

## Локализованные двумерные неоднородные состояния в упругих нематиках

А. Н. Богданов, А. А. Шестаков

*Донецкий физико-технический институт им. А. А. Галкина НАН Украины,  
Украина, 340114, г. Донецк, ул. Р. Люксембург, 72  
E-mail: bogdanov@host.dipt.donetsk.ua*

Статья поступила в редакцию 18 февраля 1997 г.

Получены аналитические решения уравнений теории упругости, описывающие систему локализованных аксиально-симметричных неоднородных состояний («изолированных нитей») в нематике, которые под влиянием магнитного или электрического полей сжимаются в плотные нити. Высказано предположение, что такие структуры могут реализоваться в нитевидных нематических текстурах. Эта модель является альтернативой общепринятой дисклинационной модели. В холестериках данные локализованные состояния радиально неустойчивы, однако здесь возможно существование решетки из нитевидных структур.

Одержано аналітичні рішення рівнянь теорії пружності, що описують систему локалізованих аксіально-симетричних неоднорідних станів («ізолюваних ниток») в нематіку, які під впливом магнітного або електричного полів стискаються в щільні нитки. Висловлено припущення, що такі структури можуть реалізуватися в ниткоподібних нематичних текстурах. Ця модель є альтернативою існуючій дисклінаційній моделі. У холестериках локалізовані стани радіально нестійкі, але в них можливе існування ґратки з ниткоподібних структур.

PACS: 61.30.Jf

Для прямолинейных дисклинаций в нематиках в рамках плоской модели (директор  $\mathbf{n}(\mathbf{r})$  вращается в плоскости, перпендикулярной оси дисклинации) решения обладают расходящейся энергией в центре и на больших расстояниях от оси [1]. К тому же аксиальные дисклинации с индексом 2 неустойчивы в области параметров, соответствующих реальным веществам [2] (см. также [3]). В [4,5] рассмотрена модель, устраняющая сингулярность на оси таких дисклинаций; экспериментальные исследования [1,5] подтвердили выводы теории [2–4]: аксиальные неоднородные структуры с индексом 2 имеют несингулярное ядро. В отличие от дисклинаций такие структуры обладают непрерывным распределением  $\mathbf{n}(\mathbf{r})$  на оси, однако все еще являются нелокализованными. В настоящей работе будет показано, что уравнения феноменологической теории жидких кристаллов имеют локализованные несингулярные решения, обладающие аксиальной симметрией. Подобные локализованные стационарные неоднородности в

магнетиках и сверхпроводниках называют вихрями (см., например, [6]). Для жидкостей использование такого термина может привести к недоразумению, поскольку он ассоциируется с динамическими эффектами. Поэтому исследуемые здесь локализованные двумерные аксиальные неоднородности в жидких кристаллах будем называть нитями.

Рассмотрим осесимметричное распределение директора, при котором на оси симметрии ( $OZ$ ) вектор  $\mathbf{n}(\mathbf{r})$  параллелен этой оси и путем непрерывного вращения вдоль радиальных направлений переходит к антипараллельной ориентации вдали от нее. В отличие от дисклинаций, рассмотренных в [1,4,5], данная модель описывает несингулярную, локализованную неоднородность в объеме жидкого кристалла.

В рамках континуальной теории возможные распределения  $\mathbf{n}(\mathbf{r})$  в нити определяются минимизацией упругой энергии

$$W = \int w \, d\mathbf{x} = \int [K_1(\operatorname{div} \mathbf{n})^2 + K_2(\mathbf{n} \operatorname{rot} \mathbf{n} + q_0)^2 + K_3(\mathbf{n} \times \operatorname{rot} \mathbf{n})^2] dx, \quad (1)$$

где  $K_i$  и  $q_0$  — упругие константы [3]. При  $q_0 = 0$  выражение (1) описывает энергию нематика, при  $q_0 \neq 0$  — холестерика. Абсолютному минимуму системы соответствуют решения, обращающие в нуль потенциал (1). Для нематика — это однородное состояние; для холестерика — геликоидальная структура [3]. Ясно, что прочие распределения  $\mathbf{n}(\mathbf{r})$ , минимизирующие функционал энергии, могут соответствовать локальным минимумам, т.е. описывают метастабильные состояния.

Введя для пространственной переменной цилиндрические координаты  $\mathbf{R} = (\rho, \varphi, z)$ , а для директора — сферические ( $\mathbf{n} = (\sin \theta \cos \psi, \sin \theta \sin \psi, \cos \theta)$ ), можно показать, что для состояний однородных по  $z$  вариационная задача для функционала (1) имеет осесимметричные решения типа  $\psi = \psi(\varphi)$ ,  $\theta = \theta(\rho)$ . Далее расчет показывает, что как для нематика, так и для холестерика решения  $\psi = \varphi + \pi/2$ , соответствующие нулевой дивергенции, входят в число решений, минимизирующих энергию системы. В настоящей работе ограничимся анализом этих решений.

Подставляя  $\psi = \varphi + \pi/2$  в (1) и интегрируя энергию по  $\varphi$  и  $z$ , получаем

$$W = \pi L K_2 \int w \rho \, d\rho = \pi L K_2 \int \left[ \left( \frac{d\theta}{d\rho} + \frac{\sin \theta \cos \theta}{\rho} + q_0 \right)^2 + k \frac{\sin^4 \theta}{\rho^2} \right] \rho d\rho, \quad (2)$$

где  $k = K_3/K_2$  — отношение упругих постоянных продольного изгиба ( $K_3$ ) и кручения ( $K_2$ );  $L$  — длина нити. В выражении (2) предполагается, что на оси нити  $\theta(0) = 0$  и вектор  $\mathbf{n}$  становится антипараллельным на расстоянии  $R$  от оси, где  $\theta(R) = \pi$ . В частности, при  $R = \infty$  выражение (2) соответствует энергии уединенной нити.

Уравнение Эйлера для функционала (2)

$$\frac{d^2\theta}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{d\theta}{d\rho} - \frac{\sin 4\theta}{4\rho^2} - k \frac{\sin^2\theta \sin 2\theta}{\rho^2} + 2q_0 \frac{\sin^2\theta}{\rho} = 0 \quad (3)$$

с граничными условиями  $\theta(0) = 0$ ,  $\theta(R) = \pi$  описывает распределение  $\mathbf{n}(\mathbf{r})$  в нити.

В частности, для изолированных нитей ( $R = \infty$ ) в нематике ( $q_0 = 0$ ) умножением уравнения (3) на  $\rho^2(d\theta/d\rho)$  и интегрированием по  $\rho$  получаем первый интеграл

$$\left( \rho \frac{d\theta}{d\rho} \right)^2 = \sin^2 \theta [1 + (k - 1) \sin^2 \theta]. \quad (4)$$

Уравнение (4) удается проинтегрировать в элементарных функциях

$$\operatorname{tg} \theta = \frac{2(\rho/\rho_0)}{1 - k(\rho/\rho_0)^2}, \quad (5)$$

где  $\rho_0$  — произвольное положительное число, определяющее характерные размеры ядра нити. В области малых  $\rho$  угол  $\theta \sim \rho$ , при  $\rho \rightarrow \infty$  угловая переменная изменяется по закону  $\theta \sim \pi - 1/\rho$ . В одноконстантном приближении ( $k = 1$ ) выражение (5) совпадает с решением для вихря в изотропном ферромагнетике [7]; при  $k \rightarrow 0$  в области  $\theta \approx \pi/2$  формируется особенность, и при  $k = 0$  соотношение (5) переходит в выражение  $\operatorname{tg} \theta = 2\rho/\rho_0$ , описывающее структуру с разворотом  $\mathbf{n}$  на  $\pi/2$ .

При фиксированных значениях  $k$  решения (5) представляют собой семейство функций типа  $\theta(\rho/\rho_0)$ . На рис. 1 представлены функции  $\theta(\rho/\rho_0)$  (5) для  $k = 4$  (в хорошо исследованном нематике *n*-азоксианизол (ПАА) параметр  $k = 3,95$ ),  $\rho_0$  изменяется от 1 до 10. Наличие решений типа (5) является следствием инвариантности энергии нематика (2) относительно радиального растяжения  $\rho_0 > 1$  или сжатия  $0 < \rho_0 < 1$  функций  $\theta(\rho)$ . Таким образом, полученные вихревые состояния в нематике имеют «аморфный» характер: для фиксированного значения энергии структуры (2) остается постоянной при произвольной

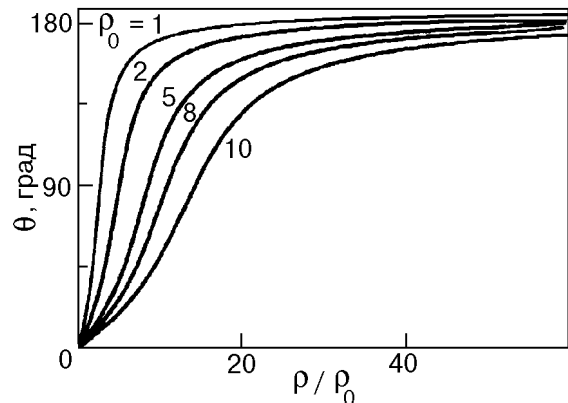


Рис. 1. Зависимости  $\theta$  от  $\rho/\rho_0$  для  $k = 4$  при различных  $\rho_0$ .

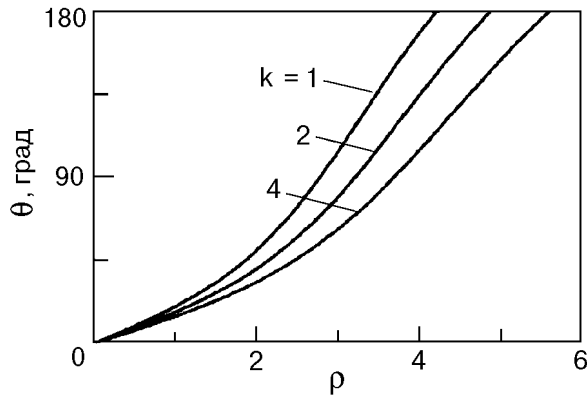


Рис. 2. Расчетные значения оптимальных профилей для различных  $k$ .

радиальном сжатии или растяжении профиля  $\theta(\rho)$ .

Однако энергия взаимодействия нематика с магнитным полем  $\mathbf{H}$  ( $\Delta w_H = 0,5\Delta\chi H^2 \sin^2 \theta$ ) или электрическим полем ( $\Delta w_E = 0,5\Delta\epsilon H^2 \sin^2 \theta$ ) ( $\Delta\chi, \Delta\epsilon$  — диамагнитная и диэлектрическая анизотропии соответственно) имеет уже иной характер: при масштабном преобразовании функций  $\theta(\rho)$  типа  $\rho \rightarrow \rho/\rho_0$  энергии  $\Delta w_H, \Delta w_E$  пропорциональны  $\rho_0^2$ . Отсюда следует, что нити в нематиках испытывают радиальную неустойчивость в магнитном или электрическом полях. Во всех известных нематиках  $\Delta\chi > 0$ , и, следовательно, минимум энергии в магнитном поле достигается при  $\rho_0 = 0$ . Это означает, что под действием магнитного поля исследуемые аксиальные линии в нематиках будут сжиматься. В данной идеальной модели этот процесс имеет беспороговый характер: любое сколь угодно малое магнитное поле (например, магнитное поле Земли) приведет к коллапсу нитевидных структур и к образованию плотных локализованных структур, в которых расстояния между молекулами сравнимы с их размерами. Можно предположить, что «черные нити» в нитевидных нематических текстурах представляют собой именно такие образования.

В течение многих лет нитевидные текстуры, давшие название нематикам, равно как и другие неоднородные состояния в нематиках, объяснялись на основе дисклинационной теории [3]. Однако после того, как аксиальные структуры с непрерывным ядром были предсказаны теоретически [4,5], они были обнаружены среди неоднородных состояний Шлирен текстур [5].

Аналогично тщательное исследование нитевидных текстур могло бы помочь ответить на вопрос: существуют ли в них локализованные аксиальные структуры, описанные в настоящей работе?

Энергия, связанная со структурой (5), вычисляется подстановкой решения (5) в (2) и имеет следующий вид:

$$\frac{E_V}{2\pi K_2 L} = \begin{cases} 1 + \frac{k}{2(1-k)^{1/2}} \ln \frac{1+(1-k)^{1/2}}{1-(1-k)^{1/2}}, & 0 < k < 1, \\ 1 + \frac{k}{(k-1)^{1/2}} \arcsin\left(\frac{k-1}{k}\right)^{1/2}, & k > 1. \end{cases}$$

При  $k = 1$  оба выражения равны; при  $k \rightarrow 0$  энергия вихря стремится к величине  $2\pi K_2 L$ , т.е. составляет половину его энергии в одноконстантном приближении. В области больших  $k$  энергия нити пропорциональна  $\sqrt{K_2 K_3}$ .

Для анализа решеток из нитей в жидких кристаллах можно воспользоваться моделью круговой ячейки [8,9]. В рамках данного приближения элементарная ячейка решетки с гексагональным (или квадратным) сечением заменяется круговым цилиндром равного объема. Тогда задача расчета структуры решетки сводится к интегрированию уравнения (3) с последующей минимизацией плотности энергии решетки  $w = W/(\pi R^2)$  по  $R$  (энергия  $W$  задается выражением (2)). Таким образом, решения уравнения (3) с конечным радиусом соответствуют вихревой решетке. Оказывается, что такие решения существуют только для холестериков. Процедура численного решения уравнения типа (3) подробно осуждалась в [9]. Результаты численного расчета оптимальных профилей для ряда значений  $k$  приведены на рис. 2. Равновесный размер решетки  $R_0$  монотонно возрастает с ростом  $k$ . В частности, для  $k = 1$  минимум энергии достигается при  $R_0 = 4,32 q_0^{-1}$ , а для  $k = 4$  — при  $R_0 = 5,27 q_0^{-1}$ . Для сравнения: период геликоидальной структуры в холестерике равен  $L_0 = 2\pi q_0^{-1}$  [3].

Авторы глубоко признательны А. Хуберту за полезное обсуждение работы, а также благодарят Фонд Александра фон Гумбольдта за предоставление вычислительной техники и литературы по жидким кристаллам.

1. И. Е. Дзялошинский, *ЖЭТФ* **58**, 1443 (1970).
2. С. И. Анисимов, Н. Е. Дзялошинский, *ЖЭТФ* **61**, 2140 (1972).
3. П. Де Жен, *Физика жидких кристаллов*, Мир, Москва (1977).
4. Р. Е. Cladis and M. Kleman, *J. Phys.* **33**, 591 (1972).
5. R. В. Meyer, *Philos. Mag.* **27**, 403 (1973).

6. А. М. Косевич, Б. А. Иванов, А. С. Ковалев, *Нелинейные волны намагниченности. Динамические и топологические солитоны*, Наукова думка, Киев (1983).
7. А. А. Белавин, А. М. Поляков, *Письма в ЖЭТФ* **22**, 503 (1975).
8. А. Хуберт, *Теория доменных стенок в упорядоченных средах*, Мир, Москва (1977).
9. A. N. Bogdanov and A. Hubert, *JMMM* **138**, 255 (1994).

Localized two-dimensional inhomogeneous states in elastic nematics

A. N. Bogdanov and A. A. Shestakov

Analytical solutions of elasticity equation describing a system of localized axisymmetric inhomogeneous

states («isolated threads») have been derived for nematic liquid crystals. Such structures collapse into dense threads under the influence of magnetic fields. The known «threaded» textures in nematic may consist of the collapsed localized structures. This model is an alternative to the known disclination model of defects in liquid crystals. The localized states proved to be unstable in cholesterics. However, thread lattices may exist in cholesteric liquids.