

強誘電性液晶  $\text{SmC}_\alpha^*$  の電場誘起相転移に於ける  
ソリトン相互作用と転移の次数の傾き角依存性

平成 20 年度

三重大学大学院工学研究科

博士前期課程 物理工学専攻

木全 慶輔

# 目次

第 I 章 序論 .....	1
第 II 章 ソリトン .....	5
第 III 章 電場誘起 $\text{SmC}^*$ - $\text{SmC}$ 相転移 .....	7
第 IV 章 電場中の $\text{SmC}_\alpha^*$ の定式化	
1 電場中の $\text{SmC}_\alpha^*$ の自由エネルギー .....	13
2 電場誘起 $\text{SmC}_\alpha^*$ - $\text{SmC}$ 相転移(傾き角 $\theta$ を一定とした場合) .....	14
3 電場誘起 $\text{SmC}_\alpha^*$ - $\text{SmC}$ 相転移(傾き角 $\theta$ の変動を許す場合) .....	17
第 V 章 数値解析結果	
1 $\text{SmC}_\alpha^*$ 相での $\delta = 2\pi/4$ における計算結果( $t = -8$ ) .....	18
2 $\text{SmC}_\alpha^*$ 相での $\delta = 2\pi/4$ における温度依存性 .....	26
3 $\text{SmC}_\alpha^*$ 相での $\delta = 2\pi/8$ における計算結果 .....	30
4 $\text{SmC}_\alpha^*$ 相での $\delta$ 依存性 .....	54
第 VI 章 まとめ .....	58
謝辞 .....	59
参考文献 .....	60

# 第 I 章 序論

液晶とは一般的に棒状や円盤状などの異方的な形の分子で構成された体系で、液体と結晶(固体)の中間の秩序を持つ状態である。液体は分子の重心位置に秩序が無く、分子の方向秩序も無い。一方、結晶は分子の重心位置に3次元的な秩序を持ち、さらに分子の方向秩序も一般的に有している。特例として棒状分子の結晶で方向秩序を持たないものがあり、それは柔軟性結晶と呼ばれ、極めて低温でのみ方向秩序が出現する。これらの液体と結晶の中間の秩序を持つ液晶は分子の方向秩序は有しているが、分子の重心位置に3次元秩序はなく2次元以下の秩序となっている<sup>1,2)</sup>。結晶・液晶・液体の分子の重心位置秩序と分子の方向秩序の模式図を Fig.1.1 に示す。

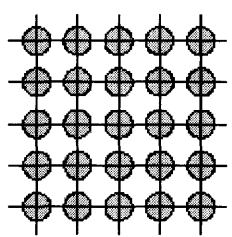
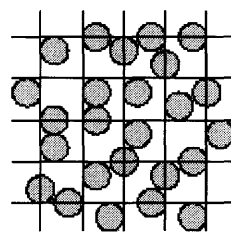
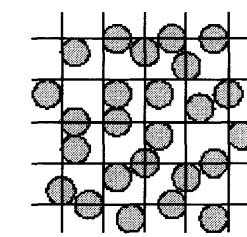
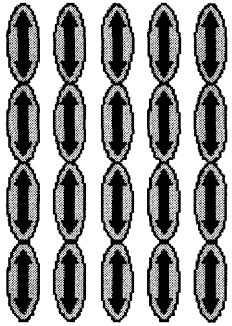
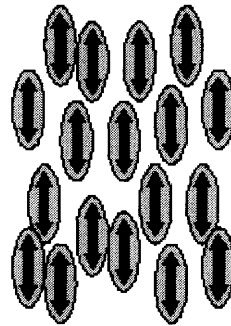
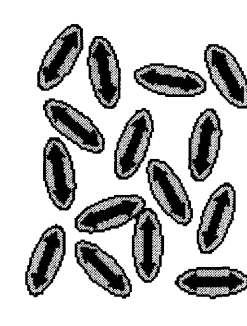
	結晶	液晶	液体
位置秩序			
方向秩序			

Fig.1.1 結晶・液晶・液体の位置秩序と方向秩序の模式図

液晶には分子配向や分子配列の秩序の様相は多種存在する。液晶分子の重心位置秩序が無いが、分子の配向には秩序が存在するものがネマティック相(N相)[Fig.1.2]、このN相が配向方向に垂直な方向にねじれた状態となり螺旋構造を成すものがコレステリック相(Ch相)[Fig.1.2]である。Ch相となる場合、液晶分子は鏡映面を持たずカイラル分子と呼ばれる。本研究で注目する液晶相であるスメクティック相(Sm相)では、N相と同様に分子に配向秩序が存在するだけでなく、分子の重心位置に1次元的な秩序が存在し、その構造は分子位置が層状に配列する層構造となっている。そのSm相の配向秩序の様相も多種存在し、

分子が層法線に対して平行に配向する秩序を持つスメクティック A 相(SmA 相)[Fig.1.3]や、分子が層法線に対してある角度傾いて配向する秩序を持つスメクティック C 相(SmC 相)[Fig.1.3]などが存在する。

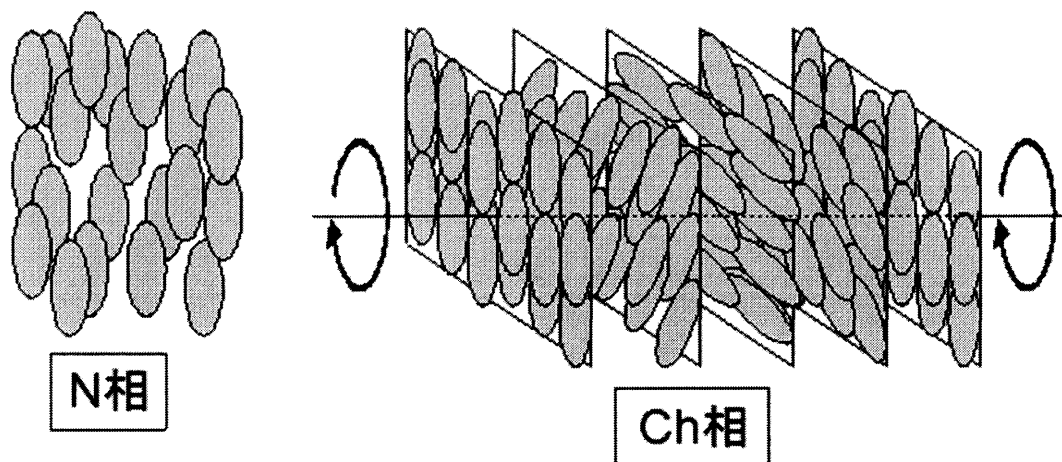


Fig.1.2 ネマティック相(N相)とコレステリック相(Ch相)の構造

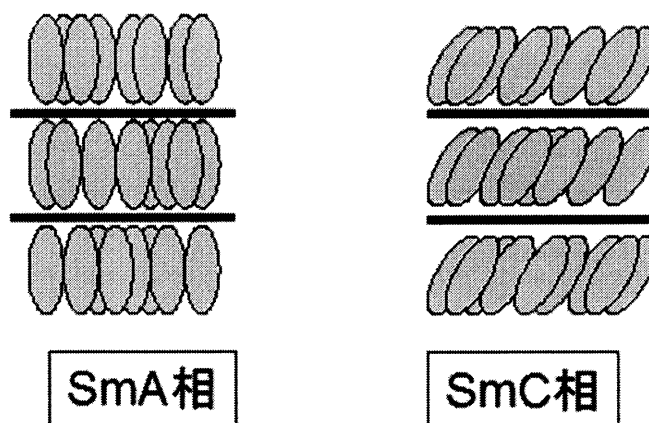


Fig.1.3 スメクティック A 相(SmA 相)とスメクティック C 相(SmC 相)の構造

ここで SmC 相を発現する液晶分子がカイラルである場合、分子が電気双極子モーメントを帯び強誘電性を示し、さらに隣合う層の方位角が少しずつ回転し螺旋構造となる。これらの構造と特性を持つ液晶相がカイラル・スメクティック C 相(SmC\*相)やカイラル・スメクティック C<sub>a</sub>(SmC<sub>a</sub>\*相)である [Fig.1.4] <sup>3)</sup>。このような強誘電性を持つ液晶相に電場を印加することで強く作用し螺旋構造が解け一様に配向する SmC 相へと相転移を起こす。SmC\*相は螺旋構造のピッチ  $p$  が大きく、螺旋構造が一周するのに必要な層数は数百層ほどであるのに対し、SmC<sub>a</sub>\*相では螺旋構造のピッチが小さく、螺旋構造が一周するのに必要な層数は数層ほどの螺旋構造となっている <sup>4,5,20,21)</sup>。

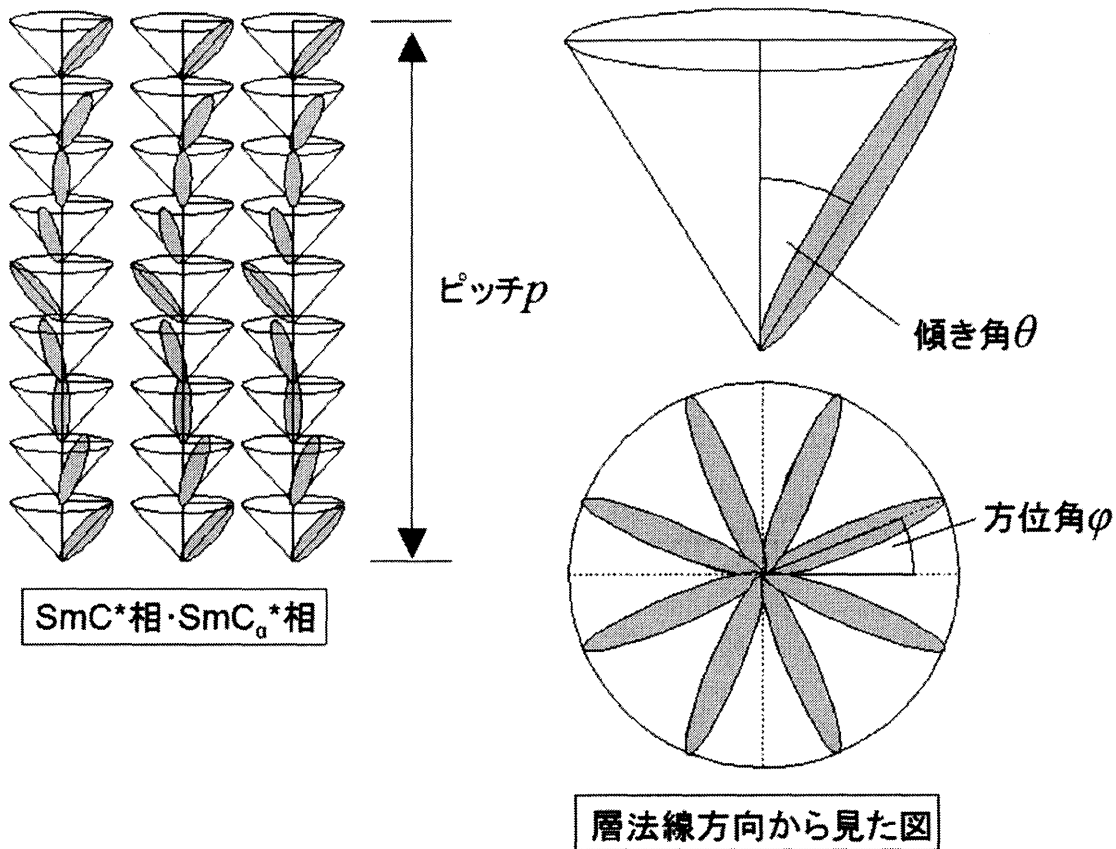


Fig.1.4 SmC\*相・SmC<sub>α</sub>\*相の螺旋構造

SmC\*相では螺旋構造のピッチは大きいため隣り合う層ごとの分子の方位角の差が小さく、電場印加による構造変化は連続記述が可能であるため、電場誘起 SmC\*・SmC 相転移はソリトン励起の観点から解析が成されてきた。即ち現れるソリトンはサイン・ゴルドン (Sine-Gordon) 方程式のソリトン解であり、その周期構造はソリトンが等間隔に並んだもの (ソリトン格子) と呼ばれる。電場誘起 SmC\*・SmC 相転移において傾き角  $\theta$  を一定として取り扱う場合、ソリトン間に働く相互作用が斥力的に働き、連続転移 (二次転移) となる<sup>6-8)</sup>。一方、電場印加による傾き角  $\theta$  の変動を許した場合はソリトン間相互作用が引力的に作用するケースが存在し、結果として転移は一次転移となる<sup>6-8)</sup>。これに対して、SmC<sub>α</sub>\*相の螺旋構造のピッチは小さいために隣り合う層ごとの分子の方位角の差が大きく、ソリトンの連続記述が不可能であり離散的となる<sup>9-11)</sup>。

本研究では電場誘起 SmC<sub>α</sub>\*・SmC 相転移を離散ソリトンの観点から解析を行い、さらにその離散ソリトン間に働く相互作用に注目していく。傾き角  $\theta$  一定の条件における電場誘起 SmC<sub>α</sub>\*・SmC 相転移に解析はすでに行われており、無電場状態における螺旋構造の波数  $q_0$  が  $q_0 < 1/4$  の条件下ではソリトン間相互作用は斥力的に働き、SmC<sub>α</sub>\*・SmC 相転移は二次転移となることが明らかとなっている<sup>10,12)</sup>。本研究では傾き角  $\theta$  の変動を許し、SmC<sub>α</sub>\*

\*-SmC 相転移のソリトン間相互作用の特性や $\delta$ 依存性、温度依存性などを明らかにしたい。

## 第Ⅱ章 ソリトン

ここではソリトン(soliton)について述べる<sup>7.13)</sup>。ソリトンとは一般的に時間がどれだけ経過しても、もしくは衝突が起きてもその形を崩すことが無い安定した孤立波である。また孤立波とは有限な振幅を持つ領域が狭い範囲に治まっている波のことである。一般的に線形波では波の進行速度は波の波数に依存し、この性質を分散と呼ぶ。この性質によって、波が重ね合わせによって波束を形成してもやがて形が崩れてしまう。しかしソリトンを解として持つ方程式には非線形項が存在し、この非線形項の効果と分散性を与える項の効果がつりあい孤立波が安定化される。ソリトンを解として持つ方程式には KdV 方程式、サイン・ゴールドン(sine-Gordon)方程式、非線形シュレーディンガー方程式、戸田格子などが知られている。本論文では後のつながりのために次のサイン・ゴールドン方程式について述べる。

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} = \sin \varphi \quad (2.1)$$

(2.1)式で示される式がサイン・ゴールドン方程式であり、 $\varphi$ 全体が形を変えずにある速度で並進する解を定常解といい、この定常解がサイン・ゴールドン方程式の1-ソリトン解である。以下でこのソリトン解を求めてみる。速度 $c$ で並進する座標 $\xi = x - ct$  ( $|c| < 1$ )を導入すると、(2.1)式は次式の常微分方程式に変形される。

$$\frac{d^2 \varphi}{d\xi^2} = \frac{1}{1-c^2} \sin \varphi \quad (2.2)$$

この式から積分定数 $C$ を用いて次の積分を得る。

$$\frac{1}{2} \left( \frac{d\varphi}{d\xi} \right)^2 = \frac{1}{1-c^2} (C - \cos \varphi) \quad (2.3)$$

ここで $x \rightarrow -\infty$ の極限で $\varphi = 0$ (または $2\pi$ )、 $\frac{d\varphi}{d\xi} = 0$ の条件をつけると $C = 1$ となり、(2.3)

式は

$$\frac{d\varphi}{d\xi} = \pm \frac{2}{\sqrt{1-c^2}} \sin \frac{\varphi}{2} \quad (2.4)$$

と変形され、ここから解として

$$\varphi = 4 \tan^{-1} \left[ \exp \left( \pm \frac{x - ct + x_0}{\sqrt{1-c^2}} \right) \right] \quad (2.5)$$

が得られる。(2.5)式において $x \rightarrow -\infty$ の極限で $\varphi = 0$ (または $2\pi$ )、 $x \rightarrow +\infty$ の極限で $\varphi = 2\pi$ (または $0$ )となる。ここで $\varphi = 0$ と $\varphi = 2\pi$ も(2.1)式の解であり(一様解)、即ち(2.5)式の解はこの2つの一様解を一捻りしてつなぐ状態を表した解となっている。このことか

ら(2.5)式の解はキンク(kink)解と呼ばれる。また(2.5)式の符号が負の解は反キンク(anti-kink)解と呼ばれる。さらに(2.5)式を $\xi$ で微分した式は

$$\frac{d\phi}{d\xi} = \pm \frac{2}{\sqrt{1-c^2}} \operatorname{sech} \frac{\xi}{\sqrt{1-c^2}} \quad (2.6)$$

となる。(2.5)式のキンク解と反キンク解を Fig.2.1 に、(2.6)式を Fig.2.2 に示す。Fig.2.2 を見るとこの解が孤立波の様相を呈していることがわかる。

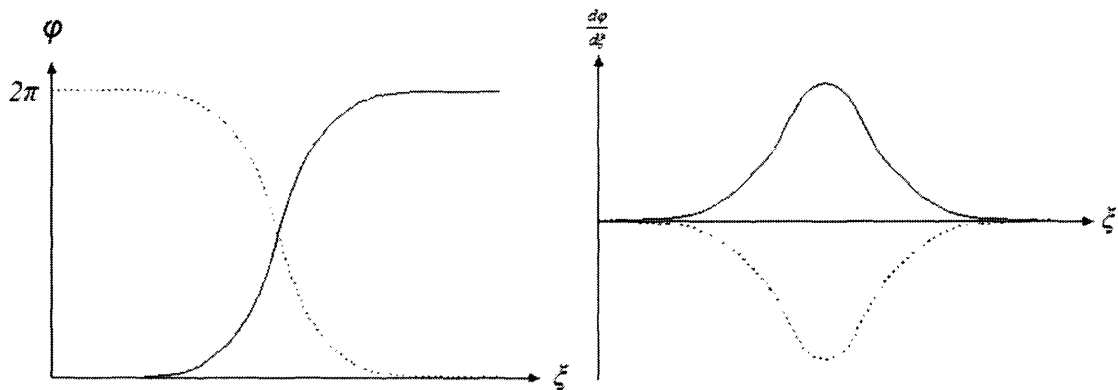


Fig.2.1 キンク解(実線)と反キンク解(破線) Fig.2.2 キンク解(実線)と反キンク解(破線)の $d\phi/d\xi$

電場誘起 SmC\* $\rightarrow$ SmC 相転移において上述のようなキンク解が重要な役割を果たすが、それについて次章で述べる。



### 第三章 電場誘起 SmC\*-SmC 相転移

SmC\*相では分子のディレクター $\mathbf{n}$ と層法線を含む面に垂直な方向に電気分極が現れ螺旋構造に従って回転している。ここで層に平行方向に電場を印加することでこの電気分極との結合により螺旋構造が解かれて一様な SmC 相へと転移する。

電場中における SmC\*相の Ginzburg-Landau の自由エネルギーは分子のディレクター $\mathbf{n}$ の傾き角 $\theta$ と方位角 $\varphi$ を用いて次のように表される<sup>6-8)</sup>。

$$F = \int \left[ \frac{1}{2}a\theta^2 + \frac{1}{4}b\theta^4 + \frac{1}{2}k' \left( \frac{d\theta}{dz} \right)^2 + \frac{1}{2}k\theta^2 \left( \frac{d\varphi}{dz} - q_0 \right)^2 - E\theta \cos \varphi \right] dz \quad (3.1)$$

ここで $a = a_0(T - T_A) = a_0t$  ( $t = T - T_A$ )、 $T$ は温度、 $T_A$ は SmA 相転移温度を表している。 $k'$ 、 $k$ はそれぞれ傾き角 $\theta$ と方位角 $\varphi$ の変化に対する弾性定数を表し、 $q_0$ は無電場状態における SmC\*相の波数、 $E$ は電場の強さを表している。(3.1)式のオイラー-ラグランジュ方程式は次の2式となる。

$$\left\{ a_0t\theta + b\theta^3 - k' \frac{d^2\theta}{dz^2} + k\theta \left( \frac{d\varphi}{dz} - q_0 \right)^2 - E \cos \varphi = 0 \right. \quad (3.2)$$

$$\left. \left\{ k\theta \frac{d^2\varphi}{dz^2} + 2k \frac{d\theta}{dz} \left( \frac{d\varphi}{dz} - q_0 \right) - E \sin \varphi = 0 \right. \right. \quad (3.3)$$

ここで傾き角 $\theta$ は温度 $t$ に依存しており低温になるにつれて大きくなる。温度 $t$ が十分低温の時、 $\theta$ はかなり大きくなり電場印加による $\theta$ の変化が SmC 相への転移に対してあまり影響を与えることがなくなるため、傾き角 $\theta$ を一定と取り扱っても現象の大筋を捉える事が出来る。しかし温度が SmA 転移温度 $T_A$ 近傍では $\theta$ が小さく、電場印加による変動を無視することができないため、傾き角 $\theta$ について考慮する必要がある(Fig.3.1)。後に詳細を述べるが、傾き角 $\theta$ を一定とした場合 SmC\*-SmC 相転移は二次転移であり、 $\theta$ の変動を考慮した場合一次転移となることがある。

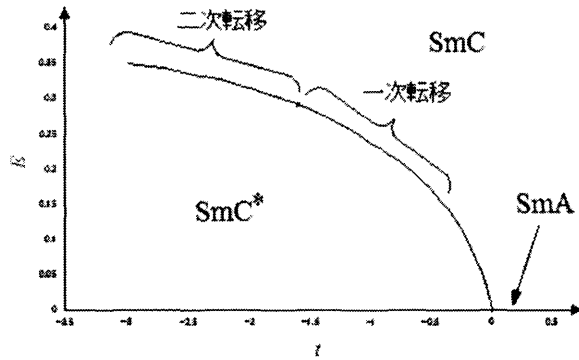


Fig.3.1 SmC\*-SmC 相転移の相図

まず傾き角  $\theta$  を一定と仮定し  $\theta = \theta_0$  とした場合について考察する。オイラー-ラグランジュ方程式は(3.3)式から得られる次式のみとなる。

$$\frac{d^2\varphi}{dz^2} = \frac{E}{k\theta_0} \sin\varphi \quad (3.4)$$

これは前述にある(2.1)式の時間に依存しないサイン-ゴルドン方程式である(2.2)式となっている。(3.4)式の解としてヤコビ(Jacobi)の楕円関数  $\text{sn}(z, \kappa)$  を用いた次の周期解が得られる。

$$\varphi = \sin^{-1} \text{sn} \left( \sqrt{\frac{E}{k\theta_0}} \frac{z - z_0}{\kappa}, \kappa \right) \quad (3.5)$$

ここで  $\kappa$  は母数である。(3.5)式を(3.1)式に代入し、 $\kappa$  に対して自由エネルギー  $F$  を最小化とする条件から、 $\kappa$  が次式から決まる。

$$\frac{\kappa}{E(\kappa)} = \frac{4}{\pi q_0} \sqrt{\frac{E}{k\theta_0}} \quad (3.6)$$

ここで  $E(\kappa)$  は第二種の完全楕円積分を表している。 $\kappa \rightarrow 1$  は螺旋のピッチ  $p \rightarrow \infty$  に相当する。即ち  $\kappa \rightarrow 1$  のにおいて(3.6)式に現れる電場  $E$  は SmC\*-SmC 相転移の転移電場  $E_c$  に相当するということであり

$$E_c = \left( \frac{\pi}{4} \right)^2 k\theta_0 q_0^2 \quad (3.7)$$

と得られる。

また  $\kappa = 1$  のにおいて、(3.4)式から(2.2)式に倣いソリトン解を求めると

$$\varphi = 4 \tan^{-1} \tanh \left( \sqrt{\frac{E}{k\theta_0}} \frac{z - z_0}{2} \right) + \pi \quad (3.8)$$

となる(Fig.3.2)。SmC 相でのソリトンの励起エネルギー  $\Delta F$  は(3.8)式を(3.1)式に代入する

ことで求まり

$$\Delta F = 4\sqrt{\pi}k\theta_0^2q_0\left(\sqrt{\frac{E}{E_c}} - 1\right) \propto \frac{E - E_c}{E_c} \quad (3.9)$$

となる(Fig.3.3)。  $E < E_c$ では  $\Delta F$  は負となり数多くのソリトンが励起されることになるが、  $\theta = \theta_0$  (一定)の条件下ではソリトン間相互作用は斥力的に作用し、この働きによりエネルギーが上昇するため  $\Delta F$  との兼ね合いによりソリトン密度はある一定値に留まり、ソリトン格子を形成する。即ち(3.5)式の周期解がこのソリトン格子である(Fig.3.4)。また  $E = E_c$ では  $\Delta F = 0$ となりソリトン間相互作用が斥力的に作用する時ソリトン密度は0となる。よって  $\theta = \theta_0$  (一定)の場合 SmC\*-SmC 相転移は二次転移となる。

ソリトン密度をソリトンの波数  $q$  を用いて表すと

$$\frac{q}{q_0} = \frac{1}{2\kappa K(\kappa)} \sqrt{\frac{E}{k\theta_0}} \quad (3.10)$$

となる。ここで  $K(\kappa)$  は第一種の完全楕円積分である。(3.10)式で表されるソリトンの波数の電場依存性を Fig.3.5 に示すが、(3.6)式と(3.7)式及び(3.10)式から  $\kappa$  を媒介変数とすることによりソリトンの波数  $q$  を電場  $E$  の関数として解析的に示すことができる。

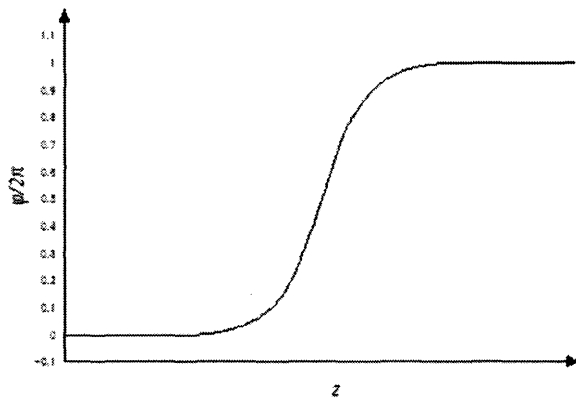


Fig.3.2 ソリトン解

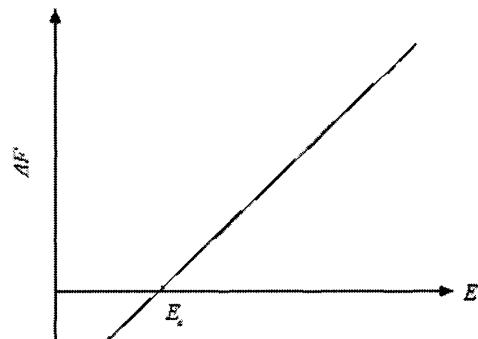


Fig.3.3  $\Delta F - E$  関係

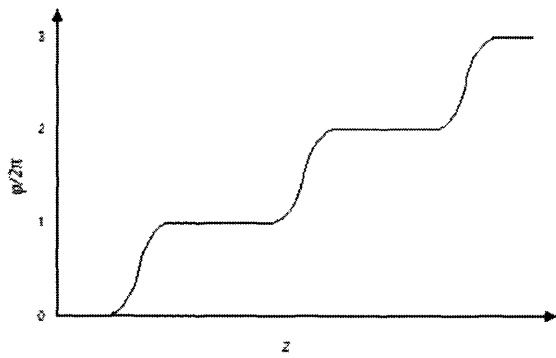


Fig.3.4 ソリトン格子

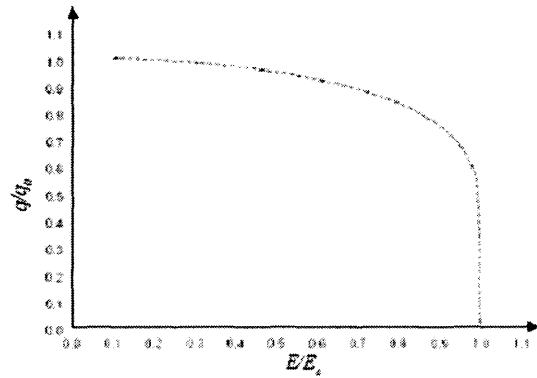


Fig.3.5  $q$ - $E$  関係( $\theta = \theta_0$ )

次に傾き角  $\theta$  の変動を許した場合について考察する。(3.2)式及び(3.3)式のオイラー-ラグランジュ方程式を連立させて解を導く必要があるが、解析的に解くことができないため数値結果のみを述べる。傾き角  $\theta$  と方位角  $\varphi$  による最も励起エネルギーが小さい 1-ソリトン解をそれぞれ Fig.3.6 に示す。ソリトン中心付近において  $\theta$  は  $\theta_c$  よりも極めて小さくなっており、この結果からソリトンの励起エネルギーが低下しソリトン間相互作用に引力的な効果を生み出している。この場合のソリトンの波数の電場依存性( $q$ - $E$  関係)を Fig.3.7 に示すが、ソリトンの波数  $q$  が転移電場  $E_c$  において不連続にゼロへと飛んでいることから SmC\*-SmC 相転移が一次転移となっていることがわかる。 $\theta$  の変動を考慮した場合、これらの結果のようにソリトン間相互作用は引力的となることもあり、転移は一次転移となる。

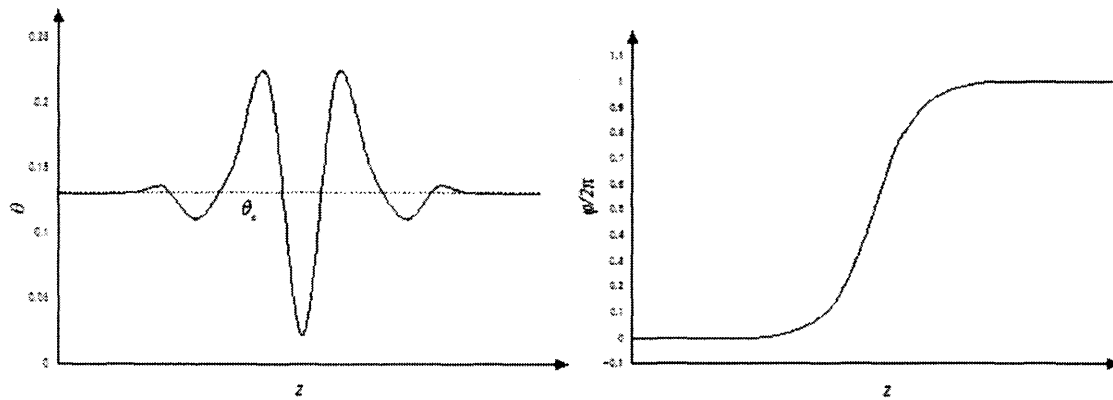


Fig.3.6  $\theta$  と  $\varphi$  の 1-ソリトン解

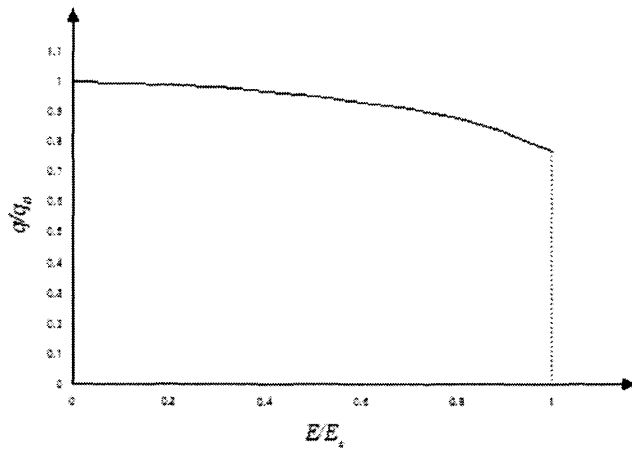


Fig.3.7  $q$ - $E$  関係( $\theta$ 変動)

以上のように電場誘起  $\text{SmC}^* \cdot \text{SmC}$  相転移において傾き角  $\theta$  の取り扱い方によってソリトン間相互作用や転移の次数などに大きな違いが生ずる。このような特性が  $\text{SmC}_\alpha^* \cdot \text{SmC}$  相転移においてどのように現れるかが注目される。

ここで、ソリトンの一様解への緩和過程がどのようになっているかを述べる。 $\text{SmC}$  相を表す一様解である  $\theta = \theta_c$ ,  $\varphi = 2\pi$  からの  $\theta$ ,  $\varphi$  の外れ  $\theta_1$ ,  $\varphi_1$  を

$$\begin{pmatrix} \theta_1 \\ \varphi_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \theta - \theta_c \\ \varphi - 2\pi \end{pmatrix} = e^{-\kappa z} \begin{pmatrix} \tilde{\theta}_1 \\ \tilde{\varphi}_1 \end{pmatrix} \quad (3.11)$$

とする。これらを(3.2)式, (3.3)式に代入し、 $\theta$ ,  $\varphi$  が微小であるとして線形化すると次式が得られる。

$$M \begin{pmatrix} \theta_1 \\ \varphi_1 \end{pmatrix} = 0, \quad M = \begin{bmatrix} \frac{d^2}{dz^2} - \kappa_\theta^2 & 2\theta_c \frac{d}{dz} \\ -2\theta_c^{-1} \frac{d}{dz} & \frac{d^2}{dz^2} - \kappa_\varphi^2 \end{bmatrix} \quad (3.12)$$

ここで、 $\kappa_\theta^2$  と  $\kappa_\varphi^2$  は

$$\begin{aligned} \kappa_\theta^2 &= a + 1 + 3\theta_c^2 \\ \kappa_\varphi^2 &= a + 1 + \theta_c^2 \end{aligned} \quad (3.13)$$

である。(3.11)式から  $\kappa$  に対する永年方程式( $\det M = 0$ )は次式のように表され、 $\kappa$  が決定される。

$$(\kappa^2 - \kappa_\theta^2)(\kappa^2 - \kappa_\phi^2) + 4\kappa^2 = 0 \quad (3.14)$$

なお、ここでの  $\kappa$  は(3.5)式に表される母数  $\kappa$  ではなく別の量であることを注意しておく。固有値  $\kappa$  の値は各パラメータ  $a (= a_0 t)$ ,  $b$ ,  $k$ ,  $k'$ ,  $q_0$ ,  $E$  の値によって実数, 複素数, 純虚数になり得て、その様子を Fig.3.1 に加えたものが Fig.3.8 である。  $\kappa$  は点線で区切られた領域 R では実数であり、領域 C では複素数、領域 PI では純虚数である。領域 R ではソリトンの一様解への緩和は指数減衰となり、領域 C では振動減衰となる。領域 PI では(3.8)式の  $e^{-\kappa z}$  は減衰しないため、この領域ではソリトンは存在しえないことがわかる。

ソリトンの緩和が指数減衰の場合(領域 R)には傾き角  $\theta$  の変動がソリトンの励起エネルギーを減少させる効果があるがそれ以上の新たな性質は現れず、ソリトン間相互作用は斥力的に働き、二次転移である。しかしソリトンの緩和が振動減衰の場合(領域 C)には傾き角  $\theta$  の変動に起因してソリトン間相互作用は引力的に働き、一次転移となる。さらに高温領域では三重臨界点(TC)が現れ相転移は再び二次転移になるが、そこではソリトン問題から外れるのでここではこれ以上論及しない。

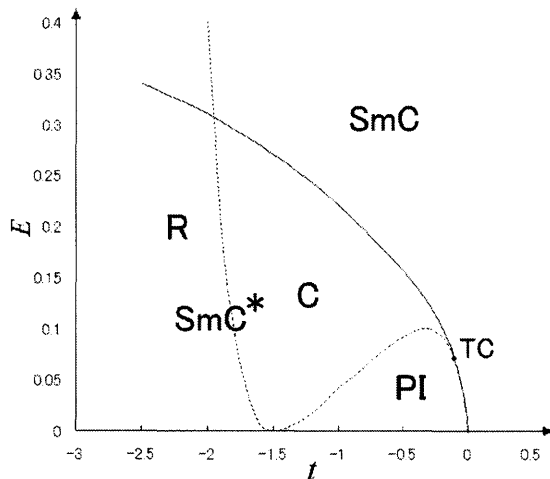


Fig.3.8 固有値  $\kappa$  の虚実と相図

## 第IV章 電場中の $\text{SmC}_\alpha^*$ の定式化

### 1. 電場中の $\text{SmC}_\alpha^*$ 相の自由エネルギー

$\text{SmC}_\alpha^*$  相も  $\text{SmC}^*$  相と同様に螺旋構造を持ち電場を印加することで一様な  $\text{SmC}$  相へと転移を起こすが、 $\text{SmC}^*$  相と異なりピッチが短いために<sup>4-5)</sup>ソリトンの連続記述が不可能である。ここで  $\text{SmC}_\alpha^*$  相のソリトンが離散的に現れると仮定し、数値計算による解析が求められる。本研究では Ginzburg-Landau の自由エネルギーである(3.1)式を離散化した次式を  $\text{SmC}_\alpha^*$  相の自由エネルギーとして用いる<sup>9-11)</sup>。

$$F = \sum_i \left[ \frac{1}{2} a \theta_i^2 + \frac{1}{4} b \theta_i^4 + \frac{1}{2} K' (\theta_{i+1} - \theta_i)^2 - K \theta_{i+1} \theta_i \cos(\varphi_{i+1} - \varphi_i - \delta) - E \theta_i \cos \varphi_i \right] \quad (4.1)$$

ここで  $a, b, K', K, E$  で表される各パラメーターは(3.1)式のものと同様であり、 $\delta$  は無電場状態における螺旋構造の波数に  $2\pi$  を掛けた値となっており、即ち  $\text{SmC}^*$  相における  $q_0$  に対応したものである。そして  $\theta_i, \varphi_i$  はそれぞれ  $i$  番目の層の傾き角と方位角を表している。傾き角  $\theta$  を一定 ( $\theta_i = \theta_0$ ) と仮定した場合の計算結果はすでに得られており<sup>9-11)</sup>、本研究の本筋とも言える傾き角  $\theta$  の変数として取り扱う場合との比較が重要であるため、まずは  $\theta$  を一定 ( $\theta_i = \theta_0$ ) として取り扱った場合の数値解析及び数値結果について述べる。

## 2. 電場誘起 $\text{SmC}_\alpha^*$ - $\text{SmC}$ 相転移(傾き角 $\theta$ を一定とした場合)

始めに傾き角  $\theta$  を一定とした場合について論ずる。  $\theta_i = \theta_0$  とすると(4.1)式の第一項から第三項は定数項となり数値結果に影響を及ぼすことがなくなるために省略する。よって(4.1)式は次式のように簡略化できる。

$$f = \sum_i [-\cos(\varphi_{i+1} - \varphi_i - \delta) - e \cos \varphi_i] \quad (4.2)$$

ここで  $f = \frac{F}{K\theta_0^2}$ 、  $e = \frac{E}{K\theta_0}$  である。  $f$  が最小となる時が平衡状態の条件となることから

(4.2)式から

$$-\frac{\partial f}{\partial \varphi_i} = \sin(\varphi_{i+1} - \varphi_i - \delta) - \sin(\varphi_i - \varphi_{i-1} - \delta) - e \sin \varphi_i = 0 \quad (4.3)$$

(4.3)式には様々な解が存在するが、(4.2)式が最小となる解が求める平衡解となる。また離散ソリトンの波数  $q$  は  $\varphi_{i \pm m} = \varphi_i + 2\pi m$  とした時  $q = n/m$  となる。 Fig.4.1 に  $\delta = 2\pi \times 1/4$  における  $\text{SmC}_\alpha^*$ 相での波数  $q = 1/9$  における離散ソリトンの構造を示す。

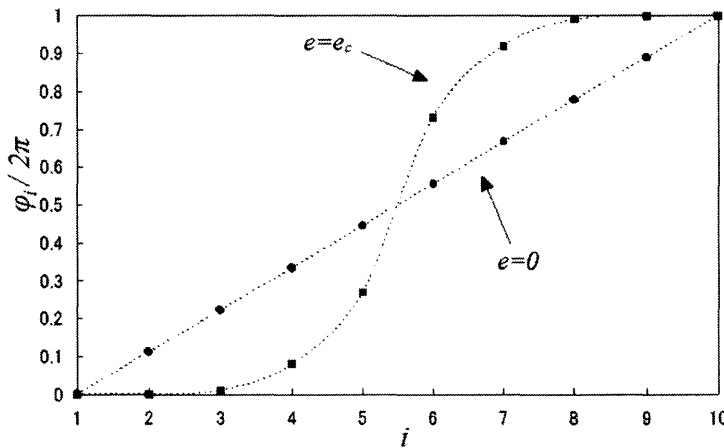


Fig.4.1  $q = 1/9$ における離散ソリトン構造

さらに  $\delta = 1/4 \times 2\pi$  における波数の電場依存性を Fig.4.2 に示す<sup>8)</sup>。図中の階段状に記述されるものが  $\delta = 1/4 \times 2\pi$  における  $\text{SmC}_\alpha^*$ 相の波数の電場依存性であり、曲線で記述されているものは  $\text{SmC}^*$ 相の波数の電場依存性である。 Fig.4.2 から  $\text{SmC}^*$ 相の波数の電場依存性は連続的な曲線で記述されるのに対して、  $\text{SmC}_\alpha^*$ 相では階段状に現れ  $\text{SmC}$  相( $q = 0$ )へと連続的に転移(二次転移)している。さらに Fig.4.2 の  $\text{SmC}_\alpha^*$ 相の波数の電場依存性の  $q = 2/9 \sim 1/5$  付近を拡大したものを Fig.4.3 に示すが、統計的に元の波数の電場依存性の階段状構造と似ており、即ち自己相似的な階段構造となっていることがわかった。また  $\text{SmC}_\alpha^*$ 相の波数の電場依存性は  $\text{SmC}^*$ 相のもの比べて転移電場  $e_c$  近傍での波数の凝縮が急激



となっていることから、離散ソリトンでの斥力的なソリトン間相互作用は連続ソリトンでのものよりも短距離的に作用していることを示している。

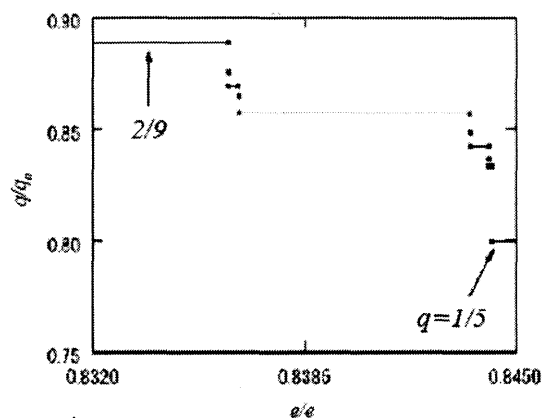
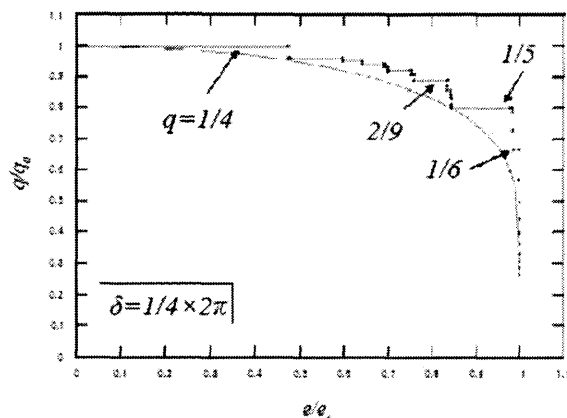


Fig.4.2  $\delta = 1/4 \times 2\pi$ における  $\text{SmC}_\alpha^*$ 相の波数の電場依存性(階段状の線)と  $\text{SmC}^*$ 相の波数の電場依存性(実線)<sup>10)</sup>

次に各電場での自由エネルギー密度  $\Delta F$  の波数依存性を Fig.4.4 に示す。ここで実線で記述されているものは  $\text{SmC}^*$ 相のものであり、点でプロットされているものが  $\text{SmC}_\alpha^*$ 相のものである。Fig.4.4 から  $\text{SmC}^*$ 相、 $\text{SmC}_\alpha^*$ 相ともに単調な下に凸となっていることがわかる。つまりソリトン間相互作用が全ての波数において斥力的に作用しており、 $e = 0$  では  $q = q_0$  が平衡状態であり、電場が大きくなるにつれて平衡状態となる波数  $q$  が小さくなり、転移電場  $e_c$  において  $q = 0$  ( $\text{SmC}$  相)へと連続的に転移している。

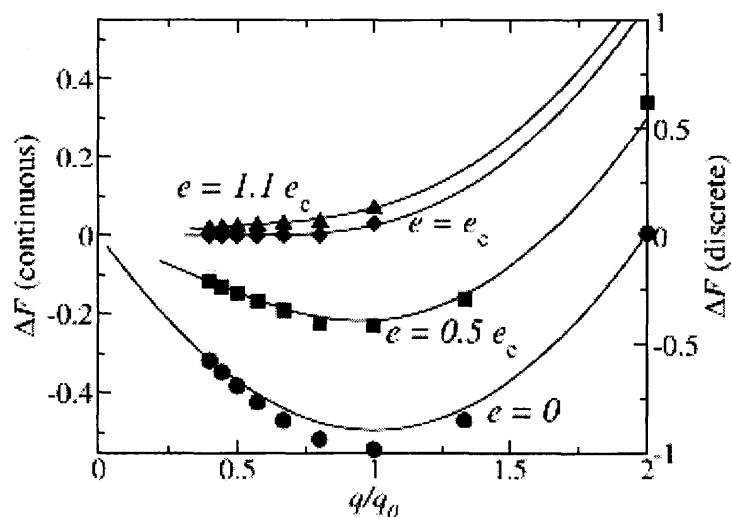


Fig.4.4  $\text{SmC}_\alpha^*$ 相の自由エネルギー密度の波数依存性(点)と  $\text{SmC}^*$ 相の自由エネルギー密度の波数依存性(実線)<sup>9)</sup>

次に  $q-e$  関係の  $\delta$  依存性について、 $\delta = 1/4 \times 2\pi$  と  $\delta = 1/5 \times 2\pi$  と  $\delta = 1/10 \times 2\pi$  における  $\text{SmC}_\alpha^*$  相、そして  $\text{SmC}^*$  相における波数の電場依存性を比較したグラフを Fig.4.5 に示す。

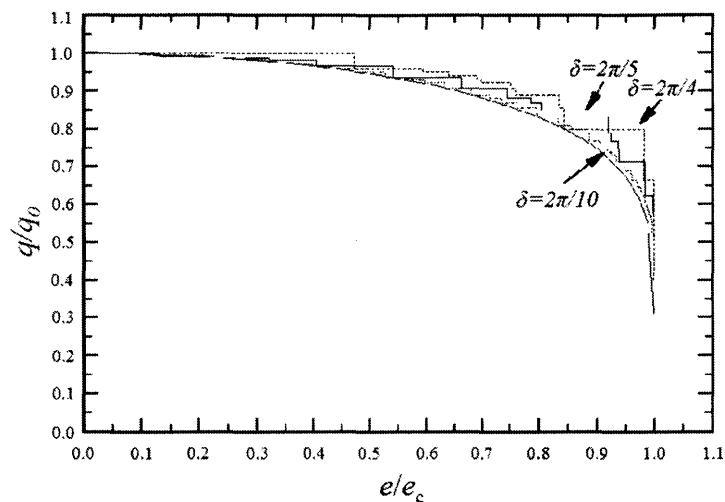


Fig.4.5  $\delta/2\pi = 1/4, 1/5, 1/10$  における  $\text{SmC}_\alpha^*$  相  
(階段状の線)と  $\text{SmC}^*$  相(実線)の波数の電場依存性の比較<sup>10)</sup>

Fig.4.5 から  $\delta$  が小さくなるにつれて階段構造を保ちつつ曲線で表される  $\text{SmC}^*$  相の波数の電場依存性に近づいていることがわかる。

傾き角  $\theta$  を一定として取り扱った場合、 $\delta < 2\pi/4$  である限り<sup>10)</sup> 電場誘起  $\text{SmC}_\alpha^* - \text{SmC}$  相転移ではソリトンは離散的な記述が成され、波数の電場依存性が自己相似的な階段状構造として現われるが、ソリトン間相互作用が斥力的に作用していることから  $\text{SmC}$  相への転移は連続的に起こる。さらに斥力的なソリトン間相互作用は  $\text{SmC}^*$  相のものに比べてより短距離的に作用していることも明らかとなった。しかし、ここまでの現象が起こるのは  $\delta < 1/4 \times 2\pi$  の領域であり、 $\delta > 1/4 \times 2\pi$  の領域では新たに特異的な現象が起こるが、ここでは論ずるのは控える<sup>10)</sup>。

### 3. 電場誘起 $\text{SmC}_\alpha^*$ - $\text{SmC}$ 相転移(傾き角 $\theta$ の変動を許す場合)

そして本研究の本筋とも言える電場誘起  $\text{SmC}_\alpha^*$ - $\text{SmC}$  相転移の傾き角  $\theta$  の変動を許す場合について述べる。傾き角  $\theta$  の変動を許す場合、(3.1)式で表される電場中における  $\text{SmC}_\alpha^*$  相の Landau の自由エネルギーから平衡状態を求めるためには以下の二式を連立させて解を解く必要がある。

$$\begin{cases} \frac{\partial F}{\partial \theta_n} = A_0 t \theta_n + B \theta_n^3 + k(2\theta_n - \theta_{n+1} - \theta_{n-1}) - \theta_{n-1} \cos(\varphi_n - \varphi_{n-1} - \delta) \\ \quad - \theta_{n+1} \cos(\varphi_{n+1} - \varphi_n - \delta) - e \cos \varphi_n = 0 & (4.4) \\ \frac{\partial F}{\partial \varphi_n} = \theta_n \theta_{n-1} \sin(\varphi_n - \varphi_{n-1} - \delta) - \theta_{n+1} \theta_n \sin(\varphi_{n+1} - \varphi_n - \delta) + e \theta_n \sin \varphi_n = 0 & (4.5) \end{cases}$$

ここで  $a = a_0(T - T_A) = a_0 t$  ( $t = T - T_A$ ) とし、 $A_0 = \frac{a_0}{K}$ ,  $B = \frac{b}{K}$ ,  $k = \frac{K'}{K}$ ,  $e = \frac{E}{K}$  とした。

(4.4)式と(4.5)式を連立させて得られる様々な解のうち、(3.1)式の  $F$  が最も最小となる解が平衡解となる。(4.1)式から解を求めるにあたり Newton-Laphson 法を用いて数値計算を行った。また本研究では各パラメーターの値として  $A_0 = 1$ ,  $B = 16$ ,  $k = 1$  を用いた。

無電場状態における傾き角  $\theta$  は

$$\theta_{n+1} = \theta_n = \theta_{n-1}, \quad \theta_n = \sqrt{\frac{-A_0 t + 2 \cos(2\pi q - \delta)}{B}} \quad (4.6)$$

となり温度  $t$  に依存する変数となる。ここで  $q$  は  $\text{SmC}_\alpha^*$  相の離散ソリトンの波数を表しており  $\varphi_{i \pm m} = \varphi_i + 2\pi m$  とした時  $q = n/m$  である。また(4.6)式から  $\text{SmA}$  相と  $\text{SmC}_\alpha^*$  相が発現する温度の境界を求めることができ、 $2\pi q = \delta$  の時に傾き角  $\theta_n$  は各温度において最大値

を取るようになる。即ち、このモデルの場合  $(\theta_n)_{\max} = \sqrt{\frac{-t+2}{16}}$  となる。よってこのモデル

では  $t < 2$  の領域では  $\theta_n > 0$  となり  $\text{SmC}_\alpha^*$  相が発現し、 $t \geq 2$  では  $\theta_n = 0$ 、即ち  $\text{SmA}$  相が発現する。つまりこのモデルにおいては  $t < 2$  の領域で電場を印加することで  $\text{SmC}_\alpha^*$ - $\text{SmC}$  相転移が起こることになる。次章ではこれらの各パラメーターを決定し計算を行い、相転移の電場依存性やソリトン間相互作用、温度依存性や  $\delta$  依存性などのふるまいについて明らかにする。

## 第V章 数値解析結果

### 1. $\text{SmC}_\alpha$ \*相での $\delta = 2\pi/4$ における計算結果( $t = -8$ )

第3章でも述べたように  $\text{SmC}$ \*相でのソリトン解は解析的に求めることができ、導かれるソリトン解は連続表記となる。それに対して  $\text{SmC}_\alpha$ \*相では螺旋構造のピッチ  $p$  が短く、現れるソリトン解は離散的な記述となる。一例として  $\delta = 2\pi/4$  ( $q_0 = 1/4$ ), 温度  $t = -8$  における数値計算から得られた波数  $q = 1/7$  の方位角  $\varphi$  の離散ソリトン格子構造を Fig.5.1(a)に、離散ソリトン構造における傾き角  $\theta$  の変調を Fig.5.1(b)に示す。ここで  $e_c$  は  $\text{SmC}_\alpha$ \*相が  $\text{SmC}$ 相へと相転移する転移電場を表している。

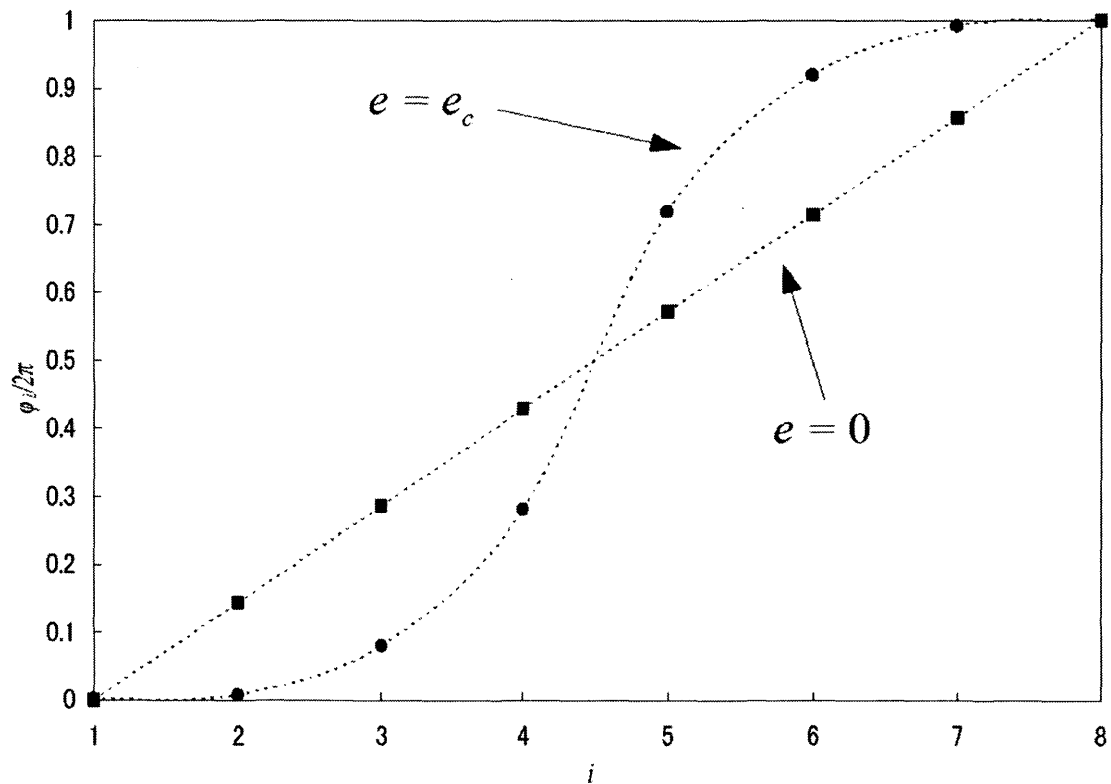


Fig.5.1(a)  $\delta = 2\pi/4$  における温度  $t = -8$ , 波数  $q = 1/7$  での離散ソリトン格子構造における方位角  $\varphi$

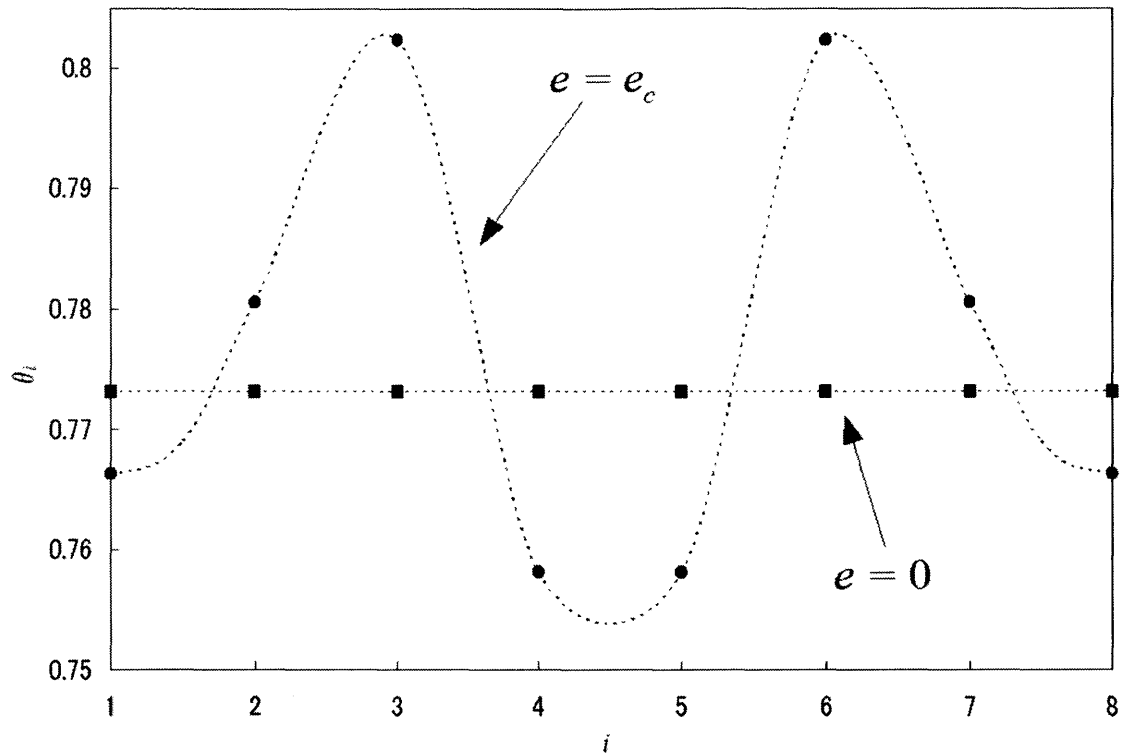


Fig.5.1(b)  $\delta = 2\pi/4$ における温度  $t = -8$ , 波数  $q = 1/7$  の離散ソリトン格子構造での傾き角  $\theta$  の変調

次に  $t = -8$  での計算で得られた自由エネルギー  $F$  を螺旋構造が一周するのに必要な層数  $N$  で割ったもの、即ち一層当たりの自由エネルギーと電場  $e$  の関係を、 $q = 1/4 \sim 1/9$  のそれぞれの波数で比較したグラフを Fig.5.2(a) に示す。さらに Fig.5.2(a) における転移電場  $e_c$  近傍である電場領域を拡大したグラフを Fig.5.2(b) に示す。Fig.5.2(a) 及び (b) から、印加する電場を大きくしていくと平衡状態となる波数は徐々に小さくなっているが、 $e_c$  では平衡状態となる波数は  $q = 1/5$  から  $q = 0$  (SmC 相) へと不連続に変化していることがわかり、即ち一次転移となっていることを意味している。

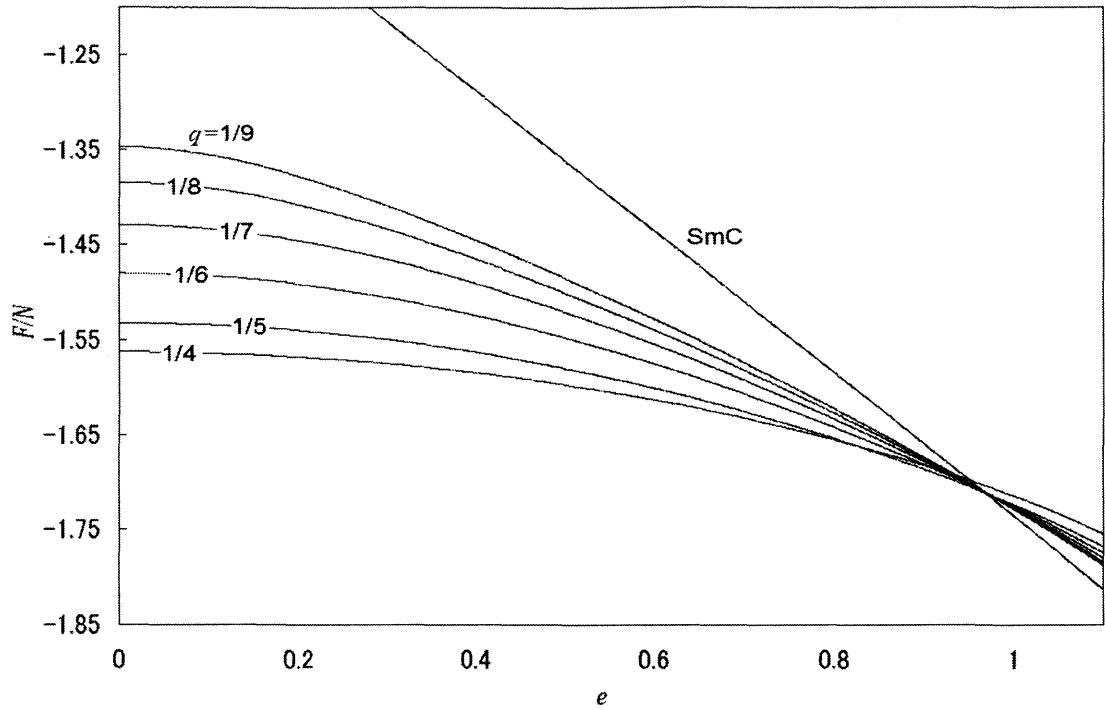


Fig.5.2(a)  $\delta = 2\pi/4$ における  $t = -8$  での  $F/N - e$  関係の各波数  $q = 1/4 \sim 1/9$  の比較

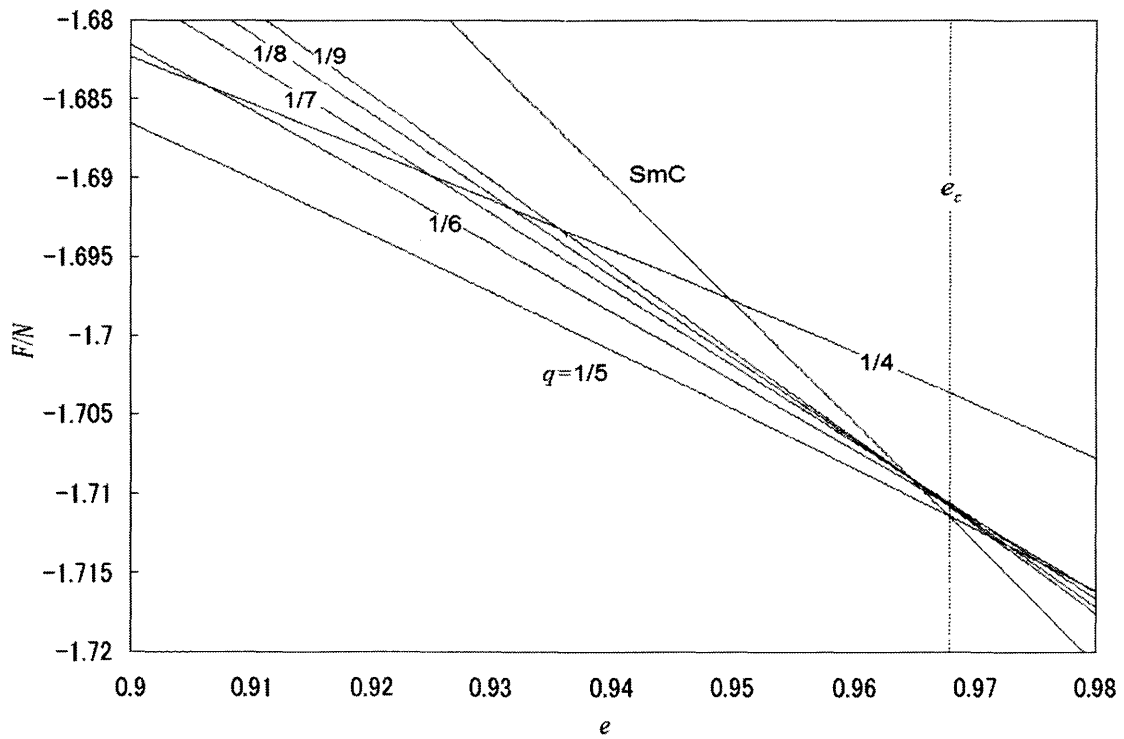


Fig.5.2(b) Fig.5.2(a)の転移電場  $e_c$  近傍の拡大図

以上のような計算結果が得られた  $\delta = 2\pi/4$  の  $\text{SmC}_\alpha^*$  相における温度  $t = -8$  での波数の電場依存性を Fig.5.3(a) に示す。Fig.5.3(a) から、第4章の Fig.4.2 に示される傾き角  $\theta$  が一定の場合の波数の電場依存性と同様に階段状構造となっているが、転移電場  $e_c$  において波数  $q$  は  $1/5$  から  $0$  ( $\text{SmC}$  相) へと不連続に転移していることがわかる。さらに、Fig.5.3(a) における  $q = 3/13$  から  $q = 1/5$  付近の階段状構造を拡大したグラフを Fig.5.3(b) に示すが、これは統計的に元の階段状構造と相似的な関係にあり、この階段状構造は  $\theta$  が一定の場合と同様に自己相似的な階段状構造(悪魔の階段状構造)となっている<sup>10)</sup>。

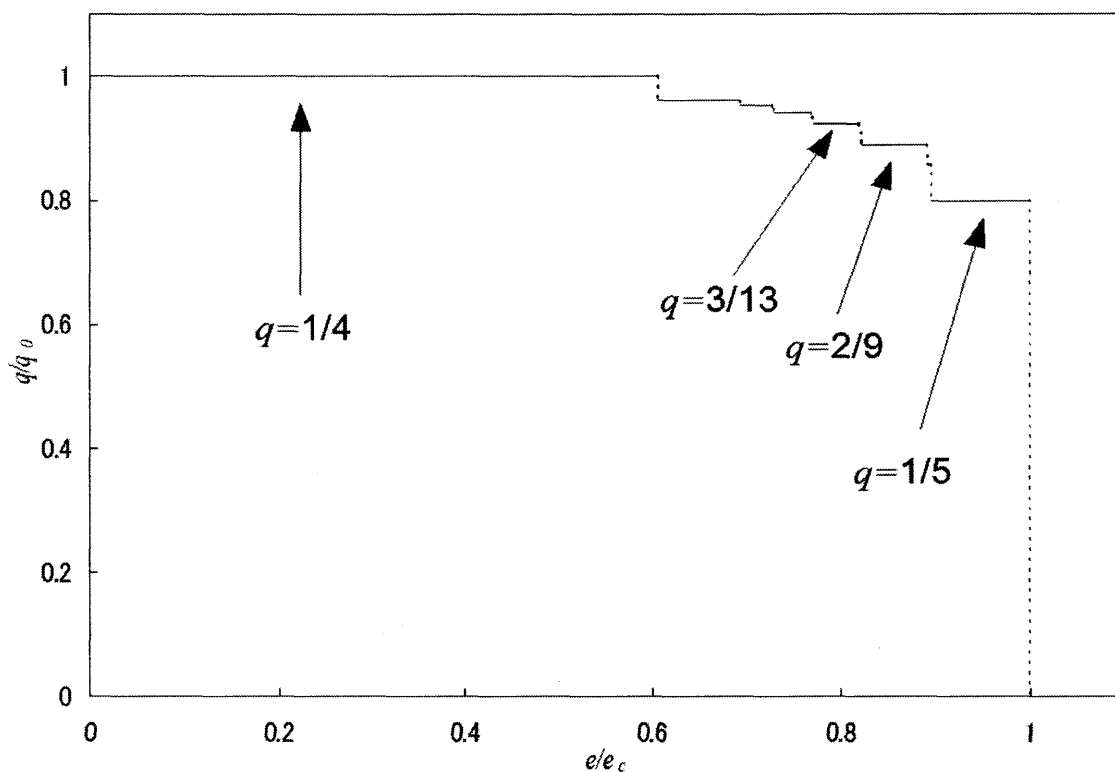


Fig.5.3(a)  $\delta = 2\pi/4$  における温度  $t = -8$  での波数の電場依存性

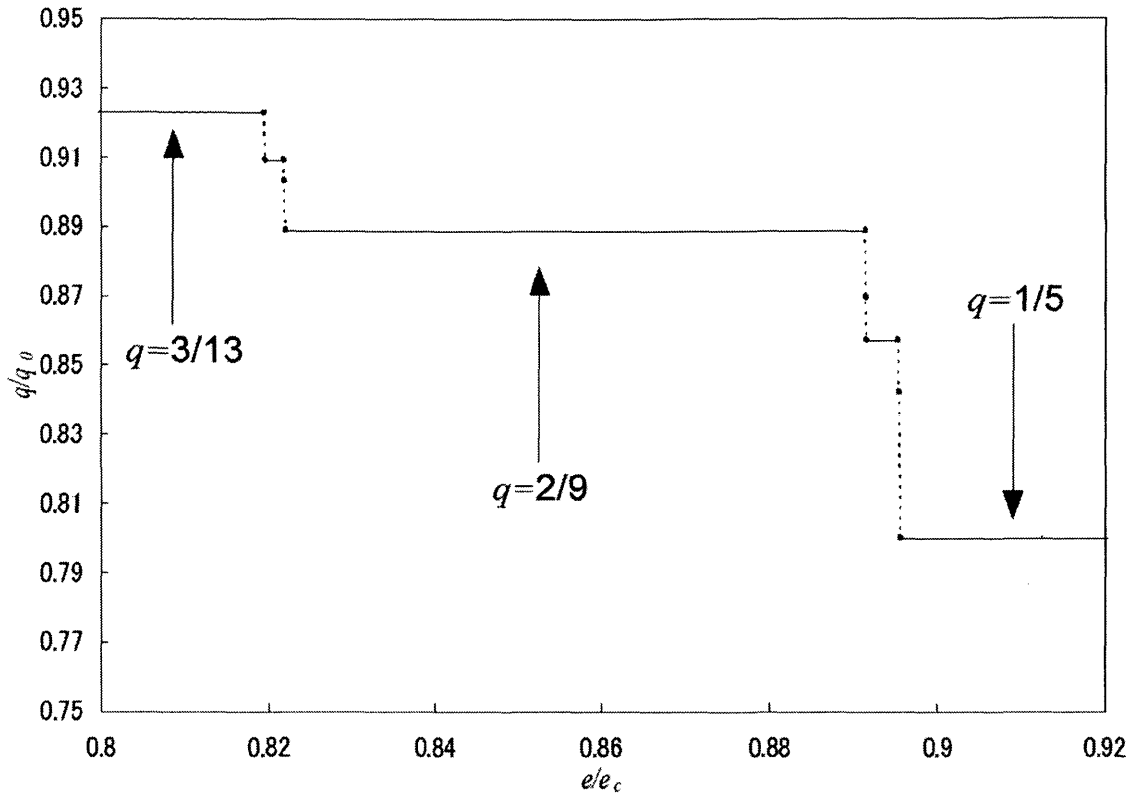


Fig.5.3(b) Fig.5.3(a)における波数  $q = 3/13$  から  $q = 1/5$  付近の拡大

さらに第4章の Fig.4.4 に示された傾き角  $\theta$  が一定の場合における自由エネルギー密度  $\Delta F$  の波数依存性と比較するために、 $\delta = 2\pi/4$  における  $t = -8$  での自由エネルギー密度の波数依存性を Fig.5.4(a)、及び Fig.5.4(b)に示す。ここで、Fig.5.4(a)は無電場状態と転移電場における  $\Delta F - q$  関係の全体像を示したものであり、Fig.5.4(b)は転移電場における  $\Delta F - q$  関係を拡大したものである。第4章の Fig.4.4 に示される傾き角  $\theta$  が一定の場合の  $\Delta F - q$  関係は全ての電場において単調な下に凸となっていたのに対し<sup>9,11</sup>、Fig.5.4(b)では波数が小さい領域において上に凸となる非単調な形となっており、転移電場において波数  $q = 1/5$  が最も安定な状態となっていることがわかる。これはソリトン間相互作用が引力的に働き、ソリトンの励起エネルギーを減少させた結果である。ここで傾き角  $\theta$  が一定の場合の転移電場における  $\Delta F - q$  関係は全ての波数で上に凸となり、波数の小さい領域ではソリトンの励起エネルギーはほぼ 0 となる。これと同様に波数の小さい領域でソリトンの励起エネルギーが 0 となる電場  $e_0$  ( $e_0 \leq e_c$ ) における自由エネルギー密度の波数依存性を示したグラフを Fig.5.4(c)に示す。ここで傾き角  $\theta$  が一定の場合において  $e_0 = e_c$  である。Fig.5.4(c)によって各波数でソリトン間相互作用がどのように働いているかが明らかになる。さらにわかりやすく解説を行うために、 $e = e_0$  での波数  $q$  の逆数、即ちソリトン間距離  $r (= 1/q)$  と自由エネルギー密度の関係を Fig.5.5(a)に示す。さらに Fig.5.5(a)における  $r = 6 \sim 10$  付近



を拡大したグラフを Fig.5.5(b)に示す。Fig.5.5(a)及び(b)より、ソリトン間距離  $r$  が近い領域だけでなくある程度遠い領域でもソリトン間相互作用が斥力的に働いていることから、引力的に働くソリトン間相互作用はある特定のソリトン間距離で強く作用することがわかった。

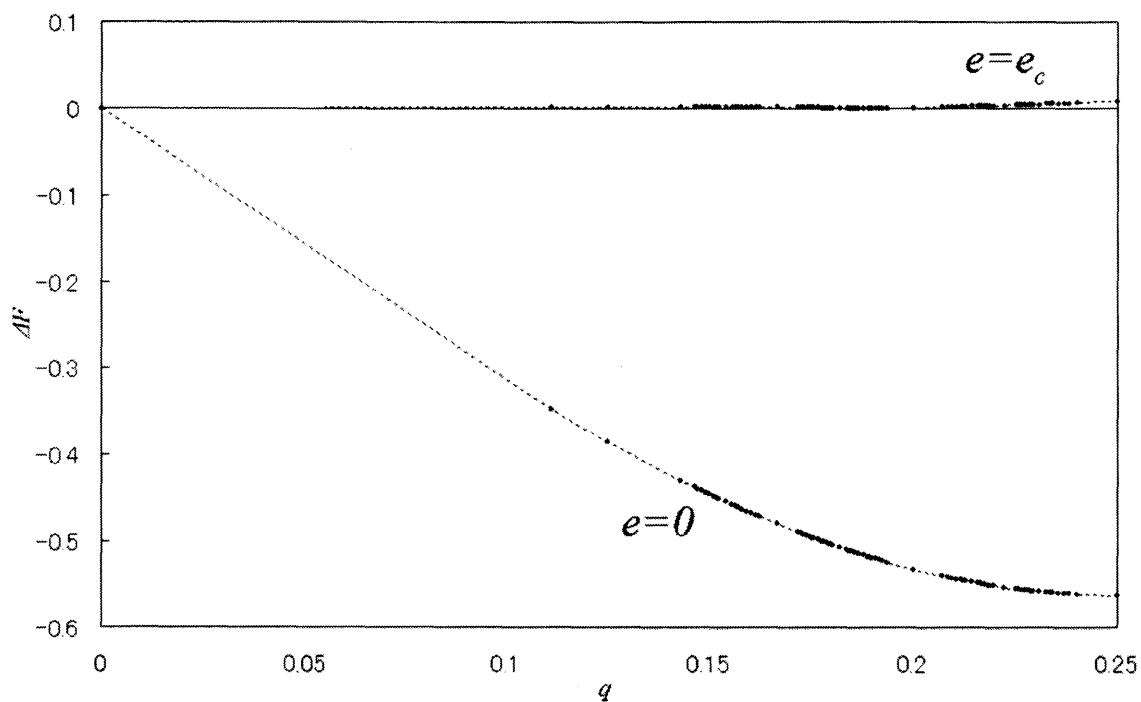


Fig.5.4(a)  $\delta = 2\pi/4$ における  $t = -8$  での自由エネルギー密度の波数依存性

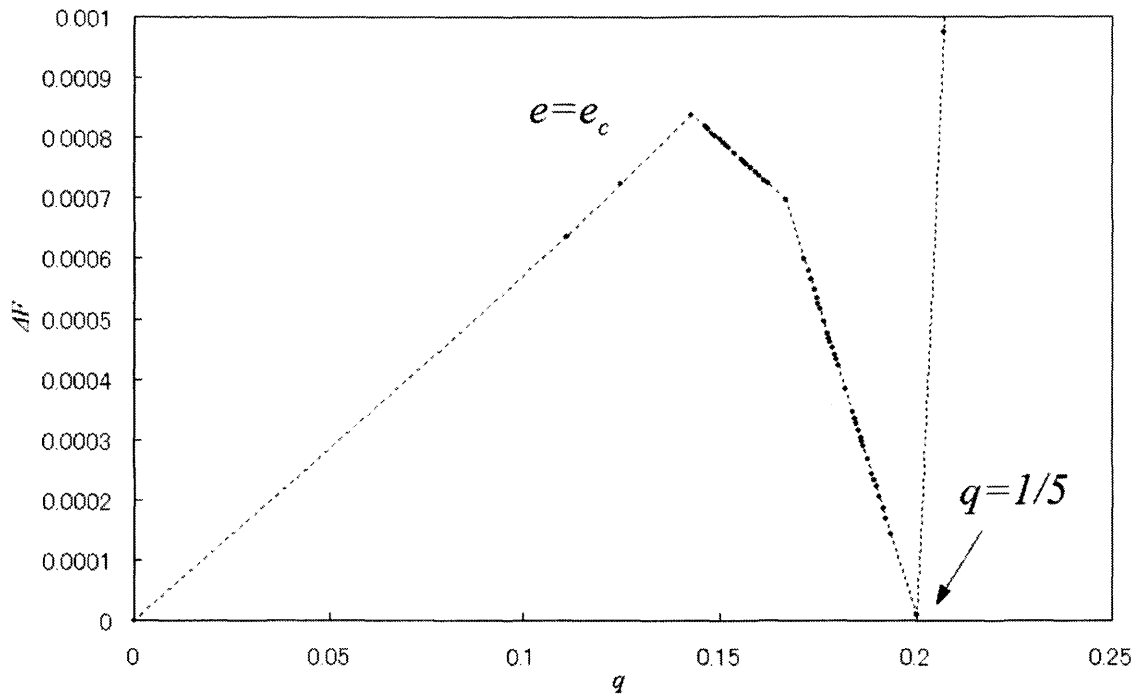


Fig.5.4(b) Fig.5.4(a)における転移電場での自由エネルギー密度の波数依存性の拡大図

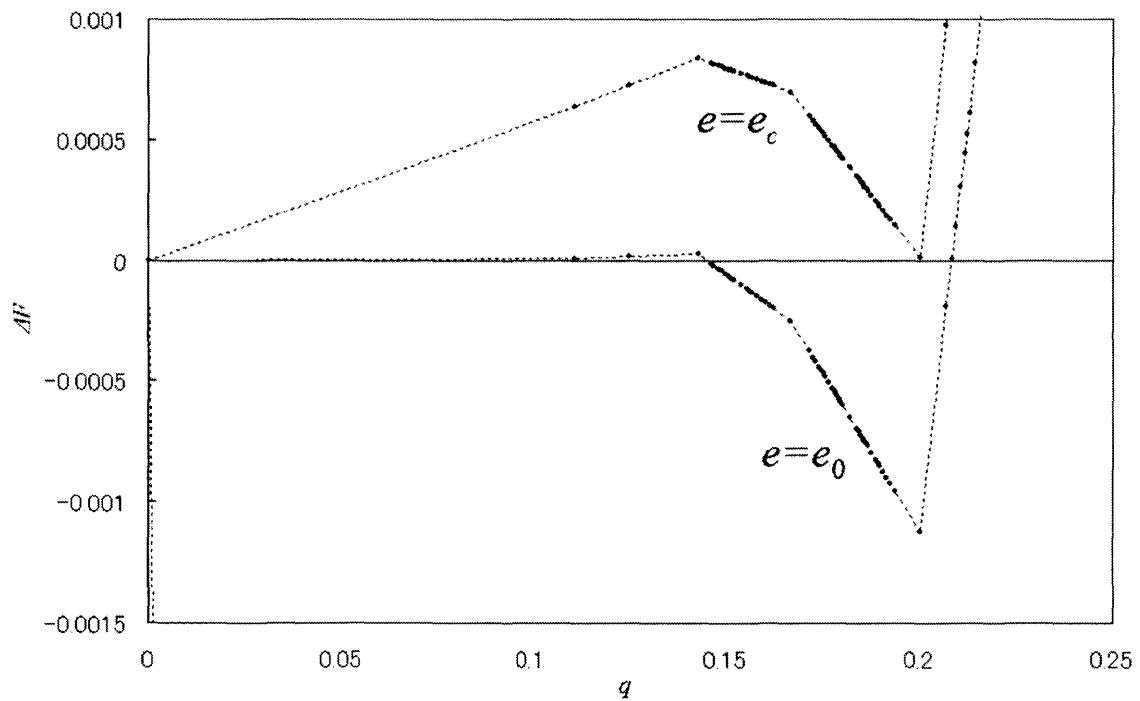


Fig.5.4(c) 転移電場  $e_c$  と波数が小さい領域のソリトンの励起エネルギーが 0 となる電場  $e_0$  における自由エネルギー密度の波数依存性

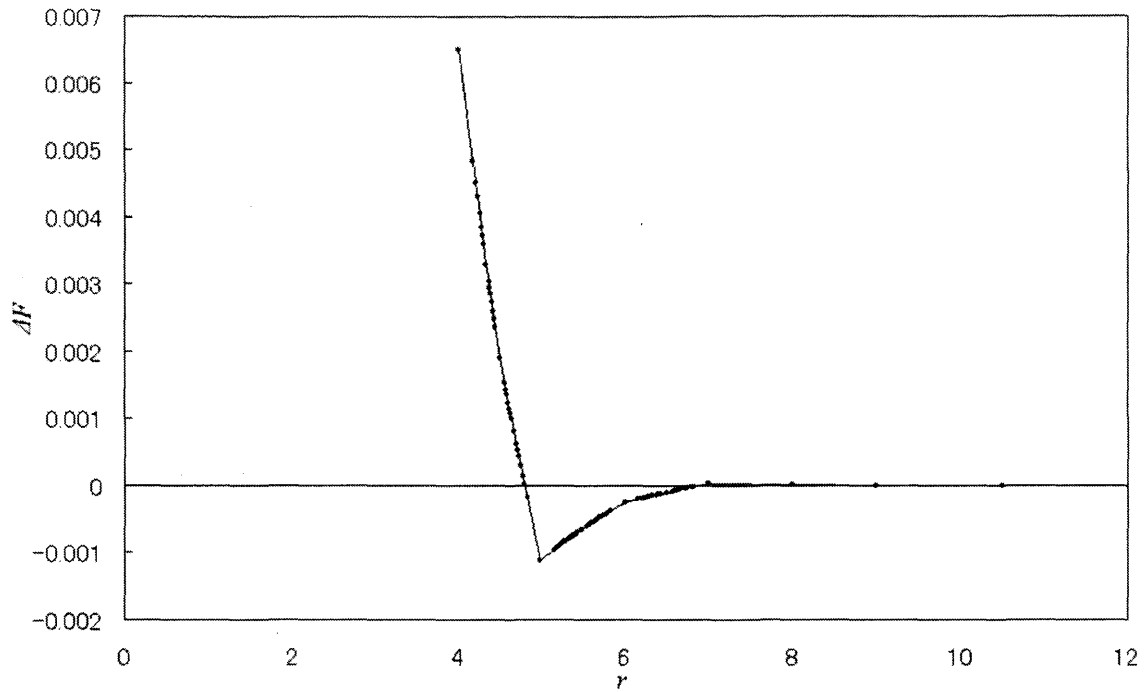


Fig.5.5(a) 電場  $e_0$  における自由エネルギー密度のソリトン間距離依存性

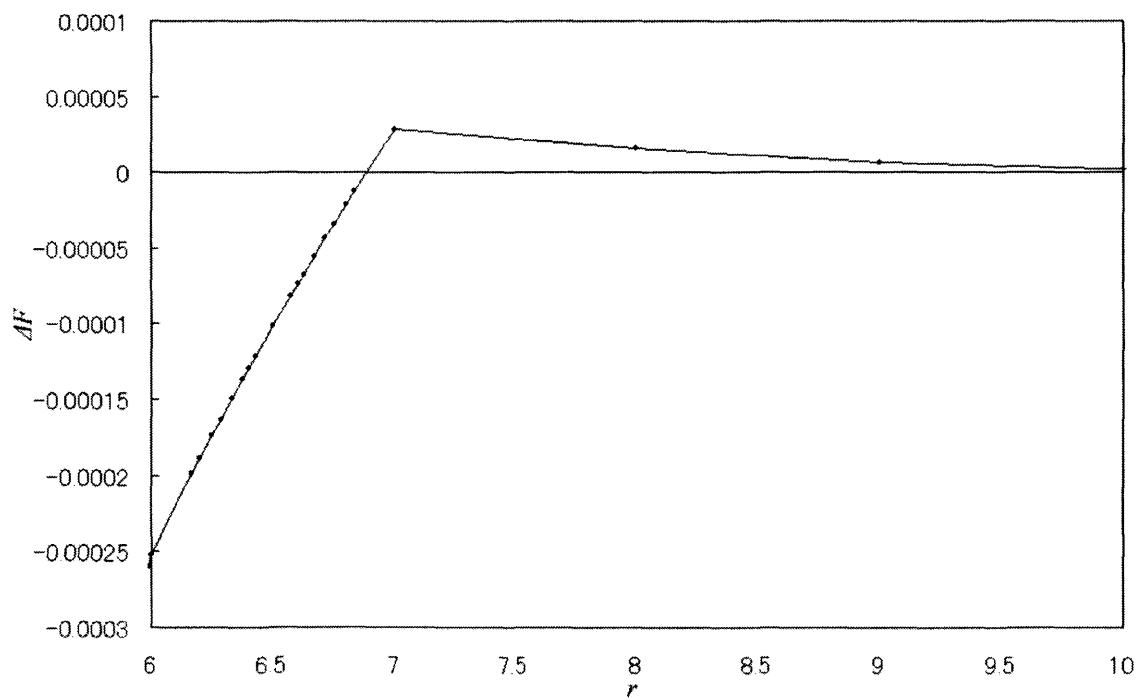


Fig.5.5(b) Fig.5.5(a)における  $r = 6 \sim 10$  付近の拡大

## 2. $\text{SmC}_\alpha^*$ 相での $\delta = 2\pi/4$ における温度依存性

前節では  $\delta = 2\pi/4$  における温度  $t = -8$  での計算結果を記述し、 $\text{SmC}_\alpha^*$ 相の傾き角  $\theta$  の変動を許した場合の相転移やソリトン、そしてソリトン間相互作用などのふるまいについて論じたが、ここでは  $\text{SmC}_\alpha^* \cdot \text{SmC}$  相転移の温度依存性について論じる。

まずは  $\delta = 2\pi/4$  における各温度  $t$  での  $\text{SmC}_\alpha^* \cdot \text{SmC}$  相転移が起きる転移電場  $e_c$  をプロットしたグラフ、即ち相転移の相図を Fig.5.6 に示す。この数値結果は  $\text{SmC}^* \cdot \text{SmC}$  相転移と同様の結果と言える。

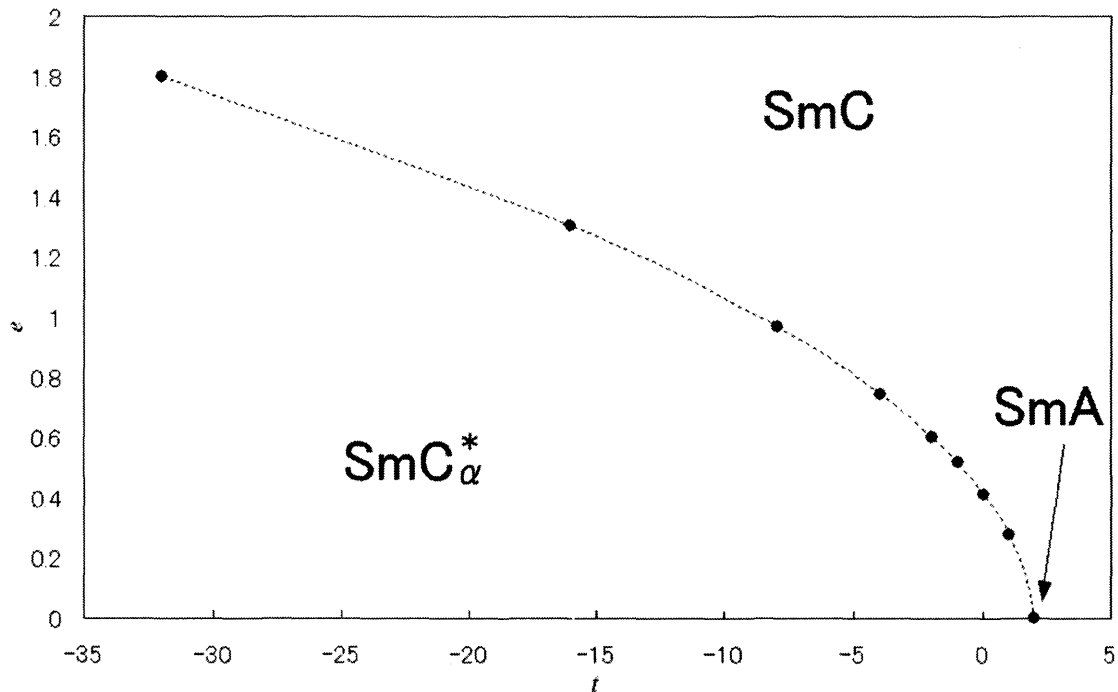


Fig.5.6  $\delta = 2\pi/4$  における相転移の相図

次に自由エネルギー密度  $\Delta F$  の波数依存性について様々な温度で調べ、 $\Delta F - q$  関係の温度依存性について述べる。 $\delta = 2\pi/4$  における各温度  $t = 1, 0, -1, -2, -8, -32$  の転移電場での自由エネルギー密度の波数依存性を比較したグラフを Fig.5.7 に示す。ここで●でプロットされたデータの温度は  $t = 1$ 、▲は  $t = 0$ 、■は  $t = -1$ 、◆は  $t = -2$ 、×は  $t = -8$ 、○は  $t = -32$  の転移電場での自由エネルギー密度の波数依存性を示している。Fig.5.7 から、低温になるにつれて転移電場で安定する波数は小さくなり、また上に凸となる領域も小さくなっている。つまり低温になるにつれて引力的なソリトン間相互作用が徐々に減少し、十分低温になるとこの上に凸となる領域は消滅し全ての波数領域で下に凸となる、即ち傾

き角が一定の場合と同様にソリトン間相互作用は斥力でのみ作用するようになり、二次転移となる。よって傾き角 $\theta$ の変動を許した場合でも、十分低温では $\theta$ の変動が相転移に対して影響を与えなくなることがわかり、 $\theta$ が一定の場合と同様のふるまいを示すことがわかった。

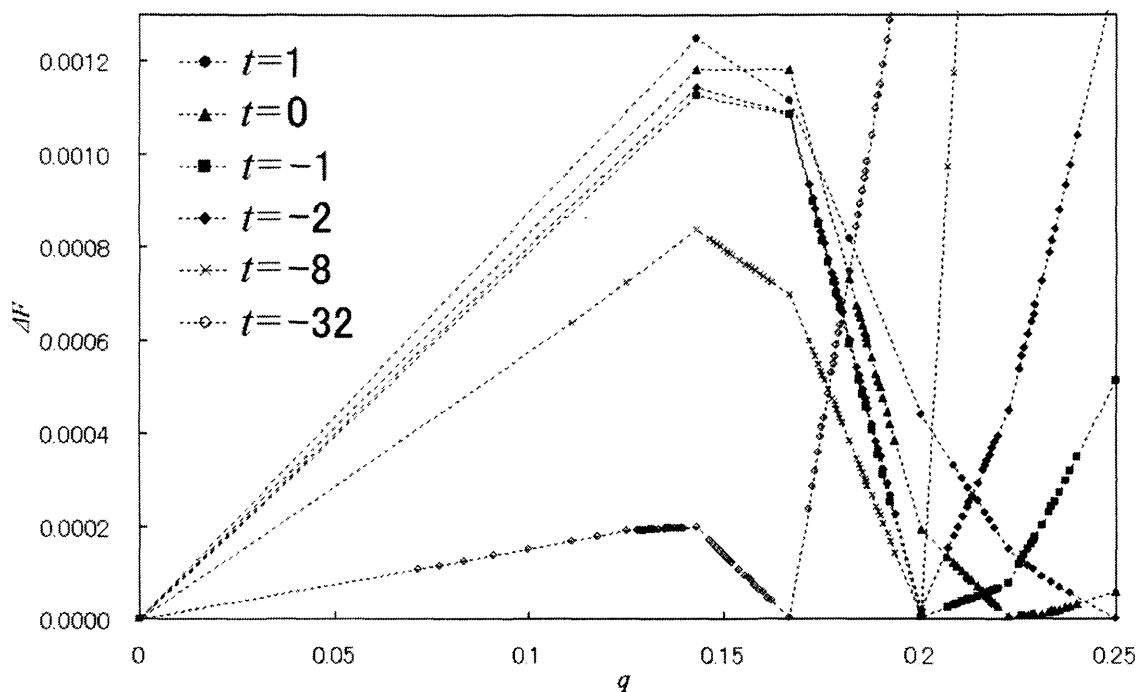


Fig.5.7  $\delta = 2\pi/4$ における各温度での自由エネルギー密度の波数依存性の比較

上述の数値結果をふまえて、次は $\delta = 2\pi/4$ における各温度での波数の電場依存性を比較する。Fig.5.7と同様の各温度 $t$ での波数の電場依存性をFig.5.8(a)に示す。ここで二次転移となる傾き角 $\theta$ が一定の場合での波数の電場依存性も同時に示した。さらにFig.5.8(a)に示された階段状構造を拡大したグラフをFig.5.8(b)に示す。Fig.5.8(a)及び(b)から、低温になるにつれて、二次転移となる $\theta$ が一定の場合の階段状構造に近づいていることが確認でき、即ち十分低温になると $\theta$ が一定の場合の階段状構造に帰着することがわかる。

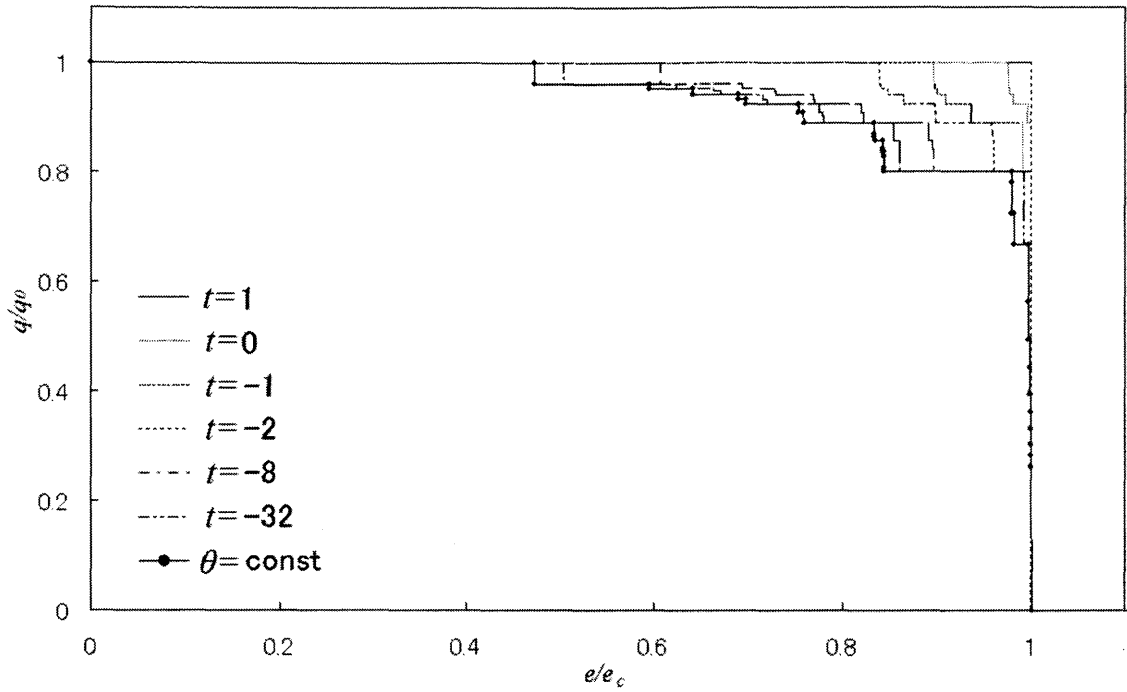


Fig.5.8(a)  $\delta = 2\pi/4$ における各温度での波数の電場依存性と傾き角 $\theta$ が一定の場合の波数の電場依存性の比較

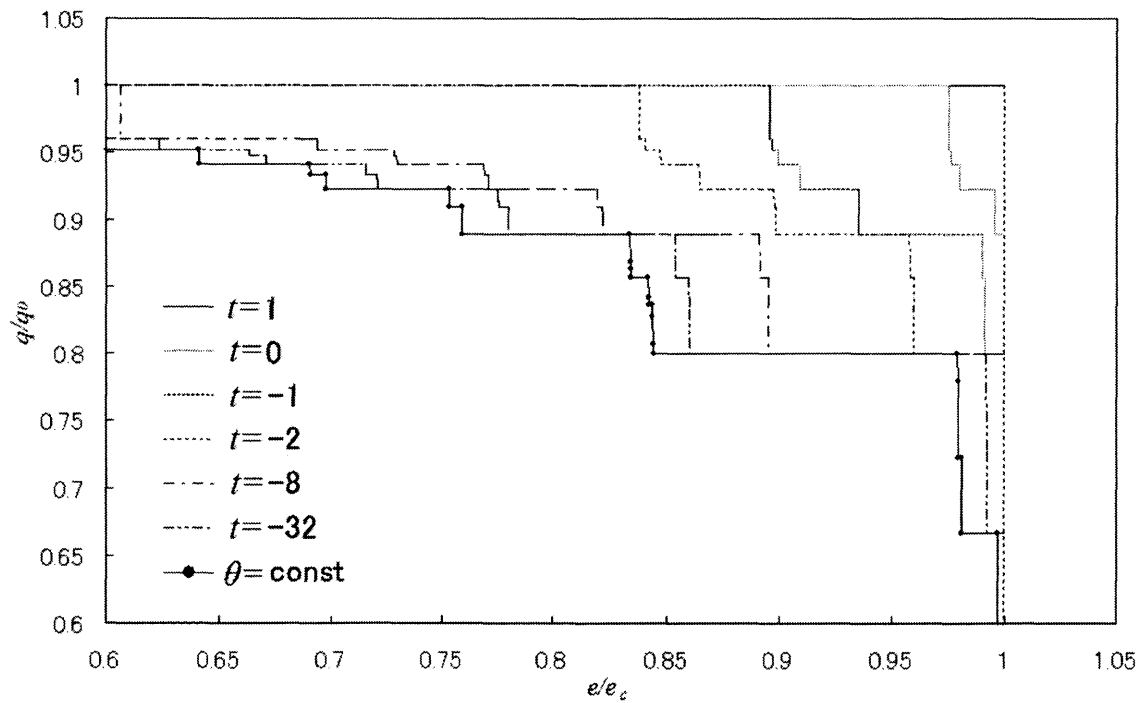


Fig.5.8(b) Fig.5.8(a)の階段状構造の拡大

このような波数の電場依存性から、転移電場  $e_c$  で波数  $q$  は各温度で不連続に 0 へと変化するが、この転移電場における各温度での転移波数  $q_c$  について Fig.5.9 に示す。温度  $t$  の減少に伴い転移波数  $q_c$  は減少しているが、Fig.5.9 では  $q_c - t$  関係の傾向はわかりにくいため、後述の  $\delta = 2\pi/8$  での計算結果で詳しく論ずる。

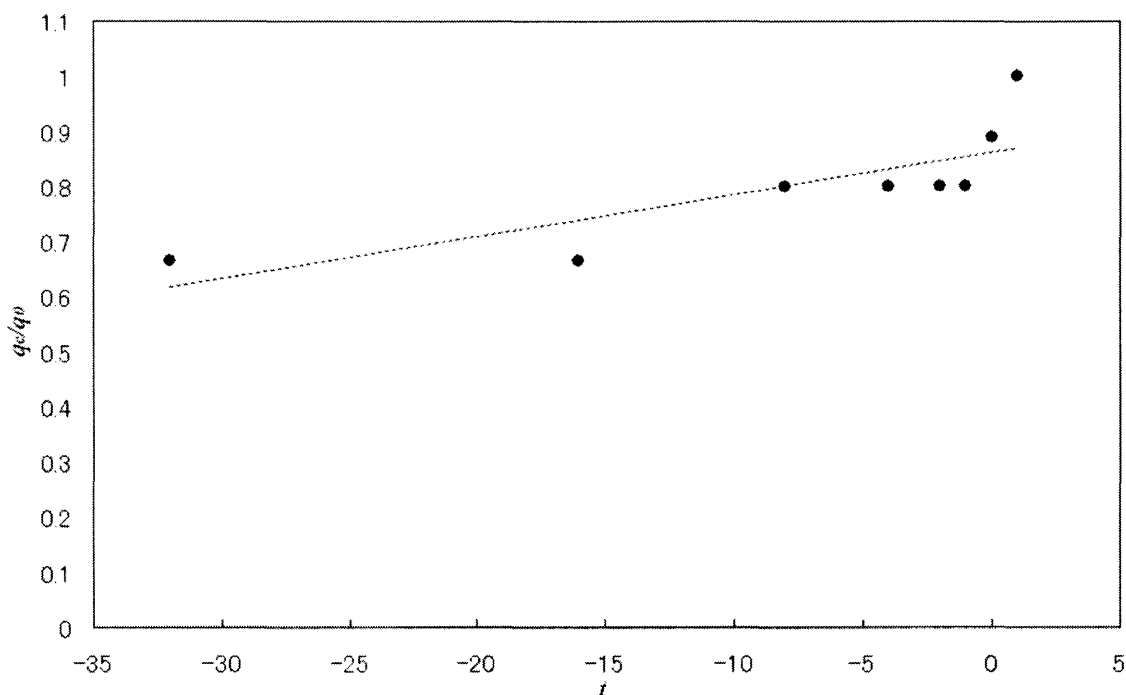


Fig.5.9  $\delta = 2\pi/4$  における転移波数  $q_c$  の温度依存性

以上の数値結果から、傾き角  $\theta$  の変動を許した場合にはソリトン間相互作用は引力的に働き一次転移となるが、低温になるにつれてその引力的効果が減少していることがわかり、即ちソリトン間相互作用が斥力のみであり二次転移となる傾き角  $\theta$  が一定の場合における  $\text{SmC}_\alpha^* - \text{SmC}$  相転移へと移行していることがわかった。この相転移特性の変化傾向は  $\text{SmC}^* - \text{SmC}$  相転移と同様のふるまいと言える。しかし  $\delta = 2\pi/4$  では相転移特性の移行は確認できたが実際に傾き角  $\theta$  が一定の場合と同様なものへの変化は実証できなかったため、次節の  $\delta = 2\pi/8$  における  $\text{SmC}_\alpha^*$  相の計算結果で詳しく論ずる。

### 3. $\text{SmC}_\alpha$ \*相での $\delta = 2\pi/8$ における計算結果

前節では離散性が極めて顕著な  $\delta = 2\pi/4$  の場合について考慮したが、ここでは離散性がやや弱い  $\delta = 2\pi/8$  における計算結果を記述し、前述の  $\delta = 2\pi/4$  との比較を論ずる。

初めに  $\delta = 2\pi/8$  における各温度  $t = 1, 0, -1$  の転移電場  $e_c$  での自由エネルギー密度の波数依存性を Fig.5.10 に示す。ここで  $\delta = 2\pi/8$  での数値結果である Fig.5.10 と、 $\delta = 2\pi/4$  での数値結果である Fig.5.7 を比較すると、 $\delta = 2\pi/4$  では凸の形が鋭角的となるのに対して、 $\delta = 2\pi/8$  では極めて曲線的となっている。さらに  $\delta = 2\pi/8$  では引力効果の減少、即ち傾き角が一定の場合へと帰着する温度が  $\delta = 2\pi/4$  に対して極めて高い結果が得られた。つまり  $\delta$  が小さくなる、即ち  $\text{SmC}_\alpha$ \*相の螺旋構造のピッチが長くなるにつれてソリトン間相互作用が引力的に働く温度領域が小さくなることがわかった。

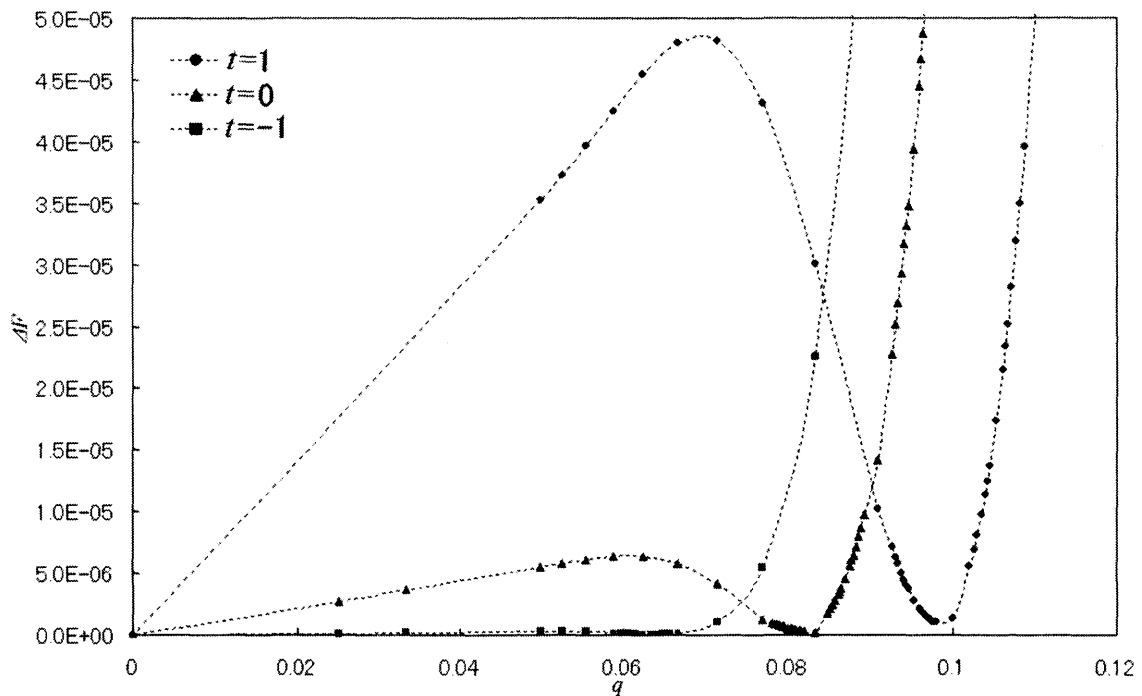


Fig.5.10  $\delta = 2\pi/8$  における温度  $t = 1, 0, -1$  の転移電場での自由エネルギー密度の波数依存性

ここで  $\delta = 2\pi/8$  における各温度  $t$  での  $\text{SmC}_\alpha$ \*- $\text{SmC}$  相転移が起きる転移電場  $e_c$  をプロットしたグラフ、即ち相転移の相図を Fig.5.11 に示す。 $\delta = 2\pi/8$  における相図である Fig.5.11 と、 $\delta = 2\pi/4$  における相図である Fig.5.6 を比較すると、 $\delta$  が小さくなると  $\text{SmC}_\alpha$ \*- $\text{SmC}$  相転移が起きる転移電場  $e_c$  の値も小さくなっている。



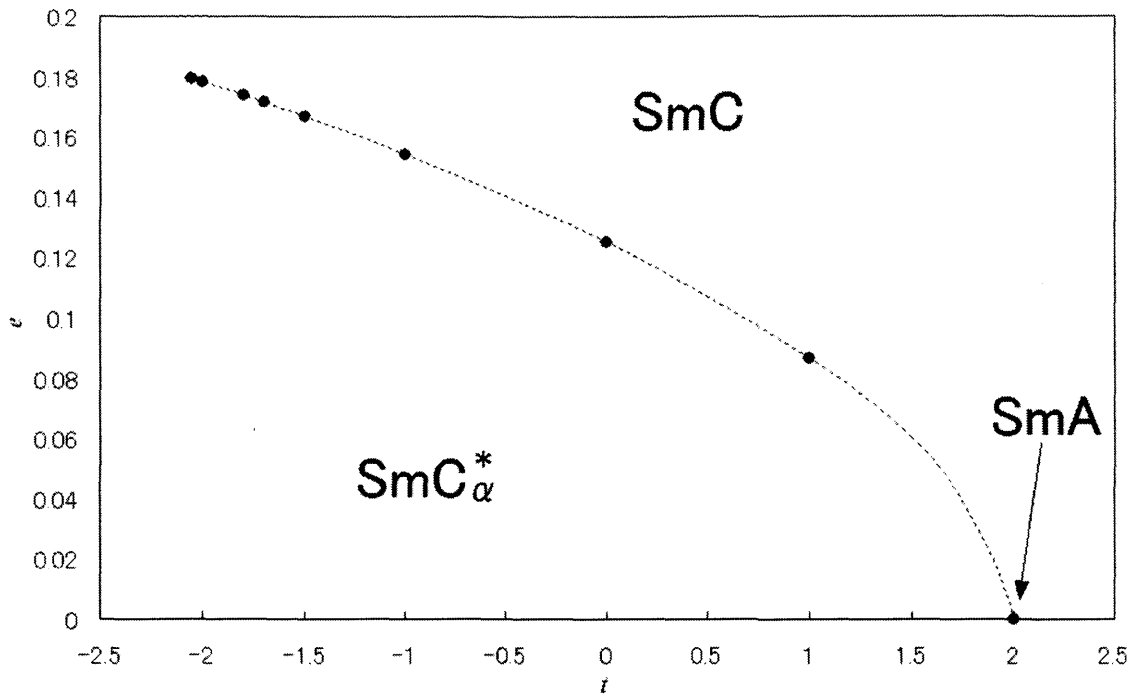


Fig.5.11  $\delta = 2\pi/8$ における相転移の相図

さらに電場  $e = e_0$  における各温度での自由エネルギー密度  $\Delta F$  のソリトン間距離  $r$  依存性を Fig.5.12 に示す。Fig.5.12 から、低温になるにつれて引力効果の減少が確認でき、十分低温になると全ての  $r$  領域で斥力となる傾き角  $\theta$  が一定の場合に帰着することがわかった。

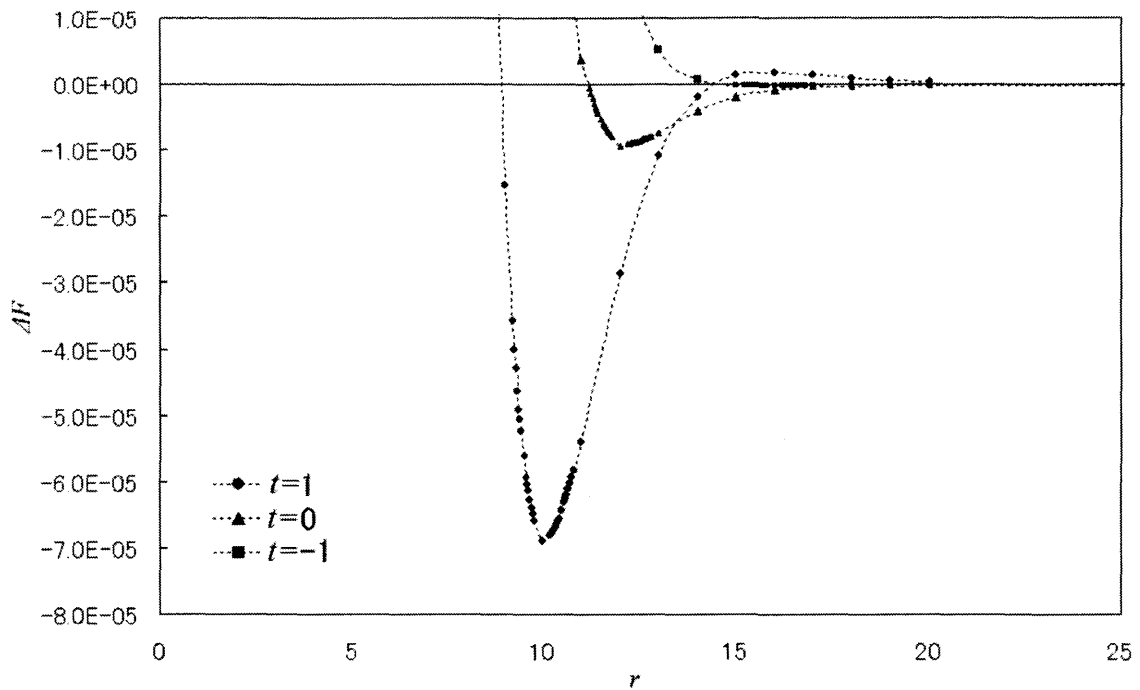


Fig.5.12  $\delta = 2\pi/8$ における温度  $t=1, 0, -1$  の電場  $e_0$  での自由エネルギー密度のソリトン間距離依存性

次に  $\delta = 2\pi/8$  における各温度  $t=1, 0, -1$  での波数の電場依存性を Fig.5.13 に示す。 $\delta = 2\pi/8$  における波数の電場依存性である Fig.5.13 と、 $\delta = 2\pi/4$  における波数の電場依存性である Fig.5.8(a)を比較すると、 $\delta$  が小さくなると階段状構造は曲線形に近づいていることが確認でき、即ち SmC\*相の波数の電場依存性に近づいていることがわかった。

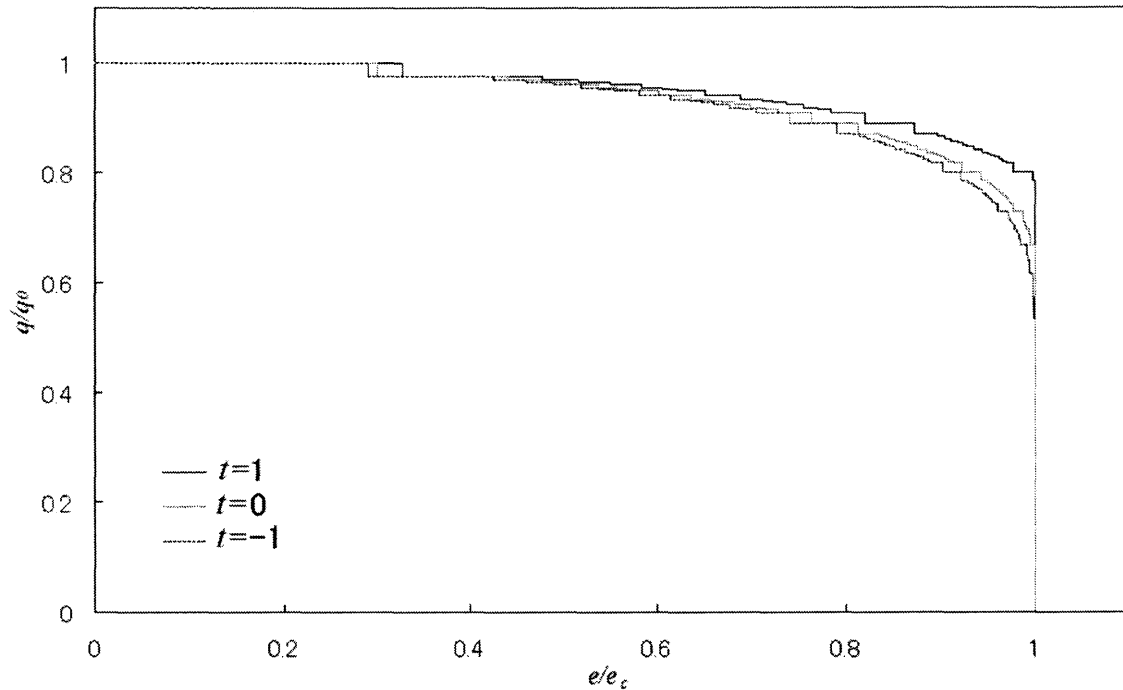


Fig.5.13  $\delta = 2\pi/8$ における各温度での波数の電場依存性

Fig.5.13の数値結果から $\delta = 2\pi/8$ における転移波数 $q_c$ の温度依存性を得ることができ、その結果をFig.5.14に示す。ここでFig.5.14の実線は各数値結果の近似曲線を表している。Fig.5.14から、 $\text{SmC}_\alpha^*$ - $\text{SmC}$ 相転移が一次転移となる温度領域と、二次転移となる温度領域の境界を確認することができ、 $t \cong -2.5$ がその境界である。即ち $\delta = 2\pi/8$ の $\text{SmC}_\alpha^*$ 相では $-2.5 < t \leq 2$ で一次転移となり、 $t < -2.5$ で二次転移となると判断される。次に低温で二次転移であることを $t = -4$ の解析で示す。

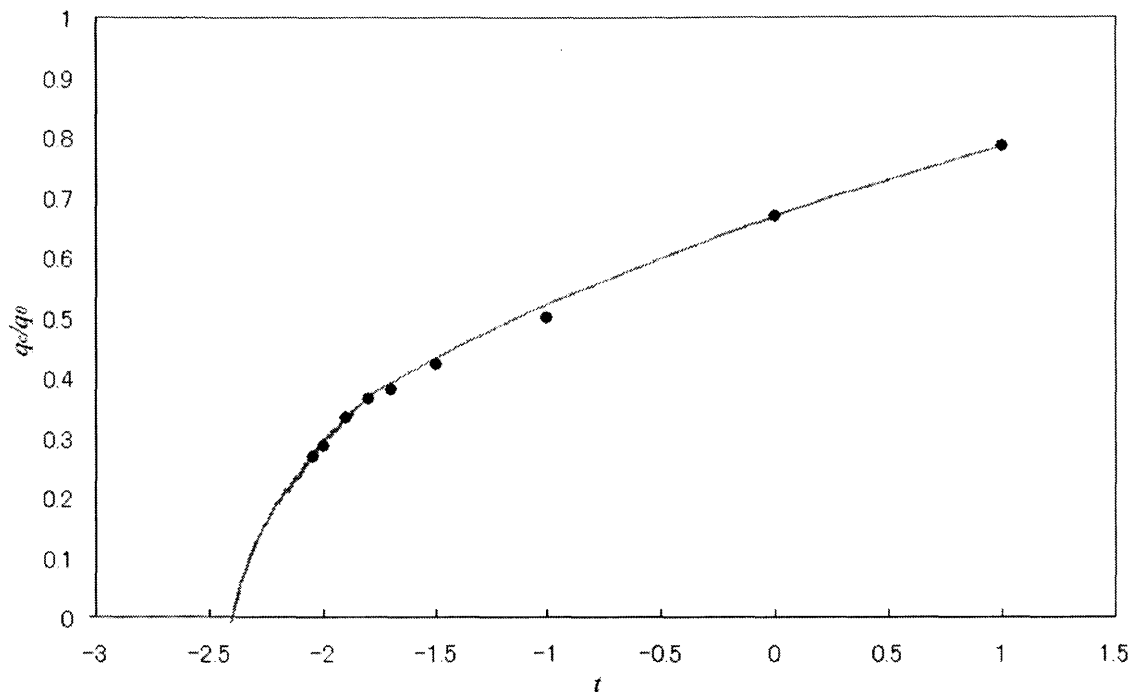


Fig.5.14  $\delta = 2\pi/8$ における転移波数 $q_c$ の温度依存性

第三章で述べたが、SmC\*-SmC相転移において低温領域では傾き角 $\theta$ の変化が相転移に影響を及ぼすことが無くソリトン間相互作用は斥力として働き二次転移となるが、この時ソリトンの一様解への緩和過程は指数減衰となる。そして高温領域では $\theta$ の変化に起因してソリトン間相互作用は引力として働き一次転移となり、この温度領域でのソリトンの緩和過程は振動減衰となる(Fig.3.8)。ここで離散系であるSmC<sub>a</sub>\*相においてこのソリトンの一様解への緩和過程がどのように対応しているかを論ずる。Fig.5.14において転移波数が有限な値( $q_c = 1/12$ )を持ち一次転移となることが確認できた温度 $t = 0$ と、転移波数が0、即ち二次転移となる可能性が極めて高い温度 $t = -4$ でのソリトンの一様解への緩和過程を述べる。まず $t = -4$ における波数 $q = 1/100$ のソリトン格子の方位角 $\varphi$ 、及び傾き角 $\theta$ の形をそれぞれ Fig.5.15(a), Fig.5.15(b)に示す。さらに Fig.5.15(a)における波数 $i = 0 \sim 50$ の領域と、 $i = 50 \sim 100$ の領域の対数グラフをそれぞれ Fig.5.15(c), 及び Fig.5.15(d)に示す。ここで Fig.5.15(c)及び(d)の実線は現れたソリトンに対応させた指数関数から得られた対数データである。Fig.5.15(c)及び(d)からソリトン中心では実線とのずれが発生するが、その領域以外では指数関数と一致していることからソリトンの一様化への緩和は指数減衰していることがわかった。さらに $t = -4$ における転移電場 $e_c$ 、及びその近傍の電場での自由エネルギー密度の波数依存性を Fig.5.16 に示すが、全ての波数において下に凸となっていることが確認でき、即ち $t = -4$ においてソリトン間相互作用は斥力として働き二次転移となることがわかり、ソリトンの緩和過程との対応が得られた。

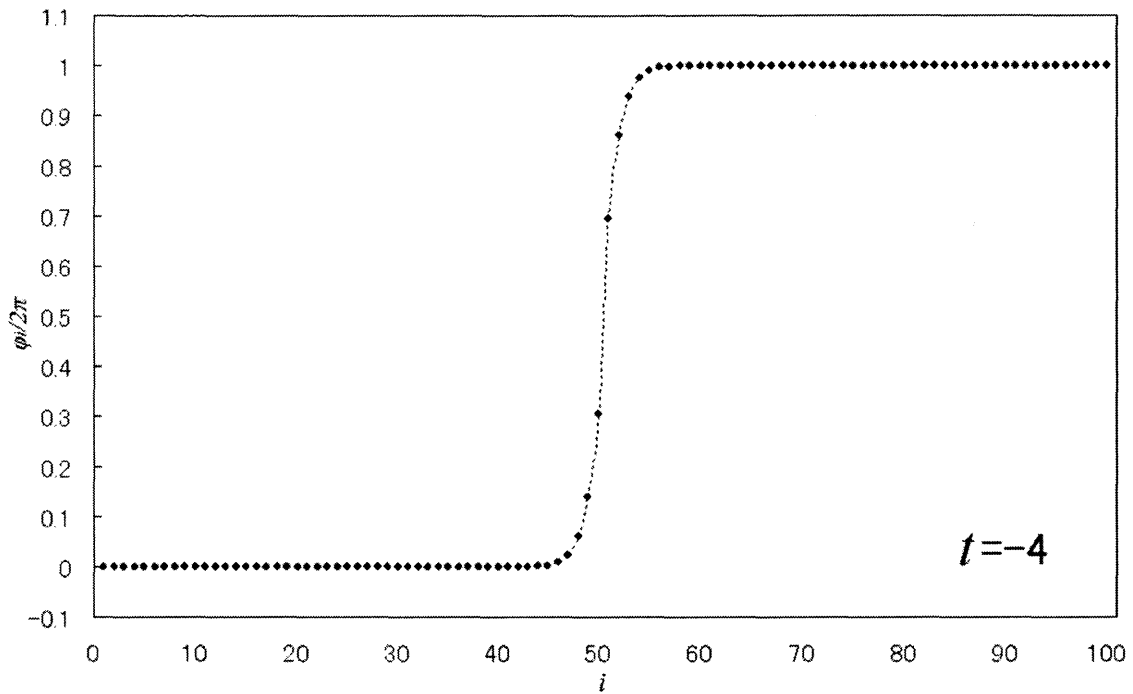


Fig.5.15(a)  $\delta = 2\pi/8$ における  $t = -4$  での波数  $q = 1/100$  のソリトン格子の方位角  $\varphi$  の形

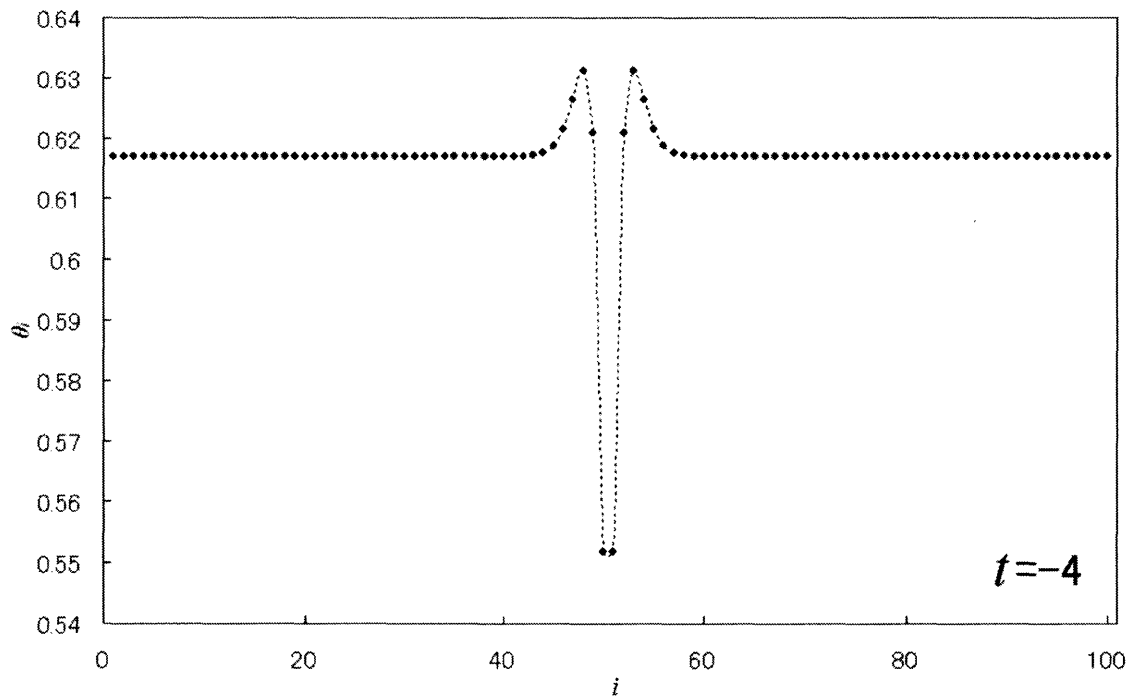


Fig.5.15(b)  $\delta = 2\pi/8$ における  $t = -4$  での波数  $q = 1/100$  のソリトン格子の傾き角  $\theta$  の形

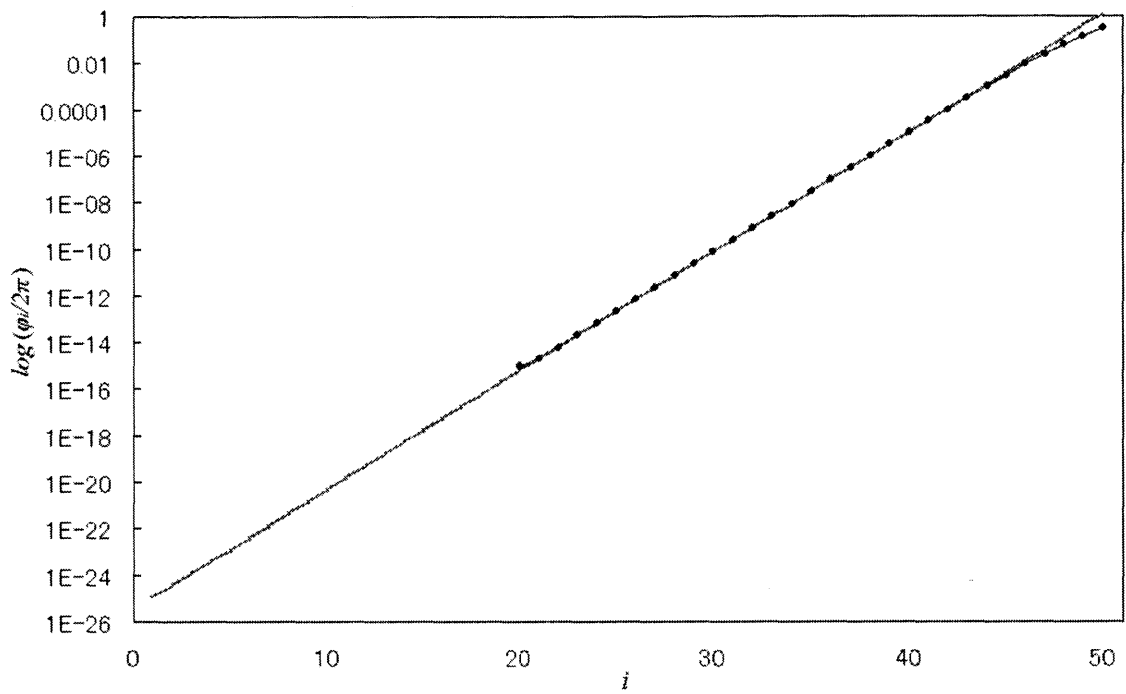


Fig.5.15(c) Fig.5.15(a)における  $i = 0 \sim 50$  領域の対数グラフ

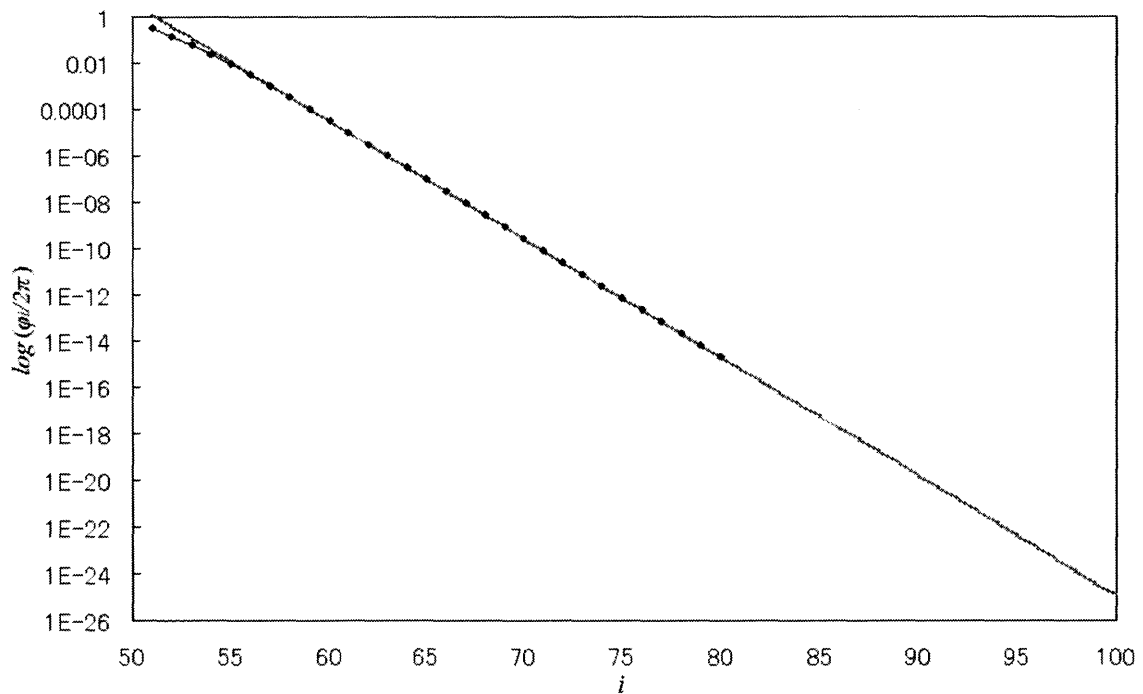


Fig.5.15(d) Fig.5.15(a)における  $i = 50 \sim 100$  領域の対数グラフ

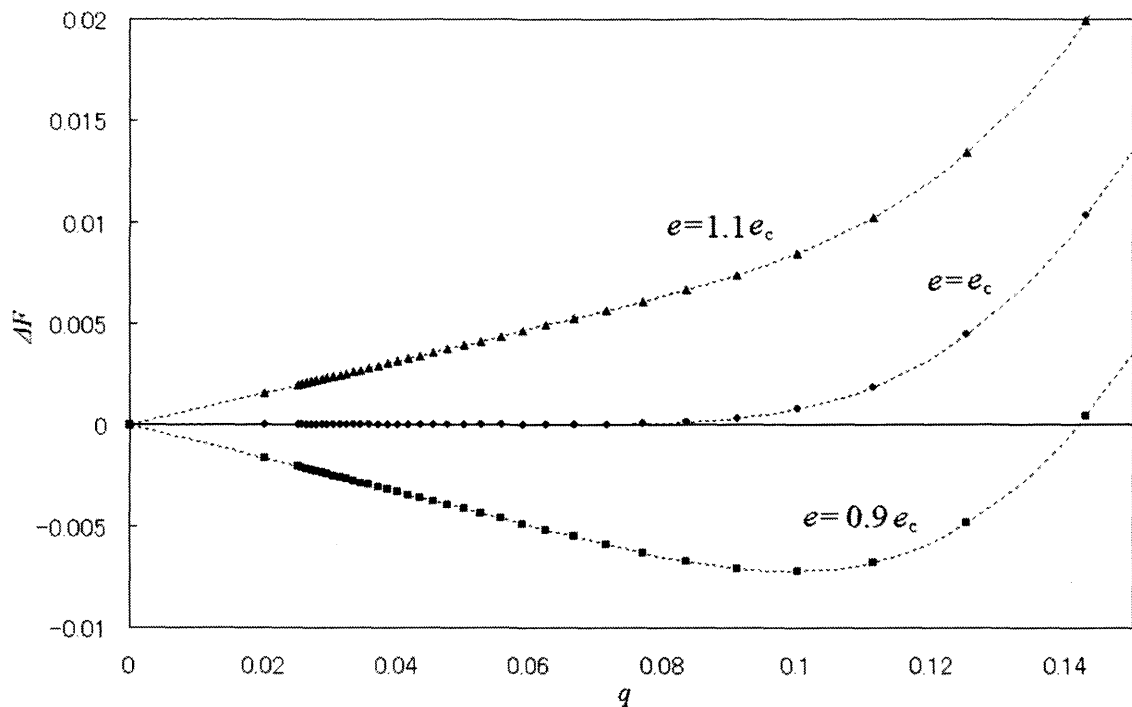


Fig.5.16  $t = -4$ における転移電場  $e_c$ , 及び転移電場近傍での自由エネルギー密度の波数依存性

一方、 $t = 0$ における波数  $q = 1/100$ の方位角  $\varphi$ , 及び傾き角  $\theta$ をそれぞれ Fig.5.17(a), Fig.5.18(a)に示す。そして Fig.5.17(a)における  $i = 0 \sim 50$ の領域の方位角  $\varphi$ のソリトンを拡大したグラフを Fig.5.17(b), Fig.5.17(c), Fig.5.17(d), Fig.5.17(e), Fig.5.17(f)に示し、さらに Fig.5.18(a)における  $i = 0 \sim 50$ の領域の傾き角  $\theta$ のソリトンを拡大したグラフを Fig.5.18(b), Fig.5.18(c), Fig.5.18(d), Fig.5.18(e), Fig.5.18(f)に示す。Fig.5.17(b)~(f), 及び Fig.5.18(b)~(f)から、ソリトンは振動減衰を起こしながら一様化へと緩和していることが確認でき、即ち  $t = 0$ において  $\text{SmC}_a^* - \text{SmC}$  相転移は一次転移でありソリトン間相互作用は引力的に働いているが、これに対応して振動減衰に変化していると考えられる。

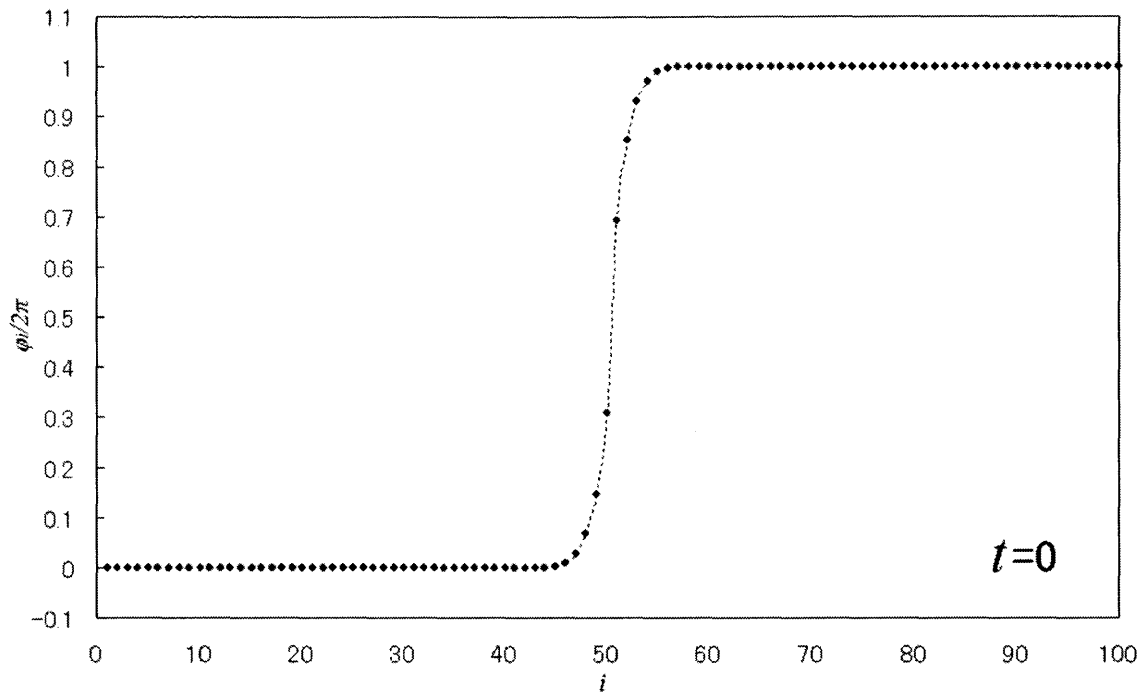


Fig.5.17(a)  $\delta = 2\pi/8$ における  $t = 0$  での波数  $q = 1/100$

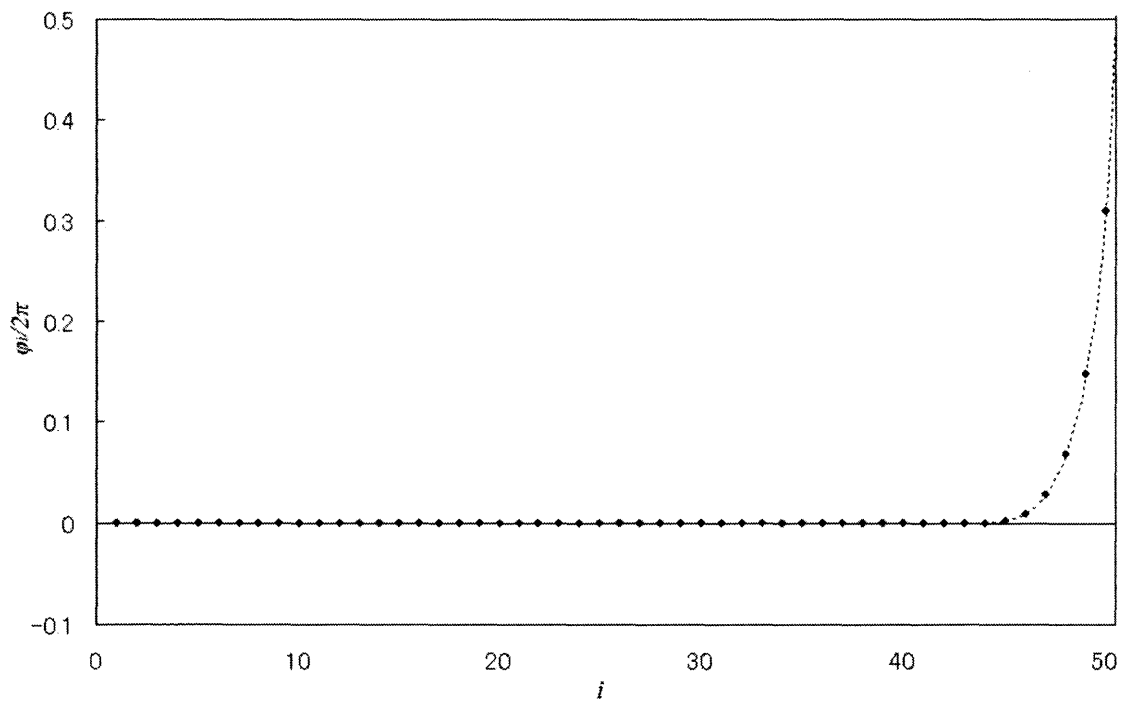


Fig.5.17(b) Fig.5.17(a)における  $i = 0 \sim 50$  領域でのソリトン格子の方位角  $\varphi$  の拡大図



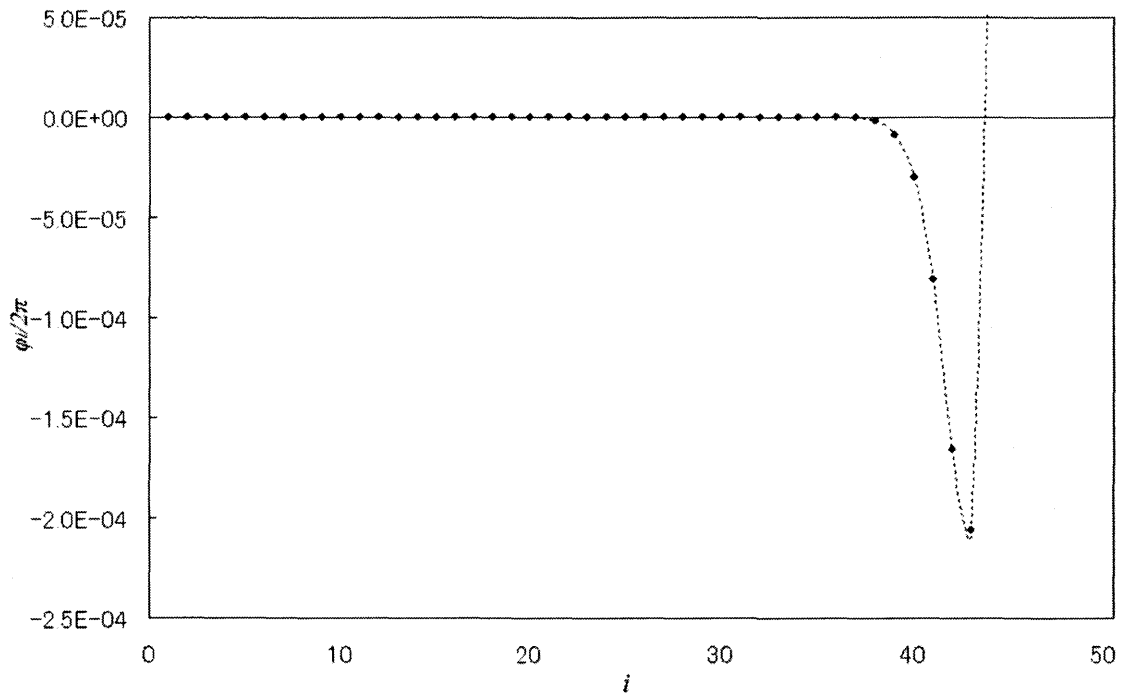


Fig.5.17(c) Fig.5.17(b)の拡大図

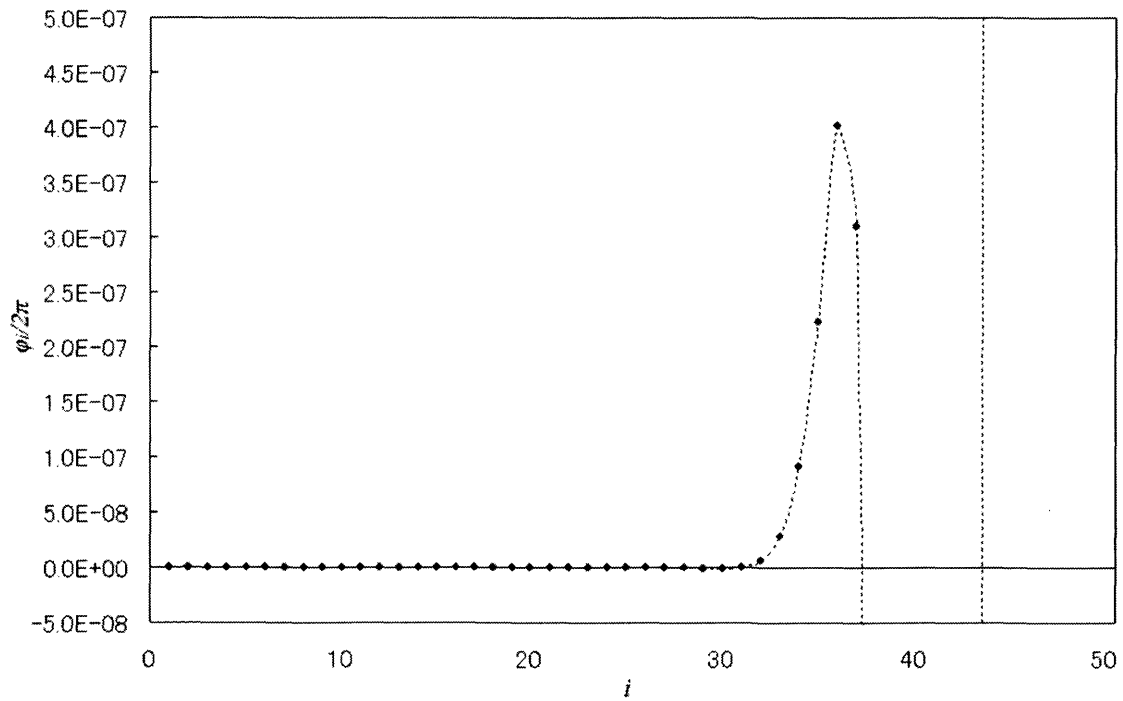


Fig.5.17(d) Fig.5.17(c)の拡大図

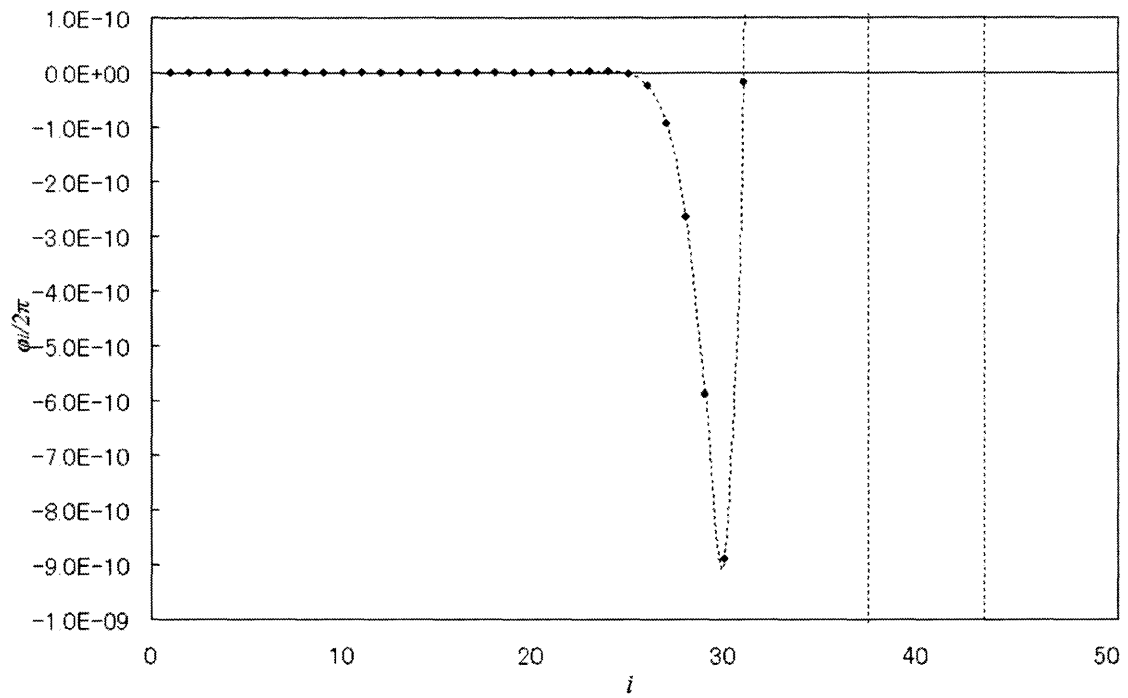


Fig.5.17(e) Fig.5.17(d)の拡大図

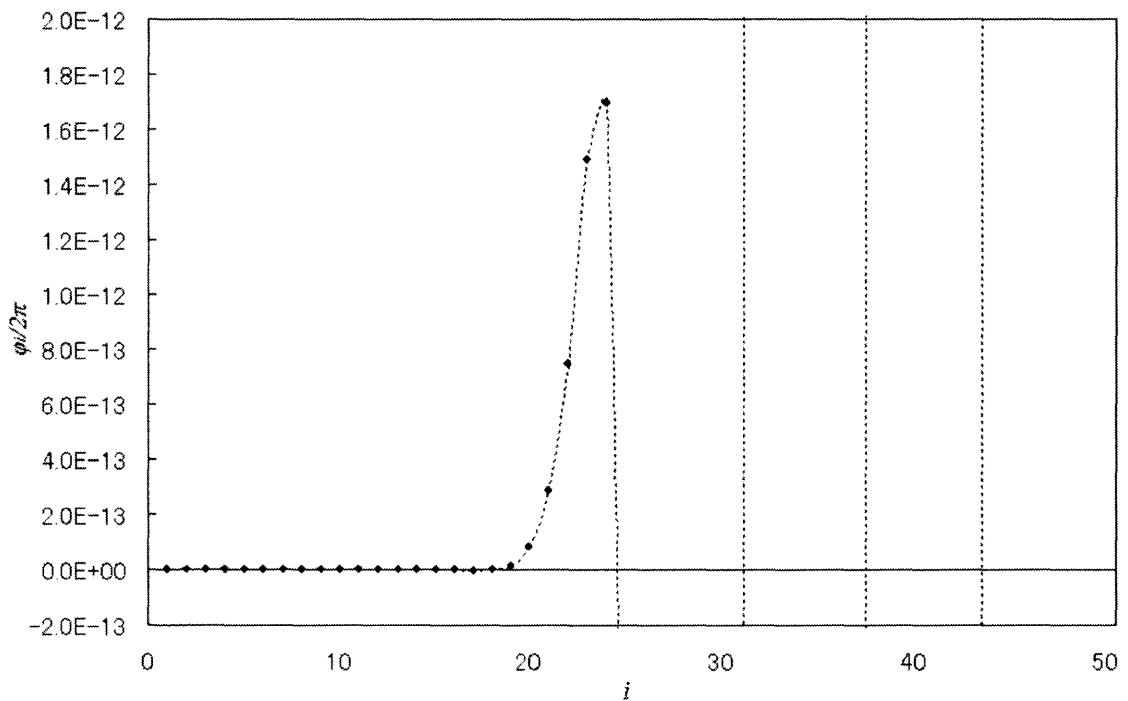


Fig.5.17(f) Fig.5.17(e)の拡大図

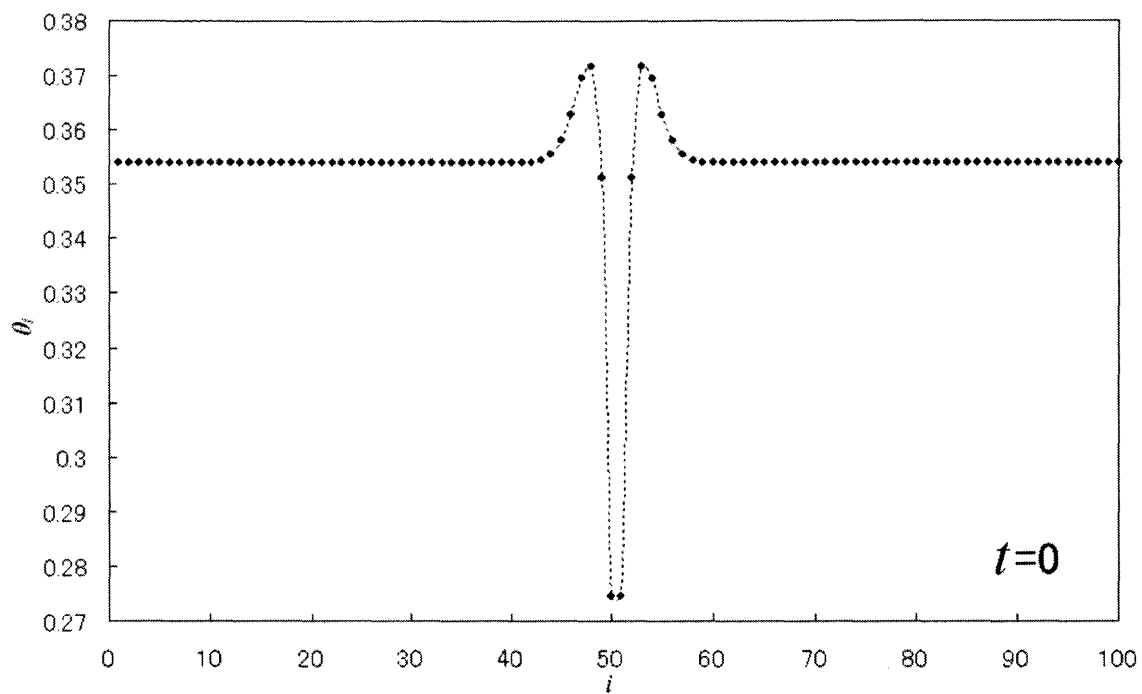


Fig.5.18(a)  $\delta = 2\pi/8$ における  $t=0$  での波数  $q = 1/100$

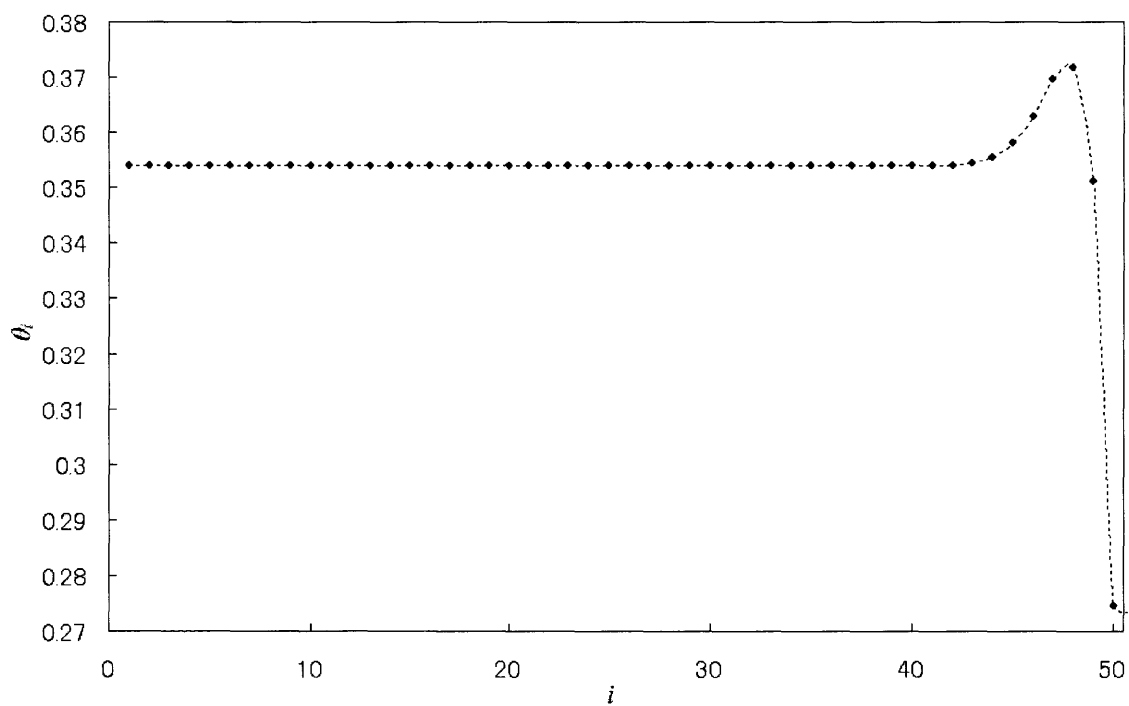


Fig.5.18(b) Fig.5.18(a)における  $i = 0 \sim 50$  領域

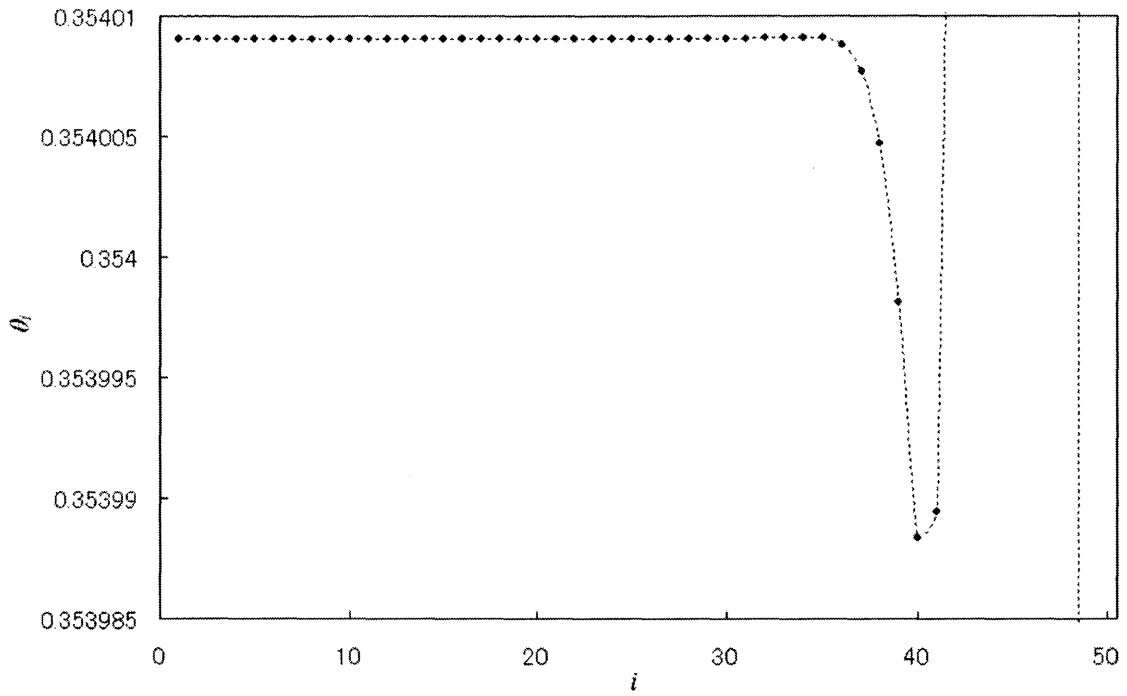


Fig.5.18(c) Fig.5.18(b)の拡大図

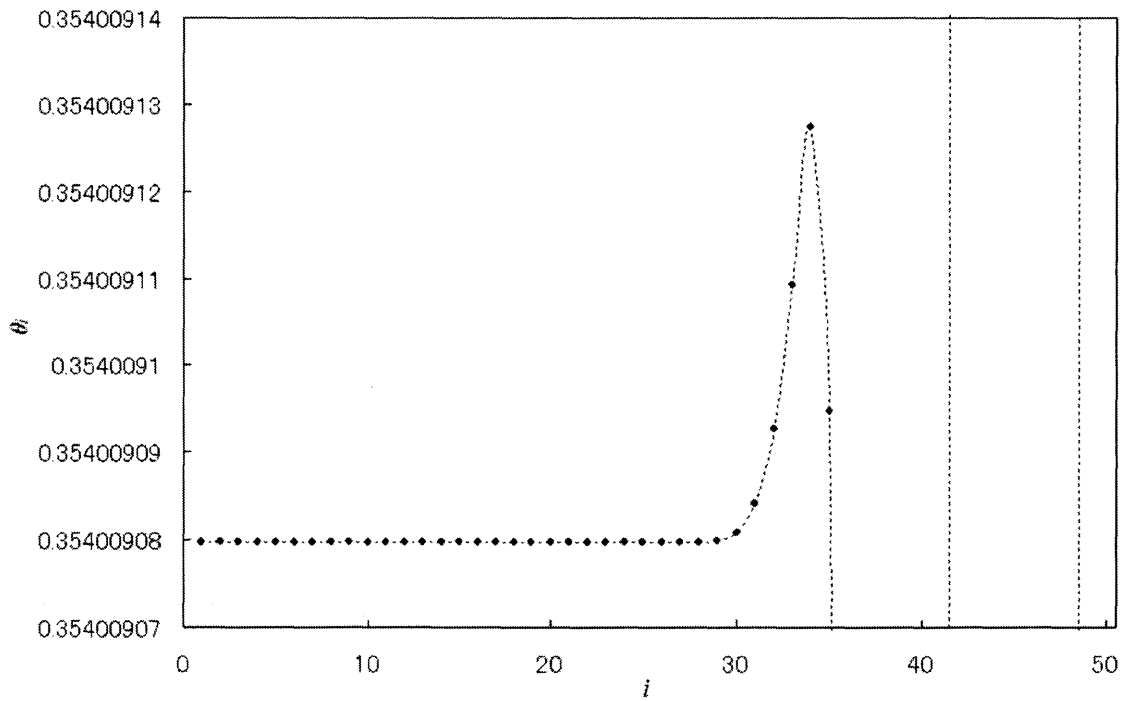


Fig.5.18(d) Fig.5.18(c)の拡大図

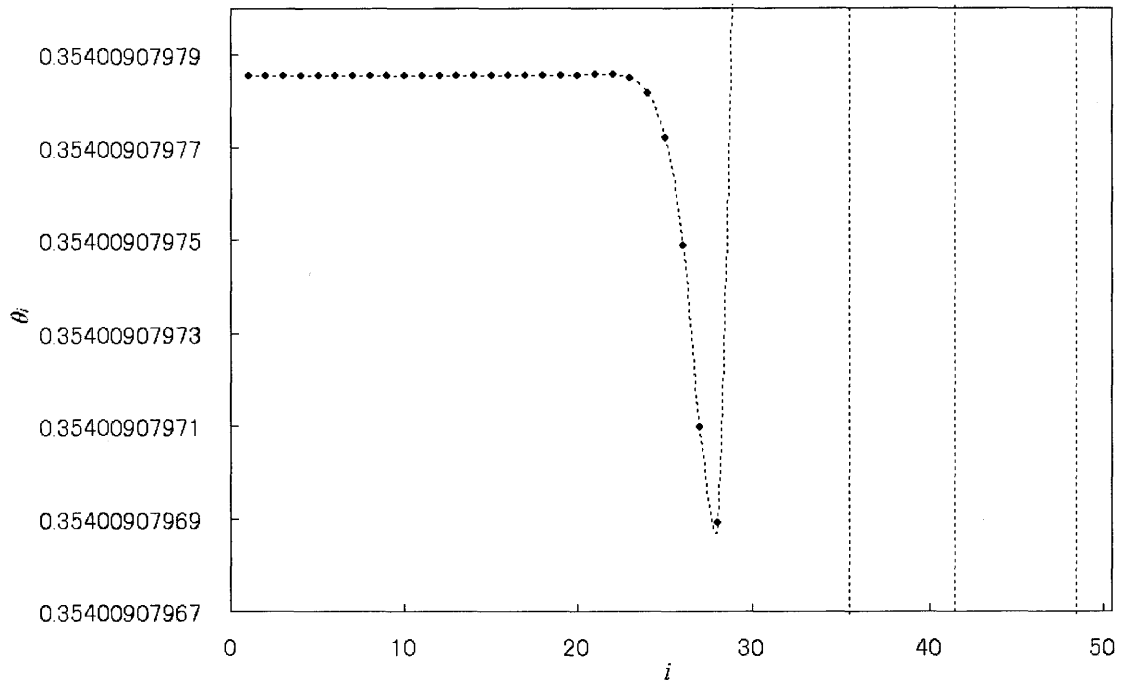


Fig.5.18(e) Fig.5.18(f)の拡大図

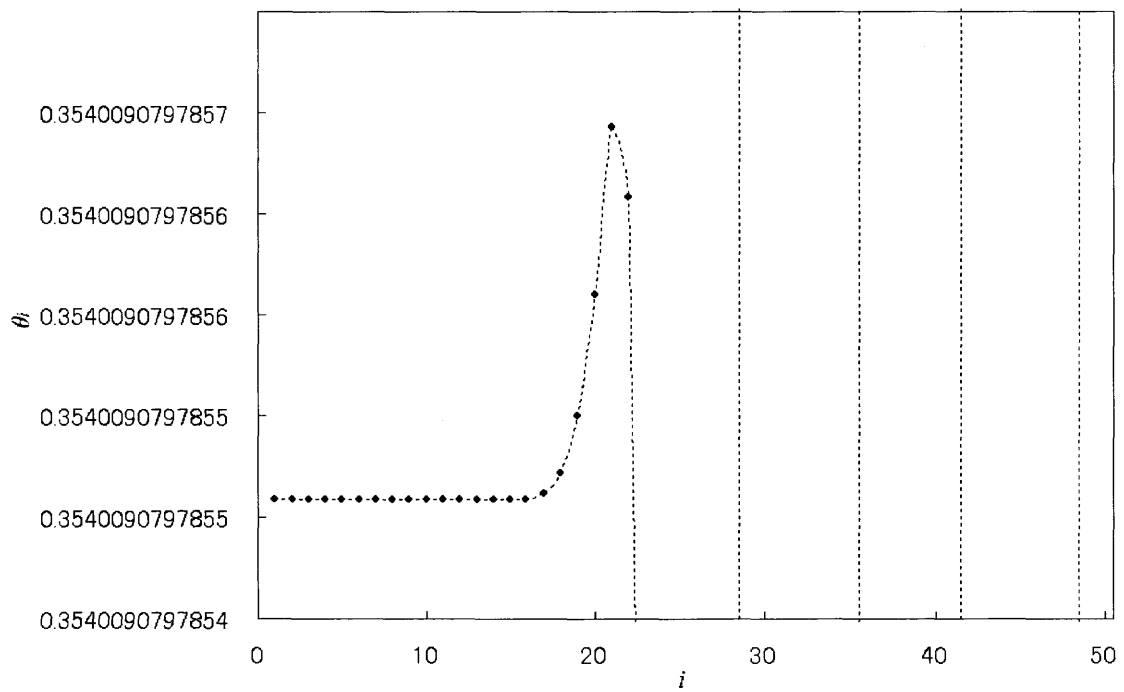


Fig.5.18(f) Fig.5.18(e)の拡大図

Fig.5.17(a)~(f)においてソリトンの緩和過程が振動減衰を起こしていることが確認できたが、ここで $t=0$ での方位角の絶対値 $|\varphi|$ の対数グラフを Fig.5.19 に示す。Fig.5.19 において二つの凸がこの振動における一周期に対応しており、一周期に存在する層数が 12 層ほどとなっていることが確認できる。これは $t=0$ における転移波数 $q_c = 1/12$ と対応していると考えられる。即ち、低温になるにつれて転移波数が減少することから(Fig.5.14)、低温になるにつれて振動周期が広がっていき、十分低温になると振動周期が消滅し指数減衰へと移行すると考えられる。

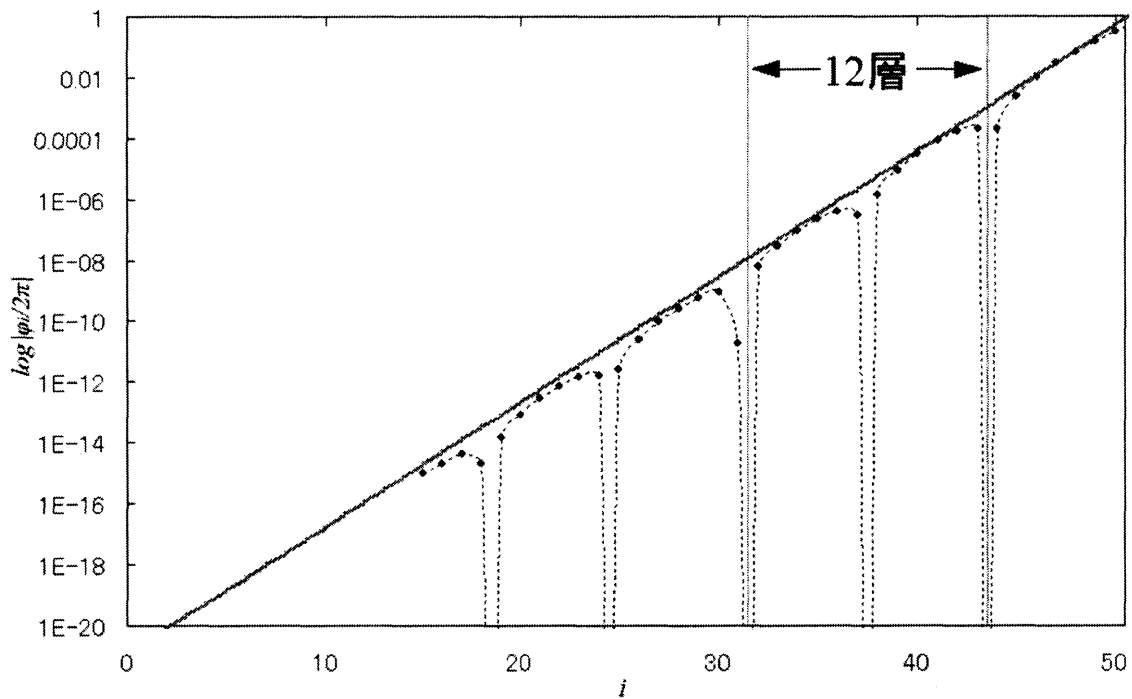


Fig.5.19  $t=0$ における $i=0\sim 50$ での方位角の絶対値 $|\varphi|$ の対数グラフ

次にソリトンの緩和過程である振動減衰と指数減衰の移行のメカニズムについて検討する。温度 $t=0\sim -5.5$ での $k$ 層に対する方位角の絶対値 $|\varphi_k|$ の対数グラフをそれぞれ Fig.5.20(a)~(n)に示す。さらに Fig.5.20(a)~(n)で表されるソリトンのデータを取るにあたり使用した電場を Fig.5.21 に示す。数値解析精度によってソリトンの左端付近のデータを得ることができなかったが、これらのグラフより温度 $t=-3.25$ 付近が振動減衰と指数減衰の境界、即ち一次転移と二次転移の境界となると考えられる。またソリトンの緩和過程は

$$\begin{aligned}\varphi_k &= A(e^{-\alpha k} + e^{-\bar{\alpha}k}) \\ &= 2A \cos(\beta k) \times e^{-\gamma k} \\ \alpha &= \gamma + i\beta\end{aligned}$$

と表すことができ、 $\gamma$ の温度依存性と $\beta$ の温度依存性を Fig.5.22 に示す。Fig.5.22 から、境界温度を境に $\gamma$ 、 $\beta$ 共にふるまいが大きく変化していることがわかり、このふるまいが一次転移と二次転移の移行に大きく関わっていると考えられる。ここで、これらの結果は Fig.5.14 に示した転移波数の温度依存性から得られた一次転移と二次転移の境界温度  $t = -2.5$  付近という結果と若干異なる結果となった。これが数値解析誤差によるものなのか、もしくは境界温度近辺では振動周期と転移波数の対応していないということなのかは今回の研究では明らかにできなかったため今後も検討を要する。

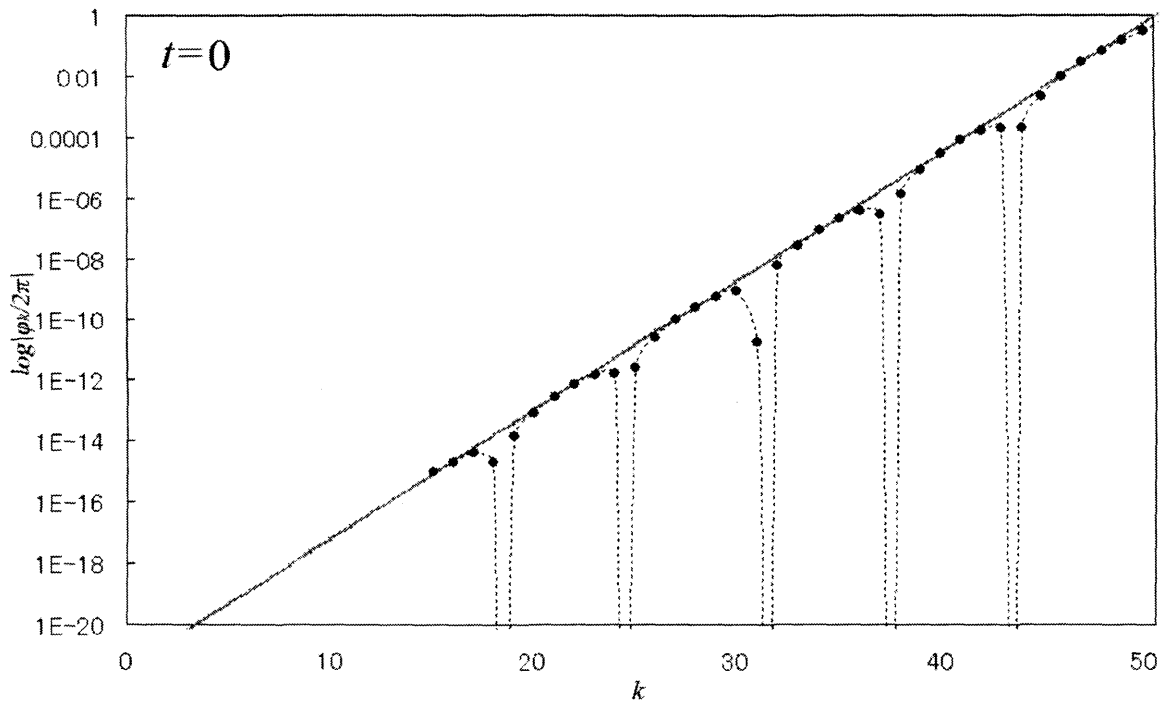


Fig. 5.20(a)  $t = 0$ における  $k = 0 \sim 50$  での方位角の絶対値  $|\varphi_k|$  の対数グラフ

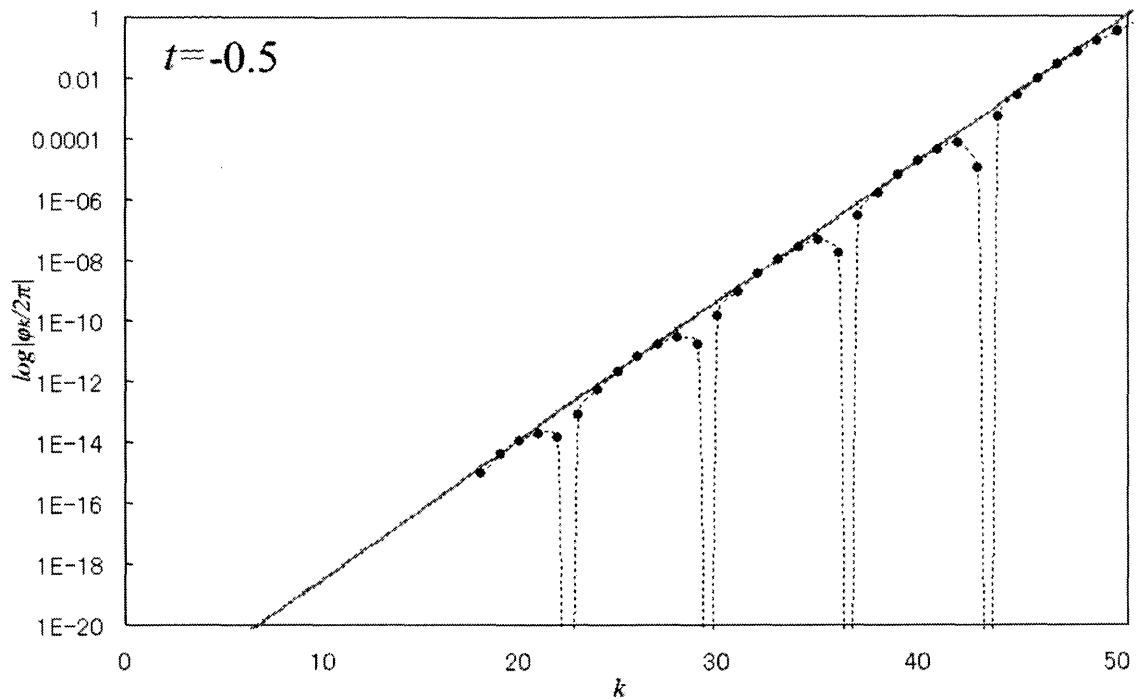


Fig. 5.20(b)  $t = -0.5$  における  $k = 0 \sim 50$  での方位角の絶対値  $|\varphi_k|$  の対数グラフ

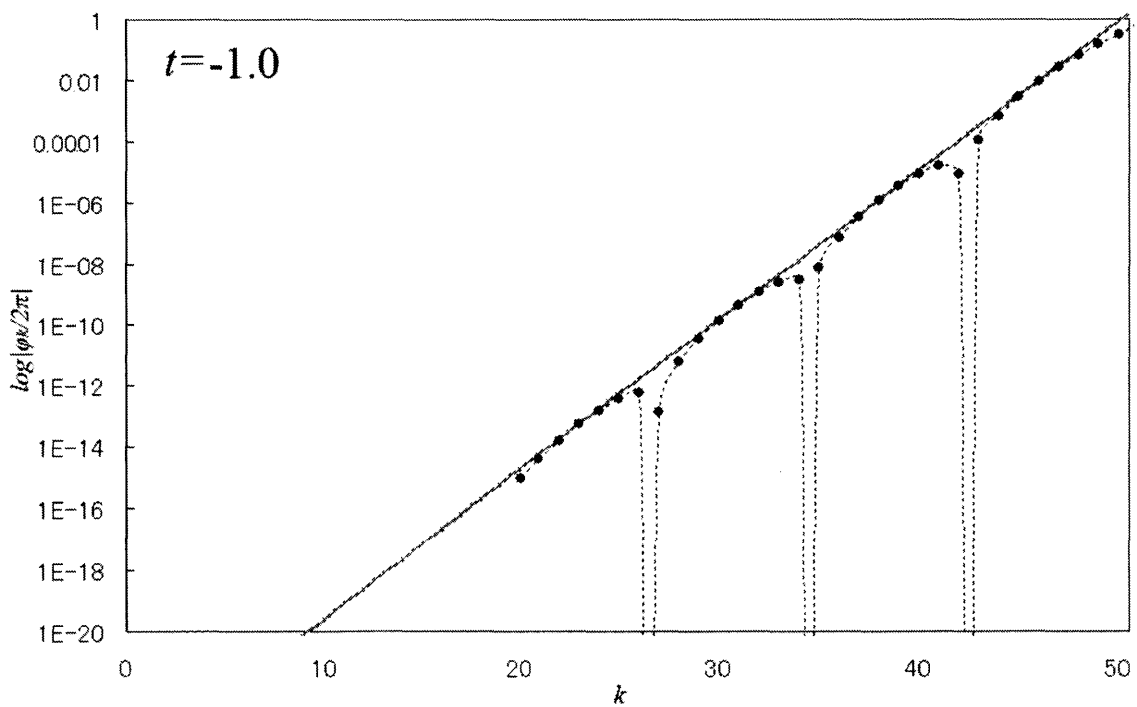


Fig. 5.20(c)  $t = -1.0$  における  $k = 0 \sim 50$  での方位角の絶対値  $|\varphi_k|$  の対数グラフ



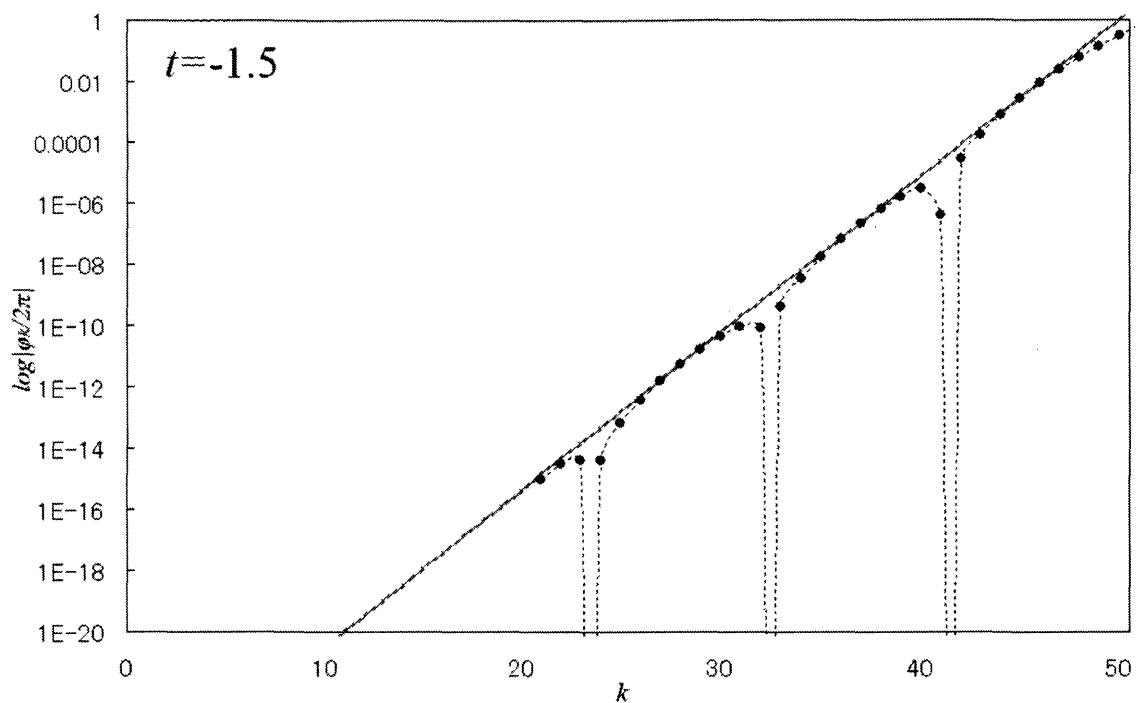


Fig. 5.20(d)  $t = -1.5$  における  $k = 0 \sim 50$  での方位角の絶対値  $|\varphi_k|$  の対数グラフ

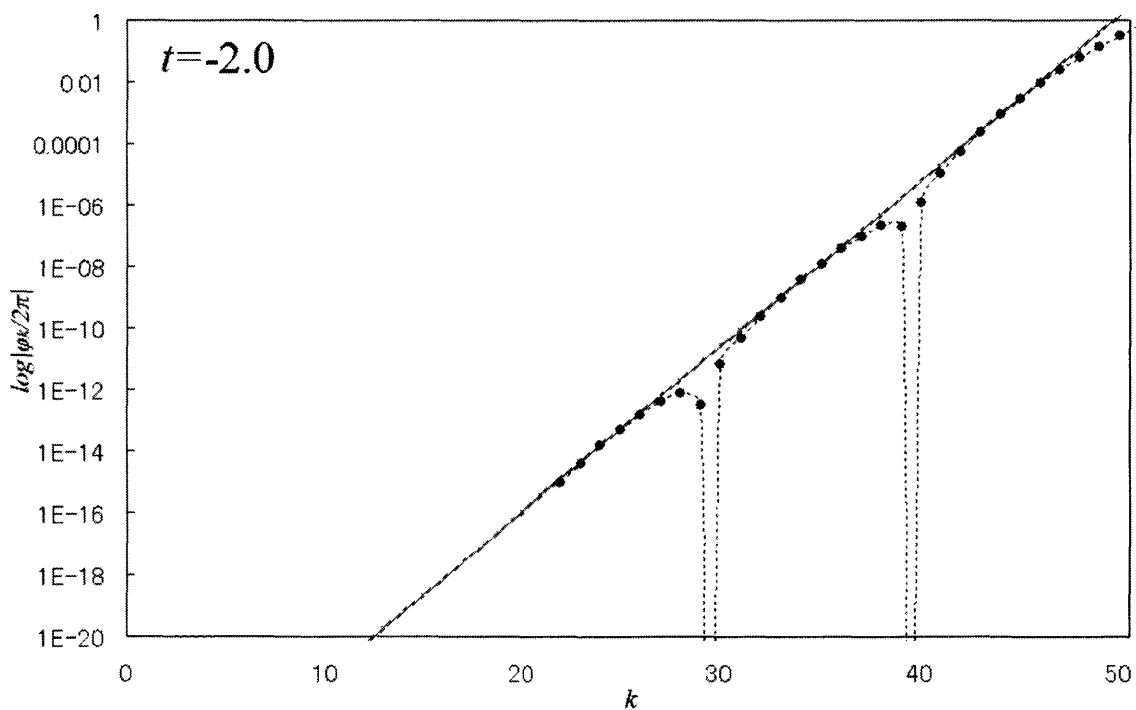


Fig. 5.20(e)  $t = -2.0$  における  $k = 0 \sim 50$  での方位角の絶対値  $|\varphi_k|$  の対数グラフ

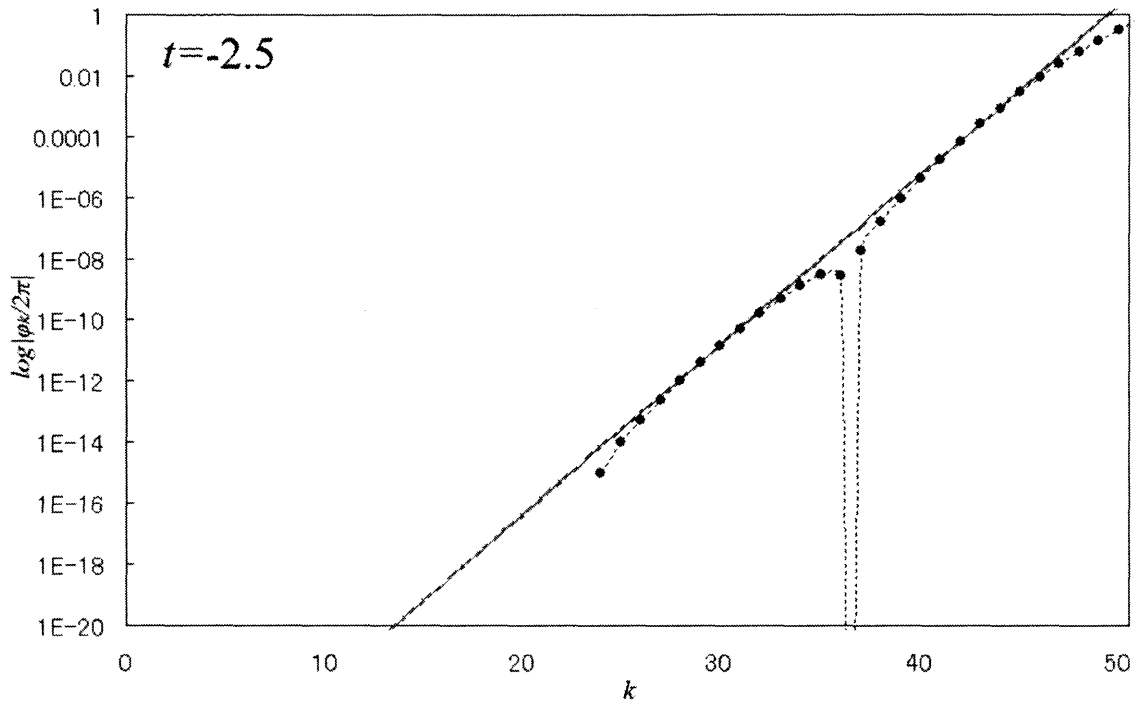


Fig. 5.20(f)  $t = -2.5$  における  $k = 0 \sim 50$  での方位角の絶対値  $|\varphi_k|$  の対数グラフ

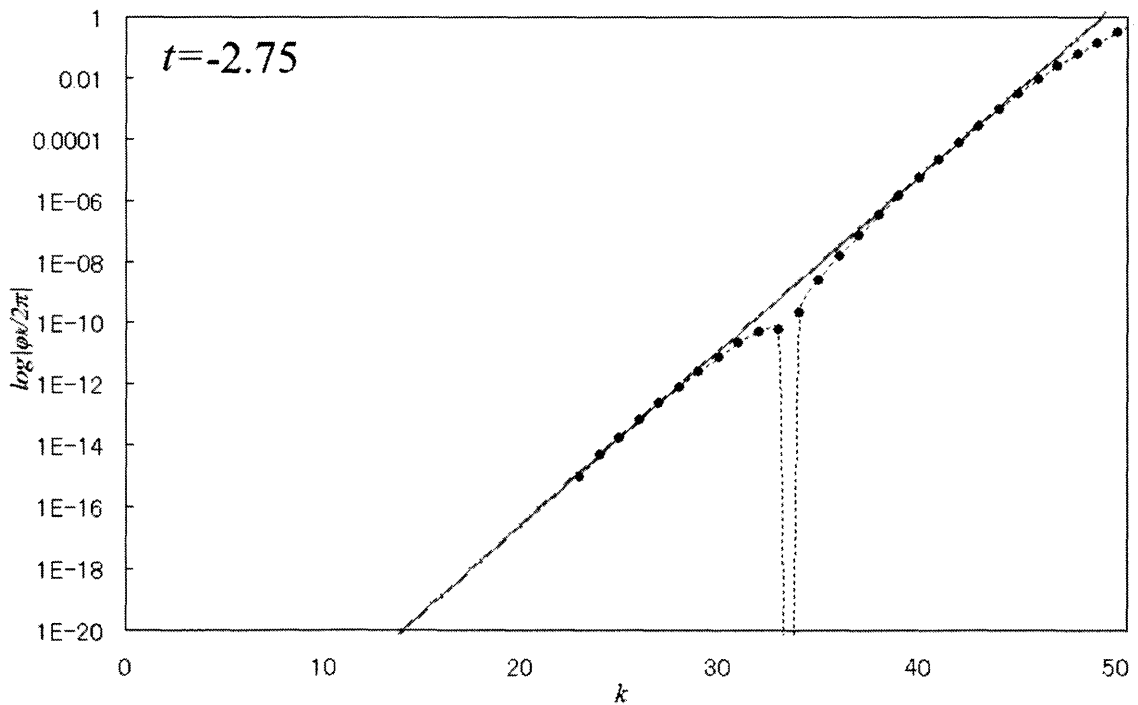


Fig. 5.20(g)  $t = -2.75$  における  $k = 0 \sim 50$  での方位角の絶対値  $|\varphi_k|$  の対数グラフ

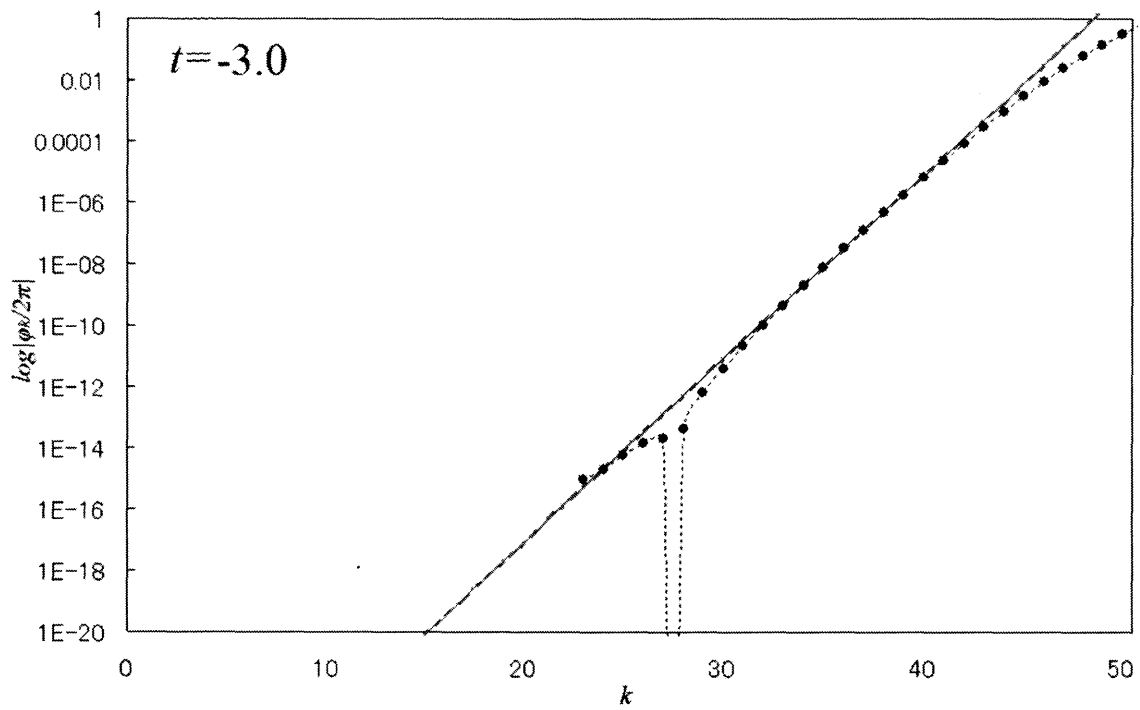


Fig. 5.20(h)  $t = -3.0$ における  $k = 0 \sim 50$  での方位角の絶対値  $|\varphi_k|$  の対数グラフ

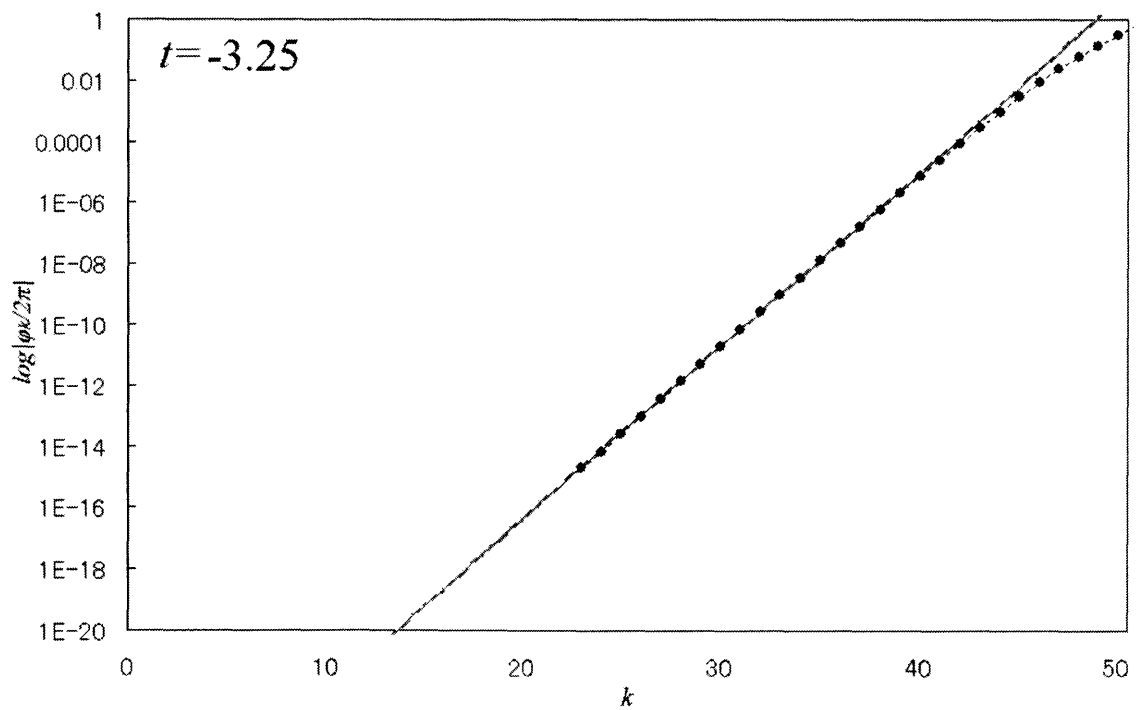


Fig. 5.20(i)  $t = -3.25$ における  $k = 0 \sim 50$  での方位角の絶対値  $|\varphi_k|$  の対数グラフ

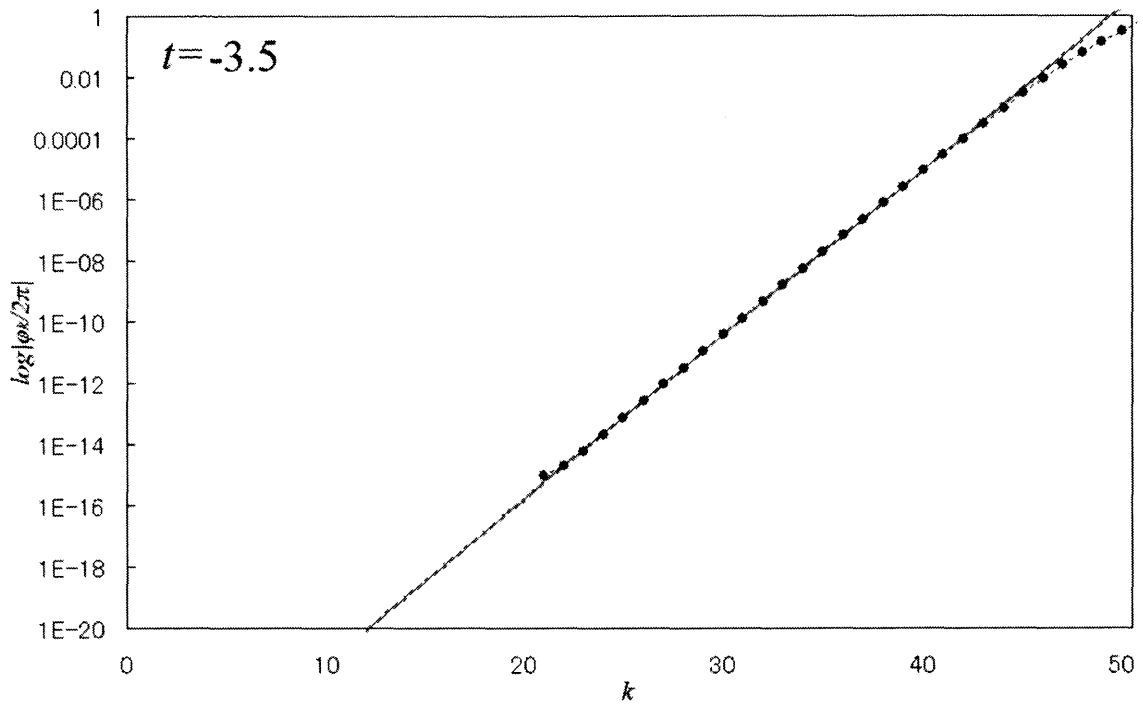


Fig. 5.20(j)  $t = -3.5$  における  $k = 0 \sim 50$  での方位角の絶対値  $|\varphi_k|$  の対数グラフ

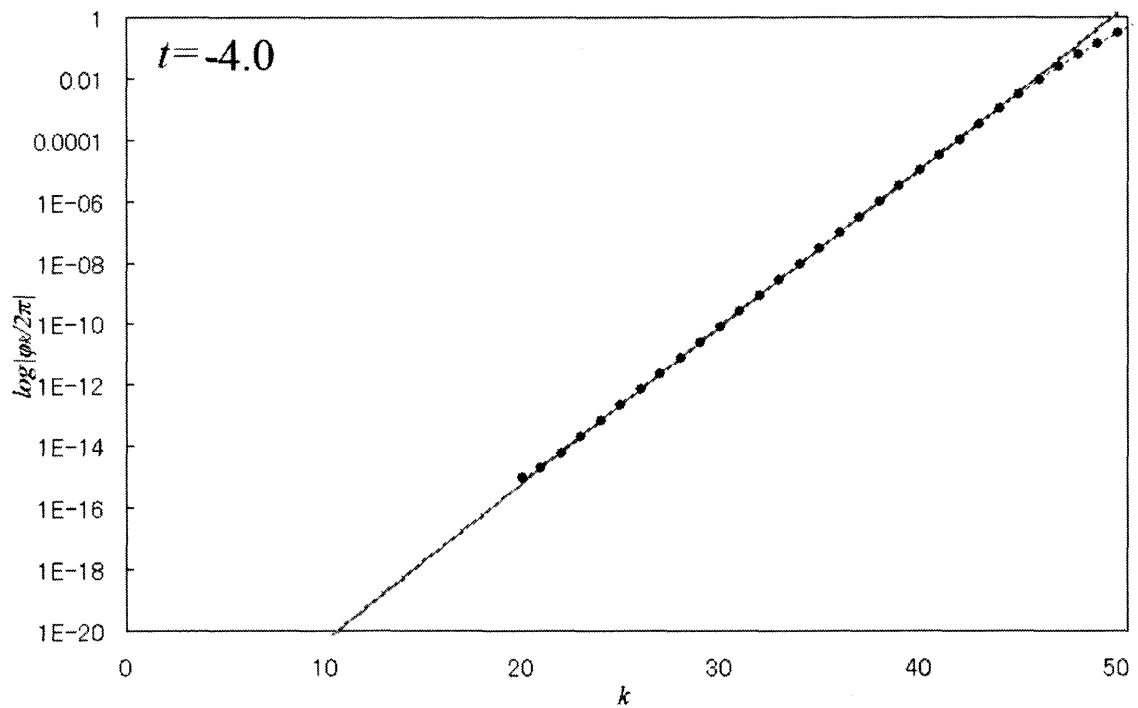


Fig. 5.20(k)  $t = -4.0$  における  $k = 0 \sim 50$  での方位角の絶対値  $|\varphi_k|$  の対数グラフ

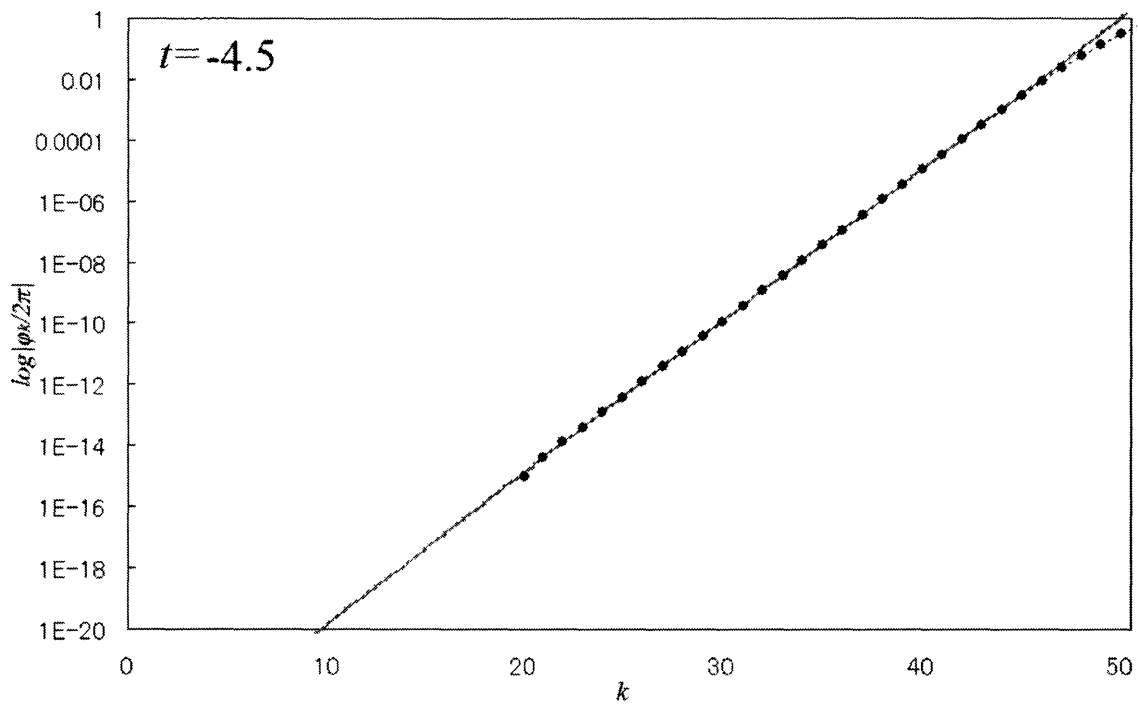


Fig. 5.20(l)  $t = -4.5$  における  $k = 0 \sim 50$  での方位角の絶対値  $|\varphi_k|$  の対数グラフ

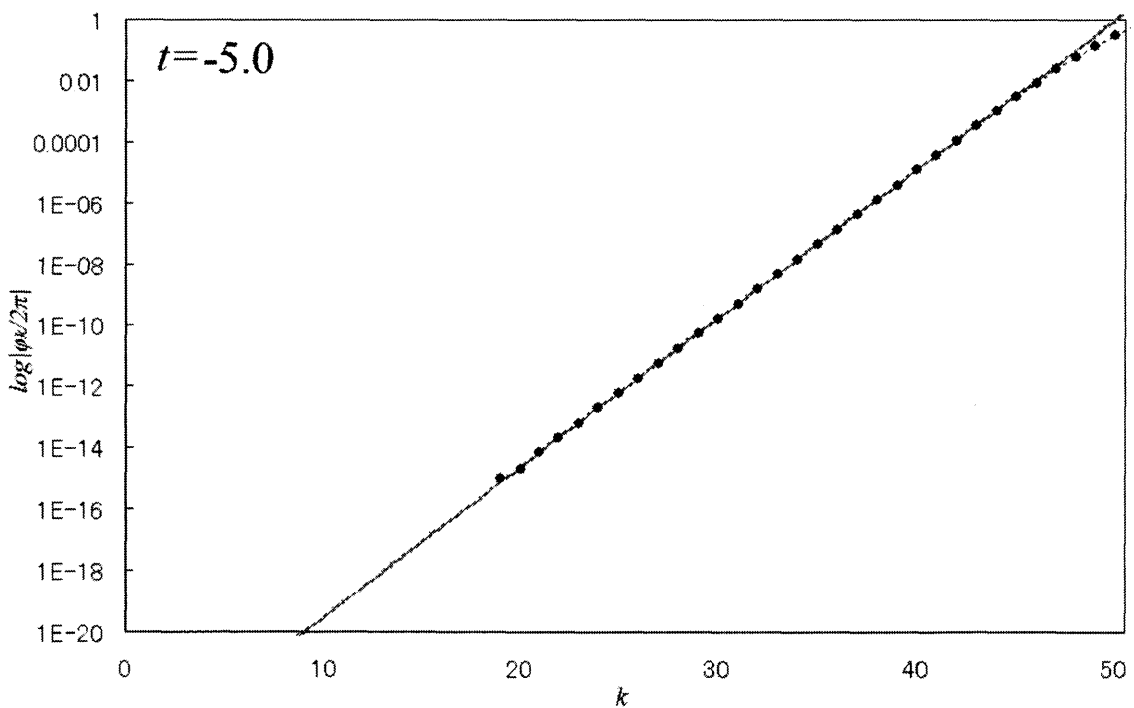


Fig. 5.20(m)  $t = -5.0$  における  $k = 0 \sim 50$  での方位角の絶対値  $|\varphi_k|$  の対数グラフ

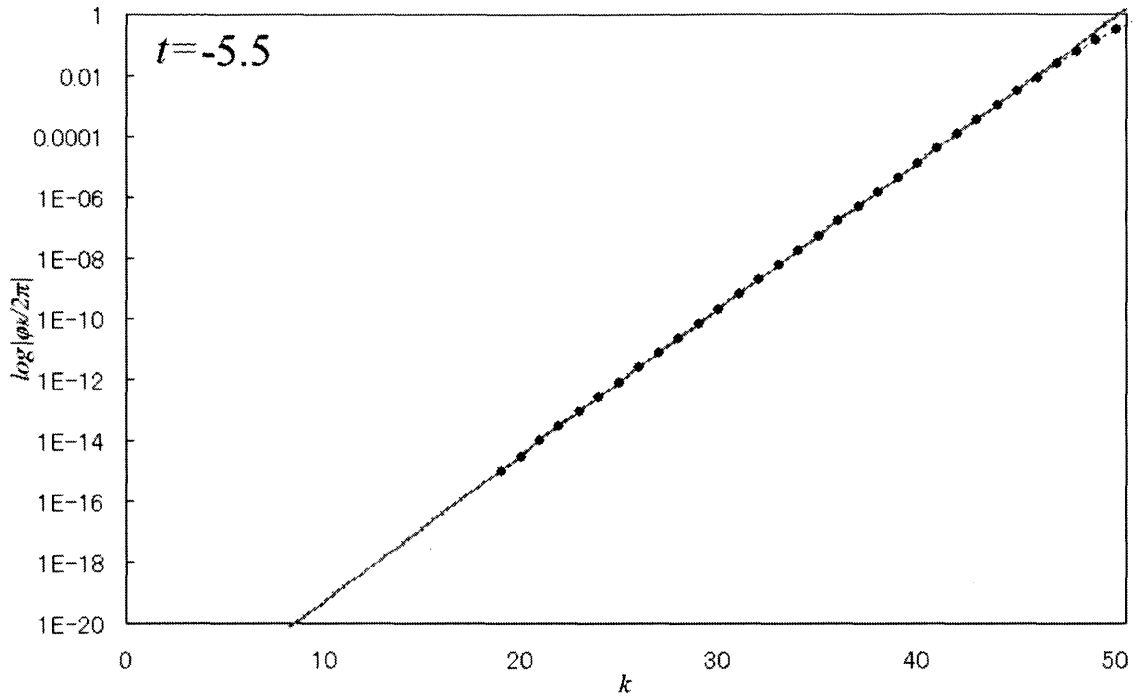


Fig. 5.20(n)  $t = -5.5$  における  $k = 0 \sim 50$  での方位角の絶対値  $|\varphi_k|$  の対数グラフ

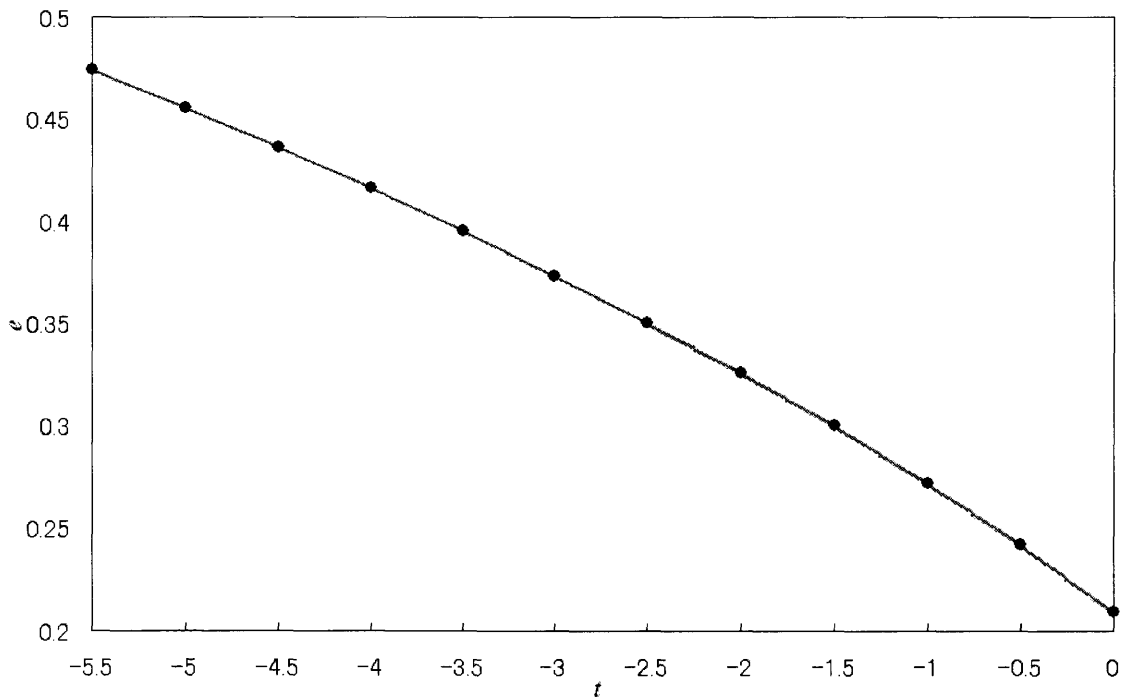


Fig.5.21 Fig.5.20(a)~(n)におけるソリトンを算出した電場の値

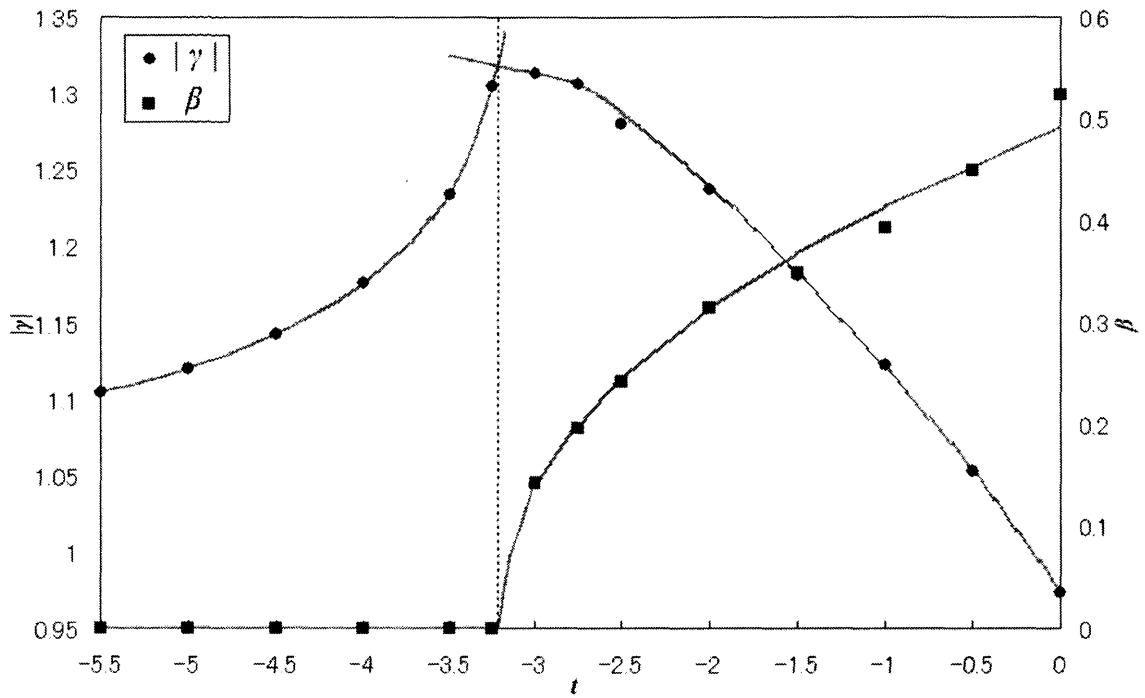


Fig.5.22  $\gamma$ と $\beta$ の温度依存性

#### 4. $\text{SmC}_\alpha^*$ 相での $\delta$ 依存性

ここまで  $\delta = 2\pi/4, 2\pi/8$  における  $\text{SmC}_\alpha^*$ - $\text{SmC}$  相転移の波数の電場依存性や温度依存性、ソリトン間相互作用などについて記述してきたが、ここでは  $\delta$  依存性について論ずる。

初めに温度  $t = 1, 0, -1$  それぞれの各  $\delta = 2\pi/4, 2\pi/6, 2\pi/8$  の波数の電場依存性を比較したグラフをそれぞれ Fig.5.23(a), Fig.5.23(b), Fig.5.23(c) に示す。Fig.5.23(a)~(c) から、 $\delta$  が小さくなるにつれて階段状構造が曲線に近づき、転移波数が小さくなっている、即ち  $\text{SmC}^*$  相の波数の電場依存性に近づいていることがわかる。

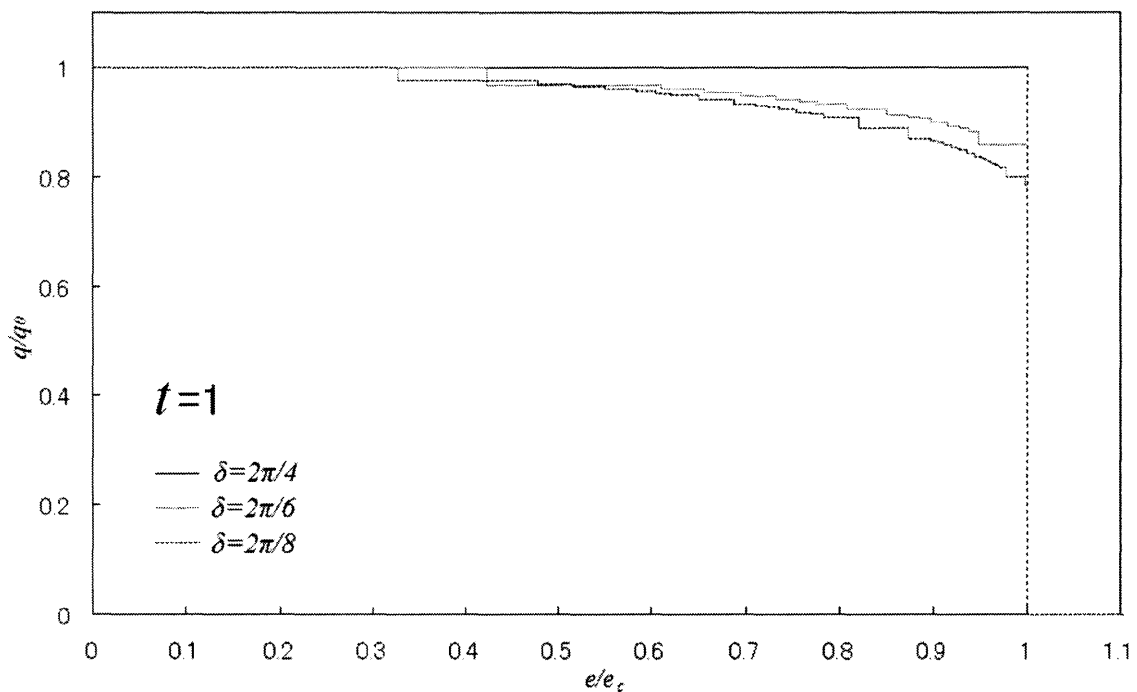


Fig.5.23(a)  $t = 1$  における  $\delta = 2\pi/4, 2\pi/6, 2\pi/8$  の波数の電場依存性の比較



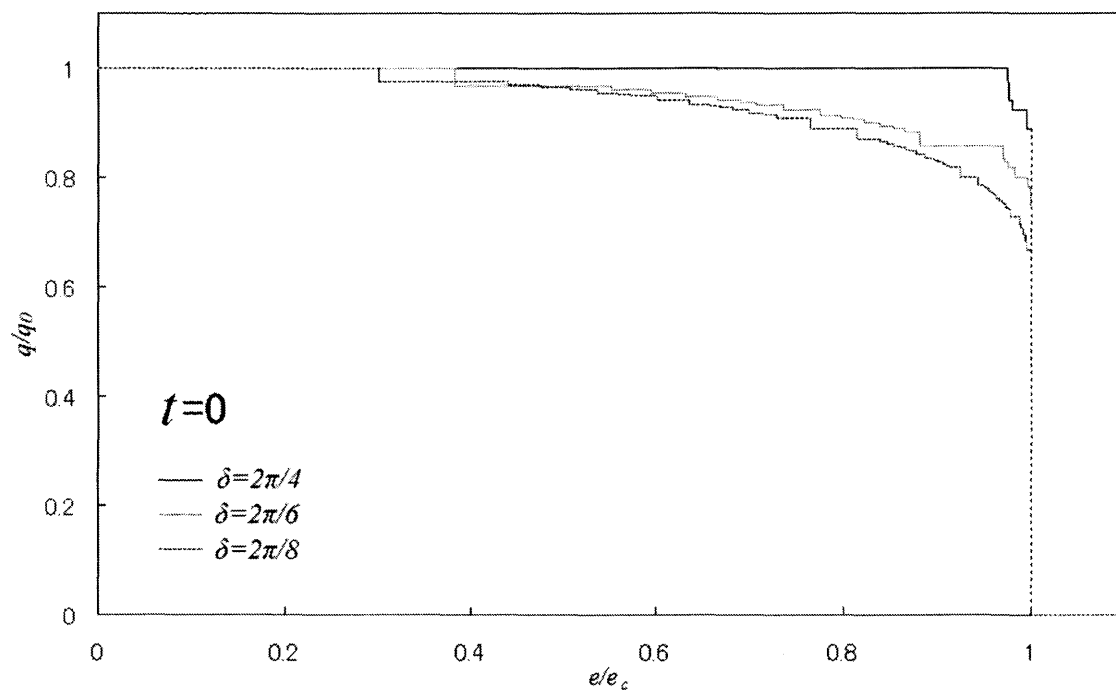


Fig.5.23(b)  $t = 0$ における  $\delta = 2\pi/4, 2\pi/6, 2\pi/8$  の波数の電場依存性の比較

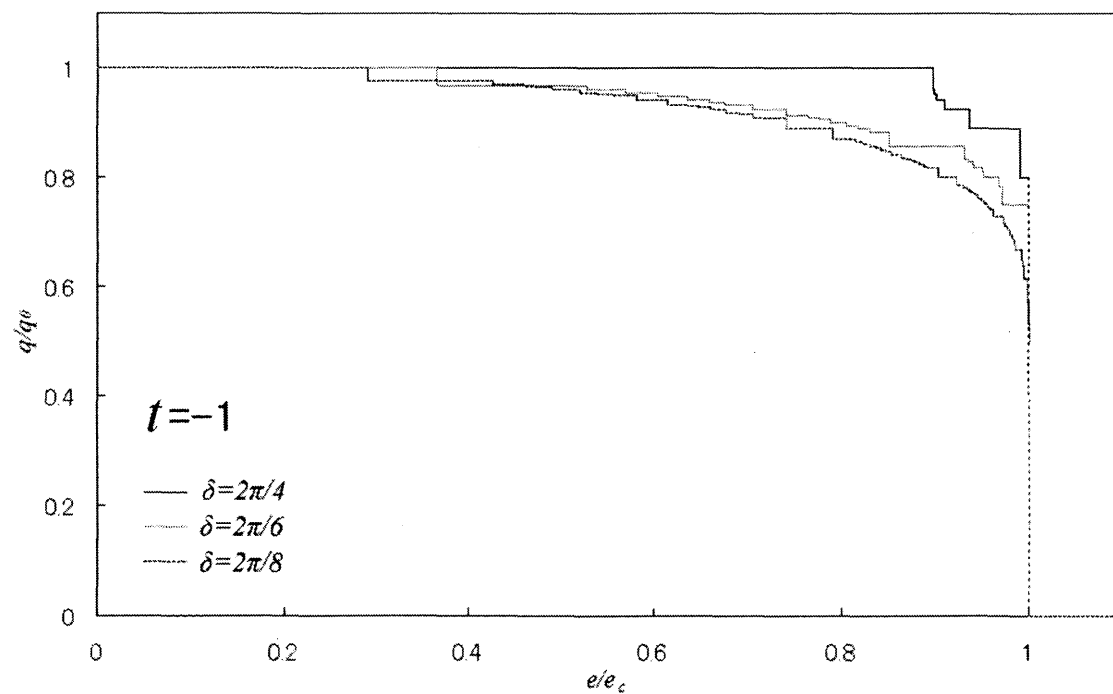


Fig.5.23(c)  $t = -1$ における  $\delta = 2\pi/4, 2\pi/6, 2\pi/8$  の波数の電場依存性の比較

次に温度  $-1 \leq t \leq 2$  の領域における各  $\delta = 2\pi/4, 2\pi/6, 2\pi/8, 2\pi/10$  での転移電場  $e_c$  を比較したグラフを Fig.5.24 に示す。Fig.5.24 から、 $\delta$  が小さくなるにつれて転移電場  $e_c$  も小さくなっている。

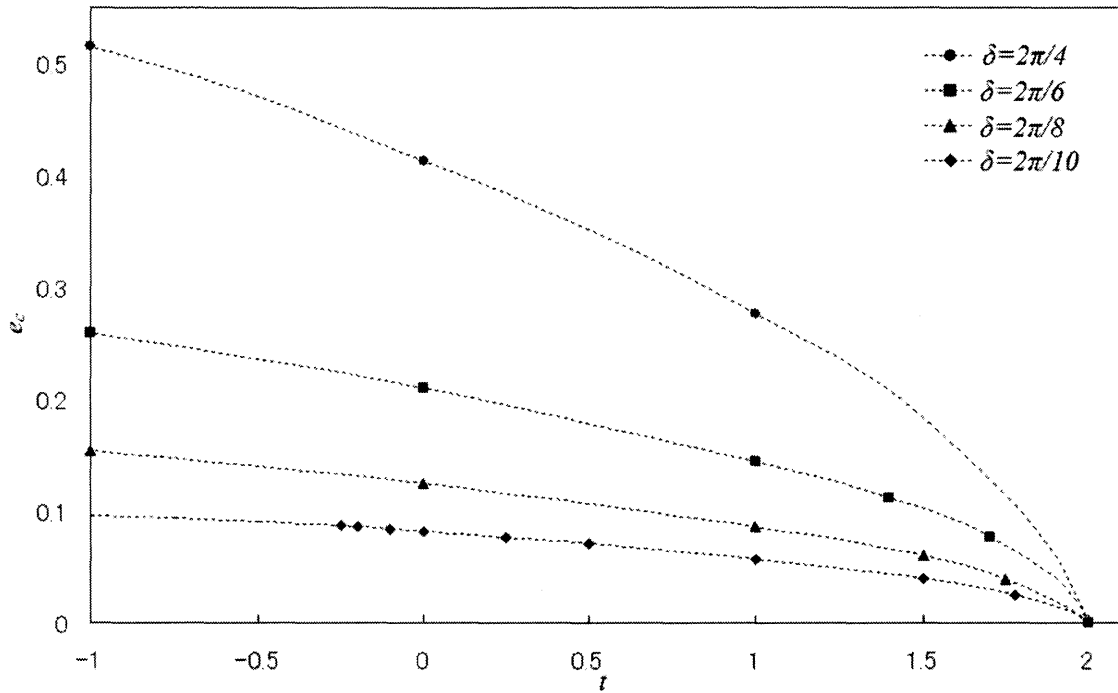


Fig.5.24  $\delta = 2\pi/4, 2\pi/6, 2\pi/8, 2\pi/10$  における相図の比較

Fig.5.23(a)~(c)で示される波数の電場依存性から、各  $\delta$  での転移波数  $q_c$  を導くことができ、Fig.5.25 に  $\delta = 2\pi/4, 2\pi/6, 2\pi/8, 2\pi/10$  における転移波数の温度依存性を比較したグラフを示す。ここで各データにおける曲線はそれぞれの近似曲線を示している。Fig.5.25 から、 $\delta$  が小さくなるにつれてソリトン間相互作用が引力的に働く温度領域が狭くなるのがわかる。

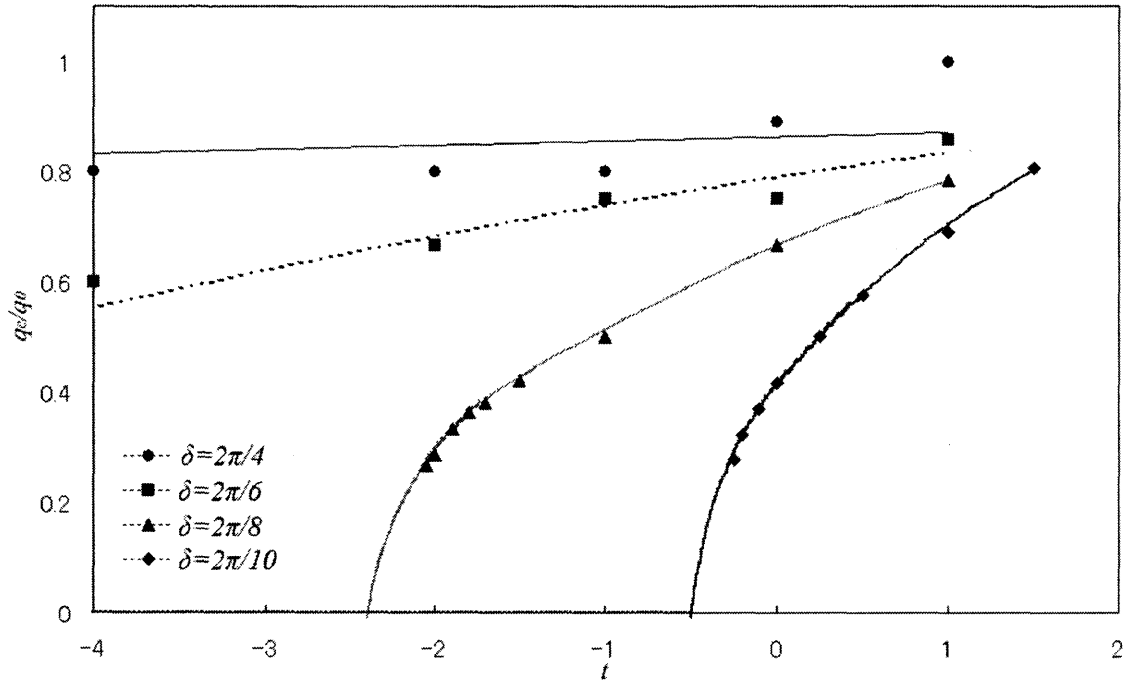


Fig.5.25  $\delta = 2\pi/4, 2\pi/6, 2\pi/8, 2\pi/10$ における転移波数  $q_c$  の温度依存性

## 第VI章 まとめ

電場誘起  $\text{SmC}^*-\text{SmC}$  相転移はソリトン凝縮として理解されているが、 $\text{SmC}_\alpha^*-\text{SmC}$  相転移は短いピッチのため離散表現が必要である。本研究では離散ソリトンの観点から  $\text{SmC}_\alpha^*-\text{SmC}$  相転移を論じた。さらに  $\text{SmC}^*-\text{SmC}$  相転移において傾き角を一定と仮定した場合にはソリトン間相互作用は斥力的に働き二次転移となる。これに対して傾き角の変動を許した場合には  $\text{SmA}$  転移温度近傍では傾き角の変動に起因してソリトン間相互作用が引力的に働き一次転移となるが、十分低温になると傾き角の変動が相転移に対して影響を与えなくなりソリトン間相互作用が斥力的となり二次転移となる。このような  $\text{SmC}^*-\text{SmC}$  相転移に現れる相転移特性やソリトン間相互作用、転移の次数の傾き角依存性が  $\text{SmC}_\alpha^*-\text{SmC}$  相転移においてどのように現れるかを論じた。

本研究では  $\delta = 2\pi/4 \sim 2\pi/10$  の範囲で数値計算を行った。波数の電場依存性は傾き角が一定の場合と同様に自己相似的な階段状構造となっているが、転移電場において波数は不連続にゼロへと変化しており、一次転移となることが確認できた。また自由エネルギー密度の波数依存性は傾き角が一定の場合のような単調な下に凸の形とは異なり、上に凸となる波数領域が存在する非単調な凸の形となっていることから、ソリトン間相互作用が引力的に働いていることがわかった。さらに波数が小さい領域のソリトンの励起エネルギーがゼロとなる電場における自由エネルギー密度のソリトン間距離依存性から、引力的に働くソリトン間相互作用は特定のソリトン間距離で強く作用することがわかった。そして低温になるにつれて各データが傾き角が一定の場合に近づいていることが確認でき、即ちソリトン間相互作用の引力効果が減少し、十分低温になると引力効果が消滅し斥力のみとなり二次転移となることがわかった。また二次転移となる低温領域においてソリトンの一様解への緩和過程は指数減衰となり、そして一次転移となる高温領域においては振動減衰となることがわかった。さらにこの振動周期が転移波数と対応していると考えられ、低温になるにつれて振動周期が広がっていき、十分低温になると振動周期が消滅し指数減衰に移行すると思われる。

以上のように  $\text{SmC}_\alpha^*-\text{SmC}$  相転移の傾き角依存性はソリトンの離散表現による違いはあるが  $\text{SmC}^*-\text{SmC}$  相転移と同様の傾向が得られ、電場誘起  $\text{SmC}_\alpha^*-\text{SmC}$  相転移のさらなる全容を明らかにできた。

実験的にはまだ詳しい転移の様子、特に転移の次数についての報告はない<sup>13-19</sup>。実験がさらに進められ将来本研究結果との対応が期待される。

## 謝辞

本研究を行うに当たって数多くの御指導を頂いた三重大学工学部物理工学科 山下護教授には御厚情のほど真にありがたく、心から御礼申し上げます。また、勉学に関して多大な御指導を頂いた佐野和博教授に深く感謝致します。並びに、様々な御助言を頂いた助教の鳥飼正志博士には真に感謝しております。

## 参考文献

- 1) P. G. de Gennes, *The Physics of Liquid Crystals* (Oxford University Press, Oxford, 1974)
- 2) S. Chandrasekhar, *Liquid Crystals* 2nd ed (Cambridge University Press, Cambridge 1992), (木村初男, 山下護 共訳 : 液晶の物理学 (吉岡書店))
- 3) 福田敦夫, 竹添秀男 : 強誘電性液晶の構造と物性 (コロナ社, 1990)
- 4) P. Mach, R. Pindak, A.-M. Levelut, P. Barois, H. T. Nguyen, C. C. Huang and L. Furenlid, *Phys. Rev. Lett.* **81** (1998) 1015.
- 5) P. Mach, R. Pindak, A.-M. Levelut, P. Barois, H. T. Nguyen, H. Baltes, M. Hird, K. Toyne, A. Seed, J. W. Goodby, C. C. Huang and L. Furenlid, *Phys. Rev. E* **60** (1999) 6793.
- 6) M. Yamashita, *Prog. Theor. Phys.* **74** (1985) 622.
- 7) 山下護 : 液晶相転移とソリトン (物理学最前線 15, 共立出版, 1986)
- 8) M. Yamashita, *Solitons in Liquid Crystals*, Eds. L. Lam and J. Prost (Springer-Verlag, Berlin, 1991), Chap. 10.
- 9) M. Torikai and M. Yamashita, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **465** (2007) 239.
- 10) Y. Sugimoto, M. Torikai and M. Yamashita, to appear in *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* (2009)
- 11) Y. Sakai, M. Torikai and M. Yamashita, preprint submitted to *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*
- 12) C. S. O. Yokoi, L.-H. Tang and W. Chou, *Phys. Rev. B* **37** (1988) 2173.
- 13) H. Hiraoka, Y. Takanishi, K. Skarp, H. Takezoe, A. Fukuda, *Jpn. J. Appl. Phys.* **30** (1991) L1819.
- 14) Y. Takanishi, H. Takezoe, A. Fukuda, T. Isozaki, Y. Suzuki and I. Kawamura, *Jpn. J. Appl. Phys.* **30** (1991) 2023.
- 15) H. Hiraoka, Y. Takanishi, H. Takezoe, A. Fukuda, T. Isozaki, Y. Suzuki and I. Kawamura, *Jpn. J. Appl. Phys.* **31** (1992) 3394.
- 16) V. Bourny and H. Orihara, *Phys. Rev. E* **63** (2001) 021703.
- 17) H. Orihara, Y. Naruse, M. Yagyu, A. Fajar and S. Uto, *Phys. Rev. E* **72** (2005) 040701.
- 18) N. M. Shtykov, A. D. L. Chandani, A. V. Emelyanenko, A. Fukuda and J. K. Vil, *Phys. Rev. E* **71** (2005) 021711.
- 19) A. Cady, X. F. Han, D. A. Olson, H. Orihara and C. C. Huang, *Phys. Rev. Lett.* **91** (2003) 125502.
- 20) D. Schlauf, Ch. Bahr and H.T. Nguyen, *Phys. E* **60** (1999) 6816.

21)Z. Q. Liu, B. K. McCoy, S. T. Wang, R. Pindak, W. Caliebe, P. Barois, P. Fernandes, H. T. Nguyen, C. S. Hsu, Shun Wang and C. C. Huang, Phys. Lett. **99** (2007) 077802