

**МЕТОД РАСЧЕТА МОДУЛЕЙ ФРАНКА
ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО КОМПЛЕКСА НА ОСНОВЕ
ЭРБИЯ**

*И.М. Тамбовцев¹, Л.А. Добрун², А.П. Ковшик³, Е.В. Аксенова⁴,
Е.И. Рюмцев⁵*

*¹⁻⁵Санкт-Петербургский государственный университет, Россия, 199034,
Санкт-Петербург, Университетская набережная 7–9*

Аннотация

Цель:

Определить модули Франка жидкокристаллического комплекса на основе эрбия.

Процедура и методы исследования:

Емкостным методом исследовано ориентирующее влияние магнитного поля на жидкокристаллический комплекс на основе эрбия. Получена зависимость эффективных значений компонент диэлектрической проницаемости комплекса от магнитного поля.

Предложен теоретический подход и численный метод определения упругих постоянных Франка на основе экспериментальной зависимости эффективных значений диэлектрической проницаемости компоненты на магнитном поле.

Результаты проведенного исследования:

Построены и объяснены зависимости диэлектрической проницаемости образца в зависимости от приложенного магнитного поля, найдены модули Франка для данного вещества.

Теоретическая/практическая значимость:

Парамагнитные нематические жидкокристаллические комплексы на основе ионов лантаноидов (лантанидомезогены), обладают высокоэффективной люминесценцией и аномально большой для жидких кристаллов анизотропией магнитной восприимчивости. Указанные свойства нематических лантанидомезогенов позволяют создавать оптические среды с линейно поляризованной люминесценцией для использования в оптоэлектронных устройствах, управляемых с помощью электрических и магнитных полей.

Ключевые слова: жидкие кристаллы, лантанидомезогены, диэлектрическая проницаемость, модули Франка, фазовый переход, эффект Фредерикса

ERBIUM-BASED LIQUID CRYSTAL COMPLEX FRANK CONSTANTS CALCULATION METHOD

I. Tambovtcev¹, E. Aksenova², L. Dobrun³, A. Kovshik⁴, E. Ryumtsev⁵

¹⁻⁵St. Petersburg State University, Russia, 199034, St. Petersburg,

Universitetskaya Embankment 7–9

Abstract

Purpose:

Determine the Frank elastic constants of an erbium-based liquid crystal complex.

Procedure and research methods:

The orienting effect of a magnetic field on an erbium-based liquid crystal complex was studied by a capacitive method. The dependence of the effective values of the components of the dielectric permittivity of the complex on the magnetic field is obtained.

A theoretical approach and a numerical method for determining the Frank elastic constants are proposed based on the experimental dependence of the effective values of the permittivity of a cell on a magnetic field.

The results of the study:

The dependences of the permittivity of the sample on the applied magnetic field explained, and Frank elastic constants for this substance are found.

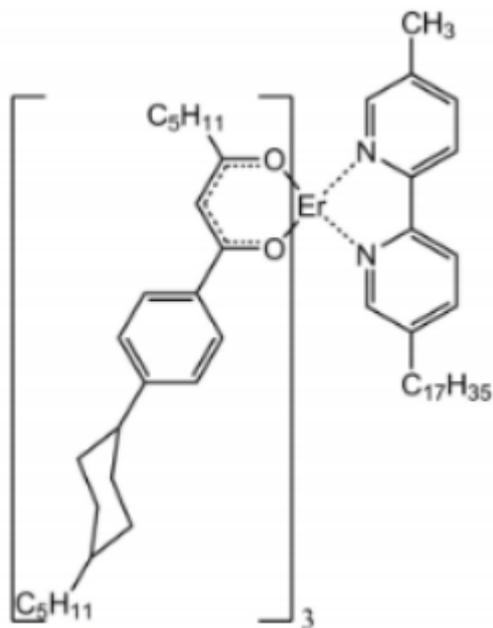
Theoretical / practical relevance:

Paramagnetic nematic liquid crystal complexes based on lanthanide ions (lanthanide mesogens) possess highly efficient luminescence and anisotropy of magnetic susceptibility is anomalously large for liquid crystals. The indicated properties of nematic lanthanide mesogens make it possible to create optical media with linearly polarized luminescence for use in optoelectronic devices controlled by electric and magnetic fields.

Key words: liquid crystals, lanthanide mesogens, dielectric permittivity, Frank elastic constants, phase transition, Fréedericksz transition

Введение

Объектом исследования являлся новый мезогенный комплекс трис[1-(4-(4-пентилциклогексил)фенил)октан-1,3-дионато]-[5-гептадецил-5'-метил-2,2'-бипиридин]эрбия. Этот комплекс $\text{Er}(\text{DDk}_{3-5})_3\text{Vpy}_{17-1}$ синтезирован в Казанском национальном исследовательском технологическом



университете [1]. Химическая структура исследуемого материала показана на рисунке 1. Комплекс эрбия образует нематическую жидкокристаллическую фазу в диапазоне температур 130–160°C.

Для

исследуемого вещества получена зависимость эффективных значений компонент диэлектрической проницаемости от величины ориентирующего магнитного поля \mathbf{H} .

Рисунок 1. Химическая структура жидкокристаллического комплекса эрбия

На основе этой зависимости численным методом найдены модули Франка для комплекса эрбия.

Методы

Предложенный численный метод состоит из двух этапов. Сначала выполняется поиск минимума свободной энергии ячейки жидкого

кристалла [2,3] $F = S \int_0^d dz \omega(z)$, где плотность свободной энергии имеет

вид

$$\omega = \frac{1}{2} \left[\left(K_{11} s \dot{\theta}^2 + K_{33} \cos^2 \theta \right) (\theta')^2 \mp \Delta \chi H^2 s \dot{\theta}^2 - \frac{\Delta \epsilon}{4\pi} \frac{U^2 d \cos^2 \theta}{\int_0^d (\epsilon_{\perp} + \Delta \epsilon \cos^2 \theta)^{-1} dz} \right].$$

В качестве граничных условий рассматриваются модели жесткого и мягкого сцепления (потенциал Рапини) с различными условиями преднаклона на границах. Здесь знак « \mp » соответствует магнитному полю \mathbf{H} , перпендикулярному измерительному электрическому полю, а знак « $+$ » – магнитному полю, параллельному измерительному электрическому полю. Эта модель также позволяет учитывать неоднородность электрического поля внутри образца.

На втором этапе решается обратная задача по нахождению модулей Франка K_{11} и K_{33} путем минимизации отклонения в рамках метода наименьших квадратов [4].

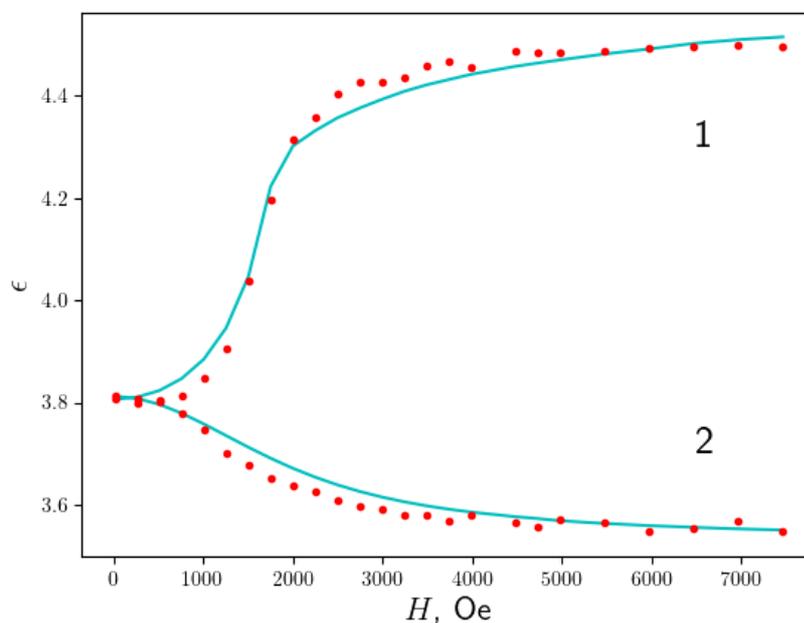


Рисунок 2. Зависимость эффективной диэлектрической проницаемости образца от приложенного магнитного поля (1 – в направлении параллельном и 2 – перпендикулярном направлению измерительного электрического поля): экспериментальные данные (точки) и результаты расчетов (сплошные линии)

На рисунке 2 представлены экспериментальные и теоретические зависимости эффективной диэлектрической проницаемости образца от

приложенного магнитного поля, иллюстрирующие результаты нашего исследования. Совпадение рассчитанных и экспериментальных данных показывает, что предложенный способ позволяет достичь высокой точности при использовании небольшого количества экспериментальных данных. Это утверждение подтверждается исследованием оценки ошибок.

Это исследование состояло из трех частей: в первую очередь было необходимо оценить способность метода находить минимум на данных без шума. Для этого, полагая K_{11} и K_{33} фиксированными, определялась теоретическая зависимость диэлектрической проницаемости образца от магнитного поля, после чего по полученной зависимости определялись K_{11} и K_{33} , соответствующие минимуму отклонения в рамках метода наименьших квадратов. Таким образом было выяснено, что на синтетических данных метод может давать точность вплоть до четвертого знака. Вторым этапом была проверка метода на жидком кристалле, для которого модули Франка хорошо известны. В качестве такого объекта был использован распространённый жидкий кристалл 5СВ. Для 5СВ были рассчитаны значения модулей Франка K_{11} и K_{33} . Они совпали с полученными с помощью других экспериментальных методов значениями с точностью в пределах 5%.

В заключительной части исследования с помощью описанного метода были определены модули Франка K_{11} и K_{33} для комплекса эрбия и проведена оценка их погрешностей:

$$K_{11} = (7 \pm 6) 10^{-6} \text{ дин}, K_{33} = (6.7 \pm 0.5) 10^{-4} \text{ дин}.$$

Заключение

Как можно видеть, этот метод не может предоставить точную информацию о модуле K_{11} для комплекса эрбия, но, по крайней мере, метод дает нам информацию, что модуль K_{11} в несколько раз меньше, чем K_{33} . Предложенный метод не обладает такой высокой точностью, как,

например, оптические методы, но может быть полезным для некоторых особых случаев, когда другие более точные методы оказываются неприменимыми. Следует отметить, что значения модулей Франка для комплекса эрбия оказались достаточно большими по сравнению с обычными жидкокристаллическими соединениями.

ЛИТЕРАТУРА

1. Dzhabarov, V.I.; Knyazev, A.A.; Strelkov, M.V.; Molostova, E.Y.; Schustov, V.A.; Haase, W.; Galyametdinov, Y.G. *Liq. Cryst.* 2010, 37, 285–291.
2. Stewart, I.W. *The Static and Dynamic Continuum Theory of Liquid Crystals: A Mathematical Introduction*, Liquid Crystals Book Series; Taylor & Francis: London, UK, 2004.
3. Val'kov, A.Y.; Aksenova, E.V.; Romanov, V.P. *Phys. Rev. E* 2013, 87, 022508.
4. Aksenova E.; Dobrun L.; Kovshik A.; Ryumtsev E.; Tambovtcev I. *Crystals* 2019, 9, 499.

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

Аксенова Елена Валентиновна – д.ф.-м.н., профессор кафедры статистической физики, Санкт-Петербургский государственный университет; e-mail: e.aksenova@spbu.ru

Петров Иван Иванович – ученая степень, должность, место работы; e-mail:

INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

Elena V. Aksenova – Dr. Sc., professor, Saint Petersburg State University; e-mail: e.aksenova@spbu.ru

Ivan I. Petrov – degree, position, place of work; e-mail: