

## ТЕКСТУРНЫЙ ПЕРЕХОД ХОЛЕСТЕРИК-НЕМАТИК В ЖИДКИХ КРИСТАЛЛАХ

В.Л.Голо<sup>1)</sup>, Е.И.Кац

Институт теоретической физики им. Л.Д.Ландау РАН  
142432, Черноголовка

<sup>1)</sup>Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова  
119899, Москва

Поступила в редакцию 3 февраля 1992 г.

Исследуется фазовый переход холестерик-нематик, имеющий место в тонких слоях жидких кристаллов при изменении шага спирали или толщины слоя. Для вычисления энергии различных текстур жидкого кристалла предложен геометрический аналог вариационного метода Ритца-Галеркина. В качестве пробных функций используются контуры в пространстве параметра порядка, описывающие конфигурацию одномерных текстур жидкого кристалла. Показано существование нескольких метастабильных состояний (мультистабильности). Установлено также наличие участков почти постоянной энергии различных состояний холестерической спирали, что (с точностью до используемого вариационного метода) физически означает дополнительное вырождение системы.

1. В достаточно тонких слоях холестерических жидких кристаллов в условиях сильного сцепления ориентации на границах образца имеют место разнообразные текстурные превращения, связанные с конкуренцией объемных и поверхностных эффектов. Эти текстурные переходы имеют перспективные приложения и потому их исследованиям посвящена достаточно обширная литература.

Отметим в этой связи работу <sup>1</sup> (см. также <sup>2-4</sup>), в которой изучалась немато-холестерическая смесь в клиновидной ячейке, что позволяет независимо изменять шаг спирали ( $p_0 \equiv \frac{2\pi}{q_0}$ ) и толщину ( $L$ ) жидкого кристалла. В области малых толщин ( $L \leq 0,5p_0 \sim 5$  мкм) в <sup>1</sup> наблюдалась однородная нематическая структура при промежуточных толщинах ( $5 \div 10$  мкм) - сильно искаженная холестерическая и, наконец, в толстых образцах ( $L \geq 20$  мкм) - холестерическая.

В работе Зельдовича и Табирияна <sup>5</sup> теоретически исследовалась одномерная задача о структуре холестерика в тонких слоях с гомеотропными граничными условиями и было найдено точное решение в эллиптических функциях.

В настоящей статье, имея в виду экспериментальную ситуацию <sup>1-4</sup>, мы хотим описать переход нематик-холестерик в тонких пленках и, кроме того предлагаем удобный метод вычисления энергии различных текстур жидкого кристалла, являющийся геометрическим аналогом вариационного метода, в котором в качестве пробных функций используются специальным образом выбранные замкнутые контуры в пространстве параметра порядка.

Для наглядного описания состояния жидкого кристалла удобно использовать геометрическое представление о пространстве параметра порядка <sup>6</sup>. В обоих случаях (нематика или холестерика) пространство вырождения представляет собой сферу  $S^2$  с отождествленными антиподальными точками. Любое состояние нематика или холестерика (текстура) изображается в виде определенных точек или линий на этой поверхности. Так, например, однородно упорядоченный нематик соответствует точке на  $S^2$ , а идеальный холестерик экваториальной окружности.

При изменении внешних условий (температуры, состава смеси или толщины слоя жидкого кристалла) возможен фазовый переход нематик-холестерик. При этом переходе должна иметь место некоторая область неоднородной ориентации

(изображаемая некоторой кривой на  $S^2$ ). Неустойчивость нематика (точки на  $S^2$ ) по отношению к неоднородно деформированной области (выходящей из этой точки кривой) может осуществляться в зависимости от граничных условий и упругой анизотропии как мягким (т.е. непрерывно), так и жестким (то есть переходом первого рода) образом. Частный случай такой неустойчивости (соответствующий положению исходной точки в "северном полюсе"  $S^2$ ) был рассмотрен в работе <sup>5</sup> и назван беспольным переходом Фредерикса.

2. Как холестерическая, так и нематическая структуры жидкого кристалла описываются как экстремали функционала Франка свободной энергии <sup>7</sup>:

$$F = \frac{1}{2} \int d^3r [K_1(\operatorname{div} \vec{n})^2 + K_2(\vec{n} \cdot \operatorname{rot} \vec{n} + q_0)^2 + K_3(\vec{n} \times \operatorname{rot} \vec{n})^2]. \quad (1)$$

Здесь  $\vec{n}$  - директор,  $K_1, K_2, K_3$  - модули упругости,  $q_0$  - некоторый параметр. При  $q_0 = 0$  основному состоянию (1) соответствует нематик (однородное состояние  $\vec{n} = \text{const}$ ), при  $q_0 \neq 0$  - холестерик. В последнем случае реализуется неоднородное основное состояние с одномерным кручением поля  $\vec{n}$ :

$$\vec{n} \cdot \operatorname{rot} \vec{n} = -q_0.$$

В принципе даже при  $q_0 = 0$  основное состояние (1) может иметь ненулевое кручение при  $K_2 < 0$ . Разумеется, для положительной определенности (1) в этом случае должны быть учтены градиенты высшего порядка, которые и ограничивают рост кручения. Область  $K_2 < 0$  описывает холестерик, а при  $K_2 > 0$  - основное состояние соответствует нематику. Точка  $K_2 = 0$  называется критической точкой Лифшица. Подобного типа критического поведения хорошо изучено для магнетиков и некоторых других систем (см., например, <sup>8</sup>).

Мы не будем здесь обсуждать эту возможность, а рассмотрим фазовые переходы, имеющие место в тонких слоях жидкого кристалла при изменении  $q_0$  (или  $L$ ), так как именно такое превращение реализуется экспериментально <sup>1-4</sup>.

Для описания этих переходов запишем энергию (1) для тонкого слоя жидкого кристалла, конфигурация которого будет нами предполагаться однородной в плоскости слоя, то есть мы будем учитывать только зависимость от координаты в направлении ортогональном слою (ось  $z$ ). Таким образом из (1) имеем:

$$F = \frac{1}{2} \int_0^L dz [K_1 \dot{n}_3^2 + K_2(\epsilon_{\mu\nu} n_\mu \dot{n}_\nu + q_0)^2 + K_3 n_3^2 \dot{n}_3^2]. \quad (2)$$

Здесь точка обозначает дифференцирование по  $z$ ,  $L$  - толщина слоя жидкого кристалла,  $\mu, \nu = 1, 2$ , а  $\epsilon_{\mu\nu}$  - антисимметричный тензор ( $\epsilon_{12} = -\epsilon_{21} = 1$ ).

Даже при  $q_0 = 0$  получающаяся задача эквивалентна исследованию геодезических на эллипсоиде. При  $q_0 \neq 0$  точное решение еще более усложняется поскольку в (2) фигурирует линейный по кручению вклад (формально аналогичный магнитному полю <sup>6</sup>). Это приводит к тому, что минимизация  $F$  при  $q_0 \neq 0$  устанавливает оптимум между длиной контура на  $S^2$  и потоком векторного поля через ограниченную этим контуром площадь.

Сказанное выше может быть сформулировано более точно. Обратим внимание на то, что квадратичная по градиентам часть энергии (2), задаваемая интегралом

$$\int_0^L dz [K_1 \dot{n}_3^2 + K_2(\epsilon_{\mu\nu} n_\mu \dot{n}_\nu)^2 + K_3 n_3^2 \dot{n}_3^2]$$

больше чем квадрат длины геодезической<sup>2)</sup>:

$$I = \frac{1}{L} \left[ \int_0^L dz [K_1 \dot{n}_3^2 + K_2 (\epsilon_{\mu\nu} n_\mu \dot{n}_\nu)^2 + K_3 n_3^2 \dot{n}^2]^{1/2} \right]^2.$$

Таким образом, получаем следующую оценку для энергии:

$$F \geq Lq_0^2 + I + K_2 q_0 \Delta, \quad (3)$$

где  $\Delta$  - площадь контура в пространстве вырождения (то есть на сфере единичного радиуса).

Если характерный размер контура на  $S^2$  есть  $r$ , то  $\Delta \sim r^2$ , а  $I \sim K_{1,3} L^{-1} r^2$ .

Первые два вклада в (3) положительны, а третий не знакоопределен. Для уменьшения  $F$  этот вклад должен быть сделан отрицательным. Он описывает поток векторного поля через область, ограниченную контуром. При малых  $|Lq_0|$  грубая оценка (3) дает следующий критерий устойчивости однородной нематической структуры (то есть точки по сравнению с контуром на  $S^2$ ):

$$L \leq \frac{K_{1,3}}{K_2} \frac{1}{q_0}. \quad (4)$$

3. С учетом сказанного выше для минимизации функционала (2) мы будем применять вариационный метод типа Ритца-Галеркина, использующий геометрическую специфику задачи. Функционал (2) может быть задан на контурах в пространстве параметра порядка, которое обладает  $SO(3)$ -симметрией. Поэтому в качестве пробных функций мы выберем класс кривых на  $S^2$ , описывающих конфигурацию холестерика. В этой связи оптимальными для минимизации (2) контурами являются окружности, поскольку при фиксированной длине они ограничивают максимальную площадь на сфере. Отметим, что геодезические как таковые не решают поставленную задачу минимизации, так как они дают только экстремум длины.

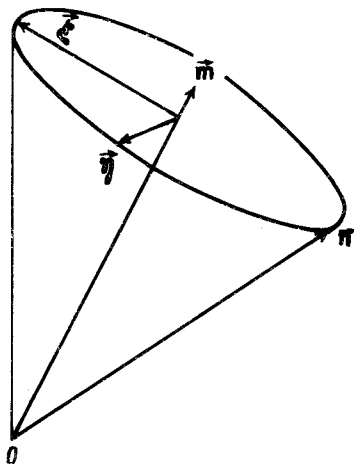


Рис. 1

Предположим, что на границах выполнены условия сильного сцепления:

$$\vec{n}|_{z=0} = \vec{n}(z=L) = \vec{n}_0 = \text{const}. \quad (5)$$

<sup>2)</sup> Этот результат следует из неравенства типа Коши-Буняковского  $\int_0^T \dot{u}^2(t) dt \geq \frac{1}{T} (\int \sqrt{\dot{u}^2} dt)^2$ .

Граничные условия (5) задают точку на  $S^2$ . Выберем упомянутый выше контур, (окружность) следующим образом. Пусть  $\vec{m}$  - вектор, проведенный из центра сферы  $S^2$  в центр окружности. Кроме того, разумеется, контур должен удовлетворять граничным условиям (5), то есть окружность с центром в  $\vec{m}$  должна проходить через точку  $\vec{n}_0$ . Такую окружность удобно параметризовать с помощью ортогональных векторов  $\vec{\xi}$  и  $\vec{\eta}$ , составляющих вместе с  $\vec{m}$  ортогональный, но не нормированный базисный репер (рис. 1):

$$\begin{aligned}\vec{\xi} &= \vec{n}_0 - (\vec{m}\vec{n}_0)\vec{m}; & \vec{\eta} &= \vec{m} \cdot \vec{n}_0 \\ \eta^2 = \xi^2 &= 1 - (\vec{m}\vec{n}_0)^2.\end{aligned}\quad (6)$$

В этом репере произвольная точка  $\vec{n}$  контура задается следующим образом:

$$\vec{n} = (\vec{m} \cdot \vec{n}_0)\vec{m} + \vec{\xi}\cos z + \vec{\eta}\sin z.\quad (7)$$

Подставляя (7) в (2) и интегрируя по  $z$ , получаем:

$$\begin{aligned}F &= \frac{1}{2}[1 - (\vec{m}\vec{n}_0)^2]\{(K_1 + K_3) + (K_2 - K_3)(\vec{m}\vec{n}_0)^2 - m_3^2[(K_1 + K_3) + (K_2 - 3K_3)(\vec{m}\vec{n}_0)^2]\} + \\ &+ K_3\{q_0 + [1 - (\vec{m}\vec{n}_0)^2]m_3\}^2.\end{aligned}\quad (8)$$

Таким образом, в классе выбранных нами контуров задача минимизации функционала (2) (то есть решения системы нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных) свелась к алгебраической задаче минимизации функции (8) по параметрам  $y \equiv \vec{m}\vec{n}_0$  и  $m_3$ .

Вместо переменных  $y$  и  $m_3$  можно использовать  $m_1, m_3$ , так как мы всегда можем выбрать  $\vec{n}_0$  в виде:

$$\vec{n}_0 = (\sin\alpha, 0, \cos\alpha)$$

и следовательно:

$$y = \sin\alpha m_1 + \cos\alpha m_3$$

(угол  $\alpha$  задает ориентацию на границе образца).

Так как  $\vec{m}$  единичный вектор, то мы должны искать минимум (8) в круге  $K$

$$m_1^2 + m_3^2 \leq 1.$$

Если минимум лежит на границе круга ( $m_1^2 + m_3^2 = 1$ ), то пробная окружность перпендикулярна плоскости, проходящей через  $\hat{z}$  и  $\vec{n}_0$  ( $\hat{z}$  - единичный вектор нормали к плоскому слою жидкого кристалла). Другими словами, решение инвариантно относительно отражения ( $P$ ) в плоскости, проходящей параллельно границам через середину слоя (именно такие решения рассмотрены в (1) для частного случая  $\alpha = 0$ ).

Используя численный анализ функции (8), мы не обнаружили существование каких-либо локальных минимумов внутри  $K$ , то есть равновесные (и даже метастабильные) текстуры жидкого кристалла должны быть инвариантными относительно симметрии  $P$ .

Наиболее просто энергия (8) выглядит в частном случае равных упругих модулей. Учитывая также, что все минимумы (8) имеют место на границе упомянутого выше круга  $K$  и задавая ориентацию  $\vec{m}$  некоторым углом  $\beta$  ( $m_1 = \sin\beta$ ,  $m_3 = \cos\beta$ ), получим из (8)

$$F = K[q_0^2 + \sin^2(\alpha - \beta)(1 + 2q_0 \cos \beta)]. \quad (9)$$

Оставляя подробное изучение описываемых функциями (8) (или (9)) текстурных переходов до отдельной работы, укажем здесь только результаты такого исследования.

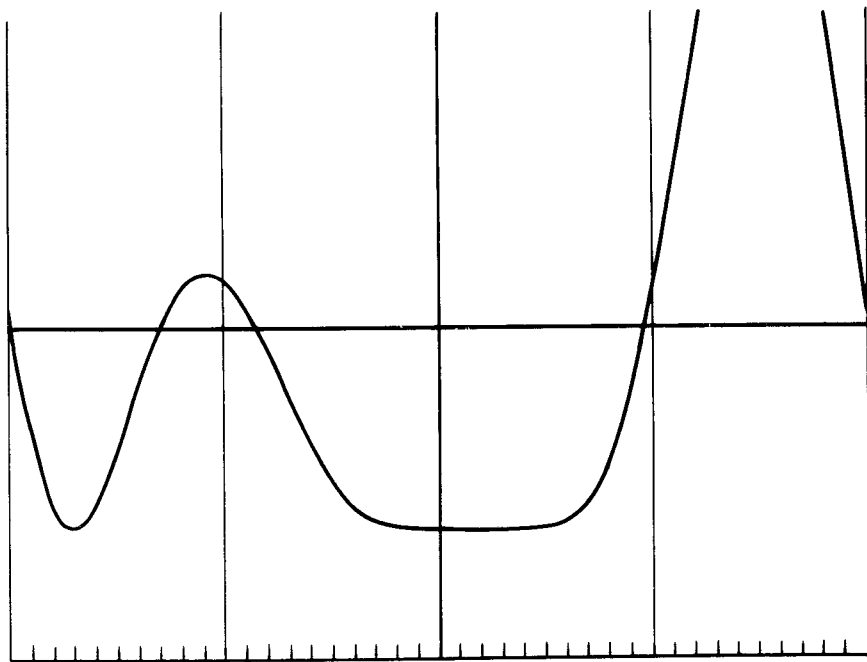


Рис.2

При значениях  $|q_0 L|$  меньших некоторого критического  $\kappa_c$  (зависящего от  $K_2/K_1$ ,  $K_3/K_1$  и  $\alpha$ ) исходная нематическая структура остается устойчивой, т.е. минимуму соответствует точка  $\vec{n}_0$  на  $S^2$ . При  $|q_0 L| > \kappa_c$  появляются новые минимумы, соответствующие искаженной нематической или холестерической структуре. Эти минимумы достигаются на описанных выше контурах-окружностях при различных значениях угла  $\beta$ . На рис. 2 для иллюстрации изображена зависимость  $F$  от  $\beta$  для  $q_0 = -0,5$ ,  $K_1 = K_3$ ,  $K_2 = 1,6K_1$ ,  $\alpha = 0,47$  рад. Видно плато с угловой шириной порядка  $25^\circ$ , на котором изменение  $F$  не превышает  $0,1\%$ . Отметим, что для указанных значений упругих модулей, согласно <sup>1</sup>, одномерная текстура энергетически более выгодна, чем двумерная.

При  $K_1 = K_2 = K_3$  и  $\alpha = 0$  (именно последний случай рассмотрен в <sup>5</sup>) непосредственно при  $\kappa_c$  имеет место фазовый переход второго рода. Однако в общем случае величины  $\kappa_c$  задают только границы метастабильных структур и описанные выше текстурные превращения являются фазовыми переходами первого рода. Поэтому переход нематик-холестерик в тонких слоях жидких кристаллов должен сопровождаться различного рода тепловыми эффектами, так как параметр  $q_0$  в жидких кристаллах весьма чувствителен к изменению температуры.

Упомянем, наконец, еще одну особенность вычисленной по контурам из (8) или (9) энергии различных холестерических текстур. Численное исследование (8) и (9) показывает наличие у этих функций участков очень медленного изменения, которые (в рамках точности применяемого вариационного подхода) можно рассматривать как области постоянного потенциала. Физически это

обстоятельство означает дополнительное вырождение ансамбля холестерических структур в областях, соответствующих "плато" эффективного потенциала (8) или (9). Мы не будем в этой работе подробнее обсуждать это явление, но совершенно ясно, что такое дополнительное вырождение должно приводить к многочисленным физическим следствиям (например, росту интенсивности рассеяния света, разнообразным мультидоменным структурам и т. д.) и имеет перспективные приложения.

---

1. M.J.Press and A.S.Arrot. *J. de Phys.* **37**, 387, (1976).
2. W.Haas and J.Adams. *Appl. Phys. Lett.* **25**, 535, (1974).
3. M.Uchiyama and C.Ishii. *J. Phys. Soc. Jpn.* **50**, 4030, (1981).
4. G.Porte and J.P.Jadot. *J. de Phys.* **39**, 213, (1978).
5. Б.Я.Зельдович, Н.В.Табирян. *ЖЭТФ* **83**, 998, (1989).
6. F.Lequas, *J. de Phys.* **49**, 967, (1988)
7. П.Ж. де Жен. *Физика жидких кристаллов*. М.: Мир, 1977.
8. R.M.Hornreich, M.Luban and S.Shtrikman. *Phys. Rev. Lett.*, **35**, 1678, (1975).