УДК 532.6

ОБ УТОЧНЕНИИ ГРАНИЧНЫХ УСЛОВИЙ ДЛЯ НЕМАТИЧЕСКОГО ЖИДКОГО КРИСТАЛЛА В ОДНОКОНСТАНТНОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

А. Г. Калугин[1]

В работе рассматриваются краевые условия в модели слабого сцепления вектора ориентации на границе для нематического жидкого кристалла в случае общего положения и для одноконстантного приближения энергии Франка упругих искажений поля директора. Показано, что применение одноконстантного приближения является корректным только в одномерном случае, а для двух- и трехмерных задач оно существенным образом упрощает граничные условия, при этом по сравнению с общим выражением для энергии Франка меняется тип краевой задачи.

Ключевые слова: нематические жидкие кристаллы, граничные условия, одноконстантное приближение.

In the presented work the boundary conditions for nematic liquid crystal in case of weak anchoring are studied. The cases of general expression and one-constant approximation for Frank energy are considered. It is shown that one-constant approximation is correct for one-dimensional problems only and for two- and three-dimensional one this model simplifies boundary conditions and changes their type.

Key words: nematic liquid crystals, boundary conditions, one-constant approximation.

1. Нематический жидкий кристалл (НЖК) — среда, молекулы или структурные единицы которой как правило имеют сильновытянутую форму и в жидкокристаллическом состоянии их длинные оси в частице сплошной среды располагаются в среднем в одном направлении. Это направление описывается единичным вектором $|\vec{n}| \equiv 1$ [1]. С учетом свойств симметрии нематика [2] и гипотезы об эквивалентности направлений $\vec{n}$ и $-\vec{n}$ [1,2] в разложении внутренней энергии Франка упругих искажений поля директора $F_V = C^{ijkl}\nabla_i n_j \nabla_k n_l$ будут 10 независимых коэффициентов C^{ijkl} [3]. Тождества $n^i\nabla_j n_i \equiv 0$ и $n^i\nabla_i n^k = -[\vec{n}, \vec{\mathrm{rot}}\,\vec{n}]^k$, выполняющиеся для единичного вектора, позволяют привести выражение для энергии Франка к виду, в котором присутствует только четыре независимых коэффициента при производных:

$$2F_V = K_1(\mathrm{div}\,\vec{n})^2 + K_2(\vec{n}, \vec{\mathrm{rot}}\,\vec{n})^2 + K_3|[\vec{n}, \vec{\mathrm{rot}}\,\vec{n}]|^2 + K_{24}\nabla_i(n^k\nabla_k n^i - n^i \mathrm{div}\,\vec{n}) . \tag{1}$$

Во многих случаях для нематиков рассматривается одноконстантное приближение, когда полагаются равными объемные коэффициенты в энергии Франка $K_1 = K_2 = K_3 = K$, обычно близкие по величине для типичных представителей НЖК [2], слагаемое с K_{24} при этом не учитывается:

$$2F_V = K\nabla_i n_j \nabla^i n^j + K_{24}\nabla_i(n^k\nabla_k n^i - n^i \mathrm{div}\,\vec{n}) . \tag{2}$$

В ранних работах по жидким кристаллам в качестве краевых условий для директора обычно использовалось условие жесткого сцепления, когда ориентация на границе считалась заданной, это также позволяло отбросить дивергентное слагаемое, не дающее вклад в уравнения внутри объема. В работе [4] была предложена модель слабого сцепления, в которой направление вектора ориентации на границе находилось из условия минимума поверхностной энергии. В этом случае граничные условия, полученные, например, на основе применения вариационного принципа, можно записать в виде [5]:

$$\left(\delta_k^j - n^j n_k\right)\left(\frac{\partial F_V}{\partial \nabla_i n^j} m_i + \frac{dF_S}{dn_m} m_j\right) = 0 , \tag{3}$$

[1] *Калугин Алексей Георгиевич* — канд. физ.-мат. наук, доцент каф. гидромеханики мех.-мат. ф-та МГУ, e-mail: kalugin@mech.math.msu.su.

где уравнение (3) спроектировано на нормаль к $\vec{n}$ для исключения неопределенного множителя Лагранжа, возникающего из-за постоянства длины директора.

2. Выпишем граничные условия общего вида для трех наиболее часто встречающихся случаев, когда директор направлен вдоль (планарная ориентация) или перпендикулярно (гомеотропная) границе, а F_V задана выражением (1). Пусть НЖК занимает область $z \leqslant 0$ в декартовых координатах (x, y, z), а компоненты директора зависят от переменных x и z, тогда краевые условия для указанных случаев принимают вид:

1) $\vec{n} = (1, 0, 0)$, $\quad K_1(n_x^1 + n_z^3) - K_{24}n_x^1 = f_S\,, \qquad K_2 n_z^2 = 0;$
2) $\vec{n} = (0, 1, 0)$, $\quad K_2(n_z^1 - n_x^3) + K_{24}n_x^3 = 0\,, \qquad K_1(n_z^3 + n_x^1) - K_{24}n_x^1 = f_S;$
3) $\vec{n} = (0, 0, 1)$, $\quad K_3 n_z^1 + K_{24}n_x^3 = f_S\,, \qquad K_3 n_z^2 = 0.$

Здесь f_S — поверхностная сила, определяемая из поверхностной энергии, в качестве которой, например, можно взять выражение $2F_S = 2\gamma + W(1 - (\vec{n}, \vec{m})^2)$ [4], где $\vec{m}$ — единичный вектор, составляющий заданный угол с нормалью к границе, который при этом может вращаться по конусу вокруг нормали. В качестве примера использования таких условий можно указать работы [6-10].

Аналогичные граничные условия для одноконстантного приближения (2) принимают вид:

1) $Kn_z^3 = f_S$, $n_z^2 = 0$; 2) $Kn_z^1 = 0$, $Kn_z^3 = f_S$; 3) $Kn_z^1 = f_S$, $Kn_z^2 = 0$.

Из этих соотношений видно, что применение одноконстантного приближения допустимо для одномерных задач, когда все зависит только от одной переменной z. Для двумерных и трехмерных задач это приближение является некорректным, поскольку может менять тип граничных условий в случае пренебрежения слагаемым с коэффициентом K_{24}. При учете дивергентного слагаемого для одноконстантного приближения, например в [11-13], вид граничных условий не меняется по сравнению с общим случаем, однако оценка величины K_{24}, полученная из этих условий будет отличаться от неодноконстантного приближения. При этом можно привести пример как работ, где в двумерной задаче при одноконстантном приближении в граничные условия входят касательные производные [14], так и работы, где эти производные отсутствуют [15-17].

Таким образом корректное применение одноконстантного приближения для неодномерных задач возможно только в случае жесткого сцепления директора с границей. В случае слабого сцепления такая модель меняет тип граничных условий, поскольку не учитываются касательные к границе производные директора. Это упрощение, например, не допускает класс периодических решений, рассмотренных в работах [6-12] и ряде других. При этом в некоторых случаях можно применять одноконстантное приближение, выделив дивергентное слагаемое в энергии Франка с отдельным коэффициентом, что сохранятт тип граничных условий, однако такой подход дает возможность получения только качественных решений и не позволяет делать правильные оценки физических величин.

Работа поддержана РФФИ, грант № 15-01-00361.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Leslie F. M.* Theory of flow phenomena in liquid crystals. Advances in liquid crystals. Ed. by G.H. Brown. Academic Press. 1979. **4**. 1-82.
2. *Сонин А. С.* Введение в физику жидких кристаллов. М.: Наука, 1983, 319 с.
3. *Лохин В. В., Седов Л. И.* Нелинейные тензорные функции от нескольких тензорных аргументов. Прикл.матем. и мех. 1963. **27**, № 3. 393-417.
4. *Papini A., Papoular M.* Distorsion d'une lamelle nematique sous champ magnertique conditions d'ancrage aux parois // J. Phys. (Paris) Colloq. 1969. **30 (C4)**. 54-58.
5. *Калугин А.Г., Голубятников А.Н.* О равновесной форме капли нематического жидкого кристалла // Тр. Матем. ин-та РАН. 1998. **223**. 171-177.
6. *Kini U. D.* Magnetic and electric field induced periodic deformations in planar oriented nematics // Liquid Crystals. 1998. **24**. 177-199.
7. *Pergamenshchik V. M.* Spontaneous deformations of the uniform director ground state induced by the surfacelike elastic terms in a thin planar nematic layer // Phys. Rev. E. 2000. **61**. 3936-3941.
8. *Rey A. D.* Young-Laplace equation for liquid crystal interfaces // J. Chem. Phys. 2000. **113**. 10820-10823.
9. *Alexe-Ionescu A. L., Barbero G., Lelidis I.* Periodic deformations in nematic liquid crystals // Phys. Rev. E. 2002. **66**. 061705-1-10.
10. *Barbero G., Evangelista L. R. , Lelidis I.* Spontaneous periodic distortions in nematic liquid crystals: Dependence on the tilt angle // Phys. Rev. E. 2003. **67**. 051708-1-4.

11*Голубятников А.Н., Калугин А.Г.* О коротких поверхностных волнах в анизотропных жидкостях // Вестник Московского университета. Серия 1. Математика. Механика. 2001. № 1. 42-43.

12. *Kralj S., Rosso R., Virga E.G.* Periodic saddle-splay Freedericksz transition in nematic liquid crystals // Eur. Phys. J. E. 2005. **17**. 37-44.
13. *Калугин А.Г.,* О равновесии слоя нематического жидкого кристалла с неоднородной границей // Известия РАН: механика жидкости и газа. 2015, № 2, с. 3-7.
14.*Sparavigna A., Lavrentovich O.D., Strigazzi A.* Magnetic field effect on periodic stripe domains in nematic liquid crystals // Phys. Rev. E. 1995. **51**, № 1. 792-796.
15. *Pikin S., Ryschenkow G., Urbach W.* On new type of electrohydrodynamics instability in tilted nematic layers // J. Phys. France. 1976. **37**. 241-244.
16. *Ignes-Mullol J., Baudry J., Lejcek L., Oswald P.* Formation of disclination lines near a free nematic interface // Phys. Rev. E. 1999. **59**. 568-577.
17. *Manyuhina O.V.* Shaping thin nematic films with competing boundary conditions // Europ. Phys. J. E. 2014. **37 (6)**. 1-5.

Поступила в редакцию
23.11.2016.

Alexey Kalugin
About corrected boundary conditions for nematic liquid crystal in case of one-constant approximation
Key words: nematic liquid crystals, boundary conditions, one-constant approximation