1993 ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА Том 35, № 4

1993 SOLID STATE PHYSICS Vol. 35, N 4

УДК 532.783

ТОПОЛОГИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ В НЕМАТИЧЕСКИХ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛАХ

С.В.Кушнарев, Т.В.Кушнарева, В.К.Першин

Представлен топологический анализ точечных дефектов в нематике. Показано, что хорошо известные радиальный и гиперболический ежи описываются различными элементами гомотопической группы $\pi_2(RP^2)$, а структурный переход между ними топологически можно рассматривать как результат влияния группы $\pi_1(RP^2)$ на $\pi_2(RP^2)$. В одноконстантном приближении континуальной теории разработан метод, позволяющий получить класс решений, соответствующий объемным точечным дефектам с осью симметрии, аналогичным двумерным точечным особенностям целых сил. Каждому объемному точечному дефекту поставлен в соответствие элемент гомотопической группы $\pi_2(RP^2)$, который предлагается брать в качестве его силы. Обсуждается отличие линий поля директора полученных сингулярностей от линий поля их плоских аналогов.

Известно, что в поле директора $\mathbf{n}(\mathbf{r})$ нематического жидкого кристалла (НЖК) существуют линейные особенности — дисклинации — и точечные особенности — ежи. Для их описания используются методы гомотопической топологии [1,2], которые позволяют предсказать возможные типы дефектов, исследовать их топологическую устойчивость, законы слияния и распада, а также возможные переходы между различными сингулярными структурами, исходя только из симметрии среды и не решая сложных уравнений равновесия и динамики.

Приведем основные положения гомотопической теории дефектов [3–5].

1) Каждый нетривиальный элемент абелевой гомотопической группы $\pi_n(R)$ определяет топологически устойчивый гомотопический класс дефектов размерности l в $(l-n-1)$-мерном пространстве.

2) Дефекты, принадлежащие одному и тому же гомотопическому классу, могут переходить друг в друга путем непрерывного деформирования поля директора в *ограниченном* объеме упорядоченной среды, но не могут таким же образом переходить в дефекты другого гомотопического класса.

3) Результат слияния дефектов в нематике определяется законом умножения элементов соответствующей гомотопической группы.

В настоящее время принята классификация объемных точечных дефектов (ТД) в НЖК, в которой каждому распределению директора $\mathbf{n}$ с точечными сингулярностями ставится в соответствие степень отображения $\mathbf{n}$: $S^2 \to RP^2$ [1] (в терминологии [3] — топологический заряд дефекта). Этот топологический инвариант показывает, сколько раз образ сферы S^2

при отображении $\mathbf{n}$ окутывает многообразие RP^2. Однако из-за неориентируемости проективной плоскости RP^2 знак степени отображения N не определен [6], что приводит к неоднозначности результата слияния ТД исходя только из закона сложения их топологических зарядов. Так, например, происходит в случаях экспериментально наблюдаемых радиального (R) и гиперболического (H) ежей, которые характеризуются одинаковым значением $|N| = 1$. Чтобы избежать этой неопределенности, необходимо, согласно общему топологическому подходу [4], установить однозначное соответствие между этими ежами и элементами группы $\pi_2(RP^2)$.

В настоящей работе, кроме этой частной задачи, обсуждается возможность существования ТД, отличных от известных ранее, а также в одноконстантном приближении континуальной теории находятся соответствующие им решения уравнений равновесия НЖК.

Для сопоставления R- и H-ежам элементов группы $\pi_2(RP^2)$ рассмотрим их взаимодействие. Поле директора удобно представить в виде $n_x = \sin\alpha\cos\beta$, $n_y = \sin\alpha\sin\beta$, $n_z \cos\alpha$, где функции α и β являются решениями уравнений равновесия НЖК [4]

$$\Delta\alpha - \sin\alpha\cos\alpha(\nabla\beta)^2 = 0,$$

$$\Delta\beta + 2\operatorname{ctg}\alpha(\nabla\alpha, \nabla\beta) = 0. \tag{1}$$

Точное решение (1) для системы двух ТД неизвестно. Однако, учитывая полное совпадение линий поля директора в сечениях этих ежей с линиями поля их двумерных аналогов, решение можно аппроксимировать функциями $\beta = \varphi$, $\alpha = \alpha^+ + \alpha^-$, где $\alpha^\pm = \pm$ $\pm \arccos\left((z \pm \alpha \;/\; \sqrt{x^2 + y^2 + (z \pm \alpha)^2})\right)$ являются точными решениями (1) для $R(+)$- и $H(-)$-дефектов, смещенных по оси z от начала координат на расстояния α и $-\alpha$ соответственно. Функция α сходится к точному решению при $2\alpha \to 0$. При этом поле директора n_x, $n_y \to 0$, $n_z \to 1$, т. е. в результате их слияния получается однородная конфигурация, соответствующая тривиальному элементу группы $\pi_2(RP^2) = Z$ (Z — группа целых чисел). Поэтому рассматриваемые ТД должны описываться противоположными по знаку элементами группы.

Элемент гомотопической группы характеризует класс гомотопных отображений пространства определения параметра порядка в пространство вырождения, поэтому он тесно связан со степенью отображения N. Учитывая, что R- и H-ежи характеризуются степенью отображения $N = 1$, без ограничения общности можно считать, что R-еж описывается элементом "+1", а H-еж — элементом "−1". По аналогии с ТД в двумерном НЖК элемент группы можно взять в качестве силы объемного ТД.

Поскольку группа $\pi_2(RP^2)$ изоморфна группе целых чисел, должно существовать бесконечное множество дефектов как положительной, так и отрицательной силы. Для нахождения их полей директора запишем уравнения равновесия (1) в сферической системе координат (r, θ, φ), полагая, что $\beta = \beta(\varphi)$, $\alpha = \alpha(\theta)$

$$\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\alpha}{d\theta}\right) - \frac{\sin 2\alpha}{2\sin\theta}k^2 = 0,$$

$$\beta = k\varphi, \qquad k = 0, \pm1, \pm2, \ldots \tag{2}$$

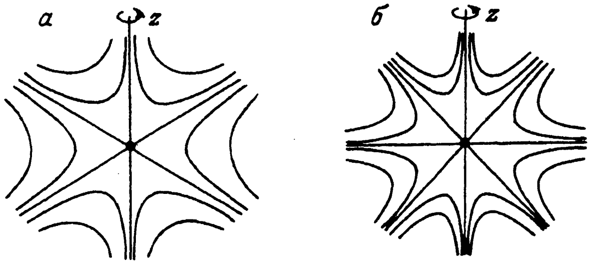

Рис. 1. Линии поля директора точечных дефектов отрицательной силы.

Здесь рассматривается только частный случай $k = 1$. Это означает, что в плоскости xy распределение поля директора радиально с особой точкой в начале координат и в любой плоскости, содержащей ось z, линии поля одинаковы. Другими словами, ось z является осью симметрии дефектов.

Для нахождения численного решения уравнения (2) при $k = 1$ используется метод Рунге–Кутта–Фельберга с автоматическим выбором шага интегрирования [7]. При этом считается, что функция $\alpha(\theta)$ непрерывна во всем интервале изменения аргумента и линии поля директора в любой плоскости, проходящей через ось симметрии, совпадают с линиями аналогичных плоских конфигураций с точечными сингулярностями, т. е. формально объемные ТД могут быть получены вращением соответствующей плоской конфигурации вокруг одной из своих "асимптот". Под "асимптотами" здесь понимаются прямые линии в поле директора, проходящие через особую точку, которые делят плоскую конфигурацию на $2(1 - S)$ секторов при $S < 0$ и на $4(S - 1)$ секторов при $S > 1$. Следует отметить, что применяя подобную операцию для двумерных ТД полуцелой силы, объемный ТД получить нельзя; при вращении же двумерных ТД целых сил получаются ежи таких же сил, обладающие цилиндрической симметрией.

Если представить полученные решения в виде полиномов Чебышева, то они имеют вид

$$\alpha_S^-(\theta) = \sum_{i=0}^{l} \alpha_{iS}^- \theta^i$$

где l — максимальная степень полинома, определяемая из условия минимальности погрешности; знак "$-$" означает, что решение соответствует ежу отрицательной силы; S — сила дефекта; α_{iS} — постоянные коэффициенты.

Уравнение (2) инвариантно относительно замены $\alpha(\theta) \to -\alpha(\theta)$. Поэтому функции $\alpha^+ = -\alpha^-(\theta)$ также являются его решениями, причем можно показать, что они соответствуют ТД положительной силы. Структуры полей директора для ТД с $S = -2$ (*а*) и $S = -3$ (*б*) приведены на рис. 1. В сечениях, содержащих ось z, они отличаются от линий аналогичных двумерных ТД (для которых $\tilde{\alpha} = S\theta$, $\tilde{\beta} = 0$) отсутствием осевой симметрии в некоторых секторах, ограниченных асимптотами: линии поля объемных ТД "притягиваются" к оси симметрии z. Аналогичным образом меняются и линии поля объемных ТД положительной силы (рис. 2), $S = +2$ (*а*), $S = +3$ (*б*). Последовательным добавлением двух секторов в поле директора можно получать дефекты больших сил.

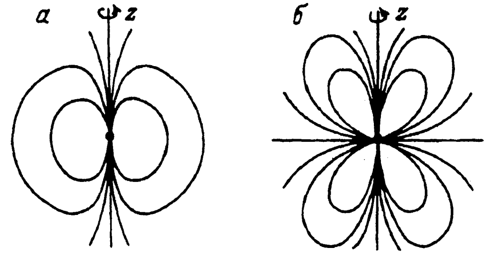

Рис. 2. Линии поля директора точечных дефектов положительной силы.

Таким образом, существует целый класс объемных точечных сингулярностей, изоморфный классу ТД целой силы в двумерном НЖК. R- и H-ежи являются лишь частными представлениями этого класса, описываемыми элементами "+1" и "−1" группы $\pi_2(RP^2)$ соответственно.

Отметим, что полученный здесь класс решений не является единственно возможным. Известны решения уравнения (2) для произвольных целых k [8,9]

$$\alpha^{\pm}(\theta) = 2\,\mathrm{arctg}\left(\mathrm{tg}^{\pm|k|}\frac{\theta}{2}\right), \quad \beta = k\varphi. \tag{3}$$

Сингулярности, соответствующие решениям (3), не имеют оси симметрии, за исключением случая $|k| = 1$, когда получаются R- и H-ежи. Линии поля директора ТД с $|k| \neq 1$ не имеют аналогов среди двумерных дефектов, так как являются пространственными кривыми. Степень отображения таких особенностей равна $|k|$, а поэтому, учитывая, что ТД с $+k$ и $-k$ имеют различную структуру, в качестве силы следует взять $S = k$. Кажется разумным предположить, что существуют другие классы решений уравнений (2), которые характеризуются числом k, указывающим на распределение линий директора в плоскости xy ($k = 1$ соответствует радиальному распределению, а $k = -1$ гиперболическому и т.п.)

Так как R- и H-ежи описываются различными элементами группы $\pi(RP^2)$, то они принадлежат различным гомотопическим классам. Тогда, согласно [4], непрерывные переходы между ними возможны только в неограниченном объеме НЖК. Что касается наблюдаемого экспериментально $R - H$ перехода в капле НЖК при изменении температуры [10], то он не противоречит приведенным выше соображениям, так как при таком переходе образуется кольцевая дисклинация, которая обеспечивает сохранение нормальных граничных условий на поверхности капли, чем заменяет требующуюся для этого бесконечность среды.

Обсудим топологическую возможность такого перехода, для чего рассмотрим влияние группы $\pi_1(RP^2)$ на группу $\pi_2(RP^2)$.

Согласно [11], гомотопические группы $\pi_2(RP^2, x_0)$ и $\pi_2(RP^2, x_1)$ изоморфны, так как любые две точки x_0 и x_1 пространства RP^2 можно соединить путем ω, целиком лежащим в этом пространстве. Кроме того, изоморфизм S_2^{ω}: $\pi_2(RP^2, x_0) \to \pi_2(RP^2, x_1)$ зависит от пути ω соединяющего точки x_0 и x_1 [6]. Элементы группы $\pi_1(RP^2)$ характеризуют два класса путей — стягиваемые в точку и нестягиваемые, которые соответствуют линейным дисклинациям целой и полуцелой силы [1]. Очевидно, что если базисные точки x_0 и x_1 соединены стягиваемым в точку путем, то изоморфизм будет тривиальным: элемент группы $\pi_2(RP^2, x_0)$ переходит в такой же элемент группы $\pi_2(RP^2, x_1)$. Однако если x_0 и x_1 соединены нестягиваемым в точку путем (например, x_0 и x_1 — диаметрально противоположные точки сферы $S^2/Z_2 = RP^2$), то обход базисной точки x_0 по этому замкнутому контуру меняет знак элемента группы $\pi_2(RP^2, x_0)$ на противоположный [12, с.585], т. е. элемент N переходит в элемент $-N$. Используя установленное выше соответствие между физическими объектами — объемными ТД — и топологическими объектами — элементами группы $\pi_2(RP^2)$, заключаем, что ТД одинаковых по модулю сил можно преобразовать друг в друга непрерывной деформацией поля директора.

Формально непрерывный переход радиального ежа ($\alpha = \theta$, $\beta = \varphi$) в гиперболический ($\alpha = \theta$, $\beta = \varphi + \pi$) осуществляется, например, непрерывным изменением C_0 от нуля до π, где C_0 — параметр в решении уравнений равновесия (1) $\beta = \varphi + C_0$. Это связано с движением базисной точки в пространстве вырождения по замкнутой нестягиваемой в точку петле, которое по сформулированной выше теореме приводит к переходу элемента группы $\pi_2(RP^2)$ "+1" в элемент "−1", т.е. к изменению знака силы конфигурации — R-еж переходит в H-еж. При этом степень отображения конфигурации сохраняется.

Таким образом, только в случае двумерных ТД понятия силы дефекта и его степени отображения совпадают. Это связано с тем, что пространство вырождения двумерного НЖК ориентируемо — это проективная прямая RP^1, которая топологически эквивалентна окружности S^1 и между элементами группы $\pi_1(RP^1)$ и степенями отображения, характеризующими конфигурации с точечными особенностями, можно установить взаимно однозначное соответствие. В трехмерном случае пространство вырождения представляет собой неориентируемую проективную плоскость RP^2 и поэтому каждому значению степени отображения соответствуют два противоположных по знаку элемента группы $\pi_2(RP^2)$ [6]. Это и приводит к возможности процессов с изменением знака силы ТД, которые не происходят в двумерном НЖК, в частности, непрерывного перехода $R \to H$.

Таким образом, установленное выше соответствие между элементами группы и ТД позволяет предсказать результат слияния и распада последних и тем самым снимает неопределенность, возникающую в подходе [1,13]. Кроме того, из представленного рассмотрения следует, что в НЖК существует множество гомотопических классов объемных ТД, каждый из которых характеризуется силой $S = k$. При этом одному и тому же классу может принадлежать несколько ТД различной структуры. Вопрос об их устойчивости и непрерывных переходах друг в друга в пределах гомотопического класса требует дополнительного обсуждения

Список литературы

[1] Воловик Г.Е., Минеев В.П. // ЖЭТФ. 1977. Т. 72. № 6. С. 2256–2273.
[2] Toulouse G., Kleman M. // J. de Phys. Lett. 1976. V. 37. № 4. P. L149–L153.
[3] Курик М.В., Лаврентович О.Д. // УФН. 1988. Т. 154. № 3. С. 381–432.
[4] Mermin N.D. // Rev. Mod. Phys. 1979. V. 51. № 3. P. 591-648.

[5] Trebin H.-R. // Adv. Phys. 1982. V. 31. P. 195.
[6] Рохлин В.А., Фукс Д.В. Начальный курс топологии. Геометрические главы. М., 1977. 488 с.
[7] Расчет электрических и магнитных полей на ЭВМ. М., 1983. 304 с.
[8] Chandrasekhar S., Ranganath G. // Advances in Physics. 1986. V. 35. № 6. P. 507–596.
[9] Поляков А.М. // ЖЭТФ. 1975. Т. 68. № 6. С. 1975–1989.
[10] Лаврентович О.Д., Терентьев Е.М. // ЖЭТФ. 1986. Т. 91. № 6. С. 2084–2096.
[11] Борисович Ю.Г., Близняков Н.М., Израилевич Я.А., Фоменко Т.Н. Введение в топологию. М., 1980. 295 с.
[12] Дубровин Б.А., Новиков С.П., Фоменко А.Т. Современная геометрия. М., 1979. 760 с.
[13] Курик М.В., Лаврентович О.Д. // Изв. АН СССР. Сер. физическая. 1989. Т. 53. № 10. С. 1880–1903.

Челябинский государственный
университет

Поступило в Редакцию
15 июня 1992 г.
В окончательной редакции
30 ноября 1992 г.