

ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В ЖИДКИХ КРИСТАЛЛАХ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ВНЕШНИХ ПОЛЕЙ

В.Н. Блинов¹, В.Л. Голо², Е.И. Кац³

¹*Научный центр в Черноголовке РАН, Черноголовка*

²*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва*

³*Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау, Черноголовка
Московский физико-технический институт, Долгопрудный*

blinov.veniamin@gmail.com, voislav.golo@gmail.com, efim.i.kats@gmail.com

Поступила 25.11.2015

Важную часть физики жидких кристаллов составляет изучение их свойств под действием внешних полей. Для рассмотрения этого эффекта для общего класса биаксиальных нематиков в одномерном случае мы применяем теоретическое описание, которое позволяет получить структуру системы, решая задачу минимизации свободной энергии. При этом, явная оптимизация по значению свободной энергии осложнена необходимостью разрешения нелинейных связей. В настоящем изложении указанная проблема обходится посредством использования метода, аналогичного формализму угловых скоростей в уравнениях Эйлера динамики твёрдого тела. Роль угловой скорости играет вектор внутренней кривизны жидкокристаллической текстуры, а роль системы координат, связанной с телом – параметр порядка. В рамках этого подхода мы приводим систему уравнений, описывающую всевозможные одномерные текстуры биаксиального нематика во внешнем поле. На основе такого подхода возможна экспериментальная оценка «степени биаксиальности» жидких кристаллов, образованных молекулами сложной формы

УДК 538.91, 539.22, 532.783

1. Введение

Жидкие кристаллы (ЖК) представляют собой состояние вещества, сочетающее в себе свойства жидкости и кристалла. Первые обычно проявляются в быстром и лёгком изменении формы. Более аккуратная формулировка этого свойства уже зависит от типа жидкого кристалла, однако по сравнению с твёрдым телом все они относительно легко меняют форму. От твёрдого тела таким веществам достались необычные оптические свойства. Именно этим сочетанием жидкие кристаллы обязаны своему успеху в технологических применениях.

Особенности ЖК-систем обусловлены их микроскопической структурой. Так, самый простой из них, *нематический*, образован вытянутыми молекулами, которые в определённых условиях (обычно при низкой температуре или высокой концентрации) образуют упорядоченную структуру, которая характеризуется появлением выделенного направления, вдоль которого стремятся сориентироваться вытянутые молекулы. Выбор молекул другой формы представляет возможность иного типа упорядочения молекул на микроскопическом уровне. В настоящей статье нас будут интересовать биаксиальные (двухосные) жидкие кристаллы, характеризующиеся наличием выделенных направлений. Если наглядно представлять себе вытянутую молекулу нематика (одноосного) как эллипсоид с длинами осей (10, 1, 1), где первая ось задаёт выделенное направление, то молекула двухосного нематика – (1, 3, 9), когда выделенное направление вдоль третьей оси больше остальных, но и второе направление выделено по сравнению с первым. В реальном биаксиальном нематике всё немного сложнее, но интуитивно этот пример помогает понять разницу. Можно сказать, что биаксиальный нематик – тоже нематик, но на его биаксиальность, если она выражена слабо, в первом приближении внимания не обращают.

Биаксиальные жидкие кристаллы – крайне интересные системы. Так, с фундаментальной точки зрения их физическое описание связано с совершенно различными разделами науки, от гидродинамики и реологии до биологии и общей теории относительности. С практической точки зрения биаксиальные ЖК широко известны благодаря технологическим применениям одноосных нематиков при изготовлении дисплеев. Поле применения биаксиальных ещё шире ввиду относительно быстрой ориентационной динамике при воздействии внешних полей. Несмотря на то, что лиотропные биаксиальные жидкие кристаллы уже хорошо известны, [1-9], вопрос о существовании термотропных ЖК такого типа остаётся открытым и активно обсуждается [10-18]. Именно термотропные биаксиальные нематики представляют основной интерес с прикладной точки зрения, поскольку ориентационная динамика лиотропных значительно более медленная.

Тем не менее, оба типа биаксиальных ЖК можно теоретически изучать с одной и той же отправной точки – с поведения жидкого кристалла во внешних полях: электрических и магнитных, постоянных или переменных. Данное обстоятельство обусловлено тем фактом, что электрооптические эффекты в жидких кристаллах представляют собой ориентационный переход, вызванный внешним полем. Одним из основных эффектов в этой области является *переход Фредерикса*, которому посвящено множество работ с момента его открытия в одноосном нематике [19]. Физический механизм явления следующий. Для того, чтобы получить ориентационный переход, внешнее поле должно действовать таким образом, чтобы создать момент вращения на нематический параметр порядка – вектор \mathbf{n} «без направления», то есть, когда направления \mathbf{n} и $-\mathbf{n}$ отождествляются. В случае, когда значение указанного момента ненулевое, возникает две конкурирующие силы, стремящиеся упорядочить молекулы нематика. Первая из них возникает за счёт граничных условий, а вторая – за счёт крутящего момента, создаваемого внешним полем. При этом переход происходит, когда поле превышает некоторое пороговое значение. В случае тонкой упорядоченной плёнки одноосного нематика с бесконечно сильным связыванием на границах этот переход непрерывный (второго рода).

Несмотря на то, что и магнитное, и электрическое поле могут создать момент и спровоцировать ориентационный переход, механизм воздействия электрического поля более сложен. Это объясняется тем, что почти все ЖК-материалы имеют конечную проводимость переменного тока, в результате чего потоки масс и заряда могут привести к различным электро-гидродинамическим эффектам, маскирующим (или полностью разрушающим) стационарный эффект Фредерикса. Более того, даже в случае идеального изолятора, внешнее поле может вызвать изменение квадрупольного по своей природе параметра порядка, создавая дипольную поляризацию. Этот эффект (*флексо-электрический*) может быть сформулирован для биаксиального случая в следующей форме

$$P_i = e_1 \frac{\partial}{\partial x_k} Q_{ik} + e_2 \varepsilon_{i\beta k} Q_{k\alpha} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \frac{\partial}{\partial x_\gamma} Q_{\alpha k}, \quad (1)$$

где \mathbf{P} – вектор поляризации, e_1 и e_2 – две феноменологические флексоэлектрические постоянные, а ε_{ijk} – символ Леви-Чивита. Эта дипольная поляризация линейно связана со внешним электрическим полем и может конкурировать со стандартным квадратичным по полю эффектом, обусловленным диэлектрической анизотропией. Так, параметр порядка Q по своей природе должен быть пропорционален плотности электрического квадрупольного момента. Следовательно, плотность энергии, связанная с приложенным внешним полем, равна

$$F_E = -\frac{1}{2} \alpha Q_{ik} E_i E_k, \quad (2)$$

где коэффициент α – материальная константа (положительная или отрицательная), связывающая биаксиальный ориентационный порядок с квадрупольной плотностью. Аналогичное выражение (с точностью до замены буквы \mathbf{E} на \mathbf{H}) можно записать для магнитного поля. В дальнейшем для определённости мы будем рассматривать случай магнитного поля, который на наш взгляд представляется более простым. Так, рассмотрим слой упорядоченного биаксиального нематика, помещённый между двумя пластинами субстрата. При этом на всю систему действует постоянное магнитное поле \mathbf{H} . Случай электрического поля совершенно аналогичен если предположить, что изначально нематик идеально упорядочен, не проводит электрический ток, а флексоэлектрические постоянные пренебрежимо малы.

Главная задача настоящей работы – сформулировать новый теоретический подход к описанию биаксиальных текстур в терминах угловых моментов, или «угловых скоростей», пространственного распределения параметра порядка. Указанные моменты могут рассматриваться как калибровочные поля, описывающие текстуру. Используя указанный метод, мы обобщаем механизм перехода Фредерикса с одноосных нематиков на двуосные. В линейном приближении, анализ устойчивости биаксиальных текстур предсказывает возможность значительно иного поведения по сравнению с одноосным случаем.

Статья организована следующим образом. В следующем разделе представлены основные математические и физические идеи, на которых построен наш подход, а также выводятся уравнения, описывающие равновесные текстуры биаксиального нематика.

Следует отметить, что уравнения практически совпадают с получаемыми в теории Кирхгоффа для описания равновесной формы эластичной нити (стержня), которые, в свою очередь, схожи с уравнениями движения волчка. В третьем разделе приводится теоретический анализ полученных уравнений, где для ряда основных конфигураций параметра порядка (соответствующих граничных условий) и внешнего поля, получаются оценки критических полей Фредерикса в линейном приближении. Полученные результаты обсуждаются в заключительном разделе.

2. Теоретическое описание биаксиальных нематических текстур

Начнем формулировать нашу задачу с определения параметра порядка в случае биаксиального нематика. В каждой точке он определяется ортонормированным базисом из трёх векторов \mathbf{m} , \mathbf{n} и $\mathbf{l} = \mathbf{n} \times \mathbf{m}$ (здесь и далее жирным шрифтом обозначаются вектора), называемых *директорами*. Введённые вектора определяют характерные направления в микроскопической структуре, в некотором смысле аналогичные осям инерции твёрдого тела. Исходя из этой аналогии интуитивно понятно, что направления этих векторов не играют роли (то есть, \mathbf{n} и $-\mathbf{n}$ физически неразличимы, то же и с двумя оставшимися векторами), поэтому физически осмысленная величина параметра порядка должна являться квадратичной функцией этих векторов. Так, естественным выбором параметра порядка является квадрупольная плотность [20]:

$$Q_{ik} = S_u (n_i n_k - \frac{1}{3} \delta_{ik}) + S_b (m_i m_k - l_i l_k). \quad (3)$$

Это выражение содержит 5 независимых компонент: две скалярные величины S , характеризующие жёсткость нематика, и, например, три угла Эйлера для определения базисной тройки \mathbf{n} , \mathbf{l} , \mathbf{m} , и может рассматриваться как элемент 5-мерного представления группы симметрий $SO(3)$. Ниже мы будем рассматривать только случай одномерных текстур, то есть, плоскую слоевую структуру, в которой конфигурация нематика инвариантна относительно сдвигов в плоскости xy , параллельной плоскости слоя, а параметр порядка может меняться только вдоль третьей оси z , нормальной к поверхности слоя.

Имея выражение для параметра порядка, мы можем выразить свободную энергию текстуры в терминах введённых величин. По своему физическому смыслу, один из членов свободной энергии должен количественно выражать степень пространственной неоднородности распределения параметра порядка. В рамках теории Ландау этот член имеет квадратичный вид с двумя феноменологическими постоянными M_1 и M_2 (связанными с так называемыми постоянными Франка K ; например, для обычного одноосного нематика $K_{11} = K_{33} = 2S_u^2(M_1 + M_2/2)$, а $K_{22} = 2S_u^2 M_1$) следующим образом:

$$\mathfrak{F}_V = \int F_V d^3 x,$$

где плотность свободной энергии имеет вид

$$F_{\nabla} = \frac{1}{2} M_2 \partial_i Q_{ki} \partial_j Q_{kj} + \frac{1}{2} M_1 \partial_i Q_{kj} \partial_i Q_{kj}. \quad (4)$$

Следует отметить, что на нам известно мало о реальных значениях коэффициентов жёсткости в биаксиальных нематиках. При этом, в выражение (4) входит всего две величины, описывающие свойства такой системы (в сравнении, например, с 15 в случае явного использования ограничений, накладываемых симметрией биаксиальных нематиков [21]). В нашем случае, когда зависимость параметра порядка нетривиальна лишь для третьей компоненты z , градиентный член энергии можно переписать в виде

$$F_{\nabla} = \frac{1}{2} M_1 \text{Tr}(\dot{Q} \cdot \dot{Q}) + \frac{1}{2} M_2 (\dot{Q} \cdot \dot{Q})_{33}, \quad (5)$$

где точка над символами обозначает производную по z , а крышечка – матричное представление параметра порядка.

Поскольку мы рассматриваем слой конечной толщины, следует также уделить внимание граничным условиям, роль которых в некоторых случаях может оказаться значительной. В зависимости от рассматриваемой ситуации, возможны несколько вариантов граничных условий: когда слой зажат между пластинами, когда слой лежит на пластине, а другая его поверхность свободна, и т.д. Можно привести следующие варианты выражений, соответствующих граничной энергии:

- пластины могут создавать ситуацию, в которой параметр порядка на границах принимает заданное значение:

$$F_s = \frac{1}{2} W_0 [(Q_{ik}^0 - Q_{ik}(z=0))^2 + (Q_{ik}^0 - Q_{ik}(z=h))^2], \quad (6)$$

где W_0 – энергия связи на единицу площади;

- в случае изотропных пластин, не накладывающих жестких ограничений на значение параметра порядка, энергия на границах обусловлена разрушением вращательной симметрии и возникновением особого направления, трансверсального к плоскости пластин. В этом случае возникает анизотропный член энергии, который записывается в виде:

$$F_a = \frac{1}{2} W_a Q_{ik} \nu_i \nu_k, \quad (7)$$

где через ν обозначен вектор нормали к граничной поверхности.

- для свободной границы разумным предположением является условие нулевого момента на границе, то есть,

$$\dot{Q}_{ik}(z=h) = 0.$$

Альтернативным, хоть и менее реалистичным вариантом, было бы условие заданного момента на границе посредством приложения к пластине внешней силы. Математически это выразилось бы в отличной от нуля константе в правой части последнего выражения.

В случае, когда энергия связи нематика с поверхностью настолько велика, что любое отклонение значения параметра порядка от значения, предписываемого граничной

пластиной, чрезвычайно невыгодно энергетически, можно записать граничные условия в простом виде

$$Q(z=0) = Q(z=h) = Q_0, \quad (8)$$

которые заменят граничную энергию в указанном случае.

Теперь, когда мы ввели основные переменные системы, можно сформулировать задачу поиска равновесных конфигураций одномерных текстур биаксиального нематика. Так, чтобы описать любой тип одномерных текстур, включая возникающие в результате перехода Фредерикса, можно напрямую минимизировать функционал свободной энергии Ландау, записанный в терминах директора \mathbf{n} , [20]. В случае биаксиального нематика такой подход значительно осложняется тем, что величины \mathbf{l} , \mathbf{m} , \mathbf{n} не являются независимыми, а должны удовлетворять соотношениям

$$\begin{aligned} \mathbf{n}^2 = \mathbf{m}^2 = \mathbf{l}^2 &= 1, \\ \mathbf{n} \cdot \mathbf{m} = \mathbf{n} \cdot \mathbf{l} = \mathbf{m} \cdot \mathbf{l} &= 0. \end{aligned}$$

Стандартная минимизация функционала с учётом этих ограничений усложняет получаемые аналитические выражения, делая такой подход не практичным. Это заставляет искать иной подход к решению задачи минимизации, основываясь на топологии и группах симметрий рассматриваемой системы и возникающих пространств.

Рассмотрим выражение параметра порядка, заданного уравнением (3). Оно задаёт симметричную матрицу 3×3 с нулевым следом. Ключевым наблюдением, которое делает наш подход возможным, является тот факт, что такие матрицы могут быть записаны в виде

$$Q = R^{-1} Q_0 R, \quad (9)$$

где R – матрица трёхмерного поворота, а матрица Q_0 имеет вид

$$Q_0 = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & -(\lambda_1 + \lambda_2) \end{pmatrix}. \quad (10)$$

Выражая диагональные элементы этой матрицы через параметры уравнения (3), будем иметь

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= \frac{2}{3} S_u, \\ \lambda_2 &= S_b - \frac{1}{3} S_u, \\ \lambda_3 &= -(\lambda_1 + \lambda_2) = -S_b - \frac{1}{3} S_u, \end{aligned}$$

что, например, в случае $\lambda_1 = \lambda_2 = -1$ соответствует одноосному нематикку с директором, направленным вдоль оси z . Представление параметра порядка в виде (9) позволяет применить топологическое описание, используя геометрию матричных групп. Так, для

заданной матрицы Q_0 множество матриц параметра порядка образует т.н. *орбиту*. Метод, основанный на представлении пространственной или временной эволюции параметра порядка в виде орбиты по отношению к группе симметрий, уже продемонстрировал свою применимость в изучении текстур конденсированных сред, [22]. Следует также отметить, что указанный метод может применяться не только к задачам жидких кристаллов, [23, 24], но и для описания других сложных систем, например, с нетривиальным магнитным упорядочением, [25, 26]. Ниже для описания изменения матрицы параметра порядка мы будем использовать матрицу «угловой скорости»

$$\Omega = R^{-1} \cdot \dot{R}, \quad (11)$$

где, как и ранее, точка обозначает дифференцирование по z . Инфинитезимальные вращения задаются матрицами-генераторами f^k , $k = 1, 2, 3$, которые имеют вид

$$(f^k)_{ij} = -\varepsilon_{ijk}. \quad (12)$$

Здесь обозначение в правой части, как и ранее, соответствует символу Леви-Чивита. Коммутаторы этих матриц равны

$$[f^i, f^j] = \sum_{k=1}^3 \varepsilon_{kij} f^k. \quad (13)$$

Имеется также и скалярное произведение

$$\frac{1}{2} \text{Tr}(f^i \cdot f^j) = -\delta_{ij}. \quad (14)$$

Следует отметить, что матрица инфинитезимального поворота δR соответствует вектору с компонентами

$$\delta\omega_k = -\frac{1}{2} \text{Tr}(\delta R \cdot f^k).$$

Аналогичным образом угловая скорость может быть выражена либо через вектор ω , либо посредством кососимметрической матрицы

$$\Omega = \sum_{k=1}^3 \omega_k f^k.$$

Матрица Ω (и, что эквивалентно, вектор ω) является ключевым математическим инструментом нашего метода, через который осуществляется описание конфигураций текстур упорядоченной среды.

3. Минимизация свободной энергии

При изучении текстур биаксиальных нематиков важным обстоятельством является то, что матрица параметра порядка имеет три собственных значения $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$, которые, вообще говоря, попарно различны, а собственные векторы определяют локальную ориентацию жидкого кристалла. В нашем случае для описания перехода Фредерикса параметры матрицы параметра порядка могут изменяться при переходе от одной точки пространства к другой, представляя собой локальную характеристику состояния системы. В этом смысле, можно говорить о пространственном распределении параметра порядка, то есть, о текстурах, [20, 23]. Предлагаемый метод основан на идее рассмотрения параметра порядка в качестве непрерывной переменной, описывающей локальную внутреннюю структуру жидкого кристалла, [20]. Далее, мы предполагаем, что в этом случае можно записать выражение для свободной энергии, которое также будет учитывать и изменения параметра порядка. При этом, основная идея состоит в том, чтобы учесть пространственную неоднородность путём включения градиентных членов параметра порядка в выражение для свободной энергии, после чего использовать стандартное термодинамическое описание равновесных конфигураций сред со внутренними степенями свободы.

Мы будем записывать градиентные члены свободной энергии в виде (4), переписывая их в виде (5) и добавляя влияние внешнего магнитного поля в виде (2), которое можно записать в более удобном виде

$$U_H = -\frac{1}{2}\alpha \text{Tr}(\hat{e} \cdot Q), \quad (15)$$

где матрица \hat{e} имеет вид

$$e_{ij} = H_i \cdot H_j.$$

В одноосном случае коэффициент α может быть выражен через анизотропную часть магнитной восприимчивости χ_a в виде

$$\alpha = \chi_a S_u.$$

Плотность полной энергии текстуры во внешнем магнитном поле имеет вид

$$F = F_{\nabla} + U_H \quad (16)$$

полная энергия плёнки при этом равна

$$\mathfrak{F} = \int_0^h F dz,$$

где h – толщина плёнки.

Важным обстоятельством выбора формы матрицы параметра порядка является то, что матрица, задаваемая выражением (9) всегда даёт самосогласованное алгебраическое описание текстур. При этом, следует учитывать также и скорость изменения параметра порядка, сравнивая его значения в различных точках пространства. Для этого необхо-

димом рассматривать параметр порядка как функцию пространственных переменных, в нашем случае, $Q(z)$. Исходя из выражения (9), можно заключить, что для описания этой функции можно рассматривать матрицу вращений $R(z)$ как функцию точки пространства. При этом, малые изменения параметра z соответствуют инфинитезимальным вращениям δR , которые задаются кососимметрическими матрицами. Таким образом, мы имеем множество симметричных матриц с нулевым следом, описывающих поведение параметра порядка в текстуре, и кососимметрические матрицы для описания их инфинитезимальных поворотов.

Рассмотрим вариации функционала полной энергии системы, заданного в виде (17). Важно, что вариация матрицы параметра порядка получается из вариации матрицы поворота R . Последняя, в свою очередь, может быть изменена вращением

$$R' = R \cdot \hat{S}$$

с другой матрицей вращения \hat{S} . Рассматривая инфинитезимальное вращение $\delta \hat{S}$, имеем

$$\delta R = R \cdot \delta \hat{S}.$$

Пользуясь приведёнными выражениями можно написать вариацию параметра порядка в виде

$$\delta Q = [Q, \delta \hat{S}]$$

и вариацию угловой скорости, которая может быть представлена в виде ковариантной производной, применённой к $\delta \hat{S}$

$$\delta \Omega = \frac{d}{dz} \delta \hat{S} - [\delta \hat{S}, \Omega].$$

Записывая

$$\delta \hat{S} = \sum_{i=1}^3 \delta s_i f^i,$$

можно переписать вариацию угловой скорости в терминах вектора вращения

$$\delta \omega = \frac{d}{dz} \delta \mathbf{s} + \omega \times \delta \mathbf{s}.$$

Аналогичным образом вариация параметра порядка переписывается как

$$\begin{aligned} \delta Q &= \sum_{i=1}^3 a_i \delta s_i, \\ a_i &= [Q, f^i]. \end{aligned} \quad (18)$$

Наконец, используя полученные выражения для вариаций, можно переписать плотность свободной энергии (17) в виде

$$F = \sum_{i,j=1}^3 \left[\frac{1}{2} M_1 \text{Tr}(a_i a_j) + \frac{1}{2} M_2 (a_i a_j)_{33} \right] \omega_i \omega_j - \frac{1}{2} \alpha \text{Tr}(e \cdot Q), \quad (19)$$

$$\delta Q = \sum_{i=1}^3 a_i \delta s_i,$$

используя далее вариации Q , a_i и ω_i в виде $\delta a_i = \sum_{j=1}^3 [a_i, f^j] \delta s_j$, (20)

$$\delta \omega_i = \frac{d}{dz} \delta s_i + \sum_{j,k=1}^3 \varepsilon_{ijk} \omega_j \delta s_k.$$

можно получить уравнения Эйлера для траектории, минимизирующей свободную энергию системы. Эти уравнения и представляют основной инструмент анализа текстур биаксиального нематика. Важным преимуществом полученных уравнений является то, что они явно учитывают структуру параметра порядка

$$\frac{d}{dz} L_i - (\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{L})_i + \sum_{j=1}^3 \text{Tr} \left(\frac{\partial F}{\partial a_j} \cdot [a_j, f^i] \right) - \frac{1}{2} \alpha \text{Tr}(\hat{e} \cdot a_i) = 0, \quad (21)$$

где компоненты введённого вектора \mathbf{L} имеют вид

$$L_i = \frac{\partial F}{\partial \omega_i}.$$

Уравнения (21) являются основным техническим результатом работы. Они представляют собой форму записи уравнений равновесных текстур биаксиальных нематиков, в которых учтены все условия и ограничения на параметры системы, в также включено влияние внешнего магнитного поля.

4. Анализ устойчивости в линейном приближении

В данном разделе проводится анализ выведенных в предыдущем разделе уравнений. Для демонстрации эффективности данного метода мы рассмотрим далее текстуры, близкие к невозмущённому состоянию, определённым условиями

$$\begin{aligned} Q &= Q_0, \\ \boldsymbol{\omega} &= 0. \end{aligned}$$

Этот случай соответствует малым значениям вектора кривизны текстуры $|\boldsymbol{\omega}| \ll 1$.

Используя полученные ранее выражения для вариаций a_i и $\boldsymbol{\omega}$, получим из условия $\delta \mathfrak{S} = 0$ уравнения на минимум свободной энергии с точностью до членов первого порядка по $\boldsymbol{\omega}$:

$$\frac{d}{dz} L_i - \frac{1}{2} \alpha \text{Tr}(\hat{e} \cdot a_i) = 0,$$

где

$$L_i = \frac{\partial F}{\partial \omega_i} = 2 \sum_{j=1}^3 I_{ij} \omega_j,$$

$$I_{ij} = \frac{1}{2} M_1 \text{Tr}(a_i^{(0)} a_j^{(0)}) + \frac{1}{2} M_2 (a_i^{(0)} a_j^{(0)})_{33},$$

в этом выражении

$$a_i^{(0)} = \left[Q_0, f^i \right].$$

В рамках приближений, упомянутых выше, уравнения на текстуры имеют вид

$$\frac{d}{dz} a_i = \sum_{j=1}^3 \left[a_j^{(0)}, f^i \right] \omega_j. \quad (23)$$

Решения уравнений (22) и (23) соответствуют равновесным одномерным текстурам биаксиальных жидких кристаллов в рамках приближения, описанного ранее. Перепишем их в виде системы уравнений второго порядка, дифференцируя уравнения (22):

$$\frac{d^2}{dz^2} L_i - \frac{1}{2} \alpha \sum_{j=1}^3 \Lambda_{ij} \omega_j = 0, \quad (24)$$

где

$$\Lambda_{ij} = \text{Tr} \left\{ \hat{e} \cdot \left[f^i, a_j^{(0)} \right] \right\}.$$

В явном виде компоненты матрицы I_{ij} записываются в виде

$$I_{11} = (2M_1 + M_2)(\lambda_1 + 2\lambda_2)^2,$$

$$I_{22} = (2M_1 + M_2)(2\lambda_1 + \lambda_2)^2,$$

$$I_{33} = 2M_1(\lambda_1 - \lambda_2)^2,$$

$$I_{ij} = 0, \quad \text{если } i \neq j$$

а матрица Λ_{ij} имеет вид

$$\Lambda = 2 \begin{bmatrix} (\lambda_1 + 2\lambda_2)(H_2^2 - H_3^2) & (2\lambda_1 + \lambda_2)H_1H_2 & (\lambda_2 - \lambda_1)H_1H_3 \\ (2\lambda_1 + \lambda_2)H_1H_2 & (2\lambda_1 + \lambda_2)(H_1^2 - H_3^2) & -(\lambda_2 - \lambda_1)H_2H_3 \\ (\lambda_2 - \lambda_1)H_1H_3 & -(\lambda_2 - \lambda_1)H_2H_3 & -(\lambda_2 - \lambda_1)(H_1^2 - H_2^2) \end{bmatrix}. \quad (25)$$

Запишем полученные выражения для одноосного нематика и посмотрим, к каким последствиям это приведёт. В случае, когда директор нематика изначально направлен вдоль оси x , будем иметь

$$\begin{aligned}\lambda_1 &= 2, \\ \lambda_2 &= -1, \\ \lambda_3 &= -1.\end{aligned}$$

Компоненты внешнего поля возьмём равными

$$\begin{aligned}H_1 &= 0, \\ H_2 &= H, \\ H_3 &= 0,\end{aligned}$$

тогда согласно (25), все компоненты матрицы Λ_{ij} равны нулю кроме одной:

$$\Lambda_{33} = -6H^2.$$

Используя это выражение, а также значение I_{33} , полученное ранее, будем иметь следующее уравнение, аналогичное уравнению Эйлеровой неустойчивости для эластичных стержней:

$$6M_1\ddot{\omega}_3 + \alpha H^2\omega_3 = 0, \quad (26)$$

откуда выражение для критического значения магнитного поля имеет вид

$$H_c = \sqrt{\frac{6M_1}{\alpha}} \frac{\pi}{h}.$$

Это выражение с точностью до обозначений параметров совпадает с критическим полем для эффекта Фредерикса [20]. Действительно, подставляя соответствующие значения параметров

$$\begin{aligned}M_1 &= \frac{K}{2S_u^2}, \\ M_2 &= 0, \\ \alpha &= \frac{\chi_a}{S_u}, \\ \lambda_1 &= \frac{2S_u}{3}\end{aligned}$$

получаем формулу из книги

$$H_c = (\pi/h)(K/\chi_a)^{1/2}.$$

Ситуация будем несколько иной в случае биаксиального нематика (конфигурация плёнки в этом случае изображена на рисунке 1). Так, вместо одного уравнения будем иметь систему

$$\begin{aligned}(2M_1 + M_2)(\lambda_1 + 2\lambda_2)\ddot{\omega}^1 - \alpha H^2\omega_1 &= 0 \\ 2M_1(\lambda_2 - \lambda_1)\ddot{\omega}_3 - \alpha H^2\omega_3 &= 0\end{aligned} \quad (27)$$

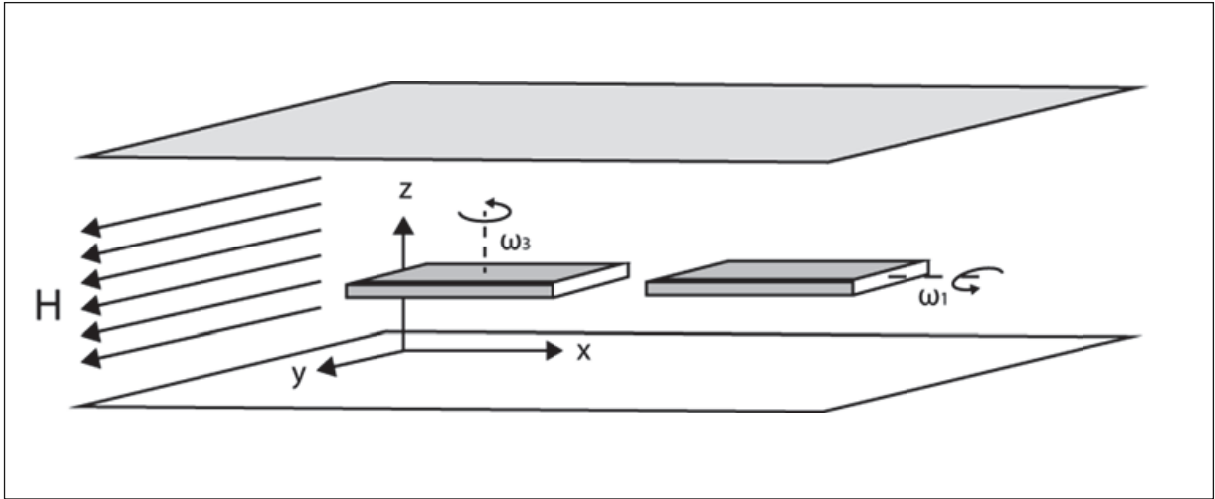


Рис. 1. Конфигурация пленки биаксиального нематика во внешнем поле.

для малых значений отклонений от равновесного состояния, описываемых переменными $\omega_{1,3}$. В случае, когда выполнены неравенства

$$\frac{\lambda_1 + 2\lambda_2}{\alpha} < 0,$$

$$\frac{\lambda_2 - \lambda_1}{\alpha} < 0$$

изначальное состояние $\omega = 0$ остаётся устойчивым при любых значениях внешнего поля. Однако в случае, когда хотя бы одно из условий не выполняется, мы получаем одно или два критических значения поля, при которых конфигурация системы перестаёт быть устойчивой. Так, например, если оба неравенства не выполняются, получаем два значения критического поля, задаваемые выражениями

$$H_{c1} = \frac{\pi}{h} \sqrt{2M_1 + M_2} \sqrt{\frac{\lambda_1 + 2\lambda_2}{\alpha}},$$

$$H_{c2} = \frac{\pi}{h} \sqrt{2M_1} \sqrt{\frac{\lambda_2 - \lambda_1}{\alpha}}. \quad (28)$$

Если предположить, что упругие константы и магнитная восприимчивость (диэлектрическая проницаемость) двуосного нематика не отличаются на порядки величин, а являются величинами того же порядка, что и соответствующие численные характеристики одноосных нематиков, оценка значения критических полей будет порядка 10^3 – 10^4 Гс (для слабо-биаксиальных нематиков, т.е. когда $\Delta\lambda \leq 0.1$, а толщина плёнки составляет порядка $h = 10 \mu\text{m}$), что соответствует напряжению 1 – 10 В.

Ввиду того, что значения компонент вектора ω в рамках нашего приближения даётся независимыми уравнениями (27), можно предположить, что должны наблюдаться два перехода Фредерикса, каждый из которых соответствует своему полю H_c , причем каждое из этих пороговых полей соответствует своему качественному изменению текстуры.

Вновь возвращаясь к одноосному случаю, можно отметить, что для него один из порогов обращается в ноль. Так, например, если $\lambda_1 = \lambda_2$, $H_{c2} = 0$. Это обстоятельство можно понять интуитивно: действительно, в случае обычного нематика ($\lambda_1 = \lambda_2$) уже в исходной конфигурации текстуры имеется ненулевой момент, а потому любое поле начнет изменять текстуру, то есть, порогового эффекта нет.

В биаксиальном случае даже для такой простой конфигурации можно ожидать существования двух типов переходов Фредерикса. Первый из них аналогичен переходу в обычных нематиках, и связан с компонентой вращения ω_3 . Вдобавок к нему, при выполнении условий $\alpha < 0$, $\lambda_1 + 2\lambda_2 > 0$ возможен также и другой переход Фредерикса, связанный с возникновением ненулевой компоненты ω_1 . В зависимости от характеристик материала (упругие константы, диэлектрическая и магнитная анизотропия, величины собственных значений параметра порядка) один из двух переходов происходит первым. Интуитивное объяснение (хотя и не полностью правильное физически, о чём будет сказано ниже) такого поведения можно построить, исходя из сравнения энергии внешнего поля (2) и упругой энергии F_v (5). Поскольку параметр порядка в случае биаксиального нематика (3) состоит из двух частей, одноосной $S_u(n_i n_k - \delta_{ik} / 3)$ и биаксиальной $S_b(m_i m_k - l_i l_k)$, то можно предположить, что для каждой из них возможен свой переход и своё значение порогового поля. На рисунке 2 показана зависимость критического поля H_{c1} от параметров λ_1 и λ_2 . Следует отметить, что два условия

$$\begin{aligned}\lambda_1 + 2\lambda_2 &= 0 \\ \lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 &= 0\end{aligned}$$

соответствуют случаю одноосного нематика с $\lambda_2 = \lambda_3$. При этом, в зависимости от знака α , малые отклонения от этих условий (а, точнее, первого из них) приводят либо к устойчивой, либо к неустойчивой текстуре с ненулевым значением ω_1 .

Для второго критического поля H_{c2} определяющим является условие $\lambda_1 = \lambda_2$, соответствующее направлению оси директора вдоль оси z . Поведение в окрестности этой точки аналогично описанному выше случаю с точностью до замены ω_1 на ω_3 . Очевидно, что одновременно оба условия $\lambda_1 = \lambda_2$ и $\lambda_1 + 2\lambda_2 = 0$ выполняются в единственной точке $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3 = 0$, соответствующей неупорядоченному состоянию.

Поверхности обоих значений критических полей изображены на рисунке 3. Эти поверхности пересекаются по некоторой кривой, проекция которой на плоскость $H = 0$ имеет вид

$$\left(\frac{3M_1}{M_2} + \frac{1}{2} \right) \lambda_1 = -\lambda_2.$$

Это уравнение прямой, содержащей значения параметров, при которых происходит вырождение критических полей в одно значение; при этом оба перехода происходят при одном и том же пороговом значении поля.

Вернемся к уравнениям (27). Как уже отмечалось ранее, из них следует наличие двух переходов Фредерикса, каждый из которых имеет собственное критическое поле. Однако, поскольку мы пользовались линейным приближением, значение большего из них следует определять уже в рамках уравнения текстуры, возмущенной первым

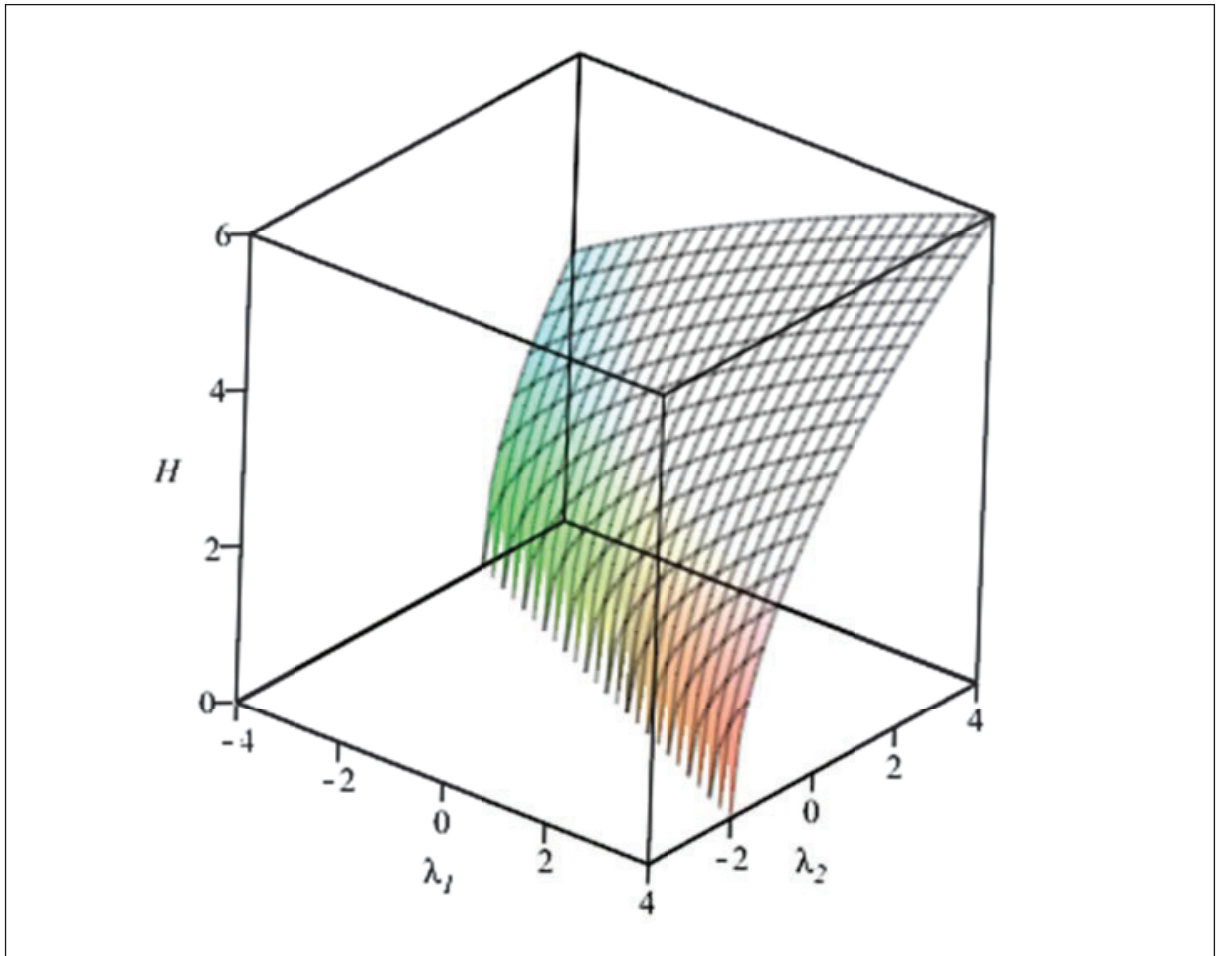


Рис. 2. Зависимость значения критического поля H_{c1} (см. (28)) от параметров биаксиального нематика λ_1 и λ_2 в случае $\alpha = 1, \frac{\pi}{h}\sqrt{2M_1 + M_2} = \sqrt{3}$.

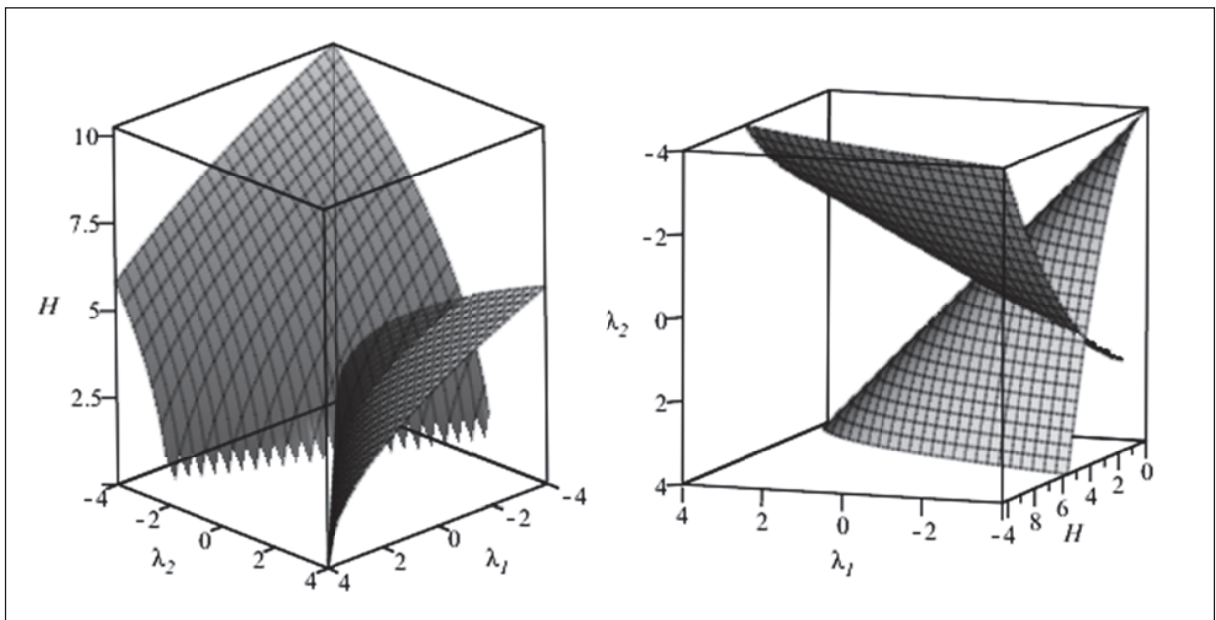


Рис. 3. Зависимость значений критических полей H_{c1} и H_{c2} (см. (28)) от параметров биаксиального нематика λ_1 и λ_2 .

переходом. Это уравнение, естественно, выходит за рамки приближения (27), поэтому необходимо рассматривать другое приближение, например, раскладывая до более высоких порядков в соответствии с теорией возмущения.

Тем не менее, общие уравнения текстур сохраняют свою силу, поскольку этот результат получен без использования предположений линейности (как и других, сделанных далее для простоты изложения). Однако, несмотря на то, что нелинейные эффекты могут привести к некоторым изменениям поведения рассматриваемой модели, получение результатов, существенным образом качественно отличающихся от описанных выше, представляется маловероятным. Физические явления, лежащие в основе представленного описания жидких кристаллов одинаковы в линейном и нелинейном приближении, а все параметры, входящие в уравнения, имеют чёткую физическую интерпретацию и могут быть измерены экспериментально.

Следует отметить, что в настоящей работе мы рассмотрели лишь простейший случай текстур, в котором конфигурация системы достаточно проста, а конфигурация жидкого кристалла мало отличается от равновесного состояния. В общем случае необходимо решать систему из трёх зависящих друг от друга нелинейных дифференциальных уравнений. По этой причине поведение текстур может оказаться значительно более сложным по сравнению с представленным здесь случаем, а решать такие системы, по видимому, необходимо с использованием численных методов. Более подробный анализ уравнений выходит за рамки тематики этой работы.

5. Заключение

Как показывает случай биаксиальных нематиков, описание текстур более сложных систем не следует проводить, используя те же методы, что и для одноосных нематиков. Усложнение модели в этом случае делает работающую в более простом случае методику чрезвычайно сложной, ввиду чего возникает необходимость в переформулировке модели в других переменных, что позволило бы упростить получаемые уравнения. В настоящей работе мы привели один из вариантов такой переформулировки, который основан на математическом аппарате, применяемом для описания движения твёрдого тела. В рамках рассматриваемых задач он принимает форму калибровочной теории, где поле Ω , описывающее кривизну текстуры, играет роль калибровочного. Такой подход позволяет эффективно использовать симметрии параметра порядка биаксиального нематика, имеющие сложную топологическую структуру [27].

Вопрос, который мы не затрагивали в работе, состоит в нелинейном анализе структуры текстур, когда значения полей превосходят критические. Следует отметить, однако, что исследование даже одномерных текстур биаксиальных нематиков оказалось сложной математической задачей, и значительно более интересной, чем мы ожидали. В данной работе сделать важный первый шаг в этом направлении. Развитие теории в этой области тесно связано с экспериментальными результатами, и появление последних в этой области несомненно спровоцирует новые и новые теоретические исследования физических особенностей биаксиальных нематиков для конкретных веществ и систем.

Литература

1. *Borshch V. et al.* Nanosecond electro-optics of a nematic liquid crystal with negative dielectric anisotropy // *Phys. Rev. E* **90**, 062504 (2014).
2. *Yu L. J., Saupe A.* Observation of a Biaxial Nematic Phase in Potassium Laurate-1-Decanol-Water Mixtures // *Phys. Rev. Lett.* **45**, 1000 (1980).
3. *Chandrasekhar S. et al.* A biaxial nematic liquid crystal // *J. Phys.* **30**(5), L491-L495 (1988).
4. *Praefcke K. et al.* Thermotropic biaxial nematic phases with negative optical character [1] // *Liquid Crystals* **7**(4), 589-594 (1990).
5. *Chandrasekhar S. et al.* A thermotropic biaxial nematic liquid crystal // *Molecular Crystals and Liquid Crystals* **165**(1), 123-130 (1988).
6. *Hessel F., Finkelmann H* Optical biaxiality of nematic LC-side chain polymers with laterally attached mesogenic groups // *Polymer Bulletin* **15**(4), 349-352 (1986).
7. *Freiser M. J.* Ordered states of a nematic liquid // *Phys. Rev. Lett.* **24**(19), 1041 (1970).
8. *Windle A. H.* Molecular correlation in thermotropic copolyesters // *Faraday discussions of the Chemical Society* **79**, 55-72 (1985).
9. *Chandrasekhar S., Rajaand V. N., Sadashiva B.K.* X-ray study of a thermotropic biaxial nematic liquid crystal // *Molecular Crystals and Liquid Crystals Letters* **7**(2), 65-71 (1990).
10. *Stannarius A.* Comment on “Dynamics of electro-optical switching processes in surface stabilized biaxial nematic phase found in bent-core liquid crystal” // *J. Appl. Phys.* **104**(3), 036104 (2008).
11. *Van Le K. et al.* Electro-optic technique to study biaxiality of liquid crystals with positive dielectric anisotropy: The case of a bent-core material // *Phys. Rev. E* **79**(3), 030701 (2009).
12. *Vaupotič N. et al.* Structure studies of the nematic phase formed by bent-core molecules // *Phys. Rev. E* **80**(3), 030701 (2009).
13. *Senyuk B. et al.* Surface alignment, anchoring transitions, optical properties, and topological defects in the nematic phase of thermotropic bent-core liquid crystal A131 // *Phys. Rev. E* **82**(4), 041711 (2010).
14. *Senyuk B. et al.* Surface alignment, anchoring transitions, optical properties and topological defects in nematic bent-core materials C7 and C12 // *Molecular Crystals and Liquid Crystals* **540**(1), 20-41 (2011).
15. *Ostapenko T. et al.* Magneto-optical technique for detecting the biaxial nematic phase // *Phys. Rev. E.* **84**(2), 021705 (2011).
16. *Zhang C. et al.* Biaxial nematic order induced by smectic fluctuations // *Phys. Rev. E* **86**, 020704(R) (2012).
17. *Kim Y.K. et al.* Search for biaxiality in a shape-persistent bent-core nematic liquid crystal // *Soft Matter* **8**(34), 8880-8890 (2012).
18. *Jákli A.* Liquid crystals of the twenty-first century—nematic phase of bent-core molecules // *Liquid Crystals Reviews* **1**(1), 65-82 (2013).

19. *Fréedericksz V., Zolina, V.* Forces causing the orientation of an anisotropic liquid // *Trans. Faraday Soc.* **29**, 919-930 (1933).
20. *de Gennes P.G., Prost J.* *The Physics of Liquid Crystals* // Claredon Press, Oxford, 1993.
21. *Brand H., Pleiner H.* Hydrodynamics of biaxial discotics // *Phys. Rev. A* **24**(5), 2777 (1981).
22. *Golo V. L., Monastyrskii M.I.* Currents in superfluid ^3He // *Lett. Math. Phys.* **2**, 373 (1978).
23. *Golo V. L., Kats E. I., Severyuk A. A., Sinitsyn D. O.* Twisted quasiperiodic textures of biaxial nematic liquid crystals // *Phys. Rev. E* **88**, 042504-7 (2013).
24. *Luchurst G.R., Sluckin T. J. (ed.)* *Biaxial Nematic Liquid Crystals: Theory, Simulation and Experiment* // Wiley, London, UK, 2015.
25. *Mescheriakova O. et al.* Large Noncollinearity and Spin Reorientation in the Novel Mn₂RhSn Heusler Magnet // arXiv: 1404.4581v2 (2014).
26. *Close A.R.D., Tronci C.* Equivalent variational approaches to biaxial liquid crystal dynamics // arXiv: 1503.03024v1 (2015).
27. *Monastyrskii M.I., Sasorov P.V.* Bound states of linear defects in biaxial nematics and superfluid liquids // *JETP* **102**(1), 149-154 (2006).

PHASE TRANSITIONS IN LIQUID CRYSTALS INDUCED BY EXTERNAL FIELDS

V.N. Blinov¹, V.L. Golo², E.I. Kats³

¹*Science center in Chernogolovka, Chernogolovka, Russia*

²*Department of Mechanics and Mathematics, Lomonosov Moscow State University,
Moscow, Russia*

³*Landau Institute for Theoretical Physics RAS, Chernogolovka, Moscow region, Russia
Moscow Institute of Physics and Technology, Dolgoprudny, Moscow region, Russia*

blinov.veniamin@gmail.com, voislav.golo@gmail.com, efim.i.kats@gmail.com

Received 25.11.2015

Practical applications of new materials are typically preceded by theoretical background that explains basic mechanisms of the experimental behavior. In case of biaxial nematic liquid crystals, applications require the study of the textural transformations in external electric or magnetic fields. Thus, one should develop theoretical approaches, which could have bearing on the minimization problem of the multi-parametric free energy. The immediate shortcoming of the direct free-energy minimization (widely used for uniaxial nematics) is the need to resolve certain non-linear constraints. To make it possible, in what follows we shall use the “angular velocity”, which describes space rotations of the order parameter, and is also a vector of internal curvature of the texture. This method provides a means to resolve the constraints imposed on the order parameter. Thus, we have obtained the set of equations to find all possible one-dimensional textures of biaxial nematic in the external field. To illustrate our method, we calculate the critical fields corresponding to some basic configurations for textural transitions in the biaxial nematics. This result could be useful to determine the intrinsic degree of biaxiality for liquid crystalline materials.