

К ВОПРОСУ О РАВНОВЕСНЫХ КОНФИГУРАЦИЯХ НЕМАТИЧЕСКОГО ЖИДКОГО КРИСТАЛЛА В ЦИЛИНДРИЧЕСКОМ ОБЪЕМЕ

С. В. Бурьлов*

*Институт транспортных систем и технологий «Трансмаг»
Национальной академии наук Украины
320005, Днепропетровск, Украина*

Поступила в редакцию 28 апреля 1997 г.

Рассмотрен нематический жидкий кристалл, помещенный в цилиндрический капилляр с гомеотропным типом сцепления на боковой поверхности. Предложено аналитическое описание планарно-полярной конфигурации поля директора и при произвольных значениях материальных параметров системы. Исследованы условия ориентационных переходов между планарно-радиальной, планарно-полярной и вытекающей радиальной структурами. Аналогичное рассмотрение проведено для сцепления планарно-циркулярного типа.

1. ВВЕДЕНИЕ

Изучение равновесных конфигураций нематического жидкого кристалла (НЖК) в цилиндрическом объеме насчитывает приблизительно тридцатилетнюю историю. Известно несколько десятков работ, посвященных данной проблеме, поэтому приведенный ниже библиографический список, конечно, не охватывает всего круга имеющихся экспериментальных и теоретических исследований. С дополнительной информацией читатель может ознакомиться, например, в обзоре Заупе [1] или книге Клемана [2], а с результатами более поздних исследований — в работах Аллендера с соавторами [3, 4].

Мы остановимся на отдельных вопросах, представляющих, на наш взгляд, важный практический интерес. Прежде всего отметим, что цилиндрическая геометрия образца вслед за геометрией плоско-параллельных ячеек является наиболее удобным объектом исследования НЖК как с теоретической, так и с экспериментальной точек зрения. При этом практически все экспериментально наблюдаемые [3–13] и теоретически возможные [14, 15] конфигурации поля директора \mathbf{n} в цилиндрическом объеме поддаются либо полному, либо приближенному аналитическому описанию. Данное обстоятельство позволяет с достаточной степенью точности предсказывать точки переходов между конфигурациями исходя из конкретного набора материальных параметров системы. С другой стороны, значения материальных параметров, таких, например, как модули упругости НЖК, удастся определять [3, 4, 11–13] из анализа экспериментально наблюдаемых ориентационных структур.

Возможные равновесные конфигурации нематика в цилиндрическом объеме зависят главным образом от типа сцепления директора \mathbf{n} с боковой поверхностью цилиндра. Тип сцепления задается единичным вектором \mathbf{P} легкого ориентирования \mathbf{n} на стен-

*E-mail: burylov@tmg.dp.ua; burylov@transmag.vidrua.dp.ua

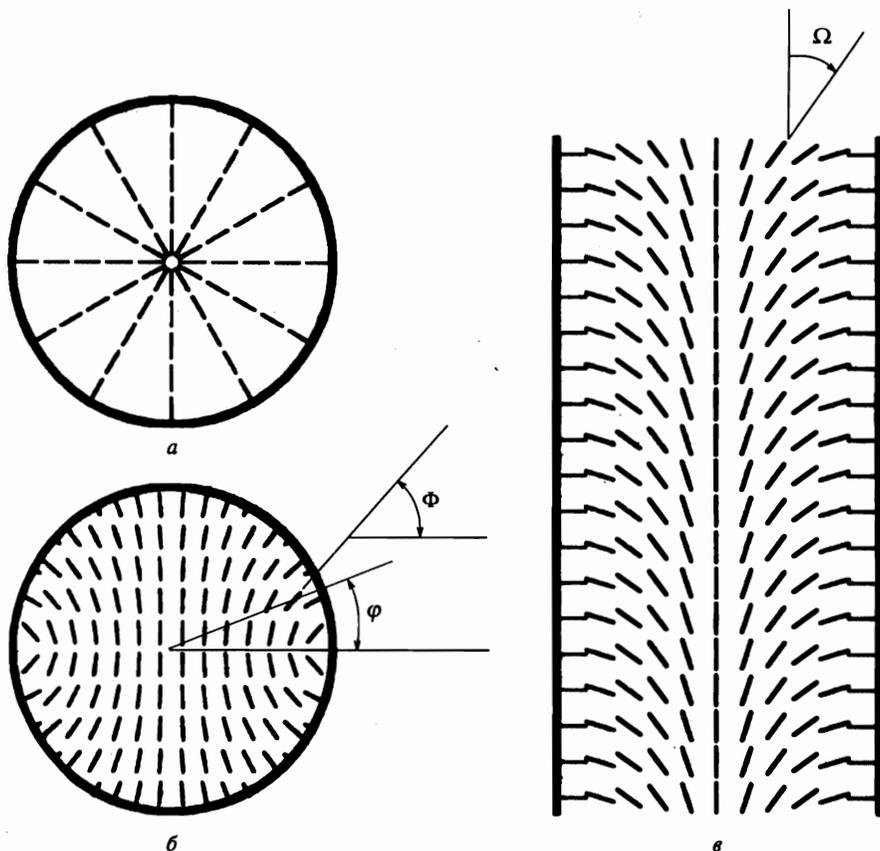


Рис. 1. Конфигурации поля директора \mathbf{n} , отвечающие сцеплению гомеотропного типа: a — планарно-радиальная (PR); b — планарно-полярная (PP); c — вытекающая радиальная (ER)

ках жидкокристаллического образца. Практически во всех проведенных экспериментах использовалось сцепление гомеотропного типа: направление Π легкого ориентирования директора перпендикулярно боковой поверхности цилиндра. Три теоретически возможные конфигурации НЖК, отвечающие данным граничным условиям, показаны на рис. 1. Эти структуры принято называть [3, 4] следующим образом: планарно-радиальная (planar radial — PR), планарно-полярная (planar polar — PP) и вытекающая радиальная (escaped radial — ER). Первые две конфигурации относятся к классу плоских (двумерных) искажений поля директора, а последняя — к классу объемных (трехмерных) деформаций. Как показано в работах [3, 4], при равных между собой модулях упругости поперечного K_{11} и продольного K_{33} изгибов НЖК минимуму полной свободной энергии системы в классе двумерных искажений отвечает PP-структура. Данный результат, однако, не может быть распространен на случай произвольных значений K_{11} и K_{33} . Это можно показать на примере жидкокристаллических материалов, образующих не только нематическую, но и смектическую А фазы. Действительно, вблизи точки перехода в смектическую фазу, когда $K_{33} \gg K_{11}$, молекулы нематика стремятся распо-

ложиться в параллельных между собой «сметкоподобных» слоях равной толщины. При этом даже качественно ясно, что PR-структура (рис. 1а) с линейным дефектом, проходящим вдоль оси цилиндра, допускает подобную перестройку НЖК: сметкоподобные слои будут образовывать концентрические окружности равной толщины. В то же время внутренняя перестройка нематика в PP-конфигурации (рис. 1б) неизбежно приведет к деформации слоев по толщине, что энергетически крайне невыгодно. Следовательно, при некотором соотношении между модулями упругости K_{11} и K_{33} может оказаться, что минимуму полной свободной энергии в классе плоских искажений будет отвечать PR-конфигурация. Для более глубокого анализа и количественных оценок требуются дополнительные теоретические исследования.

Трехмерная ER-деформация (рис. 1в) возникает при однородном «вытекании» в третье измерение линейного дефекта планарно-радиальной конфигурации. Вытекание в противоположных, энергетически эквивалентных направлениях приводит [3–13] к более сложной трехмерной структуре с точечными дефектами (escaped radial with points defects — ERPD). Для бесконечно длинных цилиндров, которые мы будем рассматривать ниже, ERPD-конфигурация является метастабильной: точечные дефекты либо притягиваются и аннигилируют, либо расходятся и исчезают на бесконечности [16]. В результате ERPD-структура переходит в однородную ER-конфигурацию, обладающую меньшей энергией в классе трехмерных искажений. Добавим, что ER-конфигурация является энергетически выгоднее ERPD-структуры и в цилиндрах конечной длины с абсолютно вырожденными торцевыми граничными условиями для директора \mathbf{n} .

Оптические эксперименты [5–8, 13] и эксперименты по ядерному магнитному резонансу [3, 4, 9–12] показывают, что в цилиндрах радиуса $R = 0.5\text{--}200$ мкм с гомеотропным типом сцепления на боковой поверхности реализуется вытекающая ER- или ERPD-структура, а в цилиндрах радиуса $R = 0.05\text{--}0.4$ мкм в зависимости от соотношения между материальными параметрами системы имеет место ERPD- или PP-конфигурация. Наблюдаемые устойчивые ERPD-структуры связаны с наличием невырожденных (например, тех же гомеотропных) торцевых граничных условий. Эти граничные условия трудно поддаются контролю и могут отличаться от эксперимента к эксперименту. Существование PR-конфигурации в цилиндрическом объеме НЖК до настоящего времени не подтверждено экспериментально, однако многие авторы (см., например, [4, 5, 10, 15]) считают, что эта структура может иметь место вблизи точки перехода нематик–сметтик A в цилиндрах радиуса $R \leq 0.1$ мкм. Отметим, что в чисто сметтической A -фазе подобная структура наблюдалась достаточно давно [17, 18].

Остановимся кратко на результатах теоретического исследования конфигураций, представленных на рис. 1. PR-структура была полностью описана Дзялошинским [14]. Аналитическое решение для ER-конфигурации при так называемом жестком (см. ниже) характере сцепления получено Кладис и Клеманом [15], а в более общей постановке — Аллендером с соавторами [3, 4]. Что касается PP-структуры, то точное решение, полученное последними авторами, отвечает только двухконстантному приближению $K_{11} = K_{33}$. Численный расчет этой структуры при $K_{11} \neq K_{33}$ недавно проведен в [19].

В настоящей работе представлено аналитическое описание PP-конфигурации при произвольных материальных параметрах системы. Мы предполагаем цилиндр бесконечно длинным и из анализа точных решений находим условия ориентационных переходов между PR-, PP- и ER-структурами. Для полноты теоретического исследования вместе с гомеотропным мы подробно рассматриваем и циркулярный тип сцепления:

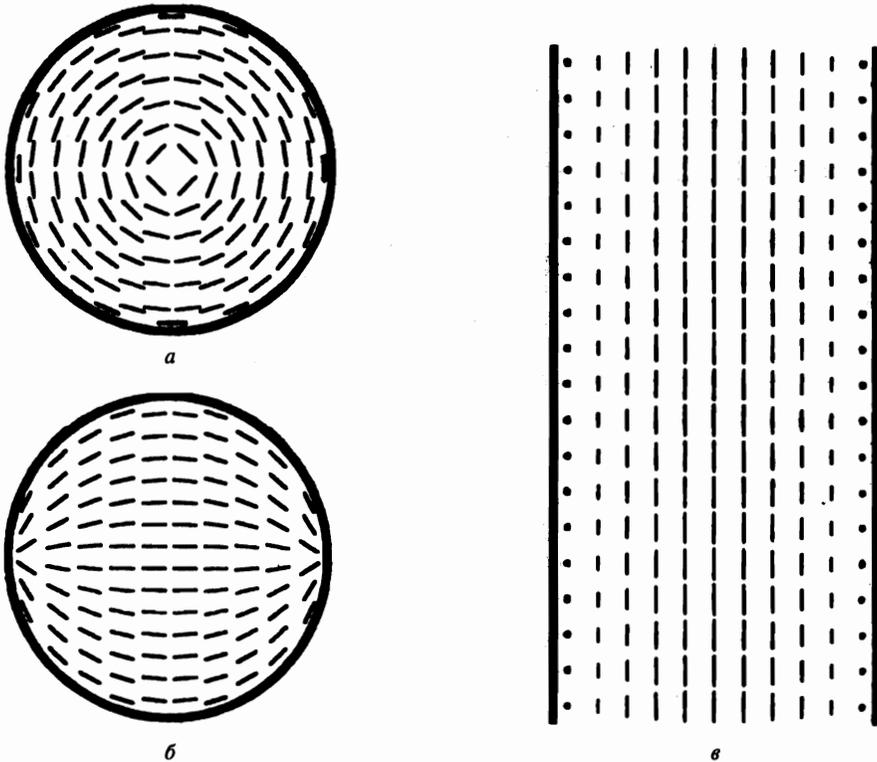


Рис. 2. Конфигурации поля директора \mathbf{n} , отвечающие сцеплению циркулярного типа: a — планарно-циркулярная (PC); b — циркулярная планарно-полярная (CPP); c — вытекающая циркулярная (EC). В случае EC-структуры (c) директор на оси цилиндра лежит в плоскости рисунка, а вблизи стенок капилляра ориентирован перпендикулярно этой плоскости

направление Π легкого ориентирования директора перпендикулярно оси цилиндра и касательно к его боковой поверхности. Циркулярный тип сцепления пока не реализован на практике. Для его реализации необходимо не только зафиксировать вектор Π в плоскости, тангенциальной к боковой поверхности цилиндра, как, например, в [20], но и снять вырождение по направлению Π в этой плоскости, другими словами, ориентировать вектор Π в тангенциальной плоскости именно перпендикулярно оси цилиндра. Для плоских ячеек НЖК задача снятия вырождения подобного вида успешно решена экспериментально [21, 22], поэтому мы полагаем, что в будущем она может быть решена и для образцов цилиндрической формы. Три аналогичные описанным выше равновесные структуры поля директора для сцепления циркулярного типа показаны на рис. 2. Мы будем называть их следующим образом: планарно-циркулярная (planar circular — PC), циркулярная планарно-полярная (circular planar polar — CPP) и вытекающая циркулярная (escaped circular — EC). Из этих трех структур теоретически полностью описана только PC-конфигурация [14]; EC-структура при жестком характере сцепления рассмотрена в [15].

Последовательность изложения материала в работе следующая. В разд. 2 представлено выражение для функционала полной свободной энергии НЖК и выписаны

уравнения равновесия для цилиндрической геометрии. В разд. 3 сформулирован общий подход к описанию плоских ориентационных текстур и кратко рассмотрены PR- и PC-конфигурации. Результаты расчетов полярных PP- и CPP-структур содержатся в разд. 4. Вытекающие конфигурации рассмотрены в разд. 5, в котором кратко описана ER-структура, приведен общий расчет EC-конфигурации и обсуждаются условия «полного вытекания», которое приводит к однородной аксиальной структуре с директором \mathbf{n} , параллельным оси цилиндра. В разд. 6 анализируются условия ориентационных переходов между возможными конфигурациями НЖК для каждого из заданных типов сцепления. Заключение приведено в разд. 7.

2. КONTИНУАЛЬНЫЙ ПОДХОД К ОПИСАНИЮ НЖК

2.1. Функционал полной свободной энергии

В статическом режиме и в отсутствие внешних (магнитных или электрических) полей полная свободная энергия F одноосного НЖК содержит два вклада: упругую свободную энергию F_{EL} и свободную энергию сцепления F_A . Рассмотрим подробнее каждый из этих вкладов.

Согласно Заупе [23], функционал упругой свободной энергии НЖК, квадратичный по производным директора, может быть записан следующим образом:

$$F_{EL} = \int_V dV \left\{ f_V - \frac{1}{2} K_{24} \operatorname{div}([\mathbf{nrot}\mathbf{n}] + \mathbf{n} \operatorname{div} \mathbf{n}) \right\}. \quad (1)$$

Здесь dV — элемент объема, f_V — плотность свободной энергии Франка [24]:

$$f_V = \frac{1}{2} \{ K_{11}(\operatorname{div} \mathbf{n})^2 + K_{22}(\mathbf{n} \operatorname{div} \mathbf{n})^2 + K_{33}[\mathbf{nrot} \mathbf{n}]^2 \}. \quad (2)$$

Коэффициент K_{22} называется модулем кручения, а коэффициенты K_{11} и K_{33} , как уже упоминалось выше, — соответственно модулями поперечного и продольного изгибов. Дивергентный вклад коэффициента K_{24} в функционал (1) по теореме Гаусса может быть представлен как поверхностный интеграл с плотностью энергии

$$f_{24} = -\frac{1}{2} K_{24} \mathbf{s}([\mathbf{nrot} \mathbf{n}] + \mathbf{n} \operatorname{div} \mathbf{n}), \quad (3)$$

где \mathbf{s} — единичный вектор внешней нормали к поверхности S образца. Поскольку коэффициент K_{24} вносит вклад только в поверхностную упругую энергию НЖК, его называют поверхностным модулем упругости. Заметим, что в литературе существуют различные варианты записи константы K_{24} ; наш вариант определения этого модуля следует из выражения (1). Отметим также, что вслед за авторами работ [4, 9–13, 25] мы пренебрегаем влиянием другого поверхностного вклада, $\int_V dV K_{13} \operatorname{div}(\mathbf{n} \operatorname{div} \mathbf{n})$, считая, что учет данного слагаемого в функционале (1) является превышением точности. На этот факт указывают и результаты отдельных экспериментов — см., например, [26].

Функционал (1) упругой свободной энергии должен иметь минимум ($F_{EL} = 0$) при однородном распределении поля директора. Это условие накладывает [27] естественные ограничения на значения модулей упругости НЖК: константы K_{11} , K_{22} и K_{33} должны быть положительны, а величина K_{24} лежать в интервале $0 \leq K_{24} \leq \min\{2K_{11}, 2K_{22}\}$.

Перейдем к функционалу свободной энергии сцепления; он может быть представлен, как поверхностный интеграл

$$F_A = \int_S dS f_A,$$

здесь плотность энергии сцепления f_A определяется анизотропной частью поверхностного натяжения на стенках (или границах) жидкокристаллического образца [21, 22]. Стенки, обработанные механическим способом или с помощью поверхностно-активных веществ, оказывают анизотропное ориентирующее действие на молекулы НЖК и задают тип сцепления, т. е. направление Π легкого ориентирования директора. В общем случае единичный вектор Π в каждой точке поверхности описывается двумя углами, α и β . Меридиональный угол α лежит в плоскости, перпендикулярной поверхности, и определяется как угол между направлением Π и нормалью s . Азимутальный угол β лежит в тангенциальной плоскости и определяется как угол между проекцией Π на эту плоскость и некоторым направлением полярной оси. Действительное направление директора \mathbf{n} на поверхности жидкокристаллического образца задается, в свою очередь, углами α' и β' . В стандартной форме Рапини–Папулара [28] плотность свободной энергии сцепления, зависящая от взаимной ориентации \mathbf{n} и Π , записывается следующим образом:

$$f_A = \frac{1}{2} (W_\theta \sin^2 \varepsilon + W_\phi \sin^2 \delta), \quad (4)$$

где $\varepsilon = \alpha - \alpha'$, $\delta = \beta - \beta'$; положительные константы W_θ и W_ϕ характеризуют энергии соответственно внеплоскостных (меридиональных) и плоскостных (азимутальных) возмущений директора.

Таким образом, полная свободная энергия системы нематик + ограничивающая поверхность имеет вид

$$F = F_{EL} + F_A = \int_V dV f_V + \int_S dS (f_{24} + f_A), \quad (5)$$

здесь выражения для f_V , f_{24} и f_A определяются формулами соответственно (2), (3) и (4).

2.2. Уравнения равновесия НЖК для цилиндрического образца

Рассмотрим НЖК, помещенный в бесконечно длинный цилиндрический капилляр радиуса R с заданным (гомеотропным или циркулярным) типом сцепления на боковой поверхности S . Введем цилиндрическую систему координат с правой тройкой единичных векторов \mathbf{e}_r , \mathbf{e}_φ , \mathbf{e}_z и осью z , направленной вдоль оси цилиндра. Для сцепления гомеотропного типа направление легкого ориентирования на поверхности S задается как $\Pi^{(H)} = \mathbf{e}_r$. В терминах углов α и β , входящих в выражение (4) для плотности энергии сцепления, имеем $\alpha^{(H)} = 0$, а значение $\beta^{(H)}$ вырождено. Это означает, что в случае гомеотропного сцепления азимутальные поверхностные возмущения не имеют места и f_A зависит только от слагаемого, связанного с W_θ . Для сцепления циркулярного типа $\Pi^{(C)} = \mathbf{e}_\varphi$, т. е. $\alpha^{(C)} = \pi/2$ и $\beta^{(C)} = 0$, здесь угол β отсчитывается от направления \mathbf{e}_φ . Поскольку углы $\alpha^{(C)}$ и $\beta^{(C)}$ определены, то в этом случае возможны как меридиональные, так и азимутальные возмущения, зависящие соответственно от W_θ и W_ϕ . Из

качественного анализа структур, представленных на рис. 2, можно сразу сделать вывод, что РС-конфигурация не связана с отклонением директора от направления $\Pi^{(C)}$, т. е. $f_A = 0$, а СРР- и ЕС-структуры отвечают простейшим типам поверхностных возмущений: для СРР-структуры f_A зависит только от W_θ (меридиональные возмущения), а для ЕС-конфигурации f_A зависит только от W_ϕ (азимутальные возмущения).

Для определения равновесного поля директора НЖК функционал (5) полной свободной энергии минимизируется с использованием обычной вариационной процедуры. Поле директора параметризуется двумя углами: углом наклона $\Omega(\mathbf{r})$ и углом кручения $\Phi(\mathbf{r})$, показанными на рис. 1; в выбранной системе координат

$$\mathbf{n} = \sin \Omega(\mathbf{r}) \cos [\Phi(\mathbf{r}) - \varphi] \mathbf{e}_r + \sin \Omega(\mathbf{r}) \sin [\Phi(\mathbf{r}) - \varphi] \mathbf{e}_\varphi + \cos \Omega(\mathbf{r}) \mathbf{e}_z. \quad (6)$$

В объеме НЖК процедура минимизации дает обычные уравнения Эйлера:

$$\frac{\partial f_F}{\partial \chi} - \frac{1}{r} \partial_\nu r \frac{\partial f_F}{\partial \partial_\nu \chi} = 0, \quad (7)$$

где $\chi = \Omega, \Phi$; $\partial_\nu = \partial / \partial \nu$; $\nu = r, \varphi$ и z .

Граничные условия для уравнений (7) зависят не только от типа, но и от характера сцепления молекул НЖК с ограничивающей поверхностью. Различают два характера сцепления: жесткий и мягкий. При жестком характере сцепления директор на поверхности S строго параллелен направлению легкого ориентирования и общее для углов Ω и Φ граничное условие имеет вид

$$\mathbf{n}|_S = \pm \Pi. \quad (8)$$

Эта ситуация реализуется, когда соответствующие гомеотропному или циркулярному сцеплению удельные энергии W_ϕ и (или) W_θ из выражения (4) бесконечно велики. При мягком характере сцепления, когда соответствующие удельные энергии конечны, граничные условия на поверхности $r = R$ цилиндра записываются как

$$\frac{\partial(f_A + f_{24})}{\partial \chi} + \frac{\partial f_F}{\partial \partial_r \chi} - \partial_\varphi \frac{\partial f_{24}}{\partial \partial_\varphi \chi} - \partial_z \frac{\partial f_{24}}{\partial \partial_z \chi} = 0. \quad (9)$$

Отметим, что уравнения (7) и граничное условие (8) имеют общий вид и справедливы для любой геометрии жидкокристаллического образца с заданной поверхностью S . Граничные условия (9) записаны здесь в упрощенном виде и отвечают исключительно цилиндрической области.

3. ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ПЛОСКОГО ПОЛЯ ДИРЕКТОРА С ПОМОЩЬЮ АНАЛИТИЧЕСКИХ ФУНКЦИЙ

Рассмотрим плоское искажение поля директора

$$\mathbf{n} = \cos(\Phi - \varphi) \mathbf{e}_r + \sin(\Phi - \varphi) \mathbf{e}_\varphi, \quad \Phi = \Phi(r, \varphi). \quad (10)$$

Это выражение следует из соотношения (6) при подстановке $\Phi(\mathbf{r}) = \Phi(r, \varphi)$ и экстремали $\Omega(\mathbf{r}) = \pi/2$ соответствующего уравнения Эйлера системы (7). Отметим, что в плоском случае поверхностное слагаемое, связанное с константой K_{24} , не вносит вклада в

функционал (1): $\text{div}([\mathbf{n} \text{rot } \mathbf{n}] + \mathbf{n} \text{div } \mathbf{n}) = 0$. Кроме того, деформации кручения отсутствуют ($\mathbf{n} \text{got } \mathbf{n} = 0$), поэтому плотность свободной энергии Франка (2), а следовательно, и уравнение Эйлера (7) для угла Φ , включают в себя только слагаемые, связанные с модулями упругости K_{11} и K_{33} . Проанализируем общее решение уравнения равновесия (7) для функции $\Phi(r, \varphi)$.

3.1. Двухконстантное приближение

При средних температурах существования нематической фазы модули упругости K_{11} и K_{33} сравнимы по величине [29], поэтому для предварительных вычислений часто используется двухконстантное приближение:

$$K_{11} = K_{33} = K. \quad (11)$$

При этом под K понимается среднее значение истинных модулей упругости K_{11} и K_{33} .

Подстановка соотношений (10) и (11) в (7) дает уравнение Лапласа для угла Φ :

$$\nabla^2 \Phi = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \Phi}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2} = 0. \quad (12)$$

Из этого уравнения следует, что существует такое безвихревое и соленоидальное поле \mathbf{E} , что $\mathbf{E} = -\nabla \Phi$; знак минус введен по аналогии с электростатикой [30]. Действительно, $\text{rot } \mathbf{E} = -\text{rot}(\nabla \Phi) = 0$ и $\text{div } \mathbf{E} = -\nabla^2 \Phi = 0$. Первое соотношение означает, что угол Φ играет роль скалярного потенциала поля \mathbf{E} . Второе условие позволяет ввести векторный потенциал Ψ согласно формуле $\mathbf{E} = \text{got } \Psi$. Поскольку поле \mathbf{E} является плоским, вектор Ψ всегда можно выбрать так, чтобы он был параллелен оси z , т.е. $\Psi = \Psi e_z$, здесь $\Psi = \Psi(r, \varphi)$. Тогда компоненты поля \mathbf{E} выражаются в виде производных от Φ или Ψ :

$$E_r = -\frac{\partial \Phi}{\partial r} = \frac{1}{r} \frac{\partial \Psi}{\partial \varphi}, \quad E_\varphi = -\frac{1}{r} \frac{\partial \Phi}{\partial \varphi} = -\frac{\partial \Psi}{\partial r}. \quad (13)$$

Соотношения (13) представляют собой известные в теории функций комплексного переменного условия Коши–Римана (см., например, [31]). Эти условия означают, что выражение

$$G = \Phi - i\Psi + A, \quad (14)$$

определенное с точностью до некоторой комплексной постоянной $A = \Phi_0 - i\Psi_0$, является аналитической функцией комплексного аргумента $\mathcal{X}(r, \varphi) = r \exp(i\varphi)$. Функцию $G(\mathcal{X})$ мы будем называть комплексным потенциалом поля \mathbf{E} или просто комплексным потенциалом.

Хорошо известно [31], что реальная и мнимая части любой аналитической функции в равной степени удовлетворяют уравнению Лапласа. Поэтому в качестве решения уравнения равновесия (12) можно взять как действительную, так и мнимую части комплексного потенциала. В последнем случае вместо (14) имеем

$$G = \Psi + i\Phi + iA.$$

Для определенности в настоящей работе будем искать комплексный потенциал в виде (14) и в качестве угла Φ брать действительную часть $G(\mathcal{X})$. Как следует из уравнения (12) и выражения (14), функция $\Phi(r, \varphi)$ определена с точностью до постоянной

Φ_0 , которая находится из дополнительных, например граничных, условий. С помощью соотношений

$$\mathbf{e}_r = \cos \varphi + i \sin \varphi, \quad \mathbf{e}_\varphi = -\sin \varphi + i \cos \varphi$$

поле директора (10) восстанавливается по известному комплексному потенциалу следующим образом:

$$\mathbf{n} = \cos \Phi + i \sin \Phi = \exp \left[i \frac{G(\mathcal{X}) + G^*(\mathcal{X})}{2} \right],$$

здесь $G^*(\mathcal{X})$ — комплексно-сопряженная функция.

Поскольку зависимость $\Phi(r, \varphi)$ является безразмерной, аргумент \mathcal{X} должен входить в комплексный потенциал G в виде \mathcal{X}/D , где D — характерный размер системы. Под характерным размером в общем случае следует понимать некоторую комбинацию материальных параметров, имеющую размерность длины. В неограниченном объеме НЖК, где размерные параметры отсутствуют, $\Phi(r, \varphi)$ может зависеть только от некоторой угловой переменной φ' . В этом случае примером комплексного потенциала является функция

$$G_m(\mathcal{X}, \mathcal{X}_0) = -im \ln(\mathcal{X} - \mathcal{X}_0) + A, \quad (15)$$

действительная часть которой

$$\Phi = \text{Re} [G_m(\mathcal{X}, \mathcal{X}_0)] = m\varphi' + \Phi_0 \quad (16)$$

задает [29, 32] распределение директора вокруг дисклинационной линии, проходящей через точку $\mathcal{X}_0 = \mathcal{X}_0(r_0, \varphi_0)$. Здесь φ' — полярный угол в системе координат с центром в точке \mathcal{X}_0 ; m — топологический заряд, а Φ_0 — начальная фаза дисклинации. В силу условия однозначности $\mathbf{n}(\varphi' + 2\pi) = \pm \mathbf{n}(\varphi')$ величина m может принимать только целые или полуцелые значения, т.е. $m = 0, \pm 1/2, \pm 1 \dots$ Существование дисклинационной линии в точке \mathcal{X}_0 отражает тот факт, что эта точка является особой — в ней нарушается условие аналитичности комплексного потенциала (15).

Если НЖК находится в некотором объеме, то на действительную часть комплексного потенциала $G(\mathcal{X})$ накладываются граничные условия типа (8) или (9). Тогда для конкретной геометрии образца задача определения равновесного плоского поля директора сводится в двухконстантном приближении к нахождению такой аналитической функции $G(\mathcal{X})$, действительная часть которой удовлетворяет заданным граничным условиям. При построении функции $G(\mathcal{X})$ может быть использован хорошо разработанный метод конформных отображений [31]. Он особенно полезен при жестком характере сцепления в образцах со сложной геометрией. В отдельных случаях функцию $G(\mathcal{X})$ удается построить и как простую суперпозицию аналитических функций. Данная процедура корректна, так как полученный в результате комплексный потенциал будет также аналитической функцией. Например, может быть использовано необходимое число функций вида (15). Если в результате построения функции $G(\mathcal{X})$ конкретная точка $\mathcal{X}_0^{(j)}$ окажется внутри объема НЖК, то она будет отвечать реальному линейному дефекту, а если за пределами НЖК, то фиктивной дисклинационной линии.

3.2. Общий случай $K_{11} \neq K_{33}$. PR- и PC-конфигурации

В общем случае $K_{11} \neq K_{33}$ подстановка распределения (10) в уравнение равновесия (7) дает

$$\nabla^2 \Phi + \kappa \Lambda(\Phi) = 0. \quad (17)$$

Здесь

$$\begin{aligned} \kappa &= \frac{K_{33} - K_{11}}{K_{11} + K_{33}}, \\ \Lambda(\Phi) &= \left[\frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \varphi} \right)^2 - \left(\frac{\partial \Phi}{\partial r} \right)^2 + \frac{2}{r} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi \partial r} - \frac{2}{r^2} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \varphi} \right) \right] \sin(2\Phi - 2\varphi) + \\ &+ \left[\frac{\partial^2 \Phi}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial \Phi}{\partial r} + \frac{2}{r} \frac{\partial \Phi}{\partial r} \frac{\partial \Phi}{\partial \varphi} - \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2} \right] \cos(2\Phi - 2\varphi). \end{aligned} \quad (18)$$

Уравнение (17) не позволяет ввести поле E и комплексный потенциал G простым образом, как это было сделано выше. Вместе с тем, некоторые специфические плоские искажения поля директора описываются аналитической функцией (14). Подобные ситуации имеют место, когда решения уравнений (12) и (17) совпадают друг с другом, т. е. когда оператор-функция $\Lambda(\operatorname{Re}(G(\mathcal{X})))$ из соотношения (18) тождественно равна нулю. Отметим два практически важных для настоящей работы случая.

1. И с к а ж е н и е, которое задается отдельной дисклинационной линией с топологическим зарядом $m = 1$. Согласно (15), комплексный потенциал такого искажения равен

$$G_1 = -i \ln(\mathcal{X} - \mathcal{X}_0) + A.$$

Подстановка этого выражения в (18) дает

$$\Lambda_1 = \Lambda[\operatorname{Re}(G_1)] = -\frac{\sin(2\Phi_0)}{l^2}, \quad (19)$$

здесь $l = |\mathcal{X} - \mathcal{X}_0|$ — расстояние от текущей точки \mathcal{X} до оси дисклинации. Выражение (19) показывает, что равновесному состоянию ($\Lambda_1 = 0$) дисклинационной линии с топологическим зарядом $m = 1$ отвечают фазы Φ_0 кратные $\pi/2$. Распределения с фазами $\Phi_0 = \Phi_0 + j\pi$, где $j = 0, \pm 1, \pm 2 \dots$, задают одно и то же распределение директора \mathbf{n} . Поэтому независимыми являются только две фазы: $\Phi_0 = 0$ и $\pi/2$. Этот результат, впервые полученный в работе [14], имеет непосредственное отношение к PR- и PC-конфигурациям НЖК в цилиндрическом объеме (см. соответственно рис. 1а и 2а). Если дисклинация с $m = 1$ находится на оси цилиндра, то поле директора (10) с функцией $\Phi = \varphi + \Phi_0$ из (16) описывает PR-структуру при $\Phi_0 = 0$ и PC-структуру при $\Phi_0 = \pi/2$. Полученные из соотношения (5) выражения для полных свободных энергий данных структур в расчете на единицу длины цилиндра имеют вид

$$F_{PR} = \pi K_{11} \ln(R/\rho), \quad F_{PC} = \pi K_{33} \ln(R/\rho), \quad (20)$$

где ρ — радиус ядра дисклинации.

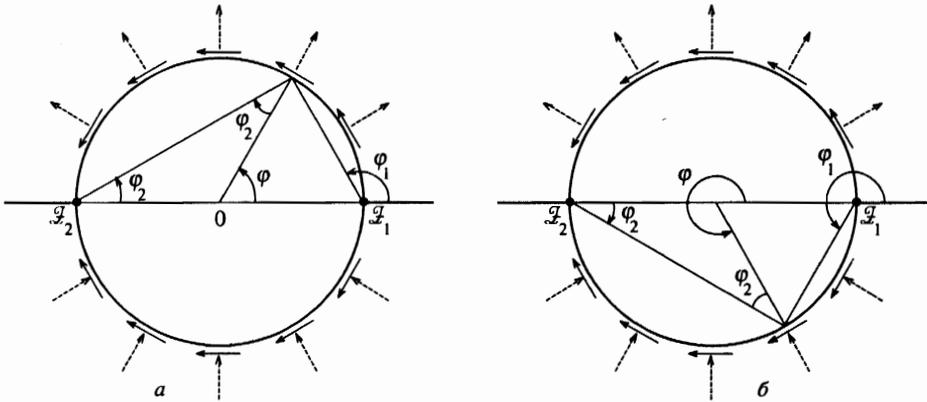


Рис. 3. Схема построения решения для полярных структур при жестком характере сцепления. На верхней (а) половине окружности $\varphi_1 = \varphi/2 + \pi/2$, $\varphi_2 = \varphi/2$; на нижней (б) половине окружности $\varphi_1 = \varphi/2 + \pi/2$, $\varphi_2 = \varphi/2 - \pi$

2. Плоская деформация, которая задается двумя дисклинационными линиями с одинаковыми топологическими зарядами $m_1 = m_2 = 1$. Если дисклинационные линии проходят через точки \mathcal{X}_1 и \mathcal{X}_2 , то комплексный потенциал (см. (15)) равен

$$G_{1+1} = -i \ln [(\mathcal{X} - \mathcal{X}_1)(\mathcal{X} - \mathcal{X}_2)] + A.$$

Отсчитывая суммарную фазу Φ_0 дисклинаций от направления, проходящего через точки \mathcal{X}_1 и \mathcal{X}_2 , получаем

$$\Lambda_{1+1} = \Lambda(\text{Re}(G_{1+1})) = -\frac{d^2 \sin(2\Phi_0)}{l_1^2 l_2^2}, \tag{21}$$

здесь $l_j = |\mathcal{X} - \mathcal{X}_j|$ — расстояние от текущей точки \mathcal{X} до оси j -й дисклинации ($j = 1, 2$); $d = |\mathcal{X}_1 - \mathcal{X}_2|$ — расстояние между дисклинациями. Из соотношения (21) следует, что для двух отдельных ($d \neq 0$) линейных дефектов условие $\Lambda_{1+1} = 0$ реализуется, если суммарная фаза Φ_0 кратна $\pi/2$; независимыми являются значения $\Phi_0 = 0$ и $\pi/2$. Этот результат мы используем в следующем разделе. (Добавим, что условие $\Lambda_{1+1} = 0$ выполняется и при $d = 0$, т. е. в случае отдельной дисклинации с зарядом $m = 2$, см. [14].)

4. РР- И СРР-КОНФИГУРАЦИИ

4.1. Двухконстантное приближение

Как уже отмечалось выше, РР- и СРР-конфигурации (см. соответственно рис. 1б и 2б) относятся к классу плоских искажений поля директора. В двухконстантном приближении РР-структура была описана в работах [3, 4]. Проследим, как может быть получено это решение при использовании представления о комплексном потенциале. Одновременно с РР-структурой будем рассматривать и СРР-конфигурацию.

Поле директора РР- и СРР-структур описывается выражением (10); направление легкого ориентирования на поверхности $r = R$ цилиндра определяется функцией

$$\Phi_S(\varphi) = \begin{cases} \varphi + \frac{\pi}{4}(1 - q), & 0 < \varphi < \pi, \\ \varphi - \frac{\pi}{4}(3 + q), & \pi < \varphi < 2\pi. \end{cases} \quad (22)$$

Здесь $q = \pm 1$: значение $q = 1$ отвечает гомеотропному, а $q = -1$ — циркулярному типам сцепления; направления директора, которые задает функция (22), показаны на рис. 3 (сплошные стрелки соответствуют $q = -1$, штриховые — $q = 1$). Если характер сцепления жесткий, то граничное условие (8) для уравнения равновесия (12) имеет вид

$$\Phi(R, \varphi) = \Phi_S(\varphi). \quad (23)$$

Из выражения (22) видно, что на поверхности цилиндра в точках $\mathcal{X}_1 = \mathcal{X}(R, 0) = R$ и $\mathcal{X}_2 = \mathcal{X}(R, \pi) = -R$ граничная функция $\Phi_S(\varphi)$ претерпевает разрыв. Если уравнение равновесия (12) выполняется всюду в объеме НЖК, то в этих граничных точках должны существовать дисклинационные линии с некоторыми топологическими зарядами соответственно m_1 и m_2 . Построим пробный комплексный потенциал как сумму потенциалов (15) отдельных дисклинационных линий:

$$G(\mathcal{X}) = -i m_1 \ln(\mathcal{X} - R) - i m_2 \ln(\mathcal{X} + R) + A. \quad (24)$$

Действительная часть этого выражения определяет пробную функцию

$$\Phi = \text{Re} [G(\mathcal{X})] = m_1 \varphi_1 + m_2 \varphi_2 + \Phi_0;$$

углы φ_1 и φ_2 показаны на рис. 3. Чтобы в области, занятой НЖК, зависимость $\Phi(r, \varphi)$ была однозначной функцией, проведем разрезы плоскости \mathcal{X} вдоль лучей $[-\infty, -R]$ и $[R, +\infty]$. Тогда углы φ_1 и φ_2 будут меняться в интервалах $0 \leq \varphi_1 < 2\pi$ и $-\pi \leq \varphi_2 < \pi$. Фазу Φ_0 и топологические заряды m_1 и m_2 найдем из граничных условий (23). Выражая из геометрических соображений углы φ_1 и φ_2 на поверхности цилиндра через угол φ (см. рис. 3) и используя функцию (22), получим систему простых линейных уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}\varphi(m_1 + m_2) + \frac{1}{2}\pi m_1 + \Phi_0 &= \varphi + \frac{1}{4}\pi(1 - q), \\ \frac{1}{2}\varphi(m_1 + m_2) - \pi(m_2 - \frac{1}{2}m_1) + \Phi_0 &= \varphi - \frac{1}{4}\pi(3 + q). \end{aligned}$$

Данные уравнения должны выполняться при любом значении φ ; это справедливо, если

$$m_1 = m_2 = 1, \quad \Phi_0 = -\frac{1}{4}\pi(1 + q). \quad (25)$$

Таким образом, равновесному состоянию НЖК отвечает искажение, которое в полной плоскости \mathcal{X} задается двумя дисклинационными линиями с одинаковыми топологическими зарядами равными единице. Гомеотропному сцеплению отвечает фаза $\Phi_0(q = 1) = -\pi/2$, а циркулярному — $\Phi_0(q = -1) = 0$. Подставляя значения (25) в функцию (24) и вычисляя ее действительную часть, находим окончательное выражение для угла¹⁾:

¹⁾ Данный результат, конечно, можно было получить и рядом других способов. Например, подстановкой граничной функции (22) в интеграл Пуассона, как это обычно делается в задачах математической физики. При такой процедуре, однако, непосредственно вычисляя функцию (26), мы не определили бы точный заряд дисклинационных линий, т.е. потеряли бы качественный характер распределения поля директора \mathbf{n} .

$$\Phi = \operatorname{arctg} \frac{r^2 \sin 2\varphi}{r^2 \cos 2\varphi - R^2} + \frac{\pi}{4}(3 - q). \quad (26)$$

Как следует из соотношений (25) и (26), зависимости $\Phi(r, \varphi)$ для РР- и СРР-структур различаются только фазой $\pi/2$. При этом общая картина соответствующих линий тока представляет собой ортогональную решетку биполярной системы координат, полюса которой расположены в точках $\mathcal{X}_{1,2} = \pm R$.

В двухконстантном приближении фаза $\pi/2$ не влияет на величину полной свободной энергии (5), поэтому значения полных энергий для РР- и СРР-структур совпадают друг с другом; в расчете на единицу длины цилиндра они имеют вид

$$F_{PP} = F_{CPP} = \pi K \ln(R/2\rho). \quad (27)$$

Обсудим решение задачи при мягком ($0 \leq W_\theta < \infty$) характере сцепления. Состояние равновесия НЖК описывается уравнением Лапласа (12) с граничным условием (9), которое в рассматриваемом случае принимает вид

$$\left[2KR \frac{\partial \Phi}{\partial r} + qW_\theta R \sin(2\Phi - 2\varphi) \right]_{r=R} = 0. \quad (28)$$

Прежде чем решать эту задачу, заметим, что масштабное (конформное) преобразование [31, 33]

$$r' = cr, \quad \varphi' = \varphi, \quad (29)$$

где c — коэффициент растяжения, переводит уравнение Лапласа (12) в решение того же уравнения. Следовательно, функция вида (ср. с (26))

$$\Phi = \operatorname{arctg} \left[\frac{r^2 \sin 2\varphi}{r^2 \cos 2\varphi - (cR)^2} \right] + \frac{\pi}{4}(3 - q) \quad (30)$$

также является решением уравнения равновесия (12). Действительно, функция (30) отвечает двум дисклинационным линиям, находящимся в точках $\mathcal{X}_1 = cR$ и $\mathcal{X}_2 = -cR$. Подстановка выражения (30) в граничное условие (28) позволяет определить равновесное значение c . Эта подстановка приводит к уравнению, не зависящему от параметра q , т. е.

$$\frac{\sin 2\varphi [W_\theta Rc^4 - 4Kc^2 - W_\theta R]}{c^4 - 2c^2 \cos 2\varphi + 1} = 0. \quad (31)$$

Отсюда следует, что

$$c = \sqrt{\frac{1 + \sqrt{1 + w^2}}{w}},$$

здесь $w = W_\theta R/2K$. При любых конечных значениях w величина $c > 1$. Следовательно, равновесному полю директора внутри цилиндрического капилляра отвечает искажение, которое задается двумя фиктивными дисклинационными линиями. Другими словами, при мягком характере сцепления эффективный радиус частицы увеличивается в c раз

(см. масштабное преобразование (29)). При $w = 0$ (абсолютно вырожденный тип сцепления) эффективный радиус неограниченно возрастает, фиктивные дисклинационные линии уходят на бесконечность и внутри капилляра поле директора становится однородным.

Подстановка распределения (10) с функцией (30) в выражение (5) определяет полные энергии РР- и СРР-структур; в расчете на единицу длины цилиндра имеем

$$F_{PP} = F_{CPP} = \pi K \left[-\ln \left(\frac{c^4 - 1}{c^4} \right) + w \left(\frac{c^2 - 1}{c^2} \right) \right] = \pi K \left[-\ln(2\gamma\xi) + \frac{1 - \gamma}{\xi} \right]. \quad (32)$$

Последнее выражение записано в терминах работ [3, 4]; здесь $\xi = 1/w = 2K/W_\theta R$, $\gamma = 1/c^2 = \sqrt{\xi^2 + 1} - \xi$. Как следует из соотношений (27) и (32), в двухконстантном приближении РР- и СРР-структуры энергетически полностью эквивалентны.

4.2. Общий случай $K_{11} \neq K_{33}$

В п. 3.2 было показано, что искажение, которое задается двумя дисклинационными линиями с топологическими зарядами $m_1 = m_2 = 1$ и фазой Φ_0 , кратной $\pi/2$, удовлетворяет общему уравнению равновесия (17) при $K_{11} \neq K_{33}$. Поэтому при жестком характере сцепления, когда граничное условие для угла $\Phi(r, \varphi)$ имеет вид (23), решение задачи определяется формулой (26). Несмотря на такое совпадение, РР- и СРР-структуры в общем случае уже не являются энергетически эквивалентными; полученные из соотношения (5) при $K_{11} \neq K_{33}$ выражения для полных свободных энергий в расчете на единицу длины цилиндрического капилляра имеют вид

$$\begin{aligned} F_{PP} &= \pi K_{33} \ln(R/2\rho) - \pi (K_{33} - K_{11})(1 - \ln 2), \\ F_{CPP} &= \pi K_{11} \ln(R/2\rho) + \pi (K_{33} - K_{11})(1 - \ln 2). \end{aligned} \quad (33)$$

Нетрудно убедиться, что эти выражения переходят в формулу (27) при $K_{11} = K_{33}$.

При мягком характере сцепления граничное условие (9) для уравнения равновесия (17) записывается как

$$\left\{ 2KR \frac{\partial \Phi}{\partial r} + qW_\theta R \sin(2\Phi - 2\varphi) + 2K\kappa \left[R \frac{\partial \Phi}{\partial r} \cos(2\Phi - 2\varphi) + \frac{\partial \Phi}{\partial \varphi} \sin(2\Phi - 2\varphi) \right] \right\}_{r=R} = 0. \quad (34)$$

Напомним, что в общем случае $K = (K_{11} + K_{33})/2$. По аналогии с методом решения этой задачи в двухконстантном приближении можно использовать масштабное преобразование (29) и пробную функцию $\Phi(r, \varphi)$ искать в виде (ср. с (26) и (30))

$$\Phi = \arctg \left[\frac{r^2 \sin 2\varphi}{r^2 \cos 2\varphi - (pR)^2} \right] + \frac{\pi}{4}(3 - q), \quad (35)$$

где p — коэффициент растяжения, отвечающий случаю $K_{11} \neq K_{33}$. Корректность данного подхода следует и из того факта, что общее уравнение равновесия (17), так же как и уравнение Лапласа (12), инвариантно относительно масштабного преобразования (29).

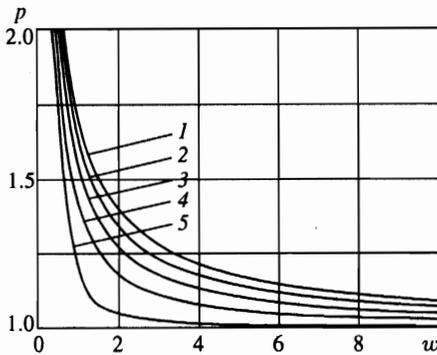


Рис. 4. Зависимость коэффициента растяжения p от безразмерного параметра w при значениях $q\kappa = 0.9$ (1), 0.45 (2), 0 (3), -0.45 (4), -0.9 (5)

Подстановка выражения (35) в граничное условие (34) дает уравнение (ср. с (31)) для равновесного значения p :

$$\frac{\sin 2\varphi [W_\theta R p^4 - 4K p^2 - W_\theta R - 4qK\kappa]}{p^4 - 2p^2 \cos 2\varphi + 1} = 0.$$

Из этого уравнения находим

$$p = \sqrt{\frac{1 + \sqrt{1 + w^2 + 2q\kappa w}}{w}}. \quad (36)$$

Обсудим выражение (36) и рассмотрим поведение дисклинационных линий при $K_{11} \neq K_{33}$. Общий ход зависимости коэффициента растяжения p от безразмерной энергии сцепления w при различных значениях $q\kappa$ показан на рис. 4; асимптотические разложения функции $p(w)$ определяются выражениями

$$p = \begin{cases} (4 + q\kappa w^2)/\sqrt{8w}, & w \ll 1, \\ 1 + (1 + q\kappa)/2w, & w \gg 1. \end{cases} \quad (37)$$

Из рис. 4 и выражений (37) видно, что по сравнению с двухконстантным приближением ($p(w, \kappa = 0) = c(w)$) поведение дисклинационных линий качественно не меняется: при жестком характере сцепления, когда $w = \infty$, линии находятся на боковой поверхности капилляра ($p = 1$); при конечных значениях w они исчезают с поверхности и становятся чисто фиктивными ($1 < p < \infty$); при стремлении w к нулю линии удаляются на бесконечность ($p \rightarrow \infty$). Отличие проявляется в конкретном значении коэффициента растяжения p , на который накладывается зависимость от знака и величины произведения $q\kappa$, т. е. зависимость от типа сцепления директора с боковой поверхностью капилляра и от соотношения модулей упругости K_{11} и K_{33} . Для обычных нематиков $K_{33} > K_{11}$, т. е. $\kappa > 0$. Поэтому при прочих равных условиях следует ожидать (см. рис. 4), что в случае гомеотропного сцепления ($q\kappa > 0$) коэффициент растяжения будет больше, т. е. фиктивные дисклинационные линии будут находиться дальше от поверхности капилляра, чем в случае циркулярных ($q\kappa < 0$) граничных условий. Особо отметим, что при заданном типе сцепления искажения поля директора, которые в эксперименте являются «наблюдаемой величиной», зависят только от значения коэффициента растяжения p

и не зависят от конкретного набора параметров $\{w, \kappa\}$, отвечающих этому значению. Другими словами, любая пара параметров $\{w, \kappa\}$, отвечающих одному значению p (см., например, линии горизонтальной сетки на рис. 4), задает абсолютно эквивалентное распределение директора внутри цилиндрического капилляра.

Подстановка распределения директора (10) с функцией $\Phi(r, \varphi)$ из (35) в соотношение (5) позволяет найти общее выражение для энергий РР- и СРР-структур; в расчете на единицу длины цилиндра это выражение имеет вид

$$F_q = \pi K \left\{ -\ln \left(\frac{p^4 - 1}{p^4} \right) - q\kappa \left[\ln \left(\frac{p^2 - 1}{p^2 + 1} \right) + \frac{2}{p^2} \right] + w \frac{p^2 - 1}{p^2} \right\}.$$

Здесь $F_{q=1} = F_{PP}$, $F_{q=-1} = F_{CPR}$, функция $p = p(q, w, \kappa)$ определяется формулой (36). Асимптотические разложения F_q дают при $w \ll 1$

$$\begin{aligned} F_q &\approx \pi K \left(w - \frac{w^2}{4} + \frac{q\kappa w^3}{12} \right) = \\ &= \frac{\pi W_\theta R}{2} \left[1 - \frac{1}{4} \left(\frac{W_\theta R}{K_{11} + K_{33}} \right) + \frac{q}{12} \left(\frac{K_{33} - K_{11}}{K_{33} + K_{11}} \right) \left(\frac{W_\theta R}{K_{11} + K_{33}} \right)^2 \right], \end{aligned} \quad (38)$$

и при $w \gg 1$

$$\begin{aligned} F_q &\approx \pi K \left\{ (1 + q\kappa) \ln \left(\frac{w}{1 + q\kappa} \right) + (1 - q\kappa)(1 - \ln 2) + \frac{1}{2w} (1 + 4q\kappa + 3q^2\kappa^2) \right\} = \\ &= \begin{cases} \pi K_{33} \ln \left(\frac{W_\theta R}{2K_{33}} \right) + \pi K_{11} (1 - \ln 2) - \frac{\pi K_{33}(2K_{33} - K_{11})}{W_\theta R}, & q = 1, \\ \pi K_{11} \ln \left(\frac{W_\theta R}{2K_{11}} \right) + \pi K_{33} (1 - \ln 2) - \frac{\pi K_{11}(2K_{11} - K_{33})}{W_\theta R}, & q = -1. \end{cases} \end{aligned} \quad (39)$$

Из соотношений (33) и (39) следует, что переход от мягкого к жесткому характеру сцепления происходит при значениях удельной энергии $W_\theta \sim 2K_{33}/\epsilon\rho$ и $W_\theta \sim 2K_{11}/\epsilon\rho$ соответственно для РР- и СРР-структур. Различные модули упругости, входящие в данные оценки, отвечают искажениям, которые являются определяющими для каждой из рассматриваемых структур: для РР-структуры определяющей деформацией является продольный изгиб, связанный с константой K_{33} , а для СРР-конфигурации — поперечный изгиб, связанный с константой K_{11} .

5. «ВЫТЕКАЮЩИЕ» КОНФИГУРАЦИИ

5.1. ER-конфигурация и аксиальная структура

При жестком характере сцепления ER-структура (рис. 1б) была описана в [15] (см. также [34]). Случай мягкого сцепления рассмотрен в [3, 4]. Остановимся кратко на полученных в [3, 4] результатах.

Поле директора ER-конфигурации определяется выражением

$$\mathbf{n} = \sin \Omega(r) \mathbf{e}_r + \cos \Omega(r) \mathbf{e}_z, \tag{40}$$

которое следует из соотношения (6) при подстановке $\Omega(\mathbf{r}) = \Omega(r)$ и экстремали $\Phi(\mathbf{r}) = \varphi$ соответствующего уравнения Эйлера системы (7). Направлению Π легкого ориентирования директора на поверхности цилиндра отвечает угол $\Omega_S = \pi/2$. Распределение $\Omega(r)$, как обычно, находится из уравнения равновесия (7) с граничным условием (9) при $r = R$. Кроме того, отсутствию дисклинации на оси цилиндра отвечает дополнительное граничное условие при $r = 0$:

$$\Omega(0) = 0, \quad \lim_{r \rightarrow 0} |\partial \Omega(r) / \partial r| < \infty.$$

Как показано в [3, 4], вид зависимости $\Omega(r)$ определяется величиной безразмерного параметра

$$\sigma = \frac{W_\theta R}{K_{11}} + \frac{K_{24}}{K_{11}} - 1,$$

который характеризует поверхностные взаимодействия в системе. При $\sigma > 1$ равновесное распределение $\Omega(r)$ задается неявной функцией

$$\frac{r}{R} = \sqrt{\frac{\sigma + 1}{\sigma - 1}} \frac{\Delta - 1}{\Delta + 1} \exp \left(\sqrt{\eta - 1} \operatorname{arctg} \frac{\sqrt{\eta - 1}(\Delta - \sigma)}{\Delta + \eta - 1} \right). \tag{41}$$

Здесь $\Delta = \sqrt{1 + \eta \operatorname{tg}^2 \Omega(r)}$, $\eta = K_{33}/K_{11}$, $0 \leq \Omega(r) \leq \pi/2$. Соотношение (41) справедливо как при $\eta \geq 1$, так и при $0 < \eta < 1$; в последнем случае в показателе экспоненты следует использовать тождественную замену

$$\sqrt{\eta - 1} \operatorname{arctg} \left[\sqrt{\eta - 1} \mu(\eta, \dots) \right] \equiv \sqrt{1 - \eta} \operatorname{arth} \left[\sqrt{1 - \eta} \mu(\eta, \dots) \right], \tag{42}$$

где $\mu(\eta, \dots)$ — знакоопределенная функция при любом значении $\eta > 0$.

При $\sigma \leq 1$ вместо сложной зависимости $\Omega(r)$ из (41) имеет место однородное распределение $\Omega(r) = \text{const} = 0$ с директором \mathbf{n} , параллельным оси z . Последняя структура представляет собой качественно новую (по сравнению с вытекающей радиальной) конфигурацию поля директора; мы будем называть ее аксиальной (axial — AX) структурой. В принципе, решение $\Omega(r) = 0$, отвечающее AX-структуре, удовлетворяет уравнению равновесия с заданными граничными условиями при любом значении σ . Однако при $\sigma > 1$ эта структура является энергетически менее выгодной, чем ER-конфигурация, и если может существовать, то только в метастабильном состоянии. Таким образом, при рассмотрении деформаций вида (40) целесообразно говорить о двух конфигурациях НЖК: вытекающей радиальной, имеющей место при $\sigma > 1$, и аксиальной, которая фактически реализуется при $\sigma \leq 1$. Используя соотношение (41), можно показать, что при $\sigma \rightarrow +1$ вытекающая ER-конфигурация плавно переходит (полное вытекание) в однородную AX-структуру. Выражения для свободных энергий каждой из этих структур в расчете на единицу длины цилиндра имеют вид

$$F_{ER} = \pi K_{11} \left\{ 2 + \frac{\eta}{\sqrt{\eta - 1}} \operatorname{arctg} \left[\frac{\sqrt{\eta - 1}(\sigma - 1)}{\sigma + \eta - 1} \right] - \frac{K_{24}}{K_{11}} \right\}, \quad \sigma > 1, \tag{43}$$

$$F_{AX} = \pi R W_\theta, \quad \sigma \leq 1. \tag{44}$$

При $\eta < 1$ в соотношении (43) следует использовать тождественную замену (42).

5.2. ЕС-конфигурация и аксиальная структура

Аналитическое описание ЕС-структуры (рис. 2б) при жестком характере сцепления представлено в [15]. Проведем рассмотрение данной конфигурации в случае мягкого сцепления.

Поле директора будем искать в виде

$$\mathbf{n} = \sin \Omega(r) \mathbf{e}_\varphi + \cos \Omega(r) \mathbf{e}_z. \quad (45)$$

Это распределение следует из соотношения (6) при подстановке $\Omega(\mathbf{r}) = \Omega(r)$ и экстремали $\Phi(\mathbf{r}) = \varphi + \pi/2$. Направление П легкого ориентирования директора на поверхности цилиндра задается углом $\Omega_S = \pi/2$. В случае искажений вида (45) плотность поверхностной энергии сцепления (4) содержит только азимутальную (W_ϕ) часть, а плотность энергии Франка (2) зависит только от модулей упругости K_{22} и K_{33} , поскольку вклад, связанный с константой K_{11} , тождественно равен нулю ($\operatorname{div} \mathbf{n} = 0$). Уравнение равновесия (7) и граничное условие (9) принимают вид

$$r^2 \frac{\partial^2 \Omega(r)}{\partial r^2} + r \frac{\partial \Omega(r)}{\partial r} - \sin \Omega(r) \cos \Omega(r) [1 + 2(\bar{\eta} - 1) \sin^2 \Omega(r)] = 0, \quad (46)$$

$$R \left(\frac{\partial \Omega(r)}{\partial r} \right)_{r=R} - \bar{\sigma} \sin \Omega(R) \cos \Omega(R) = 0, \quad (47)$$

где $\bar{\eta} = K_{33}/K_{22}$, $\bar{\sigma} = (W_\phi R + K_{24} - K_{22})/K_{22}$.

Из соотношений (46) и (47) видно, что существуют три решения задачи.

1. Решение $\Omega^{(1)}(r) = \Omega^{(1)} = \pi/2$ отвечает планарной РС-конфигурации.
2. Распределение $\Omega^{(2)}(r) = \Omega^{(2)} = 0$ описывает однородную АХ-структуру.
3. Третье решение $\Omega^{(3)}(r)$ отвечает неоднородной ЕС-конфигурации. Получим это распределение в явном виде; для сокращения записи верхний индекс, обозначающий порядковый номер решения, будем опускать.

Уравнение Эйлера (46) имеет первый интеграл

$$\left(r \frac{\partial \Omega(r)}{\partial r} \right)^2 - \sin^2 \Omega(r) [\cos^2 \Omega(r) + \bar{\eta} \sin^2 \Omega(r)] = \text{const}. \quad (48)$$

Очевидно, что полное вытекание линейного дефекта РС-структуры в третье измерение реализуется тогда, когда $\Omega(0) = 0$ и $\lim_{r \rightarrow 0} |\partial \Omega(r)/\partial r| < \infty$; поэтому $\text{const} = 0$.

Подстановка соотношения (48) в граничное условие (47) дает уравнение для угла $\Omega(R)$:

$$\sin \Omega(R) \cos \Omega(R) \left\{ \sqrt{1 + \bar{\eta} \operatorname{tg}^2 \Omega(R)} - \bar{\sigma} \right\} = 0. \quad (49)$$

Заметим, что $\bar{\eta} > 0$, поэтому решение с $\Omega(R) \neq 0$ существует только при $\bar{\sigma} > 1$; в этом случае

$$\Omega(R) = \operatorname{arctg} \sqrt{\frac{\bar{\sigma}^2 - 1}{\bar{\eta}}}. \quad (50)$$

При $\bar{\sigma} \leq 1$ граничный угол $\Omega(R) = 0$ (см. (49)) и общее распределение $\Omega(r) = \Omega^{(2)} = 0$ отвечает однородной АХ-структуре.

Интегрирование соотношения (48) с учетом граничного значения (50) дает

$$\left(\frac{r}{R}\right)^2 = \frac{\tilde{\sigma} + 1}{\tilde{\sigma} - 1} \frac{\sqrt{1 + \tilde{\eta} \operatorname{tg}^2 \Omega(r)} - 1}{\sqrt{1 + \tilde{\eta} \operatorname{tg}^2 \Omega(r)} + 1}.$$

Выражая отсюда зависимость $\Omega(r)$ в явном виде, получаем распределение

$$\Omega(r) = \operatorname{arctg} \left[\sqrt{\frac{\tilde{\sigma}^2 - 1}{\tilde{\eta}}} \frac{2rR}{R^2(\tilde{\sigma} + 1) - r^2(\tilde{\sigma} - 1)} \right], \quad (51)$$

отвечающее значению $\tilde{\sigma} > 1$. Из соотношения (51) видно, что при $\tilde{\sigma} \rightarrow +1$ вытекающая циркулярная конфигурация плавно переходит в аксиальную структуру. Выражения для полных свободных энергий ЕС- и АХ-структур совпадают с точностью до замены $K_{11} \rightarrow K_{22}$ и $W_\theta \rightarrow W_\phi$ (т.е. $\eta \rightarrow \tilde{\eta}$ и $\sigma \rightarrow \tilde{\sigma}$) с соотношениями соответственно (43) и (44). При $\tilde{\sigma} > 1$ энергетически более выгодной является ЕС-конфигурация.

6. ОРИЕНТАЦИОННЫЕ ПЕРЕХОДЫ МЕЖДУ КОНФИГУРАЦИЯМИ

6.1. Гомеотропный тип сцепления

Окончательные выражения для свободных энергий рассмотренных выше структур, отвечающих гомеотропному типу сцепления, представлены в табл. 1. Общий ход зависимостей этих энергий от безразмерного параметра $w_\theta = W_\theta R / K_{11}$ при различных соотношениях между модулями упругости K_{11} , K_{33} и K_{24} показан на рис. 5. Отметим, что константа K_{22} не вносит вклада в энергию ни одной из рассматриваемых конфигураций, а от константы K_{24} зависит только энергия ER-структуры. Обсудим, при каких

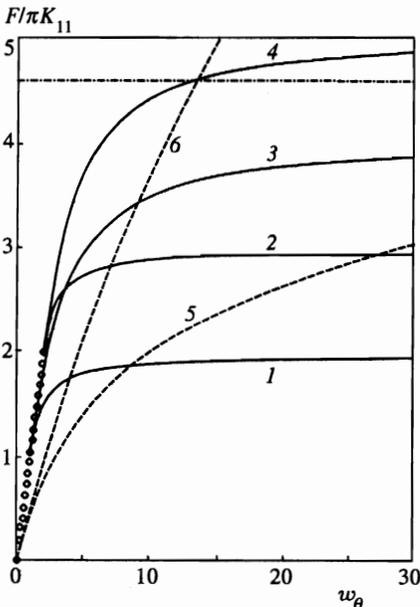


Рис. 5. Зависимости полных свободных энергий от безразмерного параметра w_θ при сцеплении гомеотропного типа. Энергия ER-структуры показана сплошными линиями, PP-конфигурации — штрихами, ER-конфигурации — штрихпунктиром, АХ-структуры — точками. Кривой 1 отвечают значения $\eta = 1$, $K_{24} = K_{11}$; 2 — $\eta = 1$, $K_{24} = 0$; 3 — $\eta = 6$, $K_{24} = K_{11}$; 4 — $\eta = 6$, $K_{24} = 0$; 5 — $\eta = 1$; 6 — $\eta = 6$; для энергии ER-структуры принято отношение $R/\rho = 100$

значениях материальных параметров системы реализуется (т. е. является энергетически более выгодной) та или иная конфигурация НЖК.

Таблица 1

Полные свободные энергии структур, отвечающих гомеотропному типу сцепления, в расчете на единицу длины цилиндра

| Структура | Характер сцепления | |
|-----------|--|---|
| | Жесткий | Мягкий |
| PR | $\pi K_{11} \ln(R/\rho)$ | $\pi K_{11} \ln(R/\rho)$ |
| PP | $\pi K_{33} \ln(R/2\rho) - \pi(K_{33} - K_{11})(1 - \ln 2)$ | $\pi K \left\{ -\ln \left(\frac{\zeta^2 - 1}{\zeta^2} \right) + w \frac{\zeta - 1}{\zeta} - \kappa \left[\ln \left(\frac{\zeta - 1}{\zeta + 1} \right) + \frac{2}{\zeta} \right] \right\},$ $\zeta = \frac{1 + \sqrt{1 + w^2 + 2w\kappa}}{w},$ $K = \frac{K_{11} + K_{33}}{2}, \quad \kappa = \frac{K_{33} - K_{11}}{K_{33} + K_{11}},$ $w = \frac{W_\theta R}{K_{11} + K_{33}}$ |
| ER | $\pi K_{11} \left[2 - \frac{K_{24}}{K_{11}} + \frac{\eta}{\sqrt{\eta - 1}} \operatorname{arctg} \sqrt{\eta - 1} \right],$ $\eta = K_{33}/K_{11},$ $\eta \geq 1^*$ | $\pi K_{11} \left\{ 2 - \frac{K_{24}}{K_{11}} + \frac{\eta}{\sqrt{\eta - 1}} \operatorname{arctg} \frac{\sqrt{\eta - 1}(\sigma - 1)}{\sigma + \eta - 1} \right\},$ $\sigma = W_\theta R/K_{11} + K_{24}/K_{11} - 1,$ $\sigma > 1, \quad \eta \geq 1^*$ |
| AX | - | $\pi R W_\theta,$ $\sigma \leq 1$ |

Примечание. * При $\eta < 1$ следует воспользоваться тождественной заменой вида (42).

В случае, когда объемные модули упругости K_{11} и K_{33} равны между собой, приведенные в табл. 1 соотношения для энергий полностью совпадают с аналогичными выражениями, полученными в работах [3, 4]. При этом энергия PP-конфигурации всегда меньше энергий PR- и AX-структур:

$$F_{PP} - F_{PR} < -\pi K \ln 2 < 0, \quad F_{PP} - F_{AX} < -\frac{W_\theta R}{2K} < 0. \tag{52}$$

Последняя оценка получена с использованием соотношения (38), из которого следует, что начальный наклон зависимости $F_{PP}(W_\theta)$ в два раза меньше наклона линейной функции $F_{AL}(W_\theta)$, см. табл. 1. Из поведения кривой 5 на рис. 5 видно, что при увеличении удельной энергии W_θ (т. е. безразмерного параметра w_θ) наклон функции $F_{PP}(W_\theta)$ уменьшается, поэтому второе из условий (52) выполняется при любых значениях W_θ . Таким образом, при $K_{11} = K_{33}$ равновесная конфигурация НЖК определяется балансом энергий PP- и ER-структур (ср. кривую 5 с кривыми 1 и 2, полученными при различных значениях константы K_{24}).

В общем случае $K_{11} \neq K_{33}$, исходя из тех же соображений, заключаем, что AX-структура всегда обладает большей энергией по сравнению с PP-конфигурацией. Следовательно, при гомеотропном типе сцепления чисто аксиального распределения поля директора не должно наблюдаться экспериментально (за исключением, конечно, тривиального случая $W_\theta = 0$, отвечающего абсолютно вырожденному типу сцепления). В то же время PR-конфигурация может иметь место при определенных соотношениях между материальными параметрами системы. Например, при жестком ($W_\theta = \infty$) характере сцепления она становится энергетически выгоднее PP-структуры при условии

$$\eta = \frac{K_{33}}{K_{11}} > 1 + \frac{\ln 2}{\ln(R/\rho) - 1}, \quad (53)$$

где, как и в выражениях для F_{PP} и F_{ER} из табл. 1, следует полагать $R \gg \rho$ (или, во всяком случае, $R > e\rho$). Отметим, что при $R \rightarrow \infty$ условие (53) согласуется с результатами работы [35]: линейная радиальная дисклинация с $m = 1$ является устойчивой по отношению к плоским возмущениям при $\eta > 1$. С уменьшением радиуса R цилиндра, как показывает соотношение (53), минимум энергии PR-структуры в классе плоских искажений достигается при больших значениях η . Естественно, что для устойчивости PR-конфигурации необходимо также выполнение условия $F_{PR} < F_{ER}$. Выражение для энергии F_{ER} содержит сложную функцию от η , поэтому данное условие неудобно для качественного анализа. Более полное представление об областях существования каждой из трех рассматриваемых структур можно получить из показанных на рис. 6 диаграмм ориентационных состояний, отвечающих значениям $K_{24} = 0$ и $1.5 K_{11}$.

Из рис. 6 видно, что для цилиндров большого радиуса ($\ln(R/\rho) \geq 6$) в широком интервале значений η и практически независимо от величины K_{24} минимуму энергии отвечает ER-структура. Данная ситуация относится к оптическим экспериментам [5–8, 13], в которых использовались капилляры радиуса $R = 20$ – 200 мкм. В этих экспериментах наблюдалась конфигурация ER (или ERPD) и был реализован именно жесткий характер сцепления. Действительно, при сопоставлении выражений для энергии ER-структуры, отвечающих разным характерам сцепления (см. табл. 1), заключаем, что переход от мягкого к жесткому сцеплению происходит при $\sigma \gg \eta$. В более грубой форме эта оценка имеет вид $R \gg b_3$, где $b_3 = K_{33}/W_\theta$ — экстраполяционная длина де Жена-Клемана [2, 29], отвечающая модулю упругости K_{33} . Принимая при средних температурах существования нематической фазы $K_{33} \sim 10^{-6}$ дин [29] и $W_\theta \sim 10^{-2}$ – 10^{-1} эрг/см² [36], получаем оценку $b_3 \sim 0.1$ – 1 мкм, т. е. условие жесткого сцепления в экспериментах [5–8, 13] выполнялось.

Теоретически ориентационные переходы к PR- и PP-конфигурациям должны иметь место в цилиндрах меньшего радиуса (см. рис. 6). В тонких капиллярах, однако, условие жесткого сцепления $R \gg b_3$ перестает выполняться: принимая $\rho \sim 5 \cdot 10^{-7}$ [9–12], получаем, что R всегда меньше или порядка b_3 при значениях абсциссы $\ln(R/\rho) \leq 3$.

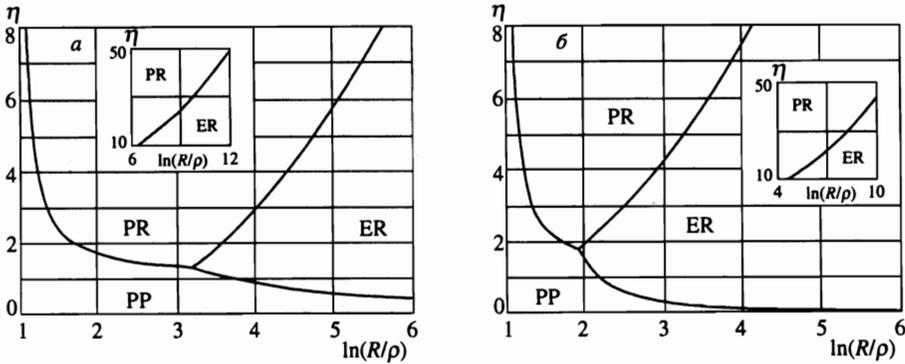


Рис. 6. Диаграммы ориентационных состояний НЖК в координатах $\ln(R/\rho)$ и η для гомеотропных граничных условий в случае жесткого сцепления. Расчетные значения модуля упругости $K_{24} = 0$ (а) и $1.5 K_{11}$ (б). На вставках показаны области больших значений координат

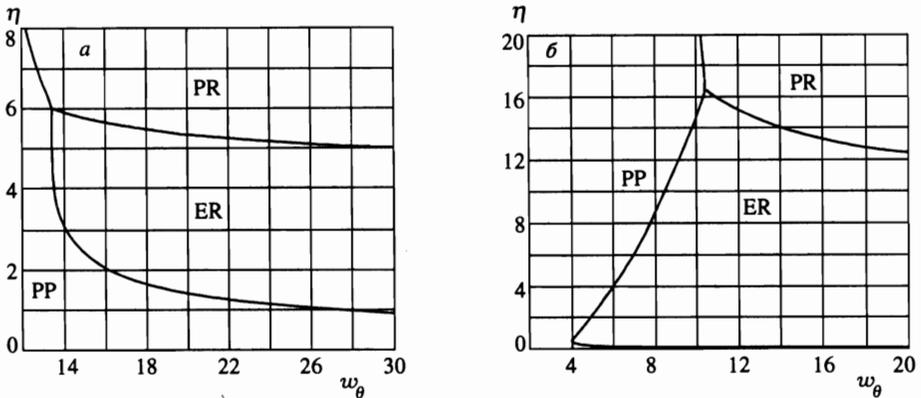


Рис. 7. Диаграммы ориентационных состояний НЖК в координатах w_θ и η для гомеотропных граничных условий в случае мягкого сцепления. Расчетные значения параметров: $R/\rho = 100$; $K_{24} = 0$ (а) и $1.5 K_{11}$ (б)

Таким образом, в тонких капиллярах для оценки ориентационной устойчивости конфигураций необходимо использовать более общие выражения для энергий, отвечающие мягкому характеру сцепления.

Диаграммы ориентационных состояний НЖК в случае мягкого сцепления при значениях $K_{24} = 0$ и $1.5 K_{11}$ представлены на рис. 7. В целом данные диаграммы показывают сильную зависимость условий переходов между конфигурациями от величины поверхностного модуля упругости K_{24} . Например, область существования ER-структуры при $K_{24} = 1.5 K_{11}$ (рис. 7б) значительно расширяется по сравнению со случаем $K_{24} = 0$ (рис. 7а). Это вполне естественно, так как с увеличением K_{24} энергия ER-конфигурации уменьшается (ср. кривые 2 и 4 с кривыми 1 и 3 на рис. 5). PP-конфигурация практически всегда (даже при $K_{24} = 2 K_{11}$) должна иметь место при малых значениях безразмерной энергии w_θ . Например, в экспериментах [3, 4] она наблюдалась в цилиндрах радиуса $R = 0.3$ и 0.4 мкм; из теоретического анализа экспериментальных данных были

получены соответственно оценки $w_\theta \approx 1.8$ и 2.4. Что касается PR-структуры, то она может иметь место только при больших значениях η . Отметим, что область существования данной конфигурации показана на рис. 7 достаточно условно и отвечает отношению $R/\rho = 100$, т.е. цилиндрам радиуса $R \sim 0.5$ мкм. При $R/\rho > 100$ эта область смещается в сторону больших, а при $R/\rho < 100$ — в сторону меньших значений η . Следовательно, при уменьшении радиуса цилиндра и вблизи перехода нематик-сметик А, когда величина η существенно больше единицы, вероятность экспериментального наблюдения PR-структуры возрастает.

6.2. Циркулярный тип сцепления

Кратко рассмотрим условия переходов между конфигурациями, которые отвечают циркулярному типу сцепления. Окончательные выражения для свободных энергий этих структур представлены в табл. 2. Набор материальных параметров, описывающих данные конфигурации, шире по сравнению с соответствующим набором для сцепления гомеотропного типа. Дополнительно он включает в себя значения модуля кручения K_{22} и удельной энергии сцепления W_ϕ . Увеличение числа материальных параметров усложняет качественный анализ системы в целом. Вместе с этим для отдельных структур, таких как РС- и АХ-конфигурации, удается найти, по крайней мере, необходимые условия существования.

РС-конфигурация может иметь место только тогда, когда она обладает минимумом энергии в классе плоских искажений. При жестком характере сцепления требование $F_{PC} < F_{CPP}$ приводит к условию

$$\eta = \frac{K_{33}}{K_{11}} < \frac{\ln(R/\rho)}{\ln(2R/e\rho)} \approx 1 + \frac{0.3}{\ln(R/\rho)}, \quad (54)$$

которое в цилиндрах большого радиуса ($R \gg \rho$) совпадает с соотношением, полученным в [35]: $\eta < 1$. При мягком характере сцепления энергия СРР-конфигурации понижается, поэтому область существования РС-структуры, обладающей постоянной энергией, смещается в сторону меньших значений η . Отметим, что даже в случае жесткого сцепления ограничение (54) является достаточно сильным, так как в реальных НЖК при средних температурах существования нематической фазы значение параметра η обычно лежит в интервале $1 \leq \eta \leq 2$.

АХ-структура может существовать при $\bar{\sigma} < 1$ и лишь в том случае, когда наклон линейной функции $F_{AX}(W_\phi)$ меньше начального наклона зависимости $F_{CPP}(W_\theta)$, см. (38). Это выполняется при условии $W_\phi/W_\theta < 1/2$.

В качестве примера на рис. 8 показана диаграмма ориентационных состояний НЖК при мягком характере сцепления и значениях $\bar{\eta} = 1$, $K_{24}/K_{11} = 1$, $W_\phi/W_\theta = 0.4$, $R/\rho = 20$. Теоретически в данном случае могут иметь место все четыре конфигурации НЖК. Область существования РС-структуры, однако, отвечает практически нереальным значениям η . Поэтому мы полагаем, что данная конфигурация не сможет наблюдаться экспериментально, если, конечно, циркулярный тип сцепления будет реализован на практике. Этот вывод тем более очевиден, что при увеличении радиуса цилиндра область существования РС-структуры сужается и отвечает меньшим значениям η . Как следует из рис. 8, в цилиндрах большого радиуса минимуму энергии отвечает ЕС-структура, а в тонких капиллярах — АХ- или СРР-конфигурации. Численные расчеты показывают, что область существования СРР-структуры расширяется с увеличением $\bar{\eta}$ и уменьшением K_{24} .

Таблица 2
 Полные свободные энергии структур, отвечающих циркулярному типу сцепления, в расчете на единицу длины цилиндра

| Структура | Характер сцепления | |
|-----------|---|---|
| | Жесткий | Мягкий |
| PC | $\pi K_{33} \ln(R/\rho)$ | $\pi K_{33} \ln(R/\rho)$ |
| CPP | $\pi K_{11} \ln(R/2\rho) + \pi(K_{33} - K_{11})(1 - \ln 2)$ | $\pi K \left\{ -\ln \left(\frac{\bar{\zeta}^2 - 1}{\bar{\zeta}^2} \right) + w \frac{\bar{\zeta} - 1}{\bar{\zeta}} + \right.$ $\left. + \kappa \left[\ln \left(\frac{\bar{\zeta} - 1}{\bar{\zeta} + 1} \right) + \frac{2}{\bar{\zeta}} \right] \right\},$ $\bar{\zeta} = \frac{1 + \sqrt{1 + w^2 - 2w\kappa}}{w},$ $K = \frac{K_{11} + K_{33}}{2}, \quad \kappa = \frac{K_{33} - K_{11}}{K_{33} + K_{11}}$ $w = \frac{W_\theta R}{K_{11} + K_{33}}$ |
| EC | $\pi K_{22} \left[2 - \frac{K_{24}}{K_{22}} + \frac{\bar{\eta}}{\sqrt{\bar{\eta} - 1}} \operatorname{arctg} \sqrt{\bar{\eta} - 1} \right],$ $\bar{\eta} = \frac{K_{33}}{K_{22}}$ $\bar{\eta} \geq 1^*$ | $\pi K_{22} \left[2 - \frac{K_{24}}{K_{22}} + \frac{\bar{\eta}}{\sqrt{\bar{\eta} - 1}} \operatorname{arctg} \frac{\sqrt{\bar{\eta} - 1}(\bar{\sigma} - 1)}{\bar{\sigma} + \bar{\eta} - 1} \right],$ $\bar{\sigma} = \frac{W_\phi R}{K_{22}} + \frac{K_{24}}{K_{22}} - 1,$ $\bar{\sigma} > 1 \quad \bar{\eta} \geq 1^*$ |
| AX | — | $\pi R W_\phi,$ $\bar{\sigma} \leq 1$ |

Примечание. * При $\bar{\eta} < 1$ следует воспользоваться тождеством (42) с заменой η на $\bar{\eta}$.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Выше мы провели рассмотрение для бесконечно длинных цилиндров. Полученные результаты остаются справедливыми и для капилляров длиной $L \gg R$. В последнем случае отношение энергии, связанной с торцевыми эффектами, к общей свободной энергии системы порядка R/L . Поэтому искажениями директора вблизи торцов цилиндра можно пренебрегать и для энергий описанных выше структур использовать

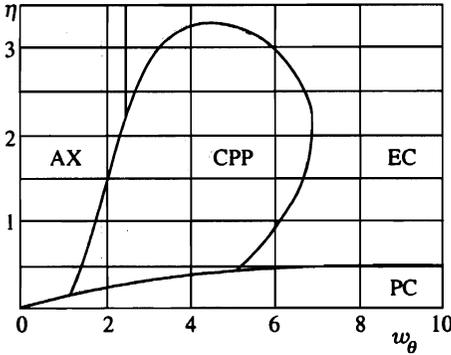


Рис. 8. Диаграмма ориентационных состояний НЖК в координатах w_θ и η для циркулярных граничных условий в случае мягкого сцепления. Расчетные значения параметров: $\tilde{\eta} = 1$, $K_{24}/K_{11} = 1$, $W_\phi/W_\theta = 0.4$, $R/\rho = 20$

выражения из табл. 1 и 2. Ситуация существенно меняется для ERPD-структуры (а также для теоретически возможной ЕС-структуры с точечными дефектами). В капиллярах конечной длины ERPD-конфигурация является устойчивой. Как показано в [16], точечные дефекты притягиваются и аннигилируют только при расстоянии между ними $h \leq 0.25R$. При расстоянии $h > 0.25R$ дефекты отталкиваются друг от друга. Они, однако, не могут выйти за пределы жидкокристаллического образца, так как вблизи торцов цилиндра точечные дефекты, подобно линейным дисклинациям [29], отталкиваются и от своих зеркальных изображений. Силы отталкивания приводят к тому, что реальные точечные дефекты располагаются вдоль оси цилиндра на одинаковом расстоянии друг от друга. Поскольку направления вытекания равновероятны, в реальной ситуации ERPD-структура наблюдается чаще, чем однородная ER-конфигурация. Вместе с этим описанные в разд. 6 условия переходов между планарными и вытекающими структурами в целом остаются справедливыми. При $L \gg R$ данные условия, связанные фактически с неустойчивостью одной из планарных структур, должны слабо зависеть от того, к какой именно трехмерной (ER или ERPD) конфигурации происходит вытекание.

В работах [3, 4], где приводятся результаты наблюдения перехода от PP-структуры к ERPD-конфигурации, этот вывод был использован для оценки поверхностного модуля упругости K_{24} . Отметим, что для константы K_{24} в литературе имеется крайне ограниченное число экспериментальных данных (см., например, [37, 38]). Это связано с тем, что поверхностный модуль упругости всегда входит в определяющие соотношения в комбинации по крайней мере с одной из удельных энергий сцепления, W_θ или W_ϕ . Разделить указанные параметры в одной серии экспериментов является достаточно сложной и не всегда выполнимой задачей. В [3, 4] это разделение проведено достаточно четко. Объектом исследования был жидкий кристалл 5ЦБ, помещенный в цилиндрические поры длиной $L \approx 10$ мкм. PP-структура, как уже упоминалось выше, наблюдалась в порах радиуса $R = 0.3$ и 0.4 мкм; переход к ERPD-конфигурации имел место при $R = 0.5$ мкм. Метод разделения вкладов, связанных с W_θ и K_{24} , был основан на непосредственном определении величины W_θ из анализа экспериментальных данных, отвечающих PP-конфигурации. Напомним, что эта структура не зависит от модуля упругости K_{24} . При использовании двухконстантного приближения ($\eta = 1$) была получена оценка $W_\theta/K \approx 6 \cdot 10^4$ см⁻¹. Из условия $F_{PP} \approx F_{ER}$ при $R = 0.5$ мкм было найдено значение $K_{24} \approx 1.7K$. Исходя из реальной величины параметра $\eta = 1.4$ [12, 39] и опираясь на результаты настоящей работы, мы можем уточнить полученные значе-

ния W_θ и K_{24} . Используя для оценки W_θ среднее значение удельных энергий, которые находятся из равенства коэффициентов растяжения $p(\eta = 1.4) = p(\eta = 1)$ при $R = 0.3$ и 0.4 мкм, и следуя той же методике определения K_{24} , получаем $W_\theta/K_{11} \approx 7.7 \cdot 10^4$ см⁻¹ и $K_{24} \approx 1.61K_{11}$. Последняя оценка, конечно, не является окончательной, так как она не следует из прямого сравнения теории с экспериментальными данными: в качестве «экспериментальных» использованы теоретические значения $p(\eta = 1)$. При этом величина $K_{24} = 1.61K_{11}$ более близка к значению $K_{24} = 1.1K$, которое получено в тех же работах методом фитирования экспериментальных данных, отвечающих ERPD-конфигурации. В последнем случае для угла $\Omega(r, z)$ использовалась пробная функция, качественно описывающая реальное распределение директора $\mathbf{n}(\mathbf{r})$ при $\eta = 1$ (двухконстантное приближение). Для более точной оценки величины K_{24} и проверки результатов настоящей работы крайне желательны дальнейшие эксперименты.

Автор выражает благодарность Ю. Л. Райхеру за обсуждение полученных результатов и К. И. Морозову за ряд полезных замечаний.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке НПК «ИСТА».

Литература

1. A. Saupe, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **21**, 211 (1973).
2. M. Kleman, *Points, Lines and Walls in Liquid Crystals, Magnetic Systems and Various Ordered Media*, Wiley, New York (1983), p. 48.
3. D. W. Allender, G. P. Crawford, and J. W. Doane, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 1442 (1991).
4. G. P. Crawford, D. W. Allender, and J. W. Doane, *Phys. Rev. A* **45**, 8693 (1992).
5. R. B. Meyer, *Phil. Mag.* **27**, 405 (1973).
6. C. Williams, P. Pieranski, and P. E. Cladis, *Phys. Rev. Lett.* **29**, 90 (1972).
7. C. Williams, P. E. Cladis, and M. Kleman, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **21**, 355 (1973).
8. M. Kuzma and M. M. Labes, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **100**, 103 (1983).
9. G. P. Crawford, M. Vifan, J. W. Doane, and I. Vifan, *Phys. Rev. A* **43**, 835 (1991).
10. R. J. Ondris-Crawford, G. P. Crawford, J. W. Doane et al., *Phys. Rev. E* **48**, 1998 (1993).
11. G. P. Crawford, D. W. Allender, J. W. Doane et al., *Phys. Rev. A* **44**, 2570 (1991).
12. A. Scharkowski, G. P. Crawford, S. Žumer, and J. W. Doane, *J. Appl. Phys.* **73**, 7280 (1993).
13. R. D. Polak, G. P. Crawford, B. C. Kostival et al., *Phys. Rev. E* **49**, R978 (1994).
14. И. Е. Дзялошинский, *ЖЭТФ* **58**, 1443 (1970).
15. P. E. Cladis and M. Kleman, *J. de Phys.* **33**, 591 (1972).
16. I. Vifan, M. Vifan, and S. Žumer, *Phys. Rev. A* **43**, 6875 (1991).
17. P. E. Cladis, *Phil. Mag.* **29**, 641 (1974).
18. F. Scudieri, *Appl. Opt.* **18**, 1455 (1979).
19. S. Kralj and S. Žumer, *Phys. Rev. E* **51**, 366 (1995).
20. R. J. Ondris-Crawford, M. Ambrožič, J. W. Doane, and S. Žumer, *Phys. Rev. E* **50**, 4773 (1994).
21. Л. М. Блинов, Е. И. Кац, А. А. Сонин, *УФН* **152**, 449 (1987).
22. Ж. Коньяр, *Ориентация жидких кристаллов и их смесей*, Университетское изд-во, Минск (1986).
23. A. Saupe, *J. Chem. Phys.* **75**, 5118 (1981).
24. F. C. Frank, *Discuss. Faraday Soc.* **25**, 19 (1958).
25. Е. И. Кац, В. В. Лебедев, *Динамика жидких кристаллов*, Наука, Москва (1988), с. 18.
26. S. Stallinga, J. A. M. M. van Haaren, and J. M. A. van den Eerenbeemd, *Phys. Rev. E* **53**, 1701 (1996).

27. J. L. Eriksen, *Phys. Fluids* **9**, 1205 (1966).
28. A. Rapini and M. Papoular, *J. de Phys.* **30**, C4-54 (1969).
29. П. де Жен, *Физика жидких кристаллов*, Мир, Москва (1977).
30. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Электродинамика сплошных сред*, Наука, Москва (1982).
31. М. А. Лаврентьев, Б. В. Шабат, *Методы теории функций комплексного переменного*, Наука, Москва (1973).
32. М. В. Курик, О. Д. Лаврентович, *УФН* **154**, 381 (1988).
33. Дж. Эриксен, *Исследования по механике сплошных сред*, Мир, Москва (1977), с. 112.
34. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теория упругости*, Наука, Москва (1987), с. 200.
35. С. И. Анисимов, И. Е. Дзялошинский, *ЖЭТФ* **63**, 1460 (1972).
36. C. Rosenblatt, *J. de Phys.* **45**, 1087 (1984).
37. O. D. Lavrentovich, *Phys. Scripta* **39**, 349 (1991).
38. A. Sparavigna, O. D. Lavrentovich, and A. Strigazzi, *Phys. Rev. E* **49**, 1344 (1994).
39. P. P. Karat and N. V. Madhusudana, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **36**, 51 (1976); **40**, 239 (1977).