01;03;05

Точечные и кольцевые дефекты в нематическом жидком кристалле в цилиндрическом капилляре

© В.К. Першин, И.И. Клебанов, П.Б. Залманов

Челябинский государственный педагогический университет,
454080 Челябинск, Россия

(Поступило в Редакцию 23 февраля 1998 г.)

Исследовано двустороннее вытекание в третье измерение линейной дисклинации силы $m = 1$ (L^p_{+1}) в цилиндрическом капилляре с нормальными граничными условиями. Показано, что в этом случае в капилляре возникают два вида дефектов: точечные и кольцевые, каждый из которых может быть радиального или гиперболического типа. Получены точные решения уравнения равновесия для упругого поля. Приближенно рассчитана свободная энергия точечных и кольцевых дефектов в узком длинном капилляре. Предложены новые сценарии вытекания дисклинации L^p_{+1}.

1. В нематических жидких кристаллах (НЖК) поле директора $\mathbf{n}(\mathbf{r})$ может иметь особые точки, линии и поверхности, где направление вектора n является неопределенным. Эти особенности называются соответственно точечными, линейными и поверхностными дефектами.

В НЖК в цилиндрическом капилляре с нормальными граничными условиями структура с особенностью на оси (линейной дисклинацией $m = 1-L^p_{+1}$) становится энергетически невыгодной при радиусах капилляра ρ, бóльших некоторого критического значения ρ_c, и "вытекает" в третье измерение [1]. Решение, описывающее одностороннее вытекание дисклинации с силой $m = 1$, получено в работе [2]. Однако для НЖК оба направления вдоль оси капилляра равноправны. Поэтому представляет интерес рассмотреть задачу о двустроннем вытекании дисклинации, когда оба направления связаны сингулярной точкой. Указание на такую возможность имеется в [1].

Целью настоящей работы является исследование двустороннего вытекания в третье измерение линейной дисклинации с силой $m = 1$ в одноконстантном приближении континуальной теории НЖК.

2. Рассмотрим нематик в цилиндрическом капилляре радиуса ρ_0 и длины $2L$ с нормальными граничными условиями. Компоненты директора в цилиндрической системе координат представим в виде

$$n_\rho = \sin\alpha(z,\rho); \quad n_\varphi = 0; \quad n_z = \cos\alpha(x,\rho), \tag{1}$$

где α — угол между силовой линией и осью капилляра, $\alpha(\rho=\rho_0) = \pi/2$.

В одноконстантном приближении свободная энергия деформации равна [1]

$$F = \frac{K}{2}\int\limits_{(V)} \left((\operatorname{div}\mathbf{n})^2 + (\operatorname{rot}\mathbf{n})^2\right) dV, \tag{2}$$

где K — модуль упругости Франка, V — объем нематика, $\mathbf{n}$ — директор.

С учетом (1) выражение (2) приводится к виду

$$F = \pi K \int\limits_0^{\rho_0} d\rho \int\limits_{-L}^{L} dz \left(\frac{\sin^2\alpha}{\rho} + \sin 2\alpha \frac{\partial\alpha}{\partial\rho} - 2\sin^2\alpha \frac{\partial\alpha}{\partial z} + \rho\left(\frac{\partial\alpha}{\partial\rho}\right)^2 + \rho\left(\frac{\partial\alpha}{\partial z}\right)^2\right). \tag{3}$$

Минимизация (3) приводит к уравнению равновесия

$$2\rho^2\frac{\partial^2\alpha}{\partial z^2} + 2\rho\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{\partial\alpha}{\partial\rho}\right) = \sin 2\alpha. \tag{4}$$

Будучи величиной безразмерной, угол α может зависеть только от безразмерных комбинаций координат. Предположим, что α зависит только от комбинации z/ρ. Тогда после введения новой переменной $x = \operatorname{arsh}(z/\rho)$ уравнение (4) записывается следующим образом:

$$2\alpha''_{xx} = \sin 2\alpha. \tag{5}$$

Промежуточный результат интегрирования имеет вид

$$(\alpha'_x)^2 = c + \sin^2\alpha, \tag{6}$$

где $c \geq 0$ — константа интегрирования.

После второго интегрирования с учетом нормальных граничных условий имеем

$$\int\limits_{\pi/2}^{\alpha} \frac{d\xi}{\sqrt{c+\sin^2\xi}} = \pm\ln u, \tag{7}$$

где

$$u = \frac{z/\rho + \sqrt{1+z^2/\rho^2}}{z/\rho_0 + \sqrt{1+z^2/\rho_0^2}}.$$

Заменой

$$\xi = \frac{\pi}{2} - \psi$$

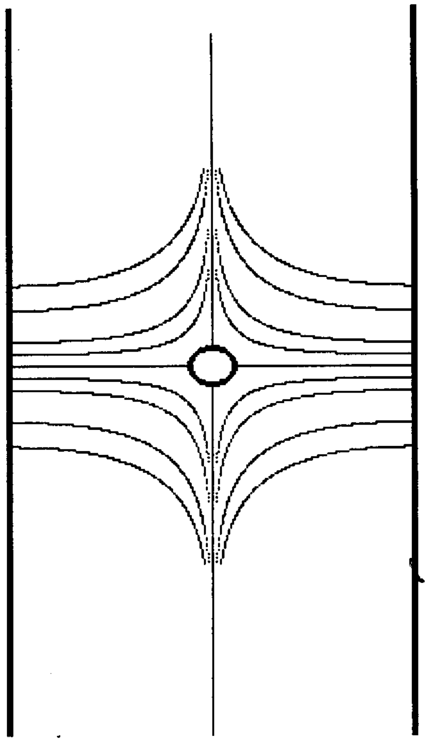

Рис. 1. Гиперболический точечный дефект (H).

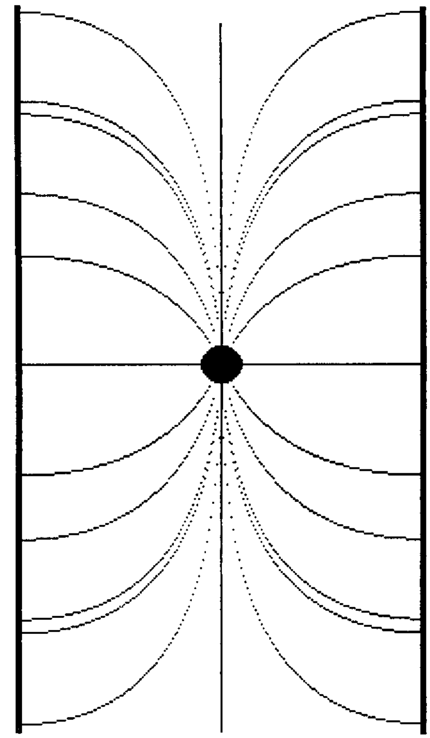

Рис. 2. Радиальный точечный дефект (R).

левая часть равенства (7) приводится к неполному эллиптическому интегралу 1-го рода

$$\int\limits_0^{\pi/2-\alpha} \frac{d\psi}{\sqrt{1-k^2\sin^2\psi}} = \pm\frac{1}{k}\ln u, \tag{8}$$

где $k = 1/\sqrt{1+c}$.

Отсюда

$$\alpha = \frac{\pi}{2} \pm \operatorname{am}\left(\frac{\ln u}{k}\right), \tag{9}$$

где am — амплитуда Якоби [3].

Для того чтобы исследовать поле упругой деформации, необходимо рассмотреть семейство силовых линий, удовлетворяющих дифференциальному уравнению

$$d\rho/n_\rho = dz/n_z, \tag{10}$$

которое нужно проинтегрировать с учетом (1) и (9).

3. Рассмотрим вначале случай $k = 1$ $(c = 0)$. Тогда (9) преобразуется к виду

$$\alpha_1 = 2\operatorname{arctg} u \quad \text{или} \quad \alpha_2 = \pi - \alpha_1. \tag{11}$$

Силовые линии, полученные в результате численного интегрирования (10) с учетом (1) и (11), приведены на рис. 1 и 2 (эти и все остальные рисунки относятся к цилиндрическому капилляру и на них представлено сечение плоскостью, проходящей через ось). Из них видно, что при двустроннем вытекании дисклинации возникают точечные дефекты гиперболического H и радикального R типов. В пределе $|z| \gg \rho_0$ получим известные соотношения Клэдис–Клемана [2], соответствующие одностороннему вытеканию дислкинации

$$\alpha_1 = \begin{cases} \pi - 2\operatorname{arctg}(\rho/\rho_0), & z > 0, \\ 2\operatorname{arctg}(\rho/\rho_0), & z < 0, \end{cases}$$

$$\alpha_2 = \pi - \alpha_1. \tag{12}$$

При $\rho_0 \to \infty$ α_1 и α_2 переходят в известные решения, описывающие гиперболические и радиальные точечные дефекты в бесконечном пространстве [4].

Вычислим теперь свободную энергию H- и R-дефектов. При этом ограничимся наиболе интересным случаем длинного и узкого капилляра ($\rho_0 \ll L$). Подстановка (11) в (1) дает

$$\frac{F}{2\pi KL} \approx 3 + \frac{\pi}{2} q \frac{\rho_0}{L} + 0(\rho_0^2/L^2), \tag{13}$$

где $q \approx 1.5$ для H-дефекта и $q \approx 3$ для R-дефекта.

При вычислении энергии применялось разложение подынтегрального выражения в (3) в ряд по степеням малого параметра с сохранением первых двух членов разложения. В области $|z| > \rho_0$ таким параметром является $\rho/|z|$, в области $|z| < \rho_0 - |z|/\rho_0$.

Выражение (13) показывает, что энергия структуры, содержащей точечный дефект, отличается от энергии несингулярной структуры наличием дополнительного члена, появляющегося из-за более сильного искажения

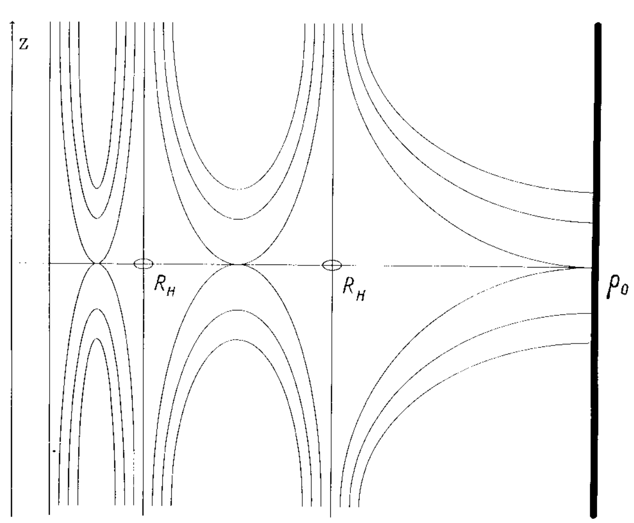

Рис. 3. Система гиперболических кольцевых дефектов (R_H).

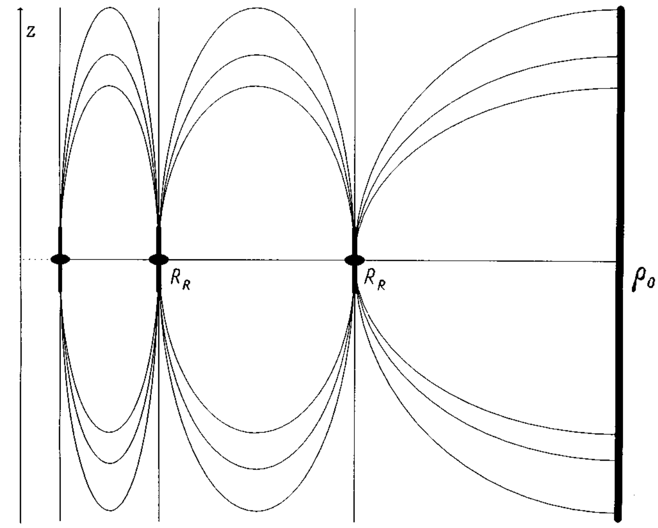

Рис. 4. Система радиальных кольцевых дефектов (R_R).

силовых линий вблизи дефекта. Этот член не вносит существенного вклада в энергию, однако его наличие позволяет сделать вывод об уменьшении энергетической щели между H- и R-дефектами по сравнению со свободным пространством.

В самом деле, в свободном пространстве (11) переходит в

$$\alpha_1 = 2\,\mathrm{arctg}\left(z/\rho + \sqrt{1 + z^2/\rho^2}\right), \quad \alpha_2 = \pi - \alpha_1. \quad (14)$$

Интегрируя уравнение силовых линий (10) с учетом (14), нетрудно убедиться, что α_1 соответствует H-дефекту, а α_2 — R-дефекту. Выделим теперь мысленно капилляр радиуса ρ_0 и длины $2L$ и вычислим энергию упругого поля в этом воображаемом капилляре. Подстановка (14) в (13) дает

$$\frac{F^{(H)}}{4\pi K} = \rho_0\,\mathrm{arctg}\,(L/\rho_0),$$

$$\frac{F^{(R)}}{4\pi K} = 2\rho_0\,\mathrm{arctg}\,(L/\rho_0) + L\ln(1 + \rho_0^2/L^2). \quad (15)$$

Считая $\rho_0 \ll L$ и сохраняя только первый член разложения в ряд по степеням ρ_0/L, получим

$$\frac{F}{2\pi KL} \approx \frac{\pi}{2}\,q\,\frac{\rho_0}{L} + 0(\rho_0^2/L^2), \quad (16)$$

где $q = 2$ для H-дефекта и $q = 4$ для R-дефекта.

Таким образом,

$$\frac{F^{(R)} - F^{(H)}}{2\pi KL} \approx \frac{\pi}{2}\,\frac{\rho_0}{L}\,2, \quad (17)$$

в то время как в реальном капилляре

$$\frac{F^{(R)} - F^{(H)}}{2\pi KL} \approx \frac{\pi}{2}\,\frac{\rho_0}{L}\,\frac{3}{2}, \quad (18)$$

т. е. энергетическая щель уменьшается.

4. При $k \neq 1$ ($c \neq 0$) в капилляре формируются сингулярные структуры, качественно отличающиеся от рассмотренных выше, — кольцевые гиперполические R_H и радиальные R_R дефекты. Их упругое поле схематически представлено на рис. 3 и 4.

Для аналитического описания колец ограничимся снова случаем длинного и узкого капилляра и рассмотрим задачу об одностороннем вытекании дисклинации в случае $c \neq 0$. Эта задача решается точно, и все полученные результаты будут, очевидно, справедливы и для двустороннего вытекания в нулевом приближении в разложении по степеням ρ_0/L. Решая уравнение (4) без первого слагаемого в левой части, имеем

$$\alpha = \frac{\pi}{2} \pm \mathrm{am}\left(\frac{\ln(\rho/\rho_0)}{k}\right). \quad (19)$$

Подставляя (19) в (10), получим

$$\frac{dz}{d\rho} = \pm\frac{\mathrm{sn}\left(\ln(\rho/\rho_0)/k\right)}{\mathrm{cn}\left(\ln(\rho/\rho_0)/k\right)}, \quad (20)$$

где sn и cn — соответственно синус и косинус амплитуды Якоби [3].

Правая часть (20) имеет особенности, определяемые уравнением

$$\mathrm{cn}\left(\ln(\rho/\rho_0)/k\right) = 0 \quad (21)$$

или

$$\rho = \rho_0 \exp\left[-k(2m+1)K(k)\right], \quad m = 0, 1, 2, \dots, \quad (22)$$

где

$$K(k) = \int\limits_0^{\pi/2} \frac{d\psi}{\sqrt{1 - k^2\sin^2\psi}}$$

— полный эллиптический интеграл 1-го рода.

Иными словами, имеем семейство бесконечного числа цилиндрических поверхностей, радиусы которых убывают в геометрической прогрессии по мере приближения к оси капилляра. На этих поверхностях угол α асимптотически стремится к 0 или π в зависимости от направления вытекания. На оси капилляра при этом возникает особенность, связанная с неопределенностью значения угла α при $\rho = 0$ (см. (19)). Учитывая равенство $k = 1/\sqrt{1+c}$, легко видеть, что при $c \gg 1$ цилиндры практически равномерно заполняют пространство внутри капилляра, а при $c \ll 1$ сконцентрированы в основном вблизи оси. При $c = 0$ имеем вытекание по Клэдис–Клеману [2].

Имея в виду сказанное выше, можно сделать вывод, что "в нулевом приближении" эта закономерность верна и для кольцевых дефектов с той только разницей, что при $c = 0$ система радиальных колец R_R вырождается в точечный R-дефект, а система гиперболических колец R_H — в точечный H-дефект.

Свободную энергию колец найдем, подставляя (19) в (3) и учитывая, что полученный результат является нулевым приближением в разложении по степеням ρ_0/L,

$$\frac{F}{2\pi kKL} \approx \frac{2}{k}E\left(\mathrm{am}\left(\ln(\rho_0/b)/k\right)\right) + \mathrm{sn}^2\left(\ln(\rho_0/b)/k\right) - (k'/k)^2\ln(\rho_0/b) + q(k)\frac{\rho_0}{L} + 0(\rho_0^2/L^2) + f_0, \quad (23)$$

где

$$E(\varphi) = \int\limits_0^{\sin\varphi}\sqrt{\frac{1-k^2t^2}{1-t^2}}dt, \quad k' = \sqrt{1-k^2},$$

$q(k)$ — ограниченная функция k ($q(k) \to (\pi/2)q$ при $k \to 1$) и b — так называемый параметр обрезания порядка молекулярных масштабов, f_0 — свободная энергия (в единицах $2\pi KL$) ядра сингулярной структуры (в рамках континуальной теории f_0 не может быть рассчитана [1]).

При $c \gg 1$

$$\frac{F}{2\pi KL} \approx c\ln(\rho_0/b) + (1/c)\frac{\rho_0}{L} + 0(\rho_0^2/L^2) + f_0. \quad (24)$$

При $c \ll 1$

$$\frac{F}{2\pi KL} \approx 3 + \frac{\pi}{2}q\frac{\rho_0}{L} - c\ln\left(\frac{c\rho_0}{2b}\right) + 0(\rho_0^2/L^2) + 0(c) + f_0. \quad (25)$$

Выражения (24) и (25) показывают, что система колец, практически равномерно заполняющая всю область капилляра, энергетически невыгодна, так как ее энергия того же порядка, что и энергия линейной дисклинации целой силы [1]. Кольца же, группирующиеся вблизи оси, напротив, энергетически почти столь же выгодны, как и несингулярная структура L^{NSL}.

5. Таким образом, линейная дисклинация L^p_{+1} может вытекать в третье измерение по меньшей мере тремя способами. При одностороннем вытекании образуется структура L^{NSC}, содержащая бесконечное число цилиндрических поверхностей, на каждой из которых направление директора асимпотически параллельно оси капилляра, а также особенность на оси капилляра. Вырожденным случаем такой структуры является дисклинация, вытекающая по Клэдис–Клеману (L^{NSL}). При двустроннем вытекании образуется система кольцевых дефектов радиального R_R или гиперболического R_H типа, в вырожденном случае переходящая соответственно в точечные R- или H-дефекты.

В принципе возможны более сложные сценарии вытекания L^p_{+1}, а именно

$$L^p_{+1} \longmapsto L^{NSC} \underset{\longmapsto}{\longleftarrow} L^{NSL},$$

$$L^p_{+1} \longmapsto R_R \underset{\longmapsto}{\longleftarrow} R,$$

$$L^p_{+1} \longmapsto R_H \underset{\longmapsto}{\longleftarrow} H.$$

Здесь знаки $\mapsto$ и $\to$ означают соответственно более вероятный и менее вероятный сценарий. Для того чтобы выяснить, какие из них осуществляются в действительности, необходимо более точно рассчитать свободную энергию описанных выше структур, а также рассмотреть конкретные механизмы формирования неустойчивости.

Список литературы

[1] *Де Жен П.* Физика жидких кристаллов. М.: Мир, 1977. 400 с.

[2] *Cladis P.E., Kleman M.* J. De Physique. 1972. Vol. 33. N 5–6. P. 591.

[3] *Янке Е., Эмде Ф., Леш Ф.* Специальные функции. М.: Наука, 1977. 344 с.

[4] *Chandrasekhar S., Ranganath G.S.* // Adv. in Phys. 1986. Vol. 35. N 6. P. 507.