Вращательная переориентация директора в нематических твистовых ячейках

© А.В. Захаров, А.А. Вакуленко

Институт проблем машиноведения Российской академии наук,
199178 Санкт-Петербург, Россия

E-mail: avak.@microm.ipme.ru

(Поступила в Редакцию 10 июня 2005 г.
В окончательной редакции 16 сентября 2005 г.)

Исследуется ориентационная релаксация директора к его равновесному положению под действием электрических, упругих и вязких моментов, возникающих в нематических твистовых ячейках (НТЯ). Показано, что время релаксации директора сильно зависит от величины внешнего электрического поля и слабо зависит от энергии сцепления молекул жидкого кристалла (ЖК) с поверхностями ячейки. Обнаружен аномально высокий рост времени релаксации директора при значениях электрического поля, близких к пороговой величине Фредерикса. Показано, что при определенных значениях внешнего электрического поля в НТЯ может возникнуть релаксационный режим в виде бегущих волн, распространяющихся от одного края ячейки к другому. Расчет релаксационных процессов вблизи температуры перехода нематик–смектик A показал, что деформация поля директора однородна по всему сечению ЖК-ячейки и не зависит от характера сцепления ЖК-молекул с поверхностями ячейки.

PACS: 64.70.Md, 61.30.Gd, 61.30.Eb

1. Введение

Однородная текстура в нематических твистовых ячейках (НТЯ) создается посредством ориентации капли жидкого кристалла (ЖК), помещенного между двумя параллельными пластинами, которые определяют ориентацию граничных молекул нематика. В случае жесткой ориентации молекул ЖК ограничивающими поверхностями, например, вдоль оси x (ось y направлена перпендикулярно оси x, а ось z перпендикулярно границам ячейки) внутри ячейки ЖК устанавливается однородная ориентация поля директора $\hat{\mathbf{n}}$ параллельно оси x. Если мы приложим элекрическое поле $\mathbf{E}$ параллельно оси y, то возникнет следующая картина. При $E < E_{\text{th}}$ внутри ячейки будет оставаться однородная недеформированная ориентация директора параллельно оси x. Здесь E_{th} — пороговое значение Фредерикса для электрического поля в НТЯ, равное [1]

$$E_{\text{th}} = \frac{\pi}{d}\sqrt{\frac{K_2}{\epsilon_0\epsilon_a}}, \tag{1}$$

где d — толщина ячейки ЖК, K_2 — коэффициент твистовой упругости Франка, ϵ_0 — диэлектрическая постоянная вакуума, $\epsilon_a = \epsilon_{\|} - \epsilon_{\perp}$ — диэлектрическая анизотропия ЖК, $\epsilon_{\|}$ и $\epsilon_{\perp}$ — диэлектрические постоянные ЖК-фазы параллельно и перпендикулярно направлению директора $\hat{\mathbf{n}}$. С ростом величины внешнего электрического поля $E \geq E_{\text{th}}$ возникает деформация однородного распределения ориентаций поля директора между двумя параллельными границами ЖК-ячейки и возникает необходимость описания процесса вращательной релаксации директора к его равновесному положению $\hat{\mathbf{n}}_{\text{eq}}$. Это режим, в котором директор вращается в плоскости, параллельной обеим стеклянным пластинам, подчинен результирующему крутящему моменту, действующему в НТЯ и направленному перпендикулярно ограничивающим плоскостям. Состояние ЖК, вызванное этим режимом, термодинамически нестабильно, поскольку внешнее электрическое поле направлено параллельно границам ЖК-ячейки (параллельно оси y) и возможны большие ориентационные флуктуации, которые поддерживают состояние ЖК между метастабильным и стабильным состояниями, ослабляя и усиливая действие кручения. Таким образом, если на границах поддерживается постоянный крутящий момент, флуктуации, уменьшающие кручение, релаксируют на суммарном внутреннем крутящем моменте, который уравновешивается моментом, приложенным к границам ячейки. В результате ЖК-фаза будет необратимо испытывать воздействие возрастающего крутящего внутреннего момента до тех пор, пока этот момент не уравновесится внешним заданным моментом. Более того, для тонких или ультратонких НТЯ ($d < 2{-}3\,\mu$m) сцепление играет важную роль и влияние поверхности на процесс релаксации необходимо рассматривать во всем диапазоне температур. Особо необходимо обратить внимание на область температур, близких к температуре фазового перехода второго рода нематик–смектик A T_{NA}, поскольку это ведет к образованию поверхностных смектических слоев вблизи ограничивающих ЖК поверхностей [2–5]. Рост приповерхностных флуктуаций SmA-фазы в твистовом нематике ведет к перенормировке некоторых вязких и упругих коэффициентов нематической фазы, что сказывается на характере релаксации вращательных процессов в твистовых ячейках. Таким образом, описание релаксационных процессов в НТЯ при разнообразных внешних условиях является нетривиальной проблемой, решение которой и составляет цель настоящей работы. Далее приводятся динамическое уравнение, описывающее переориентацию поля директора в НТЯ, его численное решение и численные оценки релаксации директора к его равновесной ориентации для ряда режимов релаксации как при температурах, близких к T_{NA}, так и вдали от этой температуры.

2. Динамика вращательной переориентации директора в нематической твистовой ячейке

Динамическое уравнение, описывающее переориентацию директора в ячейке между двумя ограничивающими поверхностями, определяется балансом электрических, упругих и вязких моментов и имеет вид [1]

$$\mathbf{T}_{\text{el}} + \mathbf{T}_{\text{elast}} + \mathbf{T}_{\text{vis}} = 0. \quad (2)$$

В случае плоской геометрии директор имеет компоненты $\hat{\mathbf{n}} = \big(\cos\phi(z), \sin\phi(z), 0\big)$; в отсутствие течения в нематической ячейке эти моменты записываются в виде $\mathbf{T}_{\text{vis}} = -\gamma_1 \hat{\mathbf{n}} \times \frac{\partial \hat{\mathbf{n}}}{\partial t}$, $\mathbf{T}_{\text{el}} = \epsilon_0 \epsilon_a \hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{E}(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{E})$, $\mathbf{T}_{\text{elast}} = \hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{h}_t$. Здесь векторы $\mathbf{h}_t = -K_2 \mathscr{A} \boldsymbol{\nabla} \times \hat{\mathbf{n}} - K_2 \boldsymbol{\nabla} \times (\mathscr{A} \hat{\mathbf{n}})$, $\mathscr{A} = \hat{\mathbf{n}} \cdot (\boldsymbol{\nabla} \hat{\mathbf{n}})$ — компоненты кручения молекулярного поля, γ_1 — коэффициент вращательной вязкости. В случае плоской геометрии, когда директор $\hat{\mathbf{n}}$ всегда находится в плоскости пластин, параллельной границам ($\hat{\mathbf{i}}$–$\hat{\mathbf{j}}$-плоскости, определяемой директором $\hat{\mathbf{n}}_s$ на нижней плоскости ($\hat{\mathbf{i}}$-направление) и направлением электрического поля ($\hat{\mathbf{j}}$-направление)), вектор $\hat{\mathbf{k}} = \hat{\mathbf{i}} \times \hat{\mathbf{j}}$ ориентирован нормально к обеим границам ячейки, $\phi(z)$ обозначает азимутальный угол, т. е. угол между направлениями вектора $\hat{\mathbf{i}}$ и директора $\hat{\mathbf{n}}$. Следует отметить, что при такой ориентации директора полярный угол, т. е. угол между направлением директора $\hat{\mathbf{n}}$ и нормалью к ограничивающей поверхности, равен $\pi/2$. Момент, вызванный электрическим полем, дается выражением $\mathbf{T}_{\text{el}} = \frac{E^2}{2} \epsilon_0 \epsilon_a \sin 2\phi(t,z) \hat{\mathbf{k}}$. Вязкий момент имеет вид $\mathbf{T}_{\text{vis}} = -\gamma_1 \partial_t \phi(t,z) \hat{\mathbf{k}}$, где $\partial_t \phi(t,z) = \partial \phi(t,z)/\partial t$. Момент упругих сил в НТЯ также известен: $T_{\text{elast}} = K_2 \partial_{zz} \phi(t,z) \hat{\mathbf{k}}$, где $\partial_{zz}\phi(t,z) = \partial^2 \phi(t,z)/\partial z^2$ [1]. Принимая во внимание эти выражения, уравнение (2) можно преобразовать к безразмерному виду

$$\partial_\tau \phi(\tau, z) = \partial_{zz} \phi(\tau, z) + \delta \sin 2\phi(\tau, z), \quad (3)$$

где $\tau = \frac{K_2 t}{\gamma_1 d^2}$ — безразмерное время, $z = \frac{z}{d}$ — безразмерная координата по толщине нематической ячейки, а $\delta = \frac{\pi^2}{2}\big(\frac{E}{E_{\text{th}}}\big)^2$ — безразмерный параметр уравнения. Здесь $E_{\text{th}} = \frac{\pi}{d}\sqrt{\frac{K_2}{\epsilon_0 \epsilon_a}}$ — пороговое поле Фредерикса для твистовой геометрии. Уравнение (3) описывает динамику директора в НТЯ и далее решено численно, однако уравнение статического равновесия

$$\partial_{zz} \phi_{\text{eq}}(z) + \delta \sin 2\phi_{\text{eq}}(z) = 0 \quad (4)$$

может быть решено аналитически.

2.1. Случай сильного сцепления. В случае сильного сцепления молекул ЖК с ограничивающими поверхностями граничными условиями являются

$$\phi(z)_{z=0} = 0, \quad \phi(z)_{z=1} = 0, \quad (5)$$

что физически означает строго параллельную оси x ориентацию директора на обеих ограничивающих поверхностях, в то время как начальная ориентация директора распределена параллельно внешнему полю $\mathbf{E}$ с $\phi(\tau = 0, z) = \frac{\pi}{2}$ и затем релаксирует к его равновесному значению $\phi_{\text{eq}}(z)$. Решение (4) с граничными условиями (5) имеет вид [6]

$$z = 2\delta \int\limits_0^\psi \frac{d\lambda}{\sqrt{1 - \sin^2 \phi_m \sin^2 \lambda}} = 2\delta \mathscr{K}(\psi, \sin\phi_m), \quad 0 \le z \le \frac{1}{2}, \quad (6)$$

где $\mathscr{K}(\psi, k)$ — эллиптический интеграл первого рода с модулем k ($k = \sin\phi_m$), $\phi_m = \phi(1/2)$. Решение для $\frac{1}{2} < z \le 1$ получено из уравнения (6) путем простой замены z на $1 - z$. Релаксация директора $\hat{\mathbf{n}}$ к его равновесной ориентации, которая описывается эволюцией

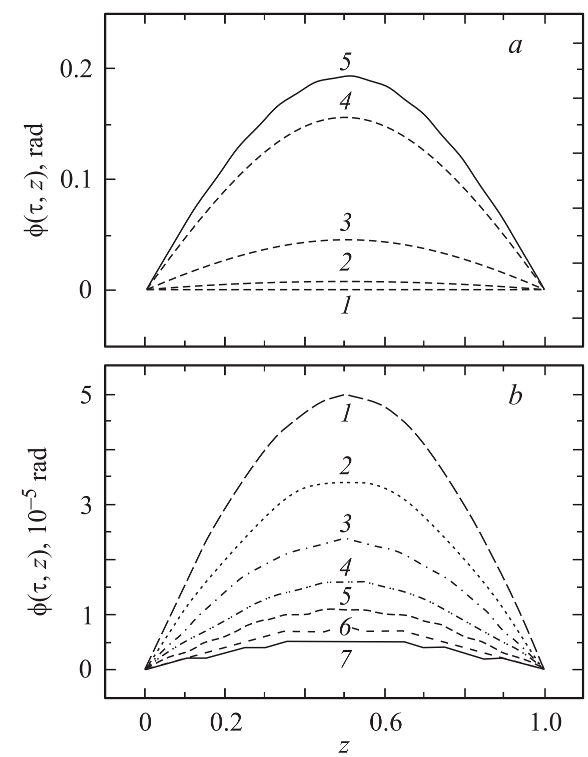

Рис. 1. Релаксация азимутального угла $\phi(\tau, z)$ ($\tau = K_2 t/\gamma_1 d^2$, τ_R и z — безразмерные время, время релаксации и толщина ячейки) к его равновесному значению $\phi_{\text{eq}}(z)$ (сплошная линия) в НТЯ, рассчитанная с помощью уравнения (3) и условия 5). E/E_{th}: a — 1.01, b — 0.99. τ: a — 0 (*1*), 10 (*2*), 30 (*3*), 50 (*4*), 63 (τ_R) (*5*), b — 0 (*1*), 3 (*2*), 5 (*3*), 7 (*4*), 9 (*5*), 11 (*6*), 14 (τ_R) (*7*).

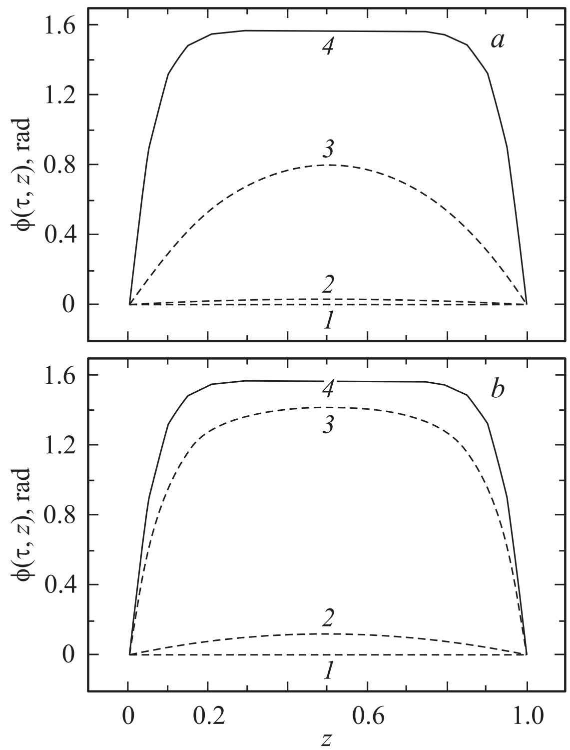

Рис. 2. То же, что на рис. 1. E/E_{th}: a — 5, b — 7. τ: a — 0 (*1*), 0.02 (*2*), 0.04 (*3*), 0.06 (τ_R) (*4*), b — 0 (*1*), 0.02 (*2*), 0.04 (*3*), 0.05 (τ_R) (*4*).

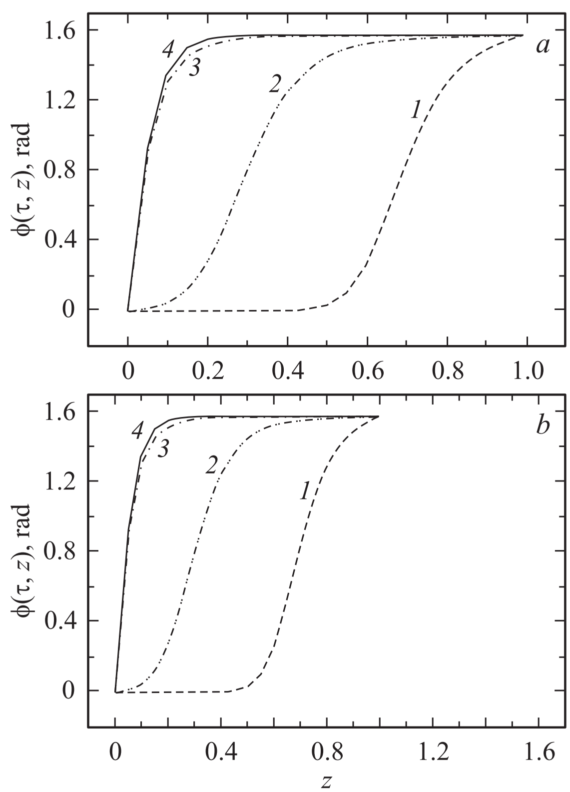

Рис. 3. То же, что на рис. 1 в случае, когда угол рассчитан с помощью (3) и (7). E/E_{th}: a — 5, b — 7. τ: a — 0 (*1*), 0.03 (*2*), 0.06 (*3*), 0.08 (τ_R) (*4*), b — 0 (*1*), 0.02 (*2*), 0.04 (*3*), 0.05 (τ_R) (*4*).

угла $\phi(\tau, z)$ из начального состояния $\phi(\tau = 0, z) = \frac{\pi}{2}$ к $\phi_{\text{eq}}(z)$ при плоской ориентации директора на обеих поверхностях (условия (5)) и различных значениях параметра $\delta = \frac{\pi^2}{2}\left(\frac{E}{E_{\text{th}}}\right)^2$, исследована стандартным численным методом [7]; результаты показаны на рис. 1 и 2. Установлено, что угол $\varphi(\tau, z)$ в случае $E/E_{\text{th}} \le 1.0$ (случай 1) релаксирует к нулю, в то время как в случае $E/E_{\text{th}} = 1.01$ (случай 2) азимутальный угол $\phi(\tau, z)$ релаксирует к малому равновесному углу $\phi_{\text{eq}}(z)$ и значения $\phi_{\text{eq}}(z)$ изменяются очень медленно между 0 на границе ячейки и 0.2 ($\sim 11.5^\circ$) в ее центре. Мы определили время релаксации τ_R в НТЯ как время, необходимое действующим на директор моментам для того, чтобы сориентировать директор таким образом, чтобы $\delta = |(\phi(t_R) - \phi(t_{\text{eq}}))/\phi(t_{\text{eq}})|$ было меньше любой заранее заданной величины. В наших вычислениях $\delta = 10^{-4}$. Важно отметить, что в случае 2 баланс между электрическим, упругим и гидродинамическим моментами, действующими на директор, влияет на величину времени релаксации $\tau_R = \frac{\gamma_1 d^2}{K_2} t_R$ примерно в 4 раза сильнее, чем в случае 1. Было установлено, что с ростом величины электрического поля E/E_{th} от 1.01 до 7.0 значение времени релаксации τ_R уменьшается на два порядка. При этом азимутальный угол $\phi(\tau, z)$ релаксирует к равновесному углу $\phi_{\text{eq}}(z)$, который в свою очередь при $E/E_{\text{th}} = 7.0$ очень быстро изменяется по сечению ячейки (в пределах первых 0.2 слоя от границы — от 0 до $\pi/2$). В случае граничных условий

$$\phi(z)_{z=0} = 0, \qquad \phi(z)_{z=1} = \frac{\pi}{2}, \tag{7}$$

когда директор на верхней границе ЖК-ячейки сориентирован под прямым углом к направлению директора на нижней границе (причем, как и ранее, оба эти вектора остаются в плоскости пластин), релаксация директора к его равновесной ориентации показана на рис. 3. Процессы релаксации в его окрестности порогового значения электрического поля $E/E_{\text{th}} = 1.01$ для геометрии с граничными условиями (7) примерно в 2 раза быстрее, чем для тех же релаксационных процессов с граничными

Времена ориентационной релаксации, рассчитанные с помощью уравнения (3) для граничных условий (5) (случай 1) и (7) (случай 2)

E/E_{th}	τ_R (1)	τ_R (2)
0.99	14	0.8
1.01	63	0.75
1.05	13	0.71
1.1	6.3	0.6
2.0	0.6	0.3
3.0	0.35	0.18
4.0	0.15	0.1
5.0	0.063	0.08
6.0	0.06	0.06
7.0	0.05	0.05

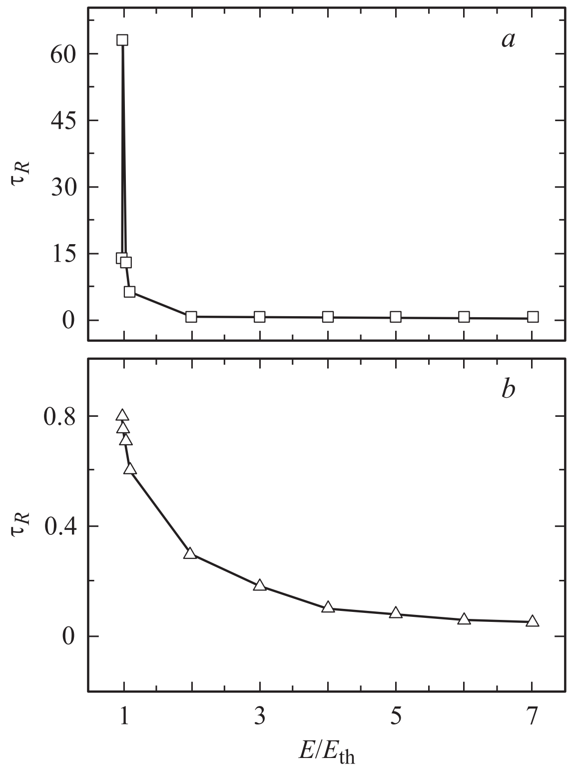

Рис. 4. Влияние внешнего поля $E/E_{\rm th}$ на время релаксации τ_R для случая сильного сцепления молекул ЖК с ограничивающими поверхностями при граничных условиях (5) (*a*) и (7) (*b*).

условиями (5). Вычисления также показали, что влияние внешнего поля $E/E_{\rm th}$ на время релаксации τ_R для обоих типов граничных условий (5) и (7) убывает по мере того, как $E/E_{\rm th}$ увеличивается. Значения τ_R насыщаются при $E/E_{\rm th} \sim 6.0$ (см. таблицу). Влияние электрического поля E на время релаксации τ_R директора $\hat{\mathbf{n}}$ к его равновесной ориентации в НТЯ с граничными условиями (5) (случай 3) и (7) (случай 4) показано на рис. 4. Оба эти случая (3 и 4) характеризуются увеличением времени релаксации по мере уменьшения величины поля E. Заметим, что релаксационный режим 4 характеризуется меньшими (примерно в 2 раза) временами релаксации, чем режим 3.

2.2. Случай слабого сцепления. Рассмотрим ту же ситуацию для НТЯ в случае, когда директор слабо сцеплен с обеими ограничивающими поверхностями, а энергия сцепления записана в виде [8]

$$W_{az} = W_{az}(\phi_s - \phi_0) = \frac{1}{2} A \sin^2(\phi_s - \phi_0), \tag{8}$$

где A — плотность энергии сцепления, ϕ_s и ϕ_0 — азимутальные углы, отвечающие ориентации директора на границе и оси легкого ориентирования $\hat{\mathbf{e}}$ соответственно. На поверхностях действуют следующие моменты: 1) упругий момент $T_{\rm elast} = \frac{K_2}{d}\big(\partial_z \phi(z)\big)_{z=0,1}$, стремящийся развернуть $\hat{\mathbf{n}}_s$ вдоль $\mathbf{E}$; 2) противоположный момент, обусловленный энергией сцепления с поверхностью $T_{\rm anchor} = -\partial W/\partial\phi_s$, который поворачивает $\hat{\mathbf{n}}_s$ в сторону $\hat{\mathbf{e}}$; 3) поверхностный вязкий момент $T_{\rm vis} = -\gamma_s \partial_t \phi_s$. На временной шкале $t \ll \tau_s = \gamma_s/(K_2 - dA\Delta\phi)$, где $\Delta\phi = \phi_s - \phi_0$, эффектом поверхностной вязкости в балансе моментов можно пренебречь, и граничное условие для азимутального угла $\phi(z,\tau)$ принимает вид

$$\big(\partial_z \phi(z)\big)_{z=0,1} = \pm A \frac{d}{K_2} \Delta\phi. \tag{9}$$

Здесь для упругих моментов учтена различная ориентация внешней нормали к граничным поверхностям $z = 0$ и $z = 1$. Для нематика 4-*n*-octyl-4′-cyanobiphenyl (8ЦБ) в работе [9] получена величина $K_2 = 5.84\,\mathrm{pN}$ при $T = 308\,\mathrm{K}$, для тонких (или ультратонких НТЯ) $d \sim 2.0{-}2.5\,\mu\mathrm{m}$. Для случая ограничивающих поверхностей, образованных оловянной окисью индия (indium tin oxide), данные для A, полученные с помощью различных экспериментальных методов, изменяются в интервале от 10^{-4} до $10^{-6}\,\mathrm{J/m^2}$; таким образом комбинация $\frac{Ad}{K_2}$ изменяется между 0.43 и 43. В случае малых $\Delta\phi$, например $\Delta\phi \in [0.03, 0.3]$, значения $\frac{Ad}{K_2}\Delta\phi$ лежат в промежутке (0.01, 4.0). Заметим, что максимальные отклонения $\Delta\phi \sim 10^\circ$ [10]. Стационарное решение уравнения (4) с граничными условиями (9) исследовано стандартным численным методом, результаты вычислений для ряда значений $E/E_{\rm th}$ представлены на рис. 5, причем величина нормированной плотности энергии сцепления была взята равной $\frac{Ad}{K_2}\Delta\phi = 0.1$. Обнаружено, что значения $\phi(\tau, z)$ в случае $E/E_{\rm th} \sim 1.0$ (кривая *4*) релаксируют к нулю, в то время как при $E/E_{\rm th} > 1.0$ (кривые *1–3*) азимутальный угол релаксирует к равновесному углу $\phi_{\rm eq}(z)$ и значения $\phi_{\rm eq}(z)$ изменяются очень быстро с ростом E до величины $E/E_{\rm th} = 6.0$ (в пределах первых 0.13 слоя от границ ЖК-ячейки между значениями 0 и $\pi/2$). Релаксация директора $\hat{\mathbf{n}}$ к его равновесному значению, которая описывается релаксацией угла $\phi(\tau, z)$ от начального условия (см. линии *1* на рис. 6) к $\phi_{\rm eq}(z)$ с

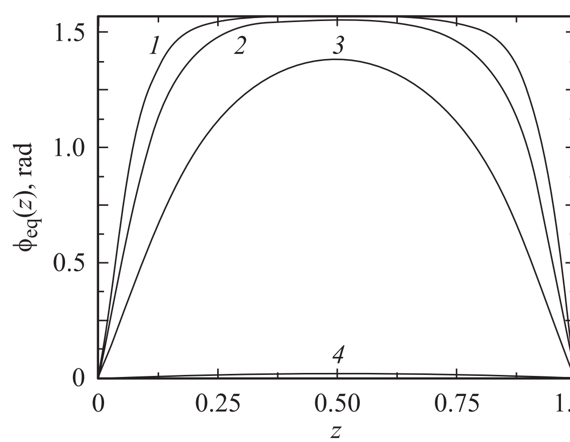

Рис. 5. Распределение стационарного угла $\phi(z)$ по НТЯ, рассчитанное с помощью уравнения (4) и условия (9). $\frac{Ad}{K_2}\Delta\phi = 0.1$. $E/E_{\rm th}$: *1* — 6.0, *2* — 4.0, *3* — 2.0, *4* — 1.0.

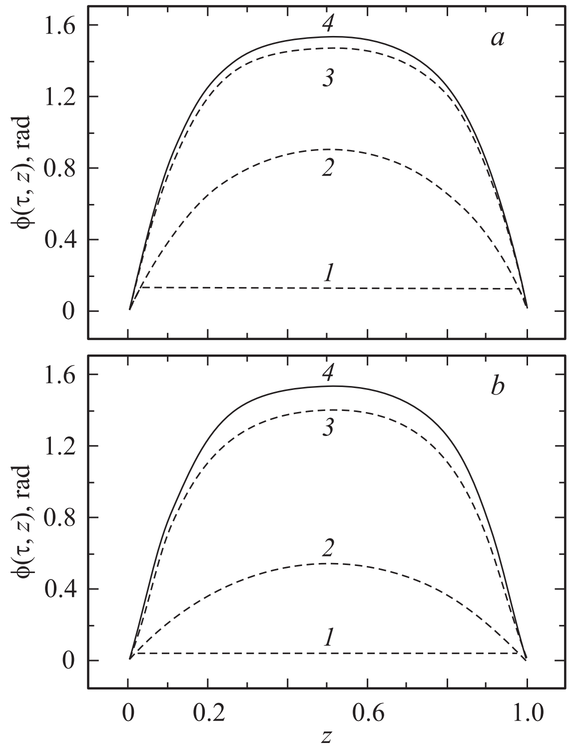

Рис. 6. То же, что на рис. 1 в случае, когда угол рассчитан с помощью (3) и (9), при $E/E_{\text{th}} = 3.0$. $\frac{Ad}{K_2}\Delta\phi$: a — 0.1, b — 0.01. τ: a — 0 (*1*), 0.02 (*2*), 0.04 (*3*), 0.075 (τ_R) (*4*), b — 0 (*1*), 0.04 (*2*), 0.08 (*3*), 0.125 (τ_R) (*4*).

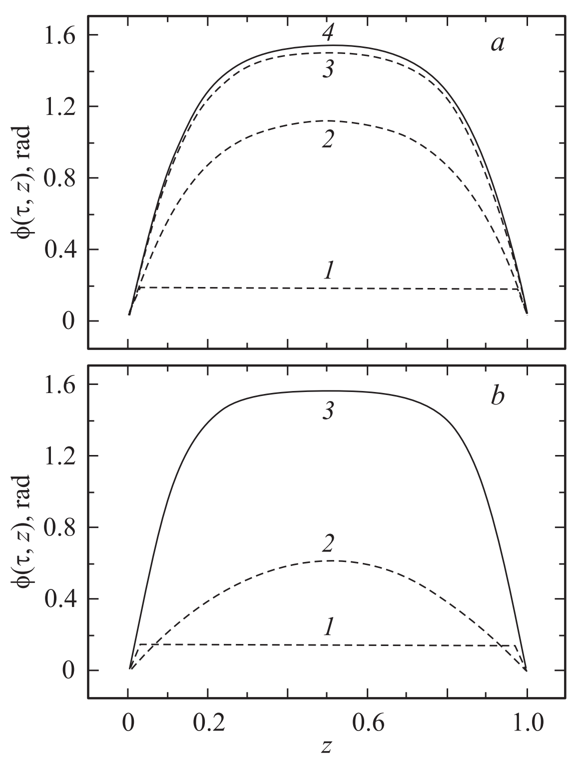

Рис. 7. То же, что и на рис. 6, при $\frac{Ad}{K_2}\Delta\phi = 0.1$. E/E_{th}: a — 3.0, b — 4.0. τ: a — 0.01 (*1*), 0.03 (*2*), 0.05 (*3*), 0.0075 (τ_R) (*4*), b — 0.01 (*1*), 0.03 (*2*), 0.06 (τ_R) (*3*).

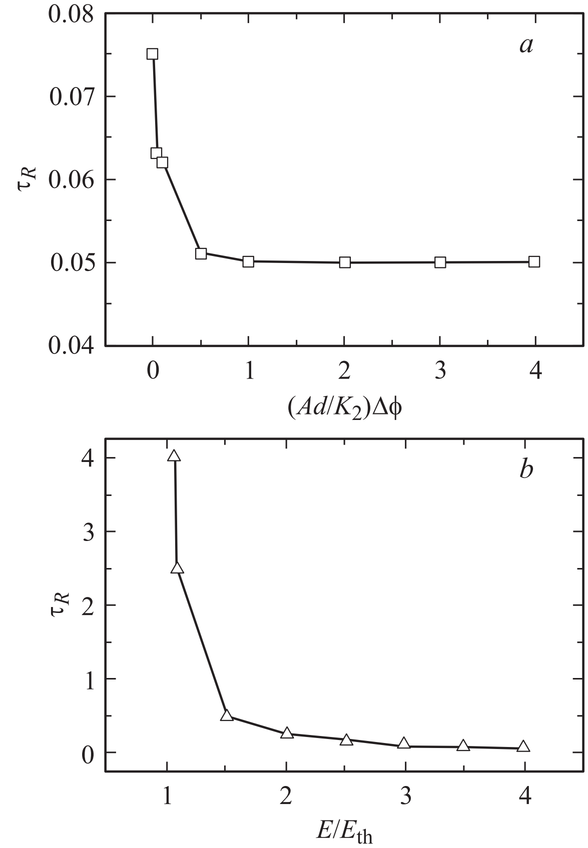

Рис. 8. Влияние нормированной плотности энергии сцепления $\frac{Ad}{K_2}\Delta\phi$ при $E/E_{\text{th}} = 4.0$ (a) и нормированного внешнего поля E/E_{th} при $\frac{Ad}{K_2}\Delta\phi = 0.1$ (b) на время релаксации τ_R, рассчитанное с помощью (3) и (9).

граничным условием (9), при значениях $\frac{Ad}{K_2}\Delta\phi = 0.01$ и 0.1 и величине внешнего поля $E/E_{\text{th}} = 3.0$ представлена на рис. 6. С ростом значений $\frac{Ad}{K_2}\Delta\phi$ от 0.01 до 0.1 значение времени релаксации τ_R медленно изменяется между 0.075 и 0.125. Релаксация директора $\hat{\mathbf{n}}$ к его равновесной ориентации при значениях $E/E_{\text{th}} = 3.0$ и 4.0 показана на рис. 7. Рост внешнего поля E/E_{th} при фиксированном значении $\frac{Ad}{K_2}\Delta\phi = 0.1$ ведет к медленному изменению времени релаксации τ_R между 0.075 и 0.06. Характер влияния внешнего электрического поля E на процесс релаксации директора к равновесной ориентации в НТЯ с граничным условием (9) показан на рис. 8, b. С ростом значений E/E_{th} от ~ 1.0 до 4.0 время релаксации τ_R убывает на порядок. Влияние величины плотности энергии сцепления A на время релаксации τ_R директора к его равновесной ориентации в НТЯ с граничным условием (9) показано на рис. 8, a. Электрическое поле ($E/E_{\text{th}} = 4.0$) поворачивает директор в равновесное положение практически с одним и тем же временем релаксации τ_R, которое медленно убывает с уменьшением значений плотности энергии сцепления до величины 0.075 для $\frac{Ad}{K_2}\Delta\phi = 0.01$ и до величины 0.05 для

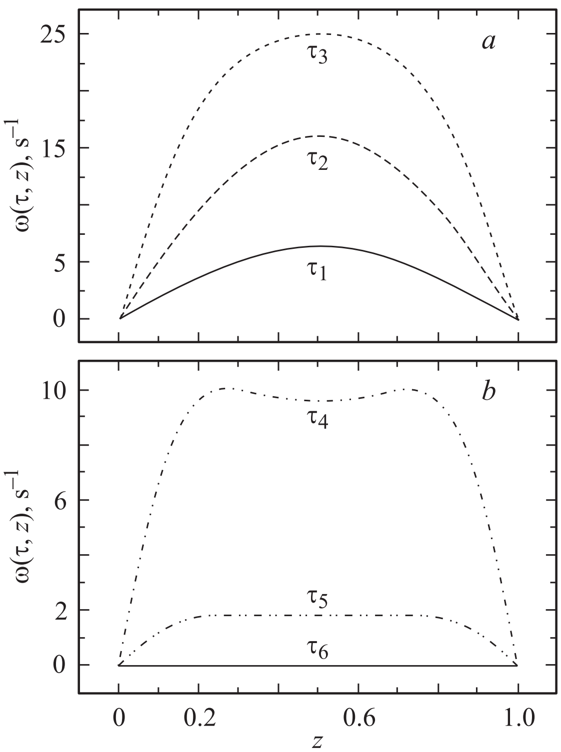

Рис. 9. Угловая скорость $\omega(\tau, z)$ директора $\hat{\mathbf{n}}(\tau, z)$ в НТЯ, рассчитанная с помощью (3) и (9) при $E/E_{\mathrm{th}} = 2.5$ и $\frac{Ad}{K_2}\Delta\phi = 0.1$ для моментов времени $\tau_1 = 0.04$, $\tau_2 = 0.05$, $\tau_3 = 0.06$ (a) и $\tau_4 = 0.075$, $\tau_5 = 0.09$, $\tau_6 = \tau_R = 0.15$ (b).

$\frac{Ad}{K_2}\Delta\phi = 4.0$. Вычисление значений функции $\phi(\tau, z)$ позволяет определить угловую скорость $\omega(\tau, z) = \partial_\tau \phi(\tau, z)$ директора $\hat{\mathbf{n}}$ в НТЯ. Характер изменения угловой скорости $\omega(\tau, z)$ показывает, что при величине внешнего поля $E/E_{\mathrm{th}} = 2.5$ (рис. 9) угловая скорость директора характеризуется увеличением в пределах первого интервала изменения времени релаксации (~ 0.06) до $\omega(\tau, z) = 25\,\mathrm{s}^{-1}$ и быстрым убыванием до нуля в пределах второго интервала его изменения (~ 0.15). Заметим, что второй интервал характеризуется сложным поведением $\omega(\tau, z)$. Значения $\omega(\tau, z)$, соответствующие $\tau = \tau_4$ (рис. 9, b), показывают, что самые высокие скорости $\omega(\tau_4, z)$ реализуются посередине между границами и центром ячейки.

2.3. Случай решения в виде бегущей волны. Рассмотрим релаксационные процессы в форме бегущих волн, распространяющихся в НТЯ с вязкой диссипацией, определяемой динамическим уравнением Колмогорова–Фишера [11,12]

$$\gamma_1 \partial_t \phi(t, z) = K_2 \partial_{zz} \phi(t, z) + \Delta \sin 2\phi(t, z), \tag{10}$$

где $\Delta = \frac{\epsilon_0 \epsilon_a E^2}{2}$. Поскольку в нашем случае поле $\mathbf{E}$ направлено параллельно оси y, состояние $\phi_{z=0}(z) = 0$ нестабильно и фронт $\phi(t, z)$ начинает двигаться от одного края $(z = 0)$ ячейки к другому $(z = d)$. Его скорость определяется балансом упругого, электрического и гидродинамического моментов. Асимптотическая скорость υ задается простым динамическим механизмом, и $\phi(t = 0, z)$ убывает экспоненциально с длиной когерентности, обратно пропорциональной величине поля E. Скорость распространения фронта υ получается при подстановке выражения

$$\phi(t, z) \sim \exp\left[-E\sqrt{\frac{\epsilon_0\epsilon_a}{K_2}}\,(z - \upsilon t)\right] \tag{11}$$

в линеаризованное уравнение (10). Очевидно, что самая низкая скорость имеет значение

$$\upsilon = 2\sqrt{\frac{\epsilon_0\epsilon_a K_2}{\gamma_1^2}\,E}, \tag{12}$$

т.е. пропорциональна величине электрического поля E, а самая узкая волна с шириной κ обратно пропорциональна величине поля E

$$\kappa = \sqrt{\frac{K_2}{\epsilon_0\epsilon_a}}\,\frac{1}{E}. \tag{13}$$

Таким образом, только при условии $\kappa < d$ или $E > E_{\mathrm{th}}/\pi$ возможно формирование режима релаксации в виде бегущей волны в НТЯ.

2.4. Температуры, близкие к T_{NA}. По мере того как температура ячейки приближается к T_{NA}, предпереходные флуктуации становятся достаточными для того, чтобы вызывать новый момент $\mathbf{T}_{\mathrm{fl}}$, который противодействует $\mathbf{T}_{\mathrm{vis}}$. Физическая природа $\mathbf{T}_{fl}$ связана с влиянием сдвигового течения на область флуктуаций. В результате эффект флуктуаций в нулевом приближении отражается в перенормировке коэффициентов γ_1 и K_2 [13–16]

$$\overline{\gamma} = \gamma_1 + \gamma_1^c, \tag{14}$$

$$\overline{K}_2 = K_2 + K_2^c, \tag{15}$$

где $\gamma_1^c = \frac{k_B T}{4}\,\frac{\pi}{\xi_0}\sqrt{\frac{\rho_m}{K_1}}\,\eta^{\nu-1}$. Здесь K_1 — коэффициент поперечной упругой деформации, ρ_m — плотность вещества, ξ_0 — базовая корреляционная длина, $\eta = (T/T_{NA} - 1)$ — нормированная температура, $\nu = \nu_{\parallel}$ — критический показатель. В нашем случае деформация кручения K_2^c может быть записана в виде [13]

$$K_2^c = \frac{k_B T}{6}\,\frac{\pi}{l^2}\,\frac{\xi_\perp^2}{\xi_\parallel} = \frac{k_B T}{6}\,\frac{\pi}{l^2}\,\frac{\xi_{0,\perp}^2}{\xi_{0,\parallel}}\,\eta^{-2\nu_\perp + \nu_\parallel}. \tag{16}$$

Здесь l — интервал между слоями образующейся смектической фазы, $\xi_\parallel = \xi_{0,\parallel}\eta^{-\nu_\parallel}$ и $\xi_\perp = \xi_{0,\perp}\eta^{-\nu_\perp}$ — продольная и поперечная корреляционные длины, $\xi_{0,\parallel}$ и $\xi_{0,\perp}$ — их базовые части соответственно. Следует отметить, что в окрестности T_{NA}

$$\lim_{\eta\to 0}\frac{\overline{K}_2}{\overline{\gamma}_1} \sim \frac{\eta^{-2\nu_\perp + \nu_\parallel}}{\eta^{-1+\nu_\parallel}} \sim \eta^{1-2\nu_\perp}.$$

В случае полярного ЖК 8ЦБ $\nu_\parallel \sim 0.67$, $\nu_\perp \sim 0.55$, $\xi_{0,\parallel} \sim 0.45\,\mathrm{nm}$ и $\xi_{0,\perp} \sim 0.2\,\mathrm{nm}$ [4,5], и приведеный выше предел принимает значение $\lim_{\eta\to 0}\frac{K_2}{\gamma_1} \to \infty$. В результате эффект флуктуаций отражается в перенормировке величин γ_1 и K_2 в уравнении (10) в $\bar{\gamma}_1$ и $\overline{K}_2$ соответственно, и с учетом указанного выше в окрестности T_{NA} уравнение (10) принимает вид

$$\partial_{zz}\phi(t,z) = 0. \qquad (17)$$

Вместе с граничными условиями $\phi_{z=0,1}(z) = 0$, соответствующими случаю сильного сцепления молекул ЖК с ограничивающими поверхностями, решение уравнения (17) имеет вид $\phi = \phi_s(T_{NA}) \equiv 0$. Физически это означает, что директор недеформирован по всему сечению ячейки подобно случаю, когда внешнее электрическое поле отсутствует, а температура значительно выше T_{NA}. В другом случае, когда температура НТЯ близка к T_{NA}, а граничное условие

$$\partial_z\phi(t,z)_{z=0,1} = 0, \qquad (18)$$

что соответствует случаю слабого сцепления молекул ЖК с ограничивающими поверхностями, уравнение (17) имеет решение $\phi(z) = \phi_s(T_{NA})$. Физически это означает, что ориентация директора однородна по всему сечению НТЯ. Следует отметить, что вблизи температуры переходы второго рода T_{NA} скорость распространения бегущей волны $\upsilon = 0$. Это следует непосредственно из определения скорости бегущей волны в виде

$$\lim_{\eta\to 0}\upsilon = \lim_{\eta\to 0}\left[2\sqrt{\frac{\epsilon_0\epsilon_a K_2}{\gamma_1^2}}\,E\right] \to 0, \qquad (19)$$

поскольку в этой формуле использовались разные скорости расходимости величин K_2 и γ_1 вблизи T_{NA}. Таким образом, в окрестности температуры перехода T_{NA}, когда значения температуры отличаются от T_{NA} на несколько десятков mK, ориентация поля директора становится однородной и $\phi \equiv 0$ по всему сечению ячейки. Такое аномальное выравнивание распределения поля директора $\hat{\mathbf{n}}$, когда роль электрического поля становится важной только при значениях $\mathbf{E}$, возрастающих пропорционально $(T/T_{NA} - 1)^\nu$ по мере охлаждения образца нематика, при температуре порядка десятков mK выше T_{NA}, по-видимому, можно наблюдать экспериментально. Следует отметить, что момент силы $T_{\text{sur}} = K_2\sin(\phi_s)/\xi$, действующий на директор $\hat{\mathbf{n}}$, на поверхности ячейки стремится сориентировать его вдоль направления электрического поля $\mathbf{E}$, в то время как момент сил $T_{\text{anchor}} = -\partial W/\partial\phi_s$, обусловленный энергией сцепления W, стремится развернуть директор в противоположном направлении (параллельно оси легкого ориентирования $\hat{\mathbf{e}}$). Здесь $\xi = \sqrt{K_2/(\epsilon_0\epsilon_a)}/E$ — электрическая длина когеренстности [1]. Таким образом, баланс моментов, действующих на директор $\hat{\mathbf{n}}_s$ на поверхности, принимает вид

$$T_{\text{sur}} + T_{\text{anchor}} = \frac{K_2}{\xi}\sin\phi_s - \partial_{\phi_s}W$$
$$= \frac{K_2}{\xi}\sin\phi_s - \frac{A}{2}\sin 2(\phi_s - \phi_0) = 0. \qquad (20)$$

Здесь ϕ_s — азимутальный угол ориентации директора на поверхности, ϕ_0 — азимутальный угол ориентации оси легкого ориентирования. Таким образом, имеем соотношение, связывающее энергию сцепления молекул ЖК с твердой поверхностью, упругие и диэлектрические свойства ЖК и углы $\Delta\phi = \phi_s - \phi_0$ и ϕ_s,

$$A\sin 2\Delta\phi = 2\sqrt{K_2\epsilon_0\epsilon_a}E\sin\phi_s. \qquad (21)$$

Когда температура $T \to T_{NA}$, плотность энергии сцепления A также стремится к бесконечности пропорционально $\eta^{-\nu_\perp+\nu_\parallel/2}$ с уменьшением η. Недавно с помощью методов динамического светового рассеяния был зафиксирован аномальный рост плотности энергии сцепления A для соединения 8ЦБ при температурах, близких к T_{NA} [17]. Учитывая тот факт, что коэффициент твистовой деформации Франка вблизи температуры фазового перехода ($T \sim 307$ K) K_2(8ЦБ) ~ 8 pN [9,18], можем рассчитать пороговое напряжение, соответствующее размерам этой ячейки: $U_{\text{th}} = \pi\sqrt{\frac{K_2}{\epsilon_0\epsilon_a}} \sim 0.9$ V. Экспериментально установлено, что значение угла $\Delta\phi$ мало и составляет $\sim 10^\circ$ [10], поэтому $\sin 2\Delta\phi \sim 2\Delta\phi$. Таким образом, мы располагаем уравнением, позволяющим рассчитать значение угла ϕ_s

$$\sin\phi_s = \frac{\Delta\phi A}{\sqrt{K_2\epsilon_0\epsilon_a}E} = \frac{\Delta\phi A}{\sqrt{K_2\epsilon_0\epsilon_a}}\,\frac{d}{U}.$$

Все это позволяет получить величину $\sin\phi_s(T_{NA}) \sim 0.05$. Таким образом, по мере охлаждения помещенной во внешнее электрическое поле нематической ячейки с ЖК, допускающим фазовый переход второго рода, начальная деформация поля директора должна смениться недеформированным однородным распределением поля директора по всему сечению НТЯ со значением угла $\lim_{T\to T_{NA}}\phi_s(T_{NA}) \sim 0$. Плотность энергии сцепления A как функция температуры, вычисленная с помощью уравнения (21), представлена на рис. 10. При этом

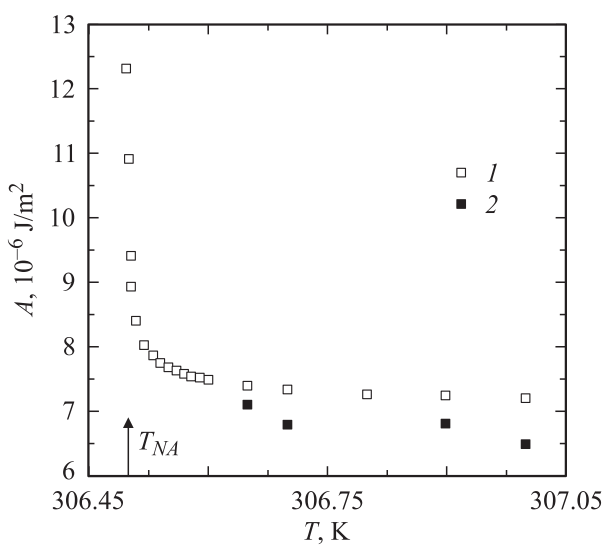

Рис. 10. Зависимость плотности энергии сцепления A от температуры (*1*), рассчитанная с помощью уравнения (21), и измеренные значения A [18] для 8ЦБ (*2*).

наблюдается удовлетворительное согласие расчетных и измеренных [17] с помощью методов динамического рассеяния света значений плотности энергии сцепления.

3. Заключение

В настоящей работе исследовано явление ориентационной релаксации в НТЯ как в случае сильной, так и в случае слабой энергии сцепления молекул ЖК с ограничивающими поверхностями, а также времена релаксации для этих режимов в окрестности температур перехода второго рода нематик–смектик A и вдали от них. Релаксация директора $\hat{\mathbf{n}}$ к его равновесной ориентации $\hat{\mathbf{n}}_{\mathrm{eq}}$ в НТЯ под действием внешнего электрического поля $\mathbf{E}$, направленного параллельно ограничивающим поверхностям, рассчитана с помощью уравнения баланса моментов, образованных электрическими, упругими и гидродинамическими силами, действующими на директор. Установлено, что с уменьшением электрического поля величина времени релаксации как в случае сильного, так и в случае слабого сцепления молекул ЖК с ограничивающими поверхностями аномально возрастает. В свою очередь исследование поля угловых скоростей директора в процессе релаксации к его равновесному положению показывает, что под действием электрического поля его величина достигает максимума в пределах короткого промежутка времени релаксации, а потом медленно убывает к нулю. Установлен режим, который способствует возникновению бегущих волн в процессе релаксации директора в НТЯ. Численные исследования релаксационных процессов в области температур, близких к T_{NA}, т.е. в нескольких десятках mK от T_{NA}, в нематической фазе показывают, что в этом режиме устанавливается однородное недеформированное состояние поля директора по всему сечению нематической ячейки. Эта ситуация аналогична случаю сильного сцепления в присутствии только упругих сил при температуре, далекой от T_{NA}. Мы надеемся, что настоящее исследование позволит приблизиться к пониманию не только релаксационных, но и энергетических процессов вблизи точек фазового перехода второго рода и вдали от них.

Список литературы

[1] П. де Жен. Физика жидких кристаллов. Мир, М. (1977). 400 с.
[2] Ch. Rosenblatt. Phys. Rev. Lett. **53**, 791 (1984).
[3] A.V. Zakharov, J. Thoen. Phys. Rev. E **69**, 011 704 (2004).
[4] B.M. Ocko, A. Braslau, P.S. Pershan, J. Als-Nielsen, M. Dentch. Phys. Rev. Lett. **57**, 94 (1986).
[5] B.M. Ocko. Phys. Rev. Lett. **64**, 2160 (1990).
[6] А.П. Прудников, Ю.А. Брычков, О.И. Маричев. Интегралы и ряды. Физматгиз, М. (2003). 626 с.
[7] И.С. Березин, Н.Р. Жидков. Методы вычисления. Физматгиз, М. (1964). 464 с.
[8] A. Rapini, M. Papoular. J. Phys. Colloq. (Paris) **30**, *1*, 4 (1969).
[9] P.P. Karat, N.V. Madhusudana. Vol. Cryst. Liq. Cryst. **40**, 239 (1977).
[10] L.Z. Ruan, M.A. Osipov, J.R. Sambles. Phys. Rev. Lett. **86**, 4548 (2001).
[11] А.Н. Колмогоров, Г.И. Петровский, Н.С. Пискунов. Бюл. МГУ А *6*, 1 (1937).
[12] R.A. Fisher. Ann. Eugenics **7**, 355 (1937).
[13] F. Jahnig, F. Brochard. J. Phys. (France) **35**, 301 (1974).
[14] R.F. Bruinsma, C.R. Safinya. Phys. Rev. A **43**, 5377 (1991).
[15] A.V. Zakharov, A.A. Vakulenko, J. Thoen. J. Chem. Phys. **118**, 4253 (2003).
[16] A.V. Zakharov, J. Thoen. Eur. Phys. J. E **9**, 461 (2002).
[17] M. Vilfan, M. Copic. Phys. Rev. E **68**, 031 704 (2003).
[18] S. Faetti, V. Palleschi. Liq. Cryst. **2**, 261 (1987).