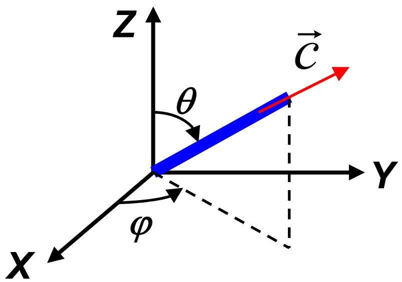
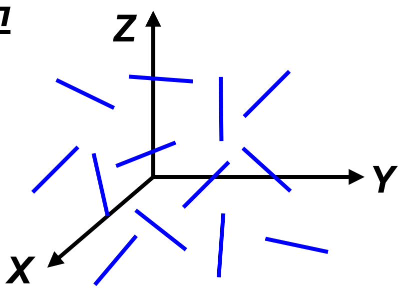
ЛЕКЦИЯ 2. Равновесные физические свойства нематиков

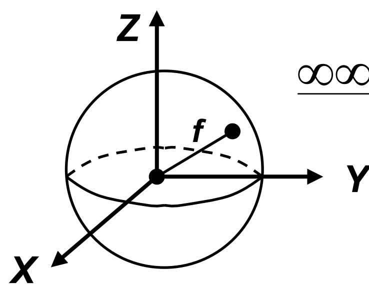
I. Одночастичная функция распределения по ориентациям.



$$|\vec{c}| = 1,$$
$$\vec{c} \Leftrightarrow -\vec{c}$$
$$\underline{f(\theta, \varphi)}$$

Изотроп



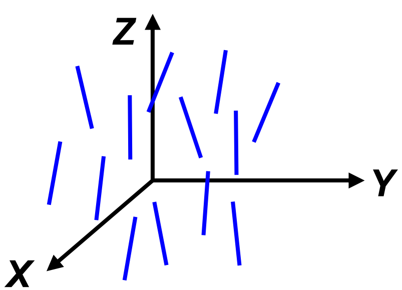


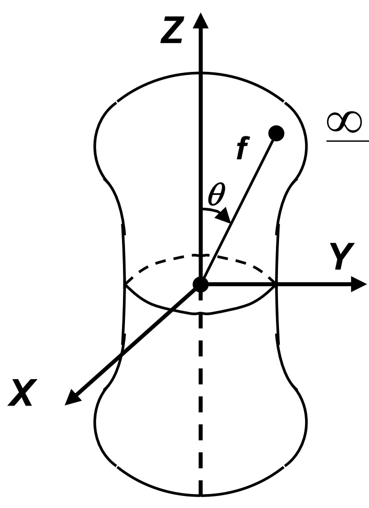
$\underline{\infty\infty m}$

f = Const = C.

$$\int f \cdot d\Omega = 1 \quad \Rightarrow C = \frac{1}{4\pi}.$$

Нематик

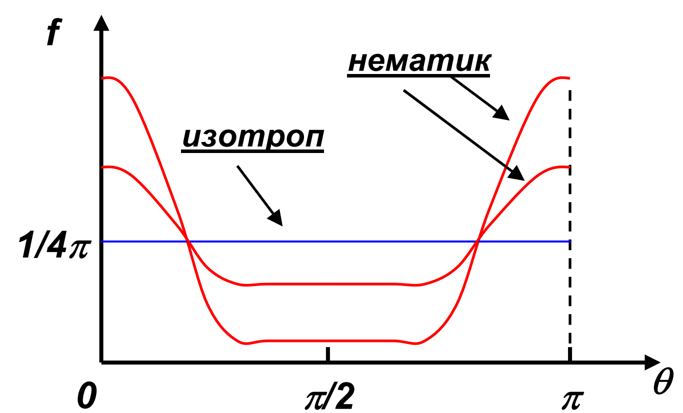




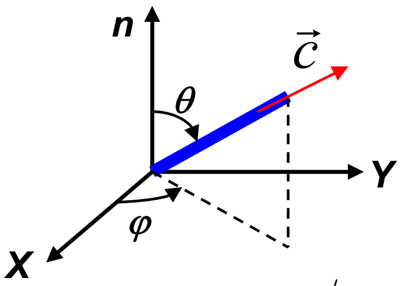
$\underline{\infty / mm}$

f(θ)

$$\int f(\theta) \cdot d\Omega = 1$$



II. Параметр порядка.



В изотропной и нематической фазах **< cosθ > = 0**

Изотропная фаза	**Нематическая фаза**
f(θ) = 1/4π.	

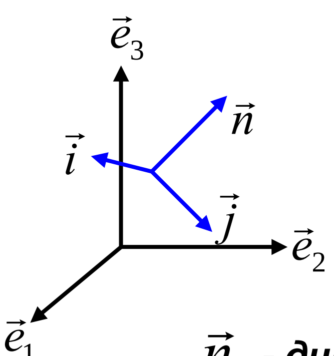
$$\left\langle \cos^2\theta \right\rangle = \frac{1}{4\pi}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\cos^2\theta\cdot\sin\theta\cdot d\theta\cdot d\varphi = \frac{1}{3},$$

$$\frac{1}{3} < \left\langle \cos^2\theta \right\rangle \le 1$$

$$S = \frac{1}{2}\left(3\left\langle c_z^2 \right\rangle - 1\right) = \frac{1}{2}\left(3\left\langle \cos^2\theta \right\rangle - 1\right)$$ ***- скалярный параметр порядка (Цветков).***

В изотропной фазе $\left\langle c_z^2 \right\rangle = 1/3$ ***и S = 0.***

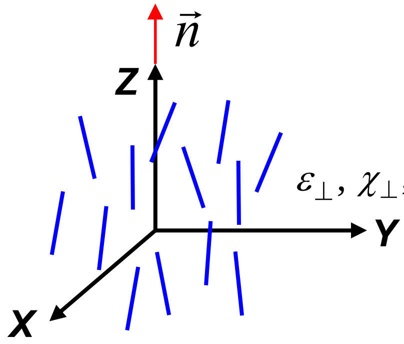
В полностью упорядоченной фазе θ = 0, cos$^2\theta$ = 1 и < cos$^2\theta$ > = 1, S = 1.



$$Q_{ij} = S\left(n_i n_j - \frac{1}{3}\delta_{ij}\right)$$ ***- тензорный параметр порядка в лабораторной системе координат.***

$\vec{n}$ ***- директор – собственный вектор параметра порядка (тензора 2 – го ранга).***

$\varepsilon_{11},\ \chi_{11},\ n_{11} = n_e.$



$\varepsilon_{\perp},\ \chi_{\perp},\ n_{\perp} = n_o.$

В связи с возникновением ориентационного порядка появляются:

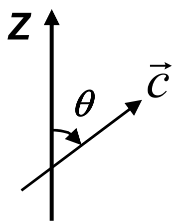
$\varepsilon_a = \varepsilon_{11} - \varepsilon_{\perp}$ ***-анизотропия диэлектрической проницаемости***

$\chi_a = \chi_{11} - \chi_{\perp}$ ***-анизотропия магнитной восприимчивости***

$\Delta n = n_o - n_e$ ***- двойное лучепреломление***

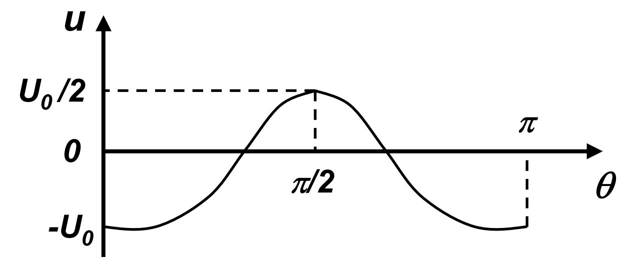
III. Теория фазового перехода нематик – изотроп.

Теория Майера - Заупе - теория среднего поля



$$u = -U_0 \cdot S \cdot P_2(\cos\theta).$$

$$P_2(\cos\theta) = \frac{1}{2}(3 \cdot \cos^2\theta - 1).$$



$$f = C \cdot e^{-u/T} = C \cdot e^{\frac{U_0 S}{T} P_2(\cos\theta)}. \qquad C 2\pi \int_{-1}^{1} e^{\frac{U_0 S}{2T}(3x^2 - 1)} dx = 1 \qquad (\cos\theta = x).$$

$$C 2\pi \cdot e^{-\frac{U_0 S}{2T}} \int_{-1}^{1} e^{m \cdot x^2} dx = 1$$ **где** $$m = \frac{3U_0 S}{2T} = \alpha \cdot S, \quad \alpha = \frac{3U_0}{2T}.$$

Итак

$$4\pi C \cdot e^{-\frac{U_0 S}{2T}} \underbrace{\int_0^1 e^{m \cdot x^2} dx}_{D(m)} = 1 \quad \Rightarrow C = \frac{1}{4\pi \cdot D(m)} e^{U_0 S/2T}. \qquad f = \frac{1}{4\pi \cdot D(m)} e^{m \cdot x^2} \qquad (\cos\theta = x).$$

$$S = \langle P_2(\cos\theta) \rangle = \int P_2(\cos\theta)\cdot f(\theta)\cdot d\Omega = \frac{2\pi\cdot 2}{4\pi\cdot D(m)\cdot 2}\int_0^1 (3x^2-1)\cdot e^{m\cdot x^2}\,dx =$$

$$= \frac{1}{2\cdot D}\left[\underbrace{3\int_0^1 x^2\cdot e^{m\cdot x^2}\,dx}_{\partial D/\partial m} - \underbrace{\int_0^1 e^{m\cdot x^2}\,dx}_{D(m)}\right] = \frac{3}{2}\cdot\frac{1}{D}\cdot\frac{\partial D}{\partial m} - \frac{1}{2} \equiv \frac{1}{2}\left(3\frac{\partial \ln D}{\partial m} - 1\right).$$

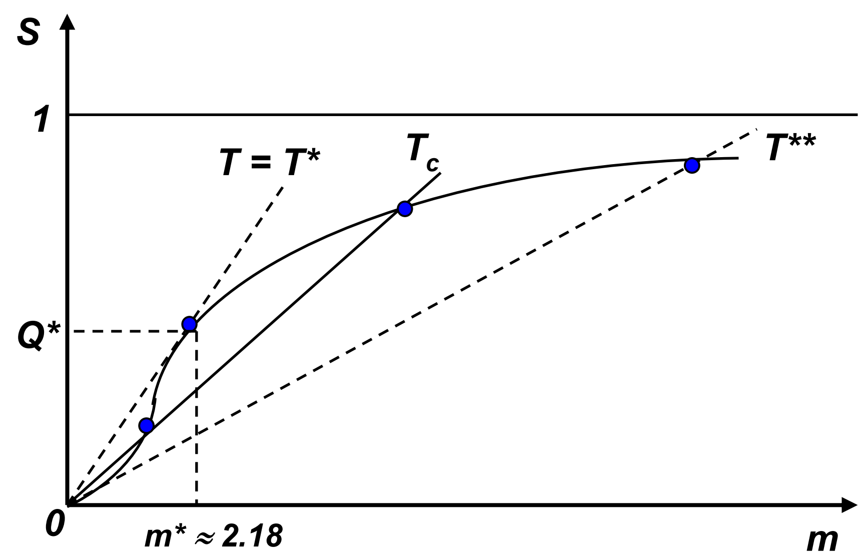
Итак,

$$S = \frac{1}{2}\left(3\frac{\partial \ln D}{\partial m} - 1\right),$$

$$D = \int_0^1 e^{m\cdot x^2}\,dx, \quad m = \frac{3U_0}{2T}\cdot S = \alpha\cdot S.$$

!!!

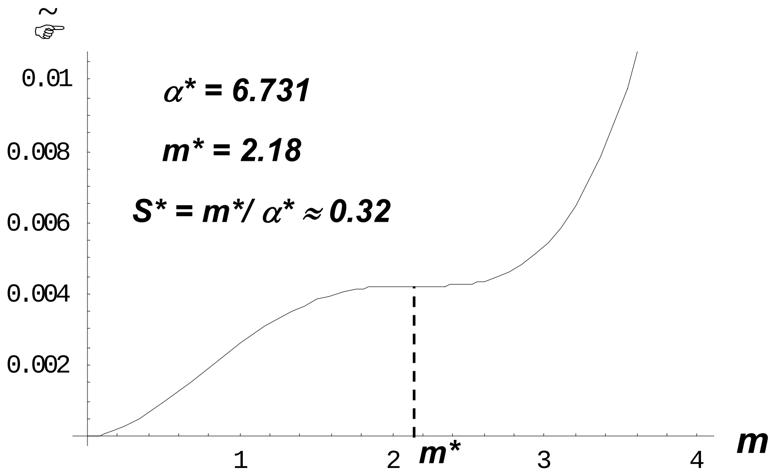
$$\underline{\underline{\frac{m}{\alpha} = \frac{3}{2}\cdot\frac{\partial \ln D}{\partial m} - \frac{1}{2}.}}$$

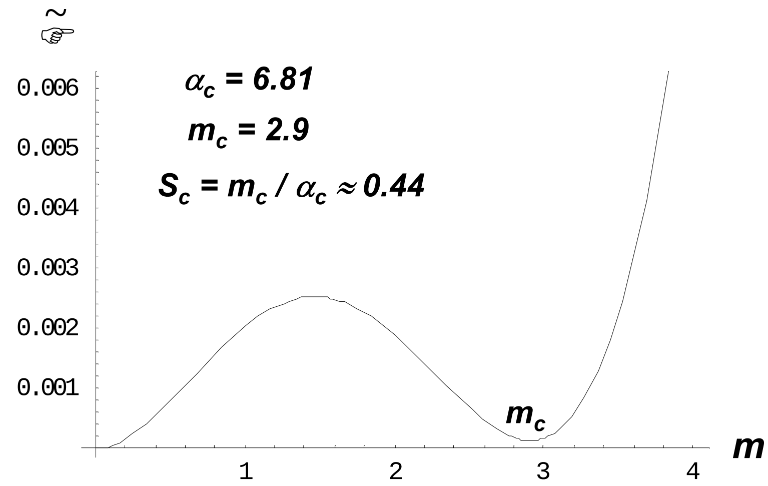


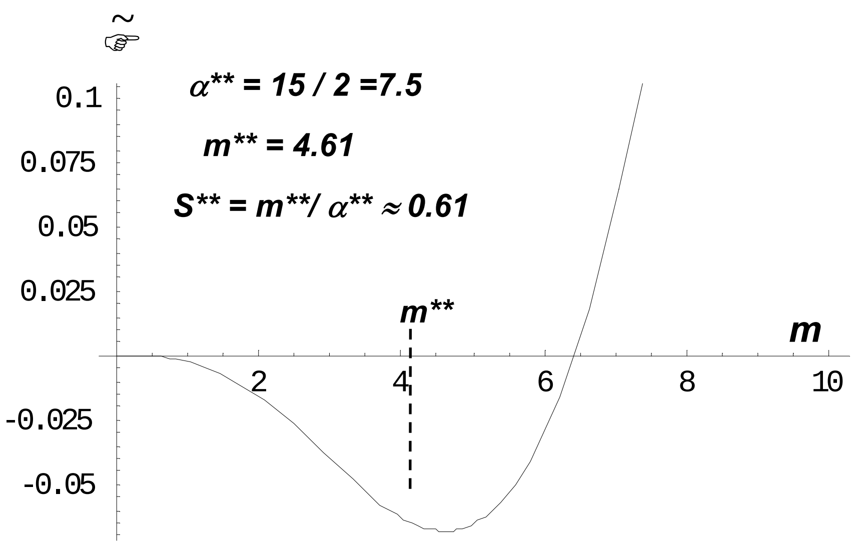
$\alpha^* \approx 6.731 \;\Rightarrow\; U_0 / T^* = 4.54;\;\; T^* / U_0 = 0.22$

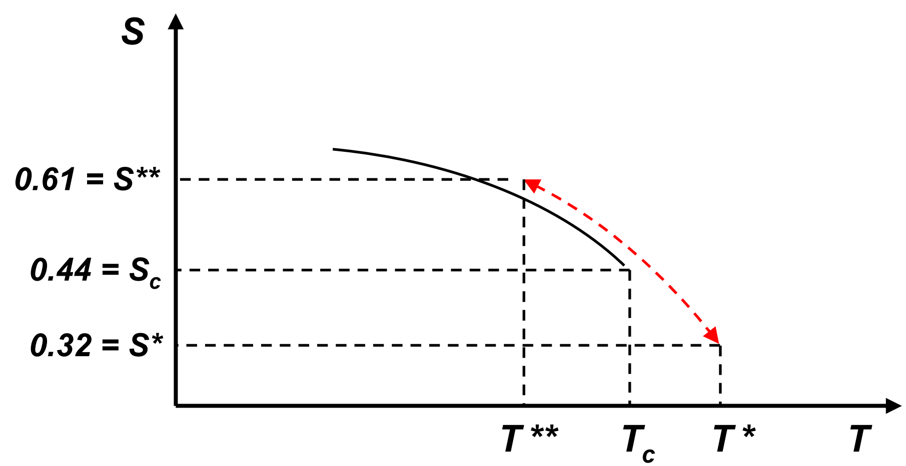
$S^* = m^*/\alpha^* \approx 0.32$

$$\tilde{☞} = ☞ / T = \frac{m}{3}\left(1+\frac{m}{\alpha}\right) - \ln D(m).$$





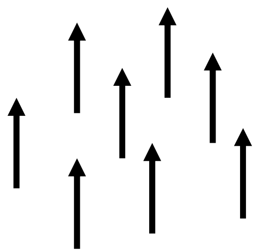




IV. Ориентационная упругость НЖК

В идеальном монокристалле НЖК (отсутствуют внешние поля):

$$Q_{ij} = S(T)\cdot(n_i n_j - \frac{1}{3}\delta_{ij}), \quad S = Const, \quad \vec{n} = Const.$$

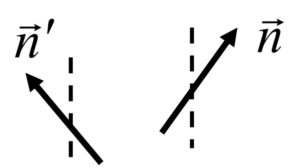


Однородное поле директора

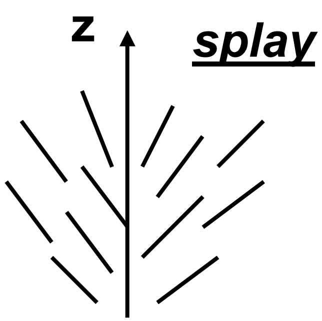
В результате внешних воздействий поле директора становится неоднородным. При $a/l \ll 1$ *(a ~ 20 Å – молек. размер, l ~ 0.01- 0.1 мкм – характерный размер искажения)* $S = Const, \vec{n}(\vec{r})$.

В ЖК <u>ориентационные</u> деформации связаны с искажением поля директора $\vec{n}(\vec{r})$, ***с его «отклонением от однородности».***

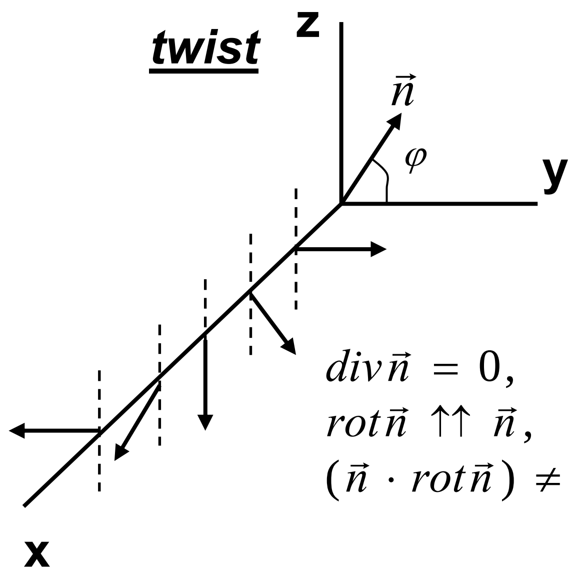
<u>Ориентационные</u> деформации характеризуются: $\frac{\partial Q_{ij}}{\partial x_k} \sim S n_i \frac{\partial n_j}{\partial x_k}$



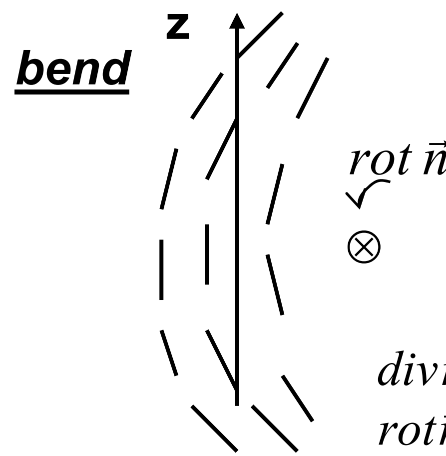
$$F_{el} = \frac{K_1}{2}(div\vec{n})^2 + \frac{K_2}{2}(\vec{n}\cdot rot\vec{n})^2 + \frac{K_3}{2}(\vec{n}\times rot\vec{n})^2$$ ***- плотность упругой энергии***



$div\,\vec{n} \neq 0,$
$rot\,\vec{n} = 0$



$div\,\vec{n} = 0,$
$rot\,\vec{n} \uparrow\uparrow \vec{n},$
$(\vec{n}\cdot rot\,\vec{n}) \neq 0$



$div\,\vec{n} = 0,$
$rot\,\vec{n} \perp \vec{n},$
$(\vec{n}\times rot\,\vec{n}) \neq 0$

Twist. $n_x = 0; n_y = \cos\varphi(x); n_z = \sin\varphi(x).$

$$rot\ \vec{n} = -\frac{\partial\varphi}{\partial x}(\vec{j}\cos\varphi + \vec{k}\sin\varphi) = -\frac{\partial\varphi}{\partial x}\cdot\vec{n} \Rightarrow rot\vec{n} \uparrow\uparrow \vec{n}$$

K_i* – *константы упругости (Озеен, Франк). ***[K_i]*** **= дин,** ***K_i*** **> 0.**

При $\vec{n} = Const, F_{el} = \min = 0$

Для ПАА при 120 ^{0}С $K_1 = 5\cdot 10^{-7}$ дин; $K_2 = 3.8\cdot 10^{-7}$ дин; $K_3 = 10.1\cdot 10^{-7}$ дин.

$\underline{K_3 > K_1 > K_2}$!

$K_i(Q)$. При $T \to T_{NI}$, $Q \to 0$ и $K_i \to 0$.

Ориентационная упругость исчезает в изотропной фазе.

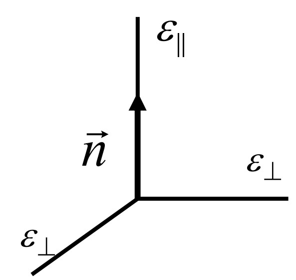
V. Влияние электрического и магнитного полей на НЖК

Вклад в плотность свободной энергии, связанный с диэлектрической и диамагнитной анизотропией

1. Диэлектрический вклад.

$$F_э = -\frac{1}{8\pi} D_i E_i = -\frac{1}{8\pi}\varepsilon_{ij} E_i E_j = -\frac{1}{8\pi}(\varepsilon_\perp \delta_{ij} E_i E_j + \varepsilon_a n_i E_i n_j E_j) =$$

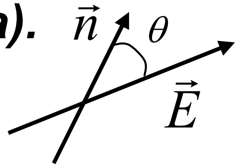
$$= -\frac{1}{8\pi}\varepsilon_\perp \vec{E}^2 \underline{-\frac{1}{8\pi}\varepsilon_a (\vec{n}\cdot\vec{E})^2},$$ **где** $D_i = \varepsilon_{ij} E_j,\ \varepsilon_{ij} = \varepsilon_\perp \delta_{ij} + \varepsilon_a n_i n_j,$



Если $\varepsilon_a > 0,\ F_э = \min$ **при** $\vec{n} \parallel \vec{E}$.

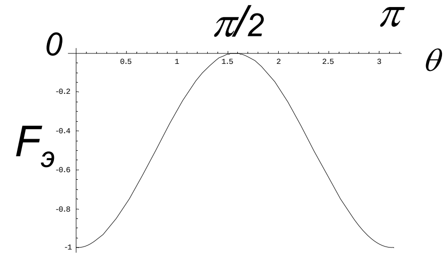
Если $\varepsilon_a < 0,\ F_э = \min$ **при** $\vec{n} \perp \vec{E}$.

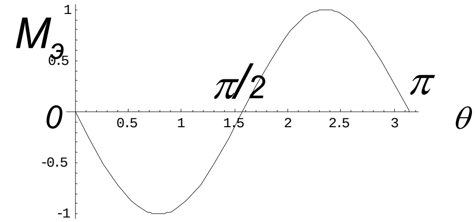
Пояснения.

a). 

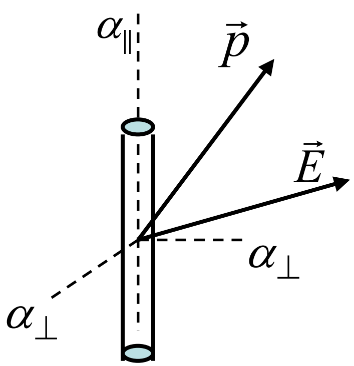
$$F_э = -\frac{\varepsilon_a E^2}{8\pi}\cos^2\theta;$$

$$M_э = -\frac{\partial F_э}{\partial\theta} = -\frac{\varepsilon_a E^2}{8\pi}\sin 2\theta$$





b). Неполярные молекулы.



$p_i = \alpha_{ij}E_j,$ α_{ij} ***- тензор поляризуемости молекулы***

$$\alpha_\parallel > \alpha_\perp \quad \Rightarrow \varepsilon_a > 0.$$

Электрическое поле стремится повернуть директор за счет анизотропии диэлектрической проницаемости. Направление вращения зависит от знака ε_a.

2. Диамагнитный вклад.

$$F_m = -\frac{1}{2} M_i H_i = -\frac{1}{2}\chi_{ij} H_i H_j = -\frac{1}{2}\chi_\perp H^2 - \underline{\frac{1}{2}\chi_a (\vec{n}\cdot\vec{H})^2},$$ **где** $M_i = \chi_{ij} H_j$, $\chi_a = \chi_\parallel - \chi_\perp$,

$\chi_\parallel, \chi_\perp < 0.$

В магнитном поле то же, что в электрическом: $\dfrac{\varepsilon_a}{8\pi} \Leftrightarrow \dfrac{\chi_a}{2}$