

УДК 541.15:539.189.2

*Л. В. Ельникова*

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРЕХОДОВ ИЗ ДВУОСНОЙ ФАЗЫ НЕМАТИЧЕСКИХ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛОВ С ТОПОЛОГИЧЕСКИМИ ДЕФЕКТАМИ

Институт Теоретической и Экспериментальной Физики им. А. И. Алиханова,  
ул. Б. Черемушкинская, 25, 117218 Москва, Россия. E-mail: elnikova@itep.ru

*В нематических жидких кристаллах (НЖК) топологические дефекты киральной природы играют существенную роль при фазовых переходах и приводят к возникновению нетривиальной топологии. Ряд переходов типа «двуосный-одноосный нематик» сопровождается понижением размерности, а параметр порядка НЖК связан с эволюцией топологических дефектов, энергией поверхностного сцепления и упругими константами Франка. В настоящей работе теория Ландау–де Жена двуосного нематика представлена как киральная калибровочная теория поля, что позволяет объяснить топологически зависимые фазовые переходы. В этой связи рассмотрен пример численного моделирования Монте–Карло на решетке, описывающий превращение объемной дисклинации двуосного нематика в поверхностный бужум одноосного нематика.*

**Ключевые слова:** *двуосные нематики, топологические дефекты, решеточный метод Монте–Карло.*

*L. V. El'nikova*

## MODELING OF PHASE TRANSITIONS FROM BIAXIAL NEMATIC LIQUID CRYSTALS WITH TOPOLOGICAL DEFECTS

A. I. Alikhanov's Institute for Theoretical and Experimental Physics  
Bolshaya Cheremushkinskaya, 25, 117218 Moscow, Russia. E-mail: elnikova@itep.ru

*In nematic liquid crystals (NLCs) topological defects of chiral nature play an essential role in phase transitions and lead to nontrivial topology. A number of “biaxial-uniaxial nematic” phase transitions are accompanied by a decrease in dimensionality, while the order parameter of the NLCs is connected with an evolution of topological defects, the surface anchoring energy and elastic Frank moduli. In this work the Landau–de Gennes theory for the biaxial nematics is presented as the chiral gauge field theory, which allows us to explain topologically dependent phase transitions. In this regard, we consider an example of numerical Monte Carlo modeling on a lattice describing the transformation of bulk disclinations in the biaxial nematic phase into the surface bojooms of a uniaxial NLC.*

**Key words:** *biaxial nematics, topological defects, Monte Carlo lattice.*

## Введение

Двuosные нематические жидкие кристаллы  $N_b$  (НЖК) широко применяются в современной спинтронике, оптических устройствах, биомедицинских, химических датчиках и пр. [1, 2], благодаря свойству переориентации их молекул при фазовом переходе, изменению оптической анизотропии и других физических свойств. Таким образом, теоретический анализ и предсказание мезоморфизма в НЖК при изменении термодинамических параметров (температуры, давления), при механическом воздействии (и при изменении компонентного состава в случае лиотропных НЖК) мотивированы потребностями производства, включая синтез новых агрегатов.

НЖК характеризуются ориентационным упорядочением молекул, описываемым вектором директором. В одноосном нематике  $N_u$  имеется единственный директор  $n$ , совпадающий с осью симметрии жидкого кристалла и его оптической осью. Двuosный нематик характеризуется тройкой взаимно-ортогональных директоров: первичным  $n$  и двумя вторичными директорами  $m, l$ .

Двuosные нематики открыты в лиотропных ЖК (лаурат калия/1-деканол/вода) и часто наблюдаются в коллоидных фазах, эмульсиях и мицеллярных системах; примерами НЖК  $N_b$  являются коллоидные фазы органо-силоксановых соединений, термотропные ЖК DT6Py6E6, 5CB, C7, C12, A131, и др. В них регистрируются в т. ч. обратимые переходы в одноосную фазу  $N_b \leftrightarrow N_u$ .

Для исследования образования и модификации структуры фаз в НЖК применяются методы поляризационной и флюоресцентной конфокальной оптической микроскопии, малоуглового рассеяния рентгеновских лучей, механической спектроскопии, ЯМР и др. Сведения о наблюдениях переходов  $N_b \rightarrow N_u$  в DT6Py6E6 и E7 методами 3D оптической микроскопии через расщепление изогир можно найти в литературных источниках [1, 3]. Метод дифракции рентгеновских лучей применялся для исследования двuosных ЖК лаурат калия/1-деканол/вода [4] и 5CB [5].

Макроскопическая теория описывает последовательность  $N_b \rightarrow N_u \rightarrow I$  (изотропная фаза) и топологических дефектов в НЖК, она развита в духе теорий Ландау–де Жена (ЛдЖ) и Озена–Франка [6–11]. Модули упругости теории ЛдЖ и коэффициенты вязкости приписываются к межмолекулярным взаимодействиям в НЖК и

могут быть измерены в связи с релаксационными характеристиками [12]. Плотность свободной энергии НЖК зависит от трех «объемных» констант упругости (или модулей Франка): растяжения  $K_{11}$ , кручения  $K_{22}$  и изгиба  $K_{33}$  (порядка  $10^{-6} - 10^{-7}$  дин), и 2-х «поверхностных» смешанных констант упругости  $K_{13}, K_{24}$ , где последняя связана с энергией поверхностного сцепления.

Различные типы точечных и линейных топологических дефектов, которые могут возникать, эволюционировать, взаимодействовать и аннигилировать в НЖК-фазах, известны давно и классифицированы [2, 4]. Возникновение топологических дефектов определяется симметрией НЖК, поверхностным сцеплением и соотношением констант упругости [13].

Например, в [14] показано, что в каплях  $N_u$  ЖК точечные топологические дефекты, так называемые «ежи», эволюционируя из радиального ежа в гиперболический в фазовом переходе, понижающем симметрию системы  $K \rightarrow C_{\infty, h}$ , связаны с температурными зависимостями констант упругости. В  $N_b$  ежей нет, точечные дефекты представлены бужумами (поверхностными точечными дефектами).

В настоящей работе мы применяем калибровочные квантово-полевые версии теорий ЛдЖ и Озена–Франка для описания переходов  $N_b \rightarrow N_u$ , где параметр порядка совпадает с деформацией орбиты  $SO(3)/(Z_2 \times Z_2)$  в  $SO(3)/Z_2$ . Этот пример показывает влияние нарушения киральной симметрии и эволюции топологических дефектов на свободную энергию и другие стандартные термодинамические параметры переходов  $N_b \rightarrow N_u$ .

## Теория Озена–Франка и киральная калибровочная теория

В теории Озена–Франка в случае двuosных  $N_b$  и одноосных  $N_u$  нематиков используется параметр порядка, выраженный в терминах магнитной восприимчивости  $Q$ ; этот условный двuosный симметричный бесследовый тензор  $Q$  имеет различные постоянные средние значения  $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$  неабелевой группы кватернионов из 8 элементов [6, 15].

Как отмечено в [6, 7], в переходе  $N_b \rightarrow N_u$  понижение симметрии НЖК, орбиты группы выражают пространство параметров порядка НЖК, которые классифицируются в полной

гомотопической последовательности фундаментальных групп  $\pi_i$  ( $i = 0, 1, 2$ ) [6]; так полная энергия НЖК, в частности член, описывающий поверхностное сцепление, зависят от группы симметрии НЖК, в которых только определенные дефекты могут быть стабилизированы или преобразованы в другие типы. Деформация нетривиальной орбиты  $SO(3)/(Z_2 \times Z_2)$  в  $SO(3)/Z_2$  исследована аналитическими [6, 7] и численными методами ([13] и ссылки); для случая полупрямого произведения  $Z_2 \times Z_2$  мы имеем группу диэдра  $D_{2h}$ .

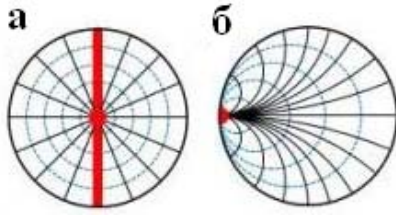


Рис. 1. Конфигурация директора с перпендикулярным сцеплением (черные линии означают первичный директор, голубые – вторичный директор): а – коллоидная  $N_b$ -фаза с дисклинацией (красная линия), б – фаза с бужумом (красная точка)

Рассмотрим объемные дисклинации в каплях двуслойной нематической фазы  $N_b$ , которые в переходе в одноосную фазу  $N_b \rightarrow N_u$  становятся бужумами (рис. 1).

В калибровочной теории поля группа  $SO(3)$  локально изоморфна группе  $SU(2)$  и может быть представлена как  $SU(2)/Z_2$ . Дисклинации и бужумы в физических системах могут быть идентифицированы соответственно как струны и монополи квантовой теории поля (КТП).

Когда распадается неабелева струна (если имеется линейная сингулярность с группой  $\pi_1(S^2) = Z_2$ , дисклинация в  $N_b$  нестабильна), она может стать бужумом в зависимости от присущих ей топологических характеристик: натяжения  $m$ , заряда  $N$  и класса связанных элементов  $C_i$  группы  $Q$  [11].

Свободная энергия двуслойного нематика  $N_b$  выражается в виде ([14] и ссылки):

$$F(Q, \Omega) = \int_{\Omega} [\psi(Q, \nabla Q) + f_B(Q)] dx, \quad (1)$$

где  $f_B(Q) = f_B(\text{tr}(Q^2), \text{tr}(Q^3))$  – плотность объемной свободной энергии (функция главных инвариантов  $Q$ ) и  $\psi(Q, \nabla Q) = L_1 I_1 + L_2 I_2 + L_3 I_3 + L_4 I_4$  – плотность упругой свободной энергии, в которой  $L_i$  есть материальные константы, а  $I_i$  – упругие инварианты  $I_1 = Q_{ij,k}$ ;  $I_2 = Q_{ik,j} Q_{ij,k}$ ;  $I_3 = Q_{ij,k} Q_{ij,k}$

$I_4 = Q_{lk} Q_{ij,l} Q_{ij,k}$ . Функция  $f_B(Q)$  инвариантна относительно действия  $SO(3)$  сопряжением на 5-мерном пространстве тензоров  $Q$ , так что критические точки объемной энергии образуют орбиты решений в 5-мерном пространстве тензоров  $Q$  [15]. Предполагается, что  $Q$  имеет постоянные скалярные параметры порядка  $S_1$  и  $S_2$ , и, следовательно, постоянные средние значения  $\lambda_1 = (2S_1 - S_2)/3$ ,  $\lambda_2 = (2S_2 - S_1)/3$ ,  $\lambda_3 = (S_1 + S_2)/3$ ; ( $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \lambda_3$ ). Здесь используется приближение постоянной объемной энергии, поэтому вычисляем только энергию упругости.

Несколько представлений функционала, соответствующих плотности энергии, представленной упругими инвариантами [15], позволяющие вычислить директоры  $n$ ,  $m$ ,  $l$  ( $|\nabla n|^2, |\nabla m|^2, |\nabla l|^2$ ) двуслойной фазы НЖК в терминах производных векторного отображения  $\Omega \rightarrow S^3$ . Мы можем ограничиться третьим упругим инвариантом  $I_3 = Q_{ij,k} Q_{ij,k}$ , свести функционал свободной энергии к выражению:

$$Q \mapsto I_3(Q) = \int_{\Omega} I_3(Q, \nabla Q) dx, \quad (2)$$

которое хорошо определено и конечно в классе Соболева  $W^{1,2}(\Omega, Q(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3))$ ; для нашего случая рассматриваем класс Соболева  $W^{1,p}(\Omega, Q(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3))$  и функционал упругой свободной энергии на  $I_3$ .

Конструируя простой общий сценарий распада линейной дисклинации в бужум (поверхностный точечный дефект) в капле нематика  $N_b$  в переходе  $N_b \rightarrow N_u$ , мы можем провести ассоциацию: благодаря увеличению натяжения и разрыву открытая петля Полякова трансформируется в монополь.

Применяем следующий вычислительный метод. В соответствии с калибровочной теорией поля на решетке в дифференциальных формах [16, 17], записываем действие из (2) в переменных связей (узлов)  $\theta(\varphi)$ , вводим новый оператор # дуальных калибровочных преобразований между переменными плакетов и связей (links), оператор # соответствует истинному числу связей токов решетки, движущихся по поляковой петле.

Мы можем вычислить параметр порядка второго ранга  $Q$  в новых зарядовых переменных ( $\kappa$ ,  $\beta$ ,  $\mu$ ) на простой кубической решетке с помощью метода Монте-Карло, применяя для простоты самодуальные условия.

Статистическая сумма гамильтониана на дуальной решетке, полученного из (1), есть [16, 17]

$$Z = const \sum_{\substack{j \in Z(C_{k+2}) \\ \partial=0}} \exp\{-4\pi^2 \beta(j, \Delta^{-1} j)\}, \quad (3)$$

где суммирование осуществляется по  $(D-k-2)$  формам  $j$ , имеющим физический смысл «тока монополей»,  $C_k$  –  $k$ -мерная ячейка на решетке. Струна (петля Полякова) разомкнута, ее концы привязаны к противоположным граням дуального куба (к которому уже преобразована геометрия коллоидной частицы (рис. 1)). Пример: особенности в функции параметра порядка (рис. 2) свидетельствуют о разрыве струны и возникновении монополя КТП. При увеличении температуры до  $t^*=4,86$  натяжение струны становится ненулевым, и при дальнейшем росте происходит разрыв. Здесь, на дуальной решетке, используется приведенная температура  $t^* = T k_B$ ,  $k_B$  – постоянная Больцмана,  $T$  – абсолютная температура.

В случае 2D установлено, что тип фазового перехода зависит от степени двуосности НЖК  $1 - 6 \frac{(tr \mathbf{Q}^3)^2}{(tr \mathbf{Q}^2)^3}$  [13]. Так что определение типа

фазового перехода остается за рамками настоящей работы и адресуется частному случаю функционала  $\psi(\mathbf{Q}, \nabla \mathbf{Q})$  для конкретной системы. В количественном виде константы упругости  $K$ ,  $K_{24}$  возможно выразить из (1) обратными преобразованиями.

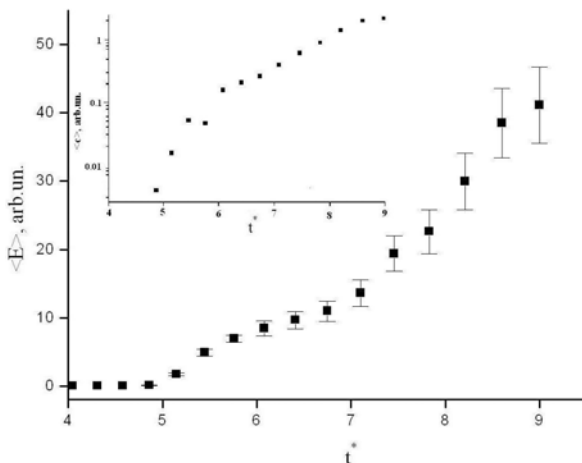


Рис. 2. Температурные зависимости средней энергии и средней теплоемкости (врезка), полученные в результате вычислений Монте-Карло на дуальной решетке (точность 5 %, размер простой кубической решетки  $48 \times 48 \times 48$ ), отражает распад струны на монополь (или дисклинацию фазы  $N_b$  в бужум фазы  $N_u$ )

## Выводы

В случае НЖК важно располагать объяснением трансформаций в возможных фазах, содержащих неабелевы топологические дефекты, которые преобразуются в абелевы в течение переходов, и роли упругости в таких переходах. Мы проиллюстрировали возможность применения решеточной калибровочной теории для анализа единственного типа дефектной конфигурации «струна – монополь», которая соответствует трансформациям топологических дефектов неабелевых систем в переходе «двуосный – одноосный нематик»  $N_b \rightarrow N_u$ . Универсальность данного подхода (например, применимость для дефектных конфигураций группы  $\pi_0$  и пр.) не доказана и требует отдельного исследования.

Для синтезируемых новых соединений с НЖК-фазами вычисления такого типа, снабженные материальными параметрами, помогут предсказать их термодинамическое поведение.

Автор выражает благодарность профессору О. Д. Лаврентовичу за предоставление литературы и полезные обсуждения.

## Список литературы / References

1. Kim Y.-K., Senyuk B., Lavrentovich O. D. Molecular reorientation of a nematic liquid crystal by thermal expansion // Nature communications. 2012. Vol. 3. P. 1133–1139. DOI: 10.1038/ncomms2073.
2. Kim Y.-K., Senyuk B., Shin S.-T., Kohlmeier A., Mehl G. H., Lavrentovich O. D. Surface alignment, anchoring transitions, optical properties, and topological defects in the thermotropic nematic phase of an organo-siloxane tetrapodes // Soft Matter. 2010. Vol. 10. P. 500–509. DOI: 10.1039/C3SM52249K.
3. Kim Y.-K., Majumdar M., Senyuk B. I., Tortora L., Seltmann J., Lehmann M., Jákli A., Gleeson J. T., Lavrentovich O. D., Sprunt S. Search for biaxiality in a shape-persistent bent-core nematic liquid crystal // Soft Matter 2012. Vol. 8, P. 8880–8890. DOI: 10.1039/c2sm26278a.
4. Figueiredo Neto A. M., Levelut A. M., Liebert L., Galerne Y. Biaxial Nematic Lyomesophase Studied by X-Ray Diffraction // Molecular Crystals and Liquid Crystals. 1985. Vol. 129. P. 191–198. DOI: 10.1080/15421408408084174.
5. Acharya B. R., Woong Kang Sh., Kumar S. X-ray diffraction from the uniaxial and biaxial nematic phases of bent-core mesogens // Liquid Crystals. 2008. Vol. 35. P. 109–118. DOI: 10.1080/02678290701817326.
6. Monastyrsky M. I. Topology of gauge fields and condensed matter. Plenum, 1993. 372 p.

- 
- 
7. *Gay-Balmaz F., Monastyrsky M., Ratiu T. S.* Lagrangian reductions and integrable systems in condensed matter. 2014. Available at: arXiv: 1404.7654v1.
  8. *Govers E., Vertogen G.* Elastic continuum theory of biaxial nematics // *Phys. Rev. A.* 1984. Vol. 30. P. 998–2000. DOI: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevA.30.1998>.
  9. *Straley J. P.* Ordered phases of a liquid of biaxial particles // *Phys. Rev. A.* 1974. Vol. 10. P. 1881–1887. DOI: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevA.10.1881>.
  10. *Mermin N. D.* The topological theory of defects in ordered media // *Reviews of Modern Physics.* 1979. Vol. 51. P. 591–648. DOI: <http://dx.doi.org/10.1103/RevModPhys.51.591>.
  11. *Kurik M. V., Lavrentovich O. D.* Defects in liquid crystals: homotopy theory and experimental studies // *Sov. Phys. Usp.* 1988. Vol. 31. P. 196–224. DOI: [10.1070/PU1988v031n03ABEH005710](https://doi.org/10.1070/PU1988v031n03ABEH005710).
  12. *Barbero G., Lenzi E. K.* Importance of the surface viscosity on the relaxation of an imposed deformation in a nematic liquid crystal cell // *Physics Letters A.* 2010. Vol. 374. P. 1565–1569. DOI: [10.1016/j.physleta.2010.01.046](https://doi.org/10.1016/j.physleta.2010.01.046).
  13. *Chiccoli C., Feruli I., Shiyanovskii S. V., Lavrentovich O. D., Pasini P., Zannoni C.* Topological Defects in Schlieren Textures of Biaxial and Uniaxial Nematics // *Phys. Rev. E.* 2002. Vol. 66. P. 030701-1–030701-4. DOI: [10.1103/PhysRevE.66.030701](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.66.030701).
  14. *Lavrentovich O. D., Terent'ev E. M.* Phase transition altering the symmetry of topological point defects (hedgehogs) in a nematic liquid crystal // *Sov. Zhurnal Eksperimentalnoi I Teoreticheskoi Fiziki.* 1986. Vol. 91(6). P. 2084–2096.
  15. *Mucci D., Nicolodi L.* On the elastic energy density of constrained Q-tensor models for biaxial nematics // *Archive for Rational Mechanics and Analysis.* 2012. Vol. 206, № 3. P. 853–884. DOI: [10.1007/s00205-012-0543-2](https://doi.org/10.1007/s00205-012-0543-2).
  16. *Ivanenko T. L., Polikarpov M. I.* Symmetries of the Chern-Simons theory on the lattice // *Nucl. Phys. B (Proc. Suppl)* 1992. Vol. 26. P. 536–538.
  17. *Ivanenko T. L., Polikarpov M. I.* Symmetries of Abelian lattice theories with Chern-Simon interactions // Preprint ITEP-49. Moscow, 1991.

Поступила в редакцию 13.03.2015 г.