes 近似を課し、 z 方向の微分と速度成分は 0 とおいた。

図 1 に流体力学的効果を入れない場合と入れた場合における Schlieren パターンの時間発展を示す。流体力学的効果が入っている方が Q_{xy}^2 の値が大きい、つまり液晶分子が系のある平面 (x - y 平面) に平行に揃いやすいという傾向があることがわかる。また図 2 はそれぞれの場合における $Q_{\alpha\beta}$ の統計平均 $\langle Q_{\alpha\beta} \rangle$ の時間発展である。流体力学的効果を入れない場合は $\langle Q_{\alpha\beta} \rangle = 0$ であるのに対して、流体力学的効果を入れた場合は $\langle Q_{xx} \rangle$, $\langle Q_{yy} \rangle$ の値が 0.25 に、 $\langle Q_{zz} \rangle$ の値が -0.5 に近づいているのがわかる。bulk energy を最小にする値 $Q_{\alpha\beta} = (3S/2)(n_\alpha n_\beta - (1/3)\delta_{\alpha\beta})$ (n_α は任意の unit vector、我々の simulation では $S = 1$) について、 $n_z = 0$ という条件のもとで平均を取ると $\langle Q_{xx} \rangle = \langle Q_{yy} \rangle = 1/4$, $\langle Q_{zz} \rangle = -1/2$ となるので、数値計算の結果は確かに液晶分子が x - y 平面内に揃っていることを示している。

上で述べた結果を理解するために、isotropic state $Q_{\alpha\beta} = 0$ から成長するモードの線形解析を行なった。Stokes 近似のもとで速度場 v_α を線形の範囲で繰り込むことによって、 $Q_{\alpha\beta}$ の運動方程式は

$$\frac{\partial}{\partial t} Q_{\alpha\beta}(\mathbf{q}) \simeq \Lambda_{\alpha\beta\mu\nu}(\mathbf{q}) \frac{1}{\beta_2} H_{\mu\nu}^{[s]} \quad (3)$$

$$\Lambda_{\alpha\beta\mu\nu}(\mathbf{q}) = \delta_{\alpha\mu}\delta_{\beta\nu} + \frac{\beta_1^2\beta_2}{\beta_3q^4}q_\mu\{q_\alpha(q^2\delta_{\beta\nu} - q_\beta q_\nu) + q_\beta(q^2\delta_{\alpha\nu} - q_\alpha q_\nu)\}. \quad (4)$$

と表される。 $q_z = 0, v_z = 0$ のもとでは、 $\Lambda_{\alpha\beta\mu\nu}(\mathbf{q})$ の5つの固有モードのうち、4つは固有値(モードの成長率)が1(流体力学的効果を考慮に入れない場合と同じ)、残りの1つのモード($Q_{xx} - Q_{yy}, Q_{xy}, Q_{xz}, Q_{yz}, Q_{zz}$) $\propto (4q_xq_y, q_y^2 - q_x^2, 0, 0, 0)$ が1より大きい固有値 $\lambda = 1 + (\beta_1^2\beta_2/\beta_3)$ を持つ。つまり、流体力学的効果を考慮に入れると、 x - y 平面に平行なモードが最も速く成長し、モードの成長の仕方に非対称性が生じるということがわかる。

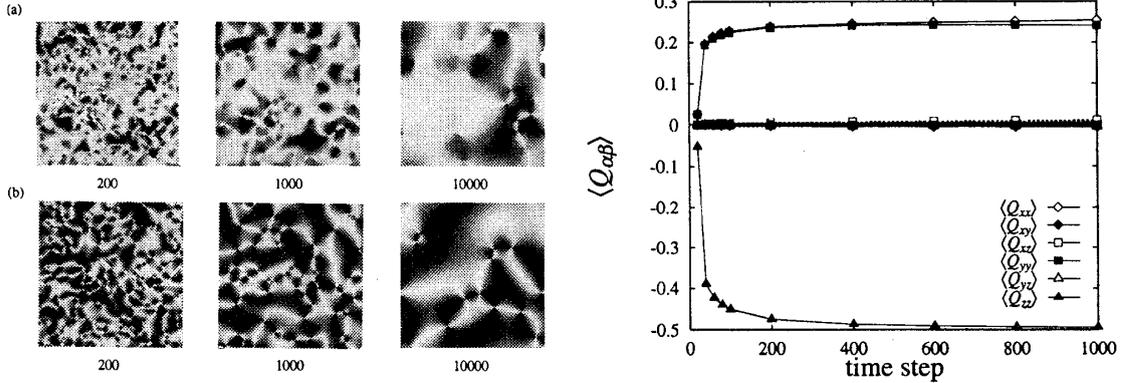


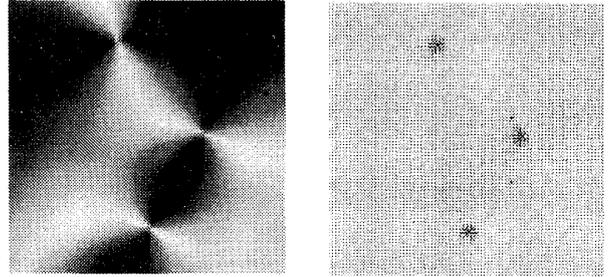
図1: 流体力学的効果を(a) 入れない場合(b) 入れた場合 図2: $\langle Q_{\alpha\beta} \rangle$ の時間発展。実線は流体力学的効果を入れた場合($\beta_3 = 2$)における Schlieren パターンの時間発展、破線は入れない場合。50回の発展(初期条件は同じ)。濃淡は Q_{xy}^2 を表す。数字はtime 立した計算の統計平均を取っているstep。

さらに、後期過程における流体力学的効果の影響を調べるために、実空間における $Q_{\alpha\beta}$ の相関関数から決定した相関長 $L(t)$ と、topological defectの数 $N(t)$ の時間発展を調べ、成長の指数 $L(t) \sim t^{\phi_c}, N(t) \sim t^{\phi_{def}}$ を計算した。その結果を表1に示す。

	ϕ_c	ϕ_{def}
no flow	0.402 ± 0.002	-0.751 ± 0.005
$\beta_3 = 2$	0.432 ± 0.002	-0.868 ± 0.005
$\beta_3 = 5$	0.428 ± 0.002	-0.845 ± 0.004
$\beta_3 = 20$	0.402 ± 0.003	-0.809 ± 0.002

表1: 流体力学的効果を入れない場合(no flow)と入れた場合($\beta_3 = 2, 5, 20$)の ϕ_c と ϕ_{def}

図3(右): 左は Schlieren パターン(78 × 78の部分)、右は速度場のprofile。 $\beta_3 = 2$ 、time step は 15000。



この結果から、流体力学的効果は後期過程における成長を少し速くする効果しかないことと、動的スケーリング則が成り立っている時に期待される関係 $\phi_{def} = -2\phi_c$ が、流体力学的効果が入っていない時には成り立たない[3]のに対し、入っている時は成り立っていることがわかる。流体力学的効果が後期過程においてそれほど強い影響を及ぼさない理由として、topological defectの近傍でしか速度場が重要でないこと(図3)、それから、実効的な運動論的係数 $\Lambda_{\alpha\beta\mu\nu}(\mathbf{q})/\beta_2$ が波数の大きさによらないことなどが考えられる。

[1] P.D. Olmsted and P.M. Goldbart, Phys. Rev. A 41, 4578 (1990); *ibid.* 46, 4966 (1992).

[2] P.G. de Gennes and J. Prost, *The Physics of Liquid crystals 2nd edition* (Oxford University Press, 1993).

[3] M. Zapotocky, P.M. Goldbart, and N. Goldenfeld, Phys. Rev. E 51, 1216 (1995).

[4] J. Fukuda, submitted to European Physical Journal B.