#### ПРАВИТЕЛЬСТВО РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

### ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ «САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ» (СП6ГУ)

Кафедра статистической физики Направление «Физика»



Влияние флексоэлектрического эффекта на переход Фредерикса в холестерических жидких кристаллах

Магистерская диссертация студента
Оскирко Антона Дмитриевича
Научный руководитель:
д.фм.н., проф. Ульянов С.В.
Рецензент:
к.фм.н. <b>Черняк К. Г.</b>

Санкт-Петербург 2016

### Оглавление

Введение		3
1	Свободная энергия	6
2	Равновесная структура ХЖК во внешнем электрическом поле	12
3	Устойчивость планарной геликоидальной структуры ХЖК	18
4	Разложение по низшим гармоникам и модель Ландау	<b>24</b>
Заключение		26
Список литературы		27

2

#### Введение

Жидкие кристаллы (ЖК) представляют собой вещества, совмещающие в себе свойства жидкостей и твёрдых тел. Наиболее исследованными среди них являются нематические (НЖК) и холестерические жидкие кристаллы (ХЖК). Чаще всего молекулы этих веществ имеют вытянутую (стержневидную) форму. Направление вдоль вытянутой оси молекулы можно обозначить единичным вектором а. Усреднение векторов а по физически бесконечно малому объёму после нормировки даёт единичный вектор n, называемый директором. Директор **n** является важнейшей переменной, позволяющей описывать искажения структуры жидкого кристалла в приближении механики сплошной среды. При температурах выше некоторой критической ЖК находятся в изотропной фазе, в которой директор не определён (нет выделенного направления), а при температуре ниже критической – в упорядоченной, в которой директор показывает направление преимущественной ориентации молекул в данной точке. Другой тип веществ, для которых наблюдается нематическая или холестерическая упорядоченность – это вещества, образованные дискообразными молекулами. В этом случае вектор а направлен также вдоль оси симметрии молекулы.

Важной особенностью ЖК является способность к переориентации во внешнем поле, как в магнитном, так и в электрическом. Это явление, открытое в 1927 году, называется эффектом Фредерикса [1]. Именно благодаря этому свойству ЖК используются для создания систем вывода информации (дисплеев), переключаемых дифракционных решёток, беззеркальных лазеров и т.д. [2–7].

Несмотря на то, что эффект Фредерикса изучался в течение долгого времени и во многих случаях описан как теоретически, так и экспериментально [8–10], в последнее десятилетие интерес к его изучению возрос [11–13]. Большинство исследований идут в сторону усложнения систем и условий, в которых они находятся: рассматриваются различные типы ЖК, геометрии ячеек и граничные условия. Это в первую очередь связано с возможностью создания систем, обладающих заданными свойствами для потенциальных технических приложений.

Данная работа посвящена изучению влияния внешнего электрического поля на ориентационную структуру ХЖК с учётом флексоэлектрического эффекта. В отсутствие внешних воздействий равновесная структура ХЖК представляет собой планарную геликоидальную структуру: в любой плоскости, перпендикулярной некоторой оси, директор распределён равномерно, а вдоль этой оси распределение имеет вид пространственной спирали, в котором директор равномерно вращается вокруг оси. Если ХЖК находится в контакте с ориентирующей поверхностью, то направление оси, определяющей пространственное вращение директора, фиксируется. В данной работе изучается ячейка, представляющая собой две проводящие плоскопараллельные пластины, пространство между которыми заполнено ХЖК, и ось спирали перпендикулярна ограничивающим плоскостям. Особенность данной работы в том, что производится учёт вклада флексоэлектрической поляризации в свободную энергию ХЖК.

Поляризацию, появляющуюся в ЖК в результате искажения поля директора, называют флексоэлектрической. Флексоэлектрический эффект бывает как прямым, так и обратным. Первым теоретически описал этого явления Майер в 1969 году [14]. Он дал объяснение дипольному механизму появления флексоэлектрической поляризации для молекул банано- или клиновидной формы, обладающих собственным дипольным моментом (см. Рис. 1).



Рис. 1: Появление флексоэлектрической поляризации у молекул специальной формы. Неискажённые состояния для молекул соответственно клиновидной (а) и банановидной (с) формы. Поперечный изгиб, флексоэлектрическая поляризация направлена вправо (b). Продольный изгиб, флексоэлектрическая поляризация направлена вниз (d).

Однако, как показал Прост в 1977 году, этот механизм не является единственным [15]. Он объяснил второй известный ныне механизм флексоэлектричества: квадрупольный. На рис. 2а изображена неискажённая структура из молекул, не обладающих собственным дипольным моментом, но обладающих квадрупольным моментом, поляризация в каждом слое равна нулю. На рис. 2b изображена группа таких же молекул, которые подвержены деформации поперечного изгиба. Видно, что в верхней части области 2 положительный заряд увеличен за счёт квадруполя из области 1. В то же время, положительный заряд внизу области 2 уменьшился за счёт того, что квадруполи частично перешли в область 3. Таким образом, данная структура начинает обладать собственным дипольным моментом, направленным вверх, и к ней можно применить всё то, что было сказано про полярные молекулы.



Рис. 2: Симметричные молекулы – поперечный изгиб

Величина вклада флексоэлектрической поляризации в свободную энергию пропорциональна сумме флексоэлектрических коэффициентов ( $e_1+e_3$ ), [9]. Характерные значения ( $e_1+e_3$ ) лежат в пределах от  $10^{-4}esu/cm$  до  $10^{-3}esu/cm$ [16] (единицы и десятки пКл/м), однако были обнаружены системы [17, 18], для которых коэффициент  $e_3$  составляет  $10^{-1}esu/cm$  (единицы нКл/м), однако эти данные ещё не были подтверждены.

В данной работе исследуется влияние флексоэлектрической поляризации на напряжение, индуцирующее переход Фредерикса в ХЖК при различных параметрах системы, таких как сумма флексоэлектрических коэффициентов, жёсткие и мягкие, симметричные и несимметричные граничные условия и др. В первом разделе рассмотрено выражение для свободной энергии ХЖК, отдельно рассмотрен вклад флексоэлектрической поляризации. Во втором разделе получены уравнения Эйлера-Лагранжа на равновесную конфигурацию ХЖК, исключён из описания азимутальный угол. При помощи численной минимизации функционала свободной энергии найдены равновесные конфигурации при различных условиях. В третьем разделе рассматривается устойчивость основного состояния ХЖК (планарной геликоидальной структуры). В четвёртом разделе при помощи теории Ландау и разложения энергии по низшей гармонике оценено критическое поле перехода Фредерикса и проанализирован характер перехода. В пятом разделе подведены итоги исследования.

### 1 Свободная энергия

Рассмотрим XЖК, находящийся между двумя плоскопараллельными пластинами, расположенными на расстоянии *L* друг от друга. Ограничивающие пластины считаются проводящими, и к ним подводится изменяемое напряжение *U*, таким образом, система имеет вид плоского конденсатора.



Рис. 3: Ячейка ХЖК в декартовой системе координат.

Введём декартову систему координат, направив ось z перпендикулярно пластинам (Рис. 3). Будем считать, что размер ограничивающих пластин много больше расстояния L между ними. В этом случае физические характеристики рассматриваемой системы можно считать зависящими от координаты z:  $\mathbf{n}(\mathbf{r}) = \mathbf{n}(z)$ ,  $\mathbf{E} = \mathbf{E}(z)$ .

Вклад в свободную энергию XЖК, связанный с искажениями поля директора, может быть представлен в виде суммы четырёх слагаемых (1)

$$\mathcal{F}_{\text{tot}} = \mathcal{F}_{\text{e}} + \mathcal{F}_{\text{sf}} + \mathcal{F}_{\text{f}} + \mathcal{F}_{\text{fl}}.$$
 (1)

Первое из них,  $\mathcal{F}_{e}$ , – упругая энергия ЖК (энергия Франка) [9]:

$$\mathcal{F}_{\rm e} = \frac{S_{\perp}}{2} \int_{l_1}^{l_2} \left[ K_{11} (\operatorname{div} \mathbf{n})^2 + K_{22} (\mathbf{n} \operatorname{rot} \mathbf{n} + q_0)^2 + K_{33} (\mathbf{n} \times \operatorname{rot} \mathbf{n})^2 \right] dz.$$
(2)

Здесь  $S_{\perp}$  – площадь ограничивающих пластин,  $K_{ii}$  – модули Франка,  $\pi/q_0$  – период спирали ХЖК.

Второе слагаемое в выражении (1) – энергия сцепления XЖК с подложкой:

$$\mathcal{F}_{\rm sf} = \frac{S_{\perp}}{2} \sum_{\alpha=1,2} w_j \left( \mathbf{n}(l_{\alpha}), \, \mathbf{n}^{0(\alpha)} \right), \quad l_1 = 0, \quad l_2 = L. \tag{3}$$

Здесь функции  $w_{\alpha}$  зависят от направлений директора на границах  $\mathbf{n}(l_{\alpha})$ , а также от направления осей лёгкого ориентирования  $\mathbf{n}^{0(\alpha)}$  (для гомеортропной ориентации – вдоль оси z, для планарной – перпендикулярно ей). Функции  $w_{\alpha}$  в выражении (3) обращаются в 0, когда директор на границе направлен вдоль соответствующей оси лёгкого ориентирования.

Третье слагаемое в выражении (1) – энергия электрического поля в диэлектрике:

$$\mathcal{F}_{\rm f} = -\frac{S_{\perp}}{2} \int_{0}^{L} \frac{(\mathbf{D}, \mathbf{E})}{4\pi} \, dz. \tag{4}$$

Тензор диэлектрической проницаемости в одноосном ЖК имеет следующий вид (1):

$$\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{\parallel} n_i n_j + \varepsilon_{\perp} (\delta_{ij} - n_i n_j),$$

где  $\varepsilon_{\parallel}$  и  $\varepsilon_{\perp}$  – диэлектрические проницаемости вдоль и поперёк вектора директора. Здесь индексы *i* и *j* пробегают значения 1, 2, 3, что соответствует пространственным координатам *x*, *y*, *z*. Для вектора электрической индукции в одноосной среде имеем:

$$\mathbf{D} = \varepsilon_{\perp} \mathbf{E} + \varepsilon_a(\mathbf{E}, \mathbf{n}) \mathbf{n}, \quad \varepsilon_a = \varepsilon_{\parallel} - \varepsilon_{\perp}, \tag{5}$$

где  $\varepsilon_a$  – величина анизотропии диэлектрической проницаемости,

Четвёртое слагаемое в выражении (1) – энергия, возникающая из-за наличия дополнительной, флексоэлектрической, поляризации [9], возникающей благодаря искажениям поля директора ХЖК. В случае малых искажений поля директора наиболее общее выражение для *i*-ой компоненты вектора флексоэлектрической поляризации имеет вид:

$$P_i^{\text{flex}} = f_{ijk} \partial_k n_j, \tag{6}$$

где  $f_{ijk}$  – флексоэлектрический тензор; по повторяющимся индексам подразумевается суммирование. Тензор  $f_{ijk}$  может быть сконструирован из компонент директора **n** и символа Кронекера. С учётом инвариантности свободной энергии по отношению к замене **n** на –**n**, тензор  $f_{ijk}$  может содержать **n** лишь в нечётной степени. С учётом этих требований, приходим к наиболее общему виду флексоэлектрического тензора:

$$f_{ijk} = e_1 n_i \delta_{jk} + e_2 n_j \delta_{ik} + e_3 n_k \delta_{ij} + e_4 n_i n_j n_k, \tag{7}$$

где  $e_1, e_2, e_3, e_4$  – флексоэлектрические коэффициенты.

Подстановка выражения (7) в формулу (6) приводит к следующим четырём слагаемым:

$$e_{1}n_{i}\delta_{jk}\partial_{k}n_{j} = e_{1}n_{i}\partial_{j}n_{j} = e_{1}n_{i}\operatorname{div}\mathbf{n},$$

$$e_{2}n_{j}\delta_{ik}\partial_{k}n_{j} = e_{2}n_{j}\partial_{i}n_{j} = 0,$$

$$e_{3}n_{k}\delta_{ij}\partial_{k}n_{j} = e_{3}(\mathbf{n}, \nabla)n_{i} = e_{3}\left[\operatorname{rot}\mathbf{n}\times\mathbf{n}\right]_{i},$$

$$e_{4}n_{i}n_{j}n_{k}\partial_{k}n_{j} = 0.$$

Здесь учтено, что  $\mathbf{n}^2 = 1$ , и, следовательно,  $n_i \partial_j n_i = 0$ . Таким образом, вектор флексоэлектрической поляризации можно представить в виде:

$$\mathbf{P}^{\text{flex}} = e_1 \mathbf{n} \operatorname{div} \mathbf{n} + e_3 \left[ \operatorname{rot} \mathbf{n} \times \mathbf{n} \right].$$
(8)

Вклад в свободную энергию от взаимодействия флексоэлектрической поляризации с внешним электрическим полем будет иметь вид:

$$\mathcal{F}_{\text{flex}} = -S_{\perp} \int_{0}^{L} (\mathbf{P}^{\text{flex}}, \mathbf{E}) dz =$$
$$= -S_{\perp} \int_{0}^{L} \left[ e_1(\mathbf{n}, \mathbf{E})(\nabla, \mathbf{n}) + e_3(\mathbf{n}, \nabla)(\mathbf{n}, \mathbf{E}) \right] dz.$$

Переход к сферической системе координат Введём сферическую систему координат, в которой полярный угол  $\theta$  отсчитывается от оси z, а азимутальный угол  $\varphi$  – от оси x (Рис. 4)



Рис. 4: Сферическая система координат

Вектор директора при этом будет иметь координаты

$$\mathbf{n} = \begin{pmatrix} \sin\theta\cos\varphi\\ \sin\theta\sin\varphi\\ \cos\theta \end{pmatrix};$$

Свободная энергия может быть представлена в виде функционала углов  $\theta = \theta(z)$  и  $\varphi = \varphi(z)$ . Выпишем компоненты единственной отличной от нуля пространственной производной директора:

$$\partial_z \mathbf{n} = \begin{pmatrix} \theta' \cos \theta \cos \varphi - \varphi' \sin \theta \sin \varphi \\ \theta' \cos \theta \sin \varphi + \varphi' \sin \theta \cos \varphi \\ -\theta' \sin \theta \end{pmatrix}.$$

Здесь штрихом обозначена производная по z. Отсюда следует:

div 
$$\mathbf{n} = -\theta' \sin \theta$$
,  
rot  $\mathbf{n} = \begin{pmatrix} -\theta' \cos \theta \sin \varphi - \varphi' \sin \theta \cos \varphi \\ \theta' \cos \theta \cos \varphi - \varphi' \sin \theta \sin \varphi \\ 0 \end{pmatrix}$ . (9)

После подстановки выражения (9) в выражение (2) и простых преобразований получим выражение для упругой энергии Франка имеем:

$$\mathcal{F}_{\rm e} = \frac{V}{2} K_{22} q_0^2 + \frac{S_\perp}{2} \int_{l_1}^{l_2} \left[ \mathcal{A}(\theta)(\theta')^2 + \mathcal{B}(\theta)(\varphi')^2 - \mathcal{C}(\theta)\varphi' \right] dz.$$
(10)

Здесь введены обозначения:

$$\mathcal{A}(\theta) = K_{11} \sin^2 \theta + K_{33} \cos^2 \theta,$$
  

$$\mathcal{B}(\theta) = \sin^2 \theta \left( K_{22} \sin^2 \theta + K_{33} \cos^2 \theta \right),$$
  

$$\mathcal{C}(\theta) = q_0 K_{22} \sin^2 \theta.$$
  
(11)

Для небольших отклонений директора от осей лёгкого ориентирования в энергии сцепления с подложкой (3) используем квадратичную аппроксимацию функций  $w_{\alpha}$  по разностям ( $\theta - \theta_0^{(\alpha)}$ ) и ( $\varphi - \varphi_0^{(\alpha)}$ ). Подобный потенциал был впервые предложен для описания взаимодействия ЖК с ориентирующими поверхностями Рапини и Популаром [19]

$$w_{\alpha}\left(\mathbf{n}(l_{\alpha}), \mathbf{n}^{0(\alpha)}\right) = w_{\alpha}(\theta, \varphi) =$$

$$= W_{\theta}^{(\alpha)}\left(\theta - \theta_{0}^{(\alpha)}\right)^{2} + W_{\varphi}^{(\alpha)}\left(\varphi - \varphi_{0}^{(\alpha)}\right)^{2}, \quad W_{\theta}^{(\alpha)}, \ W_{\varphi}^{(\alpha)} > 0.$$
(12)

Здесь через  $\theta_0^{(\alpha)}$  и  $\varphi_0^{(\alpha)}$ ,  $\alpha = 1$ , 2 обозначены углы направлений лёгкого ориентирования директора на верхней и нижней границах ячейки. Модули упругости, отвечающие взаимодействию вектора директора с ограничивающими поверхностями, обозначены через  $W_{\theta}^{\alpha}$  и  $W_{\varphi}^{\alpha}$ ,  $\alpha = 1, 2$ .

Преобразуем выражение (4) для вклада электрического поля в свободную энергию XЖК. В отсутствие свободных зарядов имеем уравнение div  $\mathbf{D} = 0$ , которое в рассматриваемой системе имеет вид:

$$\partial_z D_z = 0, \quad D_z = const.$$
 (13)

На электрическое поле **E** наложены граничные условия  $E_{x,y}(z = 0, L) = 0$ . Также, с учётом статичности задачи, имеет место уравнение rot **E** = 0; его сочетание с граничными условиями приводит к выводу, что поле **E** имеет единственную ненулевую компоненту:

$$\mathbf{E}(z) = (0, 0, E(z))^T, \tag{14}$$

которая связана с компонентой  $D_z$  вектора электрической индукции соотношением, вытекающим из формулы (5):

$$D_z = \mathcal{E}(\theta) E(z),\tag{15}$$

где введено обозначение

$$\mathcal{E}(\theta) = \varepsilon_{\perp} + \varepsilon_a \cos^2 \theta(z). \tag{16}$$

Напряжение U, приложенное к ограничивающим пластинам, и поле **E** в ячейке ЖК связаны соотношением:

$$U = \int_{0}^{L} E(z) \, dz.$$
 (17)

Если в выражении (17) учесть связь (15) и постоянство компоненты  $D_z$ , получим, что

$$D_z = UJ. \tag{18}$$

Здесь

$$J = \left(\int_{0}^{L} \frac{dz}{\mathcal{E}(\theta)}\right)^{-1}$$

Окончательное выражение для вклада внешнего электрического поля в свободную энергию получается, если в формуле (4) учесть соотношения (15) и (18):

$$\mathcal{F}_{\rm f} = -\frac{S_\perp}{2} \cdot \frac{1}{4\pi} U^2 \cdot J,\tag{19}$$

Из-за того, что **E** содержит единственную ненулевую компоненту (14), для записи вклада флексоэлектрической поляризации в свободную энергию необходимо найти только  $P_z^{\text{flex}}$ . Используя формулы (9) в выражении (8), находим:

$$P_z^{\text{flex}} = (e_1 + e_3)n_z \partial_z n_z = (e_1 + e_3)\cos\theta \,\partial_z \cos\theta$$

Выражения (15) и (17), связывающие *E*, *U* и *D*<sub>z</sub>, позволяют записать для флексоэлектрического вклада в свободную энергию:

$$\mathcal{F}_{\text{flex}} = -S_{\perp}UJ \int_{0}^{L} \frac{(e_1 + e_3)\cos\theta(\cos\theta)'_z \, dz}{\mathcal{E}(\theta)}$$

Интеграл вычисляется при помощи простой замены переменной. Окончательная формула для вклада флексоэлектрической поляризации в свободную энергию:

$$\mathcal{F}_{\text{flex}} = S_{\perp} \frac{\overline{e}_{13}}{\varepsilon_a} J_1 U J; \tag{20}$$

здесь введены обозначения:

$$\overline{e}_{13} = (e_1 + e_3)/2,$$

$$J_1 = \ln \mathcal{E}(\theta(0)) - \ln \mathcal{E}(\theta(L)).$$
(21)

Из выражения (20) видно, что в случае жёстких симметричных граничных условий флексоэлектрический эффект не проявляется, так как соответствующий вклад в свободную энергию пропорционален  $J_1$ , который, в соответствии с выражением (21), при одинаковых значениях угла  $\theta$  на границах обращается в ноль.

Полное выражение для свободной энергии ЖК получаем, объединяя формулы (10), (12), (19) и (20):

$$\mathcal{F}_{\text{tot}} = \frac{V}{2} K_{22} q_0^2 + \frac{S_{\perp}}{2} \int_0^L \left[ \mathcal{A}(\theta)(\theta')^2 + \mathcal{B}(\theta)(\varphi')^2 - 2\mathcal{C}(\theta)\varphi' \right] dz + \frac{S_{\perp}}{2} \sum_{j=1,2} \left[ W_{\theta}^{(\alpha)} \left(\theta - \theta_0^{(\alpha)}\right)^2 + W_{\varphi}^{(\alpha)} \left(\varphi - \varphi_0^{(\alpha)}\right)^2 \right] + S_{\perp} \left( -\frac{U^2}{8\pi} + \frac{\overline{e}_{13}}{\varepsilon_a} J_1 U \right) J \quad (22)$$

# 2 Равновесная структура XЖК во внешнем электрическом поле

Необходимое условие минимума свободной энергии ХЖК  $\mathcal{F}_{tot}$  состоит в обращении в ноль её первой вариации  $\delta \mathcal{F}_{tot}$  для произвольных  $\delta \theta(z)$  и  $\delta \varphi(z)$ ,  $z \in [0; L]$ . Выполнение этого равенства на интервале  $z \in (0; L)$  приводит к

уравнениям Эйлера-Лагранжа для рассматриваемой задачи. Обращение первой вариации в ноль в точках z=0 и z=L приводит к граничным условиям.

Первая вариация свободной энергии имеет вид:

$$\delta \mathcal{F}_{\text{tot}} = \frac{S_{\perp}}{2} \int_{0}^{L} \left[ \frac{d\mathcal{A}}{d\theta} \, \theta'^{2} \delta \theta + 2\mathcal{A} \theta' (\delta \theta)' + \frac{d\mathcal{B}}{d\theta} \, \varphi'^{2} \delta \theta + 2\mathcal{B} \varphi' (\delta \varphi)' - 2 \frac{d\mathcal{C}}{d\theta} \, \varphi' \delta \theta - 2\mathcal{C} (\delta \varphi)' \right] \, dz + S_{\perp} \sum_{\alpha=1,2} \left( W_{\theta}^{(\alpha)}(\theta - \theta_{0}^{(\alpha)}) \delta \theta(l_{\alpha}) + W_{\varphi}^{(\alpha)}(\varphi - \varphi_{0}^{(\alpha)}) \delta \varphi(l_{\alpha}) \right) + S_{\perp} \left( -\frac{U^{2}}{8\pi} + \frac{\overline{e}_{13}}{\varepsilon_{a}} J_{1} U \right) J^{2} \int_{0}^{L} \frac{d\mathcal{E}}{d\theta} \, \mathcal{E}^{-2} \delta \theta \, dz - S_{\perp} \, \frac{\overline{e}_{13}}{\varepsilon_{a}} JU \frac{d\mathcal{E}}{d\theta} \, \mathcal{E}^{-1} \delta \theta \Big|_{0}^{L}.$$
(23)

После интегрирования по частям членов  $2\mathcal{A}\theta'(\delta\theta)', -2\mathcal{B}\varphi'(\delta\varphi)'$  и  $-2\mathcal{C}(\delta\varphi)'$  в выражении (23) условие равенства нулю подынтегральных множителей при  $\delta\theta(z)$  и  $\delta\varphi(z)$  даёт систему уравнений Эйлера-Лагранжа в виде

$$\frac{d\mathcal{A}}{d\theta}\,\theta'^2 + 2\mathcal{A}\theta'' = \frac{d\mathcal{B}}{d\theta}\,\varphi'^2 - 2\frac{d\mathcal{C}}{d\theta}\,\varphi' + \left(-\frac{U^2}{4\pi} + \frac{2\overline{e}_{13}}{\varepsilon_a}J_1U\right)\frac{d\mathcal{E}}{d\theta}\,\mathcal{E}^{-2}J^2,\qquad(24)$$

$$\frac{d}{dz}\left(\mathcal{B}\varphi'-\mathcal{C}\right)=0.$$
(25)

13

Из-за множителя  $J^2$  уравнение (24) является интегро-дифференциальным.

Требование обращения в ноль множителей при  $\delta \theta$  и  $\delta \varphi$  для  $z = l_1 = 0$  и  $z = l_2 = L$  во внеинтегральных членах дает условия

$$\left(2(-1)^{\alpha}[\mathcal{A}(\theta)\theta' - \overline{e}_{13}UJ\sin 2\theta/\mathcal{E}(\theta)] + W_{\theta}^{(\alpha)}(\theta - \theta_{0}^{(\alpha)})\right)\Big|_{z=l_{\alpha}} = 0, \qquad (26)$$

$$\left(2(-1)^{\alpha}(\mathcal{B}\varphi'-\mathcal{C})+W_{\varphi}^{(\alpha)}(\varphi-\varphi_{0}^{(\alpha)})\right)\Big|_{z=l_{\alpha}}=0, \quad \alpha=1, \ 2.$$
(27)

Равенства (26) и (27) будем называть граничными условиями, хотя первое из них, строго говоря, не является чисто граничным, поскольку кроме значений  $\theta(z)$  на границах z = 0 и z = L содержит также множитель J, зависящий от всех значений  $\theta(z)$  внутри образца.

При помощи уравнений Эйлера-Лагранжа оказывается возможным исключить функцию  $\varphi(z)$  и фактически получить выражение для энергии деформации в окрестности равновесной конфигурации. Из уравнения (25) имеем:

$$\varphi' = \frac{C_1 + \mathcal{C}(\theta)}{\mathcal{B}(\theta)},\tag{28}$$

где  $C_1$  – произвольная константа. Подставляя  $\varphi'$  в выражение для объёмной упругой энергии (10), получаем

$$\mathcal{F}_{\rm e} = \frac{V}{2} K_{22} q_0^2 + \frac{S_\perp}{2} \int_0^L \left[ \mathcal{A}(\theta)(\theta')^2 + \frac{C_1^2 - \mathcal{C}^2(\theta)}{\mathcal{B}(\theta)} \right] dz.$$
(29)

Интегрируя выражение (28) от 0 до L, находим:

$$\varphi_{\text{tot}} = C_1 I_1 + I_2, \tag{30}$$

где  $\varphi_{\text{tot}} = \varphi(L) - \varphi(0),$ 

$$I_1 = \int_0^L \frac{dz}{\mathcal{B}(\theta)}, \ I_2 = \int_0^L \frac{\mathcal{C}(\theta)}{\mathcal{B}(\theta)} dz.$$

Совмещая граничное условие (27) и выражение (28), получаем:

$$\varphi(l_{\alpha}) = \varphi_0^{(\alpha)} + (-1)^{\alpha+1} C_1 / W_{\varphi}^{(\alpha)}, \ \alpha = 1, 2,$$
(31)

откуда

$$\varphi_{\text{tot}} - \varphi_{\text{tot}}^{(0)} = -2C_1 / W_{\varphi}^h, \qquad (32)$$

где  $\varphi_{\text{tot}}^{(0)} = \varphi_0^{(2)} - \varphi_0^{(1)}$ . Здесь через  $W_{\varphi}^h$  обозначено среднее гармоническое модулей  $W_{\varphi}^{(1)}$  и  $W_{\varphi}^{(2)}$ ,

$$W_{\varphi}^{h} = \frac{2W_{\varphi}^{(1)}W_{\varphi}^{(2)}}{W_{\varphi}^{(1)} + W_{\varphi}^{(2)}}.$$

Наконец, подставляя  $\varphi_{tot}$  из (32) в (30), и выражая из полученного равенства  $C_1$ , находим

$$C_1 = \frac{\varphi_{\text{tot}}^{(0)} - I_2}{I_1 + 2/W_{\varphi}^h}.$$
(33)

Замещая данным выражением  $C_1$  в (29), находим  $\mathcal{F}_{tot}$ , как функционал лишь от  $\theta(z)$ :

15

$$\mathcal{F}_{\text{tot}}(\theta) = \frac{V}{2} K_{22} q_0^2 + \frac{S_{\perp}}{2} \int_0^L \left( \mathcal{A}(\theta)(\theta')^2 - \frac{\mathcal{C}^2(\theta)}{\mathcal{B}(\theta)} \right) dz + S_{\perp} \left( \frac{\overline{e}_{13}}{\varepsilon_a} J_1 U - \frac{U^2}{8\pi} \right) J + \frac{S_{\perp}}{2} \left( W_{\theta}^{(1)} \left( \theta(0) - \theta_0^{(1)} \right)^2 + W_{\theta}^{(2)} \left( \theta(L) - \theta_0^{(2)} \right)^2 \right) + \frac{S_{\perp}}{2} \frac{\left( \varphi_{\text{tot}}^{(0)} - I_2 \right)^2}{I_1 + 2/W_{\varphi}^h}.$$
 (34)

Стоит отметить, что функционал (34) по определению описывает только равновесные по углу  $\varphi$  конфигурации XЖК.

Уравнение (24) является интегро-дифференциальным и сложно для анализа, поэтому равновесные конфигурации системы исследовались при помощи численной минимизации функционала (34).

Численная минимизация производилась в системе Matlab. При этом искомая функция  $\theta(z)$  представлялась - в виде суммы трёх слагаемых:

$$\theta(z) = \pi/2 + \psi(z, \delta_1, \delta_2) + \sum_{n=1}^{N} c_n \sin(\pi n z/L), \qquad (35)$$

где  $\pi/2$  отвечает неискажённому основному состоянию, функция  $\psi(z, \delta_1, \delta_2)$ описывает искажения, порождаемые отклонения угла  $\theta$  от осей лёгкого ориентирования на границах, а отрезок ряда Фурье описывает исключительно объёмные искажения, не затрагивающие границы. Варьируемые параметры – это отклонения от осей лёгкого ориентирования  $\delta_1$  и  $\delta_2$ , а также коэффициенты отрезка ряда Фурье  $c_n$ , n = 1, 2, ..., N.

Материальные константы вещества такие же, как в работе [20]:  $K_{11} = 0.42 \times 10^{-6}$  дин,  $K_{22} = 0.23 \times 10^{-6}$  дин,  $K_{33} = 0.53 \times 10^{-6}$  дин,  $q_0 = 500 \text{ см}^{-1}$ , L = 60 мкм,  $W_{\theta}^{(1)} = 2.5 \times 10^{-3} \text{ эрг/см}^2$ ,  $W_{\theta}^{(2)} = 0.5 \times 10^{-3} \text{ эрг/см}^2$ ,  $W_{\varphi}^{(1)} = 2.5 \times 10^{-4} \text{ эрг/см}^2$ ,  $W_{\varphi}^{(2)} = 1.0 \times 10^{-4} \text{ эрг/см}^2$ . В отсутствие поля в равновесной структуре при движении вдоль оси *z* директор поворачивается в плоскости (x, y) на угол  $q_0L = 3.0$  рад, диэлектрические проницаемости ЖК:  $\varepsilon_{\perp} = 7.2$ ,  $\varepsilon_{\parallel} = 16.2$ . Это позволит сравнить результаты расчётов в случае  $\overline{e}_{13} = 0$  с полученными в работе [20].

Для выяснения достаточного числа членов в ряде Фурье построим профили углов  $\theta$  и  $\varphi$  для  $\overline{e}_{13} = 0 \, esu/cm$ , U = 0.9869 В (критическое поле перехода Фредерикса для данной системы, найденное в работе [20]). Результаты приведены на рис. 5



Рис. 5: Расчётные профили углов  $\theta(z)$  и  $\varphi(z)$  при  $\overline{e}_{13} = 0$ , U = 0.9869 В, найденные при различном числе членов ряда Фурье: «1»: N = 2, «2»: N = 4, «3»: N = 20.

Видно, что учёт более, чем четырёх членов ряда Фурье не увеличивает точности расчётов. Кроме того, в ряде Фурье коэффициенты при старших гармониках на несколько порядков ниже, чем при N ≤ 4. В дальнейшем полагается, что четырёх членов в ряде Фурье достаточно и для анализа системы с флексоэлектрическим эффектом.

Выясним, как влияет флексоэлектрический эффект на переход Фредерикса. Для этого численно найдём напряжения  $U_{**}$ ,  $U_c$  и  $U_*$ , описывающие разрывный переход (1-ого рода) или только напряжение  $U_c$  в случае непрерывного перехода (2-ого рода). Здесь  $U_{**}$  – это наименьшее напряжение, при котором существует устойчивое искажённое состояние,  $U_c$  – напряжение, при котором энергии неискажённого и искажённого состояний выравниваются,  $U_*$  – наибольшее напряжение, при котором планарная геликоидальная структура может существовать как метастабильное состояние.

Диапазон изменения  $\overline{e}_{13}$  – от  $10^{-5} esu/cm$  до  $10^{-1} esu/cm$ . Результаты расчётов напряжений  $U_{**}$  в зависимости от  $\overline{e}_{13}$  представлены на рис. 6 и рис. 7:



Рис. 6: Зависимость напряжений  $U_*$ ,  $U_c$  и  $U_{**}$  от усреднёго флексоэлектрических коэффициента  $\overline{e}_{13}$ . Представлен случай несимметричных граничных условий и внешнего электрического поля, направленного вдоль оси z. Цифрами обозначены графики:  $1 - U_{**}$ ,  $2 - U_c$ ,  $3 - U_*$ 



Рис. 7: Зависимость напряжений  $U_*$ ,  $U_c$  и  $U_{**}$  от усреднённого флексоэлектрического коэффициента  $\overline{e}_{13}$ . Представлен случай отрицательных напряжений и поля, направленного против оси z. Цифрами обозначены графики:  $1 - U_{**}$ ,  $2 - U_c$ ,  $3 - U_*$ 

Из графиков видно, что с ростом  $\overline{e}_{13}$  напряжение перехода уменьшается, то есть, флексоэлектричество помогает переходу, причём при  $\overline{e}_{13}$ , большем некоторого значения, напряжения  $U_*$ ,  $U_c$  и  $U_{**}$  становятся неразличимыми, следовательно, переход становится непрерывным. Заметим, что зависимости напряжений в области малых значений могут быть немонотонными, как показано на рис. 7. При несимметричности граничных условий,  $W_{\theta}^{(1)} \neq W_{\theta}^{(2)}$ , зависимости напряжений перехода от усреднённого флексоэлектрического коэффициента  $\overline{e}_{13}$  при U > 0 и U < 0, как и следовало ожидать, отличаются. В случае симметричных граничных условий  $W_{\theta}^{(1)} = W_{\theta}^{(2)}$  графики получаются идентичными с точностью до знака.

## 3 Устойчивость планарной геликоидальной структуры XЖК

Исследуем устойчивость планарной геликоидальной структуры, которая характеризуется следующим распределением углов:  $\theta(z) = \theta_0 = \pi/2$ ,  $\varphi(z) = q_0 z$ ,  $z \in [0, L]$ . Вторая вариация свободной энергии без учёта флексоэлектрического эффекта была найдена в работе [20] и имеет вид:

$$\delta^{2}(\mathcal{F}_{e} + \mathcal{F}_{sf} + \mathcal{F}_{f}) = \frac{S_{\perp}}{2} \int_{0}^{L} \left( K_{11}(\delta\theta')^{2} + M(\delta\theta)^{2} \right) dz + \frac{S_{\perp}}{2} \sum_{\alpha=1,2} W_{\theta}^{(\alpha)} \delta\theta^{2}(l_{\alpha}) + \frac{S_{\perp}K_{22}}{2} \int_{0}^{L} (\delta\varphi')^{2} dz + \frac{S_{\perp}}{2} \sum_{\alpha=1,2} W_{\varphi}^{(\alpha)} \delta\varphi^{2}(l_{\alpha}),$$

$$(36)$$

где  $M = K_{33}q_0^2 - \varepsilon_a U^2/(4\pi L^2)$ . Для второй вариации вклада флексоэлектрической поляризации в свободную энергию ХЖК, из выражения (20) в случае планарной геликоидальной структуры имеем:

$$\delta^{2} \mathcal{F}_{\text{flex}}[\theta_{0}] = S_{\perp} \frac{\overline{e}_{13}}{\varepsilon_{a}} U \left[ J_{1} \delta^{2} J + 2\delta J \delta J_{1} + J \delta^{2} J_{1} \right]_{\theta=\theta_{0}} = -S_{\perp} \overline{e}_{13} (U/L) \delta \theta^{2} \Big|_{0}^{L}.$$
(37)

При получении формулы (37) использовано, что  $J_1|_{\theta=\theta_0} = 0$  и  $\delta J_1|_{\theta=\theta_0} = 0$ . Таким образом, вторая вариация функционала свободной энергии даётся выражением:

$$\delta^{2} \mathcal{F}_{\text{tot}} = \frac{S_{\perp}}{2} \int_{0}^{L} \left( K_{11} (\delta\theta')^{2} + M(\delta\theta)^{2} + K_{22} (\delta\varphi')^{2} \right) dz + \frac{S_{\perp}}{2} \sum_{\alpha=1,2} \left( W_{\theta}^{(\alpha)} \delta\theta^{2}(l_{\alpha}) + W_{\varphi}^{(\alpha)} \delta\varphi^{2}(l_{\alpha}) + (-1)^{\alpha+1} 2\overline{e}_{13} (U/L) \delta\theta^{2}(l_{\alpha}) \right).$$

$$(38)$$

Вариации углов независимы друг от друга, поэтому удобно разбить выражение (38) на два слагаемых:

$$\delta^{2} \mathcal{F}_{\text{tot}} = \delta^{2} \mathcal{F}_{\theta} + \delta^{2} \mathcal{F}_{\varphi},$$

$$\delta^{2} \mathcal{F}_{\theta} = \frac{S_{\perp}}{2} \int_{0}^{L} \left( K_{11} (\delta \theta')^{2} + M(\delta \theta)^{2} \right) dz +$$

$$+ \frac{S_{\perp}}{2} \sum_{\alpha = 1, 2} \left( W_{\theta}^{(\alpha)} - (-1)^{\alpha} 2\overline{e}_{13} (U/L) \right) \delta \theta^{2} (l_{\alpha}),$$

$$\delta^{2} \mathcal{F}_{\varphi} = \frac{S_{\perp}}{2} \int_{0}^{L} \left( K_{22} (\delta \varphi')^{2} \right) dz + \frac{S_{\perp}}{2} \sum_{\alpha = 1, 2} W_{\varphi}^{(\alpha)} \delta \varphi^{2} (l_{\alpha}).$$

$$(40)$$

Выражение (40) является положительно определённым, следовательно, момент потери устойчивости планарной геликоидальной структуры может быть найден из анализа  $\delta^2 \mathcal{F}_{\theta}$ . Прежде всего отметим, что вклад флексоэлектрического эффекта во вторую вариацию свободной энергии ХЖК проявляется лишь на границах. Фактически, влияние флексоэлектрического эффекта сводится к изменению модулей упругости, отвечающих взаимодействию вектора директора с ограничивающими поверхностями.

$$\widetilde{W}_{\theta}^{(\alpha)} = W_{\theta}^{(\alpha)} - (-1)^{\alpha} \cdot 2\,\overline{e}_{13}U/L = W_{\theta}^{(\alpha)} - (-1)^{\alpha} \cdot \Delta W,$$

$$\Delta W = 2\,\overline{e}_{13}U/L.$$
(41)

Как видно из выражения (41), на одной из границ энергия сцепления с подложкой увеличивается за счёт флексоэлектрического вклада, а на другой – уменьшается. С увеличением по абсолютной величине напряжения U один из эффективных модулей  $\widetilde{W}^{\alpha}_{\theta}$  может стать отрицательным.

Как следует из формулы (39), устойчивость планарного геликоидального состояния может нарушаться только в случае, когда хотя бы одна из величин  $M, \widetilde{W}_{\theta}^{(\alpha)}$  отрицательна. Таким образом, существуют три ситуации, в которых возможно нарушение устойчивости:

$$\begin{array}{rrrr} I & : & M < 0, & \widetilde{W}_{\theta}^{-} > 0, \\ II & : & M > 0, & \widetilde{W}_{\theta}^{-} < 0, \\ III & : & M < 0, & \widetilde{W}_{\theta}^{-} < 0. \end{array}$$

Здесь через  $\widetilde{W}_{\theta}^{-}$  обозначена та из эффективных энергий сцепления с подложкой, даваемых формулой (41), которая уменьшается за счёт флексоэлектрического эффекта. В терминах напряжения U эти случаи записываются следующим образом:

$$\begin{array}{rcl} I & : & U > q_0 L \sqrt{4\pi K_{33}/\varepsilon_a} \equiv U_{\mathrm{Fr}}, & U < \frac{W_{\theta}^- L}{2\overline{e}_{13}} \equiv U_{\mathrm{Fl}}, \\ III & : & U < U_{\mathrm{Fr}}, & U > U_{\mathrm{Fl}}, \\ III & : & U > U_{\mathrm{Fr}}, & U > U_{\mathrm{Fl}}. \end{array}$$

Здесь введено обозначение  $W_{\theta}^{-} \equiv \widetilde{W}_{\theta}^{-} + |\Delta W|$ . Для параметров, указанных во втором разделе и U > 0, получаем следующие значения:

$$U_{\rm Fr} \simeq 0.77 \,\mathrm{B},$$
  
 $U_{\rm Fl} \simeq 4.5 \times 10^{-4} \,[\overline{e}_{13}]^{-1} \,\mathrm{B}.$ 

Здесь  $\overline{e}_{13}$  должно быть выражено в единицах esu/cm.

На рис. 8 представлено графическое изображение зон локализации рассмотренных трёх случаев на плоскости ( $\overline{e}_{13}, U$ ):  $U_{\rm Fr}$ 



Рис. 8: Графическое изображение случаев I-III на плоскости ( $\overline{e}_{13}, U$ ). По оси абсцисс использован логарифмический масштаб.

Для анализа знакоопределённости величины  $\delta^2 \mathcal{F}_{\theta}$ , даваемой выражением (39), удобно представить  $\delta \theta(z)$  в виде суммы двух функций

$$\delta\theta(z) = \delta\psi(z) + \delta\mu(z), \tag{42}$$

21

где  $\delta\mu(0) = \delta\mu(L) = 0$ , а функция  $\delta\psi(z)$  удовлетворяет следующему дифференциальному уравнению с граничными условиями:

$$K_{11}\delta\psi''(z) - M\delta\psi(z) = 0, \quad \delta\psi(0) = \delta_1, \quad \delta\psi(L) = \delta_2.$$

В зависимости от знака параметра *M*, нетрудно получить следующее решение:

$$\delta\psi(z,\delta_1,\delta_2) = \begin{cases} \delta_1 \frac{\sin\xi(L-z)}{\sin\xi L} + \delta_2 \frac{\sin\xi z}{\sin\xi L}, & M < 0, \\ \delta_1 \frac{\mathrm{sh}\,\zeta(L-z)}{\mathrm{sh}\,\zeta L} + \delta_2 \frac{\mathrm{sh}\,\zeta z}{\mathrm{sh}\,\zeta L}, & M > 0. \end{cases}$$
(43)

Здесь введены следующие обозначения:

$$\xi = \sqrt{-M/K_{11}} = \sqrt{(\varepsilon_a U^2/(4\pi L^2) - K_{33}q_0^2)/K_{11}},$$
  
$$\zeta = \sqrt{M/K_{11}} = \sqrt{(K_{33}q_0^2 - \varepsilon_a U^2/(4\pi L^2))/K_{11}}.$$

Представление (42) для  $\delta\theta$  позволяет записать  $\delta^2 \mathcal{F}_{\theta}$  в виде суммы двух слагаемых, одно из которых зависит только от  $\delta\psi$ , а другое только от  $\delta\mu$ :

$$\delta^2 \mathcal{F}_\theta = Q_\psi + Q_\mu,$$

где  $Q_{\psi}$  и  $Q_{\mu}$  – это следующие квадратичные формы:

$$Q_{\psi} = \frac{S_{\perp}}{2} \int_{0}^{L} \left( K_{11}(\delta \psi'(z))^{2} + M(\delta \psi(z))^{2} \right) dz + \frac{S_{\perp}}{2} \sum_{\alpha=1,2} \widetilde{W}_{\theta}^{(\alpha)} \delta_{\alpha}^{2}$$
(44)

$$Q_{\mu} = \frac{S_{\perp}}{2} \int_{0}^{L} \left( K_{11} (\delta \mu')^{2} + M (\delta \mu)^{2} \right) \mathrm{d}z.$$
(45)

Выражения (44) и (45) являются разделением  $\delta^2 \mathcal{F}_{\theta}$  на граничные и объёмные флуктуирующие моды, впервые подобное разделение было применено Фейнманом в работе [21].

Условие положительной определённости  $Q_{\mu}$  было найдено в работе [20]:

$$\xi L < \pi. \tag{46}$$

Оно нужно только для случая M < 0, поскольку при M > 0 форма  $Q_{\mu}$  всегда положительно определена.

Проанализируем квадратичную форму  $Q_{\psi}$ . После подстановки (43) в (44), величина  $Q_{\psi}$  приобретёт следующий вид:

$$Q_{\psi} = \begin{cases} \frac{S_{\perp}}{2} \sum_{\alpha=1,2} \left( K_{11}\xi \operatorname{ctg} \xi L + \widetilde{W}_{\theta}^{(\alpha)} \right) \delta_{\alpha}^{2} - S_{\perp} K_{11}(\xi/\sin\xi L) \delta_{1}\delta_{2}, \ M < 0. \\ \frac{S_{\perp}}{2} \sum_{\alpha=1,2} \left( K_{11}\zeta \operatorname{cth} \zeta L + \widetilde{W}_{\theta}^{(\alpha)} \right) \delta_{\alpha}^{2} - S_{\perp} K_{11}(\zeta/\operatorname{sh} \zeta L) \delta_{1}\delta_{2}, \ M > 0. \end{cases}$$

$$\tag{47}$$

Условия её положительной определённости найдём с помощью критерия Сильвестра:

$$\begin{cases} \widetilde{W}_{\theta}^{(1)} + K_{11}\xi \operatorname{ctg} \xi L > 0, \\ \widetilde{W}_{\theta}^{(1)}\widetilde{W}_{\theta}^{(2)} + K_{11}(\widetilde{W}_{\theta}^{(1)} + \widetilde{W}_{\theta}^{(2)})\xi \operatorname{ctg} \xi L > \xi^2 K_{11}^2 \end{cases}$$
(48)

для случая M < 0 и

$$\begin{cases} \widetilde{W}_{\theta}^{(1)} + K_{11}\zeta \operatorname{cth} \zeta L > 0, \\ \widetilde{W}_{\theta}^{(1)} \widetilde{W}_{\theta}^{(2)} + K_{11} (\widetilde{W}_{\theta}^{(1)} + \widetilde{W}_{\theta}^{(2)}) \zeta \operatorname{cth} \zeta L > -\zeta^2 K_{11}^2 \end{cases}$$
(49)

для случая M > 0.

Переходя от размерных параметров  $\widetilde{W}_{ heta}^{(1,2)}$  к безразмерным

$$\widetilde{\sigma}_{\theta}^{(j)} = \widetilde{W}_{\theta}^{(j)} L/K_{11}, \tag{50}$$

22

вводя обозначения

$$\begin{split} \xi L &= t, \\ \zeta L &= \tau, \end{split}$$

и учитывая неравенство (46) вместе с условиями (48) и (49), получаем следующий вид условий стабильности планарной геликоидальной конфигурации

ХЖК во внешнем электрическом поле:

$$M < 0: \begin{cases} t < \pi, \\ \widetilde{\sigma}_{\theta}^{(1)} + t \operatorname{ctg} t > 0, \\ \widetilde{\sigma}_{\theta}^{(1)} \widetilde{\sigma}_{\theta}^{(2)} + (\widetilde{\sigma}_{\theta}^{(1)} + \widetilde{\sigma}_{\theta}^{(2)}) t \operatorname{ctg} t > t^{2}. \end{cases}$$

$$M > 0: \begin{cases} \widetilde{\sigma}_{\theta}^{(1)} + \tau \operatorname{cth} \tau > 0, \\ \widetilde{\sigma}_{\theta}^{(1)} \widetilde{\sigma}_{\theta}^{(2)} + (\widetilde{\sigma}_{\theta}^{(1)} + \widetilde{\sigma}_{\theta}^{(2)}) \tau \operatorname{cth} \tau > -\tau^{2}. \end{cases}$$

$$(52)$$

Проанализируем систему неравенств (51). Первое неравенство нарушается при  $t = \pi$ , но при таком значении t заведомо нарушено второе неравенство, следовательно, второе требование более сильное, чем первое. В качестве  $\tilde{\sigma}_{\theta}^{(1)}$ всегда можно выбрать то из двух значений  $\tilde{\sigma}_{\theta}^{(\alpha)}$ . Второе неравенство нарушается при  $t = t_0$ :  $t_0 \operatorname{ctg} t_0 = -\tilde{\sigma}_{\theta}^{(1)}$ . Для такого  $t = t_0$  третье неравенство после приведения подобных слагаемых приобретает вид ложного высказывания

$$-(\widetilde{\sigma}_{\theta}^{(1)})^2 > t_0^2,$$

То есть при нарушении второго из условий системы (51) третье оказывается уже нарушенным. Отсюда следует, что третье неравенство является определяющим в системе (51).

В системе (52) первое неравенство всегда истинно при положительных  $\tau$  и  $\widetilde{\sigma}_{\theta}^{(1)}$ , следовательно, второе неравенство в системе (52) является определяющим.

Окончательный вид условий стабильности планарной геликоидальной структуры даётся следующими неравенствами:

$$\widetilde{\sigma}_{\theta}^{(1)}\widetilde{\sigma}_{\theta}^{(2)} + (\widetilde{\sigma}_{\theta}^{(1)} + \widetilde{\sigma}_{\theta}^{(2)})t \operatorname{ctg} t > t^{2}, \quad M < 0,$$
(53a)

$$\widetilde{\sigma}_{\theta}^{(1)}\widetilde{\sigma}_{\theta}^{(2)} + (\widetilde{\sigma}_{\theta}^{(1)} + \widetilde{\sigma}_{\theta}^{(2)})\tau \operatorname{cth} \tau > -\tau^{2}, \quad M > 0.$$
(53b)

Система неравенств (53) допускает численное нахождение поля, при котором планарная геликоидальная структура теряет устойчивость, при заданных параметрах системы. Полученные результаты согласуются с полученными путём численной минимизации функционала  $\mathcal{F}_{tot}[\theta]$  в пределах погрешности.

# 4 Разложение по низшим гармоникам и модель Ландау

Как показал анализ, проведённый в третьем разделе, разделение свободной энергии искажения вблизи планарного геликоидального состояния на объёмные и граничные моды позволило выяснить, что потеря устойчивости неискажённого состояния в первую очередь происходит благодаря флуктуации граничных мод. Поэтому интерес представляет упрощённый анализ устойчивости, проведённый в духе теории Ландау в случае, когда угол θ(z) описывается только граничными модами, то есть

$$\theta(z) = \pi/2 + \delta\psi(z), \tag{54}$$

где  $\delta\psi(z)$ , как следует из формулы (43), зависит только от двух параметров,  $\delta_1$  и  $\delta_2$ . После подстановки  $\theta(z)$  в выражение для свободной энергии (34), предполагая малость параметров  $\delta_1$  и  $\delta_2$ , можно разложить  $\mathcal{F}_{tot}$  в ряд по переменным  $\delta_1$  и  $\delta_2$ , ограничиваясь членами четвёртого порядка малости. В результате получим разложение следующего вида:

$$\mathcal{F}_{\text{tot}} = \mathcal{F}^{(0)} + \sum_{k=0}^{2} A_k(U) \delta_1^k \delta_2^{2-k} + \sum_{k=0}^{4} B_k(U) \delta_1^k \delta_2^{4-k} = \mathcal{F}^{(0)} + \mathcal{F}^{(2)} + \mathcal{F}^{(4)}, \quad (55)$$

которое будем анализировать в духе теории Ландау. Конкретный вид коэффициентов  $\{A_k(U)\}$  и  $\{B_k(U)\}$  не приводится ввиду громоздкости.

При достаточно малых напряжениях дискриминант квадратичной формы  $\mathcal{F}^{(2)}$  отрицателен, и планарное геликоидальное состояние устойчиво. При повышении напряжения U до некоторого значения U<sub>\*</sub> дискриминант обращается в ноль, и планарная геликоидальная структура теряет устойчивость даже как метастабильное состояние. График зависимости дискриминанта квадратичной формы  $\mathcal{F}^{(2)}$  от напряжения U приведён на рис. 9



Рис. 9: Пример зависимости дискриминанта квадратичной формы  $\mathcal{F}^{(2)}$  от напряжения U.

Условие обращения в ноль дискриминанта эквивалентно нарушению неравенств (53). Для дальнейшего анализа удобно определить соотношение  $\varkappa \equiv \delta_1/\delta_2$ , при котором  $\mathcal{F}^{(2)}(U_*) = 0$ :

$$\varkappa = -\frac{A_1(U_*)}{2A_0(U_*)}.$$

Эта связь  $\delta_1 = \varkappa \delta_2$  задаёт флуктуацию, которая приводит к потере устойчивости планарной геликоидальной структуры. Анализ того, как именно происходит переход из планарной геликоидальной структуры в искажённую с  $\theta(z) \neq \pi/2$ , проведём в предположении, что вклад  $\mathcal{F}^{(4)}$  становится существенным лишь при исчезновении вклада второго порядка  $\mathcal{F}^{(2)}$ .

После подстановки напряжения  $U = U_*$  и  $\delta_1 = \varkappa \delta_2$  в форму  $\mathcal{F}^{(4)}$  получим:

$$\mathcal{F}^{(4)}(U_*) = \delta_2^4 \sum_{k=0}^4 B_k(U_*) \varkappa^k.$$
(56)

Знак выражения (56) определяет род перехода. Если  $\mathcal{F}^{(4)} < 0$ , то это означает, что рассматриваемая система уже перешла в искажённое состояние с энергией, меньшей, чем  $\mathcal{F}^{(0)}$ . То есть, при  $U = U_*$  система уже находится в искажённом состоянии с отличными от нуля  $\delta_1$  и  $\delta_2$ , это можно трактовать как то, что имеет место разрывный переход (1-ого рода).

Если же  $\mathcal{F}^{(4)} > 0$ , то переход в искажённое состояние связан лишь с дальнейшим повышением напряжения и потерей знакоопределённости формой  $\mathcal{F}^{(2)}$ , следовательно, проиходит непрерывный переход (2-ого рода). Сложность зависимости коэффициентов  $\{B_k\}, U_*$  и  $\varkappa$  от усреднённого флексоэлектрического коэффициента  $\overline{e}_{13}$  приводит к тому, что исследование рода можно провести только численно для заданных наперёд параметров. Расчёты подтверждают выдвинутые во втором разделе предположения о роде перехода в рассматриваемой системе.

### Заключение

В представленной работе проведено исследование перехода Фредерикса в ячейке холестерического ЖК с учётом флексоэлектрического эффекта. Условие минимума свободной энергии в равновесии привело к системе уравнений Эйлера-Лагранжа. Равновесная конфигурация ХЖК находилась прямой минимизацией функционала свободной энергии. Было обнаружено, что с ростом флексоэлектрических коэффициентов пороговое напряжение, при котором происходит переход Фредерикса, уменьшается. Анализ второй вариации свободной энергии искажения позволил исследовать учтойчивость планарной геликоидальной структуры. Возможный род перехода между планарной геликоидальной и искажённой структурами был исследован с помощью двухпараметрической модели Ландау. Было обнаружено, что в зависимости от величины флексоэлектрических коэффициентов и других материальных параметров переход может происходить как непрерывно, так и скачком.

### Список литературы

- V. Fréedericksz and A. Repiewa. Theoretisches und experimentelles zur frage nach der natur der anisotropen flüssigkeiten. <u>Zeitschrift für Physik</u>, 42(7):532– 546, 1927.
- L. M. Blinov and V. G. Chigrinov. <u>Electrooptic Effects in Liquid Crystal</u> Materials. Springer-Verlag New York, Inc., 1994.
- P. F. McManamon, T. A. Dorschner, D. L. Corkum, L. J. Friedman, D. S. Hobbs, M. Holz, S. Liberman, H. Q. Nguyen, D. P. Resler, R. C. Sharp, and E. A. Watson. Optical phased array technology. <u>Proceedings of the IEEE</u>, 84(2):268–298, Feb 1996.
- 4. B. Taheri, P. Palffy-Muhoray, T. Kosa, and D. L. Post. Technology for electronically varying helmet visor tint. Proc. SPIE, 4021:114–119, 2000.
- A. Mu noz F., P. Palffy-Muhoray, and B. Taheri. Ultraviolet lasing in cholesteric liquid crystals. <u>Opt. Lett.</u>, 26(11):804–806, Jun 2001.
- J. Schmidtke, W. Stille, and H. Finkelmann. Defect mode emission of a dye doped cholesteric polymer network. Phys. Rev. Lett., 90:083902, Feb 2003.
- B. I. Senyuk, I. I. Smalyukh, and O. D. Lavrentovich. Switchable twodimensional gratings based on field-induced layer undulations in cholesteric liquid crystals. Opt. Lett., 30(4):349–351, Feb 2005.
- S. A. Pikin. <u>Structural Transformations in Liquid Crystals</u>. Gordon & Breach, New York, 1991.
- P.-G. de Gennes and J. Prost. <u>The Physics of Liquid Crystals</u>. International Series of Monographs on Physics. Claredon Press, Oxford, 2nd edition, 1993.
- I. W. Stewart. <u>The Static and Dynamic Continuum Theory of Liquid Crystals:</u> <u>A Mathematical Introduction</u>. Liquid crystals book series. Taylor & Francis, London, 2004.
- C. V. Brown and N. J. Mottram. Influence of flexoelectricity above the nematic fréedericksz transition. Phys. Rev. E, 68(3):031702, Sep 2003.
- A. A. T. Smith, C. V. Brown, and N. J. Mottram. Theoretical analysis of the magnetic fréedericksz transition in the presence of flexoelectricity and ionic contamination. Phys. Rev. E, 75(4):041704, Apr 2007.

- D. V. Makarov and A. N. Zakhlevnykh. Tricritical phenomena at the fréedericksz transition in ferronematic liquid crystals. <u>Phys. Rev. E</u>, 81(5):051710, May 2010.
- R. B. Meyer. Piezoelectric effects in liquid crystals. <u>Phys. Rev. Lett.</u>, 22:918– 921, May 1969.
- 15. J. Prost and J.P. Marcerou. On the microscopic interpretation of flexoelectricity. Journal de Physique, 35:315–324, March 1977.
- S. P. Sreenilayam, Yu. P. Panarin, J. K. Vij, S. I. Torgova, A. Lehmann, and C. Tschierske. Flexoelectric polarization studies in bent-core nematic liquid crystals. Phys. Rev. E, 92:022502, Aug 2015.
- J. Harden, B. Mbanga, N. Éber, K. Fodor-Csorba, S. Sprunt, J. Gleeson, and A. Jákli. Giant flexoelectricity of bent-core nematic liquid crystals. <u>Phys.</u> Rev. Lett., 97:157802, Oct 2006.
- J. Harden, R. Teeling, J. T. Gleeson, S. Sprunt, and A. Jákli. Converse flexoelectric effect in a bent-core nematic liquid crystal. <u>Phys. Rev. E</u>, 78:031702, Sep 2008.
- A. Rapini and M. Papoular. Distorsion d'une lamelle nématique sous champ magnétique conditions d'ancrage aux parois. <u>J. de Phys. Colloq.</u>, 30(C-4):54 -56, November 1969.
- A. Yu. Val'kov, E. V. Aksenova, and V.P. Romanov. First-order and continuous fréedericksz transitions in cholesteric liquid crystals. <u>Phys. Rev.</u> E, 87:022508, Feb 2013.
- R. P. Feynman. <u>Statistical Mechanics: A Set Of Lectures</u>. Advanced Book Classics. Westview Press, New York, 2rd edition, 1998.