

УДК 532.624

О СТАБИЛЬНОСТИ ОДНОРОДНОЙ ОРИЕНТАЦИИ В ПЛОСКОПАРАЛЛЕЛЬНОЙ ЯЧЕЙКЕ ЖИДКОГО КРИСТАЛЛА, ОБОГАЩЕННОГО НАНОЧАСТИЦАМИ

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

Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

*e-mail: hamara404@gmail.com

(Поступила в редакцию 23 января 2014 г.)

Рассмотрены задачи о стабильности однородных ориентаций молекул нематического жидкого кристалла (НЖК) с добавленным в него небольшим количеством холестерического ЖК. Изучены ячейки ЖК с гомеотропной и твист-ориентациями молекул на границах. Задачи решены с помощью теоремы Нетер для ЖК. Инвариантность вида свободной энергии относительно трансляции по теореме Нетер приводит к сохранению “потока импульса”, а относительно группы вращения – к сохранению “потока момента количества движения”. Эти законы сохранения применены для нахождения порогов стабильности однородных ориентаций молекул указанной смеси, а также влияния наночастиц на пороги.

1. Введение

Гомеотропная ориентация директора нематического жидкого кристалла (НЖК), когда молекулы перпендикулярны стенкам плоскопараллельной ячейки, может стать неустойчивой при некоторых критических значениях воздействия внешних статических электрических, магнитных и световых полей, дестабилизирующих ориентацию директора. Как было впервые показано теоретически и экспериментально в работах [1-3], гомеотропная ориентация директора НЖК является неустойчивой относительно внедрения в НЖК небольшого количества молекул холестерического жидкого кристалла (ХЖК). Оказалось, что при некотором критическом значении концентрации ХЖК происходит бесполовой переход Фредерикса от устойчивого однородного гомеотропного распределения директора к устойчивому закрученному распределению.

Другой возможной однородной ориентацией является твист-ячейка НЖК, когда во всем объеме имеем планарную (молекулы параллельны плоскостям), но закрученную структуру. Такая структура устойчива, если угол кручения меньше 90° . Однако, такая ориентация тоже становится неустойчивой в присутствии молекул ХЖК.

В работе [4] из вариационного принципа получены уравнения равновесия деформированного состояния ЖК. С помощью теоремы Нетер получены законы сохранения для “потока импульса” и “потока момента количества движения”. Полученные законы сохранения применены для нахождения аналити-

ческих решений ряда задач о равновесии ЖК с существенно неплоским распределением директора.

В настоящей работе с помощью законов сохранения для ЖК рассмотрены задачи об устойчивости однородных гомеотропной и твист-ориентаций молекул НЖК с добавленным в него небольшим количеством ХЖК. Аналитически найдены пороги устойчивости и влияние наночастиц на них.

Для рассмотрения условия устойчивости стационарного решения существуют, по крайней мере, два возможных подхода. Первый из них – это когда пишем нестационарное уравнение, находим временную зависимость решения и требуем, чтобы коэффициент временного изменения был равен нулю. Второй подход – когда пишем уравнение для возмущения от стационарного решения и находим условие, при котором оно не имеет ненулевого решения. В настоящей работе мы воспользуемся вторым подходом.

2. Основные уравнения

Инвариантность вида свободной энергии ЖК относительно трансляции по теореме Нетер приводит к сохранению “потока импульса”, а относительно группы вращений – к сохранению “потока момента импульса” [4]:

$$\frac{\partial p_{ka}}{\partial x_k} = 0, \quad p_{ka} = -F\delta_{ka} + \frac{\partial n_a}{\partial x_a} \frac{\partial F}{\partial (\partial n_a / \partial x_k)}, \quad M_{ka} = L_{ka} + S_{ka},$$

$$L_{ka} = -F e_{kma} x_m + \frac{\partial F}{\partial (\partial n_a / \partial x_k)} \frac{\partial n_a}{\partial x_j} e_{jma} x_m, \quad S_{ka} = -\frac{\partial F}{\partial (\partial n_j / \partial x_k)} e_{jma} x_m. \quad (1)???$$

Здесь δ_{ik} – символ Кронекера, e_{ijk} – полностью антисимметричный единичный тензор, \mathbf{n} – единичный вектор в направлении преимущественной ориентации молекул ЖК (директор), F – плотность свободной энергии:

$$F = F_d + F_{int}. \quad (2)$$

Здесь F_d – плотность свободной энергии Франка ЖК:

$$F_d = \frac{1}{2} K_1 (\operatorname{div} \mathbf{n})^2 + \frac{1}{2} K_2 (\mathbf{n} \operatorname{curl} \mathbf{n})^2 + \frac{1}{2} K_3 (\mathbf{n} \times \operatorname{curl} \mathbf{n})^2, \quad (3)$$

где K_i – упругие константы Франка. При малых концентрациях наночастиц ρ_n , диспергированных в ЖК, сделаем следующие дополнительные обозначения: $\phi_n = \rho_n V_n$ есть объемная доля наночастиц, $\mathbf{P} = \mathbf{p}/V_n$ – электрический дипольный момент единицы объема и $V_n = 4\pi R^3/3$ объем наночастиц. Тогда свободная энергия взаимодействия наночастиц с ЖК в единице объема будет иметь вид [5]

$$F_{int} = -\frac{2\pi\epsilon_a\phi_n(\mathbf{nP})^2}{45\epsilon_{\parallel}^2} - \frac{2\pi\epsilon_a\phi_n P^2}{15\epsilon_{\perp}^2}, \quad (4)$$

где $\epsilon_a = \epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}$ есть анизотропия диэлектрической восприимчивости, а ϵ_{\parallel} и ϵ_{\perp} – величины статической диэлектрической проницаемости, измеренные вдоль и поперек оси нематика, соответственно.

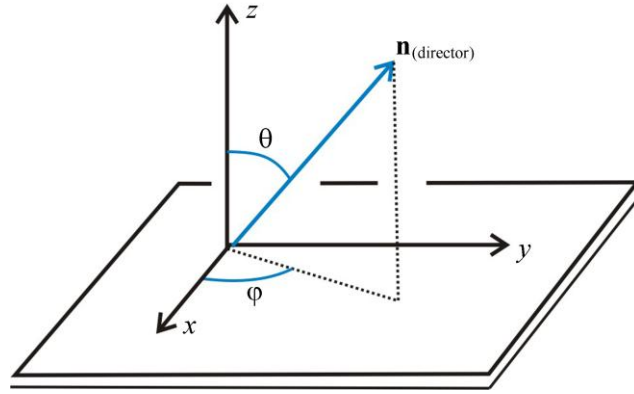


Рис.1. Представление директора смеси НЖК и ХЖК с помощью полярных углов.

Применим эти результаты к задаче о равновесии ЖК в ячейке, ограниченной плоскостями $z = 0$ и $z = L$. При этом мы ограничимся случаем, когда деформированное состояние ЖК однородно относительно трансляций в плоскости x, y , т.е. $\mathbf{n} = \mathbf{n}(z)$. В дальнейшем нам понадобится также представление вектора с помощью полярных углов (см. рис.1):

$$\mathbf{n} = \mathbf{e}_x \cos \varphi \sin \theta + \mathbf{e}_y \sin \varphi \sin \theta + \mathbf{e}_z \cos \theta. \quad (5)$$

Тогда из законов сохранения (1) нетривиальную информацию дают лишь две величины:

$$2p + K_2 q^2 = (1 - n_z^2)^{-1} \left\{ \frac{[m + K_2 q(1 - n_z^2)]^2}{K_2 + K_{32} n_z^2} + (K_1 + K_{31} n_z^2) \left(\frac{dn_z}{dz} \right)^2 \right\} + \quad (6a)$$

$$+ \frac{4\pi\epsilon_a \varphi_n (\mathbf{nP})^2}{45\epsilon_\perp^2} + \frac{4\pi\epsilon_a \varphi_n P^2}{15\epsilon_\perp^2},$$

$$m = (1 - n_z^2) (K_2 + K_{32} n_z^2) \frac{d\varphi}{dz} - K_2 q (1 - n_z^2), \quad (6b)$$

или в интегральном виде

$$z = \int_{n_z(z=0)}^{n_z(z)} G(x) dx, \quad \varphi(z) = \varphi(0) + \int_{n_z(z=0)}^{n_z(z)} \frac{m + K_2 q(1 - x^2)}{(1 - x^2)(K_2 + K_{32} x^2)} G(x) dx, \quad (7a)$$

$$G(x) = \left[(K_1 + K_{31} x^2) (K_2 + K_{32} x^2) \right]^{1/2} \times \left\{ \left(2p + K_2 q^2 - \frac{4\pi\epsilon_a \varphi_n (\mathbf{nP})^2}{45\epsilon_\perp^2} - \frac{4\pi\epsilon_a \varphi_n P^2}{15\epsilon_\perp^2} \right) \times \right. \quad (7b)$$

$$\left. \times (1 - x^2) (K_2 + K_{32} x^2) - [m + K_2 q(1 - x^2)]^2 \right\}^{-1/2}.$$

Здесь q – “волновое число” закрутки свободного холестерического ЖК, $q = 2\pi/h$, h – шаг свободной холестерической спирали, $K_{31} = K_3 - K_1$, $K_{32} = K_3 - K_2$. Входящие в (7а) параметры m и p подлежат определению из граничных условий при $z = L$ (условия на границе $z = 0$ уже выполнены).

3. Ячейка с закрученным нематиком с хиральной добавкой

Рассмотрим для НЖК с хиральной добавкой задачу, в которой директор закреплен на границах под некоторыми углами: $n_z = \cos\theta$, $\theta_0 = \theta(z = 0)$, $\varphi_0 = \varphi(z = 0)$ и $\theta_L = \theta(z = L)$, $\varphi_L = \varphi(z = L)$. Уравнения (6а) принимают следующий вид:

$$2p + K_2 q^2 = \left\{ \frac{[m + K_2 q \sin^2 \theta(z)]^2}{K_2 + K_{32} \cos^2 \theta(z)} + (K_1 + K_{31} \cos^2 \theta(z)) \left(\frac{d\theta}{dz} \right)^2 \sin^2 \theta(z) \right\} \sin^{-2} \theta(z), \quad (8a)$$

$$\frac{d\varphi}{dz} = \frac{m + K_2 q \sin^2 \theta(z)}{[K_2 + K_{32} \cos^2 \theta(z)] \sin^2 \theta(z)}. \quad (8b)$$

Как было показано в [4], если $\theta_0 = \theta_L$, то решение имеет вид $\theta(z) = \theta_0$, $\varphi(z) = \varphi_0 + (\varphi_L - \varphi_0)z/L$. Разумеется, это решение справедливо при произвольных K_1, K_2, K_3 . При $\theta_0 = \pi/2$ это обычная твист-ячейка, даже когда $\varphi_L - \varphi_0 > \pi/2$ (см. рис.2). Рассмотрим стабильность такого решения относительно выхода директора из плоскости (x, y) . С этой целью рассмотрим возмущение $\pi/2 - \theta(z) = \delta \ll 1$. Тогда, оставляя в уравнениях (8а) только члены до квадратичных по δ включительно, получим

$$2p - \frac{m^2}{K_2} - 2mq = K_1 \left(\frac{d\delta}{dz} \right)^2 + \left[2p - K_3 q^2 - \frac{K_3 - K_2}{K_2^2} m^2 - 2mq \frac{K_3}{K_2} \right] \delta^2, \quad (9a)$$

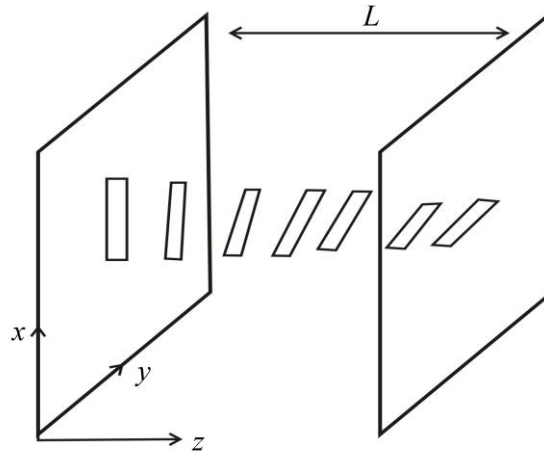


Рис.2. Твист-ячейка жидкого кристалла.

$$\frac{d\varphi}{dz} = \frac{m}{K_2} + q - \left[\frac{m}{K_2^2} (K_3 - 2K_2) + \frac{K_3 - K_2}{K_2} q \right] \delta^2. \quad (9b)$$

Эти уравнения следует решить совместно с граничными условиями $\delta(z=0, L) = 0$ и $\varphi_0 = \varphi(z=0)$ и $\varphi_L = \varphi(z=L)$. В нулевом приближении из уравнения (9b) получаем

$$\varphi(z) = \left(\frac{m}{K_2} + q \right) z + \varphi_0. \quad (10)$$

Следовательно,

$$\left(\frac{m}{K_2} + q \right) L = \varphi_L - \varphi_0. \quad (11)$$

Для того чтобы твист-распределение было стабильно, необходимо, чтобы уравнение (9a) не имело ненулевого решения, для чего достаточно выполнения условия

$$K_3 q^2 + \frac{K_3 - K_2}{K_2^2} m^2 + 2mq \frac{K_3}{K_2} \leq 2p \leq \frac{m^2}{K_2} + 2mq,$$

которое выполняется только, если

$$K_3 q^2 + \frac{K_3 - K_2}{K_2^2} m^2 + 2mq \frac{K_3}{K_2} \leq \frac{m^2}{K_2} + 2mq. \quad (12)$$

С учетом (11) получаем

$$(qL)_{cr} = \frac{2K_2 - K_3}{2K_2} \Delta\varphi. \quad (13)$$

Таким образом, исходная твист-ориентация будет устойчивой при толщинах ячейки (или концентрации ХЖК), определяемой условием (13). При малых толщинах ($L < L_{cr}$) имеем устойчивую твист (даже супертвист, если $\Delta\varphi > \pi/2$) ориентацию директора, а при больших толщинах ($L > L_{cr}$) молекулы частично выходят из плоскости исходной ориентации.

4. Холестерик с гомеотропными ориентациями на границах

Задача о холестерике с гомеотропным закреплением директора на стенках, т.е. с граничными условиями

$$\mathbf{n}(z=0) = \mathbf{n}(z=L) = \mathbf{e}_z, \quad (14)$$

была изучена в [1-7]. Здесь же мы найдем условие устойчивости гомеотропной ориентации с помощью законов сохранения для ЖК (см. рис.3). На языке θ условия (14) означают, что $\theta(z=0, L) = 0$. Из второго уравнения (6) следует, что величина передаваемого момента m тождественно равна нулю, если хотя бы на одной границе $\theta = 0$. Тогда система уравнений (6) принимает следующий вид

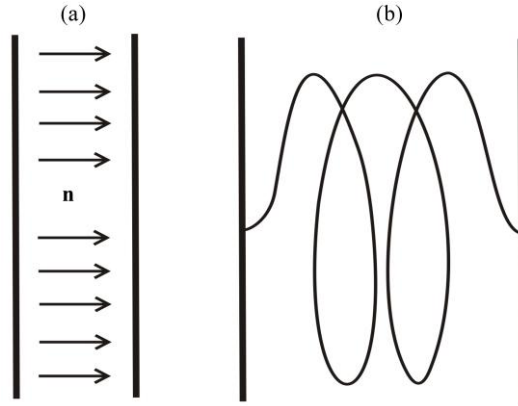


Рис.3. Ячейки НЖК + ХЖК с гомеотропными ориентациями молекул на границах: (а) при $qL \ll 1$; (б) при $qL \gg 1$.

$$2p + K_2 q^2 = \frac{K_2^2 q^2 \sin^2 \theta(z)}{K_2 + K_{32} \cos^2 \theta(z)} + (K_1 + K_{31} \cos^2 \theta(z)) \left(\frac{d\theta}{dz} \right)^2, \quad (15a)$$

$$\frac{d\varphi}{dz} = \frac{K_2 q}{K_2 + K_{32} \cos^2 \theta(z)}. \quad (15b)$$

Тогда в уравнении (15а) однородное гомеотропное решение есть $\theta = 0$. Рассмотрим устойчивость этого решения. Возмущение от стационарного решения есть $\delta = \theta \ll 1$. Здесь также, оставляя в уравнениях (15) только члены до квадратичных по δ включительно, получим

$$K_3 \left(\frac{d\delta}{dz} \right)^2 + \frac{K_2^2}{K_3} q^2 \delta^2 - (2p + K_2 q^2) = 0, \quad (16)$$

$$\frac{d\varphi}{dz} = \frac{K_2 q}{K_3} \left(1 + \frac{K_{32}}{K_3} \delta^2 \right).$$

Из первого уравнения и из граничных условий имеем

$$\delta = \theta = \pm a \sin \frac{K_2 q z}{K_3}, \quad a^2 = \frac{(2p + K_2 q^2) K_3}{K_2^2 q^2}, \quad (qL)_{кр} = \frac{\pi K_3}{K_2}. \quad (17)$$

Таким образом, при граничных условиях (14) всегда существует решение вида $\mathbf{n} = \mathbf{e}_z$. Однако при выполнении условия $qL > (qL)_{кр}$ это решение оказывается неустойчивым, а новое устойчивое решение дается выражением (17). В [3] проявление такой неустойчивости было названо бесполевым переходом Фредерикса.

5. Влияние наночастиц

Теперь обсудим те изменения в условиях устойчивости гомеотропной и твист-ориентаций, которые возникают при наличии ферроэлектрических удлин-

ненных наночастиц (например, $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$) с размерами порядка 10×100 нм. Из выше приведенных вычислений очевидно, что члены в уравнениях (6), ответственные за наночастицы, приводят просто к изменению значения “потока импульса” p . Они не приводят к какому-либо видоизменению в дальнейших формулах.

Тем самым, присутствие наночастиц не приводит к изменению пороговых значений для устойчивости гомеотропной и твист-ориентаций. Это обстоятельство связано с тем, что взаимодействие молекул наночастиц и ЖК состоит лишь в том, что их диполь-дипольное взаимодействие приводит к улучшению ориентационных упорядоченностей наночастиц и ЖК. Это способствует увеличению скалярного параметра порядка ЖК и, тем самым, возрастанию температуры фазового перехода ЖК–изотропная жидкость [8]. С этим связано также снижение порогов электрического [5] и магнитного [9] переходов Фредерикса. Однако, поскольку в наших задачах упорядоченность ЖК принимаем максимальной, то присутствие наночастиц не приводит к изменению пороговых значений для устойчивости однородных ориентаций директора.

6. Заключение

Таким образом, использование теоремы Нетер для получения законов сохранения помогает не только лучше понять качественную картину равновесной конфигурации деформации жидкого кристалла, но и легко получить условия устойчивости равновесного распределения ориентации директора в целом ряде задач. Наиболее существенная польза возникает при применении теоремы Нетер к задачам, где директор не лежит в какой-то одной плоскости.

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

ЛИТЕРАТУРА

1. **M. Brehm, H. Finkelmann, H. Stegemeyer.** Bericht Bunsengens Phys. Chem. Bel., **78**, 883 (1974).
2. **F. Fisher,** Z.Naturforsch. **31a**, 41 (1976)
3. **Б.Я. Зельдович, Н.В. Табирян.** ЖЭТФ, **83**, 998 (1982).
4. **Р.С. Акопян, Б.Я. Зельдович.** ЖЭТФ, **83**, 2137 (1982).
5. **А.А. Кандевосян, Р.С. Акопян.** Изв. НАН Армении, Физика, **47**, 47 (2012).
6. **Б.Я. Зельдович, Н.В. Табирян.** Письма в ЖЭТФ, **34**, 428 (1981).
7. **Р.С. Акопян, Р.Б. Алавердян, В.В. Саакян, Ю.С. Чилингарян.** Кристаллография, **30**, 746 (1985).
8. **O. Buluy, D. Burseva, M.R. Hakobyan, J.W. Goodby, M. Kolosov, Yu. Reznikov, R.S. Hakobyan, K. Slyusarenko, M. Prodanov, V. Vashchenko.** Mol. Cryst. Liq. Cryst., **560**, 149 (2012).
9. **М.Р. Акопян, Р.С. Акопян.** Изв. НАН Армении, Физика, **46**, 180 (2011).

ՆԱՆՈՄԱՍՆԻԿՆԵՐՈՎ ՀԱՐՍՏԱՑՎԱԾ ՀԵՂՈՒԿ ԲՅՈՒՐԵՂԱՅԻՆ
ՀԱՐԹ-ԶՈՒԳԱՀԵՌ ԲԶԶՈՒՄ ՀԱՄԱՍԵՌ ԿՈՂՄՆՈՐՈՇՄԱՆ
ԿԱՅՈՒՆՈՒԹՅԱՆ ՄԱՍԻՆ

Ս.Ռ. ՀԱԿՈԲՅԱՆ, Ա.Ա. ՂԱՆԴԵՎՈՍՅԱՆ, Ռ.Ս. ՀԱԿՈԲՅԱՆ, ՅՆ.Ս. ՉԻԼԻՆԳԱՐՅԱՆ

Դիտարկված են խնդիրներ՝ քիչ քանակությամբ խալեստերիկ հեղուկ բյուրեղով (ԽՀԲ) խառնված նեմատիկ ՀԲ-ի մոլեկուլների համասեռ կողմնորոշման կայունության մասին: Ուսումնասիրված են ՀԲ բջջիջներ՝ սահմանների վրա մոլեկուլների հումեոտրոպ ու թվիստ կողմնորոշումներով: Խնդիրները լուծվել են հեղուկ բյուրեղների համար Նոթերի թեորեմի միջոցով: Համաձայն այդ թեորեմի, ազատ էներգիայի ինվարիանտությունը տեղափոխության նկատմամբ հանգեցնում է իմպուլսի հոսքի պահպանմանը, իսկ պտտման խմբի նկատմամբ՝ շարժման քանակի մոմենտի հոսքի պահպանմանը: Այս պահպանման օրենքները կիրառվել են նշված խառնուրդների մոլեկուլների համասեռ կողմնորոշումների կայունության շեմերը որոշելու, ինչպես հաս նանոմասնիկների ազդեցությունը գնահատելու համար:

ON THE STABILITY OF HOMOGENOUS ORIENTATION
IN THE PLANE-PARALLEL CELL OF A LIQUID CRYSTAL
DOPED WITH NANOPARTICLES

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

The problems of molecules homogenous orientations stability of nematic liquid crystal (NLC) doped with small amount of cholesteric LC are considered. The LC cell with homeotropic orientation on the wall and the cell with a twist-oriented molecules on the boundaries are studied. The problems are solved using the Noether theorem for LC. The invariance of the form of free energy to translation according to the Noether theorem leads to conservation of the momentum flux, and invariance with respect to the rotation group leads to conservation of the angular-momentum flux. These conservation laws are used to get thresholds of molecules homogenous orientation stability of mentioned mixture and the influence of nanoparticles on this thresholds.