УДК 539.216:532.783

ВИХРЕВЫЕ СТРУКТУРЫ НОВОГО ТИПА В ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ПЛЕНКАХ

Дж. Барберо, З. В. Габбасова, А. К. Звездин, М.-М. Тегеранчи

Показано, что в системах без центера инверсии, в частности, жидкокристаллических пленках, состоящих из молекул с нарушенной центральной симметрией, реализуется неоднородное состояние вихревого типа. Анизотропное дипольное взаимодействие, представленное инвариантом Лифшица в разложении свободной энергии жидкого кристалла (ЖК), стабилизирует вихревое решение. Приводится оценка критерия существования неоднородности.

В жидких кристаллах известны случаи образования вихревых структур, обусловленных внешним электрическим или магнитным полем, течением анизотропной жидкости, наличием дефектов и образованием дисклинаций [1 – 5]. В данной работе рассматриваются принципиально новые состояния вихревого типа, возникновение которых не связано с внешними воздействиями, а определяется внутренней симметрией структуры.

В системах, в группе симметрии которых отсутствует операция пространственной инверсии, могут образовываться пространственно-модулированные структуры (см. [6 – 9] и цитированную там литературу). Такие структуры могут быть обусловлены наличием членов в разложении свободной энергии, которые линейны по градиенту параметра порядка и делают энергетически выгодной неоднородную структуру.

В данной работе мы покажем, что в двумерном случае в жидких кристаллах низкосимметричных кристаллографических классов с отсутствием центра инверсии может реализоваться неоднородное вихревое состояние. Как отмечалось выше, в данном случае такая структура не связана с вязкими свойствами ЖК, а является статическим образованием. Возникновение "статических вихрей" оказывается возможным также в

ЖК соединениях твердых фаз: смектически жидких кристаллах, пленках Ленгмюра–Блоджетт и др.

Из многообразия ЖК модификаций можно выделить класс веществ, содержащих в энергии инварианты, линейные по первым пространственным производным. Это связано в первую очередь с асимметрией составляющих структуру молекул. К низкосимметричному классу жидких кристаллов можно отнести холестерики, некоторые виды смектиков, образованные киральными молекулами, а также ленгмюровские слои и пленки Ленгмюра–Блоджетт. Отличительным признаком таких структур является отсутствие центра инверсии в соответствующей группе симметрии. Разложение свободной энергии систем такого типа допускает существование инварианта Лифшица [10], который приводит к возникновению неустойчивости однородной структуры.

Рассмотрим молекулярную пленку, состоящую из молекул с нарушенной "up and down" симметрией. Примерами таких систем являются пленки Ленгмюра и Ленгмюра–Блоджетт, нематические жидкие кристаллы в твист-ячейках и др.

Мы рассматриваем достаточно тонкие пленки и предполагаем, что вектор $\vec{n}$ не изменяется в направлении, перпендикулярном плоскости пленки. Представим термодинамический потенциал ЖК пленки в виде

$$\Phi = \int (f_{el} + f_s + f_l) ds. \tag{1}$$

Первое слагаемое $f_{el} = K_1(\mathrm{div}\vec{n})^2 + K_2(\vec{n}\nabla\vec{n})^2 + K_3(\vec{n}\nabla\vec{n})^2$ соответствует упругой энергии Франка, второе слагаемое $f_s = K_s n_\perp^2$ определяет анизотропную поверхностную энергию и последний член $f_l = \lambda\Delta\omega$ может быть представлен инвариантом Лифшица и интерпретирован как энергия анизотропного взаимодействия между асимметричными частями молекул.

Взаимодействие кристалла с внешним полем описывается членом вида $f_\epsilon = -\frac{1}{2}\epsilon_a(\vec{n}, \vec{E})^2$ и сводится к перенормировке константы поверхностной анизотропии $K_s \to K_s - \frac{1}{2}(\epsilon_a E)^2$. Здесь ϵ_a – анизотропия диэлектрической проницаемости ЖК, $\vec{n}$ – директор, определяющий среднее направление ориентации молекул ЖК.

Линейный по пространственным производным от параметра порядка (директора $\vec{n}$) член может быть представлен в виде

$$\lambda\Delta\omega = \lambda(n_x\partial_x n_z + n_y\partial_y n_z), \tag{2}$$

где λ – константа, или в более симметричном виде

$$\lambda\Delta\omega = \lambda(n_x\partial_x n_z - n_z\partial_x n_x + n_y\partial_y n_z - n_z\partial_y n_y). \tag{3}$$

Легко убедиться в том, что выражения (2) и (3) отличаются друг от друга только слагаемым типа $\lambda \mathrm{div}\nu_\perp(\vec{n}n_z)$, которое имеет значение лишь при рассмотрении граничных условий. Поскольку в данной работе мы исследуем распределение директора $\vec{n}$ в безграничной двумерной среде, это различие является несущественным. Мы будем для конкретности использовать $\lambda\Delta\omega$ в форме (2). Заметим также, что выражение типа (2) или (3) более точно следует называть инвариантом квазилифшицевского типа, поскольку он составлен из базисных функций (n_x, n_y) и n_z, преобразующихся по различным неприводимым представлениям группы симметрии рассматриваемой структуры.

Рассмотрим осесимметричное распределение директора $\vec{n}$. Ось симметрии будем считать направленной вдоль оси OZ и на оси вихря направление директора положим противоположным направлению поля. В выбранной геометрии задачи представляется удобным перейти к сферической системе координат для вектора

$$\vec{n} = (\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta) \tag{4}$$

и цилиндрической системе координат для вектора

$$\vec{r} = (\tilde{\rho}\cos\psi, \tilde{\rho}\sin\psi, z), \tag{5}$$

которая отвечает симметрии предполагаемого вихревого решения. Поскольку мы ограничиваемся процессами, протекающими в поверхностном слое, координату Z в (5) можно положить равной 0. Перейдем к одноконстантному приближению для энергии Франка $K_1 = K_2 = K_3 = K$. Тогда термодинамический потенциал системы (1) принимает вид

$$\Phi = \int [K\{(\vec{\nabla}_\perp\theta)^2 + \sin^2\theta(\vec{\nabla}_\perp\phi)^2\} + K_s\sin^2\theta(\theta_x\cos\phi + \theta_y\sin\phi)]ds, \tag{6}$$

где $\vec{\nabla}_\perp = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, 0\right)$.

Минимизируя функционал (6), получим систему дифференциальных уравнений для определения координат θ и ϕ:

$$\begin{gathered} 2K\nabla_\perp^2\theta - (K_s + K(\nabla_\perp\phi)^2)\sin 2\theta + \lambda\sin^2\theta(-\phi_x\sin\phi + \phi_y\cos\phi) = 0, \\ 2K\nabla_\perp\sin^2\theta\nabla_\perp^2 + 2K\sin^2\theta\nabla_\perp^2\phi - \lambda\sin^2\theta(\theta_y\cos\phi - \theta_x\sin\theta) = 0. \end{gathered} \tag{7}$$

Для того, чтобы сузить спектр решений системы (7), предположим, что азимутальный угол ϕ не зависит от расстояния $\tilde{\rho}$: $\phi_{\tilde{\rho}} = 0$ и $\theta_\psi = 0$. Тогда после перехода к цилиндрической системе координат второе уравнение системы (7) преобразуется к виду

$$2K\sin^2\theta\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial\psi^2}\right)\tilde{\rho}^{-2} - \lambda\sin^2\theta\left(\frac{\partial\theta}{\partial\tilde{\rho}}\right)\sin(\psi - \phi) = 0. \qquad (8)$$

Решения $\phi = \psi + l\pi$; $l = 0, 1, 2, ...$ являются частными решениями уравнения (8). Уравнение для Θ (первое уравнение системы (7)), соответствующее частному решению $\phi = \psi$, в цилиндрической системе координат принимает вид

$$\Theta_{\rho\rho} + \rho^{-1}\Theta_\rho - (1 - \rho^{-2})\sin\theta\cos\theta + \left(\frac{\tilde{\lambda}_e}{2\rho}\right)\sin^2\theta = 0, \qquad (9)$$

где введены обозначения

$$\tilde{\rho} = \frac{\rho}{\sqrt{K/K_s}},\ \tilde{\lambda} = \frac{\lambda}{\sqrt{KK_s}},$$

$$e = \begin{cases} -1,\ \phi = \psi + \pi \\ +1,\ \phi = \psi. \end{cases}$$

Величина e может быть определена как топологический заряд вихря. Исследуем асимптотическое поведение функции $\Theta(\rho)$. В области $\rho \ll 1$ можно принять $\pi - \theta \ll 1$. При значениях $\rho \gg 1$ решение уравнения (9) можно найти для малых углов θ. Линеаризованное уравнение (9) имеет вид

$$\Theta_{\rho\rho} + \rho^{-1}\Theta_\rho - (1 + \rho^{-2})\Theta = 0. \qquad (10)$$

Решение (10) определим через цилиндрические функции

$$\Theta = AK_1(\rho), \qquad (11)$$

где $K_1(\rho)$ – функция Макдональда первого порядка, которую можно представить в виде ряда [11]

$$K_1(\rho) = \frac{1}{\rho} + \ln\frac{\rho}{2}\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(\rho/2)^{2k+1}}{k!\Gamma(k+2)} - \frac{1}{2}\frac{\rho}{2}\sum_{k=0}^{\infty}[\Psi(k+1) + \Psi(k+2)]\frac{(\rho^2/4)^k}{k!(k+1)!},$$

где $\Psi(\rho) = \frac{\Gamma'(\rho)}{\Gamma(\rho)}$ и $\Gamma(\rho)$ – гамма-функция.

Сохраняя первые члены разложения, для малых ρ получим асимптотическую формулу

$$\Theta = A\left(\frac{1}{\rho} + \frac{\rho}{2}\ln\frac{\rho}{2}\right). \tag{12}$$

Зависимость $\Theta(\rho)$ схематически представлена на рис. 1. Мы полагаем, что $\Theta \to 0$ при $\rho \to \infty$. Очевидно, что возможна инверсная ситуация, когда $\Theta(0) = 0$ и $\Theta \to \pi$ при $\rho \to \infty$. Эти два решения являются эквивалентными в том случае, когда отсутствует внешнее поле, характеризуемое полярным вектором в направленное по оси Z. Поэтому мы ограничимся рассмотрением первого случая $\Theta(0) = \pi$.

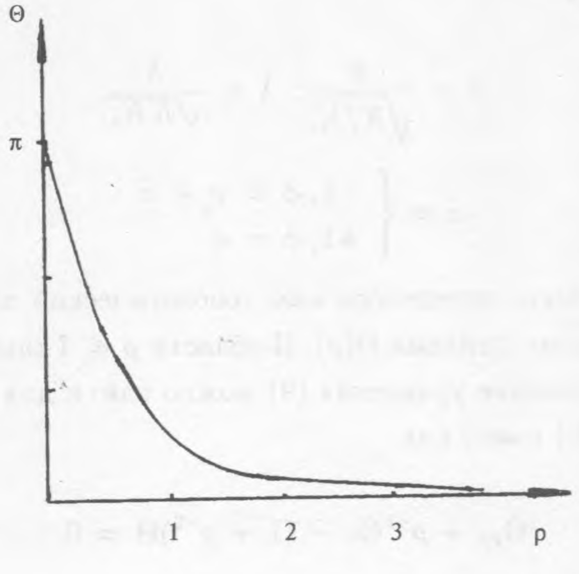

Рис. 1. *График зависимости* $\Theta(\rho)$.

Исследуем асимптотические свойства функции $\Theta(\rho)$ при $\rho \gg 1$, $\Theta \ll 1$. В этом случае уравнение для Θ принимает вид $\Theta'' + \frac{1}{\rho}\Theta' - (1 + \frac{1}{\rho^2})\Theta = 0$, решение которого можно представить в виде функции Макдональда первого порядка (или модифицированной функции Бесселя первого порядка) $\Theta = AK_1(\rho)$.

При $\rho \ll 1$ естественно перейти к новой переменной $\alpha = \pi - \theta$; уравнение для α имеет вид:

$$\frac{\partial^2 \alpha}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial \alpha}{\partial \rho} - \left(1 - \frac{1}{\rho^2}\right)\alpha = 0. \tag{13}$$

Решение (13) в области малых ρ может быть представлено в виде

$$\alpha = BI_1(\rho)$$

или

$$\Theta = \pi - BI_1(\rho), \tag{14}$$

где $I_1(\rho)$ – модифицирование функции Бесселя первого порядка

$$I_1(\rho) = \frac{\rho}{2}\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(\rho/2)^{2k}}{k!\,\Gamma(k+2)}.$$

Полагая, что в промежуточной области $\rho \approx 1$ поведение функции может быть аппроксимировано многочленом необходимого порядка, из условий сшивки и минимума энергии можно определить неизвестные коэффициенты в разложениях (12) и (14). Для получения качественной картины явления мы ограничимся здесь простейшей аппроксимацией функции $\Theta(\rho)$

$$\Theta(\rho) = \begin{cases} \pi(1 - \rho/\rho_c) & 0 < \rho < \rho_c \\ 0 & \rho > \rho_c. \end{cases}$$

Подставляя эту функцию в функционал (6) и производя интегрирование по ρ, получаем

$$\Phi = K(\pi^2 + I_1) + K_s\rho_c^2\left(1 + \frac{e\lambda\pi}{K_s\rho_c}\right)I_2, \tag{15}$$

где

$$I_1 = .2\pi\int_0^{\pi}\frac{\sin^2 x}{x}dx \simeq 7,7, \quad I_2 = \frac{2}{\pi}\int_0^{\pi} x\sin x dx \simeq 1,6.$$

Минимизируя (15) по ρ_c, получим

$$\rho_c = \frac{\lambda\pi}{2K_s} \tag{16}$$

при $e = -1$. Вихрь с топологическим зарядом $e = +1$ является энергетически невыгодным. Энергия такого вихря всегда больше нуля. Подставляя (16) в (15), получим энергию вихря с $e = -1$

$$\Phi = K(\pi + I_1) + \frac{\lambda^2\pi^2}{4K_s}I_2.$$

Отсюда следует, что образование вихря становится энергетически выгодным при $\lambda^2 > 4KK_s\left(\frac{\pi+I_1}{I_2}\right)$.

В жидкокристаллических системах, в группе симметрии которых отсутствует операция пространственной инверсии (нематических жидких кристаллах в ячейках с различными граничными условиями на подложках, ленгмюровских пленках и др.), возможно образование двумерных пространственно-модулированных структур, в которых поле директора изменяется по типу вихря. Термодинамический потенциал, отвечающий симметрии рассматриваемой системы, содержит инвариант квазилифшицевского типа, линейный по пространственным производным директора $\vec{n}$. Показано, что наличие инварианта Лифшица делает энергетически выгодным образование вихря, приведены оценки параметров и области существования вихревого распределения $\vec{n}$.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Kleman M. Points, Lines and Vortices: In Liquid Crystals, Magnetic Systems and Various Ordered Media, 1983.

[2] Виситинь Л. К., Чистяков И. Г., Жаренов Р. И., Яковенко С. С. Кристаллография, **21**, 173 (1976).

[3] Meyer R. B. Phil. Mag., **27**, 405 (1973).

[4] Faetti S., Fronzoni L., and Rolla P. A. J. Chem. Phys., **79**, 5054 (1983).

[5] Frisch N., Ricca S., Coullet P., and Gilli J. M. Phys. Rev. Lett., **72**, 1471 (1994).

[6] Изюмов Ю. А. Дифракция нейтронов на длиннопериодических структурах, М., Энергоатомиздат, 1987.

[7] Frunza S. Europhys. Lett., **20**, 407 (1992).

[8] Богданов А. Н., Кудинов М. В., Яблонский Д. А. ФТТ, **31**, 99 (1989).

[9] J a c o b s. Phys. Rev., A, **45**, 5783 (1992).

[10] Рассеяние света вблизи точек фазовых переходов. под ред. Г. К. Камминза, А. П. Леванюка, М., Наука, 1990.

[11] Г р а д ш т е й н И. С., Р ы ж и к И. М. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений, М., Наука, 1971.

Институт общей физики РАН

Поступила в редакцию 1 декабря 1994 г.

После переработки 26 июля 1995 г.