

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 27 年 4 月 23 日現在

機関番号：14301

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2012～2014

課題番号：24540433

研究課題名(和文)多孔質中のネマティック液晶におけるトポロジカル欠陥の示す非線形流動

研究課題名(英文)Nonlinear flow behaviors of nematic liquid crystals in porous media

## 研究代表者

荒木 武昭 (Araki, Takeaki)

京都大学・理学(系)研究科(研究院)・准教授

研究者番号：20332596

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,900,000円

研究成果の概要(和文)：多孔質に閉じ込めたネマティック液晶の流動特性を数値的・理論的手法を用いて調べることを目的とし、特に、トポロジカル欠陥の多重安定性に関わる非線形・非平衡流動現象に焦点を当て研究を行った。トポロジカル欠陥が多孔質と絡み合っているが、ある速度以上の流れによって、欠陥の構造が組み変わる。このことを利用し、多孔質中の流れの経路を記憶させたり、欠陥構造を制御することで流れの経路を制御できていることを示した。

研究成果の概要(英文)：When a nematic liquid crystal is confined in a porous medium, topological defects are stably formed with numerous possible configurations. Since the energy barriers between them are large, the system shows multistability. Our lattice Boltzmann simulations demonstrate dynamic couplings between the multistable defect pattern and the flow in a porous matrix. At sufficiently low flow speed, the topological defects are pinned at the quiescent positions. As the flow speed is increased, the defects show cyclic motions and nonlinear rheological properties, which depend on whether or not they are topologically constrained in the porous networks. Also we found the defect pattern can be controlled by controlling the flow. Thus, the flow path is recorded in the porous channels owing to the multistable defect patterns. We also studied the effect of electric field. We found nematic domains appear around the surfaces of a large curvatures even above the phase transition temperature.

研究分野：ソフトマター物理

キーワード：ネマティック液晶 多孔質 非線形流動 数値シミュレーション トポロジカル欠陥

### 1. 研究開始当初の背景

液晶とは液体と結晶の中間相であり、マクロには液体として振る舞うにも関わらず、メゾスケールでは弾性を有するという特徴を有する。二枚の平板に閉じ込めた場合など、壁とのアンカリング効果により一様に揃うことができる。また、分子の方向が電場に対し揃おうとする性質、屈折率が分子方向に依存するという性質から液晶は薄型ディスプレイの材料として身の回りに広く用いられている。

多孔質に液晶を封入すると、平板に挟む場合と異なり、電場を切った後もその方向が残るといった記憶効果を示すことが知られている。我々はモンテカルロシミュレーションにより、この記憶効果が多孔質の複雑な構造と液晶の配向欠陥の絡み合いによってできる配向場の多重安定性によるものであることを示した。

一方、液晶は複雑な流動挙動を示すことが知られており、近年、液晶を用いたマイクロ流路の研究も着手され、単純液体とは異なる複雑な振る舞いが報告され始めている。

### 2. 研究の目的

本研究課題は、多孔質に閉じ込めたネマティック液晶の流動特性を数値的・理論的手法を用いて調べることを目的とする。特に、液晶のトポロジカル欠陥に関わる非線形流動現象に焦点を当て研究を行う。多孔質のような一様でない空間に閉じ込めると、多孔質表面のアンカリング効果のため欠陥は安定に存在するようになる。多孔質のトポロジーと結合して、欠陥は様々な配置を取りうるが、トポロジー変化を伴うような配置間の遷移はエネルギー障壁によって抑制され、系は遅いダイナミクスを示すようになる。本研究では、トポロジカル効果によって捕捉された欠陥が流れの中でどのような振る舞い（臨界・分岐・乱流現象等）を示すか？欠陥構造を変えることで、多孔質中の流れの経路を制御することができるか？について明らかにする。

### 3. 研究の方法

本研究は、数値シミュレーション、および理論的考察によって行う。

①多孔質中の流動挙動を数値的に調べるには、複雑な構造を持つ壁の境界条件を取り入れなければならない。そこで、複雑な境界条件を取り入れるべく、まずは、格子ボルツマン法を用いて数値計算に着手する。液晶の相転移は、ネマティック秩序に関するテンソル秩序変数によって記述される Landau-de Gennes 自由エネルギーを用いる。また、テンソル秩序変数の空間勾配を考えることにより、液晶の弾性場を記述する。流れの強度を変え、配向欠陥がどのように振る舞うか、それが流れに影響を及ぼすかについて焦点を当てて、数値計算を行う。

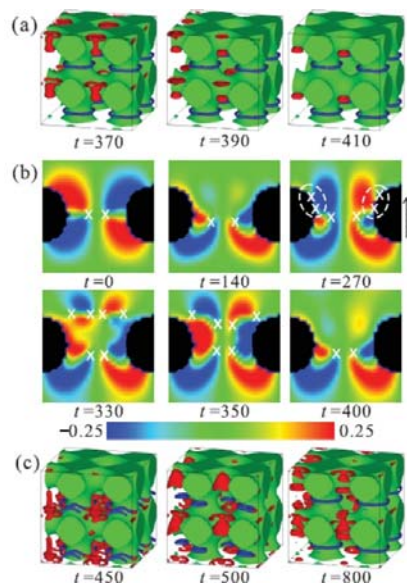
②多孔質中をネマティック液晶が流れるとき、壁のアンカリング強度が有限ならば、流れにアンカリング効果が影響を与えることが予想される。より精度よく、その振る舞いを調べるため、多孔質ではなく二枚の平板に挟まれたネマティック液晶を考える。よく用いられる液晶の流体力学である Ericksen-Leslie-Parodi モデルは、液晶の相転移を記述することができない。そこで、テンソル場を用いた Qian-Sheng モデルを用いて、詳細な数値計算を行う。このモデルは、液晶秩序化と弾性を記述する自由エネルギーにアンカリングの効果を導入し、流れ場と配向場の回転の運動を記述する流体方程式である。

③多孔質を流れる液晶の電場の効果を調べたい。通常、液晶に電場を印加する際、電場は一様なものと仮定されることが多い。しかしながら、誘電率は液晶秩序や配向場に依存するため、電場も一様になるとは限らない。誘電率の不均一性を考慮し、静電場を正しく計算し、液晶場に対する電場の効果を調べる。

その他、我々が以前、開発した流体粒子ダイナミクス法や、モンテカルロシミュレーションなどを用いて、様々な方向から問題にアプローチしていきたい。

### 4. 研究成果

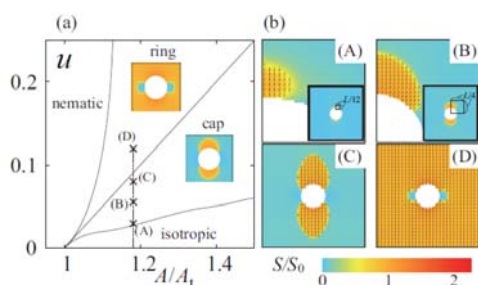
①数値シミュレーションの結果、多孔質中に残るトポロジカル欠陥は、多孔質の構造によってトポロジカルに拘束されたものとそうでないものの二種類の欠陥が存在するが分かった。流れが小さい場合には、欠陥は分子の回転運動によって流れに逆らい、自由エネルギー的に安定な元の位置が保持される。流れが大きくなると、トポロジカルに拘束されていない欠陥が動き出すようになる。さらに流れを強くすると、拘束された欠陥も組み換えながら運動するようになった。トポロジカル欠陥のメモリー効果により、流動特性も記



憶される。また、欠陥構造を制御することにより、多孔質中の流れの経路を制御できることが分かった。

②多孔質中をネマティック液晶が流れるとき、壁のアンカリング強度が有限ならば、多孔質表面における配向場のアンカリングが過渡的に壊れ、そこから液晶欠陥が生じることが分かった。その物理的機構を明らかにすべく、多孔質ではなく、より簡単な系として様々なアンカリング強度を持つ平板スリットを考え、その中を流れるネマティック液晶の流動挙動を調べた。バルク中では配向場が回転するような領域を考える。ポアズイユ流の場合、流れが十分に遅いとき、アンカリングが小さくても、液晶の弾性場により配向場は固定されている。アンカリング強度が小さければ、しだいに流れを早くしていくと、壁付近の配向場が先に回転するようになる。アンカリング強度を変化させると、回転が起こる Ericksen 数のしきい値が変化する。アンカリング強度が強い場合には、壁付近の配向場は固定されるが、壁から離れたある距離付近の配向場が不安定になり、そこからタンブリングが始まることが分かった。しかしながら、流れがある流速より遅ければ、その回転運動は、有限の時間の後、止まってしまうことも分かった。これは回転運動によって蓄えられた弾性エネルギーが大きく増大し、回転運動を妨げるためである。回転運動を続けさせるためには、さらに早い流れを与えなければならない、これはネマティック液晶が局所的に融けることに起因するものであることが分かった。

③多孔質中を流れる液晶に対する電場の効果を調べるべく、まず液晶の静電自由エネルギーに関する考察を行った。簡単のため、多孔質の代わりに、液晶より高い誘電率を持つ絶縁体球を考える。また相転移温度よりわずかに高い温度の状態を考えた。電場が弱い場合には、系は等方相のままであるが、電場を次第に強くしていくと、球の両極付近にネマティック相が出現することが分かった。これは、絶縁体球の存在により電場が局所的に強くなり、電場誘起液晶相転移が起こったためである。この局所的な液晶領域の出現様式や聖地帳は、粒子表面のアンカリングや粒子界面の曲率に依存する。また、系の電気物性や光学物性に大きく影響することも示された。



## 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 6 件)

- ① Takeaki Araki and Shintaro Fukai, “Controlled motion of a Jauns particle in periodically phase-separating binary fluids”, *Soft Matter* 11, 3470-3479 (2015), DOI:10.1039/C4SM02357A (査読有)
- ② Takayuki Uchida, Takeaki Araki and Akira Onuki, “Nematic caps on colloidal particles in a nematogenic liquid under an electric field”, *Soft Matter* 11, 2874-2884 (2015), DOI: 10.1039/C5SM00088B (査読有)
- ③ Takeaki Araki, Francesca Serra and Hajime Tanaka, “Defect science and engineering of liquid crystals under geometrical frustration”, *Soft Matter* 9, 8107-8120 (2013), DOI: 10.1039/C3SM59468M (査読有)
- ④ Yuki Uematsu and Takeaki Araki, “Electro-osmosis flow of semi-dilute polyelectrolyte solutions”, *J. Chem. Phys.* 139, 94901 (2013), DOI: 10.1063/1.4820236 (査読有)
- ⑤ Yuki Uematsu and Takeaki Araki, “Effects of strongly selective additives on volume phase transition in gels”, *J. Chem. Phys.* 137, 024902-1-9 (2012), DOI: 10.1063/1.4732857 (査読有)
- ⑥ Takeaki Araki, “Dynamic coupling between a multistable defect pattern and flow in nematic liquid crystals”, *Phys. Rev. Lett.* 109, 257801-1-5 (2012), DOI:10.1103/PhysRevLett.109.257801 (査読有)

[学会発表] (計 17 件)

- ① Yukinori Kambe and Takeaki Araki, “Effect of flow on nematic liquid crystal in a slit with finite anchoring conditions”, 9th Liquid Matter Conference, 2014/07/21-07/27, リスボン (ポルトガル)
- ② Shintaro Fukai and Takeaki Araki, “Dynamics of Janus particles in binary liquid mixtures”, 9th Liquid Matter Conference, 2014/07/21-07/27, リスボン (ポルトガル)
- ③ Takeaki Araki and Hajime Tanaka, “Effect of gravity-driven hydrodynamic flow on pattern evolution of phase-separating binary fluid mixtures”, 9th Liquid Matter Conference, 2014/07/21-07/27, リスボン (ポルトガル)

- ④ Takayuki Uchida and Takeaki Araki, “Conformation of a semiflexible polymer in nematic liquid crystal environment”, 25th International Liquid Crystal Conference, 2014/06/29-07/04, ダブリン(アイルランド)
- ⑤ 植松 祐樹・荒木 武昭, “Electro-osmotic flow of semidilute polyelectrolyte solutions”, 「電荷によって誘起されるソフトマターの階層秩序」に関する研究会, 2015/02/28, 京都大学 (京都)
- ⑥ 内田 隆之・荒木 武昭, “ネマチック液晶中でのセミフレキシブルポリマーの紺フォーメーションについて”, 2014 年日本液晶学会討論会, 2014/09/07-09/10, くにびきメッセ (島根)
- ⑦ Takeaki Araki, “Connectivity of topological defects in nematic liquid crystals confined in complex geometry”, The 2nd Kyoto-Bristol Symposium 2014, 2014/01/09, 京都大学 (京都)
- ⑧ Takeaki Araki, “Topological defects formed by frustration between nematic order and the surface field of solids”, Workshop on the mathematics of material science: liquid crystal colloids and related topics, 2013/11/05-11/07, 大田 (韓国)
- ⑨ Takeaki Araki, “Nonequilibrium behaviors of topological defects of nematic liquid crystals flowing in porous media”, International Soft Matter Conference 2013, 2013/09/15-09/19, ローマ (イタリア)
- ⑩ Yuki Uematsu and Takeaki Araki, “The electro-osmotic flow of semi-dilute polyelectrolyte solution”, International Soft Matter Conference 2013, 2013/09/15-09/19, ローマ (イタリア)
- ⑪ Takayuki Uchida and Takeaki Araki, “Field-induced nematic cloud on the colloidal particles”, STATPHYS25, 2013/07/22-07/26, ソウル (韓国)
- ⑫ Takeaki Araki, “Nonequilibrium behaviors of nematic liquid crystals flowing porous media”, 7th International Conference Engineering of Chemical Complexity, 2013/06/10-06/13, Rostok-Warnemunde (ドイツ)
- ⑬ Takeaki Araki, “Nonlinear flow behaviors of nematic liquid crystals in complex geometries”, The 4th International Symposium on Slow Dynamics in Complex Systems, 2012/12/02-12/06, 東北大学 (仙台)
- ⑭ Takeaki Araki, “A Ginzburg-Landau

- mean-field model describing phase transitions in liquid crystals: Isotropic-nematic-smectic A-smectic C, Core to Core meeting on liquid crystals, 2012/08/25, Max Planck 研究所(ドイツ)
- ⑮ Takeaki Araki, “Flow induced re-configuration of topological defects of nematic liquid crystals in porous media”, 24th International Liquid Crystal Conference 2012/08/19-08/24, マインツ (ドイツ)
- ⑯ 荒木 武昭, “流体粒子ダイナミクス法によるコロイド分散系の研究”, 第 26 回分子シミュレーション討論会, 2012/11/26-2012/11/28, 九州大学(福岡)
- ⑰ 荒木 武昭, “多孔質に閉じ込めたネマチック液晶のトポロジカル欠陥と非線形流動”, 第 2 回ソフトマター研研究会, 2014/09/24-09/26, 九州大学 (福岡)

[その他]  
ホームページ等  
<http://statphys.scphys.kyoto-u.ac.jp/~araki/>

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

荒木 武昭 (ARAKI, Takeaki)  
京都大学・理学研究科・准教授  
研究者番号：20332596

### (2) 研究分担者

小貫 明 (ONUKI, Akira)  
京都大学・理学研究科・名誉教授  
研究者番号：90112284