

Санкт-Петербургский Государственный Университет

**Оскирко Антон Дмитриевич**

**Выпускная квалификационная работа**

**Исследование изменения ориентационной структуры  
кирального жидкого кристалла с большим  
флексоэлектрическим коэффициентом под воздействием  
внешнего электрического поля**

Уровень образования: аспирантура

Направление: (03.06.01) «Физика и астрономия»

Основная образовательная программа:

МК.3008.2016 «Физика»

Научный руководитель:

доктор физико-математических наук, профессор

Ульянов Сергей Владимирович

Санкт-Петербург

2020

## Оглавление

	Стр.
<b>Введение</b> . . . . .	<b>3</b>
<b>Глава 1. Свободная энергия искажения ориентационной структуры</b> . . . . .	<b>9</b>
1.1 Свободная энергия упругих искажений ориентационной структуры	10
1.2 Энергия взаимодействия с полем . . . . .	13
1.3 Система уравнений Эйлера-Лагранжа и упрощение функционала свободной энергии . . . . .	17
<b>Глава 2. Переход Фредерикса в случае отрицательной анизотропии диэлектрической проницаемости.</b> . . . . .	<b>20</b>
2.1 Аналитическое изучение устойчивости планарной геликоидальной структуры в случае отрицательной диэлектрической проницаемости. . . . .	22
<b>Глава 3. Переход между искажёнными ориентационными структурами в случае большого усреднённого флексоэлектрического коэффициента.</b> . . . . .	<b>29</b>
3.1 Линейное решение . . . . .	34
3.2 Параболическое решение без участков насыщения . . . . .	35
3.3 Решения с участком насыщения . . . . .	47
3.4 Сравнение аналитических результатов с расчётными . . . . .	54
<b>Список литературы</b> . . . . .	<b>59</b>

## Введение

Жидкие кристаллы (ЖК) представляют собой вещества, сочетающие в себе свойства жидкостей и твёрдых тел. С одной стороны, они способны течь, как вязкие жидкости; с другой стороны, им присуща анизотропия, свойственная кристаллам. Наиболее исследованными среди них являются нематики, или нематические жидкие кристаллы (НЖК), и холестерики, или холестерические жидкие кристаллы (ХЖК). Чаще всего молекулы этих веществ имеют вытянутую (стержневидную, конусовидную, каплевидную) форму. Направление вдоль вытянутой оси молекулы можно обозначить единичным вектором **a**. Кроме того, существует ещё один класс веществ, у которых наблюдается нематическая или холестерическая упорядоченность. Это вещества, образованные дискообразными молекулами; в этом случае вектор **a** направлен также вдоль оси симметрии молекулы. Усреднение векторов **a** по физически бесконечно малому объёму после нормировки даёт единичный вектор **n**, называемый директором. Директор **n** является важной переменной, позволяющей описывать искажения структуры жидкого кристалла в рамках механики сплошной среды. Подчеркнём, что в среде выделенной является ось, а не направление, поэтому направления **n** и  $-\mathbf{n}$  физически эквивалентны. При температурах выше некоторой критической ЖК находятся в изотропной фазе, в которой нет выделенного направления, а при температуре ниже критической – в упорядоченной фазе, в которой директор показывает направление преимущественной ориентации молекул в окрестности данной точки. Главное отличие НЖК от ХЖК в том, что при температуре ниже критической и в отсутствие внешних воздействий молекулы НЖК выстраиваются вдоль некоторой оси, в то время как молекулы ХЖК образуют так называемую планарную геликоидальную структуру – периодическую спиральную структуру вдоль некоторого направления в пространстве. При этом директор **n** равномерно поворачивается при перемещении вдоль этого направления, оставаясь ему перпендикулярным.

Важной особенностью ЖК является способность к переориентации во внешнем поле, как в магнитном, так и в электрическом. Это явление, открытое в 1927 году, называется эффектом Фредерикса [1; 2]. Именно это свойство позволяет использовать ЖК для создания различных электрооптических устройств: систем вывода информации (дисплеев), переключаемых дифракционных решё-

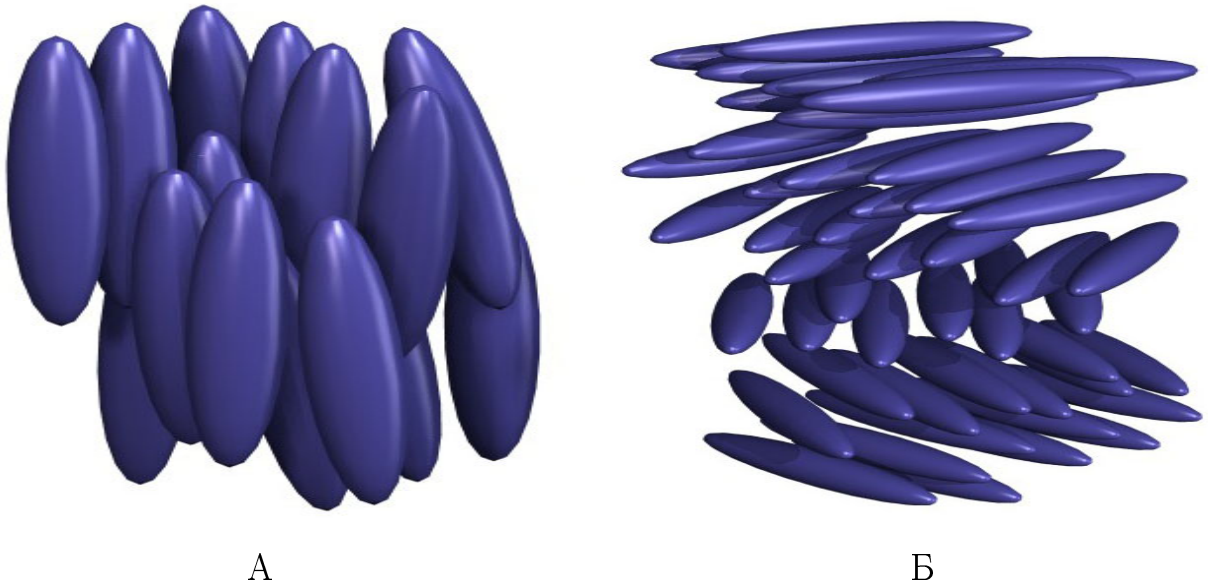


Рисунок 1 — Схематическое изображение НЖК (А) и ХЖК (Б)

ток, очков и окон с изменяемой светопропускной способностью, беззеркальных лазеров и т.д. [3—9].

Несмотря на то, что эффект Фредерикса изучался в течение долгого времени и для ряда случаев описан как теоретически, так и экспериментально для различных фаз: нематической, холестерической и т.д. [10—12], в последнее десятилетие интерес к его изучению возрос [13—18]. Большинство исследований идут в сторону усложнения систем и условий, в которых они находятся: рассматриваются различные типы ЖК, геометрии ячеек и граничные условия. Это в первую очередь связано с возможностью создания систем, обладающих заданными свойствами для потенциальных технических приложений. При этом наибольший интерес представляют напряжения, индуцирующие переход, а также трансформация равновесной структуры при напряжении выше порогового, так как именно от пространственного распределения директора зависят оптические свойства ячейки. Важно отметить, что теоретические описания перехода Фредерикса значительно отличаются для магнитного и электрического полей, так как электрическое поле оказывается неоднородным внутри ячейки ЖК [19—23]. Ранее переход Фредерикса в нематиках рассматривался как фазовый переход второго рода [24], то есть непрерывный фазовый переход. Однако оказалось, что в киральных нематиках (холестериках) этот переход может быть как непрерывным, так и разрывным, в зависимости от значений материальных констант [25].

Ещё одно важное свойство ЖК заключается в появлении дополнительной поляризации в результате искажения поля директора. Такую поляризацию называют *флексоелектрической*. Флексоелектрический эффект бывает как прямым, так и обратным. Так, прямой эффект представляет собой появление добавочной поляризации при искажении структуры образца. Обратному же флексоелектрическому эффекту соответствует появление искажений в структуре образца под действием электрического поля. (Это надо пояснить, так как без флексоелектричества, только за счёт диэлектрической поляризации структура в поле меняется, и получаем переход Фредерикса. А вообще, надо ли говорить об обратном эффекте?) Первым теоретически описал это явление Майер в 1969 году [26]. Он дал объяснение *дипольному* механизму появления флексоелектрической поляризации для молекул клино- или банановидной формы, обладающих собственным дипольным моментом (см. Рис. 2).

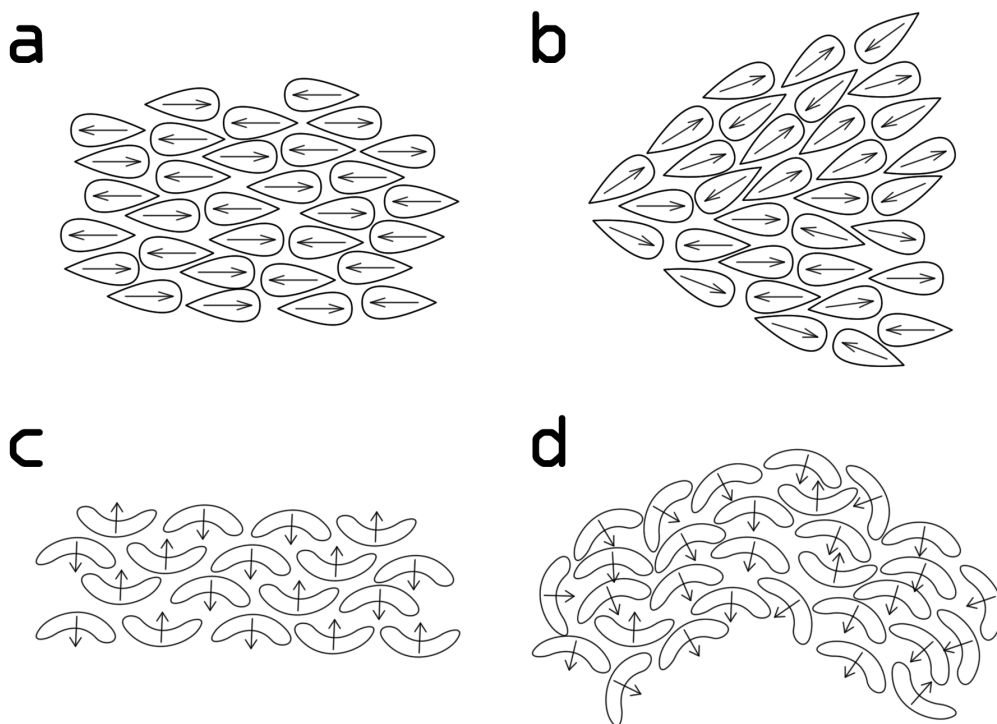


Рисунок 2 — Появление флексоелектрической поляризации у молекул специальной формы. Неискажённые состояния для молекул соответственно клиновидной (a) и банановидной (c) формы. Поперечный изгиб, флексоелектрическая поляризация направлена вправо (b). Продольный изгиб, флексоелектрическая поляризация направлена вниз (d).

Однако, как показал Прост в 1977 году, этот механизм не является единственным [27]. Он объяснил второй известный ныне механизм флексоелек-

тричества – квадрупольный. На рис. 3а изображена неискажённая структура из молекул, не обладающих собственным дипольным моментом, но обладающих квадрупольным моментом, причём поляризация в каждом слое равна нулю. На рис. 3б изображена группа таких же молекул, которые подвержены деформации поперечного изгиба. Видно, что в верхней части области 2 положительный заряд увеличен за счёт квадруполя из области 1. В то же время, положительный заряд внизу области 2 уменьшился за счёт того, что квадруполи частично перешли в область 3. Таким образом, данная структура начинает обладать собственным дипольным моментом, направленным вверх, и к ней можно применить всё то, что было сказано про полярные молекулы.

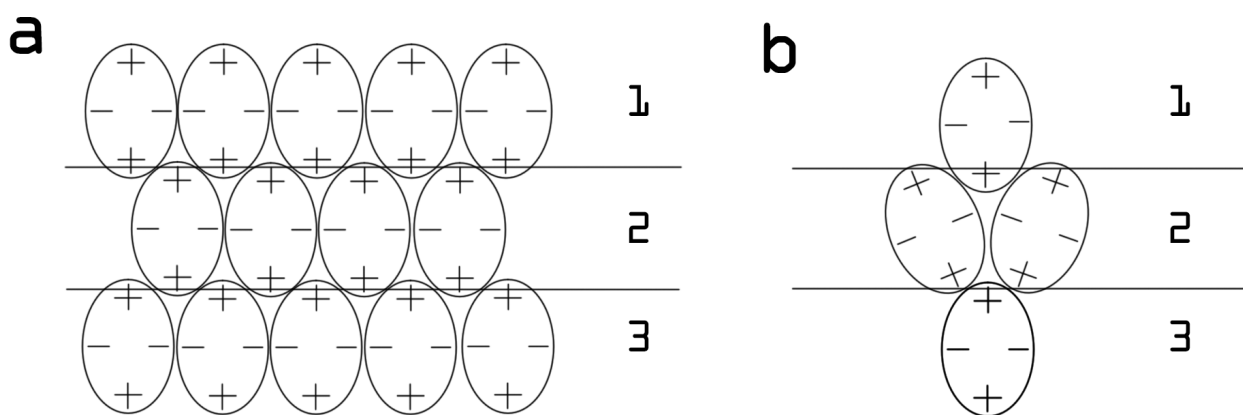


Рисунок 3 — Симметричные молекулы – поперечный изгиб

(До слов о данной работе надо поместить обзор того что делалось при изучении Фред. С учётом и без учёта флекса, неоднородности поля, сцепления с границами, разных геометрий ячеек, наличия ионных примесей, временных характеристик, и всего, что изучают в нематиках и ХЖК. После этого прояснится место этой работы)

Данная работа посвящена изучению влияния внешнего электрического поля на ориентационную структуру ХЖК с учётом флексоэлектрического эффекта. В отсутствие внешних воздействий равновесная структура ХЖК представляет собой планарную геликоидальную структуру: в любой плоскости, перпендикулярной некоторой оси, директор распределён равномерно, а вдоль этой оси распределение имеет вид пространственной спирали, в котором директор равномерно вращается вокруг оси. ЭТО ПОВТОР. Надо из обеих частей взять лучшее, а остальное убрать. РИСУНКИ. Если ХЖК находится в контакте

с ориентирующей поверхностью, то направление оси, определяющей пространственное вращение директора, может быть зафиксировано. В данной работе изучается ячейка, представляющая собой две проводящие плоскопараллельные пластины, пространство между которыми заполнено ХЖК, и ось спирали перпендикулярна ограничивающим плоскостям. Особенность данной работы в том, что производится учёт вклада *флексоэлектрической поляризации* в свободную энергию ХЖК. (Здесь это выглядит как-то неуместно)

АО: не знаю, куда поставить, пусть пока тут побудет. При поиске равновесной структуры ХЖК мы используем прямой метод вариационного исчисления

план исслед задач – потенциал + э-л второй род – точки бифуркаций. Но бифуркации не ловят  $U_c$ , так как оно на этом языке не является особой. А вот если мы не решаем диффуру, то действуем прямыми методами вар исчисления

Поместить до или после физики

В нашем случае без использования потенциала не обойтись, по сути, это фундаментальная причина

помогает одно из её общих свойств – она должна минимизировать соответствующий термодинамический потенциал. Так как объём, температура, а также количество частиц в рассматриваемой системе постоянно, в качестве термодинамического потенциала выбирается свободная энергия.

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

**Объем и структура работы.** Диссертация состоит из введения, трёх глав, заключения и двух приложений. Полный объём диссертации составляет

63 страницы, включая 26 рисунков и 0 таблиц. Список литературы содержит 40 наименований.



## Глава 1. Свободная энергия искажения ориентационной структуры

В данной работе изучается изменение ориентационной структуры ХЖК, находящегося между двумя плоскопараллельными пластинами, расположенными на расстоянии  $L$  друг от друга. Ограничивающие пластины считаются проводящими, и к ним подведено постоянное напряжение  $U$ , таким образом, система имеет вид плоского конденсатора. При изменении напряжения  $U$  может меняться ориентация директора в ячейке. Изучению таких трансформаций структуры будет уделено основное внимание.

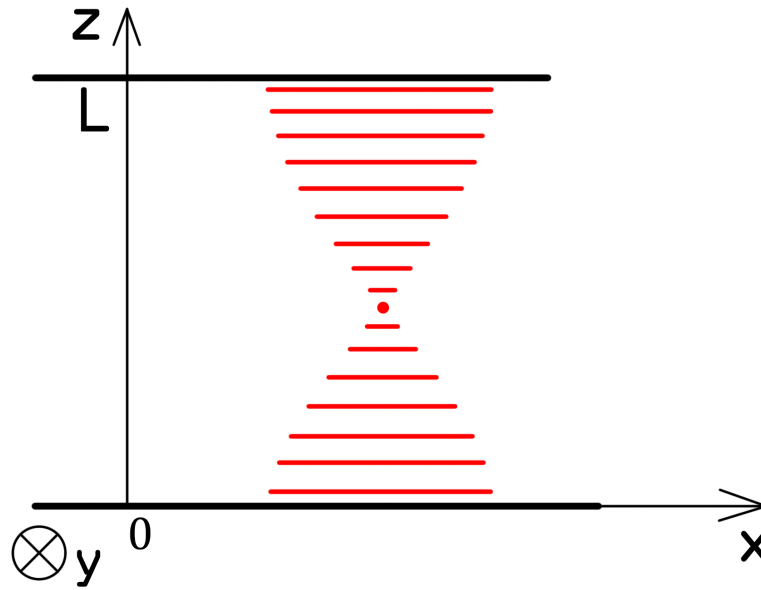


Рисунок 1.1 — Декартова система координат для ячейки ХЖК с планарной геликоидальной структурой.

Введём декартову систему координат с осью  $z$ , направленной перпендикулярно пластинам (Рис. 1.1). Предположим, что размер ограничивающих пластин значительно превосходит расстояния  $L$  между ними, таким образом, можно пренебречь краевыми эффектами. Также предположим, что все физические характеристики рассматриваемой системы однородны в плоскости  $XY$  и зависят только от координаты  $z$ :  $\mathbf{n}(\mathbf{r}) = \mathbf{n}(z)$ ,  $\mathbf{E} = \mathbf{E}(z)$ , где  $\mathbf{E}$  - напряжённость электрического поля.

Свободная энергия ХЖК, связанная с искажением ориентационной структуры директора, может быть представлена в виде суммы четырёх слагаемых (1.1)

$$\mathcal{F}_{\text{tot}} = \mathcal{F}_e + \mathcal{F}_{\text{sf}} + \mathcal{F}_f + \mathcal{F}_{\text{flex}}. \quad (1.1)$$

Здесь  $\mathcal{F}_e$  – вклад в свободную энергию, связанный с ориентационной упругостью в объёме,  $\mathcal{F}_{sf}$  – упругая энергия сцепления молекул ЖК с ограничивающими поверхностями,  $\mathcal{F}_f$  – энергия ЖК как диэлектрика во внешнем электрическом поле,  $\mathcal{F}_{flex}$  – вклад в свободную энергию, обусловленный взаимодействием флексоэлектрической поляризации с внешним электрическим полем. Эти слагаемые можно естественным образом разделить на две группы: обусловленные ориентационной упругостью (первые два слагаемых в (1.1)) и возникающие из-за взаимодействия ЖК с внешним полем (третье и четвёртое слагаемые в (1.1)).

### 1.1 Свободная энергия упругих искажений ориентационной структуры

Первое слагаемое в (1.1), свободная энергия упругих ориентационных искажений  $\mathcal{F}_e$ , было впервые описано в работах Озена [28] и Цохер [29] и более подробно изучено Франком [30]. Этот вклад может быть записан как [11]

$$\mathcal{F}_e = \frac{S_{\perp}}{2} \int_{l_1}^{l_2} [K_{11}(\text{div } \mathbf{n})^2 + K_{22}(\mathbf{n} \text{ rot } \mathbf{n} + q_0)^2 + K_{33}(\mathbf{n} \times \text{rot } \mathbf{n})^2] dz. \quad (1.2)$$

Здесь  $S_{\perp}$  – площадь ограничивающих пластин,  $K_{ii}$  – модули Франка,  $\pi/q_0$  – период геликоидальной спирали ХЖК. Физический смысл констант  $K_{ii}$  удобно пояснить на примере свободной энергии Франка для нематического ЖК, которая получается из (1.2) при  $q_0 = 0$ . Тогда каждое из трёх слагаемых подынтегрального выражения соответствует искажениям определённого типа. При деформации поперечного изгиба (Рисунок 1.2а) в правой части (1.2) остаётся только слагаемое с  $K_{11}$ . При деформации кручения (Рисунок 1.2б) в правой части (1.2) остаётся только слагаемое с  $K_{22}$ . Наконец, при деформации продольного изгиба (Рисунок 1.2с) остаётся только слагаемое с  $K_{33}$ . Таким образом,  $K_{11}$ ,  $K_{22}$  и  $K_{33}$  являются модулями поперечного изгиба, кручения и продольного изгиба соответственно. Будет ли здесь что-то про  $K_{13}$  и  $K_{24}$ ? Неизвестно!

Для дальнейшего анализа свободной энергии удобно представить декартовы координаты директора  $\mathbf{n}(z)$  как функции полярного угла  $\theta(z)$  и

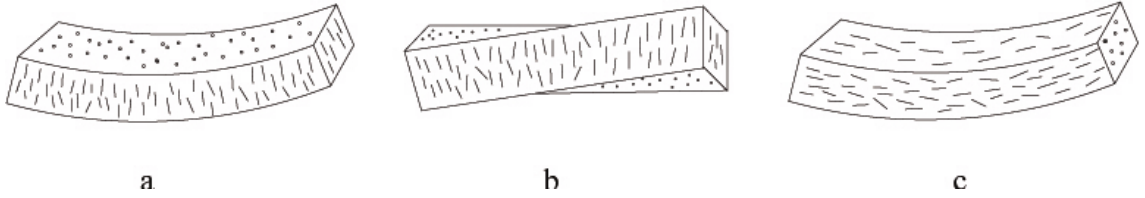


Рисунок 1.2 — Различные типы деформаций поля директора в ЖК: а – поперечный изгиб, б – кручение, с – продольный изгиб.

азимутального угла  $\varphi(z)$  (Рисунок 1.3):

$$\mathbf{n} = \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \varphi \\ \sin \theta \sin \varphi \\ \cos \theta \end{pmatrix}. \quad (1.3)$$

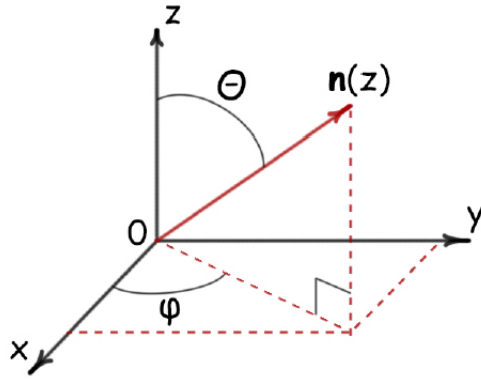


Рисунок 1.3 — Полярный  $\theta(z)$  и азимутальный  $\varphi(z)$  углы директора  $\mathbf{n}(z)$ .

Для  $\operatorname{div} \mathbf{n}$  и  $\operatorname{rot} \mathbf{n}$  имеем:

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \mathbf{n} &= -\theta' \sin \theta, \\ \operatorname{rot} \mathbf{n} &= \begin{pmatrix} -\theta' \cos \theta \sin \varphi - \varphi' \sin \theta \cos \varphi \\ \theta' \cos \theta \cos \varphi - \varphi' \sin \theta \sin \varphi \\ 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (1.4)$$

Здесь штрихом обозначена производная по  $z$ . Подставляя (1.4) в (1.2), получаем

$$\mathcal{F}_e = \mathcal{F}_e^{(0)} + \frac{S_\perp}{2} \int_0^L [\mathcal{A}(\theta)(\theta')^2 + \mathcal{B}(\theta)(\varphi')^2 - \mathcal{C}(\theta)\varphi'] dz. \quad (1.5)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{A}(\theta) &= K_{11} \sin^2 \theta + K_{33} \cos^2 \theta, \\ \mathcal{B}(\theta) &= \sin^2 \theta (K_{22} \sin^2 \theta + K_{33} \cos^2 \theta), \\ \mathcal{C}(\theta) &= q_0 K_{22} \sin^2 \theta. \end{aligned} \quad (1.6)$$

где  $\mathcal{F}_e^{(0)} = VK_{22}q_0^2/2$ , а  $V = S_\perp L$  – это объём ячейки.

Второе слагаемое в выражении (1.1) – энергия сцепления ХЖК с подложкой:

$$\mathcal{F}_{\text{sf}} = \frac{S_\perp}{2} \sum_{\alpha=1,2} w_\alpha \left( \mathbf{n}(l_\alpha), \mathbf{n}_0^{(\alpha)} \right), \quad l_1 = 0, \quad l_2 = L. \quad (1.7)$$

Здесь индекс  $\alpha = 1, 2$  нумерует границы, скалярные функции  $w_\alpha$  зависят от направлений директора на границах ячейки  $\mathbf{n}(l_\alpha)$ , а также от направления осей лёгкого ориентирования  $\mathbf{n}_0^{(\alpha)}$ . Важное свойство функций  $w_\alpha$  в (1.7) – обращение соответствующей функции в ноль, если  $\mathbf{n}(l_\alpha) = \mathbf{n}_0^{(\alpha)}$ . Конкретный вид  $w_\alpha$  выбирается в соответствии с решаемой задачей. Так, в случае малых отклонений  $\mathbf{n}(l_\alpha)$  от  $\mathbf{n}_0^{(\alpha)}$  возможно использование квадратичной аппроксимации по разности этих векторов:

$$w_\alpha(\mathbf{n}(l_\alpha), \mathbf{n}_0^{(\alpha)}) = w_\alpha(\mathbf{n}(l_\alpha) - \mathbf{n}_0^{(\alpha)}) = (\mathbf{n}(l_\alpha) - \mathbf{n}_0^{(\alpha)}) \hat{W}_\alpha (\mathbf{n}(l_\alpha) - \mathbf{n}_0^{(\alpha)}) \quad (1.8)$$

Здесь  $\hat{W}_\alpha$  – положительно определённые матрицы размера  $3 \times 3$ . Потенциал (1.8) является квадратичным по отклонениям директора на границах. Также применяется потенциал, квадратичный по отклонениям углов и использованный, например, в [25]:

$$w_\alpha(\theta_\alpha, \varphi_\alpha, \theta_0^{(\alpha)}, \varphi_0^{(\alpha)}) = W_\theta^{(\alpha)} \left( \theta_\alpha - \theta_0^{(\alpha)} \right)^2 + W_\varphi^{(\alpha)} \left( \varphi_\alpha - \varphi_0^{(\alpha)} \right)^2. \quad (1.9)$$

Здесь  $W_{\theta, \varphi}^{(\alpha)} > 0$  – константы сцепления с подложкой,  $\theta_0^{(\alpha)}$  и  $\varphi_0^{(\alpha)}$  – углы лёгкого ориентирования на границах, также введены обозначения:  $\theta_1 = \theta(0)$ ,  $\varphi_1 = \varphi(0)$ ,  $\theta_2 = \theta(L)$ ,  $\varphi_2 = \varphi(L)$ . Часто используется потенциал, который был предложен Рапини и Папуларом в 1969 году [31]:

$$w_\alpha(\theta_\alpha, \varphi_\alpha, \theta_0^{(\alpha)}, \varphi_0^{(\alpha)}) = W_\theta^{(\alpha)} \sin^2 \left( \theta_\alpha - \theta_0^{(\alpha)} \right) + W_\varphi^{(\alpha)} \sin^2 \left( \varphi_\alpha - \varphi_0^{(\alpha)} \right) \quad (1.10)$$

Заметим, что в низшем (квадратичном) приближении потенциалы (1.9) и (1.10) совпадают. Для описания сцепления с подложкой в задачах, связанных с деформацией шага спирали ХЖК, удобен В-потенциал, предложенный в работах [32; 33]:

$$w_\alpha(\varphi_\alpha, \varphi_0^{(\alpha)}) = -W_\varphi^{(\alpha)} \left( \cos^2 \frac{\varphi_\alpha - \varphi_0^{(\alpha)}}{2} - \frac{1}{2} \right) \quad (1.11)$$

Также отметим, что если энергия сцепления с подложкой много больше остальных вкладов, то константы  $W_\theta^{(\alpha)}$  и  $W_\varphi^{(\alpha)}$  устремляются к бесконечности, и

положение директора на границах фиксируется. В таком случае говорят о жёстких граничных условиях.

В данной работе используется потенциал Рапини-Папулара (1.10):

$$\mathcal{F}_{\text{sf}} = \frac{S_{\perp}}{2} \sum_{\alpha=1,2} W_{\theta}^{(\alpha)} \sin^2 \left( \theta_{\alpha} - \theta_0^{(\alpha)} \right) + W_{\varphi}^{(\alpha)} \sin^2 \left( \varphi_{\alpha} - \varphi_0^{(\alpha)} \right) \quad (1.12)$$

## 1.2 Энергия взаимодействия с полем

Третье слагаемое в выражении (1.1) – энергия электрического поля в диэлектрике:

$$\mathcal{F}_{\text{f}} = -\frac{S_{\perp}}{2} \int_0^L \frac{(\hat{\mathbf{e}} \mathbf{E}, \mathbf{E})}{4\pi} dz. \quad (1.13)$$

Тензор диэлектрической проницаемости в одноосном ЖК имеет следующий вид (1.2):

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

где  $\varepsilon_{\parallel}$  и  $\varepsilon_{\perp}$  – диэлектрические проницаемости вдоль и поперёк директора. Здесь индексы  $i$  и  $j$  принимают значения 1, 2, 3, что соответствует пространственным координатам  $x$ ,  $y$ ,  $z$ .

Наконец, последний вклад в (1.1) возникает благодаря флексоэлектрической поляризации. Наиболее общее выражение  $i$ -ой компоненты вектора флексоэлектрической поляризации  $\mathbf{P}^{\text{flex}}$  можно, с учётом малости искажений ориентационной структуры, записать следующим образом:

$$P_i^{\text{flex}} = f_{ijk} \partial_k n_j, \quad (1.14)$$

здесь подразумевается суммирование по повторяющимся значкам. Тензор  $f_{ijk}$ , называемый флексоэлектрическим, должен состоять из компонент директора  $\mathbf{n}$  и символов Кронекера. Так как  $\mathbf{n}$  и  $-\mathbf{n}$  эквивалентны, свободная энергия должна быть инвариантна относительно этой замены. Значит, тензор  $f_{ijk}$  может содержать в себе только нечётные степени компонент директора. Таким образом, наиболее общее выражение для  $f_{ijk}$ :

$$f_{ijk} = e_1 n_i \delta_{jk} + e_2 n_j \delta_{ik} + e_3 n_k \delta_{ij} + e_4 n_i n_j n_k, \quad (1.15)$$

где  $e_1, e_2, e_3, e_4$  – флексоэлектрические коэффициенты. Подставляя (1.15) в (1.14), получаем следующие четыре слагаемых:

$$\begin{aligned} e_1 n_i \delta_{jk} \partial_k n_j &= e_1 n_i \partial_j n_j = e_1 n_i \operatorname{div} \mathbf{n}, \\ e_2 n_j \delta_{ik} \partial_k n_j &= e_2 n_j \partial_i n_j = 0, \\ e_3 n_k \delta_{ij} \partial_k n_j &= e_3 (\mathbf{n}, \nabla) n_i = e_3 [\operatorname{rot} \mathbf{n} \times \mathbf{n}]_i, \\ e_4 n_i n_j n_k \partial_k n_j &= 0. \end{aligned}$$

Здесь учтено, что  $n_i \partial_j n_i = 0$ , так как  $\mathbf{n}^2 = 1$ . Вектор флексоэлектрической поляризации записывается в виде

$$\mathbf{P}^{\text{flex}} = e_1 \mathbf{n} \operatorname{div} \mathbf{n} + e_3 [\operatorname{rot} \mathbf{n} \times \mathbf{n}]. \quad (1.16)$$

Таким образом, вклад флексоэлектрической поляризации в свободную энергию можно записать как

$$\mathcal{F}_{\text{flex}} = -S_{\perp} \int_0^L (\mathbf{P}^{\text{flex}}, \mathbf{E}) dz. \quad (1.17)$$

Вводя в вектор электрической индукции помимо диэлектрической поляризации  $\mathbf{P}$  ещё и флексоэлектрическую  $\mathbf{P}^{\text{flex}}$ , имеем

$$\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P} + 4\pi\mathbf{P}^{\text{flex}} = \hat{\varepsilon}\mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P}^{\text{flex}} \quad (1.18)$$

Для вектора электрической индукции в одноосной среде можно написать:

$$\mathbf{D} = \varepsilon_{\perp} \mathbf{E} + \varepsilon_a (\mathbf{E}, \mathbf{n}) \mathbf{n} + 4\pi\mathbf{P}^{\text{flex}}, \quad \varepsilon_a = \varepsilon_{\parallel} - \varepsilon_{\perp}, \quad (1.19)$$

где  $\varepsilon_a$  – величина анизотропии диэлектрической проницаемости, а  $\mathbf{P}^{\text{flex}}$  – флексоэлектрическая поляризация [11], возникающая благодаря искажениям поля директора ХЖК.

Таким образом, выражение для энергии взаимодействия ХЖК с внешним электрическим полем имеет вид:

$$\mathcal{F}_{\mathbf{E}} = \mathcal{F}_{\mathbf{f}} + \mathcal{F}_{\text{flex}} = -\frac{S_{\perp}}{8\pi} \int_0^L (\mathbf{E}, \hat{\varepsilon}\mathbf{E}) dz - S_{\perp} \int_0^L (\mathbf{P}^{\text{flex}}, \mathbf{E}) dz$$

Как следует из уравнения Максвелла  $\operatorname{rot} \mathbf{E} = 0$  и граничных условий  $E_{x,y}(0) = E_{x,y}(L) = 0$ , единственная ненулевая компонента вектора  $\mathbf{E}$  – это  $E_z = E(z)$ .

Таким образом,  $\mathbf{P}^{\text{flex}} \mathbf{E} = P_z^{\text{flex}} E_z$ . Учитывая, что  $P_z^{\text{flex}} = (e_1 + e_3)n_z \partial_z n_z$  и подставляя (1.3), можно записать для вклада в свободную энергию

$$\mathcal{F}_E = -\frac{S_{\perp}}{8\pi} \int_0^L E^2(z) \mathcal{E}(\theta) dz + S_{\perp} \bar{e} \int_0^L \sin 2\theta \theta' E(z) dz, \quad (1.20)$$

где введены обозначения

$$\mathcal{E}(\theta) = \varepsilon_{\perp} + \varepsilon_a \cos^2 \theta, \quad \bar{e} = (e_1 + e_3)/2. \quad (1.21)$$

Из другого уравнения Максвелла,  $\text{div} \mathbf{D}(z) = 0$ , следует, что  $z$ -компонента вектора электрической индукции  $D_z$  не зависит от  $z$ . Совмещая это с выражениями (1.3) и (1.19), получаем

$$D_z = \mathcal{E}(\theta) E(z) - 4\pi \bar{e} \sin 2\theta \theta', \quad (1.22)$$

откуда можно выразить

$$E(z) = (D_z + 4\pi \bar{e} \sin 2\theta \theta') / \mathcal{E}(\theta). \quad (1.23)$$

Напряжение на обкладках  $U$  и  $z$ -компонента вектора электрической индукции  $D_z$  связаны следующим образом:

$$U = \int_0^L E(z) dz = D_z J^{-1} + 4\pi \bar{e} J_1, \quad (1.24)$$

где введены следующие обозначения:

$$J^{-1} = \int_0^L \frac{dz}{\mathcal{E}(\theta)}, \quad J_1 = \varepsilon_a^{-1} \ln \frac{\mathcal{E}(\theta(0))}{\mathcal{E}(\theta(L))}. \quad (1.25)$$

Отметим, что  $J_1$  зависит только от значений  $\theta(z)$  на границах,  $\theta(0)$  и  $\theta(L)$ . Таким образом, для  $D_z$  имеем:

$$D_z = (U - 4\pi \bar{e} J_1) J, \quad (1.26)$$

а выражение для электрического поля имеет вид

$$E(z) = (U J + 4\pi \bar{e} (\sin 2\theta \theta' - J_1 J)) / \mathcal{E}(\theta). \quad (1.27)$$

Из выражения (1.27) следует, что в ориентационно неоднородной среде с флексоэлектрическими свойствами может возникать ненулевое электрическое поле

даже если  $U = 0$ . Подставляя Eq. (1.27) в Eq. (1.20), получаем итоговое выражение для энергии электрического поля в ячейке ХЖК:

$$\mathcal{F}_E = -\frac{S_\perp}{8\pi}U^2J + S_\perp\bar{e}UJJ_1 + 2\pi S_\perp\bar{e}^2 \left( \int_0^L \frac{(\sin 2\theta \theta')^2}{\mathcal{E}(\theta)} dz - JJ_1^2 \right). \quad (1.28)$$

Важно отметить, что в формуле (1.28) учтена неоднородность электрического поля, возникающая из-за наличия флексоэлектричества. Кроме того, видно, что помимо первых двух слагаемых, зависящих от напряжения  $U$ , в (1.28) присутствуют ещё два слагаемых, зависящих только от ориентационной структуры. Для случая  $\bar{e} = 0$  выражение для энергии записывается так же, как, например, в работах [19; 20; 25]:

$$\mathcal{F}_E = -S_\perp U^2 J / 8\pi. \quad (1.29)$$

В случае, когда  $(\varepsilon_a/\varepsilon_\perp) \cos^2 \theta \ll 1$  формула (1.29) сводится к более простому виду [11]

$$\mathcal{F}_E = \mathcal{F}_E^{(0)} - \frac{S_\perp \varepsilon_a U^2}{8\pi L^2} \int_0^L \cos^2 \theta dz, \quad \mathcal{F}_E^{(0)} = -\frac{S_\perp U^2 \varepsilon_\perp}{8\pi L}, \quad (1.30)$$

при этом учитывается неоднородность поля директора  $\mathbf{n}(z)$ , а электрическое поле в ячейке считается однородным.

Заметим, что энергия  $\mathcal{F}_E$  зависит от знака напряжения  $U$  из-за одного из флексоэлектрических членов,  $S_\perp \bar{e} U J J_1$ . В случае жёстких симметричных граничных условий,  $\theta(0) = \theta(L)$ , этот вклад исчезает благодаря тому, что  $J_1 = 0$ . Отметим, что случай  $\bar{e} < 0$  сводится к  $\bar{e} > 0$  при помощи замены  $(\bar{e}, U) \rightarrow (-\bar{e}, -U)$ . Таким образом, можно ограничиться рассмотрением только случая  $\bar{e} > 0$ .

Подставляя (1.5), (1.12) и (1.28) в (1.1), получаем выражение для свободной энергии ячейки ХЖК во внешнем электрическом поле

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{\text{tot}} = & \mathcal{F}_e^{(0)} + \frac{S_\perp}{2} \int_0^L \left[ \mathcal{A}(\theta)(\theta')^2 + B(\theta)(\varphi')^2 - 2C(\theta)\varphi' \right] dz + \\ & + \frac{S_\perp}{2} \sum_{\alpha=1,2} \left[ W_\theta^{(\alpha)} \sin^2 (\theta - \theta_0^{(\alpha)}) + W_\varphi^{(\alpha)} \sin^2 (\varphi - \varphi_0^{(\alpha)}) \right] - \\ & - S_\perp \mathcal{U}^2 J / 8\pi, \end{aligned} \quad (1.31)$$

где

$$\mathcal{A}(\theta) = A(\theta) + 4\pi\bar{e}^2 \sin^2 2\theta / \mathcal{E}(\theta), \quad \mathcal{U} = U - 4\pi\bar{e}J_1, \quad (1.32)$$



### 1.3 Система уравнений Эйлера-Лагранжа и упрощение функционала свободной энергии

Первая вариация свободной энергии (1.31) может быть записана следующим образом:

$$\begin{aligned} \delta \mathcal{F}_{\text{tot}} = S_{\perp} \left\{ \int_0^L \left[ \frac{1}{2} \frac{d\mathcal{A}}{d\theta} \theta'^2 \delta\theta + \mathcal{A} \theta' \delta\theta' + \frac{1}{2} \frac{dB}{d\theta} \varphi'^2 \delta\theta + \right. \right. \\ \left. \left. + B \varphi' \delta\varphi' - \frac{dC}{d\theta} \varphi' \delta\theta - C \delta\varphi' \right] dz + \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1,2} \left( W_{\theta}^{(\alpha)} \sin 2(\theta_{\alpha} - \theta_0^{(\alpha)}) \delta\theta_{\alpha} + W_{\varphi}^{(\alpha)} \sin 2(\varphi_{\alpha} - \varphi_0^{(\alpha)}) \delta\varphi_{\alpha} \right) + \right. \\ \left. + \frac{\varepsilon_a}{8\pi} \mathcal{U}^2 J^2 \int_0^L \frac{\sin 2\theta}{\mathcal{E}^2(\theta)} \delta\theta dz + \bar{e} \mathcal{U} J \frac{\sin 2\theta}{\mathcal{E}(\theta)} \delta\theta \Big|_0^L \right\}. \quad (1.33) \end{aligned}$$

Проинтегрировав по частям вклады в  $\delta \mathcal{F}_{\text{tot}}$ , содержащие вариации производных и приравнявая к нулю  $\delta \mathcal{F}_{\text{tot}}$  для произвольных вариаций  $\delta\theta$  и  $\delta\varphi$  в объёме и на границах, получаем систему из двух уравнений Эйлера-Лагранжа

$$\frac{d\mathcal{A}}{d\theta} \theta'^2 + 2\mathcal{A} \theta'' = \frac{dB}{d\theta} \varphi'^2 - 2 \frac{dC}{d\theta} \varphi' + \frac{\varepsilon_a \mathcal{U}^2 J^2 \sin 2\theta}{4\pi \mathcal{E}^2(\theta)}, \quad (1.34)$$

$$d(B\varphi' - C)/dz = 0, \quad (1.35)$$

и двух граничных условий

$$\begin{aligned} \left( 2(-1)^{\alpha} [\mathcal{A}(\theta) \theta' + \bar{e} \mathcal{U} J \sin 2\theta / \mathcal{E}(\theta)] \right. \\ \left. + W_{\theta}^{(\alpha)} \sin 2(\theta - \theta_0^{(\alpha)}) \right) \Big|_{z=l_{\alpha}} = 0, \end{aligned} \quad (1.36)$$

$$\left( 2(-1)^{\alpha} (B\varphi' - C) + W_{\varphi}^{(\alpha)} \sin 2(\varphi - \varphi_0^{(\alpha)}) \right) \Big|_{z=l_{\alpha}} = 0, \quad (1.37)$$

где  $\alpha = 1, 2$ . Из уравнений (1.34) и (1.35) можно сделать вывод, что функция  $\theta(z) \in C^2[0, L]$ , а  $\varphi(z) \in C^1[0, L]$ . Заметим, что (1.34) – функциональное интегро-дифференциальное уравнение, так как  $J_1$  зависит от значений  $\theta(z)$  на границах, а  $J$  содержит интеграл (1.26). Кроме того, граничные условия (1.36) являются нелокальными. Данные свойства, как уравнения, так и граничных условий, возникли благодаря учёту флексоэлектрической поляризации.

Первый интеграл системы уравнений (1.34) и (1.35) выглядит следующим образом:

$$\mathcal{A}(\theta)\theta'^2 + B(\theta)\varphi'^2 - \mathcal{U}^2 J^2 / (4\pi\mathcal{E}(\theta)) = C_1, \quad (1.38)$$

$$B(\theta)\varphi' - C(\theta) = C_2, \quad (1.39)$$

где  $C_{1,2}$  – произвольные константы. Конкретные значения этих констант могут быть найдены из граничных условий (1.36) и (1.37).

Ввиду сложности возникающих уравнений Эйлера-Лагранжа удобно искать равновесную ориентационную структуру ХЖК, используя прямые методы минимизации свободной энергии. При этом уравнение (1.39) и граничные условия (1.37) позволяют упростить выражение для полной свободной энергии  $\mathcal{F}_{\text{tot}}$ , а уравнение (1.38) и граничные условия (1.36) дают возможность контролировать точность результатов численных расчётов. В решении задачи поиска равновесных профилей углов оказывается возможным записать  $\mathcal{F}_{\text{tot}}$  как функционал, зависящий только от  $\theta(z)$ . Для этого используем выражение для  $\varphi'$ , полученное из соответствующего уравнения Эйлера-Лагранжа. Таким образом, мы будем рассматривать  $\mathcal{F}_{\text{tot}}[\theta(z)]$ , содержащий равновесное распределение  $\varphi(z)$ , подстраивающееся под заданное распределение  $\theta(z)$ .

Рассмотрим выражение (1.5) для свободной энергии, связанной с объёмной ориентационной упругостью ХЖК. Подставив в него  $\varphi'$ , выраженное из (1.39), получим

$$\mathcal{F}_e = \mathcal{F}_e^{(0)} + \frac{S_{\perp}}{2} \int_0^L \left[ A(\theta)\theta'^2 + \frac{C_2^2 - C^2(\theta)}{B(\theta)} \right] dz. \quad (1.40)$$

В выражение (1.40) входит константа  $C_2$ . Для того, чтобы определить её, проинтегрируем  $\varphi'$  из (1.39) по отрезку  $[0, L]$ :

$$\varphi_{\text{tot}} = C_2 I_1 + I_2, \quad (1.41)$$

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

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

Подставляя (1.39) в (1.37), получаем

$$2 \left( \varphi(l_{\alpha}) - \varphi_0^{(\alpha)} \right) = (-1)^{\alpha+1} \arcsin \left( 2C_2 / W_{\varphi}^{(\alpha)} \right), \quad (1.42)$$

$\alpha = 1, 2$ , следовательно,

$$2(\varphi_{\text{tot}}^{(0)} - \varphi_{\text{tot}}) = \arcsin(2C_2/W_\varphi^{(1)}) + \arcsin(2C_2/W_\varphi^{(2)}), \quad (1.43)$$

где  $\varphi_{\text{tot}}^{(0)} = \varphi_0^{(2)} - \varphi_0^{(1)}$ . Здесь предполагается, что  $|\varphi(l_\alpha) - \varphi_0^{(\alpha)}| \leq \pi/4$ . Это ограничение соответствует отсутствию скачкообразных изменений шага спирали ХЖК [34].

Из (1.41) и (1.43) можно выразить константу  $C_2$ ,

$$C_2 = (\varphi_{\text{tot}}^{(0)} - I_2) / (I_1 + k_1/W_\varphi^{(1)} + k_2/W_\varphi^{(2)}), \quad (1.44)$$

где  $k_\alpha = (W_\varphi^{(\alpha)}/2C_2) \arcsin(2C_2/W_\varphi^{(\alpha)})$ ,  $1 \leq k_\alpha \leq \pi/2$ . Неравенства  $|C_2|/W_\varphi^{(\alpha)} \leq 0.5$  должны выполняться, чтобы существовало решение трансцендентного уравнения (1.44). Для случая  $|C_2|/W_\varphi^{(\alpha)} \ll 1$  можно записать точное выражение для  $C_2$ :

$$C_2 = (\varphi_{\text{tot}}^{(0)} - I_2) (I_1 + 2/W_\varphi^H)^{-1} \quad (1.45)$$

где  $W_\varphi^H = 2W_\varphi^{(1)}W_\varphi^{(2)}/(W_\varphi^{(1)} + W_\varphi^{(2)})$ .

Подставляя выражение (1.44) в (1.40) и используя (1.42), получаем следующее выражение для полной свободной энергии  $\mathcal{F}_{\text{tot}}$  как функционала, зависящего только от  $\theta(z)$ :

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{\text{tot}}(\theta) = \mathcal{F}_e^{(0)} + \frac{S_\perp}{2} \left[ \int_0^L \left( \mathcal{A}(\theta)\theta'^2 - \frac{C^2(\theta)}{B(\theta)} \right) dz + \right. \\ \left. + W_\theta^{(1)} \sin^2(\theta(0) - \theta_0^{(1)}) + W_\theta^{(2)} \sin^2(\theta(L) - \theta_0^{(2)}) + \right. \\ \left. + C_2^2 \left( I_1 + \kappa_1/W_\varphi^{(1)} + \kappa_2/W_\varphi^{(2)} \right) - \frac{\mathcal{U}^2 J}{4\pi} \right], \quad (1.46) \end{aligned}$$

где  $\kappa_\alpha = 2/(1 + \sqrt{1 - (2C_2/W_\varphi^{(\alpha)})^2})$ ,  $1 \leq \kappa_\alpha \leq 2$ . При  $|C_2|/W_\varphi^{(\alpha)} \ll 1$  предпоследнее слагаемое в (1.46) может быть приближённо записано как

$$\frac{S_\perp}{2} \left( \varphi_{\text{tot}}^{(0)} - I_2 \right)^2 (I_1 + 2/W_\varphi^H)^{-1}. \quad (1.47)$$

Погрешность такой аппроксимации составляет около 2% при  $|C_2|/W_\varphi^{(\alpha)} \leq 0.25$  и около 15% для всей области  $|C_2|/W_\varphi^{(\alpha)} \leq 1/2$ .

После нахождения равновесной функции  $\theta(z)$  можно найти соответствующую равновесную функцию  $\varphi(z)$ , совмещая выражения (1.39), (1.37) и (1.44):

$$\varphi(z) = \varphi_0^{(1)} + \frac{1}{2} \arcsin \frac{2C_2}{W_\varphi^{(1)}} + \int_0^z \frac{C(\theta) + C_2}{B(\theta)} dz. \quad (1.48)$$

## Глава 2. Переход Фредерикса в случае отрицательной анизотропии диэлектрической проницаемости.

Ячейки ЖК с отрицательной анизотропией диэлектрической проницаемости отличаются тем, что, находясь во внешнем электрическом поле, молекулы ЖК стремятся выстроиться не вдоль его силовых линий, а поперёк. Это связано со знаком  $\varepsilon_a$ : при  $\varepsilon_a < 0$  энергия электрического поля в диэлектрике, даваемая формулой (1.29), становится минимальной, когда  $\theta(z) = \pi/2$  на интервале  $z \in [0, L]$ . Для анализа равновесной ориентационной структуры в ячейке ХЖК с отрицательной анизотропией диэлектрической проницаемости ( $\varepsilon_a < 0$ ) вновь обратимся к методу численной минимизации функционала свободной энергии  $\mathcal{F}_{\text{tot}}$ . Процедура минимизации функционала свободной энергии  $\mathcal{F}_{\text{tot}}$  аналогична таковой, использованной в работе [39]. Равновесную ориентационную структуру в ячейке ХЖК будем искать с помощью численной минимизации свободной энергии (1.46), используя следующие значения углов лёгкого ориентирования на границах:

$$\theta_0^{(1)} = \theta_0^{(2)} = \pi/2, \varphi_{\text{tot}}^{(0)} = q_0 L. \quad (2.1)$$

Эти условия соответствуют ненапряжённому ХЖК в отсутствие внешнего электрического поля. Сведём задачу поиска минимума функционала  $\mathcal{F}_{\text{tot}}[\theta(z)]$  к задаче поиска минимума функции нескольких переменных, аппроксимировав искомую зависимость  $\theta(z)$  пробной функцией

$$\theta(z) = \pi/2 + \delta\psi(z, \delta_1, \delta_2) + \sum_{n=1}^N c_n \sin(\pi n z / L). \quad (2.2)$$

Здесь слагаемое  $\pi/2$  соответствует неискажённому состоянию. Функция  $\delta\psi(z, \delta_1, \delta_2)$ , задаваемая выражением (2.14), содержит  $\delta_1$  и  $\delta_2$  – отклонения от углов лёгкого ориентирования на границах:  $\theta(0) = \pi/2 + \delta_1$ ,  $\theta(L) = \pi/2 + \delta_2$ . Наконец, ряд Фурье описывает объёмные искажения ориентационной структуры, не затрагивающие границы. Используя граничные условия (1.36), можно выразить коэффициенты  $c_N$  и  $c_{N-1}$  через все остальные –  $\delta_{1,2}$  и  $\{c_n\}_{n=1}^{N-2}$ . Таким образом, углы  $\delta_1$ ,  $\delta_2$ , а также коэффициенты  $c_n$ ,  $n = 1, \dots, N-2$  являются регулируемыми параметрами.

Ограничимся в (2.2)  $N = 20$  членами ряда Фурье. Учёт более, чем 20 слагаемых приводит к относительному изменению профиля  $\theta$  менее чем на 0.5%

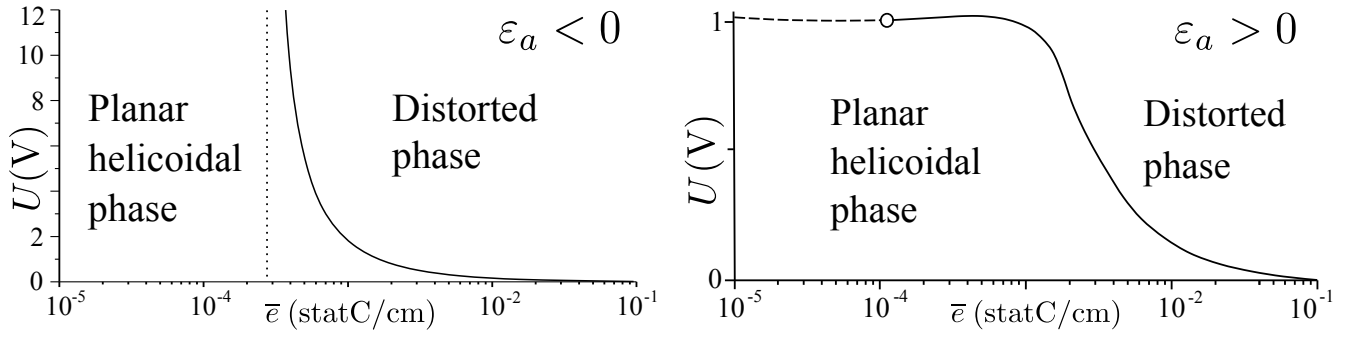


Рисунок 2.1 — Фазовые диаграммы для случаев  $\varepsilon_a < 0$  и  $\varepsilon_a > 0$ . Сплошной и пунктирной линией обозначена граница между различными "фазами" при разрывном и непрерывном переходе соответственно. Точечной линией обозначена асимптота межфазовой границы при  $\varepsilon_a < 0$ , а знаком "о" — трикритическая точка.

для любого  $z$  на всём интервале  $[0, L]$ . В многомерной численной минимизации существует проблема попадания в максимумы или в седловые точки. Для того, чтобы определить, действительно ли минимизация свободной энергии привела к минимуму, используем случайные небольшие сдвиги параметров  $\delta_{1,2}, \{c_n\}$  относительно полученных значений. Если минимизационный алгоритм приводит к другому ответу, это означает, что предыдущий результат был ошибочным — максимумом или седловой точкой. При этом в случае, если достигнут, по крайней мере, локальный минимум, то при любом достаточно небольшом сдвиге минимизация будет всегда возвращать нас обратно.

При помощи прямой минимизации свободной энергии были найдены равновесные ориентационные структуры в ячейке ХЖК при различных значениях усреднённого флексоэлектрического коэффициента  $\bar{\varepsilon}$  и приложенного напряжения  $U$ , а также следующих значениях материальных констант:  $K_{11} = 0.42 \times 10^{-6}$  дин,  $K_{22} = 0.23 \times 10^{-6}$  дин,  $K_{33} = 0.53 \times 10^{-6}$  дин,  $q_0 = 500$  см $^{-1}$ ,  $L = 60$  мкм,  $W_\theta^{(1)} = 2.5 \times 10^{-3}$  эрг/см $^2$ ,  $W_\theta^{(2)} = 0.5 \times 10^{-3}$  эрг/см $^2$ ,  $W_\phi^{(1)} = 2.5 \times 10^{-4}$  эрг/см $^2$ ,  $W_\phi^{(2)} = 1.0 \times 10^{-4}$  эрг/см $^2$ ,  $\varepsilon_\perp = 16.2$ ,  $\varepsilon_\parallel = 7.2$ . Заметим, что от стандартного набора параметров этот набор отличается только значениями диэлектрической проницаемости  $\varepsilon_\perp$  и  $\varepsilon_\parallel$ .

Полученные результаты для  $\varepsilon_a < 0$  для сравнения приводятся вместе с аналогичными результатами для  $\varepsilon_a > 0$ . На Рис. 2.1 на плоскости  $(\bar{\varepsilon}, U)$  приведены рассчитанные области устойчивости планарной геликоидальной ориентационной структуры. Данный результат можно получить и аналитически аналогично тому, как это было проделано, к примеру, в [39].

## 2.1 Аналитическое изучение устойчивости планарной геликоидальной структуры в случае отрицательной диэлектрической проницаемости.

Для определения устойчивости планарной геликоидальной структуры ( $\theta_0(z) = \pi/2$ ,  $\varphi_0(z) = q_0 z$ ,  $z \in [0, L]$ ) нужно изучить вторую вариацию свободной энергии на этой структуре,  $\delta^2 \mathcal{F}_{\text{tot}}(\theta_0, \varphi_0)$ . Вторая вариация свободной энергии в отсутствие флексоэлектрической поляризации уже была найдена в работе [25]:

$$\delta^2 \mathcal{F}_{\text{tot}}|_{\bar{e}=0} = \frac{S_{\perp}}{2} \left[ \int_0^L (K_{11}(\delta\theta')^2 + M\delta\theta^2 + K_{22}(\delta\varphi')^2) dz + \sum_{\alpha=1,2} W_{\theta}^{(\alpha)} \delta\theta^2(l_{\alpha}) + \sum_{\alpha=1,2} W_{\varphi}^{(\alpha)} \delta\varphi^2(l_{\alpha}) \right], \quad (2.3)$$

где

$$M = K_{33}q_0^2 - \varepsilon_a U^2 / (4\pi L^2). \quad (2.4)$$

Так как  $J_1|_{\theta=\theta_0} = 0$  и  $\delta J_1|_{\theta=\theta_0} = 0$ , то вклад во вторую вариацию свободной энергии, обусловленный флексоэлектрической поляризацией, даётся выражением

$$\delta^2 \mathcal{F}_{\text{flex}} = -S_{\perp} \bar{e}(U/L) \delta\theta^2 \Big|_0^L. \quad (2.5)$$

Следовательно, вторая вариация свободной энергии  $\delta^2 \mathcal{F}_{\text{tot}} = \delta^2 \mathcal{F}_{\text{tot}}|_{\bar{e}=0} + \delta^2 \mathcal{F}_{\text{flex}}$  оказывается суммой двух независимых вариаций по углам  $\theta$  и  $\varphi$ . При этом часть, зависящая от вариации  $\varphi$ , положительно определена, так как  $K_{22} > 0$  и  $W_{\varphi}^{(1,2)} > 0$ . Таким образом, устойчивость планарной геликоидальной структуры определяется только членами, зависящими от вариации  $\theta$ :

$$\delta^2 \mathcal{F}_{\theta} = \frac{S_{\perp}}{2} \int_0^L (K_{11}(\delta\theta')^2 + M(\delta\theta)^2) dz + \frac{S_{\perp}}{2} \sum_{\alpha=1,2} \mathcal{W}^{(\alpha)} \delta\theta^2(l_{\alpha}), \quad (2.6)$$

где

$$\mathcal{W}^{(\alpha)} = W_{\theta}^{(\alpha)} - 2(-1)^{\alpha} \bar{e} U / L. \quad (2.7)$$

Вклад флексоэлектрической поляризации во вторую вариацию свободной энергии  $\delta^2 \mathcal{F}_{\text{tot}}$  сводится к ренормированию модулей сцепления с поверхностью,

$W_{\theta}^{(\alpha)} \rightarrow \mathcal{W}^{(\alpha)}$ . Следует отметить, что один из эффективных модулей зацепления  $\mathcal{W}^{(\alpha)}$  с ростом приложенного напряжения  $U$  увеличивается и остаётся положительным, в то время как другой уменьшается и при достаточно больших значениях  $U$  становится отрицательным. Введём следующие обозначения:

$$\mathcal{W}^+ = \begin{cases} \mathcal{W}^{(1)}, & \text{if } U > 0, \\ \mathcal{W}^{(2)}, & \text{if } U < 0, \end{cases} \quad \mathcal{W}^- = \begin{cases} \mathcal{W}^{(2)}, & \text{if } U > 0, \\ \mathcal{W}^{(1)}, & \text{if } U < 0. \end{cases} \quad (2.8)$$

Как следует из выражения (2.6), планарная геликоидальная структура может стать неустойчивой только если  $\mathcal{W}^-$  отрицательно. Это приводит к требованию

$$U_{\text{flex}} < |U|, \quad (2.9)$$

где

$$U_{\text{flex}} = \frac{L}{2\bar{e}} \begin{cases} W_{\theta}^{(2)}, & \text{если } U > 0, \\ W_{\theta}^{(1)}, & \text{если } U < 0. \end{cases} \quad (2.10)$$

Представим  $\delta\theta(z)$  в виде суммы двух слагаемых:

$$\delta\theta(z) = \delta\psi(z) + \delta\mu(z), \quad (2.11)$$

где

$$\delta\mu(0) = \delta\mu(L) = 0, \quad (2.12)$$

а функция  $\delta\psi(z) = \delta\psi(z, \delta_1, \delta_2)$  выбрана как решение следующего дифференциального уравнения с граничными условиями:

$$\begin{cases} K_{11}\delta\psi''(z) - M\delta\psi(z) = 0, \\ \delta\psi(0) = \delta_1, \delta\psi(L) = \delta_2. \end{cases} \quad (2.13)$$

Такой выбор  $\delta\mu(z)$  и  $\delta\psi(z)$  даёт возможность разделить интегральный член в (2.6), на два слагаемых, по отдельности зависящих от этих функций; выполнение первого условия в (2.13) позволяет исключить “перекрёстный член” после подстановки  $\delta\psi(z)$  и  $\delta\mu(z)$  в (2.6).

Решение уравнения (2.13) с учётом  $\varepsilon_a < 0$  может быть представлено в следующем виде:

$$\delta\psi = \delta_1 \frac{\sinh \xi(L-z)}{\sinh \xi L} + \delta_2 \frac{\sinh \xi z}{\sinh \xi L} \quad (2.14)$$

где обратная длина  $\xi$  определяется как

$$\xi = \sqrt{|M| K_{11}^{-1}} = \sqrt{|K_{33}q_0^2 - \varepsilon_a U^2/(4\pi L^2)| K_{11}^{-1}}. \quad (2.15)$$

Разделяя  $\delta\theta$  на два случааемых, даваемых выражениями (2.11) и (2.14), представим  $\delta^2\mathcal{F}_\theta$  в виде суммы двух независимых квадратичных форм

$$\delta^2\mathcal{F}_\theta = \frac{1}{2}S_\perp(Q_\Psi + Q_\mu), \quad (2.16)$$

где

$$Q_\Psi = \int_0^L (K_{11}\delta\psi'^2(z) + M\delta\psi^2(z)) dz + \sum_{\alpha=1,2} \mathcal{W}^{(\alpha)}\delta_\alpha^2, \quad (2.17)$$

$$Q_\mu = \int_0^L (K_{11}(\delta\mu')^2 + M(\delta\mu)^2) dz. \quad (2.18)$$

Стоит отметить, что только  $Q_\Psi$  зависит от искажений на границе  $\delta_{1,2}$ . Идея такого разделения вариации на часть, зависящую от вариации функции в объёме и часть, зависящую от, в том числе, граничных вариаций, впервые была применена Фейнманом [35]. Сейчас эта идея широко используется при описании ячеек ЖК [25; 36; 37]. Так как  $K_{11} > 0$  и  $M > 0$ , квадратичная форма  $Q_\mu$  оказывается положительно определённой. Подставляя (2.14) в (2.17), получаем

$$Q_\Psi = \sum_{\alpha=1,2} \left( K_{11}\xi \coth \xi L + \mathcal{W}^{(\alpha)} \right) \delta_\alpha^2 - 2K_{11}(\xi/\sinh \xi L)\delta_1\delta_2. \quad (2.19)$$

Используя критерий Сильвестра для  $Q_\Psi$ , получаем условия устойчивости планарной геликоидальной структуры ХЖК:

$$\begin{cases} w^+ + t \coth t > 0, \\ w^{(1)}w^{(2)} + 2\bar{w}t \coth t > -t^2, \end{cases} \quad (2.20)$$

где введены безразмерные параметры  $t = \xi L$ ,  $w^+ = \mathcal{W}^+L/K_{11}$ ,  $w^{(\alpha)} = \mathcal{W}^{(\alpha)}L/K_{11}$ , и  $\bar{w} = (W_\theta^{(1)} + W_\theta^{(2)})L/2K_{11}$ . Видно, что первое неравенство в (2.20) выполнено при любых возможных значениях  $t$  и  $w^+$ . Таким образом, критерий устойчивости планарной геликоидальной структуры в случае  $\varepsilon_a < 0$ :

$$w^{(1)}w^{(2)} + 2\bar{w}t \coth t + t^2 > 0. \quad (2.21)$$

Неравенство (2.21) трансцендентно относительно напряжения  $U$ , содержащегося в  $t = \xi L$ , где  $\xi$  даётся выражением (2.15). Однако  $\bar{e}$  входит только в



$w^{(\alpha)} = \mathcal{W}^{(\alpha)} L / K_{11}$ , где  $\mathcal{W}^{(\alpha)}$  даются выражением (2.7). Таким образом, неравенство (2.21) квадратично относительно  $\bar{e}$ , и условия устойчивости могут быть записаны явно:

$$0 \leq \bar{e} \leq +\infty, \quad \text{если } U = 0, \quad (2.22a)$$

$$0 \leq \bar{e} < e_+^*, \quad \text{если } 0 < |U| < U_\infty, \quad (2.22б)$$

$$(2.22в)$$

где  $\Delta w = (W_\theta^{(2)} - W_\theta^{(1)}) L / K_{11}$ ,

$$e_+^*(U) = (K_{11}/4U) \left( \Delta w + 2\bar{w} \operatorname{sgn} U \sqrt{1 + X(U)} \right), \quad (2.23)$$

$$X(U) = \frac{2}{\bar{w}} \left( t \coth t + t^2/2\bar{w} \right), \quad (2.24)$$

Кривая  $e_+^*(U)$ , построенная по выражению (2.24), совпадает с расчётной кривой  $U^*(\bar{e})$ . Кроме того, можно рассчитать положение вертикальной асимптоты  $\bar{e}'$ :

$$\bar{e}' = \lim_{U \rightarrow \infty} e_+^*(U) = \sqrt{\frac{-\varepsilon_a K_{11}}{16\pi}} \quad (2.25)$$

Подставляя указанные выше значения параметров, получаем  $\bar{e}' = 2.74 \times 10^{-4}$  Фр/см, что также хорошо согласуется с численными расчётами.

Отметим важные свойства диаграммы в случае  $\varepsilon_a < 0$ . С одной стороны, переход Фредерикса оказывается невозможен при небольших значениях  $\bar{e}$ . Этот результат, в частности, согласуется с эмпирическим представлением о том, как должны выстраиваться молекулы с отрицательной анизотропией диэлектрической проницаемости во внешнем электрическом поле в отсутствие флексоэлектрической поляризации. С другой стороны, существует некоторое значение  $\bar{e}'$  такое, что при  $\bar{e} > \bar{e}'$  переход возможен, причём напряжение, необходимое для этого, убывает с ростом  $\bar{e}$ . Таким образом, кривая зависимости  $U = U^*(\bar{e})$  имеет две асимптоты: горизонтальную  $U = 0$  и вертикальную  $\bar{e} = \bar{e}' = 2.74 \times 10^{-4}$  Фр/см. Также отметим, что в случае  $\varepsilon_a < 0$  возможен только непрерывный переход Фредерикса. **Этот вывод можно сделать как по результатам численной минимизации свободной энергии, так и при помощи способа оценки рода перехода Фредерикса, описанном в предыдущей главе: коэффициент  $\tilde{B}$  оказывается положительным.**

**После этой надписи идёт черновик-черновик**

На Рис. 2.2 приведены профили полярного угла  $\theta(z)$ , рассчитанные при фиксированном напряжении  $U = 1.2$  В и различных значениях  $\bar{e}$ . В случае,

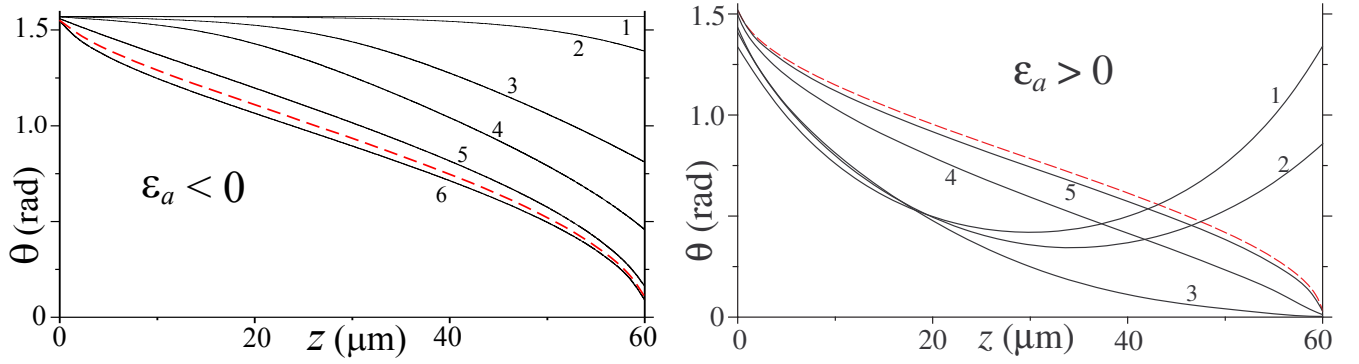


Рисунок 2.2 — Графики зависимости  $\theta(z)$  при  $U = 1.2$  В. Значения  $\bar{e}$  в единицах statC/cm для случая  $\epsilon_a < 0$ : 1 –  $\bar{e} = 10^{-3}$ , 2 –  $\bar{e} = 1.5 \times 10^{-3}$ , 3 –  $\bar{e} = 1.8 \times 10^{-3}$ , 4 –  $\bar{e} = 2 \times 10^{-3}$ , 5 –  $\bar{e} = 3 \times 10^{-3}$ , 6 –  $\bar{e} = 10^{-2}$ ; значения  $\bar{e}$  при  $\epsilon_a > 0$ : 1 –  $\bar{e} = 0$ , 2 –  $\bar{e} = 10^{-4}$ , 3 –  $\bar{e} = 10^{-3}$ , 4 –  $\bar{e} = 3 \times 10^{-3}$ , 5 –  $\bar{e} = 10^{-2}$  в единицах Фр/см. Красные пунктирные линии соответствуют зависимости  $\cos^2 \theta(z) \simeq z/L$ .

когда  $\bar{e}$  достаточно мал, равновесные ориентационные структуры значительно отличаются для  $\epsilon_a > 0$  и  $\epsilon_a < 0$ . Однако с ростом  $\bar{e}$  ориентационные структуры становятся очень схожи. Это интересное свойство может быть объяснено следующим образом. Выражение для свободной энергии (1.31) при больших значениях  $\bar{e}$  и/или  $U$  (когда вкладом, содержащими  $K_{ii}$  и  $W_{\theta,\varphi}^{(\alpha)}$ , можно пренебречь), сводится к следующему:

$$\mathcal{F} \simeq -\frac{S_{\perp}}{8\pi} U^2 J + S_{\perp} \bar{e} U J J_1 + 2\pi S_{\perp} \bar{e}^2 \int_0^L \frac{(\sin 2\theta \theta' - J J_1)^2}{\mathcal{E}(\theta)} dz. \quad (2.26)$$

Рассмотрим ситуацию, когда вклады, содержащие  $\bar{e}$ , значительно превосходят первый вклад в (2.26). Чтобы выяснить критерий наступления этого случая, оценим по модулю отношение второго слагаемого в (2.26) к первому:

$$\frac{8\pi \bar{e} U J J_1}{U^2 J} \sim \frac{\bar{e}}{\epsilon_a U} \gg 1 \quad (2.27)$$

Последнее неравенство и является критерием. Кроме того, в ситуации, когда  $\sin 2\theta \theta' - J J_1 \neq 0$ , это же неравенство означает превосходство последнего слагаемого в (2.26) над остальными. Определим, какой профиль  $\theta(z)$  даёт доставляет минимум функционалу (2.26), когда выполнено условие (2.27). Можно заметить, что интеграл в слагаемом, содержащем  $\bar{e}^2$ , неотрицателен, а значит, на равновесной ориентационной конфигурации  $\theta(z)$  должен быть близок к нулю. Это достигается, когда выполнено следующее равенство:

$$\sin 2\theta \theta' - J J_1 = 0. \quad (2.28)$$

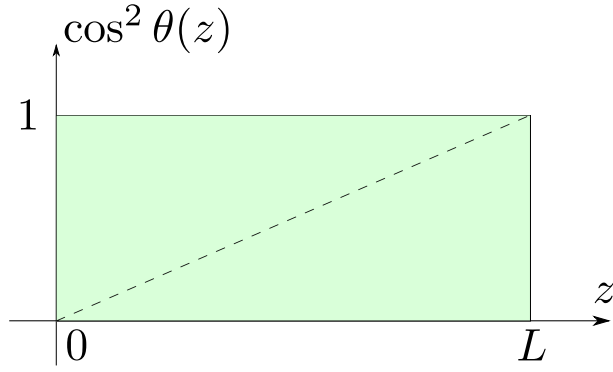


Рисунок 2.3 — Область, задаваемая неравенствами (2.31) и отрезок прямой с наибольшим возможным угловым коэффициентом.

Общим решением этого дифференциального уравнения является функция  $\theta(z)$ , для которой

$$\cos^2 \theta(z) = az + b \quad (2.29)$$

с произвольными константами  $a$  и  $b$ . Так как третье слагаемое в (2.26) близко к нулю, минимум свободной энергии определяется вторым слагаемым. Подставляя (2.29) в (2.26) и опуская первое слагаемое, получаем

$$\mathcal{F} \simeq -S_{\perp} \bar{e} U a. \quad (2.30)$$

Таким образом, минимуму  $\mathcal{F}$  соответствует максимальное положительное значение  $a$ . Для его определения учтём ограничения на  $a$  и  $b$ , следующие из определения (2.29):

$$0 \leq az + b \leq 1 \quad \forall z \in [0, L] \quad (2.31)$$

Таким образом, отрезок прямой  $az + b$  на  $z \in [0, L]$  должен целиком находиться в области, изображённой на Рис. 2.3, то есть его левый конец должен лежать на левой границе приведённой области, а правый – на правой. Нетрудно заметить, что наибольшее положительное значение  $a$  соответствует прямой, отмеченной на Рис. 2.3 пунктиром, и равняется  $1/L$ ,  $b = 0$ . Таким образом, минимум функционала  $\mathcal{F}$  как при  $\epsilon_a < 0$ , так и при  $\epsilon_a > 0$  даётся зависимостью  $\cos^2 \theta(z) \simeq z/L$ . Отметим, что при достаточно больших  $\bar{e}$  равновесной является гибридно-ориентированная структура. В такой структуре рядом с одной из границ молекулы в среднем выстраиваются параллельно ограничивающей плоскости, а рядом с другой – перпендикулярно. Такой переход между планарной геликоидальной и гибридной структурами может быть использован для создания переключателей, в основе работы которых лежит флексоэлектричество.

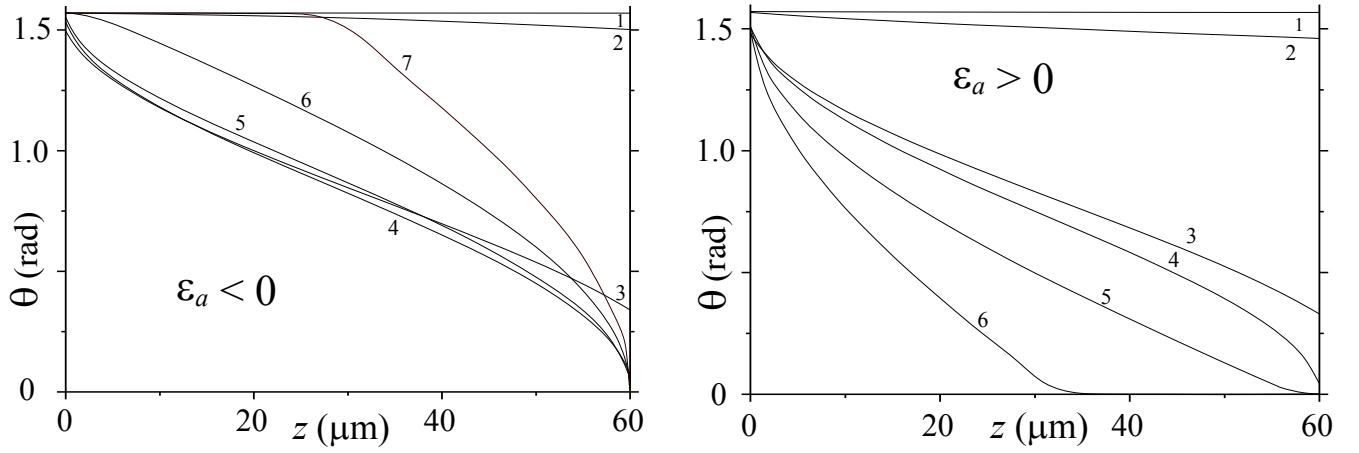


Рисунок 2.4 — Равновесная ориентационная структура  $\theta(z)$  при  $\bar{e} = 0.01$  Фр/см. Напряжения для случая  $\varepsilon_a < 0$ : 1 –  $U = 0.15$  В, 2 –  $U = 0.17$  В, 3 –  $U = 0.18$  В, 4 –  $U = 1$  В, 5 –  $U = 2$  В, 6 –  $U = 5$  В и 7 –  $U = 10$  В; для случая  $\varepsilon_a > 0$ : 1 –  $U = 0.15$  В, 2 –  $U = 0.17$  В, 3 –  $U = 0.18$  В, 4 –  $U = 1$  В, 5 –  $U = 5$  В и 6 –  $U = 10$  В.

Кроме того, в ячейке ХЖК с достаточно большим  $\bar{e}$  был обнаружен ориентационный переход нового типа. Такой переход продемонстрирован на Рис. 2.4, где представлены профили  $\theta(z)$  при фиксированном  $\bar{e}$  и различных значениях напряжения  $U$ . С ростом приложенного напряжения от нулевого значения сначала происходит непрерывный переход Фредерикса. При дальнейшем увеличении напряжения происходит ещё один переход. Этот переход является разрывным, так как происходит между двумя значительно различающимися ориентационными структурами. Это иллюстрируют графики 2 и 3 на Рис. 2.4: разница в приложенном напряжении составляет 0.01 В, при этом полученные профили существенно различны. Отметим, что при очень высоком напряжении  $U$  первое слагаемое в выражении (2.26) становится определяющим. Следовательно, система стремится к насыщенной ориентационной структуре, которая описывается зависимостью  $\theta(z) = \pi/2$  при  $\varepsilon_a < 0$  и  $\theta(z) = 0$  при  $\varepsilon_a > 0$ . Это можно пронаблюдать на Рис. 2.4 на примере профилей 5-7 для случая  $\varepsilon_a < 0$  и профилей 5 и 6 для случая  $\varepsilon_a > 0$ .

### Глава 3. Переход между искажёнными ориентационными структурами в случае большого усреднённого флексоэлектрического коэффициента.

В предыдущей главе рассматривалась ситуация, когда при достаточно больших значениях  $\bar{e}$  и  $U$  выполнялось соотношение

$$\frac{\bar{e}U}{K} \gg 1, \quad (3.1)$$

где  $K = \max K_{ii}$  – наибольший модуль Франка рассматриваемой системы. При этом вкладами в свободную энергию  $\mathcal{F}_{\text{tot}}$ , даваемую выражением (1.31), содержащими  $K_{ii}$  и  $W_{\phi}^{(1,2)}$ , можно пренебречь. Таким образом, выражение для свободной энергии может быть записано в следующем виде:

$$\begin{aligned} \mathcal{F} = \frac{S_{\perp}}{2} \left( -\frac{1}{4\pi} U^2 J + 2\bar{e}U J J_1 + 4\pi\bar{e}^2 \int_0^L \frac{(\sin 2\theta \theta' - J J_1)^2}{\mathcal{E}(\theta)} dz + \right. \\ \left. + W_{\theta}^{(1)} \sin^2 (\theta(0) - \theta_0^{(1)}) + W_{\theta}^{(2)} \sin^2 (\theta(L) - \theta_0^{(2)}) \right). \quad (3.2) \end{aligned}$$

Видно, что в этом пределе свободная энергия не зависит от азимутального угла  $\phi(z)$ , а значит, в этом случае нематические и холестерические ЖК описываются одинаково.

Исследуем, как равновесная ориентационная структура ЖК-ячейки (описываемая зависимостью  $\theta(z)$ ) меняется в зависимости от приложенного напряжения  $U$  для различных наборов материальных параметров. В дальнейшем ограничимся углами лёгкого ориентирования на границах  $\theta_0^{(1,2)} = \pi/2$ . Отметим, что в этом приближении свободная энергия (3.2) является функционалом  $\cos^2 \theta(z)$ . Таким образом, удобно использовать замену  $y(z) \equiv \cos^2 \theta(z) + \varepsilon_{\perp}/\varepsilon_a = \mathcal{E}(\theta)/\varepsilon_a$ . Так как ранее мы указывали, что ищем функцию  $\theta(z) \in C^2[0, L]$ , то и на  $y(z)$  накладываются такие же требования:  $y(z) \in C^2[0, L]$ . При этом важно, что функция  $y(z)$  ограничена:  $y(z) \in [\varepsilon_{\perp}/\varepsilon_a, \varepsilon_{\parallel}/\varepsilon_a] \quad \forall z \in [0, L]$ . Свободная энергия как функционал  $y(z)$  имеет вид

$$\begin{aligned} \mathcal{F} = \frac{S_{\perp}}{2} \left( -\frac{1}{4\pi} U^2 J + 2\bar{e}U J J_1 + \frac{4\pi\bar{e}^2}{\varepsilon_a} \int_0^L \frac{(y' + J J_1)^2}{y} dz + \right. \\ \left. + W_{\theta}^{(1)} y(0) + W_{\theta}^{(2)} y(L) - (W_{\theta}^{(1)} + W_{\theta}^{(2)}) \frac{\varepsilon_{\perp}}{\varepsilon_a} \right). \quad (3.3) \end{aligned}$$

В терминах  $y(z)$  можно также записать

$$J^{-1} = \varepsilon_a^{-1} \int_0^L \frac{dz}{y}, \quad J_1 = \varepsilon_a^{-1} \ln \frac{y(0)}{y(L)}. \quad (3.4)$$

Для того, чтобы рассчитать равновесную ориентационную конфигурацию  $\theta(z)$ , нужно найти функцию  $y(z)$ , доставляющую минимум функционалу (3.3). Так как функция  $y(z)$  ограничена, необходимое условие минимизации свободной энергии можно сформулировать как неотрицательность её первой вариации

$$\delta\mathcal{F} \geq 0. \quad (3.5)$$

Вариация  $\delta\mathcal{F}$  даётся следующей формулой:

$$\begin{aligned} \frac{\delta\mathcal{F}}{S_\perp} = & \left[ \frac{-U^2 J^2}{8\pi} + \bar{e}U J_1 J^2 + 2\pi\bar{e}^2 ((y')^2 - 2y''y - J_1^2 J^2) \right] \frac{\delta y(z)}{\varepsilon_a y^2} + \\ & + \left[ \bar{e}U J - 4\pi\bar{e}^2 (y'(0) + J J_1) + \varepsilon_a y(0) \frac{W_1}{2} \right] \frac{\delta y(0)}{\varepsilon_a y(0)} + \\ & + \left[ -\bar{e}U J + 4\pi\bar{e}^2 (y'(L) + J J_1) + \varepsilon_a y(L) \frac{W_2}{2} \right] \frac{\delta y(L)}{\varepsilon_a y(L)}. \end{aligned} \quad (3.6)$$

При этом функция  $y(z)$  должна удовлетворять условиям

$$\begin{cases} 0 \leq z \leq L, \end{cases} \quad (3.7a)$$

$$\begin{cases} \varepsilon_\perp/\varepsilon_a \leq y \leq \varepsilon_\parallel/\varepsilon_a. \end{cases} \quad (3.7b)$$

На Рис. 3.1 изображены области, задаваемые неравенствами (3.1). Таким образом, участок кривой  $y(z)$  при  $z \in [0, L]$  должен находиться внутри соответствующего прямоугольника. Минимум функционалу могут доставлять и такие профили, у которых существуют точки или целые области, где  $y(z) = \varepsilon_\parallel/\varepsilon_a$  или  $y(z) = \varepsilon_\perp/\varepsilon_a$ . Обозначим множество таких точек через  $A$ , а дополнение  $A$  до отрезка  $[0, L]$  –  $B$ . Проиллюстрируем эти множества на примере графика зависимости  $y(z)$ , приведённого на Рис. 3.2. Так, в данном случае  $A = \{0\} \cup [a, b]$ ,  $B = (0, a) \cup (b, L]$ . Также важно отметить, что бесконечно малые вариации  $\delta y(z)$  произвольны, когда  $z \in B$ . В этом случае в условии (3.5) может реализоваться только равенство. Это требование приводит к следующему уравнению Эйлера-Лагранжа:

$$-2yy'' + (y')^2 - J^2 \left( J_1 - \frac{U}{4\pi\bar{e}} \right)^2 = 0 \quad (3.8)$$

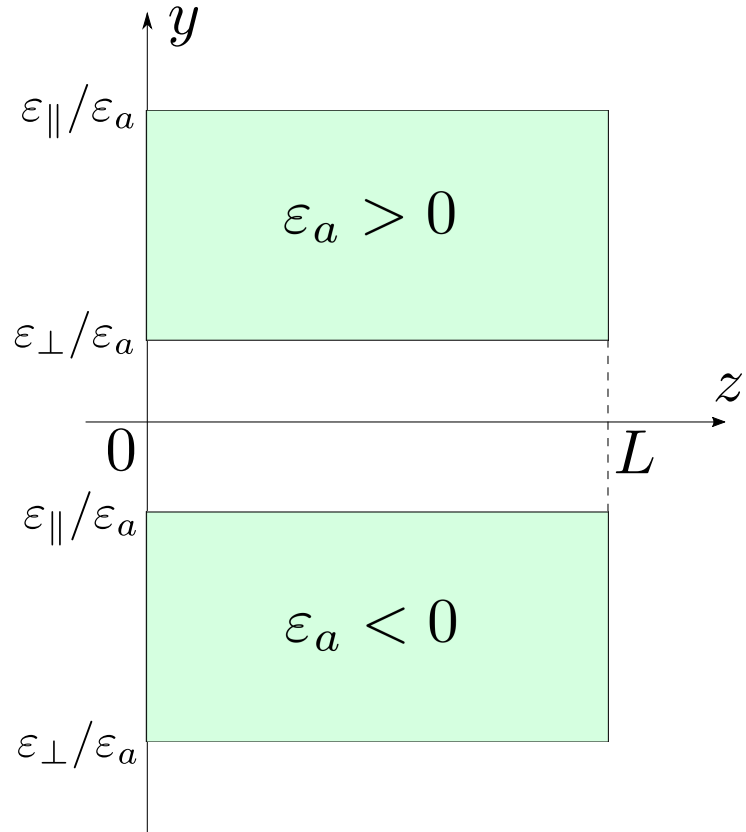


Рисунок 3.1 — Графическая иллюстрация системы неравенств (3.7а) и (3.7б) для случаев  $\varepsilon_a > 0$  и  $\varepsilon_a < 0$ .

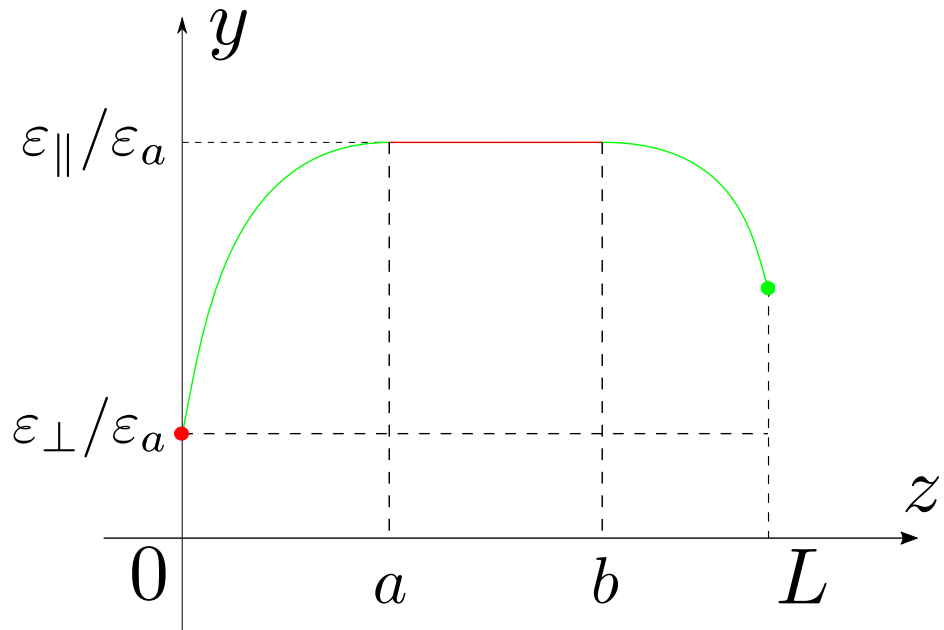


Рисунок 3.2 — График зависимости  $y(z)$ , иллюстрирующий случай, когда кривая  $y(z)$  касается границ ограничивающего прямоугольника.

и граничными условиями

$$\bar{e}UJ - 4\pi\bar{e}^2(y'(0) + JJ_1) + \varepsilon_a y(0)\frac{W_1}{2} = 0 \quad (3.9a)$$

$$-\bar{e}UJ + 4\pi\bar{e}^2(y'(L) + JJ_1) + \varepsilon_a y(L)\frac{W_2}{2} = 0. \quad (3.9б)$$

Однако при достижении  $y(z)$  "верхней"или "нижней"границы прямоугольника (3.76), то есть когда  $z \in A$ , эти вариации оказываются знакоопределёнными:  $\delta y(z) \geq 0$ , если  $y(z) = \varepsilon_{\perp}/\varepsilon_a$ , и  $\delta y(z) \leq 0$  при  $y(z) = \varepsilon_{\parallel}/\varepsilon_a$ . В этом случае, используя выражение для первой вариации свободной энергии (3.6), для  $z \in (0, L) \cap A$  вместо уравнения Эйлера-Лагранжа (3.8) можно записать неравенство

$$\left(-2yy'' + (y')^2 - J^2 \left(J_1 - \frac{U}{4\pi\bar{e}}\right)^2\right) \frac{\delta y}{y} \geq 0. \quad (3.10)$$

Для  $z \in \{0, L\} \cap A$  граничные условия также примут форму неравенств:

$$\left[-y'(0) - J \left(J_1 - \frac{U}{4\pi\bar{e}}\right) + g_1 y(0)\right] \delta y(0) \geq 0, \quad (3.11a)$$

$$\left[y'(L) + J \left(J_1 - \frac{U}{4\pi\bar{e}}\right) + g_2 y(L)\right] \delta y(L) \geq 0, \quad (3.11б)$$

где

$$g_i = \frac{\varepsilon_a W_i}{8\pi\bar{e}^2}, \quad i = 1, 2. \quad (3.12)$$

Утверждение. Если существует некоторый отрезок  $[a, b] \subset (0, L)$  такой, что множество  $[a, b] \cap A$  содержит конечное число элементов, то во всех этих точках  $\delta\mathcal{F}/\delta y = 0$ . Действительно, пусть нашёлся такой отрезок  $[a, b]$ , что существует  $z_1$ :  $z_1 \in [a, b] \cap A$ . Тогда из непрерывности  $\delta\mathcal{F}/\delta y(z)$  следует, что

$$\frac{\delta\mathcal{F}}{\delta y(z_1 - 0)} = \frac{\delta\mathcal{F}}{\delta y(z_1 + 0)} = \frac{\delta\mathcal{F}}{\delta y(z_1)}. \quad (3.13)$$

При этом хотя бы с одной из сторон от  $z_1$   $\delta\mathcal{F}/\delta y(z) = 0$  в силу определения отрезка  $[a, b]$ . Следовательно, значение вариации в точке  $z_1$  также нулевое.

Утверждение доказано.

При записи условий (3.10), (3.11a) и (3.11б) учтено, что  $\varepsilon_a y(z) = \mathcal{E}(\theta(z)) > 0$ . Отметим, что неравенства (3.10)–(3.11б) аналогичны условиям Каруша-Куна-Таккера (см., например, [40]) для уравнения Эйлера-Лагранжа с граничными условиями. Таким образом, поиск равновесной ориентационной структуры ЖК-ячейки сводится к достаточно необычной математической задаче: уравнение Эйлера-Лагранжа (3.8) является интегро-дифференциальным, а также



содержит значения искомой функции на границах. Каждое из граничных условий (3.11a) и (3.11б) – неравенство и тоже содержит интегральный множитель  $J$ , зависящий от распределения  $\theta(z)$  в объёме ячейки, а также значения  $y(0)$  и  $y(L)$  в множителе  $J_1$ . Наконец, условие, которому должна удовлетворять искомая функция  $y(z)$ , может быть различным и зависит от того, как распределяются множества  $A$  и  $B$  на отрезке  $[0, L]$  для конкретной функции-кандидата.

Достаточное условие минимума свободной энергии может быть получено, если добавить к (3.5) требование положительности второй вариации свободной энергии

$$\delta^2 \mathcal{F}[y(z)] > 0, \quad z \in B \cup (\partial A \cap (0, L)). \quad (3.14)$$

Во всех остальных точках отрезка  $[0, L]$  достаточное условие даётся неравенством (3.10).

Для решения уравнения Эйлера-Лагранжа введём обозначение

$$a = J \left( J_1 - \frac{U}{4\pi\epsilon} \right). \quad (3.15)$$

Так как выражение  $J(J_1 - U/(4\pi\epsilon))$  не зависит от  $z$ , получаем параметрическое уравнение

$$-2yy'' + (y')^2 - a^2 = 0. \quad (3.16)$$

Этот параметр также входит в граничные условия (3.11a) и (3.11б).

Заметим, что если вторая производная  $y''$  равна нулю (а значит,  $y(z)$  – линейная функция), то уравнение (3.16) принимает вид

$$(y')^2 - a^2 = 0. \quad (3.17)$$

Семейство линейных функций, являющихся его решениями, может быть описано как

$$y(z) = \pm az + b, \quad (3.18)$$

где  $b$  – произвольная константа.

Далее, пусть  $y'' \neq 0$ . Введём замену  $\tau(y) = y'$ . Тогда справедлива цепочка равенств

$$y''_{zz} = \tau'_z = \tau'_y y' = \tau'_y \tau. \quad (3.19)$$

Подставляя выражение для  $y''$  из (3.19) в (3.16), получаем:

$$-2y\tau'_y\tau + \tau^2 - a^2 = 0. \quad (3.20)$$

Разделив переменные и проинтегрировав, запишем

$$\tau^2 - a^2 = cy, \quad (3.21)$$

где  $c$  – произвольная константа. Учитывая, что  $\tau = y'$ , проинтегрируем это уравнение:

$$|y'| = \sqrt{cy + a^2} \Rightarrow y = \frac{c}{4}(z + b)^2 - \frac{a^2}{c}. \quad (3.22)$$

Здесь  $b$  – также произвольная константа.

Таким образом, уравнение (3.16) имеет три независимых решения

$$y(z) = \pm az + b, \quad (3.23)$$

$$y(z) = \frac{c}{4}(z + b)^2 - \frac{a^2}{c}, \quad (3.24)$$

где  $b$  и  $c$  – произвольные константы. Выражение (3.15) является, по своей сути, условием самосогласования на параметр  $a$ , так как  $J$  и  $J_1$ , в свою очередь, зависят от  $a$ .

### 3.1 Линейное решение

Отметим, что из-за требования  $y \in C^2[0, L]$  кусочно-заданная функция, состоящая из линейных функций (3.23) решением быть не может. Подставляя линейное решение (3.23) в уравнение (3.16), приходим к следующему равенству:

$$\frac{JU}{4\pi\bar{e}} = 0.$$

Это требование может быть выполнено только в тривиальном случае  $U = 0$ . Таким образом, в дальнейшем будем рассатривать только параболическое решение (3.24) с учётом ограничения (3.76) на  $y(z)$ . Это требование совместно с условиями на границах ячейки (3.11а) и (3.11б), а также условием самосогласования (3.15) позволяет определить параметры  $a$ ,  $b$  и  $c$ .

### 3.2 Параболическое решение без участков насыщения

Проверим возможность существования параболического решения  $y(z)$  вида (3.24), для которого было бы выполнено условие  $y(z) \in (\varepsilon_{\parallel}/\varepsilon_a, \varepsilon_{\perp}/\varepsilon_a) \forall z \in [0, L]$ . На языке множеств  $A$  и  $B$  этот случай соответствует пустому множеству  $B$ . Решение должно обладать следующими свойствами:

- Абсцисса вершины параболы находится либо вне отрезка  $[0, L]$ , либо её ордината лежит в области возможных значений функции  $y(z)$ :

$$\begin{aligned} & \left[ -b \notin [0, L], \right. & (3.25a) \\ & \left. \frac{\varepsilon_{\perp}}{\varepsilon_a} < \frac{-a^2}{c} < \frac{\varepsilon_{\parallel}}{\varepsilon_a}; \right. & (3.25b) \end{aligned}$$

- Значения функции  $y(z)$  на краях отрезка  $[0, L]$  также должны находиться в указанном выше интервале:

$$\varepsilon_{\perp}/\varepsilon_a < y(0, L) < \varepsilon_{\parallel}/\varepsilon_a \quad (3.26)$$

- Должны быть удовлетворены граничные условия (3.9a) и (3.96);
- Должно выполняться условие самосогласования (3.15).

Подставим исследуемое параболическое решение в граничные условия (3.9a) и (3.96) и после несложных преобразований получим:

$$\left(b + \frac{2a}{c}\right) \left(\frac{g_1}{2} \left(b - \frac{2a}{c}\right) - 1\right) = 0 \quad (3.27a)$$

$$\left(L + b + \frac{2a}{c}\right) \left(\frac{g_2}{2} \left(L + b - \frac{2a}{c}\right) - 1\right) = 0. \quad (3.27b)$$

Кроме того, вычисляя  $J$  и  $J_1$  для  $y(z)$  заданного вида, запишем условие самосогласования (3.15):

$$\begin{aligned} a = a\varepsilon_a & \left( \ln \left( \frac{L + b - 2a/c}{b - 2a/c} \times \frac{b + 2a/c}{L + b + 2a/c} \right) \right)^{-1} \times \\ & \times \left( \frac{1}{\varepsilon_a} \ln \left( \frac{b - 2a/c}{L + b - 2a/c} \times \frac{b + 2a/c}{L + b + 2a/c} \right) - \frac{U}{4\pi\bar{e}} \right). \end{aligned} \quad (3.28)$$

После преобразований получаем следующее условие:

$$L + b - \frac{2a}{c} = \gamma \left( b - \frac{2a}{c} \right). \quad (3.29)$$

Здесь и далее использовано обозначение

$$\gamma = \exp\left(\frac{-\varepsilon_a U}{8\pi\bar{e}}\right). \quad (3.30)$$

Видно, что условия (3.27a) и (3.27б) приводят к равенству нулю одного из множителей в каждом условии. Рассмотрим теперь значения функции  $y(z)$  на границах ячейки:

$$y(0) = \frac{c}{2} \left(b - \frac{2a}{c}\right) \left(b + \frac{2a}{c}\right) \quad (3.31a)$$

$$y(L) = \frac{c}{2} \left(L + b - \frac{2a}{c}\right) \left(L + b + \frac{2a}{c}\right) \quad (3.31б)$$

Из того, что они должны быть отличны от нуля, следует, что в условиях (3.27a) и (3.27б) нулю могут быть равны только вторые множители, что приводит к следующим равенствам:

$$b - 2a/c = 2/g_1 \quad (3.32)$$

$$L + b - 2a/c = 2/g_2. \quad (3.33)$$

Видно, что подстановка (3.32) и (3.33) в (3.29) даёт

$$g_1 = \gamma g_2. \quad (3.34)$$

Это выражение связывает материальные параметры и не может быть удовлетворено в общем случае.

Рассмотрим решение параболического типа, для которого множество  $B$  содержит единственную точку  $z_0$ . Как было показано ранее, если эта точка находится на интервале  $(0, L)$ , то уравнение Эйлера-Лагранжа остаётся в силе, а значит, ничего, по сравнению с предыдущим рассмотренным случаем не меняется. Таким образом, имеет смысл рассмотреть ситуацию, когда  $z_0 = 0$  или  $z_0 = L$ . Если эта точка находится на левой границе,  $z_0 = 0$ , то рассмотрим совместно выражение (3.29), возникающее из условия самосогласования, и равенство (3.33), возникающее из граничного условия (3.32):

$$L + b - \frac{2a}{c} = \frac{2}{g_2} \quad (3.35a)$$

$$L + b - \frac{2a}{c} = \gamma \left(b - \frac{2a}{c}\right). \quad (3.35б)$$

Выражая  $b - 2a/c$  из каждого из условий и приравнявая полученное, запишем:

$$\frac{2}{g_2} - L = \frac{L}{\gamma - 1}. \quad (3.36)$$

Вновь получено равенство, связывающее материальные параметры, а значит, решение такого типа невозможно. Аналогично можно доказать, что случай  $z_0 = L$  тоже не реализуется.

Таким образом, для случая чисто параболического решения остаётся рассмотреть ситуацию, когда на обеих границах отрезка  $[0, L]$   $y(z) \in \{\varepsilon_{\perp}/\varepsilon_a, \varepsilon_{\parallel}/\varepsilon_a\}$ . Введём обозначения

$$y(0, L) = \mu_{0, L}. \quad (3.37)$$

Можно записать все условия, которым должно удовлетворять решение:

$$\left\{ \begin{array}{l} y(z) = \frac{c}{4}(z+b)^2 - \frac{a^2}{c}, \\ y(0) = \mu_0, \\ y(L) = \mu_L, \\ a = J \left( J_1 - \frac{U}{4\pi e} \right), \\ \left[ \begin{array}{l} -b \notin [0, L], \\ \frac{\varepsilon_{\perp}}{\varepsilon_a} < \frac{-a^2}{c} < \frac{\varepsilon_{\parallel}}{\varepsilon_a}, \end{array} \right. \\ [-(y'(0) + a) + g_1 y(0)] \delta y(0) \geq 0, \\ [y'(L) + a + g_2 y(L)] \delta y(L) \geq 0. \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} (3.38a) \\ (3.38б) \\ (3.38в) \\ (3.38г) \\ (3.38д) \\ (3.38е) \\ (3.38ж) \end{array}$$

Подстановка зависимости (3.38а) в (3.38б), (3.38в) и (3.38г) даёт следующую систему уравнений на коэффициенты  $a$ ,  $b$  и  $c$ : (эта система взята со страницы R-2)

$$b = -\frac{L}{2} \left( \frac{\pm\gamma}{\frac{\mu_L}{\mu_0} \pm \gamma} + \frac{1}{1 \pm \gamma} \right), \quad (3.39a)$$

$$b - \frac{2a}{c} = \frac{-L}{1 \pm \gamma}, \quad (3.39б)$$

$$\frac{c}{4} \cdot \frac{-L}{1 \pm \gamma} \left( b + \frac{2a}{c} \right) = \mu_0. \quad (3.39в)$$

Здесь и далее подразумевается, что во всех выражениях могут стоять одновременно либо только “верхние”, либо только “нижние” знаки. После несложных

алгебраических преобразований удаётся выразить следующие конструкции из коэффициентов, удобные для дальнейшей подстановки:

$$\begin{cases} b = \frac{-L}{2} \left( \frac{\pm\gamma}{\frac{\mu_L}{\mu_0} \pm \gamma} + \frac{1}{1 \pm \gamma} \right), \end{cases} \quad (3.40a)$$

$$\begin{cases} \frac{2a}{c} = \frac{L}{2} \left( \frac{1}{1 \pm \gamma} - \frac{\pm\gamma}{\frac{\mu_L}{\mu_0} \pm \gamma} \right), \end{cases} \quad (3.40б)$$

$$\begin{cases} \frac{c}{4} = \frac{\mu_0 (1 \pm \gamma) \left( \frac{\mu_L}{\mu_0} \pm \gamma \right)}{\pm\gamma L^2}. \end{cases} \quad (3.40в)$$

Граничные условия (3.38е) и (3.38ж) после подстановки в них выражений для коэффициентов (3.40а) – (3.40в) принимают следующий вид:

$$\begin{cases} \mu_0 \left( g_1 + \frac{2(1 \pm \gamma)}{L} \right) \delta y(0) \geq 0, \end{cases} \quad (3.41a)$$

$$\begin{cases} \mu_L \left( g_2 + \frac{2(1 \pm \gamma^{-1})}{L} \right) \delta y(L) \geq 0. \end{cases} \quad (3.41б)$$

**АО:** надо придумать, как здесь заменить  $\delta y(0, L)$  на единицу в некоторой степени. Для того, чтобы анализа полученные неравенства, необходимо выбрать знаки  $\varepsilon_a$  и  $U$ . Произведём расчёт для случая  $\varepsilon_a > 0$ ,  $U > 0$ . Заметим, что в этом случае выполнены следующие неравенства:

$$\mu_{0,L} > 0, \quad (3.42a)$$

$$0 < \gamma \leq 1, \quad (3.42б)$$

$$1 \leq \gamma^{-1} < \infty. \quad (3.42в)$$

Учитывая требование (3.42б), неравенство (3.41а) можно свести к требованию  $\delta y(0) > 0$ , что соответствует  $\mu_0 = \varepsilon_{\perp}/\varepsilon_a$ . Предположим, что знак при  $\gamma$  – “верхний”. Тогда неравенство (3.41б) принимает вид

$$\left( g_2 + \frac{2(1 + \gamma^{-1})}{L} \right) \delta y(L) \geq 0. \quad (3.43)$$

Выражение в скобках может принимать только положительные значения ( $g_{1,2} > 0$ , так как  $\varepsilon_a > 0$ ). Таким образом, приходим к требованию  $\delta y(L) > 0$ , что соответствует  $\mu_L = \mu_0 = \varepsilon_{\perp}/\varepsilon_a$ . Так как  $y(0) = y(L)$ , вершина параболы находится в точке  $z = L/2$ , а значит, нужно проверить, не выходит ли ордината вершины

за границы допустимого отрезка. Выражение для ординаты параболы:

$$y(z) \Big|_{z=-b} = \frac{-a^2}{c}, \quad (3.44)$$

на него наложено следующее ограничение:

$$\frac{\varepsilon_{\perp}}{\varepsilon_a} \leq \frac{-a^2}{c} \leq \frac{\varepsilon_{\parallel}}{\varepsilon_a}. \quad (3.45)$$

Воспользуемся полученными ранее формулами (3.40), чтобы выразить  $-a^2/c$ , и после несложных преобразований получим

$$1 \leq \frac{-(1-\gamma)^2}{4\gamma} \leq \frac{\varepsilon_{\parallel}}{\varepsilon_{\perp}}. \quad (3.46)$$

Видно, что это условие не выполняется, а значит, решений в случае выбранного при  $\gamma$  знака при  $\varepsilon_a > 0$  и  $U > 0$  нет.

Рассмотрим теперь “нижний” знак при  $\gamma$ . В этом случае неравенство (3.416) принимает вид

$$\left( g_2 + \frac{2(1-\gamma^{-1})}{L} \right) \delta y(L) \geq 0. \quad (3.47)$$

Знак выражения в скобках определяет, какого знака должна быть вариация  $\delta y(L)$ . Заметим, что с ростом  $U$  значение  $\gamma^{-1}$  также монотонно растёт. Следовательно, существует некоторое значение напряжения  $U = \tilde{U}$  такое, что при  $U < \tilde{U}$ ,  $\delta y(L) > 0$ , а при  $U > \tilde{U}$ ,  $\delta y(L) < 0$ . Найти напряжение  $\tilde{U}$  можно, приравнявая значение выражения в скобках в формуле (3.47) к нулю. После несложных преобразований получим:

$$\tilde{U} = \frac{8\pi\bar{e}}{\varepsilon_a} \ln \left( 1 + \frac{\varepsilon_a W_2 L}{16\pi\bar{e}^2} \right). \quad (3.48)$$

Рассмотрим случай  $U < \tilde{U}$ . Как сказано выше, это условие приводит к тому, что  $\mu_L = \varepsilon_{\perp}/\varepsilon_a$ . Проверим, выполняется ли условие на ординату вершины параболы, которая при  $\mu_0 = \mu_L$  имеет абсциссу  $z = -b$ . Подставим в (3.44) выражения для комбинации коэффициентов из (3.40):

$$y(z) \Big|_{z=-b} = - \left( \frac{2a}{c} \right)^2 \cdot \frac{c}{4} = \frac{\mu_0 \left( \frac{\mu_L}{\mu_0} - \gamma^2 \right)^2}{4\gamma(1-\gamma) \left( \frac{\mu_L}{\mu_0} - \gamma \right)}. \quad (3.49)$$

Подставляя полученные выше значения  $\mu_0 = \mu_L = \varepsilon_{\perp}/\varepsilon_a$ , запишем условие на вершину параболы:

$$1 \leq \frac{(1+\gamma)^2}{4\gamma} \leq \frac{\varepsilon_{\parallel}}{\varepsilon_{\perp}}. \quad (3.50)$$

Видно, что первое неравенство в (3.50) выполнено для всех  $\gamma \in (0, 1]$ , а вот второе является содержательным. Исследуем неравенство

$$(1+\gamma)^2 \leq \frac{4\gamma\varepsilon_{\parallel}}{\varepsilon_{\perp}}. \quad (3.51)$$

Графики функций  $f_1(\gamma) = (1+\gamma)^2$  и  $f_2(\gamma) = 4\gamma\varepsilon_{\parallel}/\varepsilon_{\perp}$  представлены на Рис. 3.3. При построении графиков учтено, что  $f_2(0) < f_1(0)$  и  $f_2(1) > f_1(1)$ , следова-

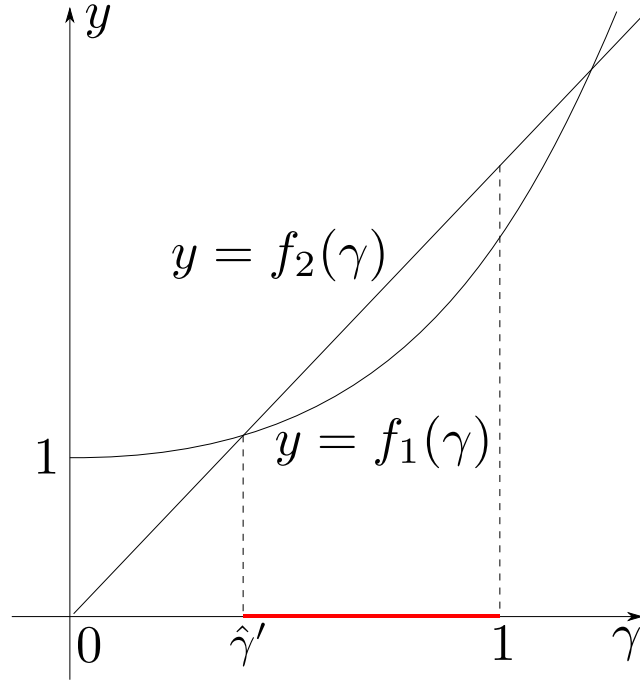


Рисунок 3.3 — Графики функций  $y = f_1(\gamma)$  и  $y = f_2(\gamma)$ . Цветом выделен участок на оси  $\gamma$ , соответствующий решению неравенства (3.51).

тельно, на интервале  $(0, 1)$  существует  $\hat{\gamma}'$  такая, что  $f_1(\hat{\gamma}') = f_2(\hat{\gamma}')$ . При этом неравенство (3.51) выполнено при  $\hat{\gamma}' < \gamma \leq 1$ , что в терминах напряжений соответствует  $0 \leq U < \hat{U}'$ ,  $\hat{U}' : \hat{\gamma}' = \gamma(\hat{U}')$ . Приведём точное выражение для  $\hat{\gamma}'$  и соответствующего напряжения  $\hat{U}'$ :

$$\hat{\gamma}' = \frac{2\varepsilon_{\parallel}}{\varepsilon_{\perp}} - 1 - \frac{2\varepsilon_{\parallel}}{\varepsilon_{\perp}} \sqrt{\frac{\varepsilon_a}{\varepsilon_{\parallel}}}, \quad (3.52)$$

$$\hat{U}' = \frac{8\pi\bar{e}}{\varepsilon_a} \ln \left( \frac{1}{\hat{\gamma}'} \right). \quad (3.53)$$



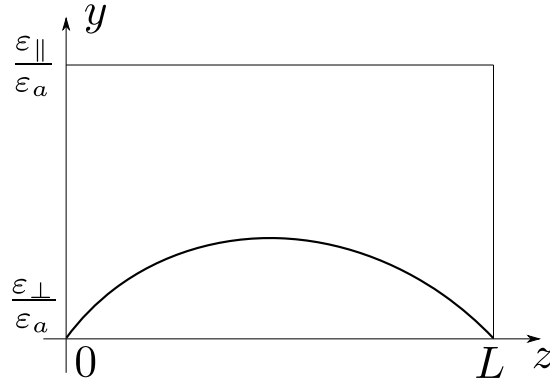


Рисунок 3.4 — Вид профиля при напряжении  $U < \min(\tilde{U}, \hat{U}_1)$

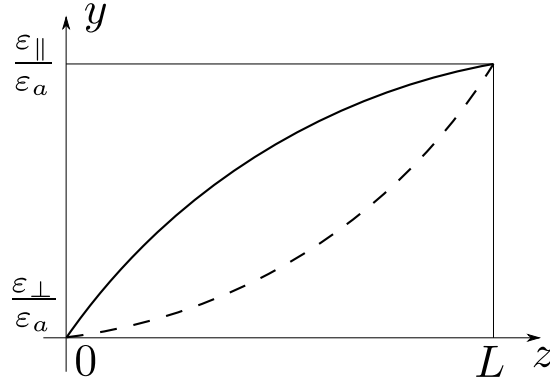


Рисунок 3.5 — Схематическое изображение параболических профилей без участков насыщения при  $\mu_0 = \varepsilon_{\perp}/\varepsilon_a$  и  $\mu_L = \varepsilon_{\parallel}/\varepsilon_a$ .

Напомним, что условие  $U < \tilde{U}$  соответствует неравенству, заменяющему граничное условие на границе  $z = L$ , а условие  $U < \hat{U}'$  соответствует требованию, чтобы вершина параболы не выходила за границы обозначенного прямоугольника.

Таким образом, заключаем, что при  $U < \min(\tilde{U}, \hat{U}_1)$  возможно существование профиля, изображённого на Рис. 3.4. Подставляя  $\mu_0 = \mu_L = \varepsilon_{\perp}/\varepsilon_a$  в (3.40) и выбирая “нижний” знак при  $\gamma$ , можно получить уравнение такого профиля:

$$y(z) = \frac{\varepsilon_{\perp}}{\varepsilon_a} \cdot \frac{(1 - \gamma)^2}{-\gamma^2} \cdot \left( \frac{z}{L} - \frac{1}{2} \right)^2 + \frac{\varepsilon_{\perp}}{\varepsilon_a} \cdot \frac{(1 + \gamma)^2}{4\gamma} \quad (3.54)$$

Мы рассмотрели случай  $U < \tilde{U}$ , что приводит к  $\mu_L = \varepsilon_{\perp}/\varepsilon_a$ . Рассмотрим теперь  $U > \tilde{U}$ . В свою очередь, это условие приводит к требованию  $\mu_L = \varepsilon_{\parallel}/\varepsilon_a$ . Такие значения  $\mu_0$  и  $\mu_L$  приводят к профилям, схематически изображённым на Рис. 3.5. Проверим, при каких значениях напряжения  $U$  выполнено условие на вершину параболы. В данном случае может быть выполнено только первое условие из совокупности (3.38д). Подставляя в выражение для коэффициента  $b$  (3.40а) “нижний” знак при  $\gamma$  и исследуемые значения  $\mu_{0,L}$ , запишем первое

условие из (3.38д):

$$\left[ \frac{L}{2} \left( \frac{-\gamma}{\frac{\varepsilon_{\parallel}}{\varepsilon_{\perp}} - \gamma} + \frac{1}{1 - \gamma} \right) < 0, \right. \quad (3.55a)$$

$$\left. \frac{L}{2} \left( \frac{-\gamma}{\frac{\varepsilon_{\parallel}}{\varepsilon_{\perp}} - \gamma} + \frac{1}{1 - \gamma} \right) > L. \right. \quad (3.55б)$$

Рассмотрим неравенство (3.55а). После несложных преобразований можно прийти к следующей записи:

$$\frac{1}{1 - \gamma} < \frac{\gamma}{\frac{\varepsilon_{\parallel}}{\varepsilon_{\perp}} - \gamma} \quad (3.56)$$

Заметим, что  $\varepsilon_{\parallel}/\varepsilon_{\perp} > 1$  (так как рассматривается случай  $\varepsilon_a > 0$ ), а  $\gamma < 1$ . Отсюда можно сделать вывод, что неравенство (3.56) не может быть выполнено. Отсюда также следует, что профиль, обозначенный на Рис. 3.5 пунктирной линией, не может быть равновесным.

Рассмотрим неравенство (3.55б). Его при помощи алгебраических преобразований можно свести к следующему виду:

$$(1 - \gamma)^2 < (2\gamma - 1) \frac{\varepsilon_a}{\varepsilon_{\perp}}. \quad (3.57)$$

Графики функций  $f_1(\gamma) = (1 - \gamma)^2$  и  $f_2(\gamma) = (2\gamma - 1)\varepsilon_a/\varepsilon_{\perp}$  представлены на Рис. 3.6. Здесь при построении графика учтено, как соотносятся значения обеих функций при  $\gamma = 0$  и  $\gamma = 1$ . Таким образом, неравенство (3.57) выполнено, когда  $\gamma \in (\hat{\gamma}_1, 1]$ , что соответствует  $U \in [0, \hat{U}_1)$ . Решая квадратное уравнение, можно получить точное выражение для  $\hat{\gamma}_1$  и напряжения  $\hat{U}_1$ :

$$\hat{\gamma}_1 = \frac{\varepsilon_{\parallel}}{\varepsilon_{\perp}} - \frac{\varepsilon_{\parallel}}{\varepsilon_{\perp}} \sqrt{\frac{\varepsilon_a}{\varepsilon_{\parallel}}}, \quad (3.58)$$

$$\hat{U}_1 = \frac{8\pi\bar{e}}{\varepsilon_a} \ln \left( \frac{1}{\hat{\gamma}_1} \right) \quad (3.59)$$

Вновь, условие  $U > \tilde{U}$  отвечает за выполнение неравенства (3.47) на правой границе, а условие  $U < \hat{U}_1$  порождено требованием на вершину параболы.

Таким образом, можно видеть, что при

$$\tilde{U} < U < \hat{U}_1 \quad (3.60)$$

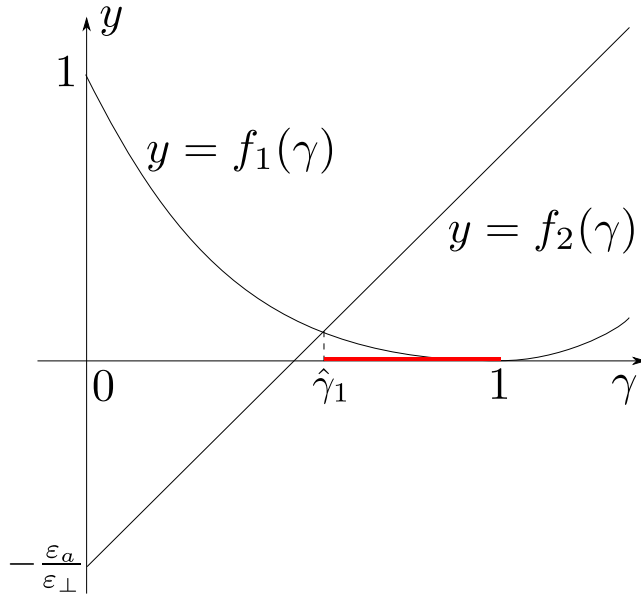


Рисунок 3.6 — Графики функций  $y = f_1(\gamma)$  и  $y = f_2(\gamma)$ . Цветом выделен участок на оси  $\gamma$ , соответствующий решению неравенства (3.57).

равновесной будет ориентационная структура, профиль  $y(z)$  которой обозначен на Рис. 3.5 сплошной линией. Подставляя в (3.38a) выражения для коэффициентов (3.40) с учётом  $\mu_0 = \varepsilon_{\perp}/\varepsilon_a$ ,  $\mu_L = \varepsilon_{\parallel}/\varepsilon_a$  и “нижнего” при  $\gamma$ , получим уравнение этого профиля в явном виде:

$$y(z) = -\frac{\varepsilon_{\perp}}{\varepsilon_a} \cdot \frac{(1-\gamma) \left( \frac{\varepsilon_{\parallel}}{\varepsilon_{\perp}} - \gamma \right)}{\gamma} \left[ \frac{z}{L} - \frac{1}{2} \cdot \frac{(1-\gamma)^2 + \frac{\varepsilon_a}{\varepsilon_{\perp}}}{(1-\gamma) \left( \frac{\varepsilon_{\parallel}}{\varepsilon_{\perp}} - \gamma \right)} \right] + \\ + \frac{\varepsilon_{\perp}}{\varepsilon_a} \cdot \frac{\left( \frac{\varepsilon_{\parallel}}{\varepsilon_{\perp}} - \gamma^2 \right)^2}{\gamma(1-\gamma) \left( \frac{\varepsilon_{\parallel}}{\varepsilon_{\perp}} - \gamma \right)}. \quad (3.61)$$

Заметим, что для того, чтобы интервал напряжений, задаваемый двойным неравенством (3.60), был непустым, также необходимо, чтобы выполнялось следующее неравенство:

$$\tilde{U} < \hat{U}_1 \quad (3.62)$$

Для дальнейшего анализа удобно ввести обозначение

$$\varkappa = \sqrt{\frac{\varepsilon_{\parallel}}{\varepsilon_a}} \quad (3.63)$$

и записать найденные выше характеристические напряжения  $\tilde{U}$ ,  $\hat{U}'$  и  $\hat{U}_1$  с его помощью:

$$\tilde{U} = \frac{8\pi\bar{e}}{\varepsilon_a} \ln \left( 1 + \frac{g_2 L}{2} \right), \quad (3.64a)$$

$$\hat{U}' = \frac{8\pi\bar{e}}{\varepsilon_a} \ln \frac{\varkappa + 1}{\varkappa - 1}, \quad (3.64б)$$

$$\hat{U}_1 = \frac{8\pi\bar{e}}{\varepsilon_a} \ln \frac{\varkappa + 1}{\varkappa}. \quad (3.64в)$$

Отметим, что  $\hat{U}_1 < \hat{U}'$ . Значит, остаётся три возможных варианта взаимного расположения напряжений:

$$\hat{U}_1 < \hat{U}' < \tilde{U}, \quad (3.65a)$$

$$\hat{U}_1 < \tilde{U} < \hat{U}', \quad (3.65б)$$

$$\tilde{U} < \hat{U}_1 < \hat{U}'. \quad (3.65в)$$

С учётом явно выраженных напряжений (3.64) эти неравенства можно переписать следующим образом:

$$\frac{2}{\varkappa} < \frac{4}{\varkappa - 1} < g_2 L, \quad (3.66a)$$

$$\frac{2}{\varkappa} < g_2 L < \frac{4}{\varkappa - 1}, \quad (3.66б)$$

$$g_2 L < \frac{2}{\varkappa} < \frac{4}{\varkappa - 1}. \quad (3.66в)$$

Видно, что параметром, который отвечает за то, какой сценарий будет реализован в данной системе (при данном наборе параметров), является  $g_2 L$ . Выясним, каким именно сценариям трансформации ориентационной структуры с изменением  $U$  соответствуют ситуации (3.66).

- Случай “сильного” сцепления,  $2/\varkappa < g_2 L$ .

При таких значениях параметра  $g_2 L$  будет реализован сценарий, схематически изображённый на Рис. 3.7. Видно, что с ростом  $U$  от  $U = 0$  сначала происходит небольшое искажение структуры вблизи середины ячейки, затем это искажение распространяется ближе к границам и становится всё сильнее. При этом ориентация на обеих границах остаётся планарной. Наконец, профиль  $y(z)$  касается “верхней границы” в середине ячейки при  $U = \hat{U}'$ . Дальнейшая эволюция ориентационной структуры ЖК требует рассмотрения профилей с участками насыщения, что будет сделано в части 3.1. На данном этапе эти стадии

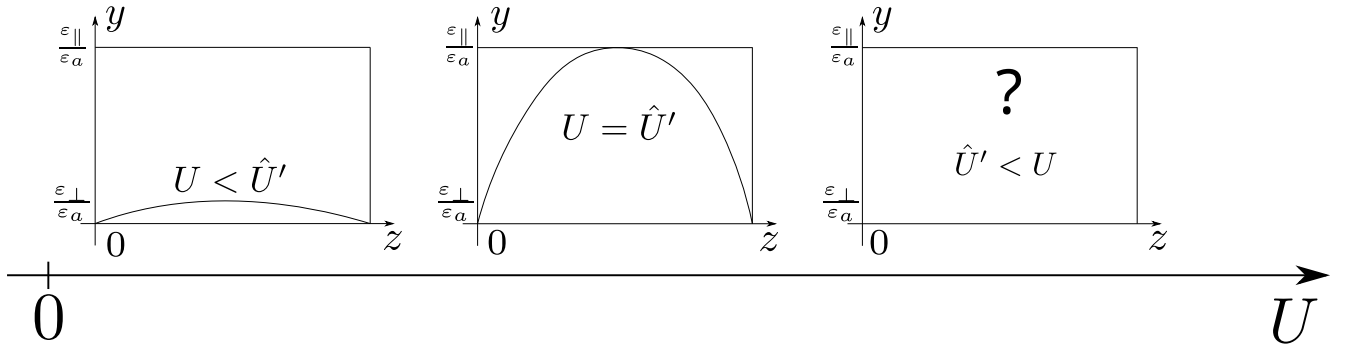


Рисунок 3.7 — Схематическое изображение трансформации профилей  $y(z)$  с ростом приложенного напряжения  $U$  в случае “сильного” сцепления, задаваемого неравенством (3.66a).

эволюции отмечены знаками вопроса. Отметим, что здесь и на остальных аналогичных схемах по оси напряжений отсутствует масштаб, она нанесена, чтобы показать, в каком порядке сменяются профили с ростом  $U$ . Кроме того, можно увидеть, что в данном сценарии не упоминается напряжение  $\hat{U}_1$ . Это происходит из-за того, что оно соответствует нарушению условия на вершину параболы для асимметричного профиля без участков насыщения, который в данном случае не может быть равновесным.

- Случай “среднего” сцепления,  $4/(\varkappa - 1) < g_2 L < 2/\varkappa$ .

При данных значениях параметра  $g_2 L$ , характеризующего сцепление с подложкой, реализуется сценарий, схематически изображённый на Рис. 3.8. В этом случае единственным возможным решением без участ-

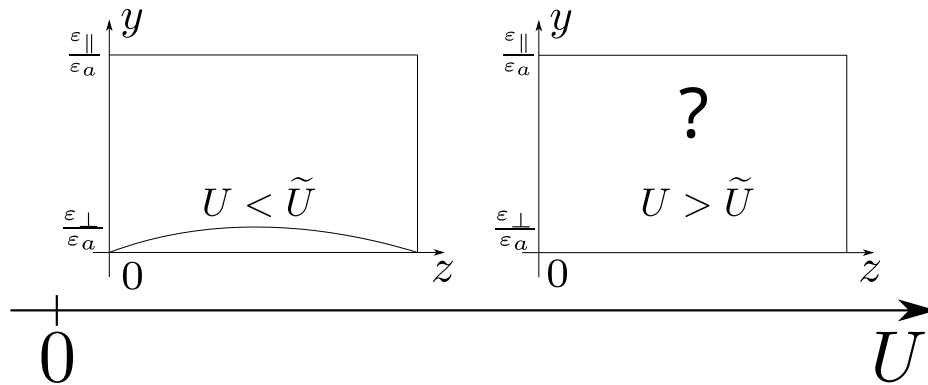


Рисунок 3.8 — Схематическое изображение трансформации профилей  $y(z)$  с ростом приложенного напряжения  $U$  в случае “среднего” сцепления, задаваемого неравенством (3.66б).

ков насыщения является профиль, задаваемый уравнением (3.54). Это происходит из-за того, что симметричный (относительно  $z = L/2$ )

параболический профиль является равновесным, пока выполнено неравенство

$$U < \min(\tilde{U}, \hat{U}'), \quad (3.67)$$

которое в данном случае сводится к  $U < \tilde{U}$ . Поясним, почему в данном случае при рассмотрении изменения ориентационной структуры с ростом  $U$  мы не упоминаем напряжения  $\hat{U}_1$  и  $\hat{U}'$ . Напряжение  $\hat{U}'$  отвечает за касание вершиной симметричного параболического профиля верхней границы,  $\varepsilon_{\parallel}/\varepsilon_a$  (эта ситуация изображена на второй диаграмме на Рис. 3.8), однако этого произойти не может, так как сначала будет достигнуто напряжение  $\tilde{U}$ , и условие на правой границе (3.38ж) нарушится для симметричного профиля. В свою очередь, напряжение  $\hat{U}_1$  разделяет случаи, когда вершина асимметричного профиля располагается вне ( $U < \hat{U}_1$ ) или внутри ( $U > \hat{U}_1$ , такой профиль уже не физичен) интервала  $(0, L)$ . Однако при переходе через  $\tilde{U}$  и потере устойчивости на правой границе оказывается, что  $U > \hat{U}_1$ , а значит, асимметричный профиль без участка насыщения не возникает.

- Случай “слабого” сцепления,  $g_2 L < 4/(\kappa - 1)$ .

Наконец, при данных значениях параметра  $g_2 L$  Здесь симметричный

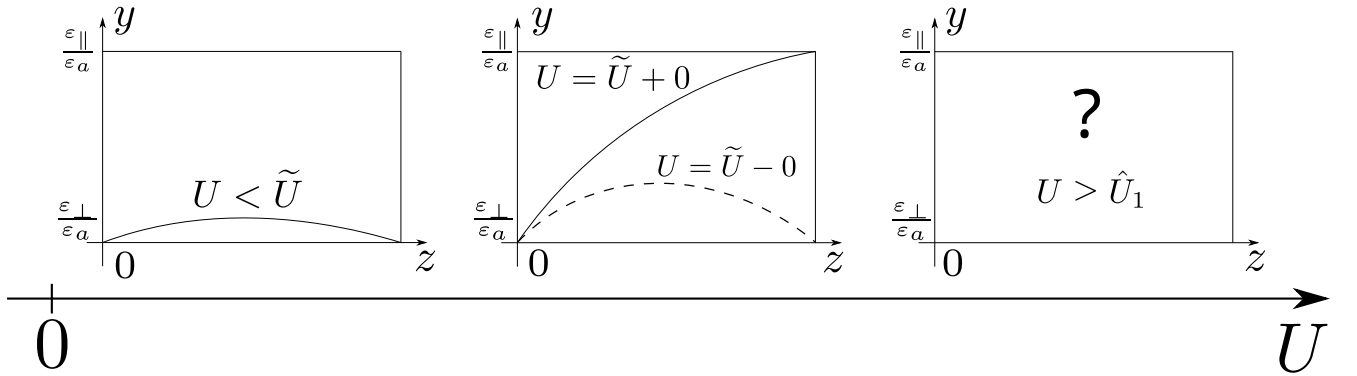


Рисунок 3.9 — Схематическое изображение трансформации профилей  $y(z)$  с ростом приложенного напряжения  $U$  в случае “слабого” сцепления, задаваемого неравенством (3.66в).

параболический профиль остаётся равновесным, пока напряжение  $U$  не превысит значения  $\tilde{U}$ , после чего равновесным становится параболический профиль с разными значениями на границах, задаваемый уравнением (3.61). В свою очередь, асимметричный профиль без участков насыщения остаётся равновесным до достижения следующего порогового напряжения,  $\hat{U}_1$ , после чего равновесным будет уже профиль

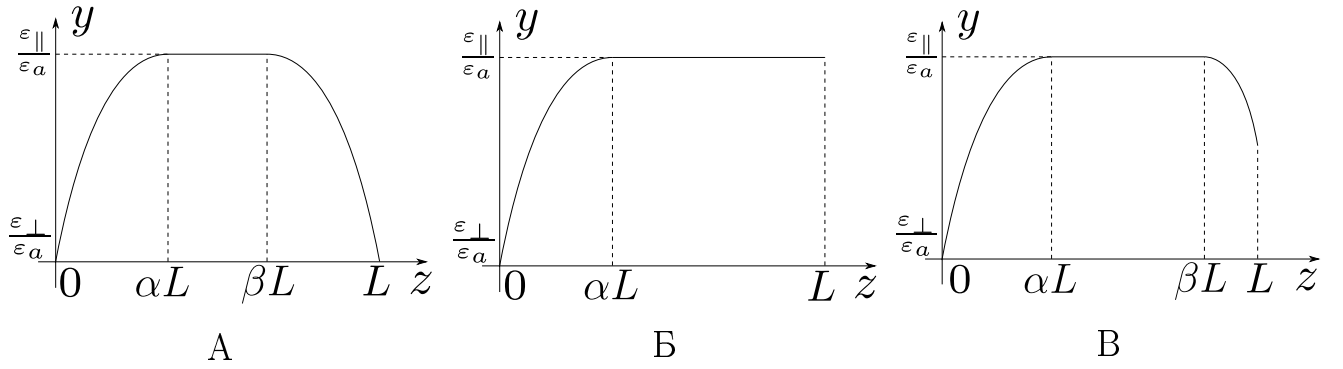


Рисунок 3.10 — Схематическое изображение различных видов профилей с участками насыщения, полученных при помощи численной минимизации свободной энергии.

с участками насыщения. В данном случае оказалось неупомянутым напряжение  $\hat{U}'$ , так как симметричный профиль теряет устойчивость на правой границе ещё до того, как его вершина коснётся границы  $y = \varepsilon_{\parallel}/\varepsilon_a$ .

### 3.3 Решения с участком насыщения

Рассмотрим решения с единственным участком насыщения. Расчёт равновесных профилей при помощи прямой минимизации свободной энергии показал, что при  $\varepsilon_a, U > 0$  возникают профили только трёх типов. Они схематически изображены на Рис. 3.10. Перед тем, как мы начнём получать их уравнения, отметим следующую особенность: в данном случае искомая функция  $y(z)$  состоит из нескольких частей. При этом на каждую точку сшивания  $z_0$  добавляется ещё по два условия: на функцию,  $y(z_0 - 0) = y(z_0 + 0)$ , и на производную,  $y'(z_0 - 0) = y'(z_0 + 0)$ .

**Случай А. Симметричный профиль с участком насыщения.** Будем искать решение следующего вида:

$$y(z) = \begin{cases} y_1(z), & z \in [0, \alpha L], \\ \frac{\varepsilon_{\parallel}}{\varepsilon_a}, & z \in (\alpha L, \beta L), \\ y_3(z), & z \in [\beta L, L]. \end{cases} \quad (3.68)$$

Отметим, что и  $y_1$ , и  $y_3$  должны решать одно и то же уравнение (3.16), а значит, обе они имеют вид (3.24) с общим коэффициентом  $a$  и отличаясь только коэффициентами  $b$  и  $c$  ( $b_1$ ,  $c_1$  и  $b_3$  и  $c_3$  соответственно). Запишем “геометрические” условия на функцию  $y_1(z)$ :

$$\begin{cases} y_1(z) = \frac{c_1}{4}(z + b_1)^2 - \frac{a^2}{c_1}, \end{cases} \quad (3.69a)$$

$$\begin{cases} y_1(0) = \frac{\varepsilon_{\perp}}{\varepsilon_a}, \end{cases} \quad (3.69б)$$

$$\begin{cases} y_1(\alpha L) = \frac{\varepsilon_{\parallel}}{\varepsilon_a}, \end{cases} \quad (3.69в)$$

$$\begin{cases} y_1'(\alpha L) = 0. \end{cases} \quad (3.69г)$$

Нетрудно видеть, что требование сшивания производных может быть выполнено тогда и только тогда, когда вершина параболы  $y_1(z)$  находится в точке с координатами  $(\alpha L, \varepsilon_{\parallel}/\varepsilon_a)$ , а значит,  $b_1 = -\alpha L$ . Подстановка (3.69) в (3.69б) и (3.69в) приводит к следующему виду  $y_1(z)$ :

$$y_1(z) = -\left(\frac{z}{\alpha L} - 1\right)^2 + \frac{\varepsilon_{\parallel}}{\varepsilon_a}. \quad (3.70)$$

Аналогичные рассуждения можно провести и для  $y_3(z)$ . Отметим, что условия  $y_1(0) = y_3(L)$  и  $y_1(\alpha L) = y_3(\beta L)$  приводят к тому, что параболы  $y_1(z)$  и  $y_3(z)$  оказываются симметричными относительно  $z = L/2$ . Это означает, в частности, что  $\alpha = 1 - \beta$ . Таким образом, для  $y_3(z)$  имеем:

$$y_3(z) = -\left(\frac{z}{\alpha L} - \frac{1}{\alpha} + 1\right)^2 + \frac{\varepsilon_{\parallel}}{\varepsilon_a}. \quad (3.71)$$

Кроме того, из этих же условий можно получить следующее выражение для  $a$ :

$$a = -\frac{2\kappa}{\alpha L}. \quad (3.72)$$

Для того, чтобы определить значение параметра  $\alpha$ , следует подставить полученную зависимость  $y(z)$  в условие самосогласования (3.15):

$$a \frac{(1 - 2\alpha)L}{2\kappa^2} = \ln \left( \gamma \frac{\kappa + 1}{\kappa - 1} \right). \quad (3.73)$$

Подставляя (3.72) в (3.73), можно получить окончательное выражение для  $1/\alpha$ :

$$\frac{1}{\alpha} = 2 - \kappa \ln \left( \gamma \frac{\kappa + 1}{\kappa - 1} \right). \quad (3.74)$$



Учитывая, что  $\alpha$  ограничена:

$$0 < \alpha \leq \frac{1}{2}, \quad (3.75)$$

можно заметить, что в данном случае существует ограничение на  $\gamma$ :

$$\gamma < \frac{\varkappa - 1}{\varkappa + 1}. \quad (3.76)$$

Это эквивалентно условию  $U > \hat{U}'$ , где  $\hat{U}'$  – найденное в предыдущей части напряжение, при котором симметричный параболический профиль касается верхней границы (см. Рис. 3.7).

Остаётся проверить, что выполнены граничные условия (3.38е) и (3.38ж). Подстановка  $y_1(z)$  в первое из них даёт

$$g_1(\varkappa - 1)(\varkappa + 1) > \frac{2}{\alpha L}(1 - \varkappa), \quad (3.77)$$

что верно всегда, поскольку  $\varkappa > 1$ . Подстановка  $y_3(z)$  во второе условие приводит к неравенству

$$g_2 L > \frac{2}{\alpha(\varkappa - 1)}. \quad (3.78)$$

Его можно интерпретировать следующим образом: так как  $\alpha = \alpha(U)$ , причём с ростом напряжения  $\alpha$  монотонно уменьшается, то будет существовать некоторое критическое значение напряжения  $\tilde{U}'$ , при котором неравенство обратится в равенство, и при превышении которого исследуемый профиль перестанет быть равновесным. Можно выписать явное выражение для этого порогового напряжения:

$$\tilde{U}' = \hat{U}' + \frac{8\pi\bar{e}}{\varepsilon_a} \left( \frac{g_2 L}{2} \cdot \frac{\varkappa - 1}{\varkappa} - \frac{2}{\varkappa} \right) \quad (3.79)$$

Таким образом, симметричный профиль с участком насыщения является равновесным, когда выполнены два условия на напряжение,  $\hat{U}' < U < \tilde{U}'$ , причём указанный интервал напряжений непустой тогда и только тогда, когда  $g_2 L > 4/(\varkappa - 1)$ .

Может, стоит привести итоговый вид функции  $y(z)$  в виде кусочно-заданной функции?

**Асимметричный профиль с насыщенной правой границей.** Рассмотрим профиль, схематически изображённый на Рис. 3.10 Б. Будем искать решение

вида

$$y(z) = \begin{cases} y_1(z), & z \in [0, \alpha L], \\ \frac{\varepsilon_{\parallel}}{\varepsilon_a}, & z \in (\alpha L, L]. \end{cases} \quad (3.80)$$

В данном случае необходимо найти единственную функцию  $y_1(z)$ , удовлетворяющую тем же условиям, что и одноимённая функция, найденная выше (система уравнений (3.69)); эти условия приводят к виду  $y_1(z)$ , повторяющему формулу (3.70):

$$y_1(z) = -\left(\frac{z}{\alpha L} - 1\right)^2 + \frac{\varepsilon_{\parallel}}{\varepsilon_a}. \quad (3.81)$$

Опять же, из этих условий можно получить выражение для  $a$ :

$$a = -\frac{2\kappa}{\alpha L}. \quad (3.82)$$

Подставляя (3.81) в условие самосогласования (3.15), получаем ещё одно уравнение:

$$a \frac{(1 - \alpha)L}{2\kappa^2} = \ln \left( \gamma \frac{\kappa + 1}{\kappa} \right). \quad (3.83)$$

Совмещая (3.82) и (3.83), получаем выражение для  $\alpha$ :

$$\alpha = \left( 1 - \kappa \ln \left( \gamma \frac{\kappa + 1}{\kappa} \right) \right)^{-1}. \quad (3.84)$$

В данном случае мы также имеем ограничение на  $\alpha$ :

$$0 < \alpha \leq 1. \quad (3.85)$$

Видно, что это условие выполнено при  $U > \hat{U}_1$ , где  $\hat{U}_1$  определено выражением (3.66в).

Наконец, проверим, когда выполняется условия на границах. подстановка  $y_1(z)$  в (3.38е) приводит к тому же выражению, что было получено при рассмотрении предыдущего случая, а значит, и вывод совпадает: условие на границе  $z = 0$  выполнено всегда. Далее, подставляя (3.80) в (3.38ж), получаем неравенство:

$$g_2 \kappa^2 + a \leq 0, \quad (3.86)$$

откуда, с учётом (3.82) и (3.84), можно получить, что существует критическое напряжение  $\hat{U}_2$  такое, что при  $U > \hat{U}_2$  условие (3.84) будет выполнено. Приведём явный вид выражения для  $\hat{U}_2$ :

$$\hat{U}_2 = \hat{U}_1 + \frac{8\pi\bar{e}}{\varepsilon_a} \cdot \frac{1}{\kappa} \left( \frac{g_2 L}{2} - 1 \right) \quad (3.87)$$

Отметим, что при рассмотрении данного вида профилей не возникает условия на  $g_2L$ , а значит, такой профиль возникает в системе с любым значением  $g_2L$  при достаточно большом напряжении ( $U > \hat{U}_2$ ).

**Асимметричный профиль с ненасыщенной правой границей.** Рассмотрим профиль, схематически изображённый на Рис. 3.10 В. Выпишем все уравнения, которым должно удовлетворять решение:

$$\left\{ \begin{array}{l} y(0) = \frac{\varepsilon_{\perp}}{\varepsilon_a}, \\ y(\alpha L) = \frac{\varepsilon_{\parallel}}{\varepsilon_a}, \\ y(\beta L) = \frac{\varepsilon_{\parallel}}{\varepsilon_a}, \\ y'(\alpha L) = 0, \\ y'(\beta L) = 0, \\ aJ^{-1} = J_1 - \frac{U}{4\pi\bar{e}}, \\ y'(L) + a + g_2y(L) = 0, \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} (3.88a) \\ (3.88б) \\ (3.88в) \\ (3.88г) \\ (3.88д) \\ (3.88е) \\ (3.88ж) \end{array}$$

и все неравенства:

$$\left\{ \begin{array}{l} 0 < \alpha < \beta < L, \\ y(L) \geq \frac{\varepsilon_{\perp}}{\varepsilon_a}, \\ -(y'(0) + a) + g_1y(0) \geq 0. \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} (3.89a) \\ (3.89б) \\ (3.89в) \end{array}$$

Решение будем искать в виде

$$y(z) = \begin{cases} \frac{c_1}{4} (z + b_1)^2 - \frac{a^2}{c_1}, & z \in [0, \alpha L], \\ \frac{\varepsilon_{\parallel}}{\varepsilon_a}, & z \in [\alpha L, \beta L], \\ \frac{c_2}{4} (z + b_2)^2, & z \in (\beta L, L]. \end{cases} \quad (3.90)$$

Учёт уравнений (3.88а) - (3.88д) позволяет записать  $y_1(z)$  и  $y_3(z)$  в следующем виде:

$$y_1(z) = - \left( \frac{z}{\alpha L} - 1 \right)^2 + \frac{\varepsilon_{\parallel}}{\varepsilon_a} \quad (3.91)$$

$$y_3(z) = - \left( \frac{z}{\alpha L} - \frac{\beta}{\alpha} \right)^2 + \frac{\varepsilon_{\parallel}}{\varepsilon_a}, \quad (3.92)$$

Кроме того, остаётся справедливым равенство (3.82). Отметим, что подстановка (3.92) в (3.89б) приводит к следующему неравенству:

$$\alpha \geq 1 - \beta. \quad (3.93)$$

Далее, как и в предыдущих случаях, условие на границе  $z = 0$  (неравенство (3.89в)) оказывается выполненным всегда. Напротив, подставляя (3.92) в условие на границе  $z = L$  (уравнение (3.88ж)), получаем следующее равенство:

$$(1 - \beta) - \varkappa\alpha = -\frac{2}{g_2 L}. \quad (3.94)$$

Наконец, подстановка (3.91) в условие самосогласования (3.88е) после несложных преобразований и учёта связи  $\alpha$  и  $\beta$  (3.94) приводит к уравнению следующего вида;

$$\frac{k}{x} + \ln x = A(U), \quad (3.95)$$

где введены обозначения:

$$x = \alpha, \quad (3.96)$$

$$k = \frac{1}{\varkappa} \left( \frac{2}{g_2 L} + 1 \right), \quad (3.97)$$

$$A(U) = \frac{\varepsilon_a U}{8\pi\bar{e}} + \frac{1}{\hat{\gamma}_1} - \ln \left( \frac{g_2 L}{2} (\varkappa + 1) \right). \quad (3.98)$$

Уравнение (3.95) решается численно, однако можно найти, когда это решение существует и удовлетворяет нашим требованиям.

Возможны два случая:  $k > 1$  и  $k < 1$ . Графики функции  $f(x) = \ln(x) + k/x$  для обоих случаев приведены на Рис. 3.11. Нетрудно видеть, что выполняются следующие утверждения:

$$A(0) < \ln k + 1, \quad k \in \left( \frac{1}{\varkappa}, 1 \right) \quad (3.99)$$

$$A(0) < k, \quad k > 1. \quad (3.100)$$

Отсюда следует, что при  $U = 0$  решений у уравнения (3.95) быть не может. Однако с ростом  $U$  горизонтальная прямая  $y = A(U)$  начинает монотонно подниматься, и при некотором  $U$  решение у уравнения (3.95) появится.

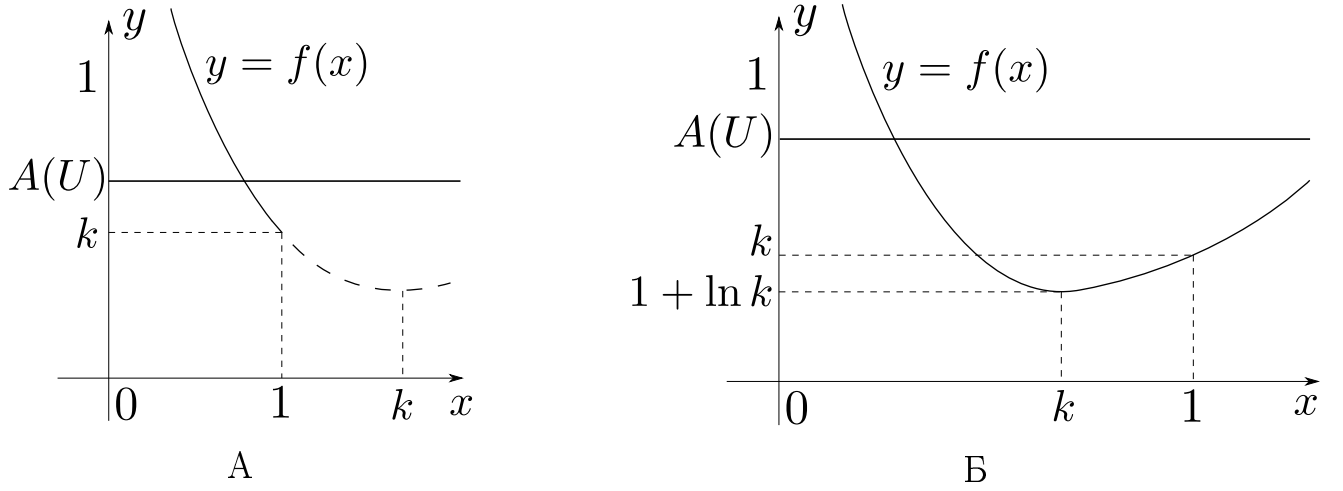


Рисунок 3.11 — Графики функции  $y = f(x)$  в случае  $k > 1$  (А) и  $k < 1$  (Б).

Рассмотрим условия, которые наложены на решение:

$$\begin{cases} \alpha \geq 1 - \beta, & (3.101a) \\ \alpha < \beta, & (3.101б) \\ 1 - \beta \geq 0. & (3.101в) \end{cases}$$

С учётом связи (3.94) их можно записать только для  $\alpha$ :

$$\begin{cases} \alpha \leq \frac{k\kappa - 1}{\kappa - 1}, & (3.102a) \\ \alpha < \frac{k\kappa}{\kappa + 1}, & (3.102б) \\ \alpha > k - \frac{1}{\kappa}. & (3.102в) \end{cases}$$

Заметим, что из неравенства (3.102б) следует, что искомая точка пересечения графика функции  $y = f(x)$  и прямой  $y = A(U)$ , удовлетворяющая всем условиям, находится левее минимума функции  $f(x)$  ( $x = k$ ). Таким образом, нужно смотреть лишь за пересечением  $y = A(U)$  с левой “ветвью”  $y = f(x)$ . Рис. 3.12 иллюстрирует, какие неравенства из системы (3.102) являются определяющими при различных значениях параметра  $k$  (и, соответственно,  $g_2L$ ). Отметим, что отмеченные допустимые интервалы на Рис. 3.12 являются интервалами для  $\alpha$ . Чтобы найти соответствующие им интервалы напряжений, нужно найти проекцию соответствующего интервала на ось ординат (через график функции  $y = f(x)$ ), а затем вычислить, в каких пределах должно меняться напряжение  $U$ , чтобы  $A(U)$  находилась в обозначенных пределах.

На Рис. 3.13 представлена полученная схема эволюции равновесного профиля в зависимости от значения параметра  $g_2L$ .

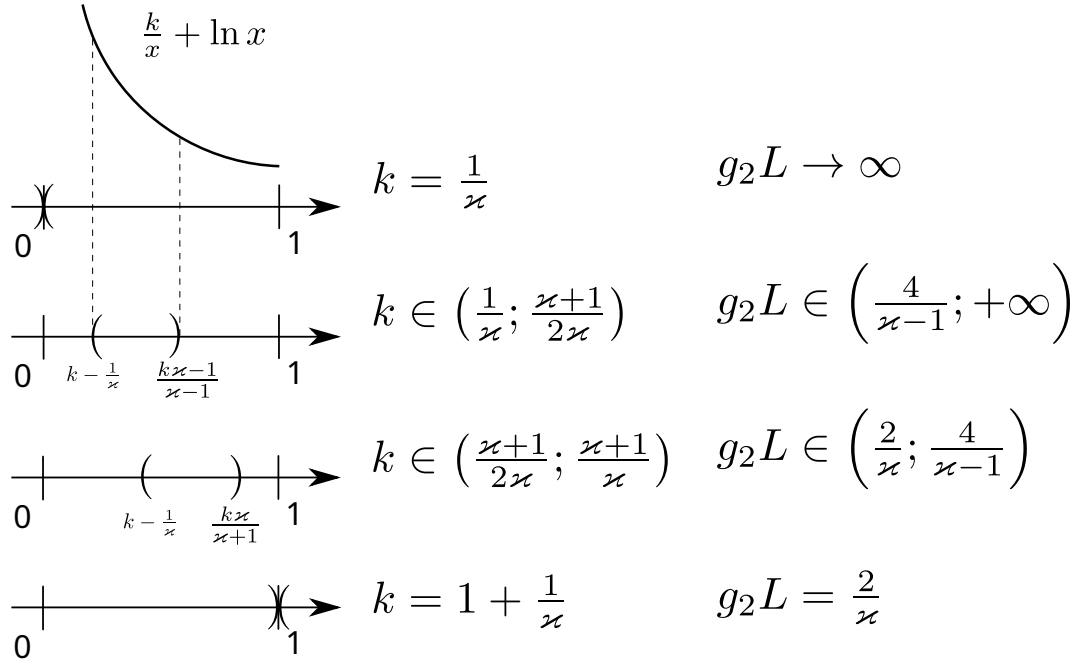


Рисунок 3.12 — Графики функций  $y = f_1(\gamma)$  и  $y = f_2(\gamma)$ . Цветом выделен участок на оси  $\gamma$ , соответствующий решению неравенства (3.57).

### 3.4 Сравнение аналитических результатов с расчётными

В заключение приведём сравнение профилей, рассчитанных при помощи полной модели свободной энергии (x.xx) и профилей, полученных аналитически на основе анализа сокращённой модели свободной энергии (y.yu).

Методика поиска равновесной ориентационной структуры ЖК в ячейке путём численной минимизации функционала свободной энергии аналогична таковой, применённой в главе 2. При этом был использован следующий набор параметров системы:  $L = 0.006$  см,  $\varepsilon_{\perp} = 7.2$ ,  $\varepsilon_{\parallel} = 16.2$ ,  $\varepsilon_a = 9$ ,  $\bar{e} = 0.01$  Фр/см. Было обнаружено, что, в зависимости от значения  $g_2L$ , трансформация ориентационной структуры с изменением приложенного напряжения  $U$  может происходить по трём различным сценариям, что соответствует результату, полученному аналитически. На Рис. 3.14 показана трансформация ориентационной структуры при достаточно небольшой энергии сцепления с правой подложкой  $W_{\theta}^{(2)}$ , когда выполнено следующее неравенство:

$$g_2L < \frac{2}{\kappa}, \quad (3.103)$$

где  $\kappa = \sqrt{\varepsilon_{\parallel}/\varepsilon_a}$ . Отметим, что кривая 1 соответствует области малых напряжений  $U$ , и для неё требование (3.1) не выполнено. Тем не менее, она оказывается

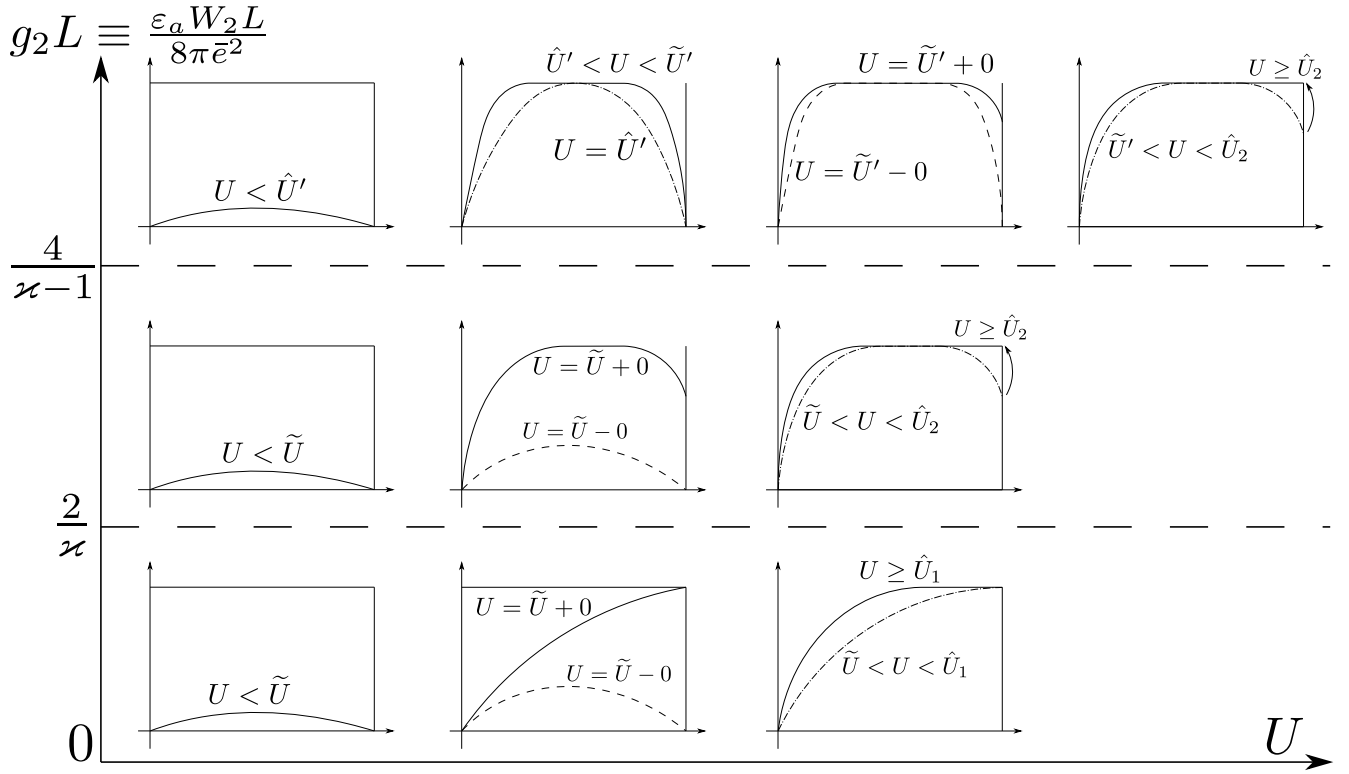


Рисунок 3.13 — Схема переходов между профилями различных типов в зависимости от значения параметра  $g_2 L$ .

близка к зависимости, полученной при помощи численной минимизации полной свободной энергии (1.31). Можно также увидеть значительный скачкообразный переход между кривыми 1 и 2. Этот переход происходит при достижении напряжения

$$\tilde{U}_1 = \frac{8\pi\bar{e}}{\varepsilon_a} \ln \left( 1 + \frac{g_2 L}{2} \right). \quad (3.104)$$

Следует отметить, что для использованных параметров  $g_2 L \ll 1$ , следовательно, в этом случае  $\tilde{U}_1 \simeq W_\theta^{(2)} L / (2\bar{e})$ . С дальнейшим ростом  $U$  ориентационная структура меняется без скачков, и при достижении напряжения

$$U_1 = \frac{8\pi\bar{e}}{\varepsilon_a} \ln \left( \frac{\kappa + 1}{\kappa} \right), \quad (3.105)$$

в объёме ячейки возникает область насыщения, в которой  $\theta = 0$ , а при увеличении приложенного напряжения эта область увеличивается (см. кривые 5 и 6 на Рис. 3.14).

**“Среднее сцепление”** В случае, когда константа сцепления с границами удовлетворяет неравенствам

$$\frac{2}{\kappa} < g_2 L < \frac{4}{\kappa - 1}, \quad (3.106)$$

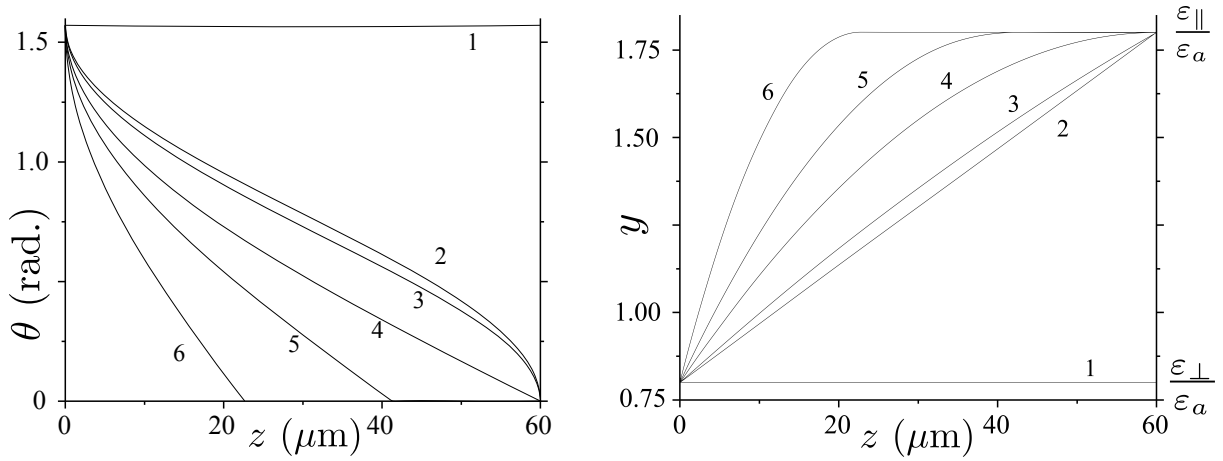


Рисунок 3.14 — Графики зависимостей  $\theta(z)$  (слева) и  $y(z)$  (справа), полученные в случае слабого сцепления с правой подложкой, когда выполнено неравенство (3.103). Модули сцепления с границами для каждого графика:

$W_{\theta}^{(1)} = 0.0025$  эрг/см<sup>2</sup>,  $W_{\theta}^{(2)} = 5 \times 10^{-4}$  эрг/см<sup>2</sup>. Соответствие линий и приложенного напряжения: 1 –  $U = 0.04$  В, 2 –  $U = 0.05$  В, 3 –  $U = 1.5$  В, 4 –  $U = 4.67$  В, 5 –  $U = 7.5$  В, 6 –  $U = 15$  В.

трансформация ориентационной структуры происходит по другому сценарию, что показано на Рис. 3.15. При этом изменение ориентационной структуры при

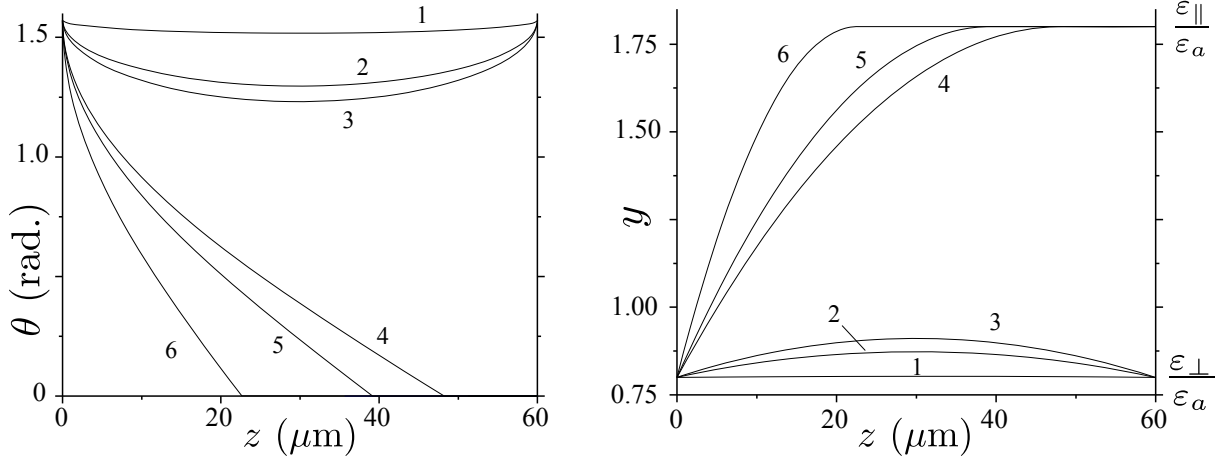


Рисунок 3.15 — Графики зависимостей  $\theta(z)$  (слева) и  $y(z)$  (справа), полученные в случае среднего сцепления с подложкой, когда выполнено неравенство (3.106). Значения модулей сцепления с подложкой для всех кривых:  $W_{\theta}^{(1)} = 0.25$  эрг/см<sup>2</sup>,  $W_{\theta}^{(2)} = 0.10$  эрг/см<sup>2</sup>. Соответствие линий и приложенного напряжения: 1 –  $U = 1$  В, 2 –  $U = 5$  В, 3 –  $U = 6.1$  В, 4 –  $U = 6.2$  В, 5 –  $U = 8$  В, 6 –  $U = 15$  В.

небольших напряжениях  $U$  аналогично происходившим в предыдущем случае, однако когда напряжение достигает значения  $\tilde{U}_1$ , происходит скачкообразный



переход между кривыми 3 и 4. Важной особенностью этого случая является то, что область насыщения в объёме ячейки появляется сразу после перехода. Как и в предыдущем случае, при дальнейшем увеличении напряжения область насыщения в объёме растёт.

“Сильное зацепление”

АО: В описании этого случая ошибка. При отрыве границы она не сразу оказывается насыщенной, и там есть ещё одно характеристическое напряжение

Наконец, когда энергия сцепления с подложкой удовлетворяет неравенству

$$g_2 L > \frac{4}{\varkappa - 1}, \quad (3.107)$$

наблюдается третий сценарий эволюции ориентационной структуры. Этот сце-

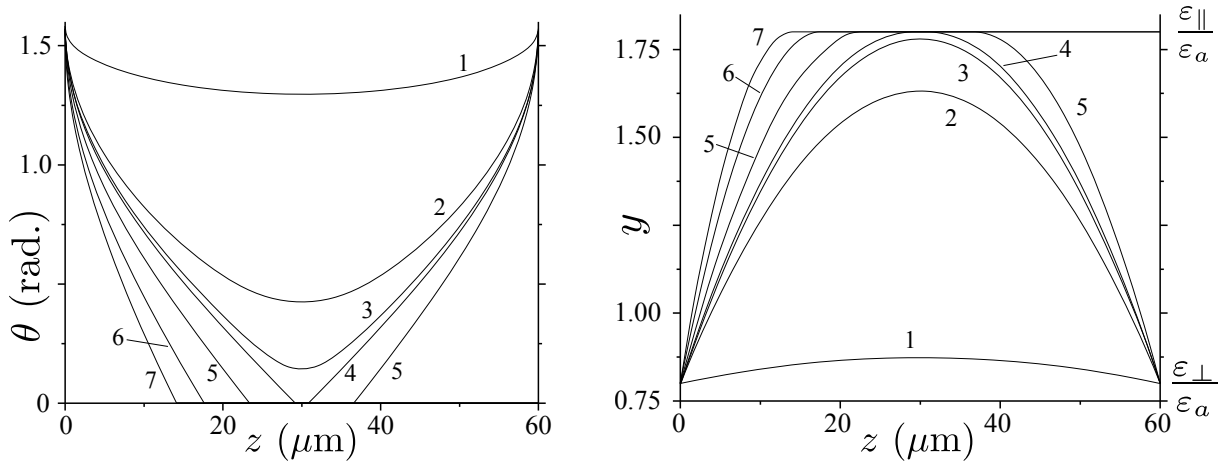


Рисунок 3.16 — Графики зависимостей  $\theta(z)$  (слева) и  $y(z)$  (справа), полученные для случая сильного сцепления с подложкой, когда выполнено неравенство (3.107). Модули сцепления с подложкой для всех кривых:  $W_\theta^{(1)} = 1.75$  эрг/см<sup>2</sup>,  $W_\theta^{(2)} = 0.7$  эрг/см<sup>2</sup>. Соответствие линий и приложенного напряжения: 1 –  $U = 5$  В, 2 –  $U = 15$  В, 3 –  $U = 16$  В, 4 –  $U = 16.5$  В, 5 –  $U = 19.65$  В, 6 –  $U = 19.75$  В, 7 –  $U = 25$  В.

нарий показан на Рис. 3.16. Опять же, трансформации при малых напряжениях  $U$  аналогичны предыдущим случаям. Однако когда напряжение достигает значения

$$U_2 = \frac{8\pi\bar{e}}{\varepsilon_a} \ln \left( \frac{\varkappa + 1}{\varkappa - 1} \right), \quad (3.108)$$

в середине ячейки появляется область насыщения (кривые 4 и 5 на Рис. 3.16). С ростом  $U$  эта область продолжает симметрично расширяться от центра ячейки

до тех пор, пока напряжение не достигнет значения

$$\tilde{U}_2 = U_2 + \frac{8\pi\bar{e}}{\varepsilon_a} \left( \frac{g_2 L}{2} \cdot \frac{\varkappa}{\varkappa - 1} \cdot \frac{\varepsilon_{\perp}}{\varepsilon_{\parallel}} - \frac{2}{\varkappa} \right). \quad (3.109)$$

Когда это происходит, ориентационная структура скачком меняется от описываемой линией 5 на Рис. 3.16 до описываемой кривой 6 (при указанном наборе параметров пороговое напряжение составляет  $U_2 = 19.68$  В). Интересно, что если сравнить графики 5 и 6, можно увидеть, что в результате переходе область насыщения расширилась и справа, и слева от центра. При дальнейшем увеличении  $U$  область насыщения также увеличивается (см. линии 6 и 7 на Рис. 3.16).

полученные результаты показывают, что в ячейках с большим усреднённым флексоэлектрическим коэффициентом возможны три сценария эволюции ориентационной структуры с ростом приложенного напряжения. При этом то, какой сценарий будет реализовываться, зависит от энергии сцепления с одной из границ. Наши результаты также показали, что в таких ЖК-ячейках возможны разнообразные скачкообразные ориентационные переходы, а также переходы к насыщению. Такие свойства могут быть использованы при разработке переключателей нового типа.

## Список литературы

1. *Fréedericksz V., Repiewa A.* Theoretisches und Experimentelles zur Frage nach der Natur der anisotropen Flüssigkeiten [текст] // Zeitschrift für Physik. — 1927. — июль. — т. 42, № 7. — с. 532—546. — URL: <https://doi.org/10.1007/BF01397711>.
2. *Fréedericksz V., Zolina V.* Forces causing the orientation of an anisotropic liquid [текст] // Trans. Faraday Soc. — 1933. — т. 29, вып. 140. — с. 919—930. — URL: <http://dx.doi.org/10.1039/TF9332900919>.
3. *Blinov L. M., Chigrinov V. G.* Electrooptic Effects in Liquid Crystal Materials [текст]. — Springer-Verlag New York, Inc., 1994.
4. Optical phased array technology [текст] / P. F. McManamon [и др.] // Proceedings of the IEEE. — 1996. — февр. — т. 84, № 2. — с. 268—298.
5. Technology for electronically varying helmet visor tint [текст] / B. Taheri [и др.] // Proc. SPIE. — 2000. — т. 4021. — с. 114—119. — URL: <http://dx.doi.org/10.1117/12.389139>.
6. *Muñoz F. A., Palffy-Muhoray P., Taheri B.* Ultraviolet lasing in cholesteric liquid crystals [текст] // Opt. Lett. — 2001. — июнь. — т. 26, № 11. — с. 804—806. — URL: <http://ol.osa.org/abstract.cfm?URI=ol-26-11-804>.
7. *Schmidtke J., Stille W., Finkelmann H.* Defect Mode Emission of a Dye Doped Cholesteric Polymer Network [текст] // Phys. Rev. Lett. — 2003. — февр. — т. 90, вып. 8. — с. 083902. — URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.90.083902>.
8. *Senyuk B. I., Smalyukh I. I., Lavrentovich O. D.* Switchable two-dimensional gratings based on field-induced layer undulations in cholesteric liquid crystals [текст] // Opt. Lett. — 2005. — февр. — т. 30, № 4. — с. 349—351. — URL: <http://ol.osa.org/abstract.cfm?URI=ol-30-4-349>.
9. *Jiang Y., Shin Y., Yang D.-K.* Dual-Mode Switchable Liquid-Crystal Window [текст] // Phys. Rev. Applied. — 2019. — нояб. — т. 12, вып. 5. — с. 054037. — URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevApplied.12.054037>.

10. *Pikin S. A.* Structural Transformations in Liquid Crystals [текст]. — New York : Gordon & Breach, 1991. — URL: [https://books.google.ru/books?id=9yT60Ioh%5C\\_LwC](https://books.google.ru/books?id=9yT60Ioh%5C_LwC).
11. *Gennes P.-G. de, Prost J.* The Physics of Liquid Crystals [текст]. т. 83. — 2nd. — Oxford : Clarendon Press, 1993. — (International Series of Monographs on Physics). — URL: <https://global.oup.com/academic/product/the-physics-of-liquid-crystals-9780198517856?cc=us&lang=en&>.
12. *Stewart I. W.* The Static and Dynamic Continuum Theory of Liquid Crystals: A Mathematical Introduction [текст]. — London : Taylor & Francis, 2004. — (Liquid crystals book series). — URL: <https://www.crcpress.com/The-Static-and-Dynamic-Continuum-Theory-of-Liquid-Crystals-A-Mathematical-Stewart/p/book/9780748408962>.
13. *Brown C. V., Mottram N. J.* Influence of flexoelectricity above the nematic Fréedericksz transition [текст] // Phys. Rev. E. — 2003. — сент. — т. 68, № 3. — с. 031702.
14. *Smith A. A. T., Brown C. V., Mottram N. J.* Theoretical analysis of the magnetic Fréedericksz transition in the presence of flexoelectricity and ionic contamination [текст] // Phys. Rev. E. — 2007. — апр. — т. 75, № 4. — с. 041704.
15. *Makarov D. V., Zakhlevnykh A. N.* Tricritical phenomena at the Fréedericksz transition in ferronematic liquid crystals [текст] // Phys. Rev. E. — 2010. — май. — т. 81, № 5. — с. 051710.
16. *Garbovskiy Y., Glushchenko A.* Ferroelectric Nanoparticles in Liquid Crystals: Recent Progress and Current Challenges [текст] // NANOMATERIALS. — ST ALBAN-ANLAGE 66, CH-4052 BASEL, SWITZERLAND, 2017. — NOV. — т. 7, № 11.
17. Electro-optical switching in twisted nematic samples doped with gold nanorods [текст] / R. V. dos Santos [и др.] // JOURNAL OF MOLECULAR LIQUIDS. — RADARWEG 29, 1043 NX AMSTERDAM, NETHERLANDS, 2019. — DEC 1. — т. 295.

18. Photoswitchable Bent-Core Nematic Liquid Crystals with Methylated Azobenzene Wing Exhibiting Optic-Field-Enhanced Freedericksz Transition Effect [текст] / N. Begum [и др.] // JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C. — 1155 16TH ST, NW, WASHINGTON, DC 20036 USA, 2020. — JAN 9. — т. 124, № 1. — 874—885.
19. *Deuling H. J.* Deformation of Nematic Liquid Crystals in an Electric Field [текст] // Mol. Cryst. Liq. Cryst. — 1972. — т. 19, № 2. — с. 123—131. — URL: <http://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1080/15421407208083858>.
20. *Gruler H., Scheffer T. J., Meier G.* Elastic Constants of Nematic Liquid Crystals [текст] // Z. Naturforsch. — 1972. — т. 27a. — с. 966—975. — URL: [http://zfn.mpg.de/data/Reihe\\_A/27/ZNA-1972-27a-0966.pdf](http://zfn.mpg.de/data/Reihe_A/27/ZNA-1972-27a-0966.pdf).
21. *Cheng J., Thurston R. N., Berreman D. W.* Boundary-layer model of field effects in a bistable liquid-crystal geometry [текст] // J. Appl. Phys. — 1981. — т. 52, № 4. — с. 2756—2765. — URL: <http://link.aip.org/link/?JAP/52/2756/1>.
22. *Arakelyan S. M., Karayan A. S., Chilingaryan Y. S.* Freedericksz transition in nematic liquid crystals in static and light fields: general features and anomalies [текст] // Sov. Phys. Dokl. — 1984. — т. 29. — с. 202.
23. *Napoli G.* Weak anchoring effects in electrically driven Freedericksz transitions [текст] // J. Phys. A: Math. Gen. — 2006. — т. 39, № 1. — с. 11. — URL: <http://stacks.iop.org/0305-4470/39/i=1/a=002>.
24. *Guyon E.* Second-Order Phase Transitions: Models and Analogies [текст] // Am. J. Phys. — 1975. — т. 43, № 10. — с. 877. — URL: <http://dx.doi.org/10.1119/1.9970>.
25. *Val'kov A. Y., Aksenova E. V., Romanov V. P.* First-order and continuous Fréedericksz transitions in cholesteric liquid crystals [текст] // Phys. Rev. E. — 2013. — февр. — т. 87, вып. 2. — с. 022508. — URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.87.022508>.
26. *Meyer R. B.* Piezoelectric Effects in Liquid Crystals [текст] // Phys. Rev. Lett. — 1969. — май. — т. 22, вып. 18. — с. 918—921. — URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.22.918>.
27. *Prost, J., Marcerou, J.P.* On the microscopic interpretation of flexoelectricity [текст] // J. Phys. France. — 1977. — т. 38, № 3. — с. 315—324. — URL: <https://doi.org/10.1051/jphys:01977003803031500>.

28. *Oseen C. W.* The theory of liquid crystals [текст] // Trans. Faraday Soc. — 1933. — т. 29, вып. 140. — с. 883—899. — URL: <http://dx.doi.org/10.1039/TF9332900883>.
29. *Zocher H.* The effect of a magnetic field on the nematic state [текст] // Trans. Faraday Soc. — 1933. — т. 29, вып. 140. — с. 945—957. — URL: <http://dx.doi.org/10.1039/TF9332900945>.
30. *Frank F. C. I.* Liquid crystals. On the theory of liquid crystals [текст] // Discuss. Faraday Soc. — 1958. — т. 25, вып. 0. — с. 19—28. — URL: <http://dx.doi.org/10.1039/DF9582500019>.
31. *Rapini A., Papoular M.* DISTORSION D'UNE LAMELLE NÉMATIQUE SOUS CHAMP MAGNÉTIQUE CONDITIONS D'ANCRAGE AUX PAROIS [текст] // J. de Phys. Colloq. — 1969. — нояб. — т. 30, № C—4. — с. 54—56.
32. *Belyakov V. A., Stewart I. W., Osipov M. A.* Dynamics of jumpwise temperature pitch variations in planar cholesteric layers for a finite strength of surface anchoring [текст] // Journal of Experimental and Theoretical Physics. — 2004. — июль. — т. 99, № 1. — с. 73—82. — URL: <https://doi.org/10.1134/1.1787080>.
33. *Belyakov V. A., Osipov M. A., Stewart I. W.* Nonsingular walls in plane cholesteric layers [текст] // Journal of Physics: Condensed Matter. — 2006. — апр. — т. 18, № 19. — с. 4443—4460. — URL: <https://doi.org/10.1088%2F0953-8984%2F18%2F19%2F001>.
34. *Belyakov V. A., Stewart I. W., Osipov M. A.* Surface anchoring and dynamics of jump-wise director reorientations in planar cholesteric layers [текст] // Phys. Rev. E. — 2005. — май. — т. 71, вып. 5. — с. 051708. — URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.71.051708>.
35. *Feynman R. P.* Statistical Mechanics: A Set Of Lectures [текст]. — 2nd. — New York : Westview Press, 1998. — (Advanced Book Classics). — URL: <https://www.routledge.com/Statistical-Mechanics-A-Set-Of-Lectures/Feynman/p/book/9780201360769>.
36. *Val'kov A. Y., Romanov V. P., Romanov M. V.* Fluctuations in bounded cells of liquid crystals in an external field [текст] // JETP. — 2001. — т. 93, вып. 2. — с. 344—362. — URL: <http://dx.doi.org/10.1134/1.1402735>.

37. *Kiselev A. D.* Saddle-splay-term-induced orientational instability in nematic-liquid-crystal cells and director fluctuations at substrates [текст] // Phys. Rev. E. — 2004. — апр. — т. 69, вып. 4. — с. 041701. — URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.69.041701>.
38. *Landau L. D., Lifshitz E. M.* Statistical Physics, Part 1 [текст]. т. 5. — 3rd. — Oxford : Butterworth-Heinemann, 2000. — (Course of Theoretical Physics). — URL: <https://www.elsevier.com/books/title/author/9780080570464>.
39. *Oskirko A. D., Ul'yanov S. V., Val'kov A. Y.* Influence of flexoelectric effect on the Fréedericksz transition in chiral nematic liquid crystals [текст] // Phys. Rev. E. — 2018. — июль. — т. 98, вып. 1. — с. 012702.
40. *Borwein J. M., Lewis A. S.* Convex Analysis and Nonlinear Optimization [текст] //. — 2nd. — New York : Springer, 2006. — гл. 7. с. 153—177.