

01;05

## Ориентационные переходы в слое ферронематика с бистабильным сцеплением на границе

© А.Н. Захлевных, О.Р. Семенова

Пермский государственный национальный исследовательский университет,  
614990 Пермь, Россия  
e-mail: zakhlevn@psu.ru, semenova\_ok@rambler.ru

(Поступило в Редакцию 4 марта 2011 г.)

В рамках континуальной теории показана возможность индуцированного внешним магнитным полем перехода первого рода между гомеотропной фазой и гибридной гомеотропно-планарной фазой в ферронематическом жидком кристалле (ферронематике) с бистабильным сцеплением на границе слоя, а также возвратных переходов. Определены критические значения материальных параметров ферронематика, энергии сцепления, толщины слоя и напряженности магнитного поля, при которых возможен этот переход. Рассмотрены случаи как положительной, так и отрицательной диамагнитной анизотропии ферронематика.

### Введение

Как известно, большинство существующих жидкокристаллических ячеек моностабильны, т.е. обладают единственной устойчивой конфигурацией директора (единичного вектора  $\mathbf{n}$ , характеризующего среднюю ориентацию молекул жидкого кристалла), которая может быть изменена в результате приложенного внешнего воздействия. В таких ячейках индуцированная конфигурация директора поддерживается внешним полем, что требует энергетических затрат. В отличие от них в бистабильных жидкокристаллических ячейках, обладающих двумя устойчивыми состояниями, внешнее поле прикладывает только для переключения директора из одного состояния в другое. Для создания бистабильности обычно производят структурную обработку поверхностей ячейки [1,2], а для теоретического описания используют различные виды потенциала поверхностного сцепления [3–8].

В настоящей работе исследуются индуцированные магнитным полем ориентационные переходы в плоском слое ферронематика. Ферронематик представляет собой разбавленную суспензию игольчатых частиц ферро- или ферриматнетика в нематическом жидком кристалле. Отличительной его особенностью является то, что в нем наряду с характерным для жидких кристаллов квадрупольным (диамагнитным) механизмом воздействия магнитного поля имеется еще и дипольный (ферромагнитный) механизм влияния поля  $\mathbf{H}$  на магнитные моменты феррочастиц, внедренных в нематическую матрицу. Диамагнитные взаимодействия между магнитным полем и директором квадратичны по полю  $\mathbf{H}$ , а взаимодействие между магнитными частицами и полем линейно по  $\mathbf{H}$ , поэтому дипольный механизм определяет поведение ферронематика в слабых полях. По этой причине ферронематики чувствительны к приложенному магнитному полю и ориентируются в отличие от обычных нематиков достаточно слабым полем.

Предполагается, что на верхней границе ячейки имеется абсолютно жесткое гомеотропное сцепление с поверхностью, а на нижней возможна как планарная, так и гомеотропная ориентация директора; каждое из этих состояний директора на нижней границе является локально устойчивым и обладает одинаковой энергией сцепления (бистабильное сцепление). Планарное и гомеотропное состояния разделены потенциальным барьером конечной высоты, который может быть преодолен вследствие мягкого сцепления воздействием внешнего поля на директор.

Подобно тому как авторы работы [7] анализируют конкуренцию флексоэлектрического и диэлектрического эффектов и их влияние на переключение бистабильной ячейки нематика в электрическом поле, в настоящей работе исследуются ориентационная структура и возможность переключения ориентационного состояния бистабильной ячейки ферронематика в магнитном поле.

Структура работы следующая. В разд. 1 минимизацией функционала свободной энергии получена система уравнений, описывающая ориентационное и магнитное состояния ферронематика со слабым бистабильным сцеплением на поверхности. В разд. 2 изучено основное состояние ферронематика в отсутствие внешнего магнитного поля и найдены пороговые значения энергии сцепления, определяющие область существования однородной гомеотропной фазы. Возможность индуцированного внешним магнитным полем перехода первого рода от гомеотропной фазы в гибридную гомеотропно-планарную фазу и возвратного перехода при различных значениях материальных параметров суспензии исследована в разд. 3. Там же определены критические величины материальных параметров ферронематика, энергии сцепления, толщины слоя и величины магнитного поля, при которых возможен переход между гомеотропным и гомеотропно-планарным состояниями ферронематика.

## 1. Уравнения ориентационного равновесия

### 1.1. Свободная энергия ферронематика

Равновесная конфигурация полей директора и намагниченности определяется условием минимума полной свободной энергии ферронематика

$$F = \int F_V dV + \oint F_S dS, \quad (1)$$

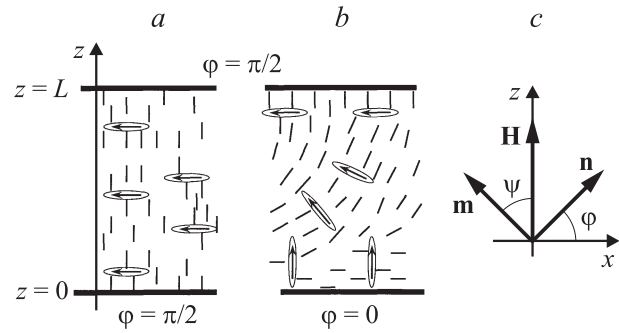
включающей в себя как объемную, так и поверхностную части.

Объемная плотность свободной энергии ферронематика имеет вид [9,10]

$$F_V = \frac{1}{2} \left[ K_{11} (\text{div} \mathbf{n})^2 + K_{22} (\mathbf{n} \text{ rot} \mathbf{n})^2 + K_{33} (\mathbf{n} \times \text{rot} \mathbf{n})^2 \right] - \frac{1}{2} \sigma |\chi_a| (\mathbf{n} \mathbf{H})^2 - M_s f \mathbf{m} \mathbf{H} + \frac{W_p}{d} f (\mathbf{m} \mathbf{n})^2 + \frac{k_B T}{v} f \ln f. \quad (2)$$

Здесь  $K_{ii}$  — константы Франка ориентационной упругости жидкого кристалла,  $\chi_a$  — анизотропия магнитной восприимчивости ( $\sigma = 1$  для  $\chi_a > 0$  и  $\sigma = -1$  для  $\chi_a < 0$ ),  $\mathbf{H}$  — напряженность внешнего магнитного поля,  $M_s$  — намагниченность насыщения материала магнитных частиц,  $v$  — объем частицы,  $f$  — объемная доля магнитных частиц в суспензии,  $\mathbf{m}$  — единичный вектор намагниченности  $\mathbf{M} = M_s f \mathbf{m}$  ферронематика,  $d$  — диаметр частицы,  $T$  — температура,  $k_B$  — постоянная Больцмана. Параметр  $W_p$  представляет собой анизотропную часть энергии поверхностного натяжения и называется энергией сцепления магнитных частиц с нематической матрицей.

Слагаемое в квадратных скобках в выражении (2) представляет собой плотность свободной энергии искаженного состояния поля директора (потенциал Франка), последующие два вклада описывают квадрупольный и дипольный механизмы взаимодействия диамагнитной нематической матрицы и магнитных моментов частиц  $\boldsymbol{\mu} = M_s v \mathbf{m}$  с магнитным полем соответственно. Предпоследнее слагаемое определяет поверхностное взаимодействие частиц с директором [9]. Мы полагаем  $W_p > 0$ , что в отсутствие поля минимуму энергии соответствуют гомеотропные ( $\mathbf{m} \perp \mathbf{n}$ ) условия сцепления на частицах, при которых их длинные оси перпендикулярны директору ( $W_p \sim 10^{-3} - 10^{-1}$  дин/см [9]). В случае  $\chi_a > 0$  директор  $\mathbf{n}$  и длинные оси магнитных частиц стремятся ориентироваться вдоль приложенного магнитного поля. Однако, если на поверхности магнитных частиц созданы гомеотропные условия сцепления, при которых директор  $\mathbf{n}$  ортогонален длинным осям частиц, указанные ориентационные механизмы являются конкурирующими. При  $\chi_a < 0$  директор стремится ориентироваться перпендикулярно полю и дипольный и квадрупольный механизмы ориентации ферронематика полем усиливают друг друга. Вследствие малой концентрации  $f \ll 1$



**Рис. 1.** Схема бистабильной ячейки ферронематика: *a* — в гомеотропной фазе, *b* — в гомеотропно-планарной фазе, *c* — ориентация директора  $\mathbf{n}$  и единичного вектора намагниченности  $\mathbf{m}$  относительно напряженности магнитного поля  $\mathbf{H}$ .

частиц в суспензии магнитное диполь-дипольное взаимодействие между ними полагаем отсутствующим. Последнее слагаемое в потенциале (2) описывает вклад энтропии смешения идеального газа магнитных частиц.

Будем полагать, что на верхней границе ячейки заданы условия жесткого гомеотропного сцепления, так что в отсутствие поля директор перпендикулярен верхней границе, а на нижней границе слоя имеется двукратное вырождение по ориентациям, описываемое потенциалом вида

$$F_S = 4W_0 [1 - (\mathbf{n} \mathbf{e}_x)^2] [1 - (\mathbf{n} \mathbf{e}_z)^2]. \quad (3)$$

Здесь  $W_0 > 0$  — поверхностная плотность энергии сцепления нематика с нижней границей, являющаяся мерой глубины минимумов  $F_S$ ,  $\mathbf{e}_x = (1, 0, 0)$  и  $\mathbf{e}_z = (0, 0, 1)$  — единичные векторы двух осей легкого ориентирования. При  $W_0 > 0$  потенциал (3) имеет минимум при  $\mathbf{n} \parallel \mathbf{e}_x$  либо при  $\mathbf{n} \parallel \mathbf{e}_z$ .

Направим магнитное поле по нормали к слою  $\mathbf{H} = (0, 0, H)$ . В этом случае директор и намагниченность остаются в плоскости  $(x, z)$  двух бистабильных ориентаций и компоненты векторов  $\mathbf{n}$  и  $\mathbf{m}$  можно искать в виде (см. рис. 1)

$$\mathbf{n} = (\cos \varphi(z), 0, \sin \varphi(z)),$$

$$\mathbf{m} = (-\sin \psi(z), 0, \cos \psi(z)). \quad (4)$$

Так как сцепление на верхней границе слоя ( $z = L$ ) предполагается абсолютно жестким и гомеотропным, то

$$\varphi(z)|_{z=L} = \pi/2. \quad (5)$$

Используя в (3) соотношение (4) для директора  $\mathbf{n}$ , получаем

$$F_S = W_0 \sin^2(2\varphi_0). \quad (6)$$

Здесь  $\varphi_0 = \varphi(z)|_{z=0}$  — значение угла  $\varphi$  на нижней границе слоя. Поверхностный потенциал (6) имеет два минимума: при  $\varphi_0 = 0$ , когда  $\mathbf{n} \parallel \mathbf{e}_x$ , и  $\varphi_0 = \pi/2$ , т.е. при  $\mathbf{n} \parallel \mathbf{e}_z$ . Первый из них отвечает планарному сцеплению директора с нижней границей слоя, второй — гомеотропному сцеплению. Потенциал (6) анализировался

ранее применительно к нематическим [7,8] и холестерическим [11] жидким кристаллам.

Выберем в качестве единицы длины толщину ячейки  $L$ , тогда безразмерная координата  $\tilde{z} = z/L$ . Определим безразмерные параметры  $k = K_{11}/K_{33}$ ,  $w_p = L^2 f_0 W_p / (K_{33} d)$ ,  $\xi = M_s f_0 L / \sqrt{K_{33} |\chi_a|}$ ,  $\kappa = L^2 f_0 k_B T / (v K_{33})$  и безразмерную напряженность магнитного поля  $h = LH \sqrt{|\chi_a| / K_{33}}$ .

Здесь  $f_0 = Nv/V$  представляет собой среднюю концентрацию магнитных частиц в суспензии,  $N$  — число частиц,  $V$  — объем ферронематика. Безразмерный параметр  $k$  характеризует анизотропию ориентационной упругости,  $w_p$  — безразмерную энергию сцепления магнитных частиц с директором. Смысл параметров  $\xi$  и  $\kappa$  обсуждался в работах [10–13]. Параметр  $\xi = H_q/H_d$  характеризует режимы влияния внешнего поля на ферронематик. Он представляет собой [12] отношение двух характерных полей, где  $H_d \approx K_{33}/(M_s f_0 L^2)$  — поле, при котором искажение директора вызывается дипольным механизмом;  $H_q \approx L^{-1} \sqrt{K_{33} |\chi_a|}$  — характерное поле, вызывающее искажение директора под действием квадрупольного механизма. Если  $\xi \gg 1$ , то ориентационные деформации происходят благодаря дипольному механизму, а в случае  $\xi \ll 1$  — квадрупольному. Параметр  $\kappa = (L/\lambda)^2$ , где  $\lambda = \sqrt{v K_{33} / f_0 k_B T}$  — так называемая сегрегационная длина [10], задающая характерный масштаб области концентрационного расслоения. Параметр  $\kappa$  ответствен за сегрегационный эффект; в пределе  $\kappa \gg 1$  этот эффект несуществен.

## 1.2. Уравнения равновесия

Подставляя в (2) соотношения (4), находим для объемной плотности свободной энергии

$$F_V = \frac{K_{33}}{L^2} \left\{ \frac{1}{2} [k \cos^2 \varphi + \sin^2 \varphi] \left( \frac{d\varphi}{d\tilde{z}} \right)^2 - \frac{1}{2} \sigma h^2 \sin^2 \varphi - \xi h \frac{f}{f_0} \cos \psi + w_p \frac{f}{f_0} \sin^2(\varphi - \psi) + \kappa \frac{f}{f_0} \ln f \right\}. \quad (7)$$

Свободная энергия (1) представляет собой функционал относительно углов ориентации директора  $\varphi(\tilde{z})$ , намагниченности  $\psi(\tilde{z})$  и концентрации  $f(\tilde{z})$ , в котором теперь  $F_S$  и  $F_V$  определены выражениями (6) и (7). Минимизация (1) по  $\psi(\tilde{z})$  дает так называемое [9] уравнение связи

$$\xi h \sin \psi = w_p \sin 2(\varphi - \psi) \quad (8)$$

между ориентациями директора и намагниченности. Минимизация (1) по  $f(\tilde{z})$  приводит к распределению концентрации магнитных частиц в суспензии

$$f = f_0 Q \exp \left\{ \frac{\xi h}{\kappa} \cos \psi - \frac{w_p}{\kappa} \sin^2(\varphi - \psi) \right\}, \quad (9)$$

где величина  $Q$  определяется соотношением нормировки

$$\int f dV = Nv, \quad (10)$$

представляющим собой условие постоянства числа магнитных частиц в суспензии. Выражение (9) описывает так называемый эффект сегрегации [10], заключающийся в концентрационном перераспределении магнитной примеси по образцу, в результате которого магнитные частицы накапливаются в тех местах слоя, где минимальна сумма их магнитной энергии во внешнем поле и ориентационной энергии в нематической матрице.

Минимизация по  $\varphi(\tilde{z})$  приводит к уравнению

$$(k \cos^2 \varphi + \sin^2 \varphi) \frac{d^2 \varphi}{d\tilde{z}^2} + \frac{1}{2} (1 - k) \sin 2\varphi \left( \frac{d\varphi}{d\tilde{z}} \right)^2 = -\frac{1}{2} \sigma h^2 \sin 2\varphi + w_p \frac{f}{f_0} \sin 2(\varphi - \psi),$$

которое интегрируется с помощью уравнений (8) и (9) и приводится к виду

$$\frac{d\varphi}{d\tilde{z}} = \pm \sqrt{A(\varphi, \psi(\varphi))}, \quad (11)$$

или в интегральной форме

$$\tilde{z} = \pm \int_{\varphi_0}^{\varphi(\tilde{z})} A^{-1/2}(\varphi, \psi(\varphi)) d\varphi, \quad (12)$$

где

$$A(\varphi, \psi(\varphi)) = (C - \sigma h^2 \sin^2 \varphi - 2\kappa f / f_0) / (k \cos^2 \varphi + \sin^2 \varphi). \quad (13)$$

Здесь  $C$  — константа интегрирования. Интегрируя уравнение (11) по толщине слоя, получаем уравнение для  $C$ :

$$\pm \int_{\varphi_0}^{\pi/2} A^{-1/2}(\varphi, \psi(\varphi)) d\varphi = 1. \quad (14)$$

Подставляя (9) в (10) и переходя от интегрирования по координате  $\tilde{z}$  к интегрированию по углу  $\varphi$  с помощью (11), находим

$$Q^{-1} = \pm \int_{\varphi_0}^{\pi/2} A^{-1/2} \exp \left\{ \frac{\xi h}{\kappa} \cos \psi - \frac{w_p}{\kappa} \sin^2(\varphi - \psi) \right\} d\varphi. \quad (15)$$

Минимизация полной свободной энергии (1) по  $\varphi_0 = \varphi(\tilde{z})|_{\tilde{z}=0}$  приводит к уравнению

$$\pm (k \cos^2 \varphi_0 + \sin^2 \varphi_0) A^{1/2}(\varphi_0, \psi(\varphi_0)) = 2w_0 \sin 4\varphi_0. \quad (16)$$

Здесь введено обозначение  $w_0 = W_0 L / K_{33}$  для безразмерной энергии сцепления директора с нижней поверхностью ячейки. Граничное условие на верхней границе слоя  $\tilde{z} = 1$ , согласно (5), представляет собой

$$\varphi(\tilde{z})|_{\tilde{z}=1} = \pi/2. \quad (17)$$

Уравнение (11) допускает существование решений, для которых  $d\varphi/d\tilde{z} < 0$ , либо  $d\varphi/d\tilde{z} > 0$ . В гомеотропно-планарной фазе  $d\varphi/d\tilde{z} > 0$  и в уравнениях (11)–(15) следует брать знак „плюс“, а в гомеотропной фазе ввиду немонотонности функции  $\varphi(\tilde{z})$  производная  $d\varphi/d\tilde{z}$  может иметь любой знак. По этой же причине, согласно (11), в уравнении (16) для  $0 < \varphi_0 < \pi/4$  следует брать знак „плюс“, а для  $\pi/4 < \varphi_0 < \pi/2$  — знак „минус“.

Таким образом, полная система уравнений ориентационного равновесия ферронематика содержит уравнения (4), (8), (9) и (12)–(17). Она допускает решения, отвечающие однородному гомеотропному упорядочению, при котором  $\varphi(\tilde{z}) \equiv \pi/2$ , т.е. директор во всем объеме ячейки ортогонален границам, а также гибриднему гомеотропно-планарному упорядочению, для которого угол  $\varphi$  зависит от координаты  $\tilde{z}$ , так что на верхней границе  $\varphi = \pi/2$ , а на нижней границе  $\varphi = \varphi_0(h, w_0, w_p, k, \xi, \kappa)$  в соответствии с уравнением (16).

Сделаем оценку безразмерных параметров, используя материальные параметры для реальных ферронематиков [8,9,14–16]. Полагая  $d \sim 10^{-5}$  см,  $M_s \sim 10^2$  Г,  $f_0 \sim 10^{-5}$ ,  $K_{33} \sim 10^{-7}$  см,  $\chi_a \sim 10^{-7}$ ,  $W_p \sim 1$  дин/см,  $W_0 \sim 10^{-4}$  дин/см, находим для ячейки толщиной  $L \sim 10^{-3}$  см безразмерные параметры  $\xi \sim 10$ ,  $\kappa \sim 10^{-2}$ ,  $w_p \sim 10$  и  $w_0 \sim 1$ . Параметр  $w_p \sim 10$  отвечает жесткому сцеплению молекул жидкого кристалла с поверхностью магнитных частиц, а  $w_0 \sim 1$  — достаточно мягкому сцеплению с бистабильной нижней границей слоя.

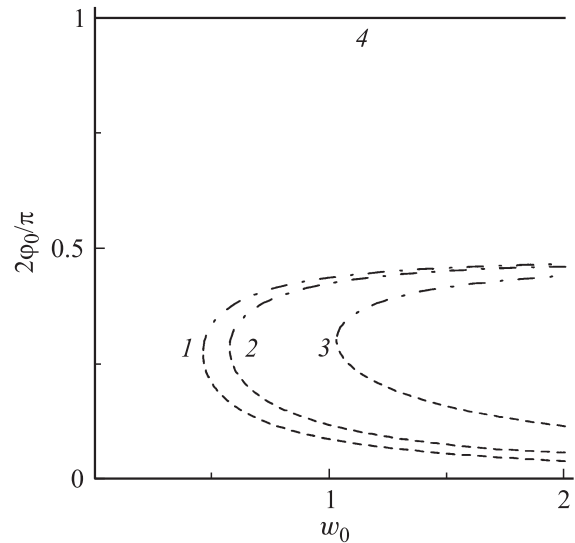
## 2. Ферронематик в отсутствие внешнего магнитного поля

Рассмотрим вначале ориентационную структуру ферронематика в отсутствие поля ( $h = 0$ ). В этом случае уравнения (8) и (11) вместе с граничными условиями (16) и (17) дают  $\varphi(\tilde{z}) = \psi(\tilde{z}) = \pi/2$ , т.е.  $\mathbf{m} \perp \mathbf{n}$ . Это решение отвечает однородной гомеотропной фазе. Наряду с этим при  $h = 0$  уравнение (11) имеет другое решение, соответствующее гомеотропно-планарной фазе, в которой угол  $\varphi$  зависит от координаты  $\tilde{z}$ , так что на верхней границе слоя  $\varphi = \pi/2$ , а на нижней границе  $\varphi = \varphi_0(w_0, k)$ , где  $\varphi_0(w_0, k)$  определяется уравнением

$$\sqrt{k \cos^2 \varphi_0 + \sin^2 \varphi_0} \int_{\varphi_0}^{\pi/2} d\varphi \sqrt{k \cos^2 \varphi + \sin^2 \varphi} = 2w_0 \sin 4\varphi_0. \quad (18)$$

Сама зависимость  $\varphi(\tilde{z})$  неявно задана уравнением

$$\tilde{z} \int_{\varphi_0}^{\pi/2} d\varphi \sqrt{k \cos^2 \varphi + \sin^2 \varphi} = \int_{\varphi_0}^{\varphi(\tilde{z})} d\varphi \sqrt{k \cos^2 \varphi + \sin^2 \varphi}, \quad (19)$$



**Рис. 2.** Зависимость угла  $\varphi_0$  ориентации директора на нижней границе слоя от энергии сцепления  $w_0$  с поверхностью в отсутствие поля. 1 —  $k = 2/3$ , 2 —  $k = 1$ , 3 —  $k = 2.5$ . Прямая 4 отвечает гомеотропному сцеплению на нижней границе слоя.

которое, как и (18), можно записать в терминах эллиптических функций, но в виде (19) оно более удобно для анализа. Как видно из уравнений (9) и (15), в отсутствие поля ( $h = 0$ ) магнитные частицы однородно распределены по объему слоя:  $f(\tilde{z}) = f_0$ .

На рис. 2 показана зависимость  $\varphi_0(w_0, k)$ , определяемая уравнением (18). Видно, что при любых значениях энергии сцепления  $w_0$  имеется решение  $\varphi_0 = \pi/2$  (прямая 4), отвечающее гомеотропной фазе. Однако если энергия сцепления  $w_0$  превышает некоторое критическое значение  $w_{0c}$ , соответствующее вершинам кривых 1–3, то наряду с ним имеется еще решение, описывающее гибридную гомеотропно-планарную фазу (штриховые и штрихпунктирные кривые 1–3 на рис. 2). В гомеотропно-планарной фазе директор не достигает планарного состояния  $\varphi_0 = 0$  на нижней границе при конечных значениях энергии сцепления  $w_0$  из-за упругих искажений в объеме ячейки, вызванных жестким гомеотропным сцеплением на верхней границе. Штриховыми кривыми на рис. 2 изображены решения уравнения (18), отвечающие метастабильной гомеотропно-планарной фазе, а штрихпунктирными кривыми — термодинамически неустойчивые состояния.

Кривые 1–3 на рис. 2 демонстрируют учет влияния анизотропии ориентационной упругости, когда все три константы Франка различны. Видно, что с ростом параметра  $k \equiv K_{11}/K_{33}$  кривые смещаются вправо, так что критическое значение  $w_{0c}$  растет. Сравнение кривых 1 и 3 с кривой 2 ( $k = 1$ ) показывает, что уменьшение значений  $k$  смещает область бистабильного поведения ферронематика в сторону меньших значений энергии сцепления на нижней границе слоя. В отсутствие поля ( $h = 0$ ) при  $k = 1$  легко найти решения системы уравнений ориентационного равновесия. Одно из них

$\varphi(\tilde{z}) \equiv \pi/2$  отвечает гомеотропной фазе, другое

$$\varphi(\tilde{z}) = \left(\frac{\pi}{2} - \varphi_0\right)\tilde{z} + \varphi_0$$

описывает гомеотропно-планарную фазу. Само значение  $\varphi_0$  определяется из уравнения (18) и удовлетворяет соотношению

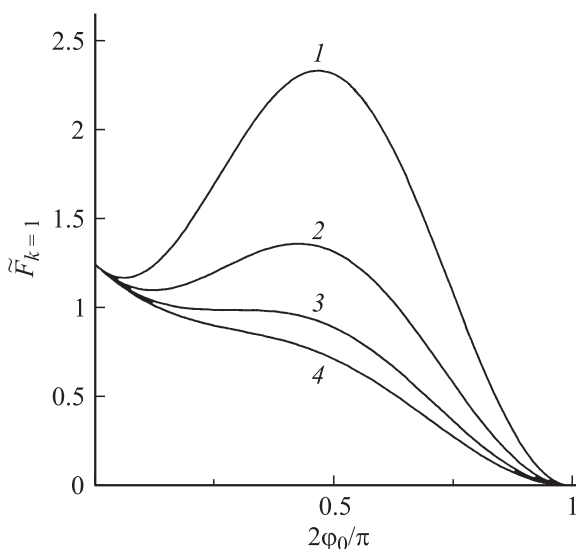
$$w_0 = \frac{\pi/2 - \varphi_0}{2 \sin 4\varphi_0},$$

которое было получено ранее авторами работы [7] при решении другой физической задачи. При значениях  $w_0 < w_{0c}$  ( $w_{0c} = 0.5758$  для  $k = 1$ ) устойчивой является только гомеотропная фаза и бистабильное поведение ячейки отсутствует.

Продемонстрируем возможность перехода между гомеотропным и гомеотропно-планарным состояниями. При  $k = 1$  в отсутствие поля ( $h = 0$ ) полная свободная энергия ферронематика (1) имеет вид

$$\tilde{F}_{k=1} = \frac{FL}{K_{33}S} = \frac{1}{2} \left(\frac{\pi}{2} - \varphi_0\right)^2 + w_0 \sin^2 2\varphi_0, \quad (20)$$

где  $S$  — площадь ограничивающих пластин. На рис. 3 приведена ее зависимость от угла  $\varphi_0$  ориентации директора на нижней границе слоя при различных значениях энергии сцепления  $w_0$ . Как видно в случае  $w_0 > w_{0c}$  (кривые 1 и 2), полная свободная энергия ферронематика имеет два минимума. Один из них ( $\varphi_0 = \pi/2$ ) отвечает абсолютно устойчивой гомеотропной фазе, другой — метастабильной гомеотропно-планарной фазе. Эти два состояния разделены потенциальным барьером, который увеличивается с ростом  $w_0$ . Воздействием магнитного поля этот барьер может быть преодолен, и ячейка может



**Рис. 3.** Зависимость полной энергии ферронематика от угла  $\varphi_0$  ориентации директора на нижней границе слоя в двух-константном приближении ( $k = 1$ ) при  $h = 0$ . 1 —  $w_0 = 2$ , 2 —  $w_0 = 1$ , 3 —  $w_0 = w_{0c}$ , 4 —  $w_0 = 0.4$ .

перейти из гомеотропного состояния в гомеотропно-планарное. При  $w_0 \leq w_{0c}$  (кривые 3 и 4) ячейка имеет только одно устойчивое состояние ( $\varphi_0 = \pi/2$ ). Как видно из рис. 3, при  $w_0 > w_{0c}$  имеется возможность перехода между гомеотропным и гомеотропно-планарным состояниями, при этом ориентация ячейки изменяется скачком, что свидетельствует о переходе первого рода (роль параметра порядка при переходе играет величина  $\sin^2 \varphi_0$ ).

### 3. Ферронематик в магнитном поле

Рассмотрим поведение ферронематика в магнитном поле в отсутствие сегрегации ( $\kappa \gg 1$ ,  $f(\tilde{z}) \equiv f_0$ ). В этом случае система уравнений ориентационного равновесия содержит уравнения (4), (8), (12)–(14), (16) и (17), в которых выражение (13) имеет вид

$$A = \frac{C - \sigma h^2 \sin^2 \varphi - 2\xi h \cos \psi + 2w_p \sin^2(\varphi - \psi)}{k \cos^2 \varphi + \sin^2 \varphi}.$$

В силу того что на верхней границе слоя создано жесткое гомеотропное сцепление директора с поверхностью, в магнитном поле для гомеотропной фазы существуют решения  $\varphi_-$  и  $\varphi_+$ , соответствующие двум функциям  $\varphi(\tilde{z})$ , для которых  $d\varphi/d\tilde{z} < 0$  (в нижней части слоя  $0 \leq \tilde{z} \leq \tilde{z}_*$ ) и  $d\varphi/d\tilde{z} > 0$  (в верхней части слоя  $\tilde{z}_* < \tilde{z} \leq 1$ ); здесь величина  $\tilde{z}_*$  определена условием  $d\varphi/d\tilde{z} = 0$ . В этом случае уравнение (12) принимает вид

$$\tilde{z} = - \int_{\varphi_0}^{\varphi(\tilde{z})} A^{-1/2}(\varphi, \psi(\varphi)) d\varphi \quad \text{при } 0 \leq \tilde{z} < \tilde{z}_*,$$

$$\tilde{z} = - \int_{\varphi_0}^{\varphi_*} A^{-1/2}(\varphi, \psi(\varphi)) d\varphi$$

$$+ \int_{\varphi_*}^{\varphi(\tilde{z})} A^{-1/2}(\varphi, \psi(\varphi)) d\varphi \quad \text{при } \tilde{z}_* < \tilde{z} \leq 1,$$

а уравнение (14)

$$- \int_{\varphi_0}^{\varphi_*} A^{-1/2}(\varphi, \psi(\varphi)) d\varphi + \int_{\varphi_*}^{\pi/2} A^{-1/2}(\varphi, \psi(\varphi)) d\varphi = 1,$$

где  $\varphi_* = \varphi(\tilde{z}_*)$ .

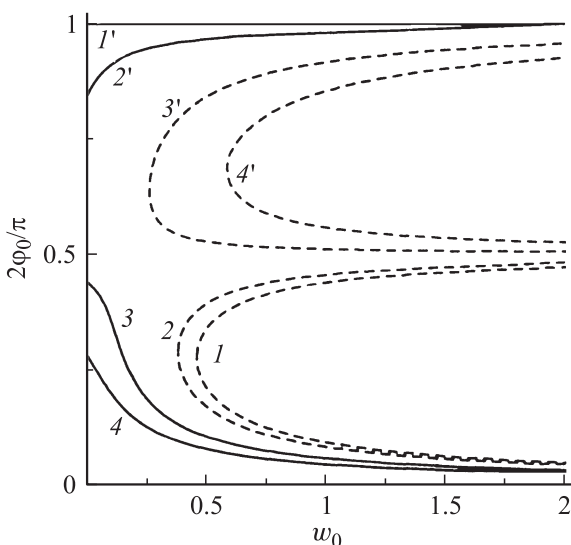
Все последующие численные расчеты выполнены для ферронематика на основе нематика E7, для которого  $k = 2/3$  [16]. Будем полагать, что ориентационные деформации ферронематика происходят преимущественно за счет дипольных взаимодействий (т.е.  $\xi = 5$ ) и имеется жесткое гомеотропное сцепление магнитных частиц с нематической матрицей ( $w_p = 10$ ).

Как отмечалось выше, в отсутствие поля при фиксированной энергии сцепления  $w_0$  на нижней границе бистабильная ячейка ферронематика находится в гомеотропном состоянии, которому отвечает минимум свободной энергии, но внешнее поле может индуцировать переход в гомеотропно-планарную фазу. Этот переход зависит от знака анизотропии диамагнитной восприимчивости.

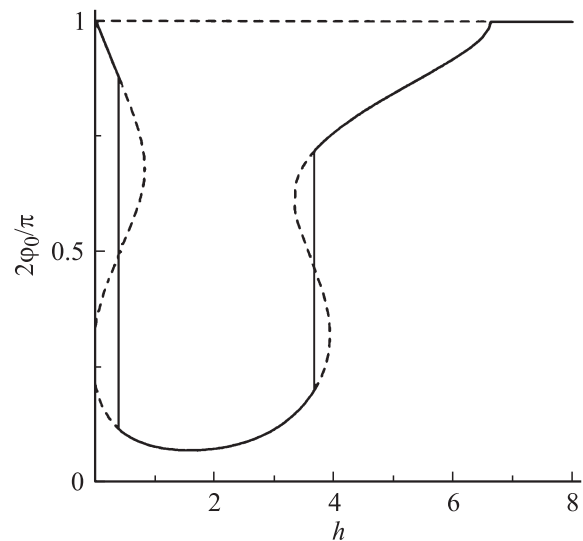
### 3.1. Положительная диамагнитная анизотропия

Если  $\chi_a > 0$  ( $\sigma = 1$ ) и ферронематик находится в гомеотропной фазе, то включение внешнего магнитного поля, перпендикулярного обкладкам слоя, за счет дипольных взаимодействий приводит к повороту магнитных частиц вдоль поля, что из-за гомеотропных условий сцепления с директором приводит к его повороту и переходу в гомеотропно-планарную фазу. Как будет показано ниже, такой переход возможен в дипольном режиме ( $\xi \gg 1$ ) и при достаточно жестком сцеплении магнитных частиц с нематической матрицей.

На рис. 4 показана зависимость  $\varphi_0(w_0)$  в различных магнитных полях. Кривые 1'–4' описывают гомеотропную фазу; кривые 1–4 соответствуют гибридной гомеотропно-планарной фазе. На этом и всех последующих рисунках штриховыми кривыми показаны термодинамически неустойчивые состояния ферронематика. В отсутствие поля (кривые 1 и 1') устойчивой является гомеотропная фаза. Включение магнитного поля приводит к переориентации магнитных частиц в направлении поля, а благодаря их связи с молекулами нематика директор отклоняется от своего первоначального положения, т.е. угол  $\varphi_0$  уменьшается. С ростом поля искажения гомеотропной фазы усиливаются, а кривые  $\varphi_0(w_0)$  для гомеотропно-планарной фазы смещаются влево. В поле  $h = 0.1$  (кривые 2 и 2') гомеотропная фаза еще является



**Рис. 4.** Зависимость угла наклона директора на нижней границе ячейки  $\varphi_0$  от энергии сцепления  $w_0$  для  $\sigma = 1$ . 1 и 1' —  $h = 0$ , 2 и 2' —  $h = 0.1$ , 3 и 3' —  $h = 0.5$ , 4 и 4' —  $h = 1$ .



**Рис. 5.** Зависимость угла наклона директора на нижней границе ячейки  $\varphi_0(h)$  при  $w_0 = 0.5$  и  $\sigma = 1$ .

устойчивой, в то время как при  $h = 0.5$  (кривые 3 и 3') и при  $h = 1$  (кривые 4 и 4') устойчива гомеотропно-планарная фаза. Численно установлено, что при выбранных значениях материальных параметров ориентационный переход из гомеотропной фазы в гомеотропно-планарную происходит при  $h = h_c = 0.39$ .

На рис. 5 показана зависимость  $\varphi_0(h)$  для  $w_0 = 0.5$ . Как видно из рис. 5, при  $h = 0$  устойчива гомеотропная фаза. С ростом поля угол  $\varphi_0$  уменьшается и при  $h = h_c = 0.39$  энергии гомеотропной и гибридной фаз становятся равными, т.е. происходит переход из гомеотропного состояния в состояние с гомеотропно-планарным упорядочением. Далее гибридная фаза является устойчивой до поля  $h_{c2} = 3.66$ , при котором происходит возвратный переход в гомеотропную фазу. Оба перехода являются переходами первого рода, так как параметр порядка  $\sin^2 \varphi_0$  испытывает скачок, показанный вертикальными отрезками на рис. 5 и последующих рисунках. Из рис. 5 также видно, что решение для гомеотропной фазы в полях  $0.83 < h < 3.34$  при заданном  $w_0 = 0.5$  перестает существовать, поэтому кривые  $\varphi_0(w_0)$  на рис. 4 для гомеотропной фазы с ростом поля становятся C-образными и начинают смещаться вправо; дальнейшее увеличение поля приводит к росту угла  $\varphi_0$  и при  $h = h_p$ , где  $h_p = 6.90$ , угол  $\varphi_0$  достигает значения  $\pi/2$ , при этом угол  $\psi(\varphi_0) = 0$ . Такое состояние отвечает ферронематику с планарными условиями сцепления магнитных частиц с нематической матрицей, при котором  $\mathbf{m} \parallel \mathbf{n}$ .

Пороговое поле, выше которого директор планарно ориентирован на поверхности магнитных частиц, находится из системы уравнений (4), (8), (12)–(14), (16) и (17) и имеет вид [17]

$$h_p = \frac{w_p}{\xi} \left[ 1 + \sqrt{1 + \frac{2\xi^2}{w_p}} \right]. \quad (21)$$

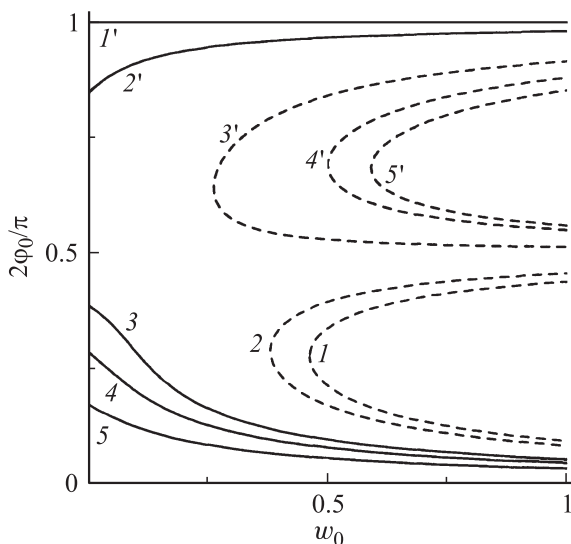


Численные расчеты показывают, что для ферронематика с  $\chi_a > 0$  в квадрупольном режиме ( $\xi < 1$ ) и при мягком сцеплении магнитных частиц с нематической матрицей ( $w_p < 1$ ) гомеотропно-планарная фаза всегда обладает большей свободной энергией, чем гомеотропная, и переход между ними невозможен.

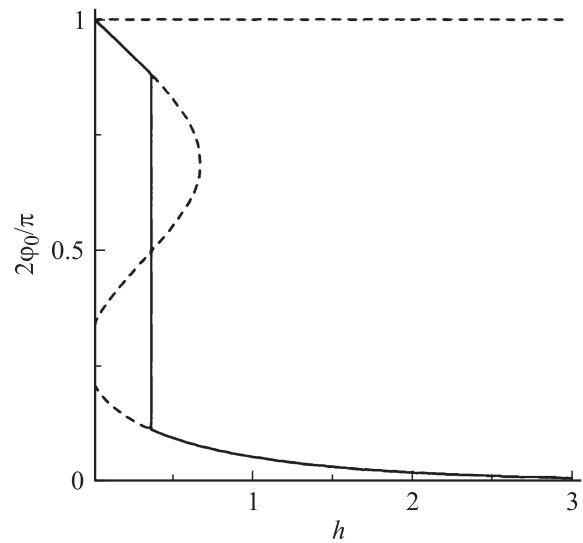
### 3.2. Отрицательная диамагнитная анизотропия

При  $\chi_a < 0$  директор стремится повернуться ортогонально полю, в то время как магнитные частицы ориентируются вдоль поля, поэтому при гомеотропном сцеплении магнитных частиц с матрицей квадрупольный и дипольный механизмы взаимодействия ферронематика с внешним полем будут усиливать друг друга и способствовать переходу между гомеотропной и гомеотропно-планарной фазами.

На рис. 6 представлены зависимости  $\varphi_0(w_0)$  в различных магнитных полях. Система уравнений ориентационного равновесия допускает решения, отвечающие гомеотропной фазе (кривая  $I'$ ) и гибридной гомеотропно-планарной фазе (кривая  $I$ ); устойчивой является гомеотропная фаза. Пусть энергия сцепления на нижней границе  $w_0 < w_{0c}$ , где  $w_{0c}$  отвечает вершине  $S$ -образной кривой  $I$  и определяет границу области бистабильного состояния ферронематика в отсутствие поля. С ростом поля  $S$ -образные кривые 2–5, соответствующие гибридной фазе, сдвигаются влево, уменьшая  $w_{0c}$ , и в некотором поле  $h = h_*$  они перестают быть  $S$ -образными (кривые 3–5). В то же время кривые 2'–5', отвечающие гомеотропной фазе, при этом же значении поля  $h = h_*$  приобретают  $S$ -образный вид и с ростом поля сдвигаются вправо (см. кривые 3'–5'). Иными



**Рис. 6.** Зависимость угла наклона директора на нижней границе ячейки  $\varphi_0$  от энергии сцепления  $w_0$  для  $\sigma = -1$ .  $I$  и  $I'$  —  $h = 0$ ,  $2$  и  $2'$  —  $h = 0.1$ ,  $3$  и  $3'$  —  $h = 0.5$ ,  $4$  и  $4'$  —  $h = 0.67$ ,  $5$  и  $5'$  —  $h = 1$ . Гибридной гомеотропно-планарной фазе отвечают кривые  $1-4$ , гомеотропной фазе —  $1'-4'$ .



**Рис. 7.** Зависимость угла наклона директора на нижней границе ячейки  $\varphi_0(h)$  при  $w_0 = 0.5$  и  $\sigma = -1$ .

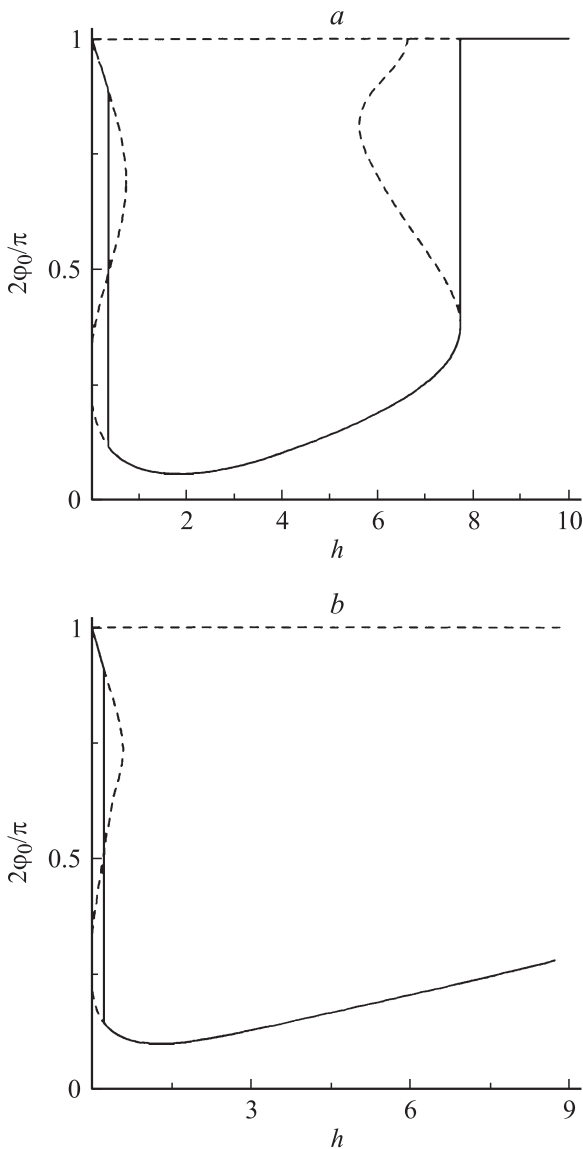
словами, при  $w_0 < w_{0c}$  в полях  $h > h_*$  гибридная фаза становится устойчивой (происходит переход первого рода между гомеотропной и гибридной гомеотропно-планарной фазами), а при выключении поля происходит обратный переход из гомеотропно-планарной в гомеотропную фазу.

На рис. 7 изображены зависимости  $\varphi_0(h)$  при  $w_0 = 0.5$ . Благодаря  $\chi_a < 0$  квадрупольный механизм воздействия магнитного поля на ферронематик усиливается с ростом поля дипольным механизмом, поэтому директор ориентируется ортогонально полю, т. е. угол  $\varphi_0$  уменьшается. Вершина кривой  $\varphi_0(h)$  на рис. 7 отвечает полю  $h = 0.67$ , для которого вершина  $S$ -образной кривой  $\varphi_0(w_0)$  на рис. 6 отвечает поверхностной энергии  $w_0 = 0.5$ . В поле  $h_c = 0.36$  свободные энергии гомеотропной и гомеотропно-планарной фаз становятся равными и происходит переход первого рода из гомеотропной в гомеотропно-планарную фазу. При  $h > h_c$  свободная энергия гибридной фазы меньше гомеотропной и гомеотропно-планарная фаза устойчива.

Таким образом, в ферронематике с отрицательной анизотропией диамагнитной восприимчивости оказываются возможными ориентационные переходы из гомеотропной фазы в гомеотропно-планарную и обратно. Заметим, что поскольку  $S$ -образные кривые гомеотропной фазы с увеличением поля смещаются вправо (см. рис. 6), то этот переход возможен при любом значении  $w_0$ . При  $w_0 < w_{0c}$  ориентационный переход осуществляется в меньших полях, чем в случае  $w_0 > w_{0c}$ .

### 3.3. Сегрегационный эффект

Так как магнитные частицы имеют возможность перемещаться в нематической матрице, они могут накапливаться в тех областях слоя, где минимальна сумма их



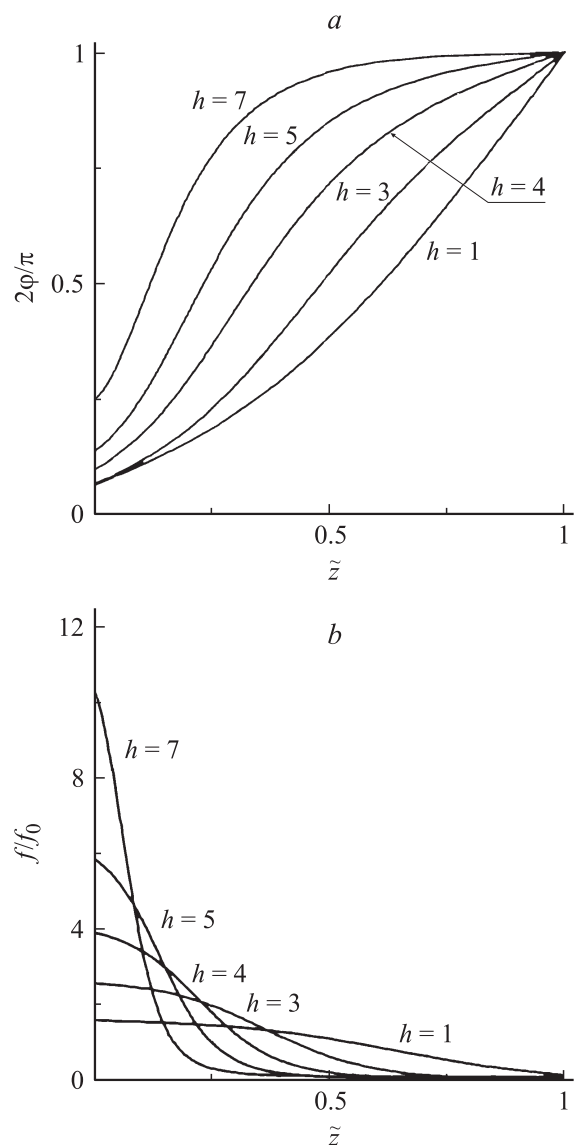
**Рис. 8.** Зависимость угла наклона директора на нижней границе ячейки  $\varphi_0(h)$  для  $\sigma = 1$ ,  $w_0 = 0.5$  при значениях  $\kappa = 2$  (a) и  $\kappa = 0.01$  (b).

магнитной энергии в поле  $\mathbf{H}$  и ориентационной энергии в нематической матрице (так называемый сегрегационный эффект [10], описываемый формулой (9)).

На рис. 8 показаны зависимости  $\varphi_0(h)$  для ферронематика с положительной диамагнитной анизотропией магнитной восприимчивости ( $\sigma = 1$ ) и  $w_0 = 0.5$  при различных значениях параметра сегрегации  $\kappa$ . Штриховые кривые на рис. 8 соответствуют термодинамически неустойчивым состояниям. Вертикальные отрезки отвечают ориентационным переходам между гомеотропной и гомеотропно-планарной фазами ферронематика. Численные расчеты показывают, что переход из гомеотропной фазы в гомеотропно-планарную возможен при любом  $\kappa$ , в то время как возвратный переход при увеличении магнитного поля в гомеотропную фазу происходит только для  $\kappa > \kappa^*$  (слабая сегрегация), где  $\kappa^* = 1.87$ . Для

выбранных значений материальных параметров пороговые поля ориентационного перехода из гомеотропной фазы в гомеотропно-планарную равны  $h_c = 0.34$  (a),  $h_c = 0.23$  (b).

На рис. 9 показаны ориентационные и концентрационные профили в магнитном поле для ферронематика с  $\sigma = 1$ ,  $w_0 = 0.5$  и  $\kappa = 2$  в гомеотропно-планарной фазе. Точки пересечения кривых  $\varphi(\tilde{z})$  с осью ординат соответствуют углу ориентации директора на нижней границе слоя  $\varphi_0$  (рис. 8). Как видно из рис. 9, в гомеотропно-планарной фазе существует градиент ориентации директора в объеме слоя от близкого к планарному упорядочению на нижней границе слоя до гомеотропного на верхней границе. Из представленных на рис. 9 профилей концентрации  $f(\tilde{z})$  видно, что с ростом напряженности магнитного поля частицы мигрируют к бистабильной поверхности. Численные расчеты показывают, что чем



**Рис. 9.** Ориентационные (a) и концентрационные (b) профили для ферронематика с  $\sigma = 1$ ,  $\kappa = 2$  и  $w_0 = 0.5$  в гомеотропно-планарной фазе в различных магнитных полях  $h$ .



меньше параметр сегрегации  $\kappa$ , т. е. чем меньше толщина слоя ферронематика по сравнению с сегрегационной длиной, определяющей характерный масштаб области концентрационного расслоения, тем больше концентрация магнитных частиц вблизи бистабильной поверхности. Таким образом, накопление магнитных частиц у нижней границы затрудняет поворот директора в направлении магнитного поля, что обуславливает отсутствие возвратного перехода из гомеотропно-планарной фазы в гомеотропную.

## Заключение

Известно, что характер сцепления с твердой поверхностью играет ключевую роль в ориентационном поведении жидких кристаллов вообще, и ферронематиков в частности. Поэтому важно определить величину параметра  $w_0$ , задающего не только плотность энергии сцепления на подложке, но и толщину ячейки. Величина  $w_0$  должна быть близка к  $w_{0c}$ , в этом случае для осуществления ориентационного перехода между фазами ферронематика потребуется приложение сравнительно небольших полей.

Для ферронематика с положительной диамагнитной анизотропией ( $\chi_a > 0$ ) должны выполняться условия, которые обеспечивают преобладание дипольного механизма ориентации ферронематика магнитным полем над квадрупольным (т.е. создание суспензий с  $\xi \gg 1$ ) и жесткое сцепление молекул нематика на поверхности феррочастиц  $w_p \gg 1$ . В этом случае ячейка, помещенная во внешнее магнитное поле, из гомеотропной фазы перейдет в гибридную гомеотропно-планарную фазу, а при выключении поля произойдет обратный переход. Также при увеличении поля наблюдаются возвратные переходы в гомеотропную фазу.

При  $\chi_a < 0$  дипольные и квадрупольные взаимодействия усиливают друг друга, что способствует ориентационному переходу из гомеотропной фазы в гомеотропно-планарную, однако в этом случае возвратный переход отсутствует.

Учет влияния сегрегационного расслоения ферронематика в магнитном поле показал, что сегрегационные эффекты приводят к уменьшению порогового поля ориентационного перехода из гомеотропной фазы в гомеотропно-планарную, в то время как возвратные переходы с увеличением магнитного поля при сильном сегрегационном эффекте отсутствуют. Это обусловлено резким возрастанием концентрации магнитных частиц вблизи бистабильной поверхности, что препятствует полному повороту директора в направлении магнитного поля.

Работа выполнена при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 10-02-96030).

## Список литературы

- [1] Barberi R., Giocondo M., Li J., Bartolino R., Dozov I., Durand G. // Appl. Phys. Lett. 1997. Vol. 71. P. 3495–3497.
- [2] Barberi R., Bonvent J.J., Giocondo M., Iovane M., Alexe-Ionescu A.L. // J. Appl. Phys. 1998. Vol. 84. P. 1321–1324.
- [3] Qian T., Xie Z., Kwok H.S., Sheng P. // J. Appl. Phys. 2001. Vol. 90. P. 3121–3123.
- [4] Yoneya M., Kim J.H., Yokoyama H. // Appl. Phys. Lett. 2002. Vol. 80. P. 374–376.
- [5] Parry-Jones L.A., Edwards E.G., Elston S.J., Brown C.V. // Appl. Phys. Lett. 2003. Vol. 82. P. 1476–1478.
- [6] Hsu J.-S., Liang B.-J., Chen S.-H. // Jpn. J. Appl. Phys. 2005. Vol. 44. P. 6170–6173.
- [7] Davidson A.J., Mottram N.J. // Phys. Rev. E. 2002. Vol. 65. P. 051 710-1–10.
- [8] Brown C.V., Parry-Jones L., Elston S.J., Wilkins S.J. // Mol. Cryst. Liquid Cryst. 2004. Vol. 410. P. 417–425.
- [9] Burylov S.V., Raikher Yu.L. // Mol. Cryst. Liquid Cryst. 1995. Vol. 258. P. 107–122.
- [10] Brochard F., Gennes P.G. de // J. de Phys. 1970. Vol. 31. P. 691–708.
- [11] Zakhlevnykh A.N., Shavkunov V.S. // J. Magn. Magn. Mater. 2000. Vol. 210. P. 279–288.
- [12] Zakhlevnykh A.N., Sosnin P.A. // J. Magn. Magn. Mater. 1995. Vol. 146. P. 103–110.
- [13] Zakhlevnykh A., Shavkunov V. // Mol. Cryst. Liquid Cryst. 1999. Vol. 330. P. 593–599.
- [14] Zadorozhnyi V.I., Sluckin T.J., Reshetnyak V.Yu., Thomas K.S. // SIAM J. Appl. Math. 2008. Vol. 68. P. 1688–1716.
- [15] Chen S.H., Amer N.M. // Phys. Rev. Lett. 1983. Vol. 51. P. 2298–2301.
- [16] Blinov L.M., Chigrinov V.G. Electrooptic Effect in Liquid Crystal Materials. New York: Springer-Verlag, 1994. 464 p.
- [17] Zakhlevnykh A.N. // J. Magn. Magn. Mater. 2004. Vol. 269. P. 238–244.