ネマチック液晶の秩序化過程

山梨大教育, UIUC [a]　豊木博泰, 大野克嗣 [a], Paul Goldbert [a]

秩序相が連続縮退している系における秩序相の形成過程についての研究が最近進んできた．ここでは，ネマチック液晶の秩序化動力学についてのセル動力学モデルを提案し，それの数値計算の結果を報告する．モデルは次元の制限を受けないが，今回行った数値計算は2次元系についてだけである．

ネマチック液晶の秩序変数の空間は $RP_2 = S_2/Z_2$である．この系における位相欠陥の分類は，ホモトピー理論により，$\pi_1(RP_2) = Z_2$, $\pi_2(RP_2) = Z$, $\pi_3(RP_2) = Z$と書かれる．これは，2次元における点欠陥のチャージは Z_2，つまり，有無の区別しかないことを意味する．2次元には，このほかに整数値のチャージをもつテクスチャが存在し得る．このように，秩序化過程におけるパターンは，2次元系においてもスピン系とは異なる特徴を持つはずである．

現象論的モデルとして TDGL タイプのものを考える．秩序変数は保存しないので，ダイナミクスは単純な緩和型 (モデル A) でよい．問題はエネルギーである．RP_2対称性を表す自由エネルギーに必要な条件はグローバルな $SO(3)$ 回転およびローカルな反転に対する不変性である．これを満たす例として，Khveschenko らのモデル

$$E_{KKN} = -\sum_{i,j} v_{ij}\mathbf{n}_i \cdot \mathbf{n}_j, \qquad \mathbf{n}_i \in S^2; \qquad v_{ij} \in \pm 1.$$

がある．[1] 彼らの目的は，トポロジカルな相転移の有無の議論にあったので，n と v_{ij}を独立変数として分配関数を計算したのだが，マクロな運動論では，エネルギーは配向場のみに依存するようにすべきである．上の例では $v_{ij} = \mathrm{sgn}(\mathbf{n}_i \cdot \mathbf{n}_j)$ とすればよい．しかし，このモデルでは不自然な局所平衡状態が多くあり，欠陥対がとなりあったままピン止めされてしまうというようなことが起こる．このようなピン止めを生じさせないもっとも簡単

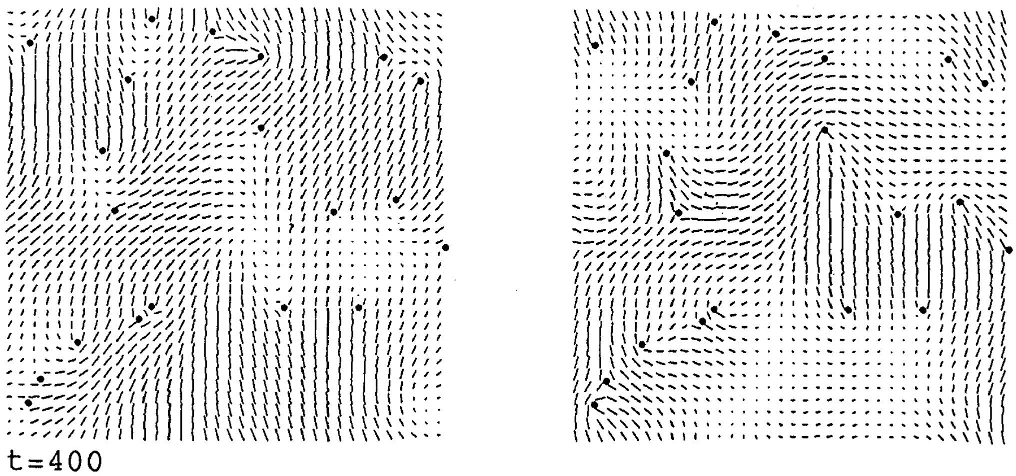

図 1: 配向子と欠陥の分布の一例．左右の図はそれぞれ XY成分と XZ成分．

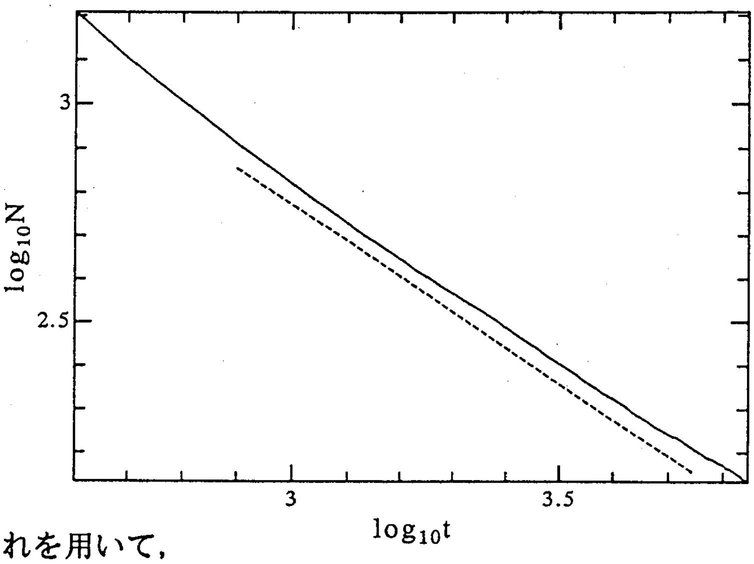

図 2: 欠陥数の時間変化．破線は傾き-0.92を表す．

な v_{ij}は $v_{ij}=\mathbf{n}_i\cdot\mathbf{n}_j$ である．これを用いて，

$$E=\frac{1}{2}\sum_{<\mathbf{rr}'>}\left[-(\boldsymbol{\psi}(\mathbf{r})\cdot\boldsymbol{\psi}(\mathbf{r}'))^2+\frac{1}{4}\left(|\boldsymbol{\psi}(\mathbf{r})|^2+|\boldsymbol{\psi}(\mathbf{r}')|^2\right)^2\right]+\sum_{\mathbf{r}}f\left(|\boldsymbol{\psi}(\mathbf{r})|\right).$$

を得る．ただし，局所ポテンシャルは $f(x)=-x^2/2+x^4/4$ とする．ここで，はじめの和の第 2 項目は，$|\boldsymbol{\psi}(\mathbf{r})|=\mathrm{constant}$ のもとで Eが極小値をとるようにつけ加えられた．このエネルギーに緩和方程式を加えると，次のようなセル動力学モデルが得られる：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\psi}(\mathbf{r},t+1) &= \tau c\sum_{\mathbf{r}'}z_{\mathbf{rr}'}\left[(\boldsymbol{\psi}(\mathbf{r},t)\cdot\boldsymbol{\psi}(\mathbf{r}',t))\,\boldsymbol{\psi}(\mathbf{r}',t)-\frac{1}{2}\left(|\boldsymbol{\psi}(\mathbf{r},t)|^2+|\boldsymbol{\psi}(\mathbf{r}',t)|^2\right)\boldsymbol{\psi}(\mathbf{r},t)\right]\\ &\quad +(1+\tau)\boldsymbol{\psi}(\mathbf{r},t)-\tau|\boldsymbol{\psi}(\mathbf{r},t)|^2\boldsymbol{\psi}(\mathbf{r},t)\ .\end{aligned}$$

ここで，和は第 2 近接セル間までとることにし，$z_{\mathbf{rr}'}$は最近接に対して $z_{\mathbf{rr}'}=1$，第 2 近接に対して $z_{\mathbf{rr}'}=1/2$ とする．パラメータは $c=0.2$ および$\tau=0.1$ とした．

第 1 図に配向場と欠陥の分布のスナップショットを示す．XY 系における渦点と異なり一種類の欠陥しかないことに注目して頂きたい．時間発展とともに欠陥は対消滅していく．第 2 図に示すように欠陥の個数は $t^{-0.92}$のように減少する．

つぎに，配向場の構造因子

$$S_{ij}(k)=\langle\Xi_{ij}(\mathbf{k})\Xi_{ij}(-\mathbf{k})\rangle,\qquad \Xi_{ij}(\mathbf{k})=\sum_{\mathbf{r}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\Phi_{ij}(\mathbf{r})$$

を計算する．ここで，$\Phi_{ij}(\mathbf{r})=\psi_i(\mathbf{r})\psi_j(\mathbf{r})-\frac{1}{3}\delta_{ij}$ である．実際には対称性を考慮し，

$$\text{対角成分:}\quad S_d(k,t)=\frac{1}{3}\sum_i S_{ii}(k,t),\qquad \text{非対角成分:}\quad S_o(k,t)=\frac{1}{6}\sum_{i\neq j}S_{ij}(k,t)$$

を計算する．得られた構造因子を，平均波数 $\langle k\rangle=\sum_k kS(k,t)/\sum_k S(k,t)$ でスケールしたものを図 3 に示す．よくスケール則 $S(k,t)=\langle k\rangle^2 g(k/\langle k\rangle)$ を満たしている．大きな特徴は，短波長でのべき則であり，$g(x)\sim x^{-4.5}$が得られた．秩序変数がベクトル系では，$g(x)\sim x^{-(N+D)}$であることが知られているが，[2]-[4] RP_2系の場合には，指数が整数値をとらないらしいのである．得られた指数は，$N=2$ と $N=3$ の間である．配向子の次元という点ではハイゼンベルグ的であり，点欠陥を持つという点では XY 的であるというこ

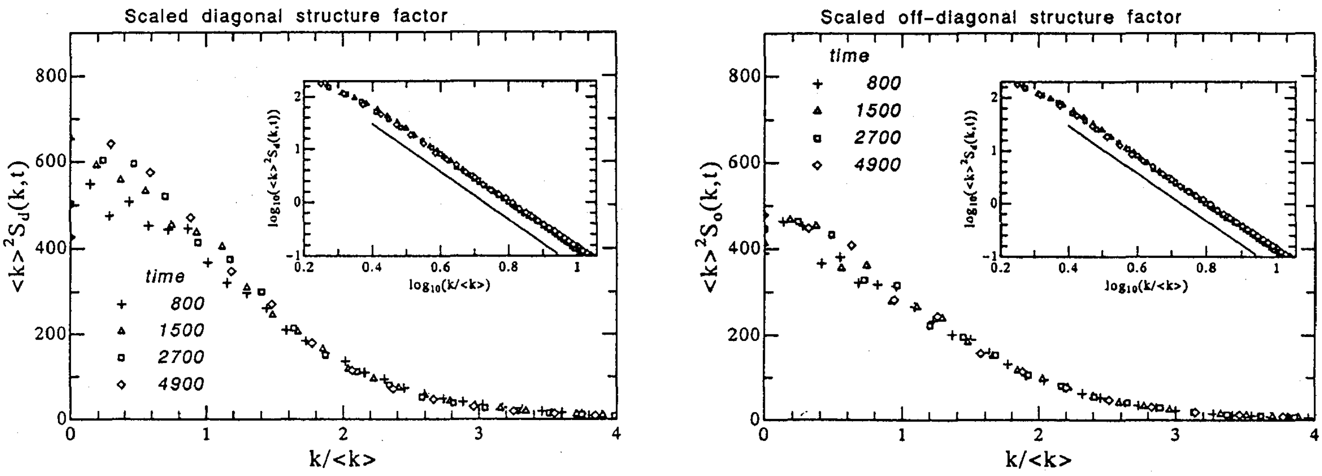

図 3: スケールされた構造因子. 挿入図における実線は傾き-4.5を表す.

とからすれば，これは自然な結果であるといえる．図 4 は $\langle k\rangle$ の時間変化である．サンプルの少なさに起因する $S_d(k)$ と $S_o(k)$ 間の微妙なズレがあるものの，大体 $\langle k\rangle \sim t^{-0.42}$ を示している．この指数は，非保存系一般に成り立つと思われている-0.5からわずかにずれている．今のところ，ズレは，有限サイズ効果なのか，相互作用項の特質によるものなのかははっきりしない．

以上，本報告の要点は，はじめて RP_2対称性の秩序化過程の数値計算モデルを提案したことと，構造因子の高波数領域での非整数べき減衰を見いだしたことである．

参考文献

[1] D.V. Khveshchenko, YA.I. Kogan, and S.K. Nechaev, Int. J. Mod. Phys. **B5**, 647 (1991).

[2] A.J. Bray and S. Puri, Phys. Rev. Lett. **67**, 2670 (1991).

[3] H. Toyoki, Phys. Rev. **B45**, 1965 (1992).

[4] F. Liu and G.F. Mazenko, Phys. Rev. **B45**, 6989 (1992).

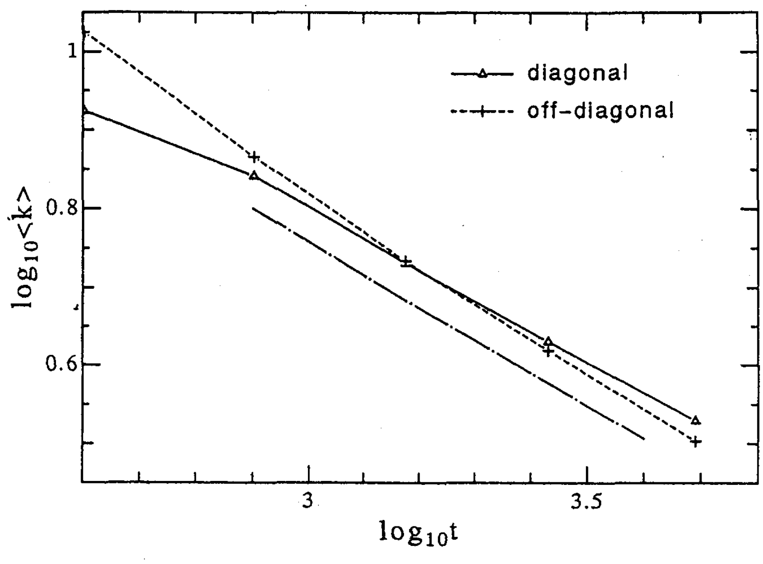

図 4: $\langle k\rangle$ の時間変化. 一点鎖線は傾き-0.42を表す.