

液晶対流系に於ける欠陥カオス

京大 理 佐々 真一 (Shin-ichi Sasa)

1. Introduction

空間的に周期的な構造が形成される 2 次元系を考える。この時、完全な周期パターンが形成されず、何らかの意味で不完全さを持つ場合がしばしばある。これを弱く乱れたパターンと呼ぶ。弱い乱れを空間的な側面と時間的な側面から考える。空間的な乱れの代表例が欠陥である。周期構造があるとそれに付随して位相が定義され、周期パターンの滑らかな変形は位相の歪みとして表現できるが、2 次元系を扱っているので、位相場に位相特異点が存在する場合がある。この位相特異点が欠陥である。時間的な乱れの代表例がカオスである。近年、カオスは様々な概念で特徴付けられてきたが、ここでは決定論的不規則性をその特徴として挙げておく。これは、ある変数が決定論的方程式に従うにもかかわらず、その時間的スペクトルが連続になっていることを意味する。本来、時間的な乱れと空間的な乱れは独立であるが、運動のコヒーレント長が系の大きさより短い時、運動は空間的に非一様になるので、時間的な乱れが空間的な乱れを引き起こす場合がある。欠陥カオスは正しくこの場合に於てはまる。(1),(2)

定義的に述べると、欠陥カオスとは欠陥の個数が不規則に変動している(動的)定常状態である。即ち、次の 2 つの条件を満たしている。まず第一に、空間パターンとしては、欠陥を含む弱く乱れた周期構造である。第二に、欠陥の個数はカオティックに変動する。即ち、欠陥の個数変動のスペクトルは連続である。これは、欠陥の生成消滅がいつまでも起こっていて、系がある平衡状態に緩和することはないことを意味する。

欠陥カオスはいくつかの実験系で見られるが、その代表例が液晶対流系である。ネマティック液晶(以下、単に液晶)に対して電場を加えると、ある臨界電圧 V_c 以上で対流ロール=Williams Domain(WD)が現れることが知られている。(3) さらに電圧を上げて V_c' を超えると、ロール構造を保持しつつ、欠陥の生成消滅による動的な定常状態が実現する。この状態は Kai によって発見され、FWD (Fluctuating Williams Domain) と呼ばれた。(4) この FWD が欠陥カオスである。

欠陥カオスは新しい(普遍的)運動形態であることが期待されるが、その本質はまだ分らない。我々はいくつかの問題を考えることからそれに迫りたいと思っている。まず、直ちに提案されるだろう問題として、次の 3 点がある。1) 欠陥カオスへの転移はどの様にして起こるのか? 2)

ロールの歪みのダイナミクスと欠陥の運動は？3) 欠陥の個数変動のスペクトルの形は？これらの問題を理論的に実験的に解決していくことが重要である。

理論的にある問題に取り組む場合、現実的な意味で計算が可能なモデルを設定しなければならない。モデルは定量的予言能力があるほどよい。そのためには、論理的基盤のしっかりしたモデルがより有効である。例えば、基礎方程式系と呼ばれるモデルは一般的に論理的基盤が保証されたモデルである。しかし、それはしばしば現実的な計算可能性を満足しない。ここで考えている液晶対流系についても、基礎方程式系が非常に複雑な連立偏微分方程式でために、解析的にも数值的にも理論家の手に負えない。このような場合、何とか工夫してFWD（欠陥カオス）のダイナミクスを記述するモデルを与えることが第一歩である。§2で発見法的な議論によって、FWDの現象論的モデルを提案する。§3でこのモデルの周期解の安定性を長波長モード（位相モード）に限定して調べる。§4で周期解が不安定化する近傍の振舞いを論じ、欠陥カオスへの転移の描像を見る。§5では全体をまとめるとともに、数値シミュレーションの結果も併せて簡単に報告する。

2. モデル

対流系に於て現象論的なモデルはいくつか知られている。代表的なモデルは Swift-Hohenberg 方程式である。液晶対流系に於ても Swift-Hohenberg 方程式に異方性を取り入れたモデルが Pesch と Kramer によって提案された。⁽⁵⁾鉛直方向の速度を w とすると、彼らのモデルは次のように書ける。

$$\begin{aligned}\dot{w} &= Rw - w^3 + \hat{D}w, \\ \hat{D} &= -(1 + \Delta)^2 - \eta_1 \partial_y^4 - 2\eta_2 \partial_x^2 \partial_y^2.\end{aligned}\tag{1}$$

ここで η_1 と η_2 は異方性のパラメータであり、 R は加えた電場の強さに相当するコントロールパラメータである。静止状態でディレクターを x -軸に配向させておくと、 y -軸方向にロールが出来易いという効果は $\eta_1 > 0$ によって表わせる。また、 $\eta_2 = 0$ は Lifshitz ポイントと呼ばれ、 $\eta_2 > 0$ ではノーマルロールが $\eta_2 < 0$ ではオブリクロールが最初に現われる。以下ではノーマルロール領域を考えるので $\eta_2 > 0$ とする。パラメータ η_2 は Lifshitz ポイントからの距離と解釈できる。このモデルは液晶対流系のいくつかの現象を説明することができるが、時間発展の観点からは安定な周期パターンへの緩和ダイナミクスである。従って、このモデルでは欠陥カオスを記述できない。

そこで、ロールの変形によって誘起される流れの効果を考える。^{(6)~(9)} この効果はモデル(1)

にドリフト項を加えることによって表現できる。

$$\begin{aligned}\dot{w} + (\vec{U} \cdot \vec{\nabla})w &= Rw - w^3 + \hat{D}w, \\ \hat{D} &= -(1 + \Delta)^2 - \eta_1 \partial_y^4 - 2\eta_2 \partial_x^2 \partial_y^2.\end{aligned}\quad (2a)$$

ここで、流れの場 $\vec{U}$ に対する方程式は次の要請に従って決定される。第一に、方程式は空間反転対称性を持たなければならない。即ち、以下の変換に対して不変でなければならない。[1] $x \rightarrow -x, U_x \rightarrow -U_x$, [2] $y \rightarrow -y, U_y \rightarrow -U_y$ and [3] $w \rightarrow -w$. 第二に、方程式に含まれる空間微分は最大3階とし、 w の冪は2次まで含むとする。最後に、液晶は非圧縮性流体なので、流れは非圧縮性条件を満たす。これらの要請から、方程式は次のようにかける。

$$\begin{aligned}U_i &= \partial_i [a_i w^2 + \sum_j \{b_{ij} w \partial_j^2 w + c_{ij} (\partial_j w)^2\}] \\ &\quad + \sum_j h_{ij} w \partial_i \partial_j^2 w - \partial_i p,\end{aligned}\quad (2b)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{U} = 0. \quad (2c)$$

ここで、添字 $i, j \dots$ は x か y を表し、また、(象徴的な意味での) 圧力を表現するために、補助場 p を導入した。方程式の対称性の議論から、一般性を失うことなく $a_y = b_{yj} = c_{yj} = 0$ と置ける。従って、独立な変数は a_x, b_{xj}, c_{xj} , 及び h_{ij} になる。簡単のために、流れの効果の等方性を仮定すると、 $a_x = b_{xj} = c_{xj} = 0$, and $h_{ij} = h$ を得る。さらに、解析をより容易にするため、 w を複素変数 W として扱う。この時、 $Re(W)$ を鉛直方向の速度と解釈できる。以上により、モデル方程式の最終的な形は次のようになる。

$$\dot{W} + (\vec{U} \cdot \vec{\nabla})W = RW - |W|^2 W + \hat{D}W, \quad (3a)$$

$$\hat{D} = -(1 + \Delta)^2 - \eta_1 \partial_y^4 - 2\eta_2 \partial_x^2 \partial_y^2.$$

$$U_i = h \sum_j (W^* \partial_i \partial_j^2 W + c.c) - \partial_i p, \quad (3b)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{U} = 0. \quad (3c)$$

このモデルは $R > R_c = 0$ の時、対流開始点の極近傍で安定なロール解を持つ。モデルが欠陥カオスを記述するためには、少なくとも周期パターンは不安定でなければならない。そして、そ

れは周期構造の基本単位を破壊しないような不安定性でなければならない。変調不安定性はこの条件を満たすので、 $R > R'_c$ でロール解が変調不安定になる $R'_c > R_c = 0$ が存在するかどうかをチェックしなければならない。これを、次の§で考える。

3. 変調不安定性

方程式 (3) は波数ベクトル $\vec{k}$ の周期解を持つ。変調不安定性は長波長の情報だけで決まるので、方程式 (3) を直接扱うより、ロールの歪みのダイナミクスを考えたほうが便利である。局所的な波数ベクトルを $\vec{k}(\vec{x}, t)$ と書く。この時、位相 Θ を $\vec{k} = \vec{\nabla} \Theta$ で定義すると、 Θ に対する方程式が方程式 (3) から導ける。⁽¹⁰⁾

$$\dot{\Theta} + \vec{U} \cdot \vec{k} = \sum_{ij} \alpha_{ij}(\vec{k}) \partial_i \partial_j \Theta, \quad (4a)$$

$$U_i = - \sum_{l,m} \beta_{ilm}(\vec{k}) \partial_l \partial_m \Theta - \partial_i p, \quad (4b)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{U} = 0. \quad (4c)$$

テンソル α_{ij} 及び β_{ilm} は $\vec{k}$ の関数なので、方程式 (4) は非線形である。

この方程式に於て、波数ベクトル $\vec{k}_0 = (k_0, 0)$ のノーマルロール解は $\Theta = \vec{k}_0 \vec{x}$ と表現されるので、この解の安定性を調べるために、 $\Theta = \vec{k}_0 \vec{x} + \phi$ を (4) 式に代入し、 ϕ について線形化した式から波数ベクトル $\vec{q} = (q \cos \vartheta, q \sin \vartheta)$ の位相擾乱の減衰率 $\lambda(\vec{q})$ を求めると次式を得る。

$$\begin{aligned} \lambda(\vec{q}) &= -d(\vartheta) q^2, \\ d(\vartheta) &= \alpha_{xx}^0 \cos^2 \vartheta + \alpha_{yy}^0 \sin^2 \vartheta + k_0 \sin^2 \vartheta (\tilde{\beta}_{xxx}^0 \cos^2 \vartheta + \beta_{xyy}^0 \sin^2 \vartheta), \end{aligned} \quad (5)$$

ただし、 $\alpha_{ij}^0 = \alpha_{ij}(\vec{k}_0)$, $\beta_{ilm}^0 = \beta_{ilm}(\vec{k}_0)$, および $\tilde{\beta}_{xxx}^0 = \beta_{xxx}^0 - 2\beta_{xyy}^0$.

変調不安定性は負の拡散定数の時に現われ、擾乱が成長する方向に応じてそのタイプは分類されている。⁽¹¹⁾ 即ち、もっとも不安定な角度 $\vartheta_* = \arg \min_{\vartheta} d(\vartheta)$ とその方向の拡散定数 $d_* = d(\vartheta_*)$ が定義されると、 $d_* < 0$ の時、変調不安定性が起こり、 ϑ_* によって、そのタイプは

$$\begin{cases} \text{the Eckhaus instability,} & \text{if } \vartheta_* = 0; \\ \text{zigzag instability,} & \text{if } \vartheta_* = \pi/2; \\ \text{skewed varicose instability,} & \text{otherwise.} \end{cases}$$

と呼ばれる。

対流開始点でのロールの波数ベクトルを $\vec{k}_0 = (1, 0)$ と記し、この波数ベクトルを持った周期解の安定性を調べると、テンソル α_{ij} , β_{ilm} の関数形から、 $R > -\eta_2/h$ の時、ジグザグ不安定であることがわかる。これは、 $h < 0$ の時のみ起こりうるので、以下では、 $h < 0$ を仮定する。 $((k_x, R)$ 空間での安定性ダイアグラムについては、図1を参照)

4. 転移点近傍の振舞

ロール解がジグザグ不安定性によって不安定化することが分かったので、その開始点（ジグザグ転移点）の近傍に焦点を当てて、系の振舞を調べよう。 y -軸方向の擾乱は線形領域で独立に成長するが、位相歪みが大きくなると、モード間の結合が重要になってくるので、長時間の振舞を調べるには非線形解析が必要になってくる。方程式の中に非線形項を摂動論的に取り入れる方法は弱非線形解析として知られている。今の問題の場合、ジグザグ転移点からの距離が摂動のパラメータである。 $\S 3$ で見たように変調不安定性は位相方程式の負の拡散定数と関連しているので、⁽¹²⁾ 弱非線形解析として位相動力学が考えられる。

このアイデアは Kuramoto によって初めて提案された。⁽¹³⁾ 彼は弱く不安定な周期パターンの位相動力学をスケーリングと対称性の議論によって導出した。ジグザグ不安定性の場合について調べよう。第一に、 $\varepsilon \rightarrow 0$ に対して位相 ϕ が次のスケーリング形を持つことがいくつかの考察によって期待される。

$$\phi(x, y, t) = \bar{\phi}(\varepsilon x, \varepsilon^{1/2} y, \varepsilon^2 t), \quad (6)$$

次に、位相方程式は次の変換に対して不変でなければならない： $[1] x \rightarrow -x, \phi \rightarrow -\phi$, $[2] y \rightarrow -y$ and $[3] \phi \rightarrow \phi + \phi_0$, ここで、 ϕ_0 は任意定数である。

これらの要請から、ジグザグ転移点近傍の位相方程式は

$$\begin{aligned} \dot{\phi} = & \varepsilon \partial_y^2 \phi - D_4 \partial_y^4 \phi + D_{||} \partial_x^2 \phi + g(\partial_y \phi)^2 \partial_y^2 \phi \\ & + s_1(\partial_x \phi) \partial_y^2 \phi + s_2(\partial_y \phi) \partial_x \partial_y \phi, \end{aligned} \quad (7)$$

と書ける。ただし、Kuramoto の論文では最後の項が見落とされていた。⁽¹⁴⁾

方程式(4)で表されているように、一般的状況では位相方程式は非局所的になるが、ジグザグ転移点近傍に限定して ε の展開で最低次だけを考えるなら、非局所性は効かない。

さて、方程式(7)の解の振舞いを調べよう。第一段階として ϕ の x 依存性を考えない。すると、(7)式より $u = \partial_y \phi$ と置くと、

$$\dot{u} = -\partial_y^2 \left(\epsilon u - \frac{1}{3} g u^3 + D_4 \partial_y^2 u \right), \quad (9)$$

を得る。この方程式はスピノーダル分解等の問題で現われる保存オーダーパラメータに対するGinzburg-Landau方程式と同じ形をしているので、振舞いが容易に理解できる。

ϵ が正の時、ジグザグ不安定性によって $u = 0$ は不安定になる。まず、この時の u の振舞いは g の符号に大きく依存する。もし g が正なら、分岐は超臨界分岐であり、ポテンシャルの極小値に対応する解 $u = \pm \sqrt{3\epsilon/g}$ は安定である。保存則が存在するために、一様状態 $u = \pm \sqrt{3\epsilon/g}$ は実現しないけれども、少なくとも位相歪みの有界性は保証される。この時、キンク-アンチキンク対が形成され、非常にゆっくりとしたタイムスケールでそれらが相互作用する。⁽¹⁵⁾ u 場のキンク-アンチキンクパターンは対流系ではジグザグロールを表すので、ジグザグ分岐が超臨界ならば、ジグザグロールが現われるということができる。

一方、 g が負の時、分岐は亜臨界分岐である。線形領域 $|u| \ll \epsilon^{1/2}$ で指数関数的に増大した位相歪みは非線形性により自己触媒的に成長し、有限時刻 t_c で発散する。発散する時刻 t_c 近傍の振舞いは次の形のスケーリングで特徴付けられる。

$$u(y, t) \sim \frac{1}{\xi(t)} f\left(\frac{y - y_0}{\xi(t)}\right), \quad (9)$$

$$\xi(t) \sim (t_c - t)^\nu \quad \text{and} \quad \nu = \frac{1}{4}, \quad (10)$$

ここで、 y_0 は位相歪みが発散する位置である。このスケーリングは位相歪みの自己集束を表現している。これは、保存則

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} u(y, t) dy = \text{const.} \quad (11)$$

からの帰結である。位相歪みの自己集束は欠陥の生成を導くと期待される。

いままで、位相が x -軸に一様な場合を考えてきた。次に第二段階として、 x -軸方向の変位を考慮にいと、次の結果を得る。[1] $g > g_c = 3s_2^2/8D_{||}$ の時、一様状態 $u = \pm \sqrt{3\epsilon/g}$ が安定なので、ジグザグロールは安定に留まる。[2] $0 < g < g_c$ の時、一様状態 $u = \pm \sqrt{3\epsilon/g}$

は斜方向の擾乱に対して不安定になる。この時、ダイナミクスは本質的に二次元になり、更なる解析が必要となる。[3] $g < 0$ の時、スケーリング (6) 式から期待されるように、位相歪みは y 方向に局在し、 x 方向にオーダー ε^{-1} で広がる。これらの結果から [2], [3] の場合、欠陥の生成が起こり FWD が実現すると期待される。しかし、[2] と [3] では振舞が異なると考えられるので、[2] の FWD を超臨界 FWD、[3] の FWD を亜臨界 FWD と呼んで区別する。実験では、[1] から [3] に対応すると思われる現象が観測されている。^{(16)~(21)} (Kai が発見した標準的な FWD は超臨界 FWD に対応する。亜臨界 FWD は Nasuno 達が Defect Lattice と呼んだ相と関係があると思われるが、現在確定的ではない。)

次に、モデル方程式 (3) の場合を考えよう。モデル方程式 (3) から位相方程式 (7) の各係数を計算することができる。最も大切な係数 g と g_c は 次のように求められる。

$$\begin{aligned} g &= 6(1 + \eta_1) - 4h\eta_2, \\ g_c &= \frac{3(2 + \mu\eta_2)^2}{2}, \end{aligned} \quad (12)$$

但し、 $\mu = 1 - 3h$ である。これらの表式から十分小さい η_2 に対して $g > g_c$ が成立ち、一方十分大きい η_2 に対して $0 < g < g_c$ が分かる。つまり、Lifshitz ポイントに十分近い時、安定なジグザグロールが現れ、Lifshitz ポイントから離れたところではジグザグロールの不安定化を通して欠陥が生成されることを示している。また、負の g の場合はモデル方程式 (3) では現われない。つまり、モデル方程式 (3) では、安定なジグザグパターンと超臨界 FWD のみが記述できる。亜臨界 FWD については更に検討する必要がある。

5. まとめと議論

液晶対流系に於ける欠陥カオスを理解するために、流れの効果を考慮にいれた現象論的なモデルを提案し、ジグザグ不安定性によってロールが不安定化することを明らかにした。また、一般的にジグザグ転移点近傍では、三種類の異なる振舞い (安定なジグザグパターン、超臨界 FWD, 亜臨界 FWD) があることを位相動力学の方法で示した。モデル方程式では超臨界分岐しか起こらないので、欠陥カオスとしては超臨界 FWD のみが記述できる。この場合のモデル方程式 (3) の数値シミュレーションを行うと欠陥カオスを記述していることが確認できる。定常状態での欠陥の個数変動は図 2 に示されているように、非周期的である。また、典型的なパターンの変化は図 3 に描かれているように、欠陥の生成・消滅・運動を素過程にしている。これらについての詳しい議論は別の機会で報告したい。

謝辞

有意義な議論をして頂いた蔵本教授、甲斐教授、沢田教授、佐野博士、那須野博士に感謝します。

References

- 1) P. Coullet, L. Gill, and J. Lega, *Phys.Rev.Lett.* **62**, (1989) 1619.
- 2) S. Sasa, *Prog.Theor.Phys.* **83**, (1990) 824.
- 3) R. Williams, *J.Chem.Phys.* **39**, (1963) 384.
- 4) S. Kai and K. Hirakawa, *Prog.Theor.Phys.Suppl.* **64**, (1978) 212.
- 5) W. Pesch and L.Kramer, *Z.Phys.* **B63**, (1986) 121.
- 6) E.D. Siggia and A. Zippelius, *Phys.Rev.Lett.* **47**, (1981) 835.
- 7) P. Manneville, *J.Phys. (Paris)* **44**, (1983) 759.
- 8) M.C. Cross, *Phys.Rev.* **A27**, (1983) 490.
- 9) H.S. Greenside, M.C. Cross, and W.M. Coughran, Jr, *Phys.Rev.Lett.* **60**, (1988) 2269.
- 10) M.C. Cross and A.C. Newell, *Physica* **10D**, (1984) 299.
- 11) F.H. Busse and R.M. Clever, *J.Fluid Mech.* **91**, (1979) 319.
- 12) Y. Pomeau and P. Manneville, *J.Phys. (paris), Lett***40**, (1979) 609.
- 13) Y. Kuramoto, *Prog.Theor.Phys.* **71**, (1984) 1182.
- 14) T. Ohta, *Prog.Theor.Phys.* **73**, (1985) 1377.
- 15) K. Kawasaki and T. Ohta, *Physica* **116A**, (1982) 573.
- 16) S. Kai, N. Chizumi, and M. Kohno, *Phys.Rev.* **A40**, (1989) 6554.
- 17) S. Kai and W. Zimmermann, *Prog.Theor.Phys.Suppl.* **99**, (1989) 458.
- 18) A. Joets and R. Ribotta, *J.Phys. (Paris)* **47**, (1986) 595.
- 19) M. Sano and Y. Sawada, private communication.
- 20) S. Nasuno, Dr. thesis, Tohoku University, (1990) (in Japanese).
- 21) S. Nasuno and S. Kai, preprint.

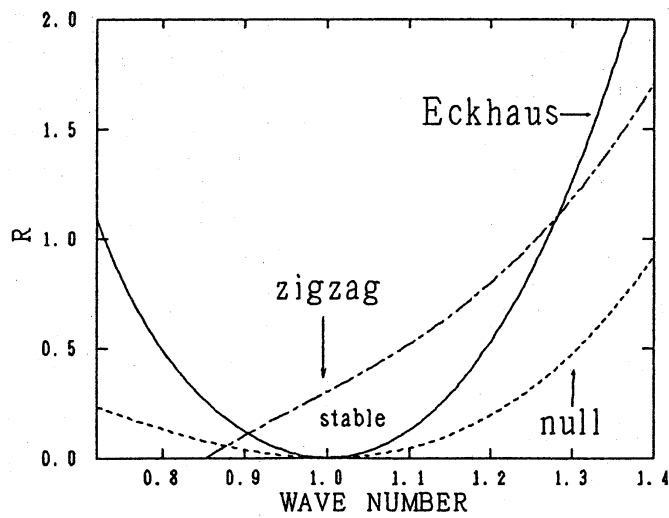


図1 Stability diagram ($\eta_2 = 0.3$, $h = -1.0$). Analytic expressions of the respective lines are as follows. zigzag boundary; $R_z(k) = (k^2 - 1)^2 - \frac{k^2 - 1}{hk^2} - \frac{\eta_2}{h}$. Eckhaus boundary; $R_E(k) = \frac{(k^2 - 1)^2(7k^2 - 1)}{(3k^2 - 1)}$. null amplitude; $R_A(k) = (k^2 - 1)^2$.

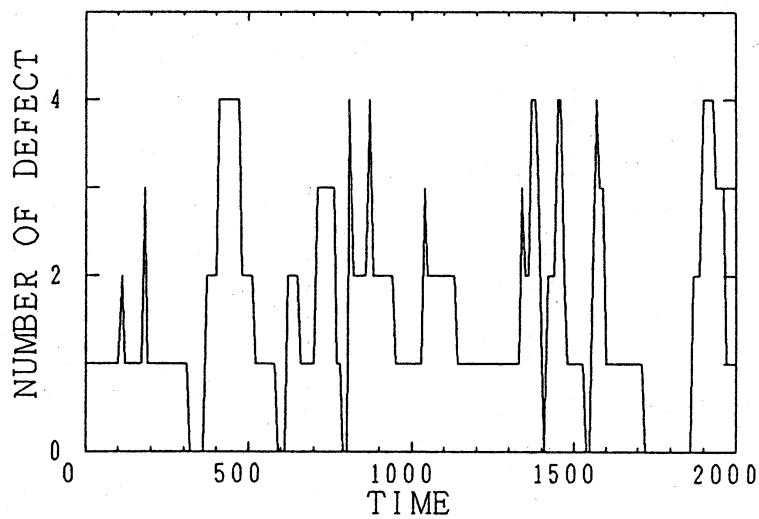


図2 欠陥の個数の時間変化

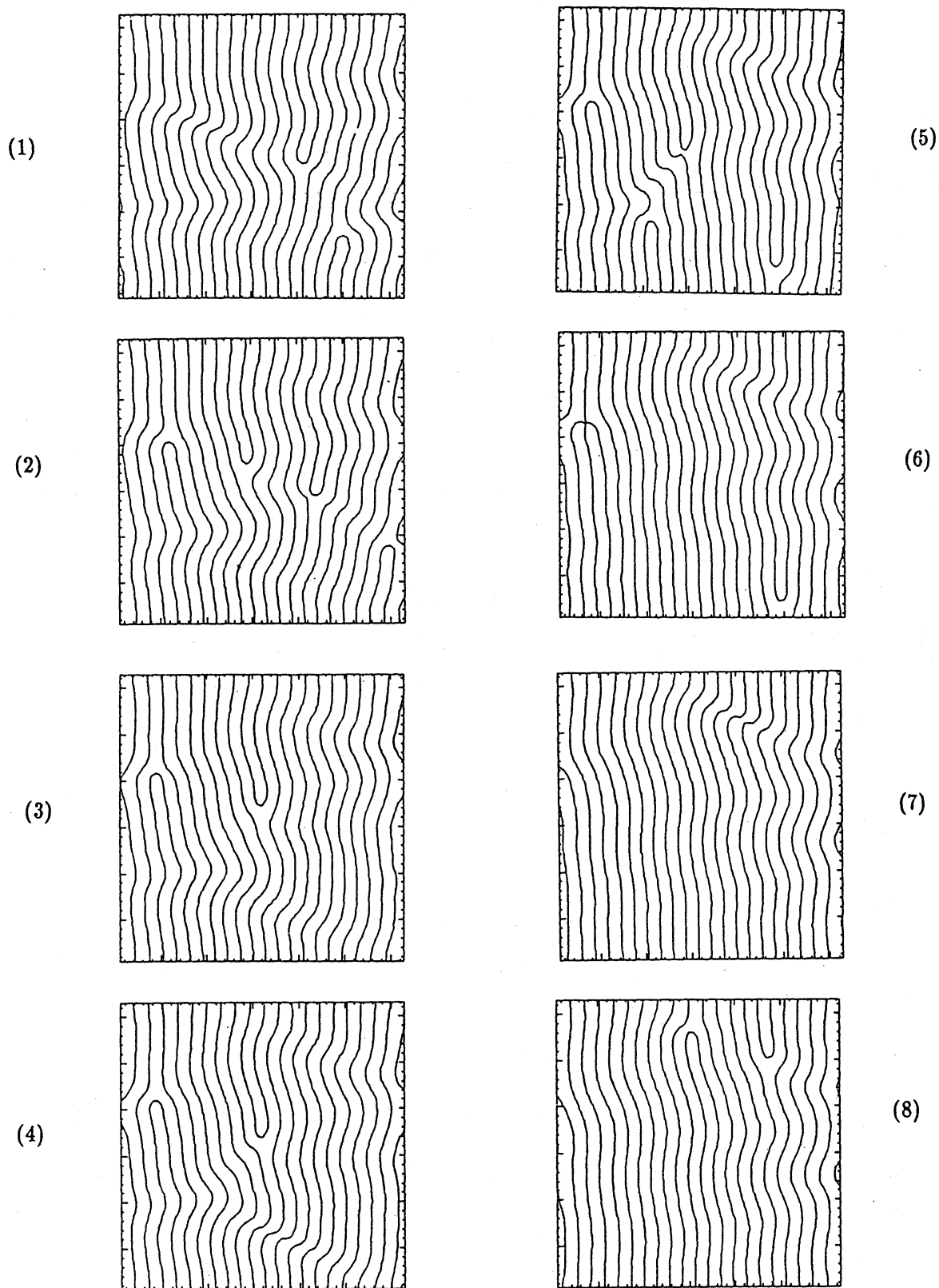


図3 パターンの時間変化 (1) → (8) The contours $Re(W) = 0$