

Мурич Дмитрий Александрович

**ВЗАИМНОЕ ВЛИЯНИЕ ОРИЕНТАЦИИ ДИРЕКТОРА И СЛОЕВОЙ
СТРУКТУРЫ В СМЕКТИЧЕСКИХ ПЛЕНКАХ**

Курсовая работа

Научный руководитель
доктор физико-математических наук,
доцент Ульянов С.В.

Санкт-Петербург
2013

1 Введение

Жидкие кристаллы занимают промежуточное положение между изотропными вязкими жидкостями и кристаллическими твердыми телами [1]. В смектических жидких кристаллах, которые рассмотрены в этой работе, имеется порядок в расположении центров масс молекул, а именно они образуют структуру, состоящую из плоских слоев.

В зависимости от направления преимущественной ориентации молекул выделяют смектики А, в которых директор \mathbf{n} нормален к плоскости слоя, и смектики С, в которых директор наклонен под некоторым углом θ . Если в смектиках С при переходе от слоя к слою директор поворачивается при сохранении угла θ , то образуется смектик С* [3]. В смектиках А*, в отличие от смектиков А, имеется спонтанная поляризация слоев.

Смектические жидкие кристаллы обладают способностью образовывать стабильные пленки макроскопических размеров, содержащие от двух до тысяч слоев. В работе рассмотрены свободно подвешенные пленки.

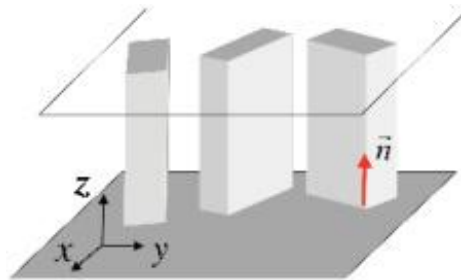


Рис. 1: Смектик А*, молекулы изображены прямоугольными параллелепипедами, направление дипольного момента перпендикулярно вектору директора.

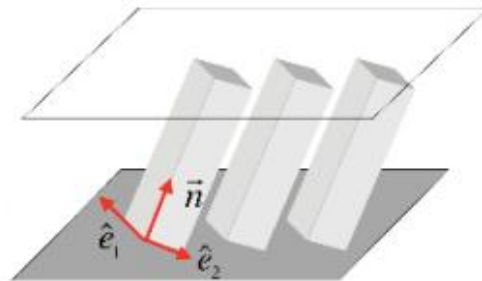


Рис. 2: Смектик С*, молекулы изображены прямоугольными параллелепипедами, наклонены к слоям на один и тот же угол, направление дипольного момента перпендикулярно вектору директора и нормали к слоям.

2 Уравнения движения смектиков A^*

Рассматривается смектик A^* с приложенным к нему некоторым электрическим полем \mathbf{E} , направленным вдоль оси x . Структура искаженного смектика A^* может быть описана с помощью переменной $u(\mathbf{r})$, которая представляет собой смещения слоев от равновесного положения вдоль оси z . Направление оси x является выделенным, поэтому $\frac{\partial u}{\partial y} = 0$. В гауссовом приближении свободная энергия искажения может быть записана в виде [1,2]

$$F_b = \frac{1}{2} \int \left\{ B \left(\frac{\partial u}{\partial z} \right)^2 + K \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)^2 + P_0 E \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 \right\} d\mathbf{r}, \quad (1)$$

где P_0 — дипольный момент единицы поверхности пленки, B — упругая постоянная, связанная со сжатием и разрежением слоев, а K — с их изгибом. В смектических пленках в свободной энергии, кроме объемного, важен также и поверхностный вклад

$$F_s = \frac{\gamma}{2} \int \left\{ \left(\frac{\partial u_1}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial u_2}{\partial x} \right)^2 \right\} d\mathbf{r}_\perp, \quad (2)$$

где γ — поверхностное натяжение, u_1 и u_2 — смещения двух свободных поверхностей пленки.

Для описания движений в пленках используется дискретная модель. В этой модели пленка рассматривается как совокупность упруго связанных смектических слоев. Свободная энергия принимает следующий вид

$$F = \frac{L_y}{2} \int \left\{ \frac{B}{d} \sum_{n=1}^{N-1} (u_{n+1} - u_n)^2 + dK \sum_{n=1}^N \left(\frac{\partial^2 u_n}{\partial x^2} \right)^2 + \gamma \left[\left(\frac{\partial u_1}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial u_N}{\partial x} \right)^2 \right] + P_0 E d \sum_{n=1}^N \left(\frac{\partial u_n}{\partial x} \right)^2 \right\} dx, \quad (3)$$

где L_y — характерный размер системы вдоль оси y , N — число слоев, d — толщина слоя.

При описании динамики пленки для каждого слоя пишется уравнение движения. В этих уравнениях сила, действующая на n -й слой и отнесенная к единице поверхности, складывается из упругой $-(1/d)(\delta F/\delta u_n)$ и вязкой $\eta_3 \Delta_\perp (\partial u_n/\partial t)$ сил. В этом случае система уравнений движения имеет вид

$$\rho \frac{\partial^2 u_1}{\partial t^2} = \frac{B}{d^2} (u_2 - u_1) - K \frac{\partial^4 u_1}{\partial x^4} + \frac{\gamma}{d} \frac{\partial^2 u_1}{\partial x^2} + \eta_3 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \frac{\partial u_1}{\partial t} + P_0 E \frac{\partial^2 u_1}{\partial x^2}, \quad (4)$$

$$\rho \frac{\partial^2 u_n}{\partial t^2} = \frac{B}{d^2} (u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}) - K \frac{\partial^4 u_n}{\partial x^4} + \frac{\gamma}{d} \frac{\partial^2 u_n}{\partial x^2} + \eta_3 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \frac{\partial u_n}{\partial t} + P_0 E \frac{\partial^2 u_n}{\partial x^2}, \quad (5)$$

$$\rho \frac{\partial^2 u_N}{\partial t^2} = \frac{B}{d^2} (u_{N-1} - u_N) - K \frac{\partial^4 u_N}{\partial x^4} + \frac{\gamma}{d} \frac{\partial^2 u_N}{\partial x^2} + \eta_3 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \frac{\partial u_N}{\partial t} + P_0 E \frac{\partial^2 u_N}{\partial x^2}. \quad (6)$$

Для решения в виде плоской волны $u_n(q_x, \omega) \exp(iq_x x - i\omega t)$ получаем следующую систему линейных однородных уравнений

$$\left(\rho \omega^2 + i\omega \eta_3 q_x^2 - \frac{B}{d^2} - K q_x^4 - \frac{\gamma}{d} q_x^2 - P_0 E q_x^2 \right) u_1 + \frac{B}{d^2} u_2 = 0, \quad (7)$$

$$\left(\rho \omega^2 + i\omega \eta_3 q_x^2 - \frac{2B}{d^2} - K q_x^4 - P_0 E q_x^2 \right) u_n + \frac{B}{d^2} (u_{n-1} + u_{n+1}) = 0, \quad (8)$$

$$\left(\rho \omega^2 + i\omega \eta_3 q_x^2 - \frac{B}{d^2} - K q_x^4 - \frac{\gamma}{d} q_x^2 - P_0 E q_x^2 \right) u_N + \frac{B}{d^2} u_{N-1} = 0. \quad (9)$$

Эту систему уравнений удобно записать в матричной форме

$$\hat{\mathbf{A}} \mathbf{u} = \mathbf{0}, \quad (10)$$

где

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_N \end{pmatrix}, \quad (11)$$

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} 2x+1-\alpha & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 2x & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 2x & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & 2x & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & 2x+1-\alpha \end{pmatrix}. \quad (12)$$

Где введены следующие обозначения

$$x = -1 + \frac{d^2}{2B} (\rho\omega^2 + i\omega\eta_3 q_x^2 - Kq_x^4 - P_0 E q_x^2), \quad (13)$$

$$\alpha = \frac{d\gamma q_x^2}{B}.$$

Для нахождения частот нормальных колебаний, нужно найти корни характеристического уравнения

$$\det \hat{A} = 0. \quad (14)$$

Это уравнение является алгебраическим уравнением достаточно высокой степени по ω^2 . Для решения этого уравнения удобен метод, использующий связь полиномов Чебышева второго рода $U_n(x)$ с тридиагональными симметричными определителями n -го порядка

$$U_n(x) = \begin{vmatrix} 2x & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 2x & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 2x & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 2x & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & 2x & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & 2x \end{vmatrix}. \quad (15)$$

Характеристическое уравнение (14) является уравнением относительно переменной x (13):

$$(x+1-\alpha)U_{N-1}(x) - \alpha \left(1 - \frac{\alpha}{2}\right) U_{N-2}(x) = 0. \quad (16)$$

Каждый корень этого уравнения $x^{(l)}$ позволяет найти две собственные частоты:

$$\omega_{\pm}^{(l)} = -i \frac{\eta_3 q_x^2}{2\rho} \pm \sqrt{(1+x^{(l)}) \frac{2B}{\rho d^2} - \frac{\eta_3^2 q_x^4}{4\rho^2} + \frac{K q_x^4}{\rho} + \frac{P_0 E q_x^2}{\rho}} \quad (17)$$

Решение характеристического уравнения (16) с учетом тригонометрического представления полиномов Чебышева в случае малых значений α в низшем порядке по α имеет вид

$$x^{(1)} = -1 + \frac{\alpha}{N},$$

$$x^{(l)} = -\cos \frac{(l-1)\pi}{N} + 2 \frac{\alpha}{N} \cos^2 \frac{(l-1)\pi}{2N}, \quad l = 2, 3, \dots, N. \quad (18)$$

Характерные значения параметров для смектика А*, входящих в выражение (17):

$$K \sim 10^{-6} \text{ дин}, \quad B \sim 2.5 \cdot 10^7 \text{ эрг см}^{-3}, \quad E \sim 300 \text{ В см}^{-1},$$

$$P_0 \sim 10^{-8} \text{ Кл/см}^2, \quad d \sim 30 \cdot 10^{-8} \text{ см}, \quad \gamma \sim 30 \text{ эрг см}^{-2}.$$

Для таких значений параметров было численно получено что вклад, вносимый полем, в выражение (17) ни при каких q_x не является существенным.

При $q_x \rightarrow 0$ все собственные колебания пленки являются колебательными, при этом частоты колебаний имеют вид [3]

$$\begin{aligned} \omega_{\pm}^{(1)} &= \pm c^{(1)} q_x - i\omega'', \\ \omega_{\pm}^{(l)} &= \pm \frac{c^{(l)}}{d} - i\omega'', \quad l = 2, 3, \dots, N, \end{aligned} \quad (19)$$

где

$$\begin{aligned} c^{(1)} &= \sqrt{\frac{2\gamma}{\rho d N}}, \\ c^{(l)} &= 2\sqrt{\frac{B}{\rho}} \sin \frac{l\pi}{2N}, \quad l = 2, 3, \dots, N, \\ \omega'' &= \frac{\eta_3 q_x^2}{2\rho}. \end{aligned} \quad (20)$$

Первая мода $\omega_{\pm}^{(1)}$ представляет собой поперечную звуковую волну. С ростом значений q_x

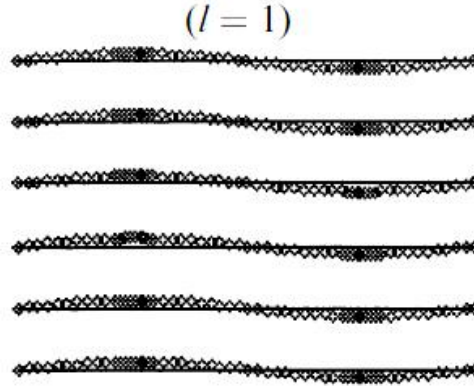


Рис. 3: Акустическая мода колебаний в свободно подвешенной пленке

происходит переход мод от колебательных к релаксационным.

Основным типом низкочастотных колебаний свободно подвешенной пленки являются акустические колебания. В этом типе движения остаются неизменными межслоевые расстояния. В дальнейшем будем предполагать, что в смектиках S^* главной является именно акустическая мода, в которой все слои смещаются одинаково.

3 Взаимное влияние флуктуаций смещения и ориентации в сегнетоэлектрических пленках

Энергия искажения директора \mathbf{n} в присутствии внешнего электрического поля $\mathbf{E} = (0, E, 0)$ с учетом кулоновского взаимодействия между слоями имеет вид

$$F = \int d\mathbf{r} \left\{ \frac{1}{2} (K_{11}(\text{div}\mathbf{n})^2 + K_{22}(\mathbf{n} \cdot \text{rot}\mathbf{n})^2 + K_{33}[\mathbf{n} \times \text{rot}\mathbf{n}]^2) - (\mathbf{P} \cdot \mathbf{E}) + \frac{1}{2} \int d\mathbf{r}_1 \frac{\text{div}\mathbf{P}(\mathbf{r})\text{div}_1\mathbf{P}(\mathbf{r}_1)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|} \right\}, \quad (21)$$

где K_{11} , K_{22} , K_{33} — объемные модули Франка.

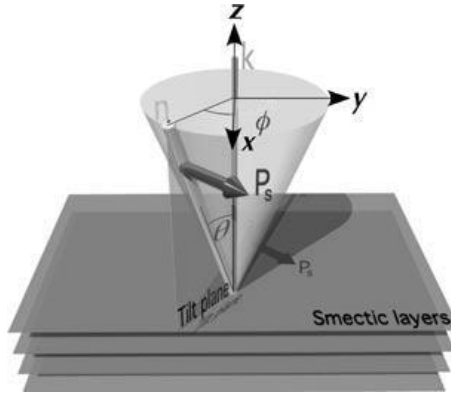


Рис. 4: Неповернутый смектический слой. Вектор \mathbf{n}_0 имеет постоянный угол наклона θ к оси z . Угол φ задает флуктуации директора.

Директор \mathbf{n}_0 и \mathbf{c}_0 -директор в неповернутом слое имеют вид (см. Рис. 3)

$$\begin{aligned} \mathbf{n}_0 &= (\sin \theta \cos \theta, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta), \\ \mathbf{c}_0 &= (\cos \varphi, \sin \varphi, 0) \approx \left(1 - \frac{\varphi^2}{2}, \varphi, 0 \right). \end{aligned} \quad (22)$$

Будем рассматривать повернутый слой, для которого переменная $u(\mathbf{r})$ задает смещение слоев, при этом

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial x} &= \text{tg}\alpha \sim \alpha, \\ \frac{\partial u}{\partial y} &= \text{tg}\beta \sim \beta. \end{aligned} \quad (23)$$

Матрица перехода к повернутому слою имеет вид:

$$A = \begin{pmatrix} 1 - \frac{\alpha^2}{2} & -\frac{\alpha\beta}{2} & -\alpha \\ -\frac{\alpha\beta}{2} & 1 - \frac{\beta^2}{2} & -\beta \\ \alpha & \beta & 1 - \frac{\alpha^2 + \beta^2}{2} \end{pmatrix}. \quad (24)$$

При таком преобразовании получаем новый вектор \mathbf{n} и соответствующий ему \mathbf{c} -директор

$$\mathbf{c} = A\mathbf{c}_0 = \begin{pmatrix} 1 - \frac{\varphi^2}{2} - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \frac{\varphi^2}{4} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 - \frac{1}{2} \varphi \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right) \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right) \\ -\frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right) \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right) + \varphi - \frac{\varphi}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 + \frac{\varphi^2}{4} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right) \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right) \\ \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right) + \varphi \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right) - \frac{\varphi^2}{4} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right) \end{pmatrix}, \quad (25)$$

$$\mathbf{n} = A\mathbf{n}_0 = \begin{pmatrix} \sin \theta \left(1 - \frac{\alpha^2}{2} - \frac{\varphi^2}{2} + \frac{\varphi^2}{4}\alpha^2 - \frac{\varphi}{2}\alpha\beta \right) - \alpha \cos \theta \\ \sin \theta \left(\varphi - \frac{\varphi}{2}\beta^2 - \frac{\alpha\beta}{2} + \frac{\varphi^2}{4}\alpha\beta \right) - \beta \cos \theta \\ \sin \theta \left(\varphi\beta + \alpha - \frac{\varphi^2}{2}\alpha \right) + \left(1 - \frac{\alpha^2 + \beta^2}{2} \right) \cos \theta \end{pmatrix}. \quad (26)$$

Считаем необходимые в (21) конструкции из \mathbf{n} и производных от \mathbf{n}

$$(\operatorname{div}\mathbf{n})^2 = \sin^2 \theta \left(\left(\frac{\partial\varphi}{\partial y} \right)^2 (1 - \beta^2) + \left(\frac{\partial\varphi}{\partial z} \right)^2 \beta^2 \right), \quad (27)$$

$$\begin{aligned} (\mathbf{n} \cdot \operatorname{rot}\mathbf{n})^2 = \sin^2 \theta \left[\left(\frac{\partial\varphi}{\partial x} \right)^2 (\cos^2 \theta - \alpha^2 \cos 2\theta) + \left(\frac{\partial\varphi}{\partial y} \right)^2 \beta^2 \sin^2 \theta + \right. \\ \left. + \left(\frac{\partial\varphi}{\partial z} \right)^2 (\sin^2 \theta (1 - \beta^2 - 2\alpha^2) + \alpha^2) + \left(\frac{\partial\varphi}{\partial x} \right) \left(\frac{\partial\varphi}{\partial z} \right) \sin 2\theta (-1 + 2\alpha^2 + \frac{\beta^2}{2}) \right], \quad (28) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [\mathbf{n} \times \operatorname{rot}\mathbf{n}]^2 = \sin^2 \theta \left[\left(\frac{\partial\varphi}{\partial x} \right)^2 \sin^2 \theta (1 - \alpha^2) + \left(\frac{\partial\varphi}{\partial y} \right)^2 \cos^2 \theta \beta^2 + \right. \\ \left. + \left(\frac{\partial\varphi}{\partial z} \right) (\cos^2 \theta (1 - \beta^2) + \alpha^2 (\sin^2 \theta - \cos^2 \theta)) + \left(\frac{\partial\varphi}{\partial x} \right) \left(\frac{\partial\varphi}{\partial z} \right) (-\beta^2 + 2(1 - \alpha^2)) \sin \theta \cos \theta \right] \quad (29) \end{aligned}$$

Посчитаем средние значения $\langle \alpha^2 \rangle$ и $\langle \beta^2 \rangle$, которые нужны для усреднения энергии Франка

$$\delta F = \gamma \int d\mathbf{r}_\perp (\nabla u)^2 = \gamma \int d\mathbf{r}_\perp (\alpha^2 + \beta^2), \quad (30)$$

откуда

$$\langle \alpha^2 \rangle = \langle \beta^2 \rangle = \frac{kT}{2\gamma S_{\text{корр}}}. \quad (31)$$

Оценим полученные величины с учетом

$$kT \sim 4 \cdot 10^{-14} \text{ эрг}, \quad \gamma \sim 30 \text{ эрг/см}^2, \quad r_{\text{корр}} \sim 10^{-6} \text{ см}.$$

Получаем оценку для $\langle \alpha^2 \rangle$ и $\langle \beta^2 \rangle$

$$\langle \alpha^2 \rangle = \langle \beta^2 \rangle \sim 2 \cdot 10^{-4} \ll 1.$$

После усреднения имеем следующую энергию Франка, ответственную за деформацию слоев:

$$\begin{aligned} \langle F \rangle_u = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} \left\{ K_{11} \sin^2 \theta \left(\frac{\partial\varphi}{\partial y} \right)^2 + K_{22} \sin^2 \theta \left(\left(\frac{\partial\varphi}{\partial x} \right) \cos \theta - \left(\frac{\partial\varphi}{\partial z} \right) \sin \theta \right)^2 + \right. \\ \left. + K_{33} \sin^2 \theta \left(\left(\frac{\partial\varphi}{\partial x} \right) \sin \theta + \left(\frac{\partial\varphi}{\partial z} \right) \cos \theta \right)^2 \right\} \quad (32) \end{aligned}$$

В результате усреднения той части энергии Франка, которая ответственна за деформацию слоев, получили, что наряду с членами $\partial\varphi/\partial x$ и $\partial\varphi/\partial y$, которые возникают в результате флуктуаций \mathbf{c} -директора уже в плоском случае [3], получаем член $\partial\varphi/\partial z$.

Список литературы

1. де Жен П. *Физика жидких кристаллов* (М.: Мир, 1977)
2. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. *Теория упругости* (М.: Наука, 1987)
3. Романов В.П., Ульянов С.В. *Динамические свойства смектических пленок* (УФН, 2003)
4. Romanov V.P., Ul'yanov S.V. *Phys. Rev. E* **65** 021706 (2002)