

付録 C 相分離のシミュレーション

C.1 差分法

ここでは、第3章で紹介した相分離の時間発展を示す TDLG 方程式 (式 (3.3.16)) の計算機シミュレーションの方法について調べましょう。運動方程式を数値的に解くために差分法を用います。ベクトル演算子 ∇ を、あるスカラー物理量 A に対して作用させると、勾配は $\nabla A = (\nabla_x A, \nabla_y A, \nabla_z A)$ 、ラプラシアン演算子は $\nabla^2 A = \nabla_x^2 A + \nabla_y^2 A + \nabla_z^2 A$ となります。ここで、 $\nabla_i = \partial/\partial i$ を示します ($i = x, y, z$)。以下では簡単にするため2次元系 (x, y) について考えます。3次元系へも簡単に拡張できます。

まず、図 C.1(a) に示すように溶液を $L \times L$ の長さ h の2次元正方格子に分割します。数値計算を滑らかに行うためには、 L の値は100以上の大きな数を想定してください。各格子点上の物理量を $A(i, j)$ として¹⁾、差分近似法を用いて、

$$\nabla_x A = \frac{\partial A}{\partial x} = \frac{A(i+1, j) - A(i, j)}{h} \quad (\text{C.1.1})$$

$$\nabla_y A = \frac{\partial A}{\partial y} = \frac{A(i, j+1) - A(i, j)}{h} \quad (\text{C.1.2})$$

と書けます。2階微分も

$$\nabla_x^2 A = \frac{\partial^2 A}{\partial x^2} = \frac{1}{h^2} (A(i+1, j) - 2A(i, j) + A(i-1, j)) \quad (\text{C.1.3})$$

$$\nabla_y^2 A = \frac{\partial^2 A}{\partial y^2} = \frac{1}{h^2} (A(i, j+1) - 2A(i, j) + A(i, j-1)) \quad (\text{C.1.4})$$

で与えられます。これらの差分近似を使って、以下の式を書き換えていきましょう。

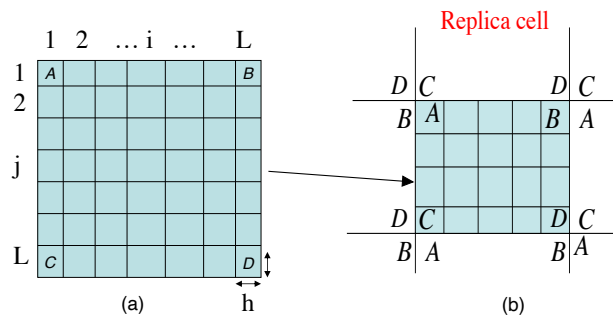


図 C.1 (a) シミュレーションボックスのモデルと (b) 周期的境界条件

1) たとえば、 $A(i, j)$ は濃度 $\phi(i, j)$ などに対応します。

式 (3.3.16) を各格子点上の濃度 $\phi(i, j)$ の時間発展とすると,

$$\frac{d\phi(i, j)}{dt} = M\nabla^2 \left(\frac{\partial f}{\partial \phi} - \kappa \nabla^2 \phi \right) = M\nabla^2 A(i, j) \quad (\text{C.1.5})$$

と書くことができます。ここで, $A(i, j)$ は

$$\begin{aligned} A(i, j) &= f'(\phi(i, j)) - \kappa \nabla^2 \phi(i, j) \\ &= f'(\phi(i, j)) - \kappa (\nabla_x^2 \phi(i, j) + \nabla_y^2 \phi(i, j)) \\ &= f'(\phi(i, j)) - \frac{\kappa}{h^2} (\phi(i+1, j) - 4\phi(i, j) + \phi(i-1, j) + \phi(i, j+1) + \phi(i, j-1)) \end{aligned} \quad (\text{C.1.6})$$

で与えられ, $f' = (df/d\phi)$ を示します。自由エネルギー f は, 正則溶液の自由エネルギー (式 (3.2.11)) や高分子溶液の自由エネルギー (式 (6.1.20)) などを使うことができます。式 (C.1.5) を差分近似を使って書き換えると,

$$\begin{aligned} \frac{d\phi(i, j)}{dt} &= \frac{\phi_{\text{new}}(i, j) - \phi(i, j)}{\Delta t} \\ &= M(\nabla_x^2 A(i, j) + \nabla_y^2 A(i, j)) \end{aligned} \quad (\text{C.1.7})$$

となります。したがって, 時間 Δt 後の濃度は

$$\phi_{\text{new}}(i, j) = \phi(i, j) + \frac{M\Delta t}{h^2} (A(i+1, j) - 4A(i, j) + A(i-1, j) + A(i, j+1) + A(i, j-1)) \quad (\text{C.1.8})$$

で与えられます。ある格子点 (i, j) 上の濃度 $\phi(i, j)$ が時刻 Δt 後には, 濃度 $\phi_{\text{new}}(i, j)$ に更新されます。新しい濃度 $\phi_{\text{new}}(i, j)$ を, 前の濃度 $\phi(i, j)$ に格納して計算を繰り返すことで, 非線形の運動方程式が数値解析できるようになります。

C.2 周期的境界条件

シミュレーションでは格子点数は有限です。実際の溶液は少なくともアボガドロ定数程度の多数の分子が存在します。このような大きな系を計算機シミュレーションで実現するには周期的境界条件 (periodic boundary condition) が役に立ちます。さらに, シミュレーションボックスの壁の効果もなくすることができます。図 C.1(b) に示すように, シミュレーションボックスの上下斜めに同じシミュレーションボックス (レプリカセルとよぶ) を置きます。このような周期的境界条件は

$$A(i, j) = A(i \pm L, j \pm L) \quad (\text{C.2.1})$$

とすることで実現できます。格子点 (L, L) の右隣は, 格子点 $(1, L)$ になります。たとえば, 格子点 (L, L) の右隣の濃度は $\phi(L+1, L) = \phi(1, L)$ となります。こうすることで, $L \times L$ のシミュレーションボックス内で全ての計算が完結します。後は, この周期的境界条件に注意しながら, 式 (C.1.8) をプログラム言語で表現するだけです。 Δt や h の値などは収束条件を満たすように設定する必要があります。詳細は数値シミュレーションの教科書などを参考にしてください。

図 C.2 は、正則溶液の自由エネルギー（式 (3.2.11)）を使って、式 (C.1.8) を数値計算したスピノダル分解の初期から後期段階までの計算機シミュレーションを示します。 $t = 0$ の初期値を図 3.6 のスピノダル領域 ($\phi = 0.5, \chi = 2.5$) に設定しました。灰色から黒色になるほど、溶質濃度が高いことを示します。核成長のシミュレーションも、初期濃度と温度を準安定領域に設定するだけで計算することができます。自由エネルギーの中身は何を議論するかによって変わってきますが、正則溶液の自由エネルギーは比較的簡単にスピノダル分解や核生成を計算することができます。

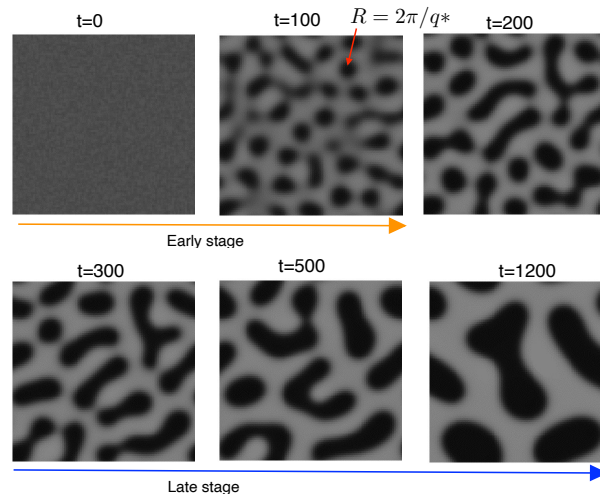


図 C.2 スピノダル分解の初期段階から後期段階の計算機シミュレーション

付録 D モンテカルロシミュレーション

D.1 正準分布

モンテカルロ (Monte Carlo) 法は、物質の熱力学的平衡状態を計算機で実現する方法の一つで、乱数を用いて確率過程を通して分子の位置などを決め微視的状态を作成していきます。ニュートンの運動方程式を数値的に解く方法とは区別されます。体積 V 、分子数 N 、温度 T が一定の微視的状态の集まりを正準集団とよびます。任意の i 番分子が位置 \mathbf{r}_i と $\mathbf{r}_i + d\mathbf{r}_i$ の微視的領域にある確率は $f(\mathbf{r}_i)d\mathbf{r}_i$ で与えられます、ここで、 $f(\mathbf{r}_i)$ を確率密度関数とよびます。系内のすべての分子がそれぞれの微視的領域に存在する確率は、 $f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)d\mathbf{r}_1d\mathbf{r}_2 \cdots d\mathbf{r}_N$ と書くことができます。各分子の位置が \mathbf{r}_i で配置されたときの全分子間相互作用エネルギーを $E(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ とすると、その状態が実現する確率密度関数 $f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ はボルツマン因子を用いて、

$$f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \frac{\exp(-E(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)/k_B T)}{\iint \cdots \int \exp(-E(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)/k_B T) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \cdots d\mathbf{r}_N} \quad (\text{D.1.1})$$

で与えられます。分母は系内のすべての領域に渡って積分することを意味しています。式 (D.1.1) で表された確率密度関数を正準分布 (canonical distribution) とよびます。任意のポテンシャル E に対して式 (D.1.1) の解析解を得ることはほとんど不可能です。そこで、この正準分布に従って計算機シミュレーションすることで、任意の系に対して物理的な正当性を確保することができるようになります。

式 (D.1.1) の各分子の微視的状态 $f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ が更新されて、新しい微視的状态 $f^\dagger(\mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2, \dots, \mathbf{r}'_N)$ に変化すると、新しい確率密度関数は

$$f^\dagger(\mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2, \dots, \mathbf{r}'_N) = \frac{\exp(-E'(\mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2, \dots, \mathbf{r}'_N)/k_B T)}{\iint \cdots \int \exp(-E(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)/k_B T) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \cdots d\mathbf{r}_N} \quad (\text{D.1.2})$$

で与えられます。このような確率を計算機で求める方法の一つを以下で紹介します。

D.2 メトロポリス法

メトロポリス (Metropolis) 法は、微視的状态 f から微視的状态 f^\dagger を作成するとき、以下の遷移確率 f_n に従って新しい微視的状态 f^\dagger を採択する方法です。

$$f_n = \begin{cases} 1 & (f^\dagger/f > 1) \\ f^\dagger/f & (f^\dagger/f < 1) \end{cases} \quad (\text{D.2.1})$$

式 (D.1.1) と式 (D.1.2) を用いて,

$$\frac{f^\dagger}{f} = \exp\left(-\frac{\Delta E}{k_B T}\right) \quad (\text{D.2.2})$$

$$\Delta E = E'(\mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2, \dots, \mathbf{r}'_N) - E(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \quad (\text{D.2.3})$$

となり, 式 (D.1.1) と式 (D.1.2) の分母同士は打ち消し合い遷移確率の中に現れなくなります. これがメトロポリス法の大きな特徴です. 式 (D.2.2) は以下の意味を持ちます. ある微視的状態 f から新しい微視的状態 f^\dagger を作成するとき, ポテンシャルエネルギー変化 ΔE が

- (1) 低くなれば ($\Delta E < 0$), 確率 $f_n = 1$ で新しい微視的状態 f^\dagger を採用します.
- (2) 高くなれば ($\Delta E > 0$), f^\dagger/f 値を計算し, 確率 f^\dagger/f で新しい微視的状態 f^\dagger を採用するか, 前の微視的状態 f を採用するかを決めます.

熱平衡状態は, ヘルムホルツの自由エネルギー $F = E - TS$ が最小の状態です. 明らかに, 自由エネルギーが最小となる状態は, エネルギー項だけで決まるわけではありません. 分子の並進や回転の自由度によるエントロピー項が存在します. 系のポテンシャルエネルギーが高くなる状態を確率 f^\dagger/f で採用することは, このエントロピー項を反映しています.

図 D.1 はメトロポリス・モンテカルロ法のフローチャートを示します. じっくり眺めてください. 一番下の分岐が重要です.

- (1) $\Delta E < 0$ (真) の場合は, 新しい微視的状態 f^\dagger を採用します.
- (2) $\Delta E > 0$ (偽) の場合は, 確率 f^\dagger/f で新しい微視的状態 f^\dagger を採用するか, 元の状態 f に戻すかを判断します. 図 D.2 は式 (D.2.2) を $\Delta E/k_B T$ でプロットしました. $[0, 1]$ 範囲で乱数を引いてその値を p ($= f^\dagger/f$) とすると, そのときのエネルギーは E_p です. そこで, 以下の分岐を作ります.

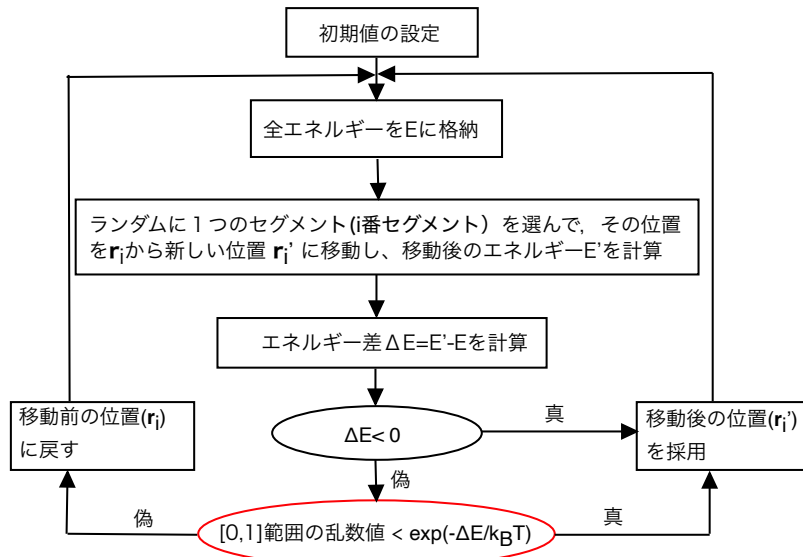


図 D.1 メトロポリス・モンテカルロ法のフローチャート

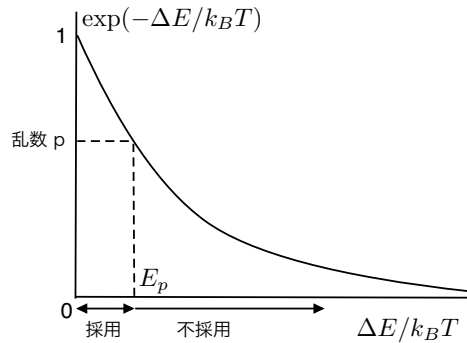


図 D.2 遷移確率 f^\dagger/f と乱数 p

- (2-1) $\Delta E/k_B T < E_p$ であれば、新しい状態 f^\dagger を採用します。乱数 p の値が小さい場合は、ほとんど新しい状態が採用されます。
- (2-2) $\Delta E/k_B T > E_p$ の場合は不採用にして元の状態 f に戻します。乱数 p の値が大きい場合は、ほとんど新しい状態は不採用になります。

(1), (2) の分岐を経てモンテカルロ (MC) ステップを繰り返すと、熱平衡状態に近づいていきます。求める物理量を何にするかは解きたい問題によりますが、たとえば、ある温度下で分子間相互作用をもつ高分子鎖の慣性半径を計算すると、MC ステップが増加するにつれて熱平衡値に漸近するようになります。MC ステップは厳密には時間に対応していませんが、“動的”モンテカルロシミュレーションは MC ステップを時間に比例した量として扱うことで、ある物理量の時間発展を調べることもできます。賛否両論はありますが…。

付録 E テンソル秩序パラメータ

E.1 アインシュタインの縮約記法

この教科書で使う添字表記法についてまとめておきます。特に 8.4 節を議論するために必要になります。

任意のベクトル $\mathbf{a} = (a_x, a_y, a_z)$ は基底ベクトルを $\{\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z\}$ として、

$$\mathbf{a} = a_x \mathbf{e}_x + a_y \mathbf{e}_y + a_z \mathbf{e}_z = \sum_{i=x,y,z} a_i \mathbf{e}_i \quad (\text{E.1.1})$$

と書けます。ここでアインシュタインの縮約記法 (Einstein summation convention) にしたがつて、上の式を

$$\mathbf{a} = a_i \mathbf{e}_i \quad (\text{E.1.2})$$

と書くことにします。和 \sum_i は書いていませんが、実際は $i = x, y, z$ について和をとるという約束です。「同じ添字が二回現れたら和を取る」というルールです。ベクトル \mathbf{a} が単位ベクトルなら、 $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{a}_i = a_i a_i = a_x^2 + a_y^2 + a_z^2 = 1$ と書きます。行列やテンソルにも適用されます。たとえば、行列 $A = [a_{ij}]$ と行列 $B = [b_{ij}]$ の積 $AB = C = [c_{ij}]$ の各成分は

$$c_{ij} = a_{ik} b_{kj} \quad (\text{E.1.3})$$

と書くことができます。ここで、添字 k は、 x, y, z について和を取るという約束です。行列の対角和 (trace) は次のように書くことができます。

$$\text{Tr}(A) = a_{xx} + a_{yy} + a_{zz} = a_{ii} \quad (\text{E.1.4})$$

二つのベクトルのスカラー積 (内積) は、

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = a_x b_x + a_y b_y + a_z b_z = a_i b_i \quad (\text{E.1.5})$$

と書きます。

クロネッカーのデルタ関数やレビ・チビタ (Levi-Civita) の記号も重要です。クロネッカーのデルタ関数は以下のように定義されています。

$$\delta_{ij} = \delta(x) = \begin{cases} 1 & (i = j, \text{ あるいは, } x = 0 \text{ のとき}) \\ 0 & (i \neq j, \text{ あるいは, } x \neq 0 \text{ のとき}) \end{cases} \quad (\text{E.1.6})$$

レビ・チビタの記号 ϵ_{ijk} は、添字 (i, j, k) が 3 次元座標軸の (x, y, z) の順であれば 1 で ($\epsilon_{xyz} = 1$)、この順を一对だけ入れ替えた (y, x, z) の場合は -1 にします ($\epsilon_{yxz} = -1$)。さらに

並びをもう一度入れ替えた (y, z, x) は 1 になります ($\epsilon_{yzx} = 1$). それ以外のたとえば, (y, y, z) のように添字に同じ文字が入る場合は 0 とします ($\epsilon_{yyz} = 0$). まとめると,

$$\epsilon_{ijk} = \begin{cases} 1 & ((i, j, k) \text{ が } (x, y, z) \text{ の偶置換のとき}) \\ -1 & ((i, j, k) \text{ が } (x, y, z) \text{ の奇置換のとき}) \\ 0 & ((i, j, k) \text{ のうち二つが等しい成分のとき}) \end{cases} \quad (\text{E.1.7})$$

となります. これを使ってベクトル積 (外積) は,

$$\mathbf{a} \times \mathbf{b} = \epsilon_{ijk} a_j b_k \mathbf{e}_i \quad (\text{E.1.8})$$

スカラー 3 重積は,

$$\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) = (a_i \mathbf{e}_i) \cdot (\epsilon_{ijk} b_j c_k \mathbf{e}_i) = a_i \epsilon_{ijk} b_j c_k \quad (\text{E.1.9})$$

と書けます. 明らかに, i, j の順番を入れ替える (たとえば, x 軸と y 軸を入れ替える) と符号が逆転します. このようなスカラー量を擬スカラーとよびます. 擬スカラーを 2 乗すると真のスカラー量になります.

あるスカラー量 p の空間座標 i, j ($= x, y, z$) に関する微分を

$$\frac{\partial p}{\partial i} = \partial_i p \quad (\text{E.1.10})$$

ベクトル \mathbf{n} の i 成分の j に関する微分を

$$\frac{\partial n_i}{\partial j} = \partial_j n_i \quad (\text{E.1.11})$$

などを書いておくと便利です. これを使うと, スカラー量 p の勾配は,

$$\nabla p = \partial_x p \mathbf{e}_x + \partial_y p \mathbf{e}_y + \partial_z p \mathbf{e}_z = \partial_i p \mathbf{e}_i \quad (\text{E.1.12})$$

ベクトル \mathbf{n} の発散は

$$\nabla \cdot \mathbf{n} = \partial_x n_x + \partial_y n_y + \partial_z n_z = \partial_i n_i \quad (\text{E.1.13})$$

回転は

$$\nabla \times \mathbf{n} = \epsilon_{ijk} \partial_j n_k \mathbf{e}_i \quad (\text{E.1.14})$$

スカラー 3 重積は

$$\mathbf{n} \cdot (\nabla \times \mathbf{n}) = n_i \epsilon_{ijk} \partial_j n_k \quad (\text{E.1.15})$$

と書けます. ∇p , $\nabla \times \mathbf{n}$ はベクトル量, $\nabla \cdot \mathbf{n}$ はスカラー量, $\mathbf{n} \cdot (\nabla \times \mathbf{n})$ は擬スカラー量となります. 自由エネルギーはスカラー量なので, ベクトル量からスカラー量を作るには, ベクトルの二乗か二つのベクトルの内積しかありません.

また, クロネッカーデルタ関数とレビ・チビタ関数には,

$$\epsilon_{ijk} \epsilon_{ilm} = \delta_{jl} \delta_{km} - \delta_{jm} \delta_{kl} \quad (\text{E.1.16})$$

の関係式があります。これを使って、ベクトル解析の様々な公式を導き出すことができます。

たとえば、ベクトル3重積は

$$\begin{aligned}
\mathbf{n} \times (\nabla \times \mathbf{n}) &= \epsilon_{ijk} n_j (\nabla \times \mathbf{n})_k \mathbf{e}_i \quad \cdots ((\nabla \times \mathbf{n})_k \text{ は } k \text{ 成分を示す}) \\
&= \epsilon_{ijk} n_j (\epsilon_{klm} \partial_l n_m) \mathbf{e}_i \\
&= \epsilon_{kij} \epsilon_{klm} n_j \partial_l n_m \mathbf{e}_i \quad \cdots (\epsilon_{ijk} \text{ を } \epsilon_{kij} \text{ に置き換えた}) \\
&= (\delta_{il} \delta_{jm} - \delta_{im} \delta_{jl}) n_j \partial_l n_m \mathbf{e}_i = (n_j \partial_i n_j - n_j \partial_j n_i) \mathbf{e}_i \\
&= \left(\frac{1}{2} \partial_i n_j^2 - n_j \partial_j n_i \right) \mathbf{e}_i = \frac{1}{2} \nabla (\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}) - (\mathbf{n} \cdot \nabla) \mathbf{n} \quad (\text{E.1.17})
\end{aligned}$$

となります。 \mathbf{n} が単位ベクトルであれば第1項は0になります。

E.2 テンソル秩序パラメータ

ネマチック相を記述するには、ダイレクター \mathbf{n} とスカラー秩序パラメータ \mathbf{S} が必要になります。これら二つを同時に扱うために液晶のテンソル秩序パラメータを導出しましょう。図8.2のように、ダイレクター \mathbf{n} を z 軸に平行にとります。棒状分子の長軸の方向を示す単位ベクトル Ω の各成分を、 Ω_i ($i, j = x, y, z$) とします。 Ω_i の配向分布関数 $f_d(\theta)$ で平均を取った量

$$\langle \Omega_i \rangle = \int \Omega_i f_d(\theta) d\Omega \quad (\text{E.2.1})$$

を考えましょう。ここで、 $d\Omega (= 2\pi \sin\theta d\theta)$ は立体角、 $\langle \cdots \rangle$ は平均値を示します。ネマチック相では、 Ω と $-\Omega$ の状態に区別はなく、 $f_d(\Omega) = f_d(-\Omega)$ なので、常に $\langle \Omega_i \rangle = 0$ となります。

次に、 $\langle \Omega_i \Omega_j \rangle$ を考えましょう。等方相では、

$$\langle \Omega_x^2 \rangle = \langle \Omega_y^2 \rangle = \langle \Omega_z^2 \rangle \quad (\text{E.2.2})$$

$$\langle \Omega_x \Omega_y \rangle = \langle \Omega_y \Omega_z \rangle = \langle \Omega_z \Omega_x \rangle = 0 \quad (\text{E.2.3})$$

であり、

$$\Omega_x^2 + \Omega_y^2 + \Omega_z^2 = 1 \quad (\text{E.2.4})$$

なので、

$$\langle \Omega_i \Omega_j \rangle = \frac{1}{3} \delta_{ij} \quad (\text{E.2.5})$$

と書くことができます。ここで、 δ_{ij} はクロネッカーのデルタ関数です。したがって、ネマチック相を記述するために等方相からの差を用いて、2階のテンソルを以下のように定義します。

$$Q_{ij} = \frac{3}{2} \left\langle \Omega_i \Omega_j - \frac{1}{3} \delta_{ij} \right\rangle \quad (\text{E.2.6})$$

この量がネマチック相における分子の配向秩序の程度を記述することになり、等方相ではゼロ、ネマチック相ではゼロでない値をもつこととなります。

ダイレクター \mathbf{n} の各成分を n_i ($i, j = x, y, z$) として, 式 (E.2.6) の両辺に $n_i n_j$ をかけると,

$$n_i n_j Q_{ij} = \frac{3}{2} \left\langle n_i n_j \Omega_i \Omega_j - \frac{1}{3} \delta_{ij} n_i n_j \right\rangle = \frac{3}{2} \left\langle (\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\Omega})^2 - \frac{1}{3} \right\rangle = \mathbf{s} \quad (\text{E.2.7})$$

となります. ここで, \mathbf{s} は式 (8.2.7) で定義した配向秩序パラメータです. 式 (E.2.7) の両辺に $(3/2)n_i n_j - (1/2)\delta_{ij}$ をかけると,

$$n_i n_j \left(\frac{3}{2} n_i n_j - \frac{1}{2} \delta_{ij} \right) Q_{ij} = \mathbf{s} \left(\frac{3}{2} n_i n_j - \frac{1}{2} \delta_{ij} \right) \quad (\text{E.2.8})$$

となります. 左辺を計算すると,

$$n_i n_j \left(\frac{3}{2} n_i n_j - \frac{1}{2} \delta_{ij} \right) = \frac{3}{2} n_i^2 n_j^2 - \frac{1}{2} n_i n_j \delta_{ij} = \frac{3}{2} - \frac{1}{2} n_i^2 = 1 \quad (\text{E.2.9})$$

となるので, 式 (E.2.8) に代入すると,

$$Q_{ij} = \frac{3}{2} \mathbf{s} \left(n_i n_j - \frac{1}{3} \delta_{ij} \right) \quad (\text{E.2.10})$$

を得ます. 式 (E.2.10) は, 棒状分子の分布がダイレクター \mathbf{n} に関して一軸対称性を持つ場合の, テンソル秩序パラメータとよばれています. テンソル秩序パラメータは, 分子がダイレクターのまわりにどのぐらい平均的に配向しているかを示すスカラー配向パラメータ \mathbf{s} と, ダイレクター \mathbf{n} の空間分布の両方を扱えます.

また, テンソル秩序パラメータの対角和は,

$$Q_{ii} = \text{Tr}(Q) = Q_{xx} + Q_{yy} + Q_{zz} = 0 \quad (\text{E.2.11})$$

となります. これをトレースレスとよびます. また対称テンソル $Q_{ij} = Q_{ji}$ です.

空間微分は, たとえば,

$$\partial_i Q_{ik} = \frac{3}{2} \left[\mathbf{s} \partial_i (n_i n_k) + \left(n_i n_k - \frac{1}{3} \delta_{ik} \right) \partial_i \mathbf{s} \right] \quad (\text{E.2.12})$$

$$n_i \partial_i n_k = n_x \partial_x n_k + n_y \partial_y n_k + n_z \partial_z n_k = (\mathbf{n} \cdot \nabla) \mathbf{n} = -\mathbf{n} \times (\nabla \times \mathbf{n}) \quad (\text{E.2.13})$$

$$n_k \partial_i n_i = n_k \nabla \cdot \mathbf{n} = \mathbf{n} (\nabla \cdot \mathbf{n}) \quad (\text{E.2.14})$$

$$n_i \partial_i \mathbf{s} = n_x \partial_x \mathbf{s} + n_y \partial_y \mathbf{s} + n_z \partial_z \mathbf{s} = \mathbf{n} \cdot (\nabla \mathbf{s}) \quad (\text{E.2.15})$$

$$(\partial_k n_i n_j)^2 = (\partial_k n_i)^2 + 2(n_i \partial_k n_i)(n_j \partial_k n_j) + (\partial_k n_i)^2 = 2(\partial_k n_j)^2 \quad (\text{E.2.16})$$

などになります.