

НЕОДНОРОДНЫЕ ДВУМЕРНЫЕ СТРУКТУРЫ В ЖИДКИХ КРИСТАЛЛАХ*А. Н. Богданов**, *А. А. Шестаков**Донецкий физико-технический институт Национальной академии наук Украины
340114, Донецк, Украина*

Поступила в редакцию 15 июля 1997 г.

В нематиках могут существовать локализованные аксиально-симметричные неоднородные состояния с непрерывным распределением поля директора. Такие структуры под влиянием магнитного или электрического полей сжимаются в плотные нити. Высказано предположение, что данные состояния могут реализоваться в нитевидных нематических текстурах. Эта модель является альтернативой общепринятой дисклинационной модели. Во всей области существования модулированного состояния холестерика могут существовать два типа решеток из аксиальных структур. Численным решением дифференциальных уравнений определены структура и равновесные размеры решеток как функции внешнего поля. В цилиндрических капиллярах холестериков могут существовать аксиальные структуры с ядром конечных размеров. Структура и равновесные размеры аксиальных состояний легко изменяются полем в широких пределах. Обсуждается возможность использования изолированных аксиальных структур и их решеток в устройствах обработки и отображения оптической информации. В этой связи наиболее перспективными представляются модулированные состояния и аксиальные структуры в хиральных жидких кристаллах со спонтанной поляризацией.

1. ВВЕДЕНИЕ

Обычно жидкие кристаллы образуют сложные текстуры, содержащие разнообразные комбинации точечных, линейных, плоскостных неоднородностей, которые наблюдаются в виде нитей, петель, инверсионных стенок, ядер, капель, конфокальных доменов и др. Вид большинства текстур жидких кристаллов главным образом определяется присутствием различных линейных дефектов [1–3]. Согласно традиционным представлениям такие дефекты (дисклинации) представляют собой особые линии, вблизи которых поле направлений ориентации молекул (поле директора $\mathbf{n}(\mathbf{r})$) носит разрывный характер. Первоначально теория была развита для плоских дисклинаций, т. е. рассматривались структуры, в которых вектор \mathbf{n} вращается в плоскости, перпендикулярной оси дисклинации. Теория плоских дисклинаций была построена для случая равных упругих модулей К. Осеевом и Ф. Франком (см. [1, 2]) и обобщена на случай произвольных констант в [4]. Важно подчеркнуть, что результаты теории плоских дисклинаций создали модельную базу, которая в дальнейшем использовалась для описания, классификации и анализа наблюдаемых линейных дефектов в жидкокристаллических текстурах. В рамках данной модели был организован обширный эмпирический материал по исследованию неоднородных состояний в жидких кристаллах, полученный на протяжении нескольких десятилетий (см. монографии и обзоры [1–3, 5–8]).

* E-mail: bogdanov@host.dipt.donetsk.ua

Однако уже в начале семидесятых годов было обнаружено, что большинство наблюдаемых линейных дефектов в жидких кристаллах не соответствуют модели плоских дисклинаций. В [9, 10] было показано теоретически, что в нематиках плоские дисклинации с индексом Франка $n = 2$ неустойчивы относительно выхода вектора \mathbf{n} из базисной плоскости; «вытеканием» дисклинации в третье измерение образуется аксиальная структура с непрерывным распределением $\mathbf{n}(\mathbf{r})$ на оси. Такие структуры наблюдались в капиллярах [10, 11], а также были идентифицированы в ряде распространённых нематических текстур [10]. Позднее выяснилось, что для всех практически реализуемых параметров в нематиках и холестериках плоские дисклинации с четным индексом Франка неустойчивы (см. [1, 12]), а устойчивость плоских дисклинаций с индексом $n = \pm 1$ возможна лишь при определенном соотношении между упругими константами [12]. В частности, оказалось, что в таких модельных нематиках как n -азоксианизол (ПАА) и метоксибензилиден — n -бутиланилин (МББА) могут существовать только объёмные дисклинации [12]. Таким образом, реальная структура линейных дефектов в жидких кристаллах существенно отличается от модели плоских дисклинаций.

В плоских дисклинациях решения обладают расходящейся энергией как в центре, так и на больших расстояниях от оси [1, 2]. Аксиальные структуры с несингулярным ядром, исследованные в [10, 11], имеют конечную энергию на оси, однако все еще являются нелокализованными. Как будет показано в данной работе, уравнения феноменологической теории жидких кристаллов имеют также локализованные несингулярные решения, обладающие аксиальной симметрией. Подобные локализованные стационарные неоднородности в магнетиках, сверхпроводниках и других областях нелинейной физики называют «вихрями» (см., например, [13]). Поскольку в жидких кристаллах термин «вихрь» обозначает известные динамические образования, исследуемые здесь статические двумерные аксиальные неоднородности в жидких кристаллах будем называть аксиальными структурами. Для обозначения локализованных линейных дефектов с несингулярным ядром можно также использовать термин «нити».

Другой тип аксиальных структур наблюдается в холестериках с положительной анизотропией в электрическом и магнитном полях, направленных параллельно оси геликоида. Здесь в определенном диапазоне полей реализуется квадратная решетка [14–18]. Двумерные решетки в холестериках также могут быть индуцированы механическими деформациями и температурными градиентами [17].

К настоящему времени теоретический анализ аксиальных структур фактически не проводился. (Отдельные результаты были получены для нематических нелокализованных аксиальных структур в капиллярах [10, 11], а возможность существования локализованных состояний была доказана в [19].) Данная работа посвящена последовательному развитию теории таких состояний и анализу их свойств. Определена структура и равновесные параметры как уединённых аксиальных образований, так и их решеток в нематических и холестерических жидких кристаллах. Изучена эволюция таких структур во внешних полях, исследована их устойчивость и определены границы существования.

2. НЕМАТИКИ

Рассмотрим осесимметричное распределение директора, при котором на оси симметрии Z вектор $\mathbf{n}(\mathbf{r})$ параллелен этой оси и путем непрерывного изменения направления директора переходит к антипараллельной ориентации вдали от нее (локализованная

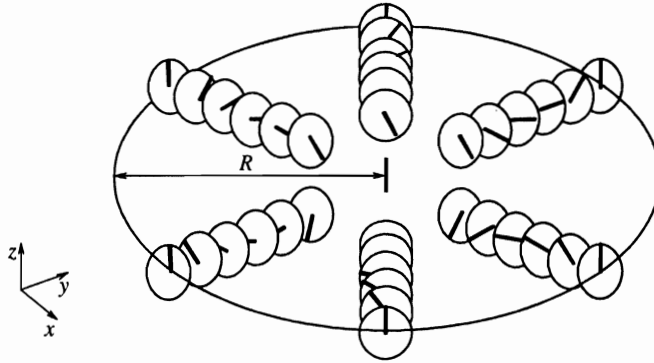


Рис. 1. Распределение директора в аксиальных структурах с $\psi = \varphi + \pi/2$

структура — «нить»), либо достигает определенной ориентации \mathbf{n}_0 на расстоянии R от центра (нелокализованные структуры (рис. 1)). В отличие от дисклинаций такие структуры представляют собой несингулярные неоднородности в объеме жидкого кристалла.

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

$$W = \int w \, dx = \int \frac{1}{2} [K_1(\text{div } \mathbf{n})^2 + K_2(\mathbf{n} \text{ rot } \mathbf{n} + q_0)^2 + K_3([\mathbf{n} \text{ rot } \mathbf{n}])^2 - \Delta\chi(\mathbf{n}\mathbf{H})^2] \, dx, \quad (1)$$

где K_i и q_0 — упругие константы; последний член в (1) описывает плотность энергии взаимодействия с внешним магнитным полем \mathbf{H} (плотность энергии взаимодействия с электрическим полем \mathbf{E} равна $\Delta\epsilon(\mathbf{n}\mathbf{E})^2$, $\Delta\chi$, $\Delta\epsilon$ — соответственно диамагнитная и диэлектрическая анизотропии) [1]. В рассматриваемой здесь модели (исключающей эффекты электропроводности) взаимодействие с магнитными и электрическими статическими полями описывается в энергии системы вкладом, имеющими одинаковую функциональную зависимость от параметров вещества, и, следовательно, как магнитное, так и электрическое поля приводят к аналогичным ориентирующим эффектам в рассматриваемых структурах. Таким образом, достаточно ограничиться рассмотрением влияния магнитного поля, подразумевая, что аналогичные результаты имеют место и в электрическом поле.

При $q_0 = 0$ функционал (1) описывает энергию нематика, при $q_0 \neq 0$ холестерика. Абсолютному минимуму системы соответствуют решения, обращающие в нуль потенциал (1). В нулевом поле для нематика — это однородное состояние; для холестерика — геликоидальная структура [1]. Ясно, что прочие распределения $\mathbf{n}(\mathbf{r})$, минимизирующие функционал энергии, могут соответствовать лишь локальным минимумам, т. е. описывают метастабильные состояния. Покажем, что среди метастабильных состояний системы присутствуют решения, описывающие аксиальные структуры. Поскольку задача обладает аксиальной симметрией, удобно представить вектор в сферических координатах $\mathbf{n} = (\sin \theta \cos \psi, \sin \theta \sin \psi, \cos \theta)$, а пространственную переменную в цилиндрических координатах $\mathbf{r} = (\rho, \varphi, z)$. В этих новых координатах плотность энергии принимает такой вид:

$$w = \frac{1}{2} K_1 \left[\cos \theta \cos(\psi - \varphi) \theta_\rho - \sin \theta \sin(\psi - \varphi) \psi_\rho + \frac{\cos \theta \sin(\psi - \varphi)}{\rho} \theta_\varphi + \right.$$

$$\begin{aligned}
 & + \frac{\sin \theta \cos(\psi - \varphi)}{\rho} \psi_\varphi \Big]^2 + \frac{1}{2} K_2 \left[\sin(\psi - \varphi) \theta_\rho - \sin \theta \cos \theta \cos(\psi - \varphi) \psi_\rho - \frac{\cos(\psi - \varphi)}{\rho} \theta_\varphi + \right. \\
 & + \left. \frac{\sin \theta \cos \theta \sin(\psi - \varphi)}{\rho} \psi_\varphi + q_0 \right]^2 + \frac{1}{2} K_3 \left\{ \sin^2 \theta \left[\cos(\psi - \varphi) \theta_\rho + \right. \right. \\
 & + \left. \left. \frac{\sin(\psi - \varphi)}{\rho} \theta_\varphi \right]^2 + \sin^4 \theta \left[\cos(\psi - \varphi) \psi_\rho + \frac{\sin(\psi - \varphi)}{\rho} \psi_\varphi \right]^2 \right\} - \frac{1}{2} \Delta \chi H^2 \cos^2 \theta. \quad (2)
 \end{aligned}$$

(В (2) предполагается, что магнитное поле направлено вдоль Z — оси симметрии структуры.)

Исследование начнем с нематических кристаллов ($q_0 = 0$) в нулевом поле. Рассмотрим локализованные решения. При условии, что вектор \mathbf{n} параллелен Z на оси нити ($\rho = 0$) и становится антипараллельным вдали от оси, система уравнений, минимизирующая потенциал (2) имеет аксиально-симметричные решения типа $\theta = \theta(\rho)$ и $\psi = \psi(\varphi) = \varphi + \gamma$ (где γ — некоторый постоянный угол). Анализ функционала (2) для данного класса решений показывает, что в зависимости от соотношения между упругими модулями устойчивому состоянию системы соответствует либо решение $\psi = \varphi + \pi/2$ (I) ($K_1 > K_2$), либо решение $\psi = \varphi$ (II) ($K_1 < K_2$). В узкой окрестности линии фазового равновесия $K_1 = K_2$ (рис. 2) альтернативные решения являются метастабильными, т. е. при изменении отношения K_1/K_2 переход между этими структурами имеет характер фазового перехода первого рода. Стандартная процедура расчета границ устойчивости

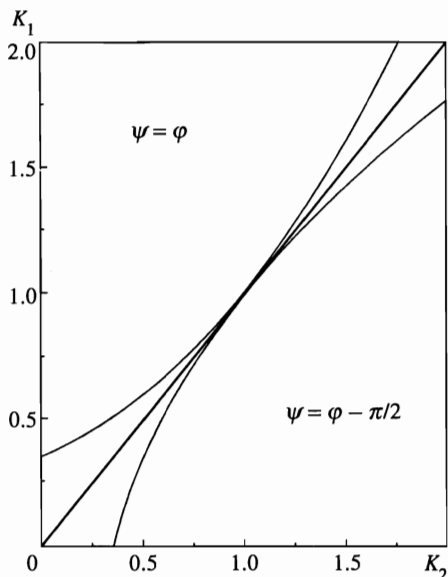


Рис. 2. Фазовая диаграмма аксиальных состояний в нематике

экстремалей приводит к следующему выражению для линии лабильности решения (I):

$$\frac{K_2}{K_3} = \begin{cases} \frac{-(2t-1)(4t-3)\sqrt{t(1-t)} + [4(2t-1)(1-t)+1] \arcsin \sqrt{1-t}}{-(2t-1)\sqrt{t(1-t)} + [8t(1-t)+1] \arcsin \sqrt{1-t}}, & t = \frac{K_1}{K_3} < 1 \\ 1, & t = 1 \\ \frac{-(2t-1)(4t-3)\sqrt{t(1-t)} + [4(2t-1)(1-t)+1] \ln(\sqrt{t} + \sqrt{1-t})}{-(2t-1)\sqrt{t(1-t)} + [8t(1-t)+1] \ln(\sqrt{t} + \sqrt{1-t})}, & t > 1 \end{cases} \quad (3)$$

Для решения (II) линия лабильности получается из (3) заменой $K_1 \leftrightarrow K_2$. На рис. 2 линия фазового равновесия выделена жирным, а границы устойчивости отдельных фаз отмечены тонкими линиями. При $K_1 = K_2 = K_3$ имеет место азимутальное вырождение решений — энергия аксиальных структур не зависит от угла γ . В этом случае функционал (1) совпадает с функционалом энергии изотропного ферромагнетика в нулевом поле [20].

Для всех известных нематиков $K_1 > K_2$ [1-3], и, следовательно, в них устойчивы структуры с $\psi = \varphi + \pi/2$, соответствующие нулевой дивергенции. В данной работе мы ограничимся исследованием именно таких решений.

Подставляя $\psi = \varphi + \pi/2$ в (1) и интегрируя энергию по φ и z , получим для структуры (I):

$$W = \pi L K_2 \int_0^{\rho_1} \left[\left(\frac{d\theta}{d\rho} + \frac{\sin \theta \cos \theta}{\rho} \right)^2 + k \frac{\sin^4 \theta}{\rho^2} \right] \rho d\rho, \quad (4)$$

где $k = K_3/K_2$ — отношение упругих постоянных продольного изгиба (K_3) и кручения (K_2), L — длина нити. В выражении (4) предполагается, что на оси нити $\theta(0) = 0$ и вектор \mathbf{n} становится антипараллельным на расстоянии ρ_1 от оси: $\theta(\rho_1) = \pi$. В частности, при $\rho_1 = \infty$ выражение (4) соответствует энергии уединенной нити.

Уравнение Эйлера для функционала (4)

$$\frac{d^2\theta}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{d\theta}{d\rho} - \frac{\sin 4\theta}{4\rho^2} - k \frac{\sin^2 \theta \sin 2\theta}{\rho^2} = 0 \quad (5)$$

с граничными условиями $\theta(0) = 0$, $\theta(\rho_1) = \pi$ описывает распределение $\mathbf{n}(\mathbf{r})$ в нити.

В частности, для изолированных нитей ($\rho_1 = \infty$) в нематике умножением уравнения (3) на $\rho^2(d\theta/d\rho)$ и интегрированием по ρ получим первый интеграл

$$\left(\rho \frac{d\theta}{d\rho} \right)^2 = \sin^2 \theta [1 + (k-1) \sin^2 \theta]. \quad (6)$$

Разделяя переменные и проводя интегрирование в (6), удастся получить следующее уравнение для $\theta(\rho)$:

$$\operatorname{cth} \theta = \frac{1 - k(\rho - \rho_0)^2}{2(\rho/\rho_0)}, \quad (7)$$

где ρ_0 — произвольное положительное число, определяющее характерные размеры ядра нити. В области малых ρ угол $\theta \sim \rho$; при $\rho \rightarrow \infty$ угловая переменная изменяется по

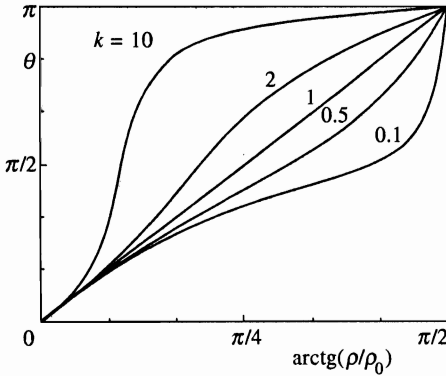


Рис. 3. Аксиальные структуры в нематике при различных значениях k

закону $\theta \sim \pi - 1/\rho$. Отметим, что в выражение (7) вошло ρ_0 — произвольное положительное число. Наличие такого свободного параметра в решении приводит к тому, что выражение (7) описывает целое семейство решений уравнения (5). Значение этого обстоятельства обсуждается ниже. А одноконстантном приближении ($k = 1$) выражение (7) совпадает с решением для вихря в изотропном ферромагнетике [20]:

$$\operatorname{tg} \left(\frac{\theta}{2} \right) = \frac{\rho}{\rho_0}. \tag{8}$$

При $k \rightarrow 0$ в области $\theta \approx \pi/2$ формируется особенность, и при $k = 0$ соотношение (7) переходит в выражение,

$$\operatorname{tg} \theta = 2 \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right), \tag{9}$$

описывающее структуру с разворотом \mathbf{n} на $\pi/2$.

На рис. 3 приведены профили $\theta(\rho/\rho_0)$ (7) для различных значений k . При $k < 1$ зависимости $\theta(\rho/\rho_0)$ имеют характерный пикообразный вид; при $k > 1$ профили (7) содержат точку перегиба.

Подставляя в (4) решения (7), после интегрирования получаем следующие выражения для энергии изолированных нитей:

$$\frac{E_V}{2\pi K_2 L} = \begin{cases} 1 + \frac{k}{2\sqrt{1-k}} \ln \frac{1 + \sqrt{1-k}}{1 - \sqrt{1-k}}, & 0 < k < 1 \\ 1 + \frac{k}{\sqrt{1-k}} \arcsin \sqrt{\frac{k-1}{k}}, & k > 1 \end{cases} \tag{10}$$

Энергия (10) имеет наименьшее значение $E_V = 2\pi K_2 L$ при $k = 0$ и монотонно возрастает с ростом k . При $k = 1$ энергия нити равна $4\pi K_2 L$ и совпадает с энергией вихря в изотропном ферромагнетике [20]. В области больших k энергия нити пропорциональна $\sqrt{K_2 K_3}$.

При фиксированных значениях k решения (7) представляют собой семейство функций типа $\theta(\rho/\rho_0)$. Наличие решений типа (7) 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 k энергия нитей (10) остается постоянной при произвольном радиальном сжатии или растяжении профиля $\theta(\rho)$.

Соотношения (6) и (7) позволяют определить функциональную связь между $d\theta/d\rho$ и θ :

$$\frac{d\theta}{d\rho} = f(\theta) = \frac{1}{\rho_0} \sqrt{1 + (k-1)\sin^2\theta} \left(\cos\theta + \sqrt{1 + (k-1)\sin^2\theta} \right). \quad (11)$$

Фазовые портреты (11) решений (7) начинаются в точках $(0, 2/\rho_0)$ и оканчиваются в точке $(\pi, 0)$. При изменении ρ_0 от нуля до бесконечности траектории (11) заполняют всю фазовую плоскость $(\theta, d\theta/d\rho)$.

Кроме локализованных решений (7) для изолированных нитей, уравнение (5) имеет аксиально-симметричные решения с граничными условиями

$$\theta(0) = 0, \quad \theta(\rho_1) = \theta_0 \quad (0 < \theta_0 < \pi). \quad (12)$$

Из вида решений (7) следует, что среди множества решений $\theta(\rho/\rho_0)$ (7) соответствующим подбором ρ_0 можно найти такую функцию, которая проходит через точку (ρ_1, θ_0) . Ясно, что полученный профиль будет описывать решения уравнения (5) с граничными условиями (12).

Аксиальные структуры конечного радиуса могут индуцироваться в капиллярах. Граничные условия (12) реализуются в капиллярах радиуса ρ_1 с напылением на стенки соответствующих ориентирующих пленок [1–3]. В работах [10, 11] наблюдались такие аксиальные состояния с углом $\theta_0 = 90^\circ$.

Рассмотренные выше свойства аксиальных структур с $\psi = \varphi + \pi/2$ также сохраняются и для решений $\psi = \varphi$. Поскольку пока не известны вещества, в которых данный тип дефектов может быть устойчив, мы не будем останавливаться на обсуждении свойств этих решений. Влияние магнитного и электрического полей на исследуемые нематические структуры будет рассмотрено в разд. 3.3.

3. ХОЛЕСТЕРИКИ

Как известно, в холестериках основному состоянию соответствует одномерная модулированная структура — геликоид. В холестериках с положительной анизотропией восприимчивости ($\Delta\chi > 0$) в магнитном поле, перпендикулярном оси геликоида, а также в холестериках с $\Delta\chi < 0$ в поле, параллельном оси геликоида, происходит искажение спиральной структуры полем (искаженный полем геликоид называют циклоидой) и увеличение периода структуры с ростом поля; наконец, в критическом поле

$$H_c^2 = \pi^2 q_0^2 K_2 / 4\Delta\chi \quad (13)$$

путем неограниченного роста периода происходит переход в однородное состояние [21, 22]. Экспериментальные исследования эволюции циклоиды в магнитном и электрическом полях проводились в целом ряде холестериков [23–26].

Ниже нам понадобятся границы существования различных спиральных структур в геликоиде их энергии. Поэтому приведем сводку основных результатов по расчету равновесных параметров геликоидальных состояний, взятых из [1–3], а также полученных

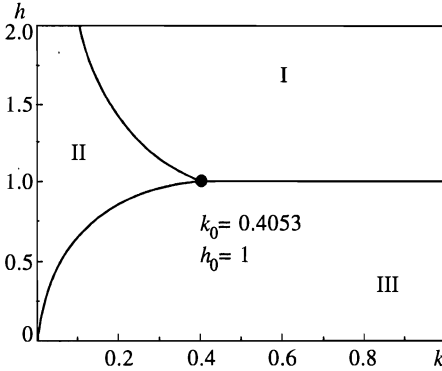


Рис. 4. Фазовая диаграмма геликоидальных состояний в холестерике: I — однородное состояние; II — коническая фаза; III — циклоида

в данной работе (рис. 4). При анализе уравнений для различных спиральных структур в холестериках выяснилось, что в области малых k ($k < k_c = (2/\pi)^2 = 0.4053$, параметр k определен в (4)) в некотором критическом поле H_1 (рис. 4) происходит разворот оси спирали параллельно магнитному полю — переход циклоиды в коническую фазу. Дальнейшая эволюция системы происходит за счет уменьшения угла конуса (подгибка вектора \mathbf{n} к направлению поля); наконец, в верхнем критическом поле, $H_2 = (2/\pi\sqrt{k})H_c$, конус схлопывается и происходит переход в однородное состояние. На $H - k$ -фазовой диаграмме (рис. 4) нанесены области термодинамической устойчивости отдельных фаз.

Покажем теперь, что наряду с одномерными модулированными структурами (различные геликоиды) двумерные модулированные структуры, а также двумерные локализованные состояния тоже входят в число метастабильных решений уравнений состояния холестерика.

Рассмотрим аксиально-симметричные структуры в холестериках в поле, направленном вдоль оси симметрии. Минимуму функционала (2) в данном случае соответствуют структуры с $\psi = \varphi + \pi/2$. После интегрирования по φ и z функционала (2) и введения новых единиц для длины и поля:

$$r = \frac{\rho}{\rho_0}, \quad h = \frac{H}{H_c}, \quad \rho_0 = \frac{\pi}{q_0} \tag{14}$$

(H_c задается соотношением (13)) энергию холестерика можно записать так:

$$w = \frac{W - W_0}{\pi L K_2} = \int_0^R \bar{w} r dr = \int_0^R \left[\left(\frac{d\theta}{dr} + \frac{\sin \theta \cos \theta}{r} - \pi \right)^2 + k \frac{\sin^4 \theta}{r^2} + \frac{\pi^4}{4} h^2 \sin^2 \theta - \pi^2 \right] r dr, \tag{15}$$

где $W_0 = \pi^3 L K q_0^2 (1 - h^2/4)$ — энергия однородного состояния с $\mathbf{n} \parallel Z$; L и k определены в (4)).

Уравнение Эйлера для функционала (15)

$$\frac{d^2 \theta}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d\theta}{dr} - \frac{\sin 4\theta}{4r^2} - k \frac{\sin^2 \theta \sin 2\theta}{r^2} + 2\pi \frac{\sin^2 \theta}{r} - \frac{\pi^4 h^2}{8} \sin 2\theta = 0 \tag{16}$$

с граничными условиями

$$\theta(0) = 0, \quad \theta(R) = \pi \quad (17)$$

описывает аксиальную структуру радиуса R в холестерике. Как и в случае нематика, состояния с конечным радиусом могут реализоваться в цилиндрических капиллярах, а изолированным состояниям в объеме холестерика соответствует граничное условие $R = \infty$.

При $k = 1$ уравнение (16) функционально совпадает с уравнением для двумерных аксиально-симметричных распределений намагниченности («вихрей») в одноосных ферромагнетиках без центра инверсии [27–29].

В отличие от (5) данное уравнение не удастся решить аналитически. Для численного интегрирования уравнения (16) с граничными условиями (17) удобно использовать стандартный разностный метод. После линеаризации вблизи пробной функции дифференциальное уравнение сводится к системе линейных алгебраических уравнений для значений функции $\theta(r)$ в дискретных позициях. Матрица взаимодействия для данной системы имеет ленточную структуру: только элементы на главной диагонали и нескольких «параллелях» отличны от нуля. Для решения таких систем уравнений использовались специальные методы расчета и процедуры, описанные в [30].

Однако сходимость разностного метода во многом определяется удачным выбором пробной функции. Для поиска возможных решений краевой задачи (16), (17) и определения их характера приходится перейти к вспомогательной задаче Коши, а именно, вначале решать уравнение (15) с начальными условиями

$$\theta(0) = 0, \quad \left(\frac{d\theta}{dr} \right)_{r=0} = a \quad (0 \leq a \leq \infty). \quad (18)$$

Численный расчет функций $\theta(r)$ (в данной работе использовался метод Рунге — Кутта) для различных значений a позволяет проанализировать характер интегральных кривых задачи Коши и отобрать те из них, которые удовлетворяют данной краевой задаче (или доказать их отсутствие). Анализ возможных интегральных кривых уравнения (16), (18) проводился на фазовых плоскостях (r, θ) и $(\theta, d\theta/dr)$. Если удавалось найти решения, соответствующие краевой задаче, то полученные методом Рунге — Кутта профили служили в качестве пробных функций при использовании разностного метода.

Численный расчет и аналитический анализ позволили получить следующие результаты.

1. Локализованные структуры и решения с конечным радиусом

Характер решений уравнения (16) существенным образом различается в зависимости от того, будет ли приложенное магнитное поле выше или ниже критического H_c (13).

В полях выше критического, $H > H_c$, энергия неоднородных структур в холестерике превышает энергию однородного состояния. Поэтому здесь имеется тенденция к локализации неоднородностей. Для решений краевой задачи (16), (17) профили $\theta(r)$ изображены на рис. 5, а соответствующие им фазовые портреты — на рис. 6. Характер зависимости $\theta(r)$ определяется величиной параметра a (18). Если a меньше некоторого критического значения $a_0(h, k)$, то решения $\theta(r)$ описывают структуры с конечными радиусами $R(a)$ и отличной от нуля производной в граничных точках $((d\theta/dr)_R > 0)$ (кривые 1, 2, 3 на рис. 5). При $a < a_0$ траектории фазовых портретов для интегральных

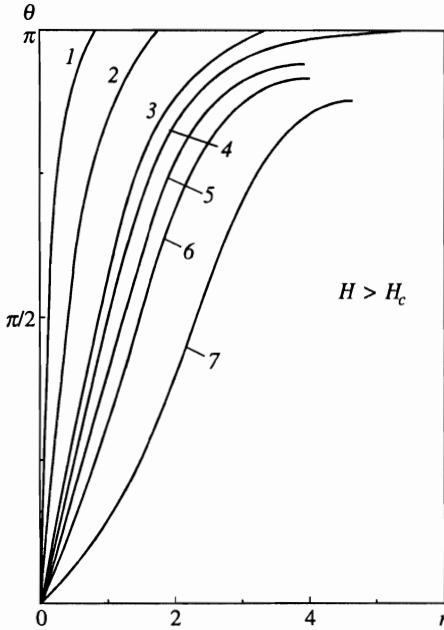


Рис. 5

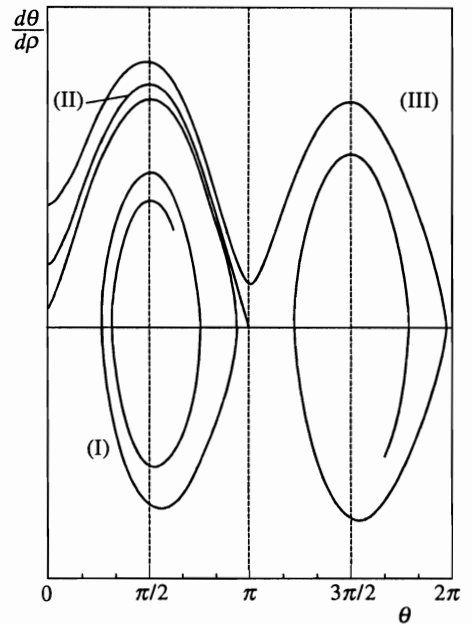


Рис. 6

Рис. 5. Характер решений краевой задачи для аксиальных структур в холестерике при $H > H_c$

Рис. 6. Фазовые портреты решений, изображенных на рис. 5

кривых задачи Коши (I) пересекают ось $\theta = \pi$ при $d\theta/dr > 0$ и заканчиваются в одном из полюсов $(\pi(2n + 1)/2, 0)$, где $n = 1, 2, 3, \dots$ (на рис. 6 приведена фазовая траектория с полюсом в точке $(3\pi/2, 0)$). На этих кривых решениях краевой задачи (17), (18) соответствуют участки $0 \leq \theta \leq \pi$ (рис. 6). Для таких решений граничные условия могут быть реализованы в цилиндрических капиллярах соответствующей обработкой поверхности.

При $a > a_0$ функции $\theta(r)$ описывают решения конечного радиуса R_0 , в которых вектор \mathbf{n} поворачивается на угол меньший π , причем $(d\pi/dr) = 0$ при $r = R_0$ (кривые 5, 6, 7 на рис. 5). Этим решениям на рис. 6 соответствуют участки траекторий, заканчивающихся в полюсе $(\pi/2, 0)$ (III).

Наконец, при $a = a_0$ реализуются локализованные решения, описывающие изолированные нити в объеме холестерика (кривая 4 на рис. 5). Данным решениям соответствуют сепаратрисные траектории типа (II), начинающиеся на вертикальной оси и заканчивающиеся в точке $(\pi, 0)$.

На рис. 7 приведены профили локализованных решений при $k = 4$ для ряда значений поля выше критического. С увеличением поля резко усиливается локализация нитей. Эффективные размеры ядра нити монотонно уменьшаются с ростом поля (при этом решения не теряют устойчивости). Естественным окончанием данного процесса является сжатие ядер нитей до размеров, когда расстояния между молекулами становятся сравнимыми с их размерами. В этой области методы континуальной теории уже не применимы.

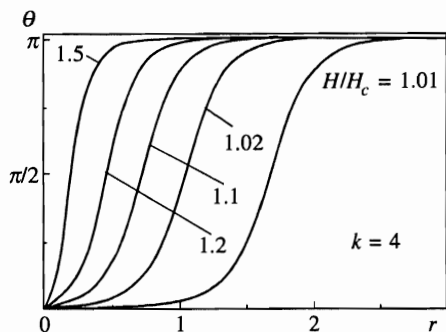


Рис. 7. Локализованные аксиальные структуры холестерика для ряда значений магнитного поля при $k = 4$

С уменьшением поля в области $H > H_c$ и приближением к критическому значению нити расширяются, а их энергия приближается к энергии однородного состояния. При этом в нитях начинает формироваться узкая переходная область между ядром с $\theta \approx 0$ и внешней областью — «доменная граница». При $H \rightarrow H_c$ путем неограниченного расширения ядра нить переходит в однородное состояние. При $H \leq H_c$ локализованные аксиальные структуры в холестериках не существуют.

В области $0 < H < H_c$ энергии модулированных состояний ниже энергии однородной фазы, поэтому характер решений для аксиальных структур здесь совершенно иной. При произвольных значениях параметра $a > 0$ решения задачи Коши (16), (18) представляют собой монотонно возрастающие функции $\tilde{\theta}(r)$, уходящие на бесконечность. Эти решения соответствуют модулированной структуре, состоящей из концентрических окружностей («круги на воде»). Решениям исследуемой краевой задачи на траекториях $\theta(r)$ соответствуют участки $0 \leq \theta \leq \pi$, описывающие аксиальные структуры конечного радиуса. Малым значениям параметра a соответствуют аксиальные решения с большим радиусом. Такие профили $\theta(r)$ представляют собой цилиндрические домены, в которых обширная внутренняя область однородного состояния с $\theta \approx 0$ отделена от внешней области с $\theta = \pi$ тонкой 180-градусной стенкой. При $R \rightarrow \infty$ размер такого домена неограниченно возрастает, и, следовательно, в полях ниже критического поля H_c (13) локализованные структуры в холестериках радиально неустойчивы. Этот результат имеет простой физический смысл. При $H < H_c$ энергия неоднородного состояния обладает более низкой энергией по сравнению с однородным. Поэтому при неограниченном расширении профиля неограниченно возрастает объем, занимаемый энергетически выгодной неоднородной частью («доменной границей»). Таким образом, при переходе в область существования модулированных структур в существующих в объеме холестерика локализованных нитях должно происходить неограниченное расширение ядра структуры (другими словами, они должны «разбухать и лопаться»).

2. Решетки аксиальных структур

Поскольку во всей области, где $H < H_c$, энергия неоднородного состояния холестерика ниже энергии однородного, здесь должны реализоваться структуры с максимально возможным распространением неоднородности в объеме образца. Примером такого состояния служит геликоид. В этом случае вектор \mathbf{n} периодически изменяется вдоль определенного направления (оси геликоида). Можно сказать, что геликоид является одномерной решеткой или одномерной модулированной структурой. Казалось бы, что неоднородность структуры, а значит, и энергетическая стабильность возрастут при

модуляции и в других направлениях, т. е. в двумерных и трехмерных решетках. Как известно, термодинамическая стабильность двумерных решеток неоднородных состояний доказана для сверхпроводников в смешанном состоянии (решетки абрикосовских вихрей) [31, 32], для магнетиков без центра инверсии в определенном диапазоне магнитных полей (решетки магнитных вихрей) [28]. В холестериках при определенных условиях наблюдались квадратные решетки [15–18], а также трехмерные модулированные структуры (так называемые голубые фазы) [33]. В данном разделе будут рассмотрены двумерные решетки из аксиальных структур, полученных выше.

Как известно, стабилизация модулированных структур в холестериках и в других хиральных системах связана с наличием в их энергии инвариантов Лифшица, которые обеспечивают понижение энергии системы только при определенном направлении изменения параметров порядка (хиральность!) [1]. В частности, в холестериках этот член имеет вид $q_0 \mathbf{n} \operatorname{rot} \mathbf{n}$ (см. (1)), и знак параметра q_0 в данном веществе определяет энергетически выгодное направление вращения вектора \mathbf{n} в нем. Поэтому среди различных решеток аксиальных структур холестерика только те обеспечивают понижение энергии системы (по сравнению с однородным состоянием), в которых сохраняется заданное направление вращения директора \mathbf{n} . Очевидно, этому условию удовлетворяют решетки, в элементарной ячейке которых вектор \mathbf{n} параллелен оси симметрии (ось Z) и путем вращения на 180° становится антипараллельным на границах ячейки. Будем называть такие структуры π -решетками. Также возможны решетки с ячейками, в которых $\mathbf{n} \parallel Z$ в центре и путем вращения на 90° становится перпендикулярным аксиальной оси на границах ячейки ($\pi/2$ -решетки). Физическая эквивалентность состояний с \mathbf{n} и $-\mathbf{n}$ позволяет и в этом случае сохранить постоянство вращения директора в решетке. Очевидно, что второй тип решеток невозможен в системах, состояния которых описываются векторным параметром порядка (например, в ферромагнетиках). Следует отметить, что в $\pi/2$ -решетках, состоящих из треугольных, квадратных или гексагональных ячеек, в узлах имеет место разрыв поля $\mathbf{n}(\mathbf{r})$. Эти особенности представляют собой радиальные линейные дисклинации. Данные особенности также устраняются «вытеканием» дисклинации в третье измерение. Таким образом, в $\pi/2$ -решетках с непрерывной структурой в дополнение к основным решеткам образуется система ячеек с центрами в узлах решетки.

Равновесные состояния двумерных решеток в холестерике определяются решением системы дифференциальных уравнений для $\theta(x, y)$ и $\psi(x, y)$, минимизирующих функционал энергии (1). Такую задачу сложно решить даже численным методом. Существенного упрощения задачи можно достичь, используя приближения круговых ячеек [30, 28]. В рамках данного приближения элементарная ячейка решетки с гексагональным (или квадратным) сечением заменяется круговым цилиндром равного объема. Соответственно, граничные условия заменяются круговыми: для π -решеток — выражением (17), а для $\pi/2$ -решеток соотношением

$$\theta(0) = 0, \quad \theta(R) = \pi/2 \quad (19)$$

(при этом полагается, что в $\pi/2$ -решетках обе системы ячеек имеют одинаковые размеры).

В рамках данного приближения задача о расчете равновесной структуры решеток восстанавливает аксиальную симметрию и сводится к интегрированию уравнения (16) с граничными условиями (17) или (19) с последующей минимизацией плотности энергии решетки

$$F = w/\pi R^2 \quad (20)$$

по R (энергия w задается выражением (15)). Таким образом, решения уравнения (15) с конечным радиусом соответствуют вихревой решетке. Как отмечалось выше (см. рис. 5 и 6), при $H < H_c$ уравнение (16) с граничными условиями (17) имеет решения для произвольных радиусов. Соответствующие профили для структур с граничными условиями (19) можно получить, если на рис. 5 провести прямую $\theta = \pi/2$.

Процедура численного расчета оптимальных размеров решеток заключалась в решении уравнения (16) для различных значений R и сравнения их энергий (20). Расчет показывает, что во всей области, $0 \leq H < H_c$, для обоих типов решеток энергия (20) имеет минимум при конечных размерах ячеек R . В частности, для $k = 1$ минимум энергии для π -решеток достигается при $R_0 = 1.37$, а для $k = 4$ при $R_0 = 1.68$; для $\pi/2$ -решеток при $k = 1$ величина $R_0 = 1.08$, а при $k = 4$ имеем $R_0 = 1.31$. (Для сравнения: полупериод геликоидальной структуры в холестерике равен единице [3].)

Обычно в холестериках константа деформаций продольного изгиба K_3 в несколько раз превышает постоянную кручения K_2 , поэтому параметр k (4) принимает значения порядка единицы. Например, согласно [15], а смеси холестерилнонаноата с МББА $k = 3.886$ при $T = 22^\circ\text{C}$. Однако в окрестности спонтанных фазовых переходов параметр $k(T)$ может меняться в широких пределах. В области малых k распределение $\theta(r)$ в равновесных структурах π -решеток имеет линейный характер, с ростом k увеличиваются размеры ядра. Расчет показывает, что функции $\theta(r)$ при $\theta \leq \pi/2$ с точностью не более процента описывают равновесные профили $\pi/2$ -решеток.

На рис. 8 приведены зависимости равновесных размеров ячеек для решеток обоих типов в нулевом поле как функции параметра k . С ростом k период решеток монотонно возрастает, причем ячейки π -решеток имеют большие размеры, при всех значениях k .

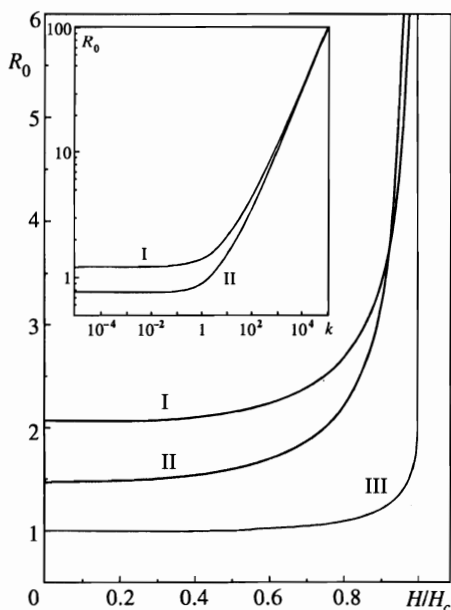


Рис. 8. Равновесные размеры элементарных ячеек (I — π -решетка; II — $\pi/2$ -решетка; III — геликоид). На вставке даны зависимости R_0 от k в нулевом магнитном поле (I — π -решетка; II — $\pi/2$ -решетка)

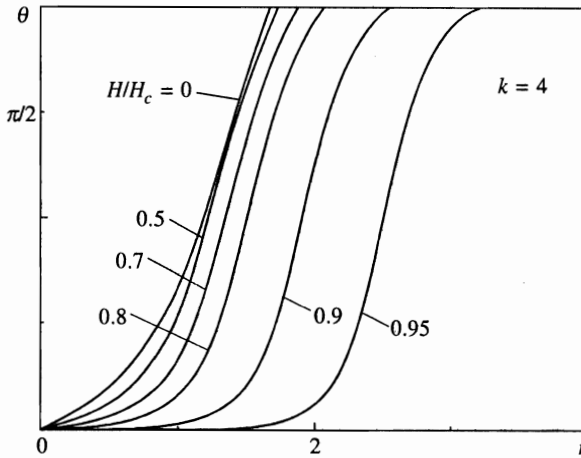


Рис. 9. Равновесные структуры элементарных ячеек π -решеток для ряда значений поля при $k = 4$

В широком диапазоне полей ($H < H_c$) равновесные периоды решеток слабо зависят от поля, но начинают неограниченно возрастать с приближением к критическому полю H_c (рис. 8). На рис. 9 представлена эволюция равновесной структуры элементарных ячеек в π -решетках с ростом магнитного поля. В окрестности критического поля неоднородность в распределении \mathbf{p} локализуется в узкой переходной области. Напротив, в ячейках $\pi/2$ -решеток неоднородности сосредоточены на границах ячеек. Это различие легко понять, если вспомнить, что в магнитном поле состояния с $\theta = \pi/2$ обладают наибольшей энергией. В $\pi/2$ -решетках эти состояния реализуются на границах ячеек, а в альтернативных решетках внутри ячеек. Именно в области состояний близких $\pi/2$ локализуются неоднородности в обоих случаях. При $H \rightarrow H_c$ в обоих типах исследуемых решеток размеры ячеек резко возрастают, причем для $\pi/2$ -решеток характерно более резкое возрастание равновесных размеров структуры (рис. 8).

Во всей области существования модулированных структур плотность энергии $\pi/2$ -решеток превышает плотность энергии π -решеток (рис. 10). Как и геликоид [21, 22], оба типа исследуемых решеток переходят в однородное состояние путем неограниченного роста периода системы в поле H_c . Ясно, что энергии всех модулированных структур становятся равными энергии однородного состояния в этом критическом поле.

При $H \rightarrow H_c$ теряется различие в распределении неоднородностей в геликоиде и в обоих типах решеток: рассматриваемые здесь модулированные состояния представляют собой систему увеличивающихся областей однородного состояния с $\theta = 0$ (доменов), а неоднородности локализуются в узких переходных слоях — 180-градусных доменных границах. Поэтому в этой области неоднородные состояния могут быть эффективно описаны моделью уединенной тонкой плоской доменной границы [30]. В неравновесной энергии системы энергетический вклад от этих неоднородных областей может быть представлен интегральным параметром — плотностью энергии доменных границ σ . Во всей области, где $H \leq H_c$, плотность энергии σ отрицательна, и обращается в нуль в критическом поле. Переход в однородное состояние происходит за счет неограниченного расширения доменов и вытеснения доменных границ на бесконечность. Таким образом, характер перехода модулированных структур в однородное состояние позволяет определить границы их существования из анализа плоской доменной границы холлестерика. Напомним, что аналогичная ситуация имеет место в сверхпроводниках [31] и

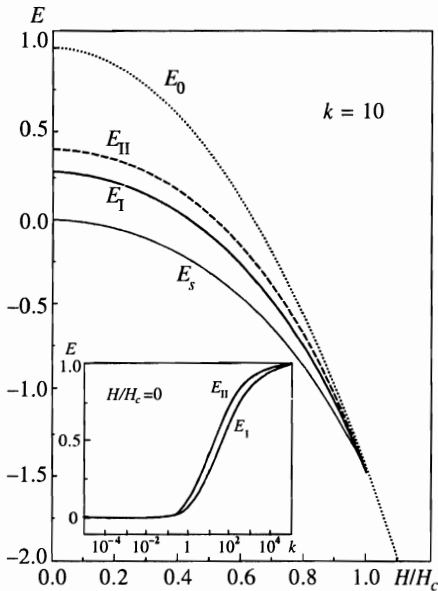


Рис. 10. Полевые зависимости равновесных энергий аксиальных π -решетки E_{II} и $\pi/2$ -решетки E_I при $k = 10$. Для сравнения тонкой линией нанесена энергия геликоида E_S и точками энергия однородного состояния E_0 . На вставке — зависимости равновесных энергий аксиальных решеток от k в нулевом магнитном поле (E_{II} — π -решетка; E_I — $\pi/2$ -решетка)

в магнетиках без центра инверсии [27–29]. Для холестериков роль параметра Гинзбурга–Ландау играет величина h (14), характеризующая относительный вклад взаимодействий, формирующих равновесные модулированные структуры.

В заключение этого раздела обсудим границы применимости результатов, полученных в приближении круговых ячеек. Ясно, что структура ячеек двумерных решеток, рассчитанная точным решением соответствующих дифференциальных уравнений, сохраняет аксиальную симметрию только в центре; вблизи границ ячеек сказывается симметрия решетки и распределения $\theta(x, y)$ и $\psi(x, y)$ существенно отличаются от аксиального. Анализ показывает, что учет симметрии решетки не может значительно повлиять на полученные выше результаты. Здесь существенным является то обстоятельство, что основной вклад в энергию системы вносят участки, находящиеся в центрах ячеек. Поэтому изменение структуры в периферийных областях ячеек слабо сказывается на общем балансе энергий системы. Так, например, изменение радиальных составляющих в аксиальной ячейке π -решетки изменяет результаты не более чем на два процента [28]. Тем не менее расчет равновесных состояний элементарных ячеек с учетом их реальной симметрии представляет интерес. В нулевом поле абсолютному минимуму функционала (1) соответствует геликоид. Однако различие в энергиях геликоидальной и двумерных модулированных структур не превышает десяти процентов и уменьшается с ростом поля. Поэтому открытым остается вопрос о том, какая из модулированных структур является термодинамически устойчивой в магнитном поле.

При переходе в однородное состояние все модулированные фазы холестерика трансформируются в структуры с сильной локализацией неоднородностей. В этой области ограничения, связанные с применением приближения круговых ячеек, снимаются и полученные результаты, включая и значения критических полей, можно считать точными.

3. Радиальная стабильность решений

В общем балансе энергии аксиальной структуры (15) выделяются слагаемые с различным характером зависимости от пространственной переменной: регулярная часть упругой энергии (w_r), члены, входящие в инвариант $\mathbf{n} \operatorname{rot} \mathbf{n}$ (w_c) и энергия взаимодействия с внешним полем (w_h):

$$w_r = \int_0^R \left[\left(\frac{d\theta}{dr} + \frac{\sin \theta \cos \theta}{r} \right)^2 + k \frac{\sin^4 \theta}{r^2} \right] r dr,$$

$$w_c = -2\pi \int_0^R \left(\frac{d\theta}{dr} + \frac{\sin \theta \cos \theta}{r} \right) r dr, \quad w_h = \frac{\pi^4}{4} h^2 \int_0^R \sin^2 r \theta dr. \quad (21)$$

Энергия w_r пропорциональна $((d\theta/dr)^2 + 1/r)r^2 \sim r^0$, т. е. имеет нулевую по r размерность; $w_c \sim r^1$ — линейную, а w_h пропорционально r^2 . Такое различие в размерности энергий различных взаимодействий существенным образом сказывается на характере решений для аксиальных состояний. Чтобы убедиться в этом, рассмотрим изменение энергии (15) при масштабном преобразовании

$$r = (1 + a)r' \quad (22)$$

профиля $\theta(r)$ размером R . После интегрирования в (15) для энергии деформированного профиля $\theta(r')$ — w' можно записать следующее точное выражение:

$$w' = w + (w_c + 2w_h)a + w_h a^2. \quad (23)$$

Соотношение (23), впервые полученное для локализованных двумерных структур (вихрей) в магнетиках без центра инверсии [29], справедливо для достаточно общих моделей [34] и позволяет сделать важные выводы об устойчивости аксиальных состояний. Как следует из (23), профиль $\theta(r)$ с граничными условиями (16) устойчив относительно преобразования (22), если

$$w_c + 2w_h = 0, \quad w_h > 0. \quad (24)$$

Чтобы проверить, удовлетворяют ли этим условиям решения уравнения (16), домножим его на $r^2(d\theta/dr)^2$ и проинтегрируем от 0 до R . После подстановки граничных условий в нуле получаем

$$w_c + 2w_h = - \int_0^R [r^2(d\theta/dr)^2]_{r=R} + \left[\cos^2 \theta + (k - 1) \sin^4 \theta + \pi r \sin 2\theta + \frac{\pi^4 h^2}{8} \sin^2 \theta \right]_{r=R}. \quad (25)$$

Для локализованных решений уравнения (16) правая часть в (25) обращается в нуль, и, следовательно, удовлетворяются условия (24).

Для решений с конечным радиусом согласно (17) $(d\theta/dr)_{r=R} > 0$. Поэтому здесь $w_c + 2w_h < 0$, и согласно (23) данные решения неустойчивы относительно расширения размеров. Для аксиальных решений, в которых на границе $(d\theta/dr)_{r=R} = 0$, $\theta(R) < \pi$, условие (25) имеет вид $w_c + 2w_h > 0$. Поэтому такие структуры неустойчивы относительно сжатия. Таким образом, в объеме холестерика только локализованные состояния сохраняют устойчивость относительно радиальных возмущений типа (22). Другие

решения радиально неустойчивы и путем расширения или сжатия будут трансформироваться в профили, соответствующие локализованным решениям. Однако аксиальные структуры конечного радиуса можно индуцировать в цилиндрических капиллярах.

Для стабилизации локализованных состояний в холестериках определяющую роль играет энергия w_c , ведущая к понижению энергии рассматриваемых состояний. В центральносимметричных материалах $w_c = 0$, и условие радиальной устойчивости аксиальных структур (24) невыполнимо (подробнее см. [29]).

В этой связи рассмотрим аксиальные решения (7) для нематиков. Как следует из (21), такие решения будут неустойчивы в магнитном поле. Во всех известных нематиках $\Delta\chi > 0$, и, следовательно, $w_h > 0$. В этом случае минимум энергии в магнитном поле достигается при $R = 0$. Это означает, что под действием магнитного поля исследуемые аксиальные линии в нематиках будут сжиматься. В данной идеальной модели этот процесс носит беспороговый характер: неконтролируемое воздействие даже слабых магнитных полей (например, магнитного поля Земли) может привести к коллапсу нитевидных структур. В результате образуются плотные локализованные структуры, в которых расстояния между молекулами сравнимы с их размерами. Можно предположить, что «черные нити» в нитевидных нематических текстурах представляют собой именно таких образования. В течение многих лет нитевидные текстуры, давшие название нематикам, равно как и другие неоднородные состояния в жидких кристаллах, объяснялись на основе дисклинационной теории [1]. Согласно описаниям в нитевидных текстурах наряду с «нитеями», прикрепленными к опорным поверхностям, существует немало аналогичных образований с одним или двумя свободными концами. Данные линейные дефекты обладают большой подвижностью: легко изгибаются, уносятся течением. Такое поведение свободных нитей совместимо с представлениями о них как локализованных образованиях с непрерывной структурой. Свободные нити могут представлять собой локализованные структуры конечной длины, заканчивающиеся точечными дефектами. В свою очередь, дисклинации являются нелокализованными состояниями с разрывом поля директора. Перемещение таких дефектов требует значительных затрат энергии, поскольку сопряжено с существенной переориентацией больших объемов нематика. Тщательные наблюдения различных дефектов в нитевидных текстурах позволили бы выяснить структуру «черных нитей». Напомним, что после того как существование аксиальных структур с несингулярным ядром было предсказано теоретически [9, 10], целенаправленные исследования позволили идентифицировать их в ряде распространенных нематических текстур [10].

Нематические аксиальные структуры также наблюдались в цилиндрических капиллярах [10, 11], однако влияние полей на эти структуры не исследовалось. Поскольку в [10, 11] аксиальные структуры не коллапсировали в магнитном поле Земли, можно предположить, что в реальных материалах процесс сжатия аксиальных линий маскируется эффектами взаимодействия с поверхностью и дефектами или, возможно, носит пороговый характер.

4. Линейный анзац для аксиальных решений

Для анализа основных закономерностей формирования аксиальных структур в жидких кристаллах рассмотрим энергию (15) для простейшего модельного распределения $\theta(r)$:

$$\theta(r) = \pi \frac{r}{R} \quad (r < R), \quad \theta(r) = 0 \quad (r > R) \quad (\pi\text{-решетка}), \quad (26)$$

$$\theta(r) = \frac{\pi}{2} \frac{r}{R} \quad (r < R), \quad \theta(r) = 0 \quad (r > R) \quad (\pi/2\text{-решетка}). \quad (27)$$

Подстановка соотношений (26), (27) в энергию (15) и последующее интегрирование приводят к следующему результату для плотности энергии решеток w (20) с модельным распределением (26) и (27):

$$E = \frac{\tilde{w}}{q_0^2} = \frac{A}{R^2} - \frac{B}{R} + C. \quad (28)$$

Здесь R играет роль варьируемого параметра. Для π -решеток коэффициенты A , B и C равны:

$$A_1 = \int_0^1 \left[\left(1 + \frac{\sin 2\pi x}{2\pi x} \right)^2 + k \frac{\sin^4 \pi x}{\pi^2 x^2} \right] x dx = (0.540 + 0.084k),$$

$$B_1 = \int_0^1 \left(2x + \frac{\sin 2\pi x}{\pi} \right) dx = 1, \quad (29)$$

$$C_1 = \frac{\pi^2 h^2}{4} \int_0^1 (\sin^2 \pi x) x dx = 0.617h^2,$$

а для $\pi/2$ -решеток интегрирование приводит к таким результатам:

$$A_2 = (0.257 + 0.053k), \quad B_2 = 0.5(1 + 4/\pi^2), \quad C_2 = 0.867h^2.$$

Интегрирование (15) с модельным решением (26) приводит к потенциалу

$$F = A - BR + CR^2, \quad (30)$$

описывающему локализованные состояния в холестерике (коэффициенты A , B и C определяются соотношениями (29), а R имеет смысл характерных размеров ядра нити).

Функциональные зависимости потенциалов (28) и (29) соответствуют обсуждаемым в предыдущем разделе трансформационным свойствам энергии системы (15). Коэффициент A включает вклад от регулярной (нематической) части упругой энергии, описываемой квадратичными по пространственной производной членами. Эта энергия всегда положительна и ведет к повышению энергии неоднородного состояния по сравнению с однородным. Напротив, линейные по пространственным производным инварианты, обусловленные хиральностью системы, приводят к отрицательному вкладу в энергию модулированных состояний. В модельной энергии (28) их вклад представлен линейным по R членом, ведущим к стабилизации системы при конечных размерах решетки.

Баланс указанных противоположных вкладов в энергию системы определяет равновесные параметры неоднородных структур. При переходе от одномерных модулированных структур к двумерным (решеткам) неоднородность системы возрастает. При этом возрастают абсолютные значения конкурирующих вкладов в энергию системы: с одной стороны, увеличивается значение коэффициента B , с другой стороны, возрастает «жесткость» системы (величина параметра A). Как было показано выше, равновесная

энергия геликоида ниже, чем энергии решеток. Таким образом, в отличие от неоднородных состояний в смешанном состоянии сверхпроводников, где термодинамически устойчива двумерная модулированная структура (решетка абрикосовских вихрей) [31, 32], в холестериках наименьшей энергией обладает система с умеренной неоднородностью — одномерно-модулированная структура (геликоид).

Из анализа потенциала (28) следует, что равновесные размеры π - и $\pi/2$ -решеток (R_0) не зависят от поля и соответственно равны $R_0^{(1)} = 2A_1/B_1 = (1.079 + 0.168k)$, $R_0^{(2)} = 2A_2/B_2 = (0.732 + 0.150k)$. Вне области критических полей распределение $\theta(r)$ в ячейке (рис. 9) имеет достаточно регулярный характер. Полученные выше в «линейном» приближении результаты дают правильное качественное описание эволюции системы в этой области (в частности, линейный рост размеров решеток с ростом k , их независимость от магнитного поля вне области критических полей), более того, имеет место неплохое количественное согласие с результатами численного расчета.

Существенно, что размеры локализованных структур не зависят от A , а «жесткость» системы определяется энергией взаимодействия с полем. Равновесный размер ядра нити $R_0 = B_1/(2C_1) \sim 1/h^2$ неограниченно возрастает при $h \rightarrow 0$ (сравни с рис. 7). Потенциал вида (30) был получен в [35], где впервые были рассмотрены аксиальные структуры в системах без центра инверсии.

Таким образом, модельные потенциалы (28) и (30) позволяют проанализировать физические причины, ведущие к стабилизации аксиальных структур, а большинство результатов, полученных в рамках данного приближения, подтверждаются при более строгом рассмотрении и относятся к достаточно широкому классу полевых моделей (см. [34]).

При $k = 1$ энергия (15) функционально совпадает с энергией аксиальной структуры (магнитных вихрей) в легкоосном ферромагнетике без центра инверсии в нулевом поле [27–29]. Такой же функциональный вид имеет энергия магнитного вихря в одноосном антиферромагнетике [36]. Как и в холестериках, в антиферромагнетиках без центра инверсии в модулированном состоянии геликоидальная структура всегда термодинамически устойчива, а вихревые решетки могут существовать как метастабильные образования [36].

В заключение данного параграфа отметим, что в различных нелинейных полевых моделях физики конденсированного состояния и теории элементарных частиц можно найти топологические и структурные аналоги неоднородным конфигурациям $\mathbf{n}(\mathbf{r})$, реализующимся в жидких кристаллах. Так, распределение намагниченности в геликоидальной структуре анизотропного магнетика без центра инверсии [22] совпадает с распределением директора в холестерике, помещенном во внешнее поле [21]. Вихревые структуры Костерлица–Таулеса в легкоплоскостном гейзенберговском ферромагнетике [37] аналогичны плоским дисклинациям индекса 2 в нематиках. Известно структурное и топологическое сходство между неоднородными конфигурациями в антиферромагнетиках и нематиках (см., например, [13]). Двумерные аксиальные структуры с несингулярным ядром, рассмотренные в данной работе, аналогичны вихревым состояниям в сверхпроводниках [31, 32], в жидком He^4 [38], в магнетиках [28, 29]. Существует аналогия между трехмерными дефектами в жидких кристаллах (каплями) и монополями в теории калибровочных полей [39, 40].

Такая схожесть в основных свойствах локализованных (солитонов) и нелокализованных состояний в различных физических моделях, с одной стороны, базируется на общности топологических свойств таких структур [41], а с другой стороны, является

следствием некоторых общих теорем о характере решений для различных типов нелинейных дифференциальных уравнений [34, 42].

По сравнению с другими физическими системами жидкий кристалл обладает рядом преимуществ для моделирования и изучения различных неоднородных структур. Для реализации необходимых для данного опыта условий можно в широких пределах изменять параметры системы; эксперименты, как правило, проводятся при комнатной температуре и сравнительно просты; результаты исследований имеют высокую степень наглядности, обычно недостижимую при исследовании других нелинейных сред.

Результаты теоретического рассмотрения, а также ряд экспериментальных данных позволяют считать, что холестерик во внешнем поле моделирует одноосный ферро- или антиферромагнетик без центра инверсии, а нематик — изотропный ферро- или антиферромагнетик. Более того, как показано в данной работе (см. также [29, 34]), некоторые свойства исследуемых здесь неоднородных состояний жидких кристаллов не связаны с конкретной моделью, а характерны для широкого класса систем и потому носят универсальный характер. Поэтому результаты, полученные при исследовании аксиальных структур в жидких кристаллах, могли бы быть полезны в других областях физики конденсированного состояния (в первую очередь в магнетизме), а также в теории солитонов.

4. ВОЗМОЖНЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ И ПРИЛОЖЕНИЯ

С использования электрооптических полевых эффектов в оптических устройствах на нематиках [43] началось бурное развитие прикладной физики жидких кристаллов. Несмотря на впечатляющий прогресс, дальнейшее усовершенствование устройств на жидких кристаллах (в первую очередь, цветных дисплеев) требует решения ряда сложных технологических, технических и фундаментальных проблем [44].

До последнего времени целенаправленные исследования аксиальных структур в жидких кристаллах не проводились. Выше упоминались работы по исследованию нематических структур в цилиндрических капиллярах [10, 11] и ряд работ, в которых в определенном диапазоне электрических и магнитных полей наблюдались двумерные модулированные структуры в холестериках [14–18]. В холестериках также наблюдались двумерные решетки, индуцированные механическими напряжениями и градиентами температуры [15]. Двумерные модулированные структуры также индуцируются в хиральных смектиках под действием механических напряжений и световых пучков (эффект Кана) [1, 45]. Теоретически такие пространственно-периодические структуры рассматривались как слабые периодические искажения геликоида (эффект Хельфриха–Юро) [46, 47].

Согласно результатам данной работы в жидких кристаллах без центра инверсии возможны статические двумерные модулированные состояния — решетки аксиальных структур. Эти состояния отделены от геликоидальной фазы конечным потенциальным барьером и их невозможно получить путем непрерывной деформации спиральной структуры. К сожалению, до настоящего времени не установлено распределение $\mathbf{n}(\mathbf{r})$ в объеме материалов, в которых наблюдаются двумерные модулированные структуры. Было бы важно провести такие исследования, а также изучить влияние внешних полей на параметры решеток. Согласно результатам данной работы, небольшие внешние поля приводят к значительным регулярным искажениям поля директора $\mathbf{n}(\mathbf{r})$ в решетке.

Поэтому такая работа может иметь практические приложения.

Поскольку во всей области существования модулированных структур геликоидальная фаза является термодинамически устойчивой, для индуцирования решеток необходимы специальные условия. Так, в работах [14–18] важную роль в образовании двумерных структур играли размеры плоской ячейки и характер взаимодействия холестерика с опорными поверхностями. Поэтому одно из направлений развития исследований, проведенных в данной работе, связано с расчетом модулированных структур в плоских капиллярах конечной толщины с учетом влияния горизонтальных опорных поверхностей.

Также перспективными с прикладной точки зрения представляются исследования аксиальных структур холестериков в цилиндрических капиллярах. Как показано в данной работе, распределение $n(r)$ в них легко изменяется внешними полями, что может быть использовано в различных оптических устройствах. Напомним, что аксиальные структуры нематиков с непрерывным распределением $n(r)$ экспериментально наблюдались в цилиндрических капиллярах [10, 11].

Выше обсуждалась связь между рассмотренными в работе аксиальными структурами жидких кристаллов и вихревыми состояниями магнетиков без центра инверсии. В ферромагнетике, помещенном в магнитное поле, в энергии появляется член, линейный по намагниченности. Взаимодействие с внешним полем снимает энергетическую эквивалентность антипараллельных направлений вектора структуры (в данном случае намагниченности). Это приводит к дополнительной возможности управления структурой модулированных состояний. Эволюция ферромагнитных вихревых решеток и уединенных вихрей в магнитном поле была изучена в [27–29, 35]. В частности выяснилось, что в определенном диапазоне полей достигается термодинамическая устойчивость вихревых решеток. В этой связи перспективным представляется исследование аксиальных структур в хиральных жидких кристаллах со спонтанной поляризацией (например, в смектиках S_c^* [3, 44, 48]), а также в суспензиях феррочастиц в холестериках. Основываясь на результатах работ [27–29, 35], а также данных о свойствах сегнетоэлектрических жидких кристаллов [48] и ферронематиков [49], можно ожидать образование в таких системах термодинамически устойчивых решеток аксиальных структур, легко управляемых внешними полями.

5. ВЫВОДЫ

1. Уравнения феноменологической теории упругости для нематиков имеют решения в виде аксиально-симметричных локализованных состояний с непрерывным распределением директора $n(r)$ (6); в цилиндрических капиллярах нематиков возможны аксиальные структуры с разворотом n на угол, меньший 180° . Данные решения испытывают радиальную неустойчивость во внешних полях. В магнитном поле аксиальные структуры сжимаются в плотные нити, в которых расстояния между молекулами сравнимы с их размерами. В нематиках с положительной диэлектрической анизотропией в электрическом поле также происходит коллапс аксиальных структур; если же $\Delta\epsilon < 0$, то радиальная неустойчивость проявляется в неограниченном расширении данных аксиальных образований. В рамках рассматриваемой идеальной модели неустойчивость имеет беспороговый характер и должна возникать в сколь угодно малом поле. Согласно экспериментальным данным в реальных системах должно существовать пороговое поле, ниже которого аксиальная структура устойчива.

2. «Черные нити», из которых состоит наиболее распространенный тип нематических текстур, возможно, представляют собой локализованные аксиальные структуры, сжатые воздействием случайных внешних полей. В пользу данной модели свидетельствует то, что в отличие от дисклинаций аксиальные структуры обладают конечной энергией. Известно также, что свободные «черные нити» обладают большой подвижностью; перемещение же дисклинаций сопряжено с энергетическими затратами из-за разрывов в поле директора $\mathbf{n}(\mathbf{r})$.

3. В холестериках наряду с одномерными модулированными состояниями (геликоидами) могут существовать решетки из аксиальных структур. Возможны два типа решеток: с разворотом директора на 90° и 180° . Равновесные размеры элементарных ячеек решеток сравнимы с периодом геликоида. Во всей области существования модулированного состояния решетки имеют конечные размеры; их энергии ниже энергии однородного состояния, однако незначительно превышают энергию геликоидальной фазы. Все модулированные состояния (геликоид и оба типа решеток) переходят в однородное состояние путем неограниченного роста периода в критическом магнитном поле H_c (13).

4. Выше критического поля H_c в холестериках может существовать система локализованных аксиальных структур. С ростом поля эффективные размеры таких образований уменьшаются, но они не коллапсируют даже в очень высоких полях.

5. В цилиндрических капиллярах холестериков могут существовать аксиальные структуры с ядром конечных размеров. Уже небольшие внешние поля приводят к значительным регулярным изменениям распределения $\mathbf{n}(\mathbf{r})$ в таких структурах.

6. Полученные в работе новые типы неоднородных состояний в жидких кристаллах легко меняют под действием поля свою структуру, а следовательно, и свои оптические свойства. С этим связана возможность практического применения как изолированных аксиальных структур, так и их решеток.

Локализованные аксиальные структуры и их решетки могут также существовать в хиральных жидких кристаллах со спонтанной поляризацией (например, в сегнетоэлектрических жидких кристаллах). В таких системах в определенном диапазоне полей может быть достигнута термодинамическая устойчивость решеток аксиальных структур.

Авторы благодарят фонд Александра фон Гумбольдта за предоставление вычислительной техники и литературы по жидким кристаллам. Мы глубоко признательны В. Г. Барьяхтару и А. Хуберту за обсуждение работы и ценные советы, а также А. С. Ковалеву и С. В. Тарасенко за полезные дискуссии.

Литература

1. П. Де Жен, *Физика жидких кристаллов*, Мир, Москва (1977).
2. В. Де Же, *Физические свойства жидкокристаллических веществ*, Мир, Москва (1982).
3. Н. Stegemeyer, *Liquid Crystals* ed. by Steinkopff, Springer, New York (1994).
4. И. Е. Дзялошинский, *ЖЭТФ* **58**, 1443 (1970).
5. М. J. Stephen and J. P. Straley, *Rev. Mod. Phys.* **46**, 618 (1974).
6. А. С. Пикин, *Структурные превращения в жидких кристаллах*, Наука, Москва (1981).
7. С. Чандрасекар, *Жидкие кристаллы*, Мир, Москва (1980).

8. *Liquid Crystals (Applications and Uses)*, Vols. 1, 2, 3, ed. by B. Bahadur, World Scientific, Singapore, New Jersey, London, Hong Kong (1990).
9. P. E. Cladis and M. Kleman, *J. Phys.* **33**, 591 (1972).
10. R. B. Meyer, *Philos. Mag.* **27**, 403 (1973).
11. C. Williams, P. Pieranski, and P. E. Cladis, *Phys. Rev. Lett.* **29**, 90 (1973).
12. С. И. Анисимов, И. Е. Дзялошинский, *ЖЭТФ* **61**, 2140 (1972).
13. C. Rebbi and G. Soliani, *Solitons and Particles*, World Scientific Publ. Co, Singapore (1984).
14. F. Rondelez and J. P. Hulin, *Solid State Comm.* **10**, 1009 (1972).
15. H. Hervet, J. P. Hurault, and F. Rondelez, *Phys. Rev. A* **8**, 3055 (1973).
16. F. Rondelez and H. Arnould, *Compt. Rend. B* **273**, 549 (1971).
17. G. Malet, J. Marignan, and O. Parodi, *J. de Phys. Lett.* **36**, 317 (1975).
18. J. Marignan, G. Malet, and O. Parodi, *J. de Phys.* **37**, 3365 (1976).
19. А. Н. Богданов, А. А. Шестаков, *ФНТ* **23**, 1024 (1997).
20. А. А. Белавин, А. М. Поляков, *Письма в ЖЭТФ* **22**, 503 (1975).
21. P. G. De Gennes, *Solid State Comm.* **6**, 163 (1968).
22. И. Е. Дзялошинский, *ЖЭТФ* **46**, 1420 (1964).
23. E. Sackmann, S. Melboom, and L. C. Snyder, *J. Amer. Chem. Soc.* **89**, 5982 (1967); J. Wysocki, J. Adams, and W. Haas, *Phys. Rev. Lett.* **20**, 1025 (1968).
24. G. Durand, L. Leger, F. Rondelez, and M. Veysse M, *Phys. Rev. Lett.* **22**, 227 (1969).
25. R. B. Meyer, *Appl. Phys. Lett.* **14**, 208 (1969).
26. F. J. Kahn, *Phys. Rev. Lett.* **24**, 209 (1970).
27. А. Н. Богданов, М. В. Кудинов, Д. А. Яблонский, *ФТТ* **31**, 99 (1989).
28. A. N. Bogdanov and A. Hubert, *JMMM* **138**, 255 (1994).
29. A. N. Bogdanov and A. Hubert, *Phys. Stat. Sol. (b)* **186**, 527 (1994).
30. А. Хуберт, *Теория доменных стенок в упорядоченных средах*, Мир, Москва (1977)
31. А. А. Абрикосов, *ЖЭТФ* **32**, 1442 (1957).
32. П. Де Жен, *Сверхпроводимость металлов и сплавов*, Мир, Москва (1968).
33. В. А. Беляев, В. Е. Дмитренко, *УФН* **146**, 369 (1985).
34. А. Н. Богданов, *Письма в ЖЭТФ* **95**, 178 (1995).
35. А. Н. Богданов, Д. А. Яблонский, *ЖЭТФ* **95**, 178 (1989).
36. A. Bogdanov, The 6th Joint MMM-INTERMAG Conference, Abstracts Albuquerque, New Mexico (1994).
37. J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless, *J. Phys. C* **6**, 1181 (1973).
38. R. J. Donnelly, *Quantized Vortices in Helium II*, Cambridge University Press (1991).
39. М. В. Кулик, О. Д. Лаврентович, *ЖЭТФ* **85**, 511 (1983).
40. О. Д. Лаврентович, Е. М. Терентьев, *ЖЭТФ* **91**, 2084 (1986).
41. Г. Е. Воловик, В. П. Минеев, *ЖЭТФ* **72**, 2256 (1977).
42. В. Г. Маханьков, Ю. П. Рыбаков, В. И. Санюк, *УФН* **164**, 121 (1994).
43. M. Schadt and W. Helfrich, *Appl. Phys. Lett.* **18**, 127 (1971).
44. M. Schadt, *Liquid Crystal*, ed. by Steikopff, Springer, New York (1994).
45. F. Kahn, *Appl. Phys. Lett.* **22**, 111 (1973).
46. W. Helfrich, *Appl. Phys. Lett.* **17**, 531 (1970).
47. J. P. Hurault, *J. Chem. Phys.* **59**, 2068 (1973).
48. Л. М. Блинов, Л. А. Береснев, *УФН* **143**, 391 (1984).
49. Ю. Л. Райхер, С. В. Бурьлов, А. Н. Захлевных, *ЖЭТФ* **91**, 542 (1986).