

## 球状粒子のまわりの液晶配向の数値計算

福田 順一, 米谷 慎, 横山 浩

科学技術振興事業団 ERATO 横山液晶微界面プロジェクト

異なる構成要素を液晶に組み合わせることにより新たな性質や機能の発現を目指す試みが近年非常に盛んに行なわれており, そのような例の1つとして, ネマチック液晶中に何らかの粒子 (あるいは水などの液滴) を分散させた系が知られている [1]. この系の興味深い特徴として, 諸条件を変化させることにより粒子まわりの液晶の配向が様々に変化すること, あるいは液晶の弾性変形によって粒子間に相互作用が生じ, その結果粒子が多様な高次構造を形成することなどが挙げられる. 特に, 粒子表面における液晶の配向が homeotropic である場合には, hyperbolic hedgehog 構造と, Saturn ring 構造の2種類の配向構造が存在することが実験によって明らかになっている [2, 3]. これらの欠陥の構造の安定性は, 位相欠陥それ自体が凝縮系物理の興味深い対象として考察されてきたこと, それから付随する欠陥の構造によって粒子間の相互作用, ひいては粒子が形成する高次構造が変化することなどから, 非常に興味深い問題として認識されている. これらの欠陥の安定性を決める要素は様々であり, その中で欠陥のコアの大きさ  $r_c$ , 粒子の大きさ  $R_0$  という2つの特徴的な長さの比が, 重要な要素の1つであると示唆されている [4, 5] ( $r_c/R_0$  がある閾値より大きいと Saturn ring が, 小さいと hedgehog がより安定).

しかしながら, そのような配向構造の形成を理解するための数値計算は, これらの特徴的な長さがお互い大きく異なり, それらを同時に取り扱う必要があるので非常に困難である. また, 通常単位ベクトルを用いる液晶配向の記述では, 欠陥の大きさ  $r_c$  は直接は現われないという問題がある. 本研究では, ネマチック液晶の配向秩序を記述する秩序変数として2階のテンソルを採用することにより, 欠陥の大きさを直接考慮した. さらに, 前述した数値計算上の困難を回避するために, 秩序変数の空間変化の強さに応じて格子間隔を動的に変化させる adaptive mesh refinement の手法を用いて, 欠陥の近傍のみを細かく見ることにより, 粒子より著しく小さい欠陥の振る舞いの観察をより少ない計算時間で行うという, 相反する要求を満たすことが可能となった [6, 7]. これらの工夫により, 欠陥と粒子の大きさの比  $r_c/R_0$  を系統的に1のオーダーから  $10^{-3}$  のオーダーまで変えることができ, さらに過去の数値計算では不可能であった欠陥の微細な構造に対する知見を与えることも可能となる.

1つの粒子のまわりのネマチック液晶の配向を数値的に求めた結果の一例を図1に示す. この結果から, hedgehog 構造と Saturn ring 構造の両方が, 少なくとも準安定な構造として数値的に再現できることが示される. またこのスキームがダイナミクス記述にも有効であることを示すため, 電場や磁場といった外場中で hedgehog が Saturn ring に転移する様子の数値計算の結果を図2に示す [8]. この転移は最近実験で観測されているが [9], 十分な解像度の格子を用意しないと数値的なピン止めが生じることなどから, 今まで数値計算でこの現象の再現に成功した例はなく, この結果が初めてのものであるということを確認しておきたい.



図 1:  $r_c/R_0 = 0.002$  における平衡配向の構造. 無限遠での配向は  $z$ (横) 方向. 左は hedgehog 構造, 右は Saturn ring 構造. それぞれ  $Q_{zz}^2$  のグレースケールプロット.

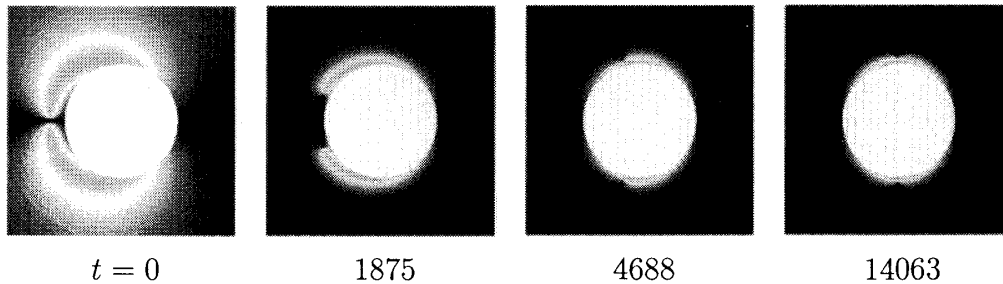


図 2: 外場を加えた際の hedgehog から Saturn ring への構造転移の様子.  $Q_{zz}^2$  のグレースケールプロット. 数字は無次元化した時間.

## 参考文献

- [1] P. Poulin *et al.*, Science **275**, 1770 (1997).
- [2] P. Poulin and D.A. Weitz, Phys. Rev. E **57**, 626 (1998).
- [3] O. Mondain-Monval *et al.*, Eur. Phys. J. B **12**, 167 (1999).
- [4] T.C. Lubensky *et al.*, Phys.Rev. E **57**, 610 (1998).
- [5] H. Stark, Eur. Phys. J. B **10**, 311 (1999).
- [6] J. Fukuda and H. Yokoyama, Eur. Phys. J. E **4**, 389 (2001).
- [7] J. Fukuda, M. Yoneya and H. Yokoyama, Phys. Rev. E **65**, 041709 (2002).
- [8] J. Fukuda, M. Yoneya and H. Yokoyama, presented in 19th International Liquid Crystal Conference (Edinburgh, UK).
- [9] J.C. Loudet and P. Poulin, Phys. Rev. Lett. **87**, 165503 (2001).