

11-Физика жидких кристаллов

Балдин Данил Валерьевич, аспирант
Пермский Государственный Университет, физический
Индукцированные магнитным полем переходы в ферронематике при изменении характера поверхностного сцепления

Научный руководитель: Захлевных Александр Николаевич, д. ф.-м. н, Декан физического факультета, Пермский Государственный Университет
Адрес: 614068, г. Пермь, ул. Ленина, 69-35
E-Mail: Baldin@zmuperm.ru стр. 734

Денисова Ольга Аркадьевна, доцент
Башкирский государственный университет, Химико-технологический
Распространение поперечной вязкой волны в холестерических жидких кристаллах
Научный руководитель: Чувывров Александр Николаевич, д. ф.-м. н, Профессор, Башкирский государственный университет
Адрес: 450077, г. Уфа, ул. Амурская, д. 52, кв. 2
E-Mail: Chuvyrov@bashnet.ru стр. 736

Денисова Ольга Аркадьевна, доцент
Башкирский государственный университет, Химико-технологический
Эффект поляризации, возникающей под действием периодического сдвига в окрестности фазового перехода нематический жидкий кристалл - изотропная жидкость
Научный руководитель: Чувывров Александр Николаевич, д. ф.-м. н, Профессор, Башкирский государственный университет
Адрес: 450077, г. Уфа, ул. Амурская, д. 52, кв. 2
E-Mail: Chuvyrov@bashnet.ru стр. 737

Ижбердина Лейсан Тагтровна, аспирант
Уфимский государственный нефтяной технический университет (УГНТУ), Автоматизация производственных процессов
Вихри в жидких кристаллах
Адрес: 450039, респ. Башкортостан, г. Уфа, ул. Ферина, 10/1-105
E-Mail: Leisan-22@yandex.ru стр. 739

Лаврик Илья Николаевич, 5 курс
Красноярский государственный университет, физический
Рассеяние света в капсулированных полимером нематических жидких кристаллах
Научный руководитель: Сорокин Анатолий Васильевич, к. ф.-м. н, доцент, Красноярский государственный университет
E-Mail: santarm1@mail.ru стр. 740

Семёнова Оксана Рифовна, стажер-преподаватель
Пермский государственный университет, физический
Ориентационные переходы в ферронематике с бистабильным сцеплением на границах слоя
Научный руководитель: Захлевных Александр Николаевич, д. ф.-м. н, декан физического факультета, Пермский государственный университет
Адрес: 614990 г. Пермь, ул. Букирева, 15
E-Mail: semenova_ok@rambler.ru стр. 742

Эльц Екатерина Эдуардовна, 6 курс
Санкт-Петербургский государственный университет, физический
Исследование влияния жидкокристаллического окружения на конформацию добавок методом компьютерного моделирования
Научный руководитель: Комолкин Андрей Владимирович, к. ф.-м. н, доцент, Научно-исследовательский институт физики, СПбГУ
E-Mail: Ekaterina@EE6440.spb.edu стр. 744

Индукцированные магнитным полем переходы в ферронематике с изменением характера поверхностного сцепления

Балдин Данил Валерьевич

Пермский государственный университет

Захлевных Александр Николаевич, д.ф.-м.н

baldin@zmu Perm.ru

Ферронематики (ФН) представляют собой магнитные суспензии на основе нематического жидкого кристалла (НЖК). Твердая фаза ФН состоит из однодомных стержнеобразных ферромагнитных частиц с отношением длины l к диаметру d порядка 10. Магнитный момент частицы направлен вдоль ее главной оси. Предполагается, что магнитные частицы внедрены в жидкий кристалл таким образом, что их главные оси направлены перпендикулярно локальному директору НЖК-матрицы (гомеотропные условия сцепления). Объемная доля магнитных частиц мала ($10^{-4} \div 10^{-2}\%$ по объему), поэтому твердую фазу ФН можно представить как идеальный газ невзаимодействующих магнитных частиц. Наличие небольшого количества феррочастиц в целом не меняет характера ориентационного упорядочения дисперсионной среды, поэтому ФН, обладая сильно выраженными магнитными свойствами, в остальном ведет себя как обычный НЖК. ФН характеризуется двумя механизмами взаимодействия с магнитным полем: квадрупольным (связанным с воздействием поля на диамагнитную НЖК-матрицу) и дипольным (обусловленным влиянием поля на магнитные моменты частиц), тогда как в чистом нематике существует лишь квадрупольный механизм. Считается, что НЖК-матрица имеет положительную диамагнитную анизотропию χ_a ; в этом случае как директор, так и длинные оси вытянутых магнитных частиц стремятся ориентироваться вдоль приложенного магнитного поля H , оказывая конкурирующее действие на ориентационную структуру ФН.

В классической работе Брошар и де Жена (J. de Phys. 1970. Vol. 31. P.691-708), положившей начало теории ФН, сцепление магнитных частиц с жидкокристаллической матрицей предполагалось абсолютно жестким. В реальных ФН это не так и позднее С.В.Бурьловым и Ю.Л.Райхером (Phys. Rev. E. 1994. Vol. 50. P.358-367) был предложен потенциал мягкого поверхностного сцепления магнитных частиц с матрицей, позволяющий рассматривать поля директора n и намагниченности m как независимые переменные

$$F_{anch} = \frac{Wf}{d}(nm)^2. \quad (1)$$

Здесь W представляет собой анизотропную часть энергии поверхностного взаимодействия, называемую энергией сцепления, f – объемная доля магнитных частиц в суспензии. При $W > 0$ выражение (1) отвечает гомеотропному сцеплению частиц с матрицей. С феноменологической точки зрения потенциал (1) является аналогом известного в физике жидких кристаллов потенциала Рапини, описывающего взаимодействия жидкого кристалла с ограничивающими поверхностями. Известно, что в случае гомеотропного сцепления в сильном поле потенциал Рапини недостаточно

хорош и может быть обобщен путем учета следующего члена разложения по $(nm)^2$. Нами для описания взаимодействия жидкого кристалла и внедренных в него магнитных частиц предложен потенциал

$$F_{anch} = \frac{Wf}{d}(nm)^2 \left[1 - \zeta(nm)^2 \right], \quad (2)$$

где ζ – дополнительный параметр поверхностной анизотропии четвертого порядка; в случае $\zeta = 0$ потенциал (2) сводится к (1). Предложенный нами потенциал (2) поверхностного сцепления магнитных частиц с жидкокристаллической матрицей в предельном случае допускает двукратное вырождение оси легкого ориентирования на поверхности магнитных частиц, т.е. бистабильную ориентацию директора \mathbf{n} на магнитных частицах.

В работе в рамках континуальной теории найдено равновесное распределение векторов намагниченности и директора в магнитном поле для ФН с конечной энергией сцепления магнитных частиц с жидкокристаллической матрицей. Показано, что в слабых полях $H \leq H_{\perp}$, где

$$H_{\perp} = \frac{W}{M_s d} \left[-1 + \sqrt{1 + \frac{2fM_s^2 d}{W\chi_a}} \right]$$

(M_s – намагниченность насыщения материала магнитных частиц), устойчиво ФН состояние I с гомеотропными условиями сцепления магнитных частиц с матрицей. В этой фазе упорядочение осуществляется дипольным механизмом. При достижении полем порогового значения H_{\perp} это состояние сменяется угловой фазой II, в которой векторы напряженности поля, директора и намагниченности компланарны, а углы ориентации намагниченности и директора относительно поля являются функциями материальных параметров ФН и напряженности поля. Ферронематическое состояние II является результатом конкуренции дипольного и квадрупольного упорядочения. В этой ФН фазе происходит изменение условий сцепления магнитных частиц с матрицей от гомеотропных к планарным. Пороговое поле H_{\perp} имеет смысл поля Фредерикса, так как в этом поле происходит своеобразный переход Фредерикса в неограниченном ФН. С ростом напряженности поля до величины

$$H_{||} = \frac{W}{M_s d} \left[(1 - 2\zeta) + \sqrt{(1 - 2\zeta)^2 + \frac{2fM_s^2 d}{W\chi_a} (1 - 2\zeta)} \right]$$

ФН состояние II сменяется состоянием III, в котором директор, векторы намагниченности и напряженности поля параллельны, т.е. в фазе III квадрупольный механизм проявляет себя в полной мере, наряду с дипольным. Поле $H_{||}$ имеет смысл так называемого поля насыщения.

Оценки показывают, что для реальных ФН пороговые поля оказываются порядка сотни эрстед, так что описанные переходы между ФН фазами I – III должны наблюдаться в реальных ФН в достаточно слабых полях.

Работа выполнена при частичной поддержке грантов PE-009-0 CRDF и E02-3.2-261 Министерства образования РФ.

Распространение поперечной вязкой волны в холестерических жидких кристаллах

Денисова Ольга Аркадьевна

Башкирский Государственный Университет

Чувывров Александр Николаевич, д.ф.-м.н

ChuvyrovAN@bashnet.ru

Исследованы процессы распространения поперечной вязкой волны в твист - структурах нематических жидких кристаллов (НЖК) и холестерических жидких кристаллах (ХЖК) с большим шагом спирали. Проведены экспериментальные измерения величин скоростей поперечных волн с помощью флексоэлектрического эффекта, индуцированного поперечной волной в этих молекулярных системах. Изучался холестерический жидкий кристалл с осью спирали, параллельной оси OZ и перпендикулярной вектору скорости \vec{v}_0 подвижной пластины.

Для экспериментальной оценки величин скоростей воспользуемся связью градиентов скоростей и величины пьезоэлектрической поляризации, определяемой пьезокоэффициентами C_{ijk} . Для холестерического жидкого кристалла и твист-НЖК имеем два отличных от нуля пьезоэлектрических коэффициента C_{xyz} и C_{yxz} . Для поляризации имеем: $P_x = C_{xyz} \frac{dv_y}{dz}$ и $P_y = C_{yxz} \frac{dv_x}{dz}$, что позволяет сделать оценки величины градиентов скоростей в зависимости от частоты сдвига.

Экспериментальные измерения пьезоэлектрического эффекта, индуцированного поперечной волной в холестерических жидких кристаллах, проводились на ячейке, собранной по симметричной схеме со свободной плавающей центральной пластиной. Флексоэлектрический сигнал снимался с резистора, напыленного на опорную подложку (~ 1 кОм) поперек колебательной пластины. Усиленный сигнал интегрировался и записывался на двухкоординатный самописец. Сдвиговая волна, возбужденная электрическим вибратором, через волновод приводила в движение рабочую пластину. Вся ячейка помещалась в термостат, температура которого измерялась хромель-алюмелевой термопарой. Сигнал с термопары поступал на аналого-цифровой преобразователь и обрабатывался на компьютере. Кроме исследования разности потенциалов, индуцируемой сдвигом, проводились измерения ее фазы относительно регистрируемого сигнала с датчика скорости сигнала. Скорость перемещения подвижной пластины фиксировалась двумя методами: путем фиксации изменения амплитуд пьезодатчиком и емкостным датчиком с зазором 0,1 мм.

Для обнаружения предсказанного эффекта был выбран жидкий кристалл - МББА, в который сделана добавка оптически активного вещества холестерилхлорида $\sim 2\%$. Измерялась частотная зависимость индуцированной сдвигом э.д.с. на частоте первой гармоники. Полученная зависимость имеет резонансный характер, который, по-видимому, связан со спиральностью ЖК-структуры. Эта ситуация возможна, когда длина волны, распространяющейся в НЖК, сравнима с шагом спирали. С уменьшением шага спирали резонансы зарегистрировать не удалось.

Итак, при распространении поперечной вязкой волны в холестерическом жидком кристалле с большим шагом спирали возникает волна с малым волновым вектором, что приводит к резонансному изменению скорости ориентационных волн при изменении частоты их генерации, что экспериментально подтверждается при изучении закрученных твист - слоев нематиков.

Эффект поляризации, возникающий под действием периодического сдвига в окрестности фазового перехода нематический жидкий кристалл – изотропная жидкость

Денисова Ольга Аркадьевна

Башкирский Государственный Университет

Чувывров Александр Николаевич, д.ф.-м.н.

ChuvyrovAN@bashnet.ru

В данной работе рассмотрены эффекты поляризации, возникающие в изотропной фазе нематического жидкого кристалла (НЖК), при наличии быстро осциллирующего течения, возбуждаемого колебаниями одной из ограничивающих слой НЖК пластин. Такая вязкая волна быстро затухает. При этом величина затухания δ определяется вязкостью η и плотностью ρ жидкости и частотой колебания пластины ω и равна $\delta \approx \sqrt{\eta / \rho \omega}$ [1]. В НЖК такие колебания могут вызывать появление переменного электрического сигнала, являющегося следствием флексоэлектрического эффекта [2]. Так как в изотропной фазе поток индуцирует появление параметра порядка i , как следствие должна возникать флексоэлектрическая поляризация.

Экспериментальные измерения эффекта поляризации в изотропной фазе проводились на ячейке, макет которой описан в работе [3]. Измерительная ячейка была собрана по симметричной схеме со свободно плавающей центральной пластиной. Сама ячейка монтировалась так, что опорные пластины располагались вертикально. Сигнал снимался либо с резистора, напыленного на опорную подложку (~ 1 кОм), либо между подвижной пластиной и опорной подложкой и далее усиливался зарядочувствительным усилителем и селективным усилителем У2-6. Усиленный сигнал интегрировался и обрабатывался на компьютере. Сдвиговая волна частотой 22 кГц, возбужденная магнитострикционным вибратором, через шток приводила в движение рабочую пластину. Вся ячейка помещалась в термостат, температура которого измерялась хромель-алюмелевой термопарой, сигнал с которой накапливался и обрабатывался на компьютере.

Скорость перемещения подвижной пластины фиксировалась емкостным датчиком с зазором 0,1 мм. Амплитуда колебания определялась из изменяющейся с частотой сдвига составляющей емкостного сопротивления. Измерение прошедшего сигнала проводилось двумя методами: для измерения компоненты P_z измерялось напряжение u_2 между подвижной пластиной и одним из электродов, для измерения компоненты P_x сигнал u_1 снимался с пленочного сопротивления величиной 1 кОм, нанесенного на одну из неподвижных пластин. Применение обоих методов дает возможность оценить вклады в разность потенциалов флексоэффекта, индуцированного сдвигом. В работе исследовались гомеотропно ориентированные слои НЖК, получаемые спонтанно.

Рассмотрим результаты исследования поляризации в НЖК, индуцированной сдвиговой волной в окрестности фазового перехода НЖК – изотропная жидкость. Объектами исследования служили *n*-метоксibenзилиден-*n*-бутиланилин (МББА) и трехкомпонентная смесь нематиков из класса двух кольчатых сложных эфиров с концевыми группами $X = C_4H_9, C_6H_{13}O, C_4H_9OSO$ и $Y = OC_6H_{13}, C_4H_9OC_2H_5$ соответственно (ДКЭ). Эффекты, которые наблюдаются в них, имеют типичные особенности и характерны для других соединений, имеющих НЖК - фазу. За фазовым переходом при $T > T_c$ наблюдается зависимость флексоэлектрического сигнала, предсказанная по теории Де Жена, а величина флексоэлектрической поляризации $P_z \sim (T - T_c)^{-2}$. В НЖК фазе поведение флексоэлектрической поляризации зависит от амплитуды сдвига. При больших амплитудах сдвига появляется стационарный наклон директора, который зависит от амплитуды и температуры. Следствием этого будет появление второй компоненты поляризации P_x , которая сохраняется и в изотропной фазе. На рисунке 1 изображена температурная зависимость квадратного корня из обратной величины сигнала.

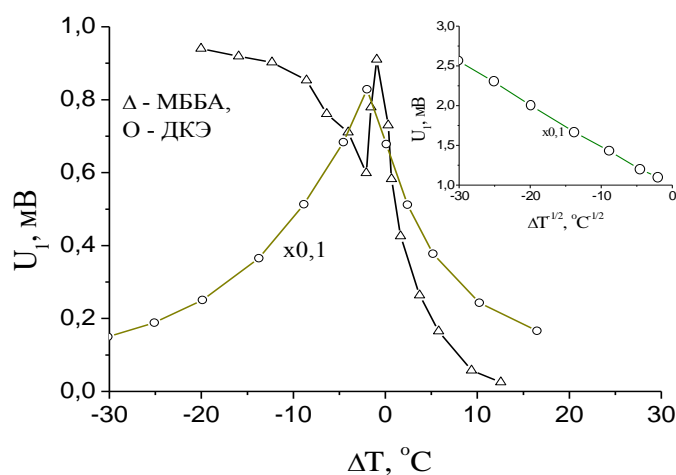


рис. 1

На нем проиллюстрированы две противоположные ситуации. В одной – для МББА, эффект флексоэлектрической поляризации определяет зависимость параметра порядка от температуры, когда стационарная ориентация директора не определяет поведение величины индуцированной поляризации в окрестности фазового перехода НЖК – изотропная жидкость. Во второй ситуации существенными являются упругие эффекты, на которые накладывается дивергенция директора. Причем средний угол отклонения директора при действии сдвиговой волны $\langle \Theta \rangle \sim \nu_o \delta / k_{33}$. Так как $k_{33} \sim S^2$, а глубина проникания вязкой поперечной волны $\delta \sim (T_c - T)^{-1/2}$, что дает для температурной зависимости величины флексополяризации имеем $P_z \sim (T_c - T)^{-1/2}$. Однако в изотропной фазе поведение индуцированной поляризации от температуры не зависит от упругости и одинаково для обоих типов соединений. Такое изменение в поведении индуцированной флексоэлектрической поляризации при появлении стационарного наклона директора в потоке, может быть, косвенно указывает на изменение типа фазового перехода. Однако для более убедительного доказательства

такого утверждения необходимы исследования термодинамических характеристик НЖК при появлении в нем поперечной вязкой волны большой интенсивности.

Данная работа была частично поддержана проектом “Университеты России” № 112-02 и «Интеграция».

Список публикаций:

[1] П. Де Жен. Физика жидких кристаллов. -М.: Мир, 1977, 377 с.

[2] G. Barbero, L.R. Evangelista, A.P. Krekhov. *Int.J.Mod.Phys.*, **6**, 2521-2530 (1992).

[3] Денисова О.А., Скалдин О.А., Чувывров А.Н. *Кристаллография*, **44**, 544-547 (1999).

Вихри в жидких кристаллах.

Ижбердина Лейсан Тагировна

Уфимский Государственный Нефтяной Технический Университет

Чувывров Александр Николаевич, д.ф.-м.н

Leisan-22@yandex.ru

Показано, что в ситуации, когда статистическое распределение директора в объеме без учета поверхностной энергии подчиняется уравнению равновесия, не существует нетривиальных солитонных решений уравнения с конечной энергией. Стабилизации солитонов может способствовать какое-либо дополнительное взаимодействие, например, с ограничивающей поверхностью при слабых граничных условиях. С математической точки зрения это означает учет поверхностной энергии нематического жидкого кристалла, приводящий к возможности существования решений уравнения равновесия в виде солитоноподобных дефектов.

Для плоского слоя нематического жидкого кристалла толщиной d в цилиндрической системе координат (ρ, ϕ, z) ось OZ направлена перпендикулярно поверхности, нижняя граница совпадает с плоскостью $Z=0$. Рассмотрено симметричное по углу ϕ распределение директора. При этом $U=U(\rho, z)$, $V=\phi+C$, где C – произвольная постоянная.

Из уравнения равновесия в одноконстантном приближении получим: $\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} (\rho \frac{\partial U}{\partial \rho}) + \frac{\partial^2 U}{\partial z^2} - \frac{1}{\rho^2} \sin U \cos U = 0$, $0 \leq \rho \leq +\infty$, $0 \leq z \leq d$. Данное нелинейное уравнение не может быть решено аналитически в общем виде. Показано, что существует единственное нетривиальное автомодельное решение $f(x)=2U$, где $x=\text{arsh}(\frac{z}{\rho})$, а $f(x)$ удовлетворяет уравнению синус-Гордона: $f_{xx} - \sin f = 0, x \geq 0$.

Найдено решение данного уравнения, соответствующее жестким тангенциальным условиям на нижней границе $U|_{z=0} = \frac{\pi}{2}$. Было получено, что решение имеет вид

$U = 2 \text{arctg}[\frac{z}{\rho} + \sqrt{1 + (\frac{z}{\rho})^2}]$. и представляет собой статистический солитон уравнения синус-

Гордона. Выражение для антисолитона найдется из соотношения $U_a = -U_c$.

Рассмотрена возможность образования решетки линейных солитонов в плоском слое нематического жидкого кристалла толщиной d . Найдено распределение директора

в слое при условии жесткой гомеотропной ориентации на нижней границе, причем ориентация на верхней границе определяется минимумом полной энергии.

Таким образом из условий равновесия в объеме и минимума энергии для функции $f = 2U(x, z)$ будем иметь следующее уравнение

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial z^2} = 0, \quad -\infty < z \leq d \quad (1),$$

удовлетворяющее граничным условиям: $K \frac{\partial f}{\partial z} - wf = 0$ при $z = d$, $f = 0$, при $z = 0$.

Граничное условие при $z = d$ может быть представлено в виде: $\frac{K}{W}a = \text{tg}(ad)$. Последнее уравнение позволяет определить значение параметра a .

Показано, что оно имеет решение $a \neq 0$ лишь при $d > d_c = \frac{K}{W}$, то есть существует

критическая толщина слоя НЖК $d_c = \frac{K}{W}$. При $d < d_c$ распределение директора в слое

однородное, а при $d > d_c$ распределение директора представляет собой периодическую функцию вдоль оси Ox , т.е. периодическую решетку линейных локализованных возмущений на верхней границе плоского слоя нематического жидкого кристалла. Таким образом решением уравнения (1) является $f(x) = 2U = 2\sin(ax)\cos(az)$ представляющее собой периодическую решетку солитоноподобных дефектов. Отметим, что подобная структура является устойчивой к внешним возмущениям и соответствует минимуму упругой энергии.

Исследование рассеяния света капсулированных полимером нематических жидкокристаллических (КПНЖК) одноосно деформированных плёнок

Лаврик Илья Николаевич

Красноярский Государственный Университет

Соркин Анатолий Васильевич, к.ф.-м.н

santarm1@mail.ru

В данном докладе представлены материалы по исследованию пространственно селективного рассеяния света и пропускания композитных пленок на основе КПНЖК, подвергнутых одноосной деформации. Нематический жидкий кристалл капсулировался в полимерной матрице по стандартной технологии SIPS (фазовое разделение при испарении растворителя) [1]. В технологии SIPS в раствор полимера в спирте добавляют нематик, из полученной эмульсии растворитель испаряют, регулируя концентрацию паров растворителя над поверхностью. Нематик нерастворим в полимере и на конечной стадии испарения выделяется в отдельную фазу. В растворе образуются капли нематика, которые растут до затвердевания полимера. В конечной точке нематик и полимер окончательно разделены.

В качестве полимерной матрицы в настоящей работе использовался широко распространенный полимерный материал – поливинилбутираль.

Для капсулирования был выбран хорошо исследованный различными физическими методами нематик 4-н-пентил-4-цианобифенил (5CB). Оптические свойства этого кристалла исследованы в работе [1].

Полученные пленки однонаправлено растягивались и закреплялись. Для исследования индикатрисы рассеяния использовалась установка, позволяющая регистрировать рассеяние в зависимости от угла. В качестве источника света использовался He-Ne лазер. Основным элементом установки является гониометр ГА-5, позволяющий производить измерение угла рассеяния. Образцы с композитной пленкой, заподимеризовавшиеся в свободном состоянии и с калиброванным растяжением, устанавливались на предметный столик таким образом, что свет, прошедший через коллиматор гониометра падал нормально на поверхность пленки. Дальнейшие измерения производились в интервале углов $+20\dots-20$ градусов (за ноль принято положение нормали к образцу). В зависимости от угла рассеяния регистрировался фототок с помощью фотодиода, закрепленного на зрительной трубе гониометра и работающего в линейной области. С помощью поляризатора и анализатора путём изменения пространственного расположения КПНЖК пленки измерялась интенсивность рассеянного света при различных вариантах взаимного расположения данных элементов оптической схемы. Это позволило сделать выводы относительно рассеивающих свойств композитной пленки в зависимости от поляризации, падающего света и ориентации капель и положения анализатора в рассеянном пучке.

Увеличение растяжения пленки вызывает усиление компоненты рассеянного света, поляризованной в плоскости заданной падающим пучком и направлением растяжения. Такое поведение объясняется ориентирующим влиянием деформированных растяжением стенок капсул на структурное упорядочение нематика. Вытянутая капля ориентируется в направлении растяжения. Кроме этого при растяжении КПНЖК пленки наблюдалось еще три эффекта.

Первый – появление линейной и близкой к ней поляризации рассеянного пленкой неполязованного света (рис. 1).

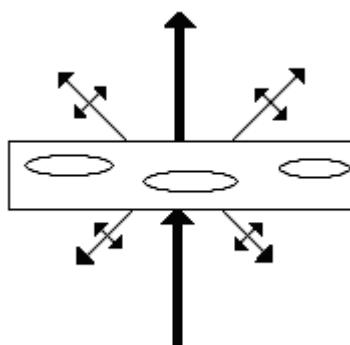


рис.1. Рассеяние поляризованного плёнкой света.

Второй – возникновение анизотропии селективного рассеяния, при которой индикатриса изменяет свою аксиально-симметричную форму на эллипсоидальную (длинная ось эллипса совпадает с нормалью к плёнке).

Третий – модуляция индикатрисы рассеяния вследствие аномальной дифракции на каплях ЖК (рис.2). Характер углового распределения интенсивности рассеяния для разных комбинаций ориентации поляризатора и анализатора подобен, но различается по абсолютной величине.

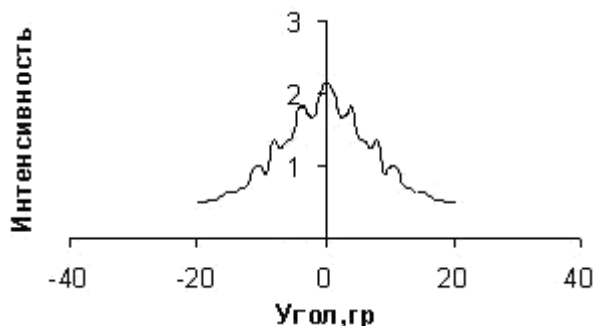


Рис.2. Изменение интенсивности света рассеянного плёнкой.

Анизотропия светорассеяния в одноосно ориентированных КПНЖК пленках обусловлена указанными выше эффектами. Свет, поляризованный перпендикулярно направлению растяжения, проходит через пленку, не рассеиваясь, поскольку отсутствует градиент показателя преломления на границе капли для этой поляризации из-за специально подобранных полимера и жидкого кристалла с близкими значениями n_{\perp} . Компонента света, поляризованного вдоль направления растяжения, интенсивно рассеивается.

Список публикаций:

[1]. Жаркова Г.М., Сонин А.С., Жидкокристаллические композиты / Новосибирск: Наука, 1994. - 214 с.

Ориентационные переходы в ферронематике с бистабильным сцеплением на границах слоя

Семёнова Оксана Рифовна

Пермский государственный университет

Захлевных Александр Николаевич, профессор, д.ф-м.н

semenova_ok@rambler.ru

В рамках континуальной теории изучен индуцированный внешним магнитным полем переход в плоском слое ферронематика (разбавленной суспензии игольчатых магнитных частиц в нематическом жидком кристалле). Пусть на верхней границе слоя ($z = L$) директор \mathbf{n} фиксирован и направлен по нормали к поверхности (жесткое гомеотропное сцепление), в то время как на нижней границе слоя ($z = 0$) имеется вырождение оси легкого ориентирования, так что устойчивым может быть как гомеотропное, так и планарное сцепление директора \mathbf{n} с границей. В такой ячейке в отсутствие приложенного магнитного поля оказываются возможными два состояния. Одно из них отвечает однородному гомеотропному упорядочению, при котором директор во всем объеме слоя ортогонален к обеим границам. Второе отвечает гибриднему гомеотропно-планарному упорядочению, при котором в объеме имеется градиент ориентации от планарного (или близкого к нему) упорядочения на нижней границе слоя, до гомеотропного упорядочения на верхней границе. Задачей настоящей

работы является исследование переключения ориентации директора между указанными состояниями в ячейке с бистабильным сцеплением. В работе рассмотрены случаи как положительной, так и отрицательной диамагнитной анизотропии матрицы ферронематика.

Построен функционал свободной энергии ферронематика, включающий как объемную, так и поверхностную части с учетом слабого сцепления магнитных частиц с жидкокристаллической матрицей. Минимизацией этого функционала построена система уравнений, описывающая ориентационное и магнитное состояние ферронематиков в условиях слабого бистабильного поверхностного сцепления.

Поверхностный потенциал сцепления ферронематика с нижней ограничивающей пластиной выбран в следующем виде:

$$F_S = 4W_0 [1 - (n e_x)^2] [1 - (n e_z)^2], \quad (1)$$

где \mathbf{n} – директор нематического жидкого кристалла, \mathbf{e}_x и \mathbf{e}_z – единичные векторы, задающие направления двух осей легкого ориентирования на нижней границе слоя. Потенциал (1) имеет два минимума: при $\mathbf{n} \parallel \mathbf{e}_x$ и $\mathbf{n} \parallel \mathbf{e}_z$. Первый из них отвечает планарному сцеплению директора с нижней границей слоя, второй – гомеотропному сцеплению. Параметр $W_0 > 0$ известен как энергия поверхностного сцепления и является мерой глубины минимумов F_S . Энергия сцепления магнитных частиц с нематической матрицей считается конечной величиной, а условия сцепления гомеотропными.

Найдено основное состояние ферронематика в отсутствие магнитного поля и определено пороговое значение энергии поверхностного сцепления, ниже которого устойчива лишь гомеотропная фаза ферронематика, и рассматриваемая ячейка не является бистабильной. Выше этого порогового значения энергии поверхностного сцепления в слое, наряду с гомеотропной фазой, возможна фаза с гибридным гомеотропно-планарным упорядочением, при котором в объеме слоя имеется градиент ориентации директора. Показано, что величина пороговой энергии сцепления зависит от констант Франка ориентационной упругости нематической матрицы. Рассмотрено приближение абсолютно жесткого сцепления молекул жидкого кристалла на магнитных частицах ферронематика.

Исследовано поведение ферронематика в слабом магнитном поле. С этой целью построены зависимости угла наклона директора на границе ячейки с двукратным вырождением легкой оси от энергии сцепления. Расчет сделан для ферронематика на основе нематического жидкого кристалла E7. Для случая слабого поля найдено пороговое значение энергии сцепления с поверхностью, ниже которого возможна только гомеотропная фаза. Изучено воздействие магнитного поля на гомеотропную и гомеотропно-планарную фазы. Оказывается, что с увеличением напряженности внешнего магнитного поля пороговое значение энергии сцепления увеличивается. Это означает, что при фиксированной энергии сцепления, близкой к пороговой, увеличением напряженности внешнего поля можно вызывать переход первого рода в гомеотропную фазу.

Включение магнитного поля вызывает переходы между гомеотропным и гомеотропно-планарным состояниями ферронематика. В самом деле, диамагнитные

взаимодействия между магнитным полем \mathbf{H} и директором пропорциональны H^2 , а взаимодействие между магнитными частицами и полем линейно по \mathbf{H} . По этой причине ферромагнитные взаимодействия доминируют в слабых полях, а диамагнитные взаимодействия – в сильных. При положительной диамагнитной анизотропии $\chi_a > 0$ диамагнитные взаимодействия ориентируют директор вдоль поля, способствуя переходу ячейки в гомеотропное состояние. Ферромагнитные взаимодействия ориентируют по полю магнитные частицы, и из-за гомеотропного сцепления директора с частицами, они опосредованно ориентируют директор перпендикулярно полю, т.е. в планарном направлении. Таким образом, ферромагнитные взаимодействия стабилизируют гомеотропно-планарную фазу и дестабилизируют гомеотропную фазу, в то время как диамагнитные взаимодействия стабилизируют гомеотропную фазу и дестабилизируют гомеотропно-планарную фазу. Эти взаимодействия конкурируют и вызывают переходы между состояниями в бистабильной ячейке ферронематика.

В случае же отрицательной диамагнитной анизотропии с увеличением напряженности магнитного поля пороговое значение энергии сцепления уменьшается, то есть устойчивой может стать гибридная гомеотропно-планарная фаза. Однако при выключении магнитного поля произойдет обратный переход из гибридной гомеотропно-планарной фазы в гомеотропную фазу.

Расчет произведен для случая, когда не учитывается эффект сегрегации, заключающийся в концентрационном перераспределении магнитной примеси по образцу.

Работа выполнена при частичной поддержке грантов PE-009-0 CRDF и E02-3.2-261 Министерства образования РФ.

Исследование влияния жидкокристаллического окружения на конформацию добавок методом компьютерного моделирования

Эльц Екатерина Эдуардовна

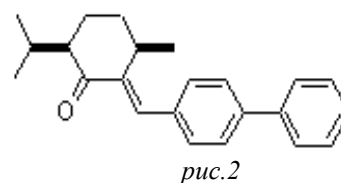
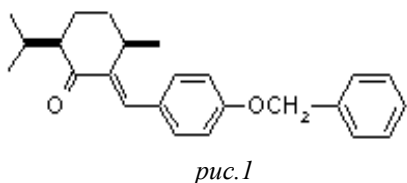
Санкт-Петербургский государственный университет

Комолкин Андрей Владимирович, к. ф-м. н

Ekaterina@EE6440.spb.edu

Исследование влияния жидкокристаллического окружения на конформацию добавок проводилось с помощью компьютерного моделирования жидкокристаллических смесей с введенными добавками. Использовались методы молекулярной динамики и квантовой химии.

Цель работы заключалась в изучении и сравнении конформационных изменений в жидкокристаллической нематической среде — 4-п-пентил-4'-цианбифенил (АЦБФ) — при растворении в ней двух различных хиральных добавок типа 2-арилиден-п-ментан-3-онов, различающихся между собой наличием группы OCH_2 , соединяющей бензольные кольца молекул, — 6-isopropyl-3-methyl-2[(E)-1-(4-benzyloxyphenyl)methylidene]-1-cyclohexanone (рис.1) и 6-isopropyl-3-methyl-2[(E)-1-(4-biphenyl)methylidene]-1-cyclohexanone (рис.2), а также в определении конформаций самих хиральных добавок (ХД).



В дальнейшем мы будем называть их ХД 1 и ХД 2 соответственно.

Для численного моделирования строения молекул методом молекулярной динамики необходимо было знать оптимизированную геометрию изучаемых молекул, эффективные заряды атомов и параметры для двугранных углов (коэффициенты разложения в ряд Фурье для торсионной энергии). Эти данные были получены посредством неэмпирических квантовохимических расчетов с помощью программ GAMESS и JAGUAR.

Квантовохимические расчеты проводились в приближении RHF (ограниченным методом Хартри-Фока) с использованием расширенного валентно-расщепленного базисного набора 6-31G*. Для извлечения эффективных зарядов $q(a)$ из результатов квантовохимического расчета была использована схема анализа заселенностей Малликена.

Затем было проведено моделирование молекулярной динамики для трех различных систем: чистого жидкокристаллического нематического вещества АЦБФ, а также АЦБФ с добавлением ХД 1 и АЦБФ с добавлением ХД 2 в весовом соотношении 99:1. Изучаемые нами системы содержали: 1 — 768 молекул АЦБФ; 2 — 763 молекулы АЦБФ и 5 молекул ХД 1; 3 — 762 молекулы АЦБФ и 6 молекул ХД 2. Для моделирования использовалась программа молекулярной динамики АКМД, разработанная в НИИФ СПбГУ.

В настоящей работе в качестве силового поля мы взяли OPLSAA (Optimized Potentials for Liquid Simulation for “All atoms”) [1], разработанное для моделирования органических, биологически важных молекул и растворов. При моделировании мы использовали периодические граничные условия (ПГУ) и алгоритм SHAKE, поддерживающий постоянными длины связей в молекулах [2].

Моделирование проводилось в каноническом ансамбле NVT при постоянной температуре – 300 К.

Системы уравнивались в течение 170 пикосекунд в случае АЦБФ, 300 пикосекунд для смеси АЦБФ с ХД 1 и 400 пикосекунд для смеси АЦБФ с ХД 2. После окончания релаксационных процессов, приводящих систему к равновесному состоянию, было выполнено моделирование уравновешенной системы для АЦБФ – 300 пикосекунд и для смесей АЦБФ с ХД 1 и ХД 2 по 500 пикосекунд.

После специальной обработки файлов с траекториями молекул был проведен конформационный анализ структуры чистого АЦБФ и АЦБФ в смеси с ХД 1 и ХД 2. Результаты по процентному содержанию различных конформаций алкильной цепи молекулы АЦБФ представлены в таблице:

Состояние	АЦБФ	АЦБФ и ХД 1	АЦБФ и ХД 2
t t t	34.7	32.0	34.7

t g \pm t	14.9	16.1	16.2
t t g \pm	8.0	7.7	7.5
t g \pm g \pm	3.0	3.2	3.4
g \pm t t	2.5	2.4	2.2
g \mp t g \pm	1.4	1.5	1.0
g \pm t g \pm	1.0	1.3	0.9

Из сравнения данных по процентному содержанию различных конформаций алкильной цепи молекул АЦБФ в жидком кристалле и в смесях с ХД можно сделать вывод, что конформационные изменения в жидкокристаллической среде при растворении в ней ХД очень незначительны, что может быть объяснено малым процентным содержанием ХД в растворе (99% АЦБФ и всего 1 % ХД)

Кроме того, в данной работе были определены наиболее вероятные конформации хиральных добавок, растворенных в жидкокристаллической среде. Это было сделано на основе исследования распределения по двугранным углам в молекулах хиральных добавок.

Список публикаций:

- [1] Jorgensen W.L., Maxwell D.S., Tirado-Rives J. *Development and Testing of the OPLS All-Atom Force Field on Conformational Energetics and Properties of Organic Liquids* // *J.Am.Chem.Soc.* 1996. 118. P. 11225-11236.
 [2] Allen M.P., Tildesley D.J. *Computer Simulation of Liquids*. Oxford: Clarendon Press. 1987. -385 p.