

УДК 532.783

ДИСКЛИНАЦИИ В НЕМАТИКАХ ПРИ УЧЕТЕ ФЛЕКСОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА

М.Р. АКОПЯН*, Р.С. АКОПЯН, Ю.С. ЧИЛИНГАРЯН

Ереванский государственный университет, Армения

*e-mail: hamara404@gmail.com

(Поступила в редакцию 24 июля 2013 г.)

Рассмотрена задача о влиянии флексоэлектричества на стабильность клиновидных (с чисто поперечным или продольным изгибами) дисклинаций в нематических жидких кристаллах (НЖК). Выведены уравнения движения директора НЖК в цилиндрической системе координат с учетом флексоэлектричества. Эти уравнения позволяют решить целый ряд задач о влиянии флексоэлектричества на ориентационные структуры НЖК. В частности, показано, что благодаря флексоэлектрическому эффекту линия дисклинации с радиальным распределением директора и поперечными размерами порядка нескольких микронов может быть стабилизирована. Для дисклинации с азимутальным распределением директора при всех физически реальных размерах линия неустойчива и вытекает в третье измерение.

1. Введение

Как известно, нематический жидкий кристалл (НЖК) своим названием обязан нитям, которые видны в этой жидкости под микроскопом. В тонких пленках, заключенных между двумя стеклянными пластинками, и при скрещенных поляризаторах нити можно увидеть в виде темных полос, исходящих из точек. Пучки этих полос обусловлены «линейными сингулярностями», перпендикулярными слою. По аналогии с дисклинациями в кристаллах Франк [1,2] предложил именовать эти «сингулярности» «дисинклинациями», а в настоящее время употребляется термин «дисклинации». Смысл этих текстур был понят Леманом [3] и Фриделем [4], однако математическое рассмотрение истинной конфигурации около дисклинации дали Озеен [5] и Франк [1]. Более полное обоснование теории дано в работах [6,7].

Предположим, что директор $\mathbf{n}$ находится в плоскости стенки ячейки с НЖК (тангенциальные граничные условия), и определим две ортогональные оси (x, y) в этой плоскости (см. рис.1). Обозначим расстояние между сингулярной точкой и точкой наблюдения через r , а ψ – угол между r и x ($\operatorname{tg}\psi = y/x$). Угол между $\mathbf{n}$ и осью x обозначим через θ . Приближенное соотношение для θ , справедливое с точки зрения симметрии, есть $\theta = s\psi + \text{const}$. Здесь s называется силой сингулярности, силой дисклинации, или топологическим зарядом. Таким

образом, если мы обойдем вокруг сингулярной точки по замкнутому контуру, сделав один полный оборот ($\Delta\psi = 2\pi$), то обнаружим, что директор повернулся на $\Delta\theta = 2\pi s$. Это справедливо только, если s – целое или полуцелое число (поскольку состояния $\mathbf{n}$ и $-\mathbf{n}$ неразличимы).

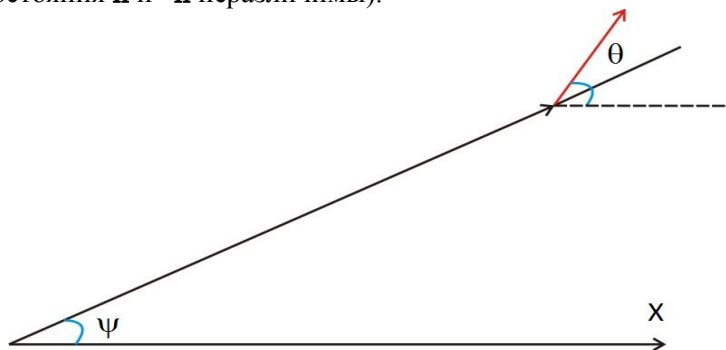


Рис. 1. Ориентация директора вдоль радиального луча, составляющего угол ψ с осью x . Директор составляет угол θ с осью x .

В работе [6] было показано, что искажения вокруг линии с целочисленной силой s всегда можно непрерывно преобразовать в гладкую структуру без сингулярной линии. Обсуждены также условия, при которых сингулярная линия может остаться устойчивой.

При механических деформациях (продольных или поперечных) в жидких кристаллах, т.е. из-за градиента тензорного параметра порядка, может возникать макроскопическая поляризация. Физическая природа этого флексоэлектрического эффекта была выяснена впервые в работе [8]. Существует также обратный флексоэлектрический эффект, когда электрическое поле вызывает дополнительную переориентацию директора ЖК.

В настоящей работе исследовано влияние флексоэлектрического эффекта на стабильность радиальной или аксиальной ориентации молекул НЖК вокруг сингулярной линии с топологическим зарядом $+1$. Получены условия стабильности по отношению к возмущению директора вне плоскости начальной ориентации. Для этого выведено уравнение директора в цилиндрических координатах вариационным принципом Эйлера-Лагранжа с учетом флексоэлектрических членов в выражении для свободной энергии НЖК. Данное рассмотрение полезно с точки зрения технологии приготовления жидкокристаллических аксионов для амплитудного и поляризационного преобразования лазерных пучков.

2. Свободная энергия НЖК, описывающая флексоэлектрический эффект

Чтобы описать флексоэлектрический эффект, напомним энергию, соответствующую отмеченному выше взаимодействию. Пусть имеем электрический потенциал ϕ , тогда электростатическое поле $E_i = -\partial\phi / \partial x_i$ ($x_i = x, y, z$ – координаты декартовой системы) и имеем $\text{curl}\mathbf{E} = 0$. Термодинамический потенциал в системе единиц СГС может быть написан как

$$W = W_0 + \frac{1}{8\pi} \varepsilon_{ik} \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} \frac{\partial \varphi}{\partial x_k} - F_d - F_{flex}. \quad (1)$$

Третий член в формуле (1) описывает упругую энергию деформации директора НЖК, которую мы напомним в обычном виде Озена–Франка:

$$F_d = \frac{1}{2} K_1 (\text{div} \mathbf{n})^2 + \frac{1}{2} K_2 (\mathbf{n} \text{curl} \mathbf{n})^2 + \frac{1}{2} K_3 (\mathbf{n} \times \text{curl} \mathbf{n})^2, \quad (2)$$

где K_i – упругие константы Франка. Матрица диэлектрического тензора НЖК $\varepsilon_{ik} = \varepsilon_{\perp} \delta_{ik} + \varepsilon_a n_i n_k$. Здесь $\varepsilon_{\parallel}$ и $\varepsilon_{\perp}$ – диэлектрические постоянные, измеренные вдоль и перпендикулярно к директору, ε_a – анизотропия диэлектрической проницаемости и δ_{ik} – символ Кронекера. Четвертый член в энергии описывает взаимодействие флексоэлектрического поля с директором НЖК. Все возможные члены в нем, удовлетворяющие условиям симметрии, есть

$$F_{flex} = e_1 n_i \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} (\text{div} \mathbf{n}) - e_3 \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} [\mathbf{n} \times (\text{curl} \mathbf{n})]_i. \quad (3)$$

В это выражение входят два коэффициента e_1 и e_3 с размерностью электрического потенциала и произвольным знаком. Они называются флексоэлектрическими коэффициентами. Из термодинамического потенциала можно найти электрическую индукцию D :

$$D_i = 4\pi \frac{\partial W}{\partial E_i} = -4\pi \frac{\partial W}{\partial \frac{\partial \varphi}{\partial x_i}} = \varepsilon_{ik} E_k + 4\pi e_1 n_i (\text{div} \mathbf{n}) - 4\pi e_3 [\mathbf{n} \times (\text{curl} \mathbf{n})]_i. \quad (4)$$

Очевидно, что $\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi \mathbf{P} = \mathbf{E} + 4\pi \mathbf{P}(e_i = 0) + 4\pi \mathbf{P}_{flex} = \mathbf{D}(e_i = 0) + 4\pi \mathbf{P}_{flex}$, где $\mathbf{P}$ есть поляризация среды. Поэтому получаем

$$D_i = \varepsilon_{ik} E_k + 4\pi P_{iflex}, \quad (5)$$

где

$$\mathbf{P}_{flex} = e_1 \mathbf{n} (\text{div} \mathbf{n}) - e_3 [\mathbf{n} \times (\text{curl} \mathbf{n})]. \quad (6)$$

Здесь заметим, что в некоторых работах используют $(-e_3)$ вместо e_3 (например, в [9,10]). Знаки совпадают с приведенными в (6), например, в работах [11-14]. Вариация термодинамического потенциала по φ даст нам уравнение для электрического поля:

$$\frac{\delta W}{\delta \varphi} - \frac{\partial}{\partial x_k} \frac{\delta W}{\delta \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x_k} \right)} = 0.$$

Тогда имеем $\text{div} \mathbf{D} = 0$. Окончательно для электрического поля имеем систему уравнений

$$\text{div} \mathbf{D} = 0, \quad \text{curl} \mathbf{E} = 0. \quad (7)$$

Вариация термодинамического потенциала по $\mathbf{n}$ даст нам уравнение для директора

$$\Pi_{ij} \left[\frac{\delta W}{\delta n_j} - \frac{\partial}{\partial x_k} \frac{\delta W}{\delta (\partial n_j / \partial x_k)} \right] = 0, \quad (8)$$

где $\Pi_{ij} = \delta_{ij} - n_i n_j$ есть проекционный оператор. Если обозначить $f_j = \frac{\delta W}{\delta n_j}$,

$\phi_j = \frac{\partial}{\partial x_k} \frac{\delta W}{\delta (\partial n_j / \partial x_k)}$, то мы найдем флексоэлектрические члены в уравнении

движения директора: $f_{j\text{flex}} = \frac{\delta F_{\text{flex}}}{\delta n_j}$, $\phi_{j\text{flex}} = \frac{\partial}{\partial x_k} \frac{\delta F_{\text{flex}}}{\delta (\partial n_j / \partial x_k)}$. Имея в виду, что

$[A \times B]_i = e_{ijk} A_j B_k$ (e_{ijk} — полностью антисимметричный единичный тензор) и $e_{ijk} e_{kpq} = \delta_{ip} \delta_{jq} - \delta_{iq} \delta_{jp}$, можно выражение (3) записать в виде

$$F_{\text{flex}} = -e_1 \mathbf{nE}(\text{div} \mathbf{n}) - e_3 \mathbf{E}(\mathbf{n} \nabla) \mathbf{n}. \quad (9)$$

Таким образом, имеем

$$f_{j\text{flex}} = -e_1 E_j (\text{div} \mathbf{n}) - e_3 E_k \frac{\partial n_k}{\partial x_j}, \quad \phi_{j\text{flex}} = -e_1 \frac{\partial}{\partial x_j} (\mathbf{nE}) - e_3 \frac{\partial}{\partial x_k} (E_j n_k). \quad (10)$$

Теперь уравнение директора (8) можно написать в виде

$$f_i - \phi_i - n_i [\mathbf{n}(\mathbf{f} - \phi)] = 0, \quad (11)$$

$$\mathbf{f} = \mathbf{f}_d + \mathbf{f}_{\text{flex}}, \quad \phi = \phi_d + \phi_{\text{flex}}, \quad (12)$$

$$f_{jd} = \frac{\delta F_d}{\delta n_j}, \quad \phi_{jd} = \frac{\partial}{\partial x_k} \frac{\delta F_d}{\delta (\partial n_j / \partial x_k)}. \quad (13)$$

Теперь для каждого флексоэлектрического эффекта в НЖК необходимо решать систему уравнений (7) и (11)-(13) совместно с (5). Следует найти $\mathbf{D}$ и $\mathbf{E}$ из (7) и, подставив их в (11), найти уравнение для ориентации директора НЖК. В общем случае такую задачу решить трудно. Поэтому имеет смысл рассмотреть конкретные задачи.

3. Уравнения в цилиндрических координатах

Для того, чтобы получить уравнение директора в цилиндрических координатах, надо минимизировать свободную энергию во всем объеме:

$$\mathbf{F} = \iint F 2\pi r dr dz, \quad \text{где } F = F_d + F_{el} + F_{\text{flex}}, \quad F_{el} = -\frac{1}{8\pi} \epsilon_{ik} \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} \frac{\partial \varphi}{\partial x_k}.$$

Таким образом, нам нужно варьировать производную F_r . Тогда уравнение для директора будет иметь следующий вид:

$$\Pi_{ij} \left[\frac{\delta(F_r)}{\delta n_j} - \frac{\partial}{\partial x_k} \frac{\delta(F_r)}{\delta (\partial n_j / \partial x_k)} \right] = 0. \quad (14)$$

Из формулы (9) имеем

$$F_{\text{flex}} = -e_1 \mathbf{n} \mathbf{E} S - e_3 E_i B_i. \quad (15)$$

Здесь сделаны следующие обозначения:

$$S = \text{div} \mathbf{n} = \frac{n_r}{r} + \frac{\partial n_r}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial n_\varphi}{\partial \varphi} + \frac{\partial n_z}{\partial z}, \quad \mathbf{B} = -[\mathbf{n} \times \text{curl} \mathbf{n}],$$

$$B_r = -\frac{n_\varphi^2}{r} + (\mathbf{n} \nabla) n_r, \quad B_\varphi = \frac{n_r n_\varphi}{r} + (\mathbf{n} \nabla) n_\varphi, \quad B_z = (\mathbf{n} \nabla) n_z. \quad (16)$$

Чтобы окончательно написать уравнение директора в цилиндрических координатах, нам необходимы следующие векторы и тензоры:

$$f_{\text{jflex}} = \frac{\delta(rF_{\text{flex}} + rF_{el})}{\delta n_j} = -e_1 r E_j S - e_3 r E_i \frac{\delta B_i}{\delta n_j} - \varepsilon_0 \varepsilon_a (\mathbf{n} \mathbf{E}) E_j,$$

$$f_{\text{rflex}} = -e_1 r E_r S - e_3 r \left[E_r \frac{\delta n_r}{\delta r} + E_\varphi \left(\frac{n_\varphi}{r} + \frac{\delta n_\varphi}{\delta r} \right) + E_z \frac{\delta n_z}{\delta r} \right],$$

$$f_{\varphi \text{flex}} = -e_1 r E_\varphi S - e_3 r \left[E_r \left(-2 \frac{n_\varphi}{r} + \frac{\delta n_r}{\delta \varphi} \right) + E_\varphi \left(\frac{n_r}{r} + \frac{\delta n_\varphi}{\delta \varphi} \right) + E_z \frac{\delta n_z}{\delta \varphi} \right],$$

$$f_{z \text{flex}} = -e_1 r E_z S - e_3 r \left[E_r \frac{\delta n_r}{\delta z} + E_\varphi \frac{\delta n_\varphi}{\delta z} + E_z \frac{\delta n_z}{\delta z} \right],$$

$$f_{r \text{rf}} = \frac{\delta(rF_{\text{flex}})}{\delta(\partial n_r / \partial r)} = -e_1 r \mathbf{n} \mathbf{E} - e_3 r E_r n_r, \quad f_{\varphi \text{zf}} = \frac{\delta(rF_{\text{flex}})}{\delta(\partial n_\varphi / \partial z)} = -e_3 r E_\varphi n_z,$$

$$f_{r \varphi \text{f}} = \frac{\delta(rF_{\text{flex}})}{\delta(\partial n_r / \partial \varphi)} = -e_3 E_r n_\varphi, \quad f_{z \text{rf}} = \frac{\delta(rF_{\text{flex}})}{\delta(\partial n_z / \partial r)} = -e_3 r E_z n_r,$$

$$f_{r \text{zf}} = \frac{\delta(rF_{\text{flex}})}{\delta(\partial n_r / \partial z)} = -e_3 r E_r n_z, \quad f_{z \varphi \text{f}} = \frac{\delta(rF_{\text{flex}})}{\delta(\partial n_z / \partial \varphi)} = -e_3 E_z n_\varphi,$$

$$f_{\varphi \text{rf}} = \frac{\delta(rF_{\text{flex}})}{\delta(\partial n_\varphi / \partial r)} = -e_3 r E_\varphi n_r, \quad f_{z \text{zf}} = \frac{\delta(rF_{\text{flex}})}{\delta(\partial n_z / \partial z)} = -e_1 r \mathbf{n} \mathbf{E} - e_3 r E_z n_z,$$

$$f_{\varphi \varphi \text{f}} = \frac{\delta(rF_{\text{flex}})}{\delta(\partial n_\varphi / \partial \varphi)} = -e_1 \mathbf{n} \mathbf{E} - e_3 E_\varphi n_\varphi,$$

$$\phi_{\text{jflex}} = \frac{\partial}{\partial x_k} \frac{\delta(rF_{\text{flex}})}{\delta(\partial n_j / \partial x_k)},$$

$$\varphi_{\text{rflex}} = -e_1 \mathbf{n} \mathbf{E} - e_1 r \frac{\partial}{\partial r} (\mathbf{n} \mathbf{E}) - e_3 r [E_r Q_1 + (\mathbf{n} \nabla) E_r],$$

$$\phi_{\varphi \text{flex}} = -e_1 \frac{\partial}{\partial \varphi} (\mathbf{n} \mathbf{E}) - e_3 r \left[E_\varphi Q_1 - \frac{n_r}{r} E_\varphi + (\mathbf{n} \nabla) E_\varphi \right],$$

$$\phi_{z\text{flex}} = -e_1 r \frac{\partial}{\partial z} (\mathbf{nE}) - e_3 r \left[E_z Q_1 - \frac{n_r}{r} E_z + (\mathbf{n} \nabla) E_z \right].$$

Из этих выражений надо построить следующие векторы:

$$\begin{aligned} f_{rf} - \phi_{rf} &= -e_1 \left[r E_r S - \mathbf{nE} - r \frac{\partial}{\partial r} (\mathbf{nE}) \right] - e_3 r \left[E_r \left(\frac{\delta n_r}{\delta r} - S \right) + E_\varphi \left(\frac{n_\varphi}{r} + \frac{\delta n_\varphi}{\delta r} \right) + E_z \frac{\delta n_z}{\delta r} - (\mathbf{n} \nabla) E_r \right], \\ f_{\varphi f} - \phi_{\varphi f} &= -e_1 \left[r E_\varphi S - \frac{\partial}{\partial \varphi} (\mathbf{nE}) \right] - e_3 r \left[E_r \left(-2 \frac{n_\varphi}{r} + \frac{\delta n_r}{\delta \varphi} \right) + E_\varphi \left(2 \frac{n_r}{r} + \frac{\delta n_\varphi}{\delta \varphi} - S \right) + E_z \frac{\delta n_z}{\delta \varphi} - (\mathbf{n} \nabla) E_\varphi \right], \\ f_{zf} - \phi_{zf} &= -e_1 \left[E_z S - \frac{\partial}{\partial z} (\mathbf{nE}) \right] - e_3 r \left[E_r \frac{\delta n_r}{\delta z} + E_\varphi \frac{\delta n_\varphi}{\delta z} + E_z \left(\frac{n_r}{r} + \frac{\delta n_z}{\delta z} - S \right) - (\mathbf{n} \nabla) E_z \right], \end{aligned} \quad (17)$$

$$\Phi = \mathbf{n}(\mathbf{f} - \boldsymbol{\phi}) = n_r (f_r - \phi_r) + n_\varphi (f_\varphi - \phi_\varphi) + n_z (f_z - \phi_z).$$

Теперь можно решать уравнение (11) для директора в цилиндрических координатах с векторами из (17) в конкретных случаях.

4. Планарно-радиальное и азимутальное распределения директора

Рассмотрим стабильность распределения директора по отношению к возмущению вне плоскости начальной ориентации для случаев чисто поперечного (планар-радиального) и чисто продольного (планар-азимутального) изгибов (см. рис.2). Рассмотрение проведем с учетом флексоэлектричности НЖК.



Рис.2. Дисклинация Франка силы $s = 1$ для случаев чисто поперечного и чисто продольного изгибов. Верхние две фигуры показывают невозмущенные распределения, а нижние – возможную релаксацию директора в третье измерение.

4.1. Изначально радиальная ориентация

В случае чисто поперечного изгиба имеем $n_r = 1$, $n_\varphi = 0$, $n_z = 0$. Тогда $S = \frac{1}{r}$, $T = B_1 = B_2 = B_3 = 0$, $F_d = \frac{1}{2} K_1 \frac{1}{r^2}$ и свободная энергия во всем объеме имеет вид

$$F_s = \pi K_1 L \ln \frac{R}{r_0}, \quad (18)$$

где R – радиус цилиндрического образца и r_0 – молекулярный размер. Если имеем возмущение вне плоскости ориентации директора, то поле последнего можно записать как

$$n_r = \cos \theta(r), \quad n_\phi = 0, \quad n_z = \sin \theta(r). \quad (19)$$

Тогда имеем

$$S = \frac{\cos \theta}{r} - \sin \theta \frac{\partial \theta}{\partial r}, \quad B_1 = -\sin \theta \cos \theta \frac{\partial \theta}{\partial r}, \quad B_2 = 0, \quad B_3 = \cos^2 \theta \frac{\partial \theta}{\partial r}. \quad (20)$$

В этом случае можно положить $\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial y} = 0$, и из уравнений $\text{div} \mathbf{D} = 0$,

$\text{curl} \mathbf{E} = 0$ получим $D_r = \text{const} \equiv c_1$, $E_z = \text{const} \equiv c_2$ и $E_\phi = \text{const}/r \equiv c_3/r$. Разумно предположить, что вдали от домена радиальной ориентации электрическое поле стремится к нулю в отсутствие внешних полей. Это означает, что константы мы можем считать равными нулю. Из уравнения (4) имеем

$$D_i = \varepsilon_{ik} E_k + 4\pi e_1 n_i (\text{div} \mathbf{n}) - 4\pi e_3 [\mathbf{n} \times (\text{curl} \mathbf{n})]_i. \quad (21)$$

Отсюда необходимо найти E_r . Для этого запишем

$$c_1 = \varepsilon_{rr} E_r + \frac{c_3}{r} \varepsilon_{r\phi} + \varepsilon_{rz} c_2 + 4\pi P_r. \quad (22)$$

Тогда, учитывая вышеприведенное замечание ($c_1 = c_2 = c_3 = 0$), получим

$$E_r = -\frac{4\pi}{\varepsilon_{rr}} P_r, \quad (23)$$

и для свободной энергии можно записать

$$F_{el} = -\frac{1}{8\pi} \varepsilon_{ik} E_i E_k = -\frac{2\pi}{\varepsilon_{rr}} P_r^2, \quad P_r = e_1 n_r S + e_3 B_r, \\ F_{flex} = -e_1 \mathbf{n} \mathbf{E} S - e_3 E_i B_i = -E_r \frac{4\pi}{\varepsilon_{rr}} P_r = \frac{4\pi}{\varepsilon_{rr}} P_r^2, \quad F_{el} + F_{flex} = \frac{2\pi}{\varepsilon_{rr}} P_r^2. \quad (24)$$

В приближении отсутствия диэлектрической и флексоэлектрической анизотропий ($\varepsilon_{\parallel} = \varepsilon_{\perp} = \varepsilon$ и $e_1 = -e_3 = e$) имеем

$$P_r = e_1 n_r S + e_3 B_r = e_1 \left(\frac{\cos^2 \theta}{r} - \sin \theta \cos \theta \frac{\partial \theta}{\partial r} \right) - e_3 \sin \theta \cos \theta \frac{\partial \theta}{\partial r} = e \frac{\cos^2 \theta}{r}, \\ 2(F_{el} + F_{flex}) = \Sigma \frac{\cos^4 \theta}{r^2},$$

где $\Sigma = \frac{4\pi e^2}{\varepsilon}$. Для типичных НЖК $\varepsilon \sim 10$, $e \sim 10^{-4}$ СГС и $\Sigma \sim 10^{-8}$ СГС.

Учитывая упругую часть свободной энергии

$$2F_d = K_1 \left(\frac{\cos \theta}{r} - \sin \theta \frac{\partial \theta}{\partial r} \right)^2 + K_3 \left(\cos \theta \frac{\partial \theta}{\partial r} \right)^2, \quad (25)$$

можно минимизировать общую энергию во всем объеме:

$$\frac{F_{sb}}{\pi} = \iint \left[K_1 \left(\frac{\cos \theta}{r} - \sin \theta \frac{\partial \theta}{\partial r} \right)^2 + K_3 \left(\cos \theta \frac{\partial \theta}{\partial r} \right)^2 + \Sigma \frac{\cos^4 \theta}{r^2} \right] r dr dz . \quad (26)$$

Тогда, при наличии флексоэлектрического эффекта, свободная энергия F_s состояния чисто поперечного изгиба, вместо (18), принимает вид

$$F_s = \pi (K_1 + \Sigma) L \ln \frac{R}{r_0} . \quad (27)$$

При расчете свободной энергии возмущенного состояния, для простоты, распределение директора выберем как решение уравнения в одноконстантном приближении упругости и в отсутствие флексоэлектричности. Тогда имеем уравнение

$$\left(\frac{1}{r} \frac{\partial \theta}{\partial r} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial r^2} \right) = - \frac{\sin 2\theta}{2r^2}$$

или

$$\frac{d}{dr} \left(r \frac{d\theta}{dr} \right) = - \frac{\sin \theta \cos \theta}{r} . \quad (28)$$

Конечно, здесь мы имеем тривиальное решение $\theta = 0$, $\frac{d\theta}{dr} = 0$, которое указывает на локальный экстремум функции F_s . Первый интеграл уравнения (28) с граничными условиями $\theta(r=0) = \pi/2$, $\theta(r=R) = 0$ есть

$$\tan \left(\frac{\pi}{4} - \frac{\theta}{2} \right) = \frac{r}{R} . \quad (29)$$

Из уравнения (29) можно видеть, что θ линейно уменьшается до нуля при $r \rightarrow 0$ и что градиенты $\mathbf{n}$ не имеют особенностей на оси. Таким образом, в этом решении с продольным и поперечным изгибами линейная дисклинация исчезает.

Вычисления можно также произвести для более реального случая с анизотропией упругих констант. Функциональный вид $\theta(r)$ при этом видоизменяется, но качественные черты, которые видны из уравнения (29), остаются неизменными. Энергию можно найти точно. Из (29) получим $\frac{d\theta}{dr} = - \frac{\cos \theta}{r}$,

$$\sin \theta = \frac{1 - \rho^2}{1 + \rho^2} \text{ и } \cos \theta = \frac{2\rho}{1 + \rho^2} . \text{ С учетом этого, имеем}$$

$$\frac{F_{sb}}{\pi} = \iint \left[K_1 \frac{\cos^2 \theta}{r} (1 + \sin \theta)^2 + K_3 \left(\cos \theta \frac{\partial \theta}{\partial r} \right)^2 + \Sigma \frac{\cos^4 \theta}{r^2} \right] r dr dz . \quad (30)$$

Если обозначить $K_3' = K_3 + \Sigma$, то энергия преобразуется следующим образом:

$$\frac{F_{sb}}{\pi K_1 L} = \int_0^1 \left[\frac{\cos^2 \theta}{\rho} (1 + \sin \theta)^2 + \frac{K_3'}{K_1} \frac{\cos^4 \theta}{\rho} \right] d\rho, \quad (31)$$

где $\rho = r / R$. Далее, обозначив $y = \rho^2$, получим

$$\frac{F_{sb}}{\pi K_1 L} = 8 \int_0^1 \frac{1 + \frac{K_3'}{K_1} y}{(1 + y)^4} dy = \frac{1}{3} \left(2 \frac{K_3'}{K_1} + 7 \right). \quad (32)$$

Таким образом, чисто поперечное распределение или радиальная линейная дисклинация будет устойчивой, если

$$\ln \frac{R}{r_0} < \frac{2K_3' + 7K_1}{3(K_1 + \Sigma)}. \quad (33)$$

В отсутствие флексоэлектричества ($\Sigma = 0$) получаем известное неравенство [12]. Как было отмечено там, окрестности точки фазового перехода из нематика в смектик А отношение K_3/K_1 может быть очень большим. Так, например, если $K_3/K_1 = 16$, то условие (33) соответствует $R \leq 563r_0 \approx 1$ мкм. В присутствии флексоэлектричества этого можно достичь даже далеко от фазового перехода.

В наиболее общем случае, когда $\varepsilon_{\parallel} \neq \varepsilon_{\perp}$ и $e_1 \neq -e_3$, имеем

$$P_r = e_1 n_r S + e_3 B_r = e_1 \frac{\cos^2 \theta}{r} - (e_1 + e_3) \sin \theta \cos \theta \frac{\partial \theta}{\partial r}. \quad (34)$$

С другой стороны,

$$2(F_{el} + F_{flex}) = \frac{4\pi}{\varepsilon_{rr}} P_r^2. \quad (35)$$

Мы имеем также $\varepsilon_{rr} = \varepsilon_{\perp} + \varepsilon_a n_r^2$ и $\varepsilon_{rr}^{-1} = \varepsilon_{\perp}^{-1} (1 + \xi n_r^2)^{-1}$, где $\xi = \varepsilon_a / \varepsilon_{\perp}$. Сделаем обозначения $\Sigma_1 = \frac{4\pi e_1^2}{\varepsilon_{\perp}}$ и $e = \frac{e_1 + e_3}{e_1}$. Тогда получим

$$2(F_{el} + F_{flex}) = \Sigma_1 (1 + \xi \cos^2 \theta)^{-1} \left[\frac{\cos^2 \theta}{r} - e \sin \theta \cos \theta \frac{\partial \theta}{\partial r} \right]^2. \quad (36)$$

Теперь, делая те же самые обозначения и преобразования, что были сделаны выше, для объемной энергии получим

$$\frac{F_{sb}}{\pi K_1 L} = 8 \int_0^1 \frac{1}{(1 + y)^4} \left[1 + \frac{K_3}{K_1} y + \frac{\Sigma_1}{K_1} y \left[(1 + y)^2 + 4\xi y \right]^{-1} (1 + y + e - ey)^2 \right] dy.$$

Если диэлектрическая анизотропия не очень велика, то получим $\left[(1 + y)^2 + 4\xi y \right]^{-1} \approx (1 + y)^{-4} \left[(1 + y)^2 - 4\xi y \right]$. Тогда интеграл легко берется:

$$F_{sb} = \frac{\pi L}{3} \left[7K_1 + 2(K_3 + \Sigma) + \Sigma_1 e \left(\frac{3}{2} + \frac{2}{5} e \right) - 8\xi \Sigma \left(\frac{1}{15} + \frac{e}{24} + \frac{e^2}{105} \right) \right]. \quad (37)$$

Отсюда хорошо видно, что анизотропия флексоэлектричества еще более стаби-

лизирует, а диэлектрическая анизотропия немного дестабилизирует распределение чисто поперечного изгиба.

4.2. Изначально азимутальная ориентация

Теперь рассмотрим стабильность деформации директора чисто продольного изгиба. В этом случае имеем $n_r = 0$, $n_\varphi = 1$, $n_z = 0$. Поэтому $S = 0$, $T = B_2 = B_3 = 0$, $B_1 = \frac{1}{r}$, $F_d = \frac{1}{2} K_3 \frac{1}{r^2}$ и свободная энергия всего объема, в отсутствие флексоэлектричества, будет

$$F_b = \pi K_3 L \ln \frac{R}{r_0}. \quad (38)$$

В присутствии возмущения вне плоскости изначального распределения поле директора запишем в виде

$$n_r = 0, n_\varphi = \cos \theta(r), n_z = \sin \theta(r). \quad (39)$$

Тогда имеем

$$S = 0, T = \frac{\sin \theta \cos \theta}{r} - \frac{\partial \theta}{\partial r}, \quad B_1 = -\frac{\cos^2 \theta}{r}, B_2 = 0, B_3 = 0.$$

В этом случае мы получаем то же уравнение (24) с $P_r = e_3 B_r$. Если пренебречь диэлектрической анизотропией ($\varepsilon_{\parallel} = \varepsilon_{\perp} = \varepsilon$), то получим

$$P_r = -e_3 \frac{\cos^2 \theta}{r}, \quad 2(F_{el} + F_{flex}) = \Sigma_3 \frac{\cos^4 \theta}{r^2},$$

где $\Sigma_3 = \frac{4\pi e_3^2}{\varepsilon}$. В этом случае упругая часть свободной энергии имеет вид

$$2F_d = K_2 \left(\frac{\sin 2\theta}{2r} - \frac{\partial \theta}{\partial r} \right)^2 + K_3 \frac{\cos^4 \theta}{r^2}.$$

Минимизируем свободную энергию всего объема:

$$\frac{F_{bt}}{\pi} = \iint \left[K_2 \left(\frac{\sin 2\theta}{2r} - \frac{\partial \theta}{\partial r} \right)^2 + K_3 \frac{\cos^4 \theta}{r^2} + \Sigma_3 \frac{\cos^4 \theta}{r^2} \right] r dr dz.$$

В присутствии флексоэлектрического эффекта свободная энергия F_b состояния чисто продольного изгиба, вместо (38), имеет вид

$$F_b = \pi (K_3 + \Sigma_3) L \ln \frac{R}{r_0}. \quad (40)$$

Распределение директора вновь берем в виде (29). Для свободной энергии возмущенного состояния получим

$$\frac{F_{bt}}{\pi K_2 L} = \int_0^1 \left[\frac{\cos^2 \theta}{\rho} (1 + \sin \theta)^2 + \frac{K'_3}{K_2} \frac{\cos^4 \theta}{\rho} \right] d\rho, \quad (41)$$

где имеем те же обозначения: $K'_3 = K_3 + \Sigma_3$, $\rho = r/R$, $y = \rho^2$. Получаем такой же интеграл (32) и, окончательно, для энергии имеем

$$\frac{F_{bt}}{\pi K_2 L} = 8 \int_0^1 \frac{1 + \frac{K'_3}{K_2} y}{(1+y)^4} dy = \frac{1}{3} \left(2 \frac{K'_3}{K_2} + 7 \right). \quad (42)$$

Чисто продольное распределение или азимутальная линейная дисклинация будет устойчивой, если

$$\ln \frac{R}{r_0} < \frac{1}{3} \left(2 + 7 \frac{K_2}{K'_3} \right). \quad (43)$$

В этом случае мы имеем обратную ситуацию. Для стабильности чисто продольного изгиба необходимо, чтобы отношение K_3/K_2 было как можно меньше. Для не особо специальных условий, у обычных НЖК, для стабильности необходимо условие $R \leq 12.6 r_0 \approx 25 \text{ \AA}$. Таким образом, для всех физически реальных размеров R линия неустойчива. А наличие флексоэлектричества делает условие стабильности более трудно выполнимым.

Если учесть диэлектрическую анизотропию ($\varepsilon_{\parallel} \neq \varepsilon_{\perp}$), то получим

$$P_r = e_3 B_r = -e_3 \frac{\cos^2 \theta}{r}, \quad 2(F_{el} + F_{flex}) = \frac{4\pi}{\varepsilon_{rr}} P_r^2.$$

Имеем также $\varepsilon_{rr} = \varepsilon_{\perp} + \varepsilon_a n_r^2$ и $\varepsilon_{rr}^{-1} = \varepsilon_{\perp}^{-1} (1 + \xi n_r^2)^{-1} \approx \varepsilon_{\perp}^{-1} (1 - \xi n_r^2)$, где

$$\xi = \varepsilon_a / \varepsilon_{\perp}. \text{ Обозначив } \Sigma'_3 = \frac{4\pi e_3^2}{\varepsilon_{\perp}}, \text{ получим}$$

$$2(F_{el} + F_{flex}) = \Sigma'_3 (1 - \xi \cos^2 \theta) \frac{\cos^4 \theta}{r^2}.$$

Необходимо минимизировать объемную свободную энергию

$$\frac{F_{bt}}{\pi} = \iint \left[K_2 \left(\frac{\sin 2\theta}{2r} - \frac{\partial \theta}{\partial r} \right)^2 + K_3 \frac{\cos^4 \theta}{r^2} + \Sigma'_3 (1 - \xi \cos^2 \theta) \frac{\cos^4 \theta}{r^2} \right] r dr dz. \quad (44)$$

В присутствии флексоэлектрического эффекта свободная энергия F_b состояния чисто продольного изгиба, вместо (38), (38) имеет вид

$$F_b = \pi \left[K_3 + \Sigma'_3 (1 - \xi) \right] L \ln \frac{R}{r_0}. \quad (45)$$

Свободную энергию в возмущенном состоянии перепишем в виде

$$\frac{F_{bt}}{\pi K_2 L} = \int_0^1 \left[\frac{\cos^2 \theta}{\rho} (1 + \sin \theta)^2 + \frac{K'_3}{K_2} \frac{\cos^4 \theta}{\rho} - \frac{\Sigma'_3 \xi}{K_2} \frac{\cos^6 \theta}{\rho} \right] d\rho. \quad (46)$$

В тех же обозначениях получим

$$F_{bt} = 8\pi K_2 L \int_0^1 \frac{1 + \frac{K'_3}{K_2} y - \frac{\Sigma'_3 \xi}{K_2} \frac{4y^2}{(1+y)^2}}{(1+y)^4} dy = \frac{\pi L}{3} \left(7K_2 + 2K'_3 - \frac{8}{5} \Sigma'_3 \xi \right). \quad (47)$$

Чисто продольное распределение или линейная дисклинация будет устойчивой, если

$$\ln \frac{R}{r_0} < \frac{1}{3} \frac{7K_2 + 2K_3 + 2\Sigma'_3(1-\xi) + \frac{2}{5}\Sigma'_3\xi}{K_3 + \Sigma'_3(1-\xi)}. \quad (48)$$

Как видно, с учетом анизотропии диэлектрической проницаемости ситуация не становится лучше.

5. Заключение

Из сделанных расчетов следует, что, используя тонкие капилляры, можно стабилизировать линию с радиальным распределением директора в присутствии флексоэлектричества даже вдали от фазового перехода в смектическую фазу. Но, в отсутствие флексоэлектричества и вдали от указанного фазового перехода, мы видим, что на практике линия должна вытекать в третье измерение. Что касается капилляров с азимутальным распределением директора, то для всех физически реальных размеров R линия неустойчива и вытекает в третье измерение. С другой стороны, линии с полуцелой силой ($s = \pm 1/2$) устойчивы просто потому, что они не могут вытекать в гладкую структуру, сохраняя то же самое значение s .

Работа выполнена при финансовой поддержке ГКН МОН РА в рамках научного проекта № SCS 13-1C061.

ЛИТЕРАТУРА

1. **F.C.Frank.** Disc. Far. Soc., **25**, 19 (1958).
2. **Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц.** Теоретическая физика, т. 7. Теория упругости. М., Наука, 1987.
3. **O.Lehmann.** Ann. Physik, **2**, 649 (1900).
4. **G.Friedel.** Ann. Physique, **18**, 273 (1922).
5. **C.W.Oseen.** Trans. Faraday Soc., **29**, 883 (1933).
6. **J.Nehring, A.Saupe.** Journ. Chem. Soc., Faraday Trans., **2**, 68, (1972).
7. **P.E.Cladis, M.Kleman.** J. de Physique, **33**, 591 (1972).
8. **R. B. Meyer.** Phys. Rev. Lett., **22**, 918 (1969).
9. **S.Chandrasekhar.** Liquid Crystals. Cambridge University Press, 1977.
10. **P.Oswald, P.Pieranski.** Nematic and Cholesteric Liquid Crystals. Taylor & Francis Group, London, 2005.
11. **D.Demus, J.W. Goodby, G.W.Gray, H.W.Spiess.** Handbook of Liquid Crystals. New York, Wiley-VCH, 1998.
12. **P.G. de Gennes, J.Prost.** The Physics of Liquid Crystals. Oxford, Clarendon Press, 1993.
13. **H.J.Deuling.** Solid State Commun., **14**, 1073 (1974).
14. **С.М.Аракелян, Ю.С.Чилингарян.** Нелинейная оптика жидких кристаллов. М., Наука, 1984.

ԴԻՍԿԼԻՆԱՑԻԱՆԵՐ ՆԵՄԱՏԻԿՆԵՐՈՒՄ
ՖԼԵՔՍԱԷԼԵԿՏՐԱԿԱՆՈՒԹՅԱՆ ԱՌԿԱՅՈՒԹՅԱՄԲ

Մ.Ռ. ՀԱԿՈԲՅԱՆ, Ռ.Ս. ՀԱԿՈԲՅԱՆ, ՅՆԼ.Ս. ՉԻԼԻՆԳԱՐՅԱՆ

Դիտարկված են խնդիրներ նեմատիկ հեղուկ բյուրեղներում (ՆՀԲ), ֆլեքսաէլեկտրականության առկայությամբ, սեպաձև (մաքուր լայնական ու երկայնական ճկումներով) դիսկլինացիաների կայունության վերաբերյալ: Ստացված են ՆՀԲ-ի ուղղորդի շարժման հավասարումները գլանային կոորդինատներում ֆլեքսաէլեկտրականության առկայությամբ: Այդ հավասարումների օգնությամբ կարելի է լուծել բազմաթիվ հետաքրքիր խնդիրներ ՆՀԲ-ի կողմնորոշումային կառուցվածքի վրա ֆլեքսաէլեկտրականության ազդեցության վերաբերյալ: Այստեղ, մասնավորապես, ցույց է տրված, որ կարելի է կայունացնել ուղղորդի ռադիալ բախշվածությամբ դիսկլինացիայի գիծը ֆլեքսաէլեկտրականության առկայության դեպքում նույնիսկ դեպի սմեկտիկ փուլային անցման կետից շատ հեռու: Ինչ վերաբերվում է ուղղորդի ազիմուտալ բախշվածությամբ դիսկլինացիային, ապա ֆիզիկապես իրական բոլոր չափերի դեպքում այդ գիծն անկայուն է և հոսում է դեպի երրորդ չափողականություն:

DISCLINATIONS IN NEMATICS IN THE PRESENCE OF FLEXOELECTRICITY

M.R. HAKOBYAN, R.S. HAKOBYAN, Yu.S. CHILINGARYAN

The stability problems of wedge disclinations (with pure splay and bend distortions) in nematic liquid crystals (NLC) are considered in the presence of flexoelectricity. We write NLC director equations in the cylindrical coordinate system, taking into account flexoelectricity. These equations allow us to solve many interesting problems on the influence of flexoelectricity on the orientational structures of NLC. In particular, it is shown that the line of disclination with radial distribution of director can be stabilized in the presence of flexoelectricity even far from nematic-smectic-phase transition point. For the disclination with azimuthal distribution of director for all physical sizes the line is not stable and escapes in the third dimension.