Письма в ЖЭТФ, том 86, вып. 6, с. 446 – 449 © 2007 г. 25 сентября

Об асимптотической нелинейности в смектиках

Е. А. Бренер, В. И. Марченко

Institut für Festkörperforschung, Forschungszentrum Jülich, D-52425 Jülich, Germany

Институт физических проблем им. П.Л. Капицы РАН, 119334 Москва Россия

Поступила в редакцию 9 августа 2007 г.

Указаны уединенные источники деформации в смектиках, для которых задача определения поля смешений существенно нелинейна на сколь угодно больших расстояниях даже при малой амплитуде воздействия. В ряде случаев удается найти нелинейные асимптотики.

PACS: 61.30.–v

Обычно поля возмущения параметра порядка на далеких расстояниях от точечных или линейных дефектов в конденсированных средах становятся малыми и можно пользоваться линейной теорией для нахождения их асимптотического поведения. Однако, как было показано нами в работе [1], в смектиках возникает специфическая ситуация – нелинейность существенно изменяет поле деформации краевой дислокации. Несмотря на то, что задача нелинейная, оказалось возможным найти ее аналитическое решение. Ишикава и Лаврентович [2] обнаружили указанный эффект, исследуя дефект в холестерике, полностью аналогичный краевой дислокации в смектике. Сантангело и Кэмин [3] нашли изящный метод вывода решения [1], позволяющий несколько расширить круг точно решаемых нелинейных задач.

В настоящей работе мы выясним для каких уединенных источников деформации в смектиках достаточно линейного приближения и для каких важны нелинейные эффекты в дальних асимптотиках. Оказывается, что в некоторых случаях асимптотика определяется исключительно нелинейностью.

Энергия малых деформаций смектика равна

$$\mathcal{E} = \int \frac{A}{2}\left\{\left(\partial_z u - \frac{(\partial_\alpha u)^2}{2}\right)^2 + \lambda^2(\Delta_\perp u)^2\right\} dV \quad (1)$$

(см. [4]), где u – смещение слоев вдоль оси смектика z, A – модуль упругости, λ – параметр длины, ∂_α – вектор градиента в плоскости слоев xy, $\Delta_\perp = \partial_\alpha^2$.

Вариационные уравнения равновесия имеют вид

$$\lambda^2\Delta_\perp^2 u - \partial_z^2 u + \partial_z(\partial_\alpha u)^2 + (\partial_z u)(\Delta_\perp u) -$$

$$-\frac{1}{2}\partial_\alpha[(\partial_\beta u)^2\partial_\alpha u] = \frac{F(\mathbf{r})}{A}, \quad (2)$$

где $F(\mathbf{r})$ – плотность внешних сил и мультипольных сил дефектов.

В линейном приближении асимптотика смещения вокруг некоторого точечного дефекта на больших по сравнению с молекулярными ($\sim a$) расстояниях и при наклоне радиус-вектора не малом по отношению к слоям, когда и $z \gg a$, имеет вид

$$u \propto \lambda\left(\frac{z}{\lambda}\right)^\alpha f\left(\frac{\rho^2}{\lambda z}, \frac{y}{x}\right), \quad (3)$$

где функция f по величине порядка единицы, $\rho = \sqrt{x^2+y^2}$. Для линейных дефектов, лежащих в плоскости смектика, $u \propto \lambda(z/\lambda)^\alpha f(x^2/\lambda z)$. Для линейных дефектов, параллельных оси z, $u \propto \lambda(\rho/\lambda)^\alpha f(y/x)$. Наконец, для плоского дефекта (стенки), перпендикулярного к смектическим слоям, $u \propto \lambda(x/\lambda)^\alpha$.

Сравнивая различные члены в энергии (1) для этих асимптотик, убеждаемся, что линейное приближение верно только при $\alpha < 0$. Тогда, так же как в электродинамике, поле любого дефекта находится по заданному источнику мультипольных сил путем дифференцирования линейных гриновских функций

$$G = \frac{1}{2\pi A\lambda}\left(\int_{\frac{\rho}{\sqrt{\lambda|z|}}}^{\infty} e^{-\frac{v^2}{4}}\frac{dv}{v} + ln\frac{\rho}{\rho_0}\right) \quad (4)$$

для точечного распределения сил, $\alpha = 0$;

$$G_\perp = \frac{\sqrt{|z|}}{2\sqrt{\pi\lambda}A}\left(\frac{x}{\sqrt{\lambda|z|}}\int_0^{\frac{x}{\sqrt{\lambda|z|}}} e^{-\frac{v^2}{4}}\frac{dv}{2} + e^{-\frac{x^2}{4\lambda|z|}}\right) \quad (5)$$

для распределения сил на линии $x = z = 0$, $\alpha = 1/2$;

$$G_\parallel = \frac{1}{8\pi A\lambda^2}\rho^2 ln\frac{\rho}{\rho_0}. \quad (6)$$

для распределения сил на линии $x = y = 0$, $\alpha = 2$.

Отметим, что гриновские функции (4) и (5) при $z = 0$ вне точек приложения сил удовлетворяют граничному условию на свободной границе ($\sigma_{zz} = 0$).

Поэтому они являются также поверхностными гриновскими функциями.

Соответствующий каждому мультиполю индекс α легко вычисляется по индексу соответствующей гриновской функции. Асимптотики линейного приближения точны в следующих случаях:

1) $\alpha = -1$. Точечные дефекты (примеси) в объеме, описываемые упругим вкладом в плотности энергии $\propto \partial_z u\delta(\mathbf{r})$ (асимптотика для таких включений определена в работе [3]); при отсутствии у дефекта симметрии $z \to -z$, необходимо учесть еще вклад $\kappa_0^{\alpha\beta}\partial_\alpha\partial_\beta u\delta(\mathbf{r})$; примеси на базисной грани смектика, инвариант $\kappa^{\alpha\beta}\partial_\alpha\partial_\beta u\delta(x)\delta(y)$.

2) $\alpha = -1/2$. Точечные источники момента силы в объеме, инвариант $\partial_x u\delta(\mathbf{r})$, и на поверхности, инвариант $\partial_x u\delta(x)\delta(y)$. Линейные включения, лежащие в смектических слоях, в объеме, инвариант $\partial_z u\delta(x)\delta(z)$; при нарушении симметрии $z \to -z$ возникает еще один инвариант $\partial_x^2 u\delta(x)\delta(z)$; на поверхности, инвариант $\partial_x^2 u\delta(x)$.

Дислокации соответствуют пограничному значению $\alpha = 0$. Индекс здесь определяется из условия независимости от контура обхода вокруг кора дислокации результирующего набора вектора Бюргерса. Такой же нулевой индекс будет в случаях:

1) объемных и поверхностных точечных источников силы (гриновские функции);

2) распределения момента сил на линиях в смектических слоях;

3) одномерного включения, параллельного оси z, с нарушенной симметрией $z \to -z$, инвариант $\Delta_\perp u\delta(x)\delta(y)$;

4) ступени на базисной грани смектика.

Для чисто винтовой дислокации ситуация вырождена – решение линейной задачи (см. [4]) оказывается точным и для нелинейного уравнения.

Особый класс задач $\alpha > 0$ представляют:

1) $\alpha = 1/2$. Распределение сил на линии в базисной плоскости, в объеме и на поверхности.

2) $\alpha = 1$. Распределение момента сил вдоль линии, нормальной к базисной плоскости, инвариант $\partial_x u\delta(x)\delta(y)$.

3) $\alpha = 2$. Распределение сил вдоль линии, нормальной к базисной плоскости.

4) $\alpha = 3$. Задача о сдвиговых напряжениях смектика, зависящих от одной координаты x (здесь общее решение линейного приближения сводится к полиному третьей степени).

Ниже рассмотрен ряд нелинейных задач, для которых нам удалось провести полное исследование.

1. Вначале обратимся к одномерному случаю, из которого становится ясна суть эффекта асимптотической нелинейности. Пусть смектик находится в сосуде с вертикальными стенками с координатами $x = 0$ и $x = L$. В простейшей одномерном случае, когда деформация зависит лишь от координаты x, уравнение равновесия имеет вид

$$\frac{3}{2}(u')^2 u'' - \lambda^2 u'''' = 0, \tag{7}$$

где штрихи обозначают дифференцирование по координате x. Первый интеграл равен

$$\frac{1}{2}(u')^3 - \lambda^2 u''' = -\frac{F}{A} \tag{8}$$

где F – тангенциальная сила, действующая со стороны левой стенки на смектик (при этом в равновесии со стороны правой стенки должна действовать сила $-F$). Второй интеграл равен

$$\frac{1}{8}(u')^4 - \frac{1}{2}\lambda^2(u'')^2 = -\frac{F}{A}u' + C, \tag{9}$$

откуда получаем

$$\int_{u'}^{0} \frac{dt}{\sqrt{t^4 + 8Ft/A - 8C}} = \frac{x - x_0}{2\lambda}. \tag{10}$$

Константы интегрирования находятся из граничных условий. Получаемые при вариировании естественные условия сводятся к двум соотношениям на каждой из стенок. Например, первое условие есть равенство (8) при $x = 0$ (вариирование по $u(0)$). Второе условие как результат вариирования по $u'|_{x=0}$ есть

$$A\lambda^2 u'' = \frac{\delta\sigma}{\delta u'},$$

где σ – энергия границы смектик-стенка. Вместо этого условия можно считать, что на стенке фиксирована ориентация смектических слоев. Будем предполагать, что слои ориентируются нормально к стенке, тогда $x_0 = 0$. В случае $L \to \infty$ далеко от стенки реализуется состояние однородного сдвига

$$u' = -\left(\frac{2F}{A}\right)^{1/3}. \tag{11}$$

С учетом этой асимптотики из второго интеграла (9) определяем константу $C = -3 * 2^{-5/3}(F/A)^{4/3}$. Выполняя интегрирование (10), находим выражение

$$u' = \left(\frac{2F}{A}\right)^{1/3} \frac{4 - 3\sqrt{2}sh(x/\tilde{\lambda}) - 4ch(x/\tilde{\lambda})}{2 + 3\sqrt{2}sh(x/\tilde{\lambda}) + 4ch(x/\tilde{\lambda})}, \tag{12}$$

описывающее переход ориентации слоев в пристеночной области $x \sim \tilde{\lambda} = 2^{1/6}3^{-1/2}(A/|F|)^{1/3}\lambda$ от граничного значения $u' = 0$ к однородному нелинейному сдвигу в объеме (см. рис.1). Вблизи стенки, при

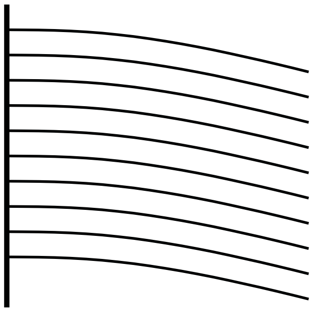

Рис.1. Пристеночная переходная область при сдвиговой деформации смектика

$x \ll \tilde{\lambda}$, решение (12) превращается в решение линейной задачи

$$u \approx -sign(F)\frac{3^{1/2}}{2^{4/3}}\left(\frac{F}{A}\right)^{2/3}\frac{x^2}{\lambda}+\frac{F}{6A\lambda^2}x^3.$$

Эти результаты применимы лишь при малой силе F, когда верно малоугловое приближение (1).

2. Рассмотрим далее однородную вдоль z задачу с аксиальной симметрией. Уравнение равновесия при этом сводится к следующему виду

$$\left\{\lambda^2\left(\rho u''' + u'' - \frac{u'}{\rho}\right) - \frac{\rho}{2}(u')^3\right\}' = 0. \qquad (13)$$

Здесь штрихи обозначают дифференцирование по радиусу ρ. Первый интеграл равен

$$\lambda^2\left(\rho u''' + u'' - \frac{u'}{\rho}\right) - \frac{\rho}{2}(u')^3 = \frac{F}{2\pi A}, \qquad (14)$$

где константа интегрирования в правой части уравнения отлична от нуля, если рассматриваемый дефект действует на смектик с силой F (в расчете на единицу длины), направленной по оси симметрии z. Легко видеть при этом, что далеко от дефекта можно пренебречь эффектом кривизны и для асимптотики смещения из (14) находим

$$u = -\frac{3}{2}\left(\frac{F}{\pi A}\right)^{1/3}\rho^{2/3}. \qquad (15)$$

При малой силе F возникает макроскопическая область, где верно линейное приближение. Действительно, в пределе малых ρ (но все еще $\rho \gg \lambda$) можно пренебречь нелинейностью, и решение сводится к (6). Сшивка асимптотик (15) и (6) происходит на радиусах $\rho \sim \rho_0 \sim \lambda(A\lambda/|F|)^{1/2}$.

3. При $F = 0$, для функции $\psi = \rho u'/\lambda$ от новой переменной $t = ln(\gamma\rho/\lambda)$ из уравнения (14) следует

$$2\ddot{\psi} - 4\dot{\psi} - \psi^3 = 0.$$

При $t \to \infty$ можно пренебречь второй производной и тогда $\psi = \pm\sqrt{2/t}$. Поле смещений при этом равно

$$u = \pm 2\sqrt{2}\lambda\left(ln\frac{\gamma\rho}{\lambda}\right)^{1/2}. \qquad (16)$$

Если параметр γ велик, так что $ln\gamma \gg 1$, то в области $\lambda \ll \rho \ll \lambda\gamma$ решение (16) сводится к

$$u \approx \pm 2\sqrt{2ln\gamma}\lambda \pm \lambda\sqrt{\frac{2}{ln\gamma}}ln\frac{\rho}{\lambda}. \qquad (17)$$

Такое поле характерно для дефекта, не обладающего зеркальной симметрией $z \to -z$, когда имеется инвариант $\kappa\Delta_\perp u\delta(x)\delta(y)$. Дефекты, превращающиеся друг в друга при зеркальном отражении $z \to -z$, характеризуются параметрами κ, отличающимися лишь знаком. В линейном по амплитуде κ приближении вокруг такого дефекта возникает поле деформации

$$u = \frac{\kappa}{8\pi A\lambda^2}\Delta_\perp\left(\rho^2 ln\frac{\rho}{\rho_0}\right) = \frac{\kappa}{2\pi A\lambda^2}ln\frac{e\rho}{\rho_0} \qquad (18)$$

Переход от линейной к нелинейной асимптотике происходит на радиусах $\rho \sim \gamma\lambda$. Сравнение формул (17) и (18) определяет связь $ln\gamma = 8\pi^2A^2\lambda^6\kappa^{-2}$ параметра γ с микроскопической характеристикой дефекта κ. Интересно, что при этом устанавливается и значение параметра линейного приближения $\rho_0 = e\gamma^{-2}\lambda$.

В случае отсутствия силы F одномерный дефект ориентированный вдоль z и обладающий зеркальной симметрией $z \to -z$ (что мы и предполагали выше в пункте **2**) вообще не инициирует деформации смектика. Ситуация здесь такая-же как и с дефектами (примесями) в обычной жидкости.

4. Рассмотрим поле краевой дислокации [1]

$$u = sign(z)2\lambda ln\left(1 + \frac{e^{\frac{b}{4\lambda}} - 1}{2\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\frac{x}{\sqrt{\lambda|z|}}} e^{-\frac{t^2}{4}}dt\right), \qquad (19)$$

где b – вектор Бюргерса дислокации ("лишний" слой вставлен при $z = 0$, $x > 0$). Заметим, что везде, за исключением микроскопической окрестности кора дислокации (x=0), выполнены естественные граничные условия для свободной границы $\sigma_{zz} = 0$. Таким образом, решение (19), рассматриваемое, например, только при $z < 0$, задает поле какого-то поверхностного линейного дефекта. Оказывается, что это поле есть результат действия момента сил, приложенных к поверхности вдоль линии дефекта. Действительно, момент сил, действующих через поверхность $z = -h \neq 0$ со стороны верхней части жидкого кристалла на нижнюю, равен

$$M = \int_{-\infty}^{\infty}\sigma_{zz}x dx = A\lambda(u_{+\infty} - u_{-\infty}), \qquad (20)$$

где $u_{+\infty} - u_{-\infty} = b/2$ – асимптотический (вдали от кора дислокации) относительный сдвиг слоев.

Ясно, что в равновесии конечная величина момента сил (20) для дислокаций недопустима. В кристаллах ситуация еще хуже – там интеграл для момента сил вообще расходится. Мы пока не видим решения этой проблемы. Очевидно, однако, что с помощью решения (19) можно построить поле смещений, вызванное распределением момента сил M вдоль линии, лежащей в плоскости $z = 0$ в объеме или на поверхности смектика. На поверхности можно прямо использовать решение, заменив лишь параметр b на $2M/A\lambda$. В объемном же случае необходимо сделать замену $b \to M/A\lambda$ и преобразовать верхнюю часть решения ($z > 0$) следующим образом: $u(x,z) \to u(-x,z) - b/2$.

Так же как и в обычных кристаллах [5], элементарная ступень на базисной плоскости смектика характеризуется моментом сил, равным произведению силы поверхностного натяжения и высоты элементарной ступени. В то время как в кристаллах высота ступени равна межплоскостному расстоянию, в смектиках высота ступени уменьшается.

Заметим, что поверхностное натяжение рассматриваемой базисной грани смектика должно совпадать с ее поверхностной энергией так же, как и в обычной жидкости. На остальных поверхностях имеются две компоненты тензора поверхностных натяжений. Компонента тензора вдоль линий выхода смектических слоев совпадает с поверхностной энергией данной ориентации поверхности. Перпендикулярная же к этой линии компонента тензора является независимой величиной, как и в обычных кристаллах [5].

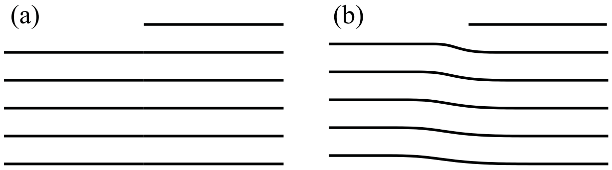

Рис.2. Ступень на поверхности смектика: (a) без деформаций, (b) с учетом деформаций

В силу положительности поверхностной энергии высота ступени благодаря деформациям, вызванным моментом сил поверхностного натяжения, уменьшается, уменьшая тем самым величину момента. Важно, что в отличие от случая обычных кристаллов, где поле смещений спадает степенным образом по мере удаления от ступени [5], в смектиках разница высот поверхности справа и слева от линии ступени на сколь угодно больших расстояниях становится меньше межплоскостного расстояния (см. рис.2), т.к., у исходного дислокационного решения (19), если $z \to 0$, то $u \to 0$ при $x < 0$, и $u \to sign(z)b/2$ при $x > 0$. Поэтому сам момент сил должен определяться самосогласованно: с одной стороны, по определению, $M = \sigma(b - u_{+\infty} + u_{-\infty})$, а с другой, согласно (20), $M = A\lambda(u_{+\infty} - u_{-\infty})$. Откуда находим результирующую высоту ступени

$$b - u_{+\infty} + u_{-\infty} = b\frac{A\lambda}{A\lambda + \sigma}$$

и величину момента $M = \sigma b A\lambda/(A\lambda + \sigma)$. Таким образом, поле смещения в окрестности элементарной ступени на поверхности смектика задается формулой (19), в которую вместо величины $b/2$ следует подставить относительное смещение $u_{+\infty} - u_{-\infty} = b\sigma/(A\lambda + \sigma)$.

Задачи о деформациях, вызванных локализованными или распределенными по линиям в объеме и на поверхности силами (нелинейные гриновские функции), а также о моменте сил, распределенных вдоль вертикальной линии, оказались более сложными, и нам пока не удалось найти их решения.

Благодарим Е.И. Каца за полезное обсуждение. В.М. благодарит Forschungszentrum Jülich за гостеприимство. Работа выполнена при финансовой поддержке DFG грант MU1170/6-1.

1. E.A. Brener, V.I. Marchenko, Phys. Rev. **E59**, 4752 (1999)
2. T. Ishikawa, O.L. Lavrentovich, Phys. Rev. **E60**, 4752 (1999).
3. C.D. Santangelo, R.D. Kamien, Phys. Rev. Lett. **91** 045506 (2003).
4. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, Теория упругости, Наука, Москва (1987).
5. В.И. Марченко, А.Я. Паршин, ЖЭТФ **79**, 257 (1980)