

温度勾配下での、液晶、気液相転移、溶解の変分原理による定式化

(九州大学 I2cner) ○深川宏樹 辻健

【はじめに】

一般に複雑な系では流体の運動方程式を求めることが難しい。温度勾配を考慮しない場合は、自由エネルギーを使ったオンサーガーの変分原理によって、運動方程式を導出できる【1】。しかしながら、この理論では一様な温度場を想定しており、温度勾配を考慮するのは難しい。温度勾配の効果は、液晶、気液相転移、溶解を理解するのに重要である。本研究では、温度勾配のある系に適用できる変分原理を提案し、これらの複雑流体の運動方程式を得た【2】。

【結果と考察】

提案した変分原理により、以下の運動方程式を得た。

液晶： 液晶の配向子の角運動量 ω は次式に従う。

$$\omega_i = -\frac{1}{\xi} \{ \partial_j (\rho \pi_{ij}) - \rho l_i - \eta \partial_i T \}$$

ここで、 ξ は摩擦係数、 ρ は質量密度、 π と l は内部エネルギーから導出されるポテンシャル力、 η はレーマン効果を表す係数である。 π と l より内部エネルギーが鏡映対称性を破り、温度依存性があると、レーマン効果とは異なる温度勾配による回転が生じることがわかった。

気液相転移： 気液相転移を伴う流体のエントロピーの式は次式で与えられる。

$$\rho D_t s = \frac{1}{T} (\Theta - \nabla \cdot \mathbf{J}_q) - \nabla \cdot \mathbf{J}_s$$

ここで s は比エントロピー、 D_t はラグランジュ微分、 T は温度、 Θ は散逸関数、 \mathbf{J}_q は熱流、 \mathbf{J}_s は潜熱による液相から気相へのエントロピー流速を表す。エントロピー流速は

$$\mathbf{J}_s = \frac{1}{T} \frac{\partial E}{\partial \nabla \rho} D_t \rho$$

とかける。気液界面における表面エネルギー E がエントロピー流速を決めることがわかった。

溶解： 溶質と溶媒で構成される二成分流体の溶質の拡散流速 \mathbf{j} は次式で与えられる。

$$\mathbf{j} = -\frac{1}{\xi} \nabla \mu^* - \frac{\eta}{\xi} \nabla T$$

ここで η はソレー効果を表す係数である。一般化された化学エネルギー μ^* は、

$$\mu^* \equiv \mu + \frac{1}{\rho} \frac{\partial E}{\partial \psi} - \frac{T}{\rho} \partial_k \left(\frac{1}{T} \frac{\partial E}{\partial \partial_k \psi} \right)$$

となる。ここで μ は bulk の化学ポテンシャル、 ψ は溶質の質量分率、 E は溶質と溶媒間の界面エネルギーである。上式の右辺第三項より、ソレー効果とは異なる温度勾配による拡散が生じることがわかった。

【参考文献】

- (1) 土井 正男 ソフトマター物理学入門 8章 岩波書店
- (2) Hiroki Fukagawa, Chun Liu, and Takeshi Tsuji. A variational formulation for dissipative fluids in inhomogeneous temperature. arXiv:1411.6760, 2014.