

球状粒子のまわりの液晶配向に対する流れ場の影響

科技団 ERATO 横山液晶微界面プロジェクト¹,

Universität Konstanz², 産総研³

福田 順一¹, Holger Stark², 米谷 慎¹, 横山 浩^{1,3}

近年、液晶に別の構成要素を組み合わせた系が、今までの液晶に見られなかった新たな構造や機能が期待できることから精力的に研究されている。そのような系の典型例の1つとして、液晶を分散媒としたコロイド系を挙げることができる。その興味深い特徴としては、分散した粒子のまわりの液晶配向、さらには粒子に付随する位相欠陥の構造が様々に変化しうること、また、分散粒子同士が液晶配向の弾性変形を媒介として相互作用をし、その結果として多様な高次構造を粒子が形成することなどがある [1]。

本研究では、そのような液晶コロイド系の力学応答の理解への第一歩として、1つの粒子のまわりの液晶配向が一樣な流れ場によってどのような影響を受けるかを数値的に調べる。過去の類似の研究のほとんどは、流れ場が弱く液晶配向が変化しないことを仮定している。液晶配向の流動による変化も考慮にいった研究 [2] は数少なく、しかもそれらは全て定常状態のみを考察している。本研究では、これまで粒子を含んだ系では全く研究されてこなかった、流動による液晶配向の変化の非定常過程の考察をターゲットの1つとしている。

液晶中に半径 R_0 の1つの球状粒子を固定した系を考え、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。粒子表面では強い垂直アンカリングを仮定した上で秩序変数を固定し、無限遠では一樣配向になるように境界条件を設定する。また、流れ場は無限遠で速さ v_0 の一樣流（方向は液晶の配向と平行）、粒子表面では $\mathbf{v} = \mathbf{0}$ と取る。液晶の配向と流れ場を支配する方程式は、Olmsted & Goldbart [3] のものを用いる。運動方程式は、適当な規格化の後に以下のように書くことができる。

$$Re \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \right) v_\alpha = \partial_\gamma \left[2\kappa_{\alpha\gamma}^{[s]} + \frac{1}{Er^*} \left(-\beta_1 H_{\alpha\gamma}^{[s]} + \sigma_{\alpha\gamma}^{i[a]} + \sigma_{\alpha\gamma}^d \right) - p\delta_{\alpha\gamma} \right], \quad (1)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \right) Q_{\alpha\beta} - \left(\kappa_{\alpha\gamma}^{[a]} Q_{\gamma\beta} - Q_{\alpha\gamma} \kappa_{\gamma\beta}^{[a]} \right) = \beta_1 \kappa_{\alpha\beta}^{[s]} + \frac{1}{\beta_2 Er^*} H_{\alpha\beta}^{[s]}. \quad (2)$$

ここで、長さや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、 $\sigma_{\alpha\beta}^{i[a]} = H_{\alpha\gamma}^{[s]} Q_{\gamma\beta} - Q_{\alpha\gamma} H_{\gamma\beta}^{[s]}$ 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、 $\sigma_{\alpha\beta}^d = -(\partial F / \partial (\partial_\alpha Q_{\mu\nu})) \times \partial_\beta Q_{\mu\nu}$ 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.

$$H_{\alpha\beta} = -\tau Q_{\alpha\beta} + \frac{3\sqrt{6}}{4} Q_{\alpha\gamma} Q_{\gamma\beta} - (\text{Tr} Q^2) Q_{\alpha\beta} + \xi_R^2 \nabla^2 Q_{\alpha\beta} + \lambda \delta_{\alpha\beta}. \quad (3)$$

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 $\text{Tr} Q = 0$ 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重要な無次元量 (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. 数値計算の詳細については, 講演で紹介する.

$Er = 1$ の場合に, hedgehog 型の欠陥が時間とともにどのように変化するかを図 1 に示す. 無限遠における流速, 液晶配向はともに z 軸 (紙面の水平方向) に平行であり, 図 1 は Q_{zz}^2 をグレースケールプロットしたものである. $Er = 1$ というのは流体の粘性力と液晶の弾性力がほぼ拮抗する状況であるが, そのような状況においても, 液晶の配向が流れ場によって強い変形を受けていることが図 1 から見て取れる. また, 流れの方向によって, 変形の仕方が大きく異なることもわかる.

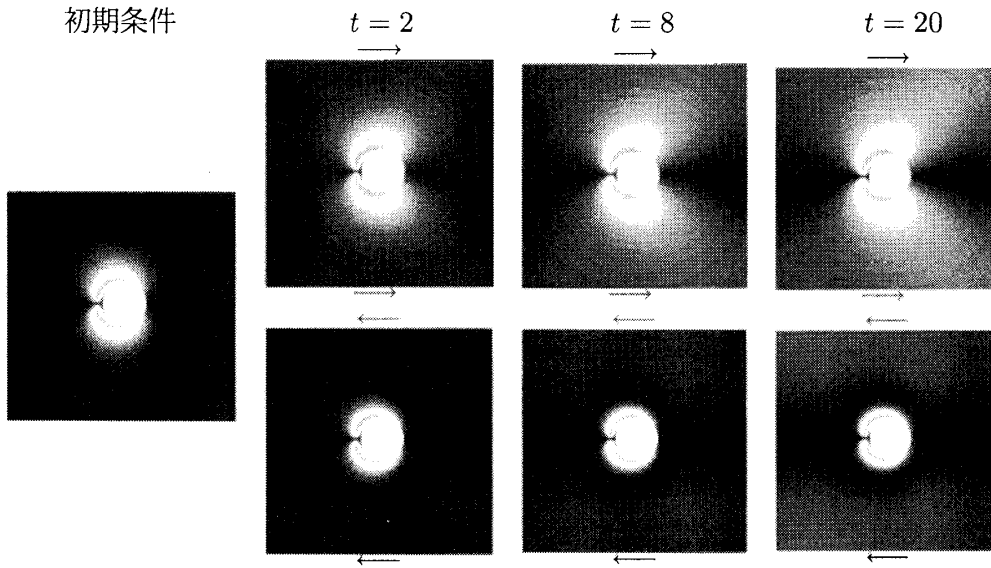


図 1: 配向の時間変化の様子. 矢印は, 粒子から見た流れ場の方向.

参考文献

- [1] P. Poulin *et al.*, Science **275** (1997), 1770.
- [2] S. Chono and T. Tsuji, Mol. Cryst. Liq. Cryst. **309** (1998), 217;
H. Stark and D. Ventzki, Europhys. Lett. **57**(2002), 60.
- [3] P.D. Olmsted and P. Goldbart, Phys. Rev. A **41**(1990), 4578; *ibid.* **46**(1992), 4966.