

деформированного тела; в силу «теоремы о малых добавках» (см. V, § 15), будучи выражена через соответствующие термодинамические переменные (температуру или энтропию), она однаакова для свободной энергии и для внутренней энергии.

### § 37. Прямолинейные дисклинации в нематиках

Равновесному состоянию нематической среды при заданных граничных условиях не обязательно соответствует всюду непрерывное распределение  $\mathbf{n}(\mathbf{r})$ , в котором вектор  $\mathbf{n}$  имел бы в каждой точке вполне определенное направление. В механике нематиков необходимо рассматривать также и деформации с полями  $\mathbf{n}(\mathbf{r})$ , содержащими особые точки или особые линии, в которых направление  $\mathbf{n}$  оказывается неопределенным. Линейные особенности называют *дисклинациями*.

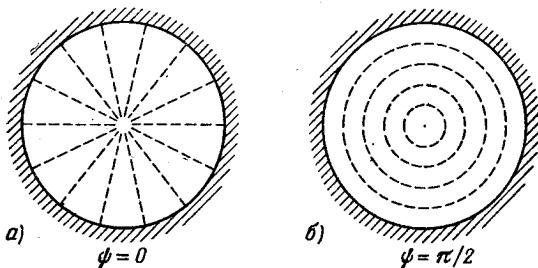


Рис. 27

Возможность возникновения дисклинаций можно проиллюстрировать простыми примерами. Рассмотрим нематик в длинном цилиндрическом сосуде, причем граничные условия требуют перпендикулярности  $\mathbf{n}$  поверхности сосуда. Естественно ожидать, что в равновесии вектор  $\mathbf{n}$  в каждой точке будет лежать в плоскости поперечного сечения цилиндра и направлен по радиусу в этом сечении (как это изображено на рис. 27, а); очевидно, что на оси цилиндра направление  $\mathbf{n}$  будет при этом неопределенным, так что эта ось будет дисклинацией. Если же граничные условия требуют параллельности направления  $\mathbf{n}$  стенке сосуда в плоскостях его поперечного сечения, то установится распределение с векторами  $\mathbf{n}$ , лежащими везде вдоль концентрических окружностей в этих плоскостях с центрами на оси цилиндра (рис. 27, б); и в этом случае направление  $\mathbf{n}$  на оси будет неопределенным.

Эти два примера — простые частные случаи прямолинейных дисклинаций. Мы рассмотрим общую задачу о возможных распределениях  $\mathbf{n}(\mathbf{r})$  в прямолинейных дисклинациях в неограниченной нематической среде. Очевидно, что распределение  $\mathbf{n}(\mathbf{r})$  в такой дисклинации не зависит от координаты вдоль ее длины,

так что достаточно рассматривать его в плоскостях, перпендикулярных осям дисклинации. Будем считать, что и сам вектор  $\mathbf{n}$  лежит везде в этих плоскостях. Таким образом, мы имеем дело с плоской задачей механики нематиков. Некоторые общие свойства решения этой задачи могут быть выяснены уже из общих соображений, без рассмотрения конкретных уравнений равновесия.

Введем цилиндрическую систему координат  $r, \varphi, z$  с осью  $z$  вдоль оси дисклинации. Как уже отмечено, распределение  $\mathbf{n}(r)$

не зависит от координаты  $z$ . Оно не может зависеть также и от координаты  $r$ , поскольку в поставленной задаче (дисклинация в неограниченной среде) нет никаких параметров с раз мерностью длины, с помощью которых могла бы быть построена безразмерная (каковой является  $\mathbf{n}(r)$ ) функция переменной  $r$ . Таким образом, искомое распределение зависит только от угловой переменной:  $\mathbf{n} = \mathbf{n}(\varphi)$ .

Введем угол  $\psi$  между  $\mathbf{n}$  и радиус-вектором, проведенным в плоскости  $z = \text{const}$  в данную точку (рис. 28); компоненты двухмерного (в этой плоскости) вектора  $\mathbf{n}$ :

$$n_r = \cos \psi, \quad n_\varphi = \sin \psi.$$

Полярный угол  $\varphi$  отсчитывается от некоторого избранного направления в плоскости — полярной оси. Введем также угол  $\theta$  между  $\mathbf{n}$  и полярной осью; очевидно, что  $\theta = \varphi + \psi$ .

Искомое решение определяется функцией  $\psi(\varphi)$ . Оно должно удовлетворять условию физической однозначности — при изменении переменной  $\varphi$  на  $2\pi$  (т. е. при обходе вокруг начала координат) вектор  $\mathbf{n}$  должен остаться неизменным с точностью до знака (изменение знака допустимо ввиду физической эквивалентности направлений  $\mathbf{n}$  и  $-\mathbf{n}$ ). Это значит, что должно быть

$$\theta(\varphi + 2\pi) = \theta(\varphi) + 2\pi n,$$

где  $n$  — целое или полуцелое положительное или отрицательное число (значение  $n = 0$  отвечает «недеформированному» состоянию  $\mathbf{n} = \text{const}$ ). Для функции  $\psi(\varphi) = \theta - \varphi$  имеем отсюда

$$\psi(\varphi + 2\pi) = 2\pi(n - 1) + \psi(\varphi). \quad (37,1)$$

Число  $n$  называют индексом Франка дисклинации.

Уравнение равновесия (которое будет выписано ниже) определяет производную  $d\psi/d\varphi$  и имеет вид

$$\frac{d\psi}{d\varphi} = \frac{1}{f(\psi)}, \quad (37,2)$$

его правая сторона не содержит независимой переменной  $\varphi$  — как следствие того, что уравнение должно быть инвариантно по

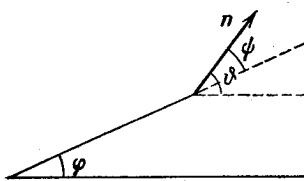


Рис. 28

отношению к любому повороту всей системы (нематика) как целиком вокруг оси  $z$  (т. е. по отношению к преобразованию  $\Phi \rightarrow \Phi + \Phi_0$ ); функция  $f(\psi)$  периодична с периодом  $\pi$ , поскольку значения  $\psi$  и  $\psi + \pi$  физически тождественны. Отсюда

$$\Phi = \int_0^\psi f(x) dx, \quad (37,3)$$

где постоянная интегрирования выбрана так, что  $\Phi = 0$  при  $\psi = 0$ . Подставив это выражение в (37,1), найдем, что

$$\bar{f} \equiv \frac{1}{\pi} \int_0^\pi f(x) dx = \frac{1}{n-1}, \quad (37,4)$$

при  $n \neq 1$  (чертка означает усреднение по периоду функции).

Отсюда можно сделать важное заключение о симметрии дисклинации: при повороте всей картины на угол  $\Phi_0 = 2\pi/2 (n - 1)$  вокруг оси  $z$  углы  $\psi$  меняются на  $\pi$ , т. е. все распределение остается неизменным. Действительно, с учетом периодичности функции  $f(\psi)$  это преобразование приводит к тождеству

$$\Phi + \frac{\pi}{n-1} = \int_0^{\psi+\pi} f(x) dx = \int_0^\psi f(x) dx + \int_\psi^{\psi+\pi} f(x) dx = \Phi + \bar{f}\pi.$$

Таким образом, в результате одного лишь требования однозначности ось  $z$  автоматически оказывается осью симметрии ( $C_m$ ) порядка

$$m = 2|n - 1|, \quad n \neq 1. \quad (37,5)$$

«Линии тока» директора определяются как линии, в каждой точке которых элемент длины  $dl$  ( $dl_r = dr$ ,  $dl_\phi = r d\phi$ ) параллелен  $n$ . Дифференциальное уравнение этих линий:

$$dl_\phi/dl_r = n_\phi/n_r,$$

т. е.

$$\frac{d\phi}{dr} = \operatorname{tg} \psi. \quad (37,6)$$

Отсюда видно, в частности, что среди линий тока имеются прямолинейные, на которых  $\psi = p\pi$  ( $p$  — целое число). Эти линии представляют собой  $2|n - 1|$  радиальных лучей

$$\Phi = \frac{\pi}{|n-1|} p \equiv \Phi_p, \quad \psi = p\pi, \quad p = 0, 1, 2, \dots, m-1. \quad (37,7)$$

Плоскость поперечного сечения дисклинации делится этими лучами на  $m$  одинаковых, повторяющихся друг друга секторов.

Перейдем к конкретному построению решения для нематика, энергия деформации которого дается формулой (36,1)<sup>1)</sup>.

Для плоского распределения имеем:

$$\operatorname{div} \mathbf{n} = \frac{1}{r} \frac{dn_\phi}{d\varphi} + \frac{n_r}{r} = \frac{1}{r} \cos \psi (1 + \psi'),$$

$$\operatorname{rot}_z \mathbf{n} = - \frac{1}{r} \frac{dn_r}{d\varphi} + \frac{n_\phi}{r} = \frac{1}{r} \sin \psi (1 + \psi'),$$

$$\mathbf{n} \cdot \operatorname{rot} \mathbf{n} = 0$$

( $\psi' \equiv d\psi/d\varphi$ ). В свободной энергии остаются только члены с  $K_1$  и  $K_3$ <sup>2)</sup>:

$$\int F dr dr d\varphi = \frac{K_1 + K_3}{4} \int (1 - \alpha \cos 2\psi) (1 + \psi'^2) \frac{d\varphi dr}{r}, \quad \alpha = \frac{K_3 - K_1}{K_3 + K_1}.$$

Интеграл по  $dr$  логарифмически расходится. В реальных задачах он обрезается сверху на некоторой длине  $R$  порядка величины размеров образца. Снизу же интеграл обрезается на расстояниях порядка величины молекулярных размеров  $a$ , где перестает быть применимой макроскопическая теория. При определении интересующего нас решения на расстояниях  $a \ll r \ll R$  можно считать множитель

$$L = \int \frac{dr}{r} \approx \ln \frac{R}{a}$$

просто некоторой постоянной, так что равновесное распределение  $\psi(\varphi)$  определяется минимальностью функционала

$$\int_0^{2\pi} (1 - \alpha \cos 2\psi) (1 + \psi'^2) d\varphi = \min. \quad (37,8)$$

Уравнение Эйлера этой вариационной задачи:

$$(1 - \alpha \cos 2\psi) \psi'' = \alpha \sin 2\psi (1 - \psi'^2). \quad (37,9)$$

Оно имеет, прежде всего, два очевидных решения:

$$\psi = 0 \quad (37,10)$$

и

$$\psi = \pi/2. \quad (37,11)$$

<sup>1)</sup> Эта задача решалась Осигеном (C. W. Oseen, 1933) и Франком (F. C. Frank, 1958) для частного случая нематика, в котором  $K_1 = K_3$ . Излагаемое ниже общее решение принадлежит И. Е. Дзялошинскому (1970).

<sup>2)</sup> В подынтегральном выражении ниже опущена полная производная  $(1 - \alpha \cos 2\psi) 2\psi' = (2\psi - \alpha \sin 2\psi)',$  что не влияет на формулировку вариационной задачи. Мы выводим здесь уравнение равновесия заново, не прибегая к общим уравнениям (36,7—8), что фактически потребовало бы более громоздких вычислений.

Это — осесимметричные решения, которым отвечают соответственно рис. 27, *a* и рис. 27, *b*<sup>1)</sup>. Эти решения однозначны, т. е. индекс Франка этих дисклинаций  $n = 1$  (ср. (37,1)).

Для нахождения решений с  $n \neq 1$  замечаем, что уравнение (37,9) имеет первый интеграл<sup>2)</sup>

$$(1 - \alpha \cos 2\psi)(\psi'^2 - 1) = \text{const} \equiv \frac{1}{q^2} - 1. \quad (37,12)$$

Отсюда находим решение в виде (37,3) с функцией

$$f(x) = q \left[ \frac{1 - \alpha \cos 2\psi}{1 - \alpha q^2 \cos 2\psi} \right]^{1/2}. \quad (37,13)$$

Константа  $q$  определяется условием (37,4)

$$(n - 1)q \int_0^\pi \left[ \frac{1 - \alpha \cos 2\psi}{1 - \alpha q^2 \cos 2\psi} \right]^{1/2} d\psi = \pi \quad (37,14)$$

(при этом должно быть  $|\alpha| q^2 \ll 1$ ). Эти формулы определяют искомое решение. При каждом  $n$  решение единствено: поскольку левая часть условия (37,14) — монотонно возрастающая функция  $q$ , это равенство удовлетворяется лишь одним значением  $q$ . Функция  $f(x)$  четна; поэтому  $\varphi(\psi)$  — нечетная функция. Это значит, что плоскость  $\varphi = 0$  является плоскостью симметрии распределения; в силу существования оси симметрии  $C_m$  тем самым возникают еще  $m - 1$  проходящих через ось  $z$  плоскостей симметрии. Наконец, плоскостью симметрий, очевидно, является плоскость  $z = 0$ . Таким образом, дисклинация с индексом  $n$  обладает полной симметрией точечной группы  $D_{mh}$ .

При  $n = 2$  из (37,14) очевидным образом следует, что  $q = 1$ , и соответствующее решение есть просто

$$\psi = \varphi = \theta/2. \quad (37,15)$$

Для выяснения качественного характера полученных решений исследуем поведение линий тока вблизи радиальных лучей  $\varphi = \varphi_p$  (37,7). На этих лучах  $\psi = r\pi$ , а вблизи них  $\psi \approx r\pi$  и функция (37,13) сводится к постоянной:

$$\frac{d\varphi}{d\psi} = f(\psi) \approx q \left( \frac{1 - \alpha}{1 - \alpha q^2} \right)^{1/2} \equiv \lambda. \quad (37,16)$$

Отсюда

$$\psi - \pi p \approx \frac{1}{\lambda} (\varphi - \varphi_p).$$

<sup>1)</sup> Отметим, что в «вырожденном» случае  $K_1 = K_8$ ,  $\alpha = 0$  существуют решения с любыми  $\psi = \text{const}$ .

<sup>2)</sup> Если рассматривать подынтегральное выражение в (37,8) как функцию Лагранжа одномерной механической системы (причем  $\psi$  играет роль обобщенной координаты,  $\varphi$  — роль времени), то (37,12) есть интеграл энергии.

Дифференциальное уравнение линий тока принимает вид

$$\frac{d \ln r}{d\varphi} = \operatorname{ctg} \psi \approx \frac{1}{\varphi - \varphi_p} \approx \frac{\lambda}{\varphi - \varphi_p},$$

откуда находим для формы линий тока вблизи луча

$$r = \text{const} \cdot |\varphi - \varphi_p|^\lambda. \quad (37,17)$$

Если ввести декартовы координаты с осью  $x$  вдоль луча, то вблизи последнего:  $r \approx x$ ,  $\varphi - \varphi_p \approx y/x$  и уравнение линий тока записывается в виде

$$y = \text{const} \cdot x^{1+1/\lambda}. \quad (37,18)$$

Далее надо рассмотреть различные случаи. При  $n \geq 3/2$  имеем  $n - 1 > 0$ , и из (37,14) очевидно, что  $q > 0$ , и потому  $\lambda > 0$ . В этом случае линии тока выходят из начала координат, касаясь луча.

При  $n = 1/2$  параметр  $q < 0$ , а с ним и  $\lambda < 0$ . Численное исследование уравнения (37,14) показывает, что  $q^2 > 1$ , а потому и  $|\lambda| > 1$ . Из (37,18) видно, что  $y$  растет вместе с  $x$ . Область вблизи начала координат нельзя рассматривать этим способом,

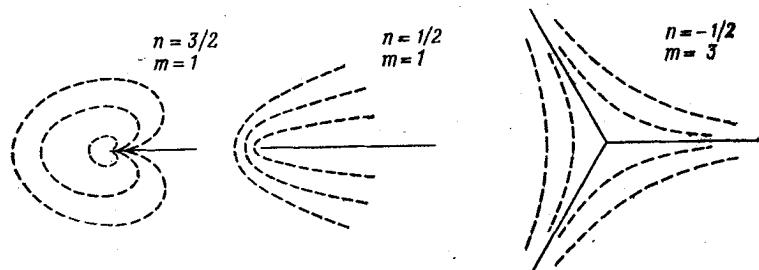


Рис. 29

так как, согласно (37,17), при  $\lambda < 0$  малым значениям  $\varphi - \varphi_p$  отвечают большие значения  $r$ .

Наконец, при  $n < 0$  параметр  $-1 < \lambda < 0$  и, согласно (37,18),  $y \rightarrow 0$  при  $x \rightarrow \infty$ . Линии тока асимптотически прижимаются к лучу.

На рис. 29 схематически показаны линии тока для дисклинаций с  $n = 3/2$ ,  $n = 1/2$  и  $n = -1/2$ .

### § 38. Несингулярное осесимметричное решение уравнений равновесия нематиков

Оссимметричные деформации (37,10—11) (см. рис. 27), представляющие дисклинации с индексом Франка  $n = 1$ , являются точными решениями уравнений равновесия нематической среды