

ФЛУКТУАЦИИ В ОГРАНИЧЕННЫХ ЯЧЕЙКАХ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛОВ ВО ВНЕШНEM ПОЛЕ

A. Ю. Вальков^b, В. П. Романов^a*, М. В. Романов^a

^a Санкт-Петербургский государственный университет
198904, Санкт-Петербург, Россия

^b Санкт-Петербургский институт внешнеэкономических связей, экономики и права
198104, Санкт-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 3 апреля 2001 г.

Рассчитаны пространственные корреляционные функции флюктуаций ориентации в ограниченных ячейках смектических и нематических жидкых кристаллов. Учитывается влияние внешних полей и конечность энергии сцепления с поверхностью. Рассматриваются случаи положительной и отрицательной анизотропии магнитной восприимчивости или диэлектрической проницаемости. Вычисления основаны на разбиении степеней свободы на объемные и поверхностные и сведении проблемы вычисления континуального интеграла, определяющего корреляционную функцию, к решению уравнения Эйлера с соответствующими граничными условиями первого или третьего рода. Найденные корреляционные функции использованы при описании интенсивности рассеянного света в нематиках для планарной и гомеотропной ориентаций. Показано, в частности, что измерения угловой зависимости интенсивности рассеянного света при различных значениях внешнего поля могут быть надежным методом определения энергий сцепления жидкого кристалла с подложкой.

PACS: 61.30.-v, 61.30.Gd, 68.10.Cr, 31.15.Kb

1. ВВЕДЕНИЕ

Одной из существенных особенностей жидких кристаллов (ЖК) является очень малая энергия ориентационного плавления. Это приводит к тому, что в упорядоченной фазе ориентация системы может значительно изменяться за счет очень слабых воздействий, т. е. восприимчивость системы чрезвычайно высока. В результате в большинстве типов ЖК существуют очень сильные флюктуации ориентации [1]. Флюктуации оказывают очень сильное влияние на многие свойства ЖК. Это касается поведения системы в окрестности фазовых переходов [1–5], оптических свойств, и прежде всего рассеяния света [1, 6], формирования вязкоупругих коэффициентов [1], флюктуационного вклада в притяжение между стенками [7–10] и т. д.

Существенной особенностью флюктуаций ориентации в ЖК является бесконечный радиус их корреляции. В такой ситуации важную роль начина-

ют играть факторы, которыми в большинстве других систем можно пренебречь. Это, в первую очередь, касается влияния внешних полей [1, 11, 12], взаимодействия ЖК с ограничивающей поверхностью [5, 8, 11, 13], конечных размеров и формы образца [3, 8, 14]. Данная проблема стала весьма актуальной в связи с многочисленными применениями ЖК в системах отображения информации. При этом особенно важны описания структуры и спектра тепловых шумов ЖК в капсулированных ячейках и твист-ячейках.

Статистические свойства флюктуаций описываются с помощью корреляционных функций. Первые расчеты пространственных корреляционных функций флюктуаций в ЖК проводились для неограниченных нематических (НЖК) и смектических А (СЖК-А) жидких кристаллов [15]. Дальнейшее развитие этих исследований проходило в направлении расширения классов ЖК [1], типов флюктуаций [16], учета динамических процессов [1], учета конечности системы и взаимодействия молекул ЖК с поверхностью [10, 17–21].

*E-mail: vadim.romanov@pobox.spbu.ru

Наиболее существенные трудности возникают при расчетах корреляционных функций в конечных системах. Чаще всего рассматривается случай флюктуаций в плоской ячейке. В работах [17–19] рассматривался простейший случай жестких граничных условий в НЖКК. Корреляционная функция, полученная в этих работах, имела вид бесконечного ряда по собственным функциям системы. Более реалистичная модель нежестких граничных условий, описываемых потенциалом типа Рапини [22], рассматривалась для НЖКК в [10, 20] и для СЖКК — в [21, 23]. При этом в работах [10, 20, 23] результат удалось представить в замкнутой форме, а в [21] он имел вид ряда.

Здесь следует отметить, что к вычислению корреляционных функций в конечных ЖК нет единого подхода. Применились методы разложения по собственным функциям [10, 17], метод континуального интегрирования [10], методы теории самосопряженных операторов [20, 23]. На первый взгляд создается впечатление, что в каждой работе метод был ориентирован на использование конкретных частных особенностей той или иной системы.

В настоящей работе предлагается схема расчета корреляционных функций в ограниченных ЖК, объединяющая подходы работ [10, 17, 18, 20, 21], которая позволяет получать результат в замкнутой форме в общем случае многокомпонентного параметра порядка.

Этот подход применяется для расчета корреляционных функций в плоско-параллельной ячейке НЖКК и СЖКК-*A* в присутствии внешнего поля. В данной работе мы рассматриваем случай, когда направления ориентации директора внешним полем и ограничивающими поверхностями совпадают. Анализируются системы с положительной и отрицательной анизотропией магнитной восприимчивости χ_a или диэлектрической проницаемости. В наиболее часто рассматриваемом в литературе случае $\chi_a > 0$ равновесное положение директора направлено вдоль внешнего поля. В случае отрицательной анизотропии в равновесии директор направлен поперек магнитного поля. Для таких систем магнитное поле подавляет только одну из двух флюктуационных мод директора, а другая остается сингулярной [24].

Получено явное выражение для корреляционной функции в смектиках *A* и нематиках в плоской геометрии при одновременном учете внешнего поля и влияния поверхности. Подробно проанализировано поведение корреляционной функции вблизи поверхности. Показано, что в зависимости от параметров системы флюктуации вблизи поверхности могут

быть как больше, так и меньше, чем в объеме. Впервые подробно изучены флюктуации в ограниченной ячейке с планарной геометрией без использования одноконстантного приближения.

В разд. 2 вводятся основные уравнения, описывающие энергию ограниченного жидкого кристалла во внешнем поле. В разд. 3 развивается общий подход к вычислению пространственной корреляционной функции флюктуаций векторного параметра порядка в ограниченной системе. В разд. 4 выводится общее выражение для корреляционной функции. В разд. 5 полученные формулы применяются для вычисления корреляционной функции флюктуаций смещений в СЖКК-*A* и флюктуаций директора в НЖКК. Подробно анализируется зависимость пространственной корреляционной функции от параметров системы, прежде всего от энергии сцепления и от приложенного внешнего поля. В разд. 6 рассчитывается интенсивность рассеянного света в ячейке жидкого кристалла. Показано, что измерения угловой зависимости рассеянного света во внешних полях позволяют определять параметры жидкого кристалла и прежде всего энергию сцепления.

2. СВОБОДНАЯ ЭНЕРГИЯ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ ЯЧЕЙКИ ВО ВНЕШНEM ПОЛЕ

Для описания жидких кристаллов мы будем использовать стандартную континуальную модель [1]. В рамках этой модели при описании упругих свойств жидких кристаллов в ограниченных ячейках обычно учитываются вклады в упругую энергию трех типов:

$$F_{tot} = F_e + F_f + F_{sf}. \quad (2.1)$$

Здесь F_e — упругая энергия жидкого кристалла, F_f — вклад внешнего поля, F_{sf} — поверхностная энергия. В рамках излагаемого ниже подхода можно изучать различные типы жидких кристаллов. В данной работе мы рассмотрим нематики и смектики *A*.

Для нематического жидкого кристалла упругая энергия — это энергия Франка

$$F_e = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} [K_{11}(\operatorname{div} \mathbf{n})^2 + K_{22}(\mathbf{n} \cdot \operatorname{rot} \mathbf{n})^2 + K_{33}(\mathbf{n} \times \operatorname{rot} \mathbf{n})^2], \quad (2.2)$$

где $\mathbf{n}(\mathbf{r})$ — единичный вектор директора, K_{jj} ($j = 1-3$) — модули Франка. Минимуму F_e соответствует однородное равновесное состояние директора $\mathbf{n}^0 = \operatorname{const}$.

Для объемной энергии СЖК-*A* мы ограничимся стандартной моделью [1]:

$$F_e = \frac{1}{2} \times \\ \times \int d\mathbf{r} \left\{ B [\partial_z u(\mathbf{r}_\perp, z)]^2 + K [\nabla_\perp u(\mathbf{r}_\perp, z)]^2 \right\}. \quad (2.3)$$

Здесь $u(\mathbf{r})$ — компонента вектора смещения вдоль оси z , направленной поперек смектических слоев, B — смектическая упругая константа, связанная со сжатием смектических слоев, K — упругая константа, связанная с искажением формы слоев,

$$\nabla_\perp = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y} \right),$$

индекс « \perp » соответствует компонентам векторов поперек оси z . Модели (2.3) соответствует вектор директора

$$\mathbf{n}(\mathbf{r}) \parallel (-\nabla_\perp u, 1) \equiv \left(-\frac{\partial u}{\partial x}, -\frac{\partial u}{\partial y}, 1 \right),$$

нормальный к смектическим слоям.

Член F_f в СЖК-*A* и НЖК для магнитного или электрического поля имеет, соответственно, вид

$$F_f = -\frac{1}{2} \chi_a \int d\mathbf{r} (\mathbf{n} \cdot \mathbf{H})^2, \\ F_f = -\frac{1}{8\pi} \varepsilon_a \int d\mathbf{r} (\mathbf{n} \cdot \mathbf{E})^2, \quad (2.4)$$

где χ_a и ε_a — анизотропии магнитной восприимчивости и диэлектрической проницаемости, \mathbf{H} и \mathbf{E} — напряженности магнитного и электрического полей. Далее мы для определенности ограничимся случаем магнитного поля. Для перехода к случаю электрического поля достаточно в окончательных формулах сделать замену $\mathbf{H} \rightarrow \mathbf{E}$ и $\chi_a \rightarrow \varepsilon_a/4\pi$. Из уравнения (2.4) следует, что для $\chi_a > 0$ член F_f имеет минимум, если $\mathbf{n}^0 \parallel \mathbf{H}$, а для $\chi_a < 0$ он минимален, если $\mathbf{n}^0 \perp \mathbf{H}$.

Член F_{sf} описывает поверхностную энергию. Наиболее часто рассматривают два основных случая ориентации директора на поверхности: планарный, когда директор параллелен поверхности, и гомеотропный — когда он перпендикулярен ей. Пусть жидкий кристалл заключен в плоскопараллельную ячейку толщиной L . Введем декартову систему координат $\{\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z\}$ с началом в центре ячейки и осью \mathbf{e}_z , направленной перпендикулярно ограничивающим ячейку плоскостям $z = l_1$ и $z = l_2$, $L = l_2 - l_1$.

Для нематических жидких кристаллов будем использовать поверхностную энергию F_{sf} в форме потенциала Рапини [22]:

$$F_{sf} = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r}_\perp \sum_{j=1,2} W_j n_\perp^2(\mathbf{r}_\perp, l_j) \quad (2.5)$$

в случае гомеотропной ориентации и

$$F_{sf} = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r}_\perp \times \\ \times \sum_{j=1,2} \left[W_j^{(1)} n_x^2(\mathbf{r}_\perp, l_j) + W_j^{(2)} n_z^2(\mathbf{r}_\perp, l_j) \right] \quad (2.6)$$

в случае планарной ориентации с осью легкого ориентирования y . Здесь величины W_j , $W_j^{(1,2)}$ ($j = 1, 2$) — энергии сцепления.

Для СЖК-*A* мы ограничимся случаем, когда смектические слои перпендикулярны оси z . Тогда

$$F_{sf} = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r}_\perp \times \\ \times \sum_{j=1,2} \left[\gamma_1^{(j)} u^2(\mathbf{r}_\perp, l_j) + \gamma_2^{(j)} (\nabla_\perp u(\mathbf{r}_\perp, l_j))^2 \right], \quad (2.7)$$

где $\gamma_1^{(j)}$ — коэффициенты сцепления, а $\gamma_2^{(j)}$ — поверхностные натяжения, $j = 1, 2$. В случае свободно подвешенной смектической пленки $\gamma_1^{(j)} = 0$.

В настоящей работе мы будем интересоваться случаем, когда и ограничивающие поверхности, и внешнее поле оказывают стабилизирующее влияние на ориентацию директора. Поэтому мы не будем рассматривать ситуации конкуренции между ориентирующими действиями поля и поверхностей (эффект Фредерикса) или двух поверхностей между собой (твист-ячейка) и т. п.

В НЖК мы будем интересоваться отклонениями $\delta\mathbf{n}$ вектора директора \mathbf{n} от своего равновесного значения \mathbf{n}^0 , $\delta\mathbf{n} = \mathbf{n} - \mathbf{n}^0$. В главном порядке $\delta\mathbf{n} \perp \mathbf{n}^0$. В СЖК-*A* в качестве флуктуирующего параметра мы возьмем величину $u(\mathbf{r})$, которая описывает отклонение смектических слоев от равновесного состояния.

Из структуры формул (2.2)–(2.7) следует, что флуктуационный вклад в полную энергию (2.1) в гауссовом приближении представляет собой квадратичную форму флуктуирующего параметра $u(\mathbf{r})$ или $\delta\mathbf{n}$, содержащую градиенты не выше второго порядка.

Обычный метод решения задачи о флуктуациях в неограниченных НЖК основан на переходе к трехмерному спектру Фурье. В плоскопараллельной ячейке естественно выполнить двумерное преобразование

вание Фурье. Мы будем пользоваться преобразованием Фурье в виде

$$f(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int f(\mathbf{q}, z) e^{i\mathbf{qr}_\perp} d\mathbf{q}.$$

Таким образом, с формальной точки зрения задача состоит в изучении корреляционной функции скалярного параметра $\phi(\mathbf{q}, z) = u(\mathbf{q}, z)$ или двухкомпонентного вектора $\phi(\mathbf{q}, z) = \delta\mathbf{n}(\mathbf{q}, z)$. Он вносит в объемную энергию $F_{bk} = F_e + F_f$ вклад вида

$$\delta F_{bk}(\phi) = \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^2} \Phi_{bk}(\phi), \quad (2.8)$$

где Φ_{bk} — положительно определенная квадратичная форма вида

$$\begin{aligned} \Phi_{bk} = & \frac{1}{2} \times \\ & \times \int_{l_1}^{l_2} \left(\phi'^+ \hat{a} \phi' + \phi'^+ \hat{b} \phi + \phi^+ \hat{b}^+ \phi' + \phi^+ \hat{c} \phi \right) dz. \end{aligned} \quad (2.9)$$

Здесь $\phi = \phi(\mathbf{q}, z)$, $\phi' = \partial\phi(\mathbf{q}, z)/\partial z$ — n -компонентные векторы, $\hat{a} = \hat{a}(\mathbf{q})$, $\hat{b} = \hat{b}(\mathbf{q})$, $\hat{c} = \hat{c}(\mathbf{q})$ — квадратные $n \times n$ -матрицы, причем \hat{a} , \hat{c} — эрмитовы, верхний индекс «+» обозначает эрмитово сопряжение. Для СЖК- A размерность $n = 1$, а для НЖК $n = 2$.

Вклад ϕ в поверхностную энергию систем (2.5), (2.6) и (2.7) имеет вид

$$\delta F_{sf}(\phi) = \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^2} \Phi_{sf}(\phi), \quad (2.10)$$

где

$$\Phi_{sf} = \frac{1}{2} (\phi_1^+ \hat{w}_1 \phi_1 + \phi_2^+ \hat{w}_2 \phi_2), \quad (2.11)$$

$\phi_1 = \phi(\mathbf{q}, l_1)$, $\phi_2 = \phi(\mathbf{q}, l_2)$, а эрмитовы положительно определенные $n \times n$ -матрицы $\hat{w}_{1,2}(\mathbf{q})$ относятся, соответственно, к первой ($z = l_1$) и второй ($z = l_2$) границам.

Конкретный вид матриц \hat{a} , \hat{b} , \hat{c} , \hat{w}_1 , \hat{w}_2 зависит от типа жидкого кристалла и изучаемой геометрии. Они будут приведены в разд. 5.

3. ОБЩИЙ МЕТОД ДЛЯ ВЫЧИСЛЕНИЯ КОРРЕЛЯЦИОННОЙ ФУНКЦИИ В ЯЧЕЙКЕ КОНЕЧНЫХ РАЗМЕРОВ

Нас будет интересовать корреляционная функция флуктуаций в общем случае векторного параметра порядка $\phi(\mathbf{q}, z)$:

$$g_{\alpha\beta}(\mathbf{q}; z, z_1) = \langle \phi_\alpha(\mathbf{q}, z) \phi_\beta^*(\mathbf{q}, z_1) \rangle, \quad (3.1)$$

где угловые скобки $\langle \dots \rangle$ обозначают статистическое усреднение, а верхний индекс «*» — комплексное сопряжение.

Для вычисления тензора \hat{g} следует провести усреднение выражения $\phi_\alpha(z) \phi_\beta^*(z_1)$ по всевозможным значениям $\phi(\mathbf{q}, z)$ с весовой функцией $\exp(-F_{tot}(\phi)/k_B T)$.

Поскольку величина $\phi(\mathbf{r})$ вещественна, то $\phi(-\mathbf{q}, z) = \phi^*(\mathbf{q}, z)$, следовательно, величины $\phi(\mathbf{q}, z)$ и $\phi(-\mathbf{q}, z)$ не независимы. Удобно переписать $F_{tot}(\phi)$ через независимые переменные. Для этого обычно переходят от интегрирования по всему спектру \mathbf{q} к интегрированию по полупространству [25], которое мы условно будем обозначать « $\mathbf{q} \geq 0$ »:

$$F_{tot}(\phi) = 2 \int_{\mathbf{q} \geq 0} \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^2} \Phi_{tot}(\phi), \quad (3.2)$$

где

$$\Phi_{tot}(\phi) = \Phi_{bk}(\phi) + \Phi_{sf}(\phi).$$

В гауссовом приближении флуктуационные моды $\phi(\mathbf{q}, z)$ для разных $\mathbf{q} \geq 0$ являются независимыми. Поэтому можно ограничиться рассмотрением некоторого фиксированного \mathbf{q} . Плотность вероятности флуктуации $\phi(z) = \phi(\mathbf{q}, z)$ равна

$$\rho(\phi) = \frac{1}{Z} \exp \left[-2 \frac{\Phi_{tot}(\phi)}{k_B T} \right], \quad (3.3)$$

где статистическая сумма

$$Z = \int \exp \left[-2 \frac{\Phi_{tot}(\phi)}{k_B T} \right] \mathcal{D}\phi. \quad (3.4)$$

Здесь символ континуального интегрирования $\int \dots \mathcal{D}\phi$ соответствует перебору всевозможных пар функций $\text{Re}(\phi(\mathbf{q}, z))$ и $\text{Im}(\phi(\mathbf{q}, z))$ при $l_1 \leq z \leq l_2$. Обратим внимание на коэффициент 2 в (3.2)–(3.4). Его возникновение связано с интегрированием по полупространству $\mathbf{q} \geq 0$ в (3.2).

Парная корреляционная функция при этом выражается континуальным интегралом

$$g_{\alpha\beta}(z, z_1) = \int \phi_\alpha(z) \phi_\beta^*(z_1) \rho(\phi) \mathcal{D}\phi. \quad (3.5)$$

Наряду с (3.5) используется представление $g_{\alpha\beta}$ в виде функциональной производной. Для этого вводится производящая функция

$$Z(\epsilon) = \int \exp \left[-\frac{2\Phi_{tot}(\phi) + \mathcal{S}(\phi; \epsilon)}{k_B T} \right] \mathcal{D}\phi, \quad (3.6)$$

где источник

$$\mathcal{S}(\phi; \epsilon) = \int_{l_1}^{l_2} [\phi(z) \cdot \epsilon^*(z) + \phi^*(z) \cdot \epsilon(z)] dz, \quad (3.7)$$

а функция $\epsilon(\mathbf{q}, z) = \epsilon^*(-\mathbf{q}, z)$ обозначает фиктивное внешнее поле, которое будет положено равным нулю в окончательных результатах. Тогда корреляционная функция \hat{g} может быть вычислена через среднее значение $\bar{\phi}$ в присутствии поля ϵ

$$\begin{aligned} \bar{\phi}(z, \epsilon) &= \frac{1}{Z(\epsilon)} \times \\ &\times \int \phi(z) \exp \left[-\frac{2\Phi_{tot}(\phi) + \mathcal{S}(\phi; \epsilon)}{k_B T} \right] \mathcal{D}\phi \quad (3.8) \end{aligned}$$

следующим образом:

$$g_{\alpha\beta}(z, z_1) = -k_B T \left. \frac{\delta \bar{\phi}_\alpha(z, \epsilon)}{\delta \epsilon_\beta(z_1)} \right|_{\epsilon=0}. \quad (3.9)$$

Здесь мы считаем, что для комплексных ϵ символ функционального дифференцирования $\delta/\delta\epsilon$ в (3.9) имеет следующий смысл:

$$\frac{\delta}{\delta\epsilon} = \frac{1}{2} \left(\frac{\delta}{\delta \operatorname{Re}(\epsilon)} - i \frac{\delta}{\delta \operatorname{Im}(\epsilon)} \right). \quad (3.10)$$

Особенность нашей задачи состоит в том, что $\Phi_{tot}(\phi)$ содержит поверхностное слагаемое Φ_{sf} , которое зависит от конечного числа ($2n$) степеней свободы $\phi_1 = \phi(l_1)$ и $\phi_2 = \phi(l_2)$. Поэтому естественно разбить степени свободы ϕ на две части, представив интеграл (3.5) как континуальный интеграл с фиксированными значениями $\phi(l_j) = \phi_j$ ($j = 1, 2$) на концах интервала $[l_1, l_2]$ с последующим конечномерным интегрированием по ϕ_1, ϕ_2 :

$$\begin{aligned} g_{\alpha\beta}(\mathbf{q}; z, z_1) &= \frac{1}{Z} \times \\ &\times \int \exp \left[-\frac{2\Phi_{sf}(\phi_{1,2})}{k_B T} \right] d\phi_1 d\phi_2 \times \\ &\times \underbrace{\int \dots \int}_{\phi(l_j)=\phi_j} \exp \left(-\frac{2\Phi_{bk} + \mathcal{S}}{k_B T} \right) \times \\ &\times \phi_\alpha(z) \phi_\beta^*(z_1) \mathcal{D}\phi. \quad (3.11) \end{aligned}$$

Континуальный интеграл в (3.11) соответствует жестким граничным условиям. Следуя Фейнману [26], проведем в (3.11) сдвиг переменной интегрирования, представив функцию $\phi(z)$ в виде суммы

$$\phi(z) = \phi_0(z) + \eta(z), \quad (3.12)$$

где ϕ_0 — фиксированная функция, удовлетворяющая неоднородным граничным условиям первого рода

$$\phi_0(l_1) = \phi_1, \quad \phi_0(l_2) = \phi_2 \quad (3.13)$$

и уравнению Эйлера

$$\hat{\mathcal{L}}_E \phi_0(z) = \epsilon(z), \quad (3.14)$$

которое соответствует условию минимума показателя экспоненты $2\Phi_{bk}(\phi) + \mathcal{S}(\phi; \epsilon)$ при $l_1 < z < l_2$. При этом граничные условия в континуальном интеграле для новой переменной интегрирования $\eta(z)$ являются однородными:

$$\eta(l_1) = \eta(l_2) = 0. \quad (3.15)$$

Для энергии (2.9) дифференциальный оператор $\hat{\mathcal{L}}_E$ равен

$$\hat{\mathcal{L}}_E = \hat{a} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + (\hat{b} - \hat{b}^+) \frac{\partial}{\partial z} - \hat{c}. \quad (3.16)$$

В силу квадратичности $\Phi_{bk}(\phi)$ и линейности $\mathcal{S}(\phi; \epsilon)$ по переменной ϕ , с учетом условия равновесия $\delta(2\Phi_{bk} + \mathcal{S}) = 0$ и граничных условий (3.15), имеем

$$\begin{aligned} 2\Phi_{bk}(\phi) + \mathcal{S}(\phi; \epsilon) &\equiv \\ &\equiv 2\Phi_{bk}(\phi_0) + \mathcal{S}(\phi_0; \epsilon) + 2\Phi_{bk}(\eta). \end{aligned}$$

Здесь в правой части от параметров ϕ_1, ϕ_2 зависит только величина $\phi_0(z) = \phi_0(\phi_{1,2})$. С учетом того, что поверхностная энергия $\Phi_{sf}(\phi_{1,2})$ тоже зависит лишь от этих параметров, интегралы по ϕ_1, ϕ_2 и по η в (3.11) факторизуются. В результате степени свободы $\eta(z)$ и ϕ_1, ϕ_2 оказываются независимыми, и мы имеем

$$\begin{aligned} \langle \phi_\alpha(z) \phi_\beta^*(z_1) \rangle &= \\ &= \langle \phi_{0\alpha}(z) \phi_{0\beta}^*(z_1) \rangle_{\phi_{1,2}} + \langle \eta_\alpha(z) \eta_\beta^*(z_1) \rangle_{\eta}, \quad (3.17) \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} \langle \phi_{0\alpha}(z) \phi_{0\beta}^*(z_1) \rangle_{\phi_{1,2}} &= \int \phi_{0\alpha}(z, \phi_{1,2}) \times \\ &\times \phi_{0\beta}^*(z_1, \phi_{1,2}) \rho(\phi_1, \phi_2) d\phi_1 d\phi_2, \quad (3.18) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle \eta_\alpha(z) \eta_\beta^*(z_1) \rangle_{\eta} &= \\ &= \underbrace{\int \dots \int}_{\eta(l_j)=0} \eta_\alpha(z) \eta_\beta^*(z_1) \rho(\eta) \mathcal{D}\eta, \quad (3.19) \end{aligned}$$

а функции распределения

$$\rho(\phi_1, \phi_2) \propto \exp \left[-2 \frac{\Phi_{sf}(\phi_{1,2}) + \Phi_{bk}(\phi_{1,2})}{k_B T} \right], \quad (3.20)$$

$$\rho(\boldsymbol{\eta}) \propto \exp \left[-2 \frac{\Phi_{bk}(\boldsymbol{\eta})}{k_B T} \right]. \quad (3.21)$$

Здесь мы обозначили

$$\Phi_{bk}(\phi_{1,2}) = \Phi_{bk}(\phi_0(\phi_{1,2})).$$

В (3.18), (3.19) положено $\epsilon = 0$. Интеграл (3.18) конечномерный, гауссова типа и легко вычисляется. Интеграл в (3.19) является гауссовым континуальным интегралом и, в принципе, тоже может быть вычислен в явном виде. Однако проще корреляционную функцию (3.19) вычислить, воспользовавшись соотношением

$$\langle \eta_\alpha(z) \eta_\beta^*(z_1) \rangle_\eta = -k_B T \frac{\delta \phi_{0\alpha}(z)}{\delta \epsilon_\beta(z_1)}, \quad (3.22)$$

которое является вариантом соотношения (3.9) для случая нулевых граничных условий $\boldsymbol{\eta}(l_1) = \boldsymbol{\eta}(l_2) = 0$. Обратим внимание на то, что производная $\delta \phi_{0\alpha} / \delta \epsilon_\beta$ не зависит от величин ϕ_1, ϕ_2, ϵ , поскольку зависимость решения ϕ_0 уравнения Эйлера (3.13), (3.14) от параметров ϕ_1, ϕ_2, ϵ линейна.

Отметим, что величина $\Phi_{bk}(\phi_{1,2})$, входящая в формулу (3.20), может быть выражена через значения $\phi_0(z)$ и $\phi'_0(z)$ на границах $z = l_1, z = l_2$. Действительно, если в формуле (2.9) воспользоваться уравнением Эйлера (3.14), то после проведения интегрирования по частям при $\epsilon = 0$ получаем

$$\Phi_{bk}(\phi_0) = \frac{1}{2} (\phi_0^+ \hat{a} \phi'_0 + \phi_0^+ \hat{b} \phi_0) \Big|_{l_1}^{l_2}. \quad (3.23)$$

Таким образом, вычисление корреляционной функции $\hat{g}_{\alpha\beta}(\mathbf{q}; z, z_1)$ сводится к решению уравнения Эйлера (3.14) с граничными условиями первого рода (3.13) и последующему вычислению конечномерного интеграла (3.18) и функциональной производной (3.22).

Альтернативный метод вычисления корреляционной матрицы $\hat{g}(\mathbf{q}; z, z_1)$ основан на прямом вычислении функциональной производной (3.9). Такая возможность связана с тем, что среднее значение $\bar{\phi}$ в (3.8) для гауссовой случайной величины может быть найдено из решения уравнения Эйлера, отвечающего условию минимума полного действия

$$2\Phi_{tot}(\phi) + \mathcal{S} = 2\Phi_{bk} + 2\Phi_{sf} + \mathcal{S}$$

в поле источника ϵ . В уравнении равновесия

$$\delta\Phi_{bk} + \delta\Phi_{sf} + \delta\mathcal{S}/2 = 0$$

проинтегрируем по частям первый, второй и третий члены из выражения (2.9) для Φ_{bk} . В промежутке $l_1 < z < l_2$ уравнение равновесия приводится к виду

$$\hat{\mathcal{L}}_E \bar{\phi}(z) = \epsilon(z), \quad (3.24)$$

идентичному (3.14). На границах $z = l_{1,2}$ в условии равновесия необходимо учесть как вклад поверхностной энергии Φ_{sf} , так и внеинтегральные члены, возникающие после интегрирования по частям Φ_{bk} . Требование обращения в нуль первой вариации действия при $z = l_2$ и $z = l_1$ дает

$$\begin{cases} \hat{a}\bar{\phi}'(l_2) + (\hat{b} + \hat{w}_2)\bar{\phi}(l_2) = 0, \\ \hat{a}\bar{\phi}'(l_1) + (\hat{b} - \hat{w}_1)\bar{\phi}(l_1) = 0. \end{cases} \quad (3.25)$$

Таким образом, для нахождения $\bar{\phi} = \bar{\phi}(\mathbf{q}, z, \phi)$ следует решить уравнение Эйлера (3.24) с граничными условиями третьего рода (3.25).

Можно получить и непосредственно уравнение для корреляционной функции $g_{\alpha\beta}$. Для этого достаточно взять функциональную производную по $\delta\epsilon(z_1)$ от уравнения Эйлера (3.24) и граничных условий (3.25). Получим

$$\begin{cases} \hat{\mathcal{L}}_E g(z, z_1) = -k_B T \delta(z - z_1) \hat{1}, \\ \hat{a}\hat{g}'(l_2, z_1) + (\hat{b} + \hat{w}_2)\hat{g}(l_2, z_1) = 0, \\ \hat{a}\hat{g}'(l_1, z_1) + (\hat{b} - \hat{w}_1)\hat{g}(l_1, z_1) = 0 \end{cases} \quad (3.26)$$

для любого фиксированного z_1 : $l_1 \leq z_1 \leq l_2$. Производные в (3.26) вычисляются по первому аргументу функции $\hat{g}(z, z_1)$. Система уравнений типа (3.26) использовалась в работах [20, 23].

4. ЯВНОЕ ВЫРАЖЕНИЕ ДЛЯ КОРРЕЛЯЦИОННОЙ ФУНКЦИИ

Решение неоднородного уравнения Эйлера

$$\hat{\mathcal{L}}_E \phi(z) = \epsilon(z)$$

нетрудно получить методом вариации произвольных постоянных. Для этого введем набор независимых решений

$$\phi_i(z) = e^{\lambda_i z} \mathbf{e}^{(i)} \quad (4.1)$$

($i = 1, \dots, 2n$) однородного уравнения

$$\hat{\mathcal{L}}_E \phi(z) = 0.$$

Векторы $\mathbf{e}^{(i)}$ являются решением системы уравнений

$$[\hat{a}\lambda_i^2 + (\hat{b} - \hat{b}^+)\lambda_i - \hat{c}] \mathbf{e}^{(i)} = 0, \quad (4.2)$$

а числа λ_i — это корни алгебраического уравнения

$$\det [\hat{a}\lambda^2 + (\hat{b} - \hat{b}^+)\lambda - \hat{c}] = 0. \quad (4.3)$$

Из свойств эрмитовости матриц \hat{a}, \hat{c} и антиэрмитовости матрицы $\hat{b} - \hat{b}^+$ вытекает, что если λ является корнем уравнения (4.3), то и $-\lambda^*$ также является его корнем. Поэтому числа λ_i можно упорядочить следующим образом: $\lambda_{j+n} = -\lambda_j^*, j = 1, \dots, n$. Если ввести матрицу $\hat{\Phi}(z)$ фундаментальных решений размерности $n \times 2n$ со столбцами из решений $\phi_i(z)$:

$$\hat{\Phi}(z) = (\phi_1(z), \phi_2(z), \dots, \phi_{2n}(z)), \quad (4.4)$$

то общее решение уравнения (3.14) при $l_1 \leq z \leq l_2$ можно записать в виде

$$\phi(z) = \hat{\Phi}(z)\mathbf{C}_0 + \int_{l_1}^{l_2} \hat{k}(z, z')\epsilon(z')dz', \quad (4.5)$$

где ядро $\hat{k}(z, z')$ — матрица размерности $n \times n$:

$$\hat{k}(z, z') = \theta(z - z')\hat{\Phi}(z)\hat{\Psi}(z'), \quad (4.6)$$

а матрица $\hat{\Psi}(z)$ размерности $2n \times n$ определяется с помощью блочных матриц:

$$\hat{\Psi}(z) = \begin{pmatrix} \hat{a}\hat{\Phi}'(z) \\ \hat{\Phi}(z) \end{pmatrix}^{-1} \hat{R}_{10}. \quad (4.7)$$

Здесь и далее мы используем обозначения

$$\hat{R}_{01} = \begin{pmatrix} \hat{0} \\ \hat{1} \end{pmatrix}, \quad \hat{R}_{10} = \begin{pmatrix} \hat{1} \\ \hat{0} \end{pmatrix}$$

— матрицы размерности $2n \times n$; $\hat{1}$ — единичная матрица n -го порядка, $\hat{0}$ — нулевая матрица n -го порядка; вектор \mathbf{C}_0 — произвольный постоянный вектор-столбец размерности $2n \times 1$, $\theta(z)$ — функция Хевисайда. Отметим, что в силу тождества $\hat{\Phi}(z)\hat{\Psi}(z) = \hat{0}$ функция $\hat{k}(z, z_1)$ непрерывна при $z = z_1$.

Равновесное решение $\phi_0(z)$ удовлетворяет граничным условиям (3.13). Подставляя уравнение (4.5) в (3.13), найдем компоненты вектора \mathbf{C}_0 . Отсюда получим

$$\begin{aligned} \phi_0(z) &= \hat{\Phi}(z)\hat{M} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix} + \\ &+ \int_{l_1}^{l_2} [\hat{k}(z, z') - \hat{\Phi}(z)\hat{M}\hat{R}_{01}\hat{k}(l_2, z')] \epsilon(z') dz', \quad (4.8) \end{aligned}$$

где $\hat{M} = \hat{M}(l_1, l_2)$ — матрица размерности $2n \times 2n$

$$\hat{M} = \begin{pmatrix} \hat{\Phi}(l_1) \\ \hat{\Phi}(l_2) \end{pmatrix}^{-1}. \quad (4.9)$$

Вычисляя функциональную производную в (3.22), находим

$$\begin{aligned} \langle \eta_\alpha(z)\eta_\beta^*(z_1) \rangle_\eta &= \\ &= k_B T [\hat{\Phi}(z)\hat{M}\hat{R}_{01}\hat{k}(l_2, z_1) - \hat{k}(z, z_1)]. \quad (4.10) \end{aligned}$$

Отметим, что при $z = l_{1,2}$ или $z_1 = l_{1,2}$ правая часть (4.10) обращается в нуль. При $\epsilon \rightarrow 0$ из (4.8) имеем

$$\begin{aligned} \langle \phi_{0\alpha}(z)\phi_{0\beta}^*(z_1) \rangle_{\phi_{1,2}} &= \\ &= \left[\hat{\Phi}(z)\hat{M} \left\langle \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix} (\phi_1^*, \phi_2^*) \right\rangle_{\phi_{1,2}} \hat{M}^+ \hat{\Phi}^+(z_1) \right]_{\alpha\beta}. \quad (4.11) \end{aligned}$$

Вычисление среднего в уравнении (4.11) проводится по формуле (3.18). Используя (4.8) при $\epsilon = 0$ в формулах (2.11), (3.23), выражение $\Phi_{bk} + \Phi_{sf}$ можно записать в виде квадратичной формы по переменным ϕ_1 и ϕ_2 :

$$\Phi_{bk} + \Phi_{sf} = \frac{1}{2}(\phi_1^*, \phi_2^*)\hat{F}_1 \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix}, \quad (4.12)$$

где $2n \times 2n$ -матрица

$$\begin{aligned} \hat{F}_1 &= [\hat{R}_{01}\hat{a}\hat{\Phi}'(l_2) - \hat{R}_{10}\hat{a}\hat{\Phi}'(l_1)]\hat{M} + \\ &+ \begin{pmatrix} -\hat{b} + \hat{w}_1 & \hat{0} \\ \hat{0} & \hat{b} + \hat{w}_2 \end{pmatrix}. \quad (4.13) \end{aligned}$$

Здесь мы использовали соотношения

$$\hat{M}^+ \hat{\Phi}^+(l_2) = \hat{R}_{01}, \quad \hat{M}^+ \hat{\Phi}^+(l_1) = \hat{R}_{10}, \quad (4.14)$$

которые являются следствием определения (4.9) матрицы \hat{M} . Тогда по стандартной формуле гауссова усреднения (см., например, [25]) получаем результат, выраженный через элементы обратной матрицы:

$$\begin{aligned} \langle \phi_{0\alpha}(z)\phi_{0\beta}^*(z_1) \rangle_{\phi_{1,2}} &= \\ &= k_B T [\hat{\Phi}(z)\hat{M}\hat{F}_1^{-1}\hat{M}^+ \hat{\Phi}^+(z_1)]_{\alpha\beta}. \quad (4.15) \end{aligned}$$

Таким образом, полная корреляционная функция, вычисленная по формуле (3.17), имеет вид

$$\hat{g}(z, z_1) = k_B T \left[\hat{\Phi}(z) \hat{M} \hat{F}_1^{-1} \hat{M}^+ \hat{\Phi}^+(z_1) - \hat{k}(z, z_1) + \hat{\Phi}(z) \hat{M} \hat{R}_{01} \hat{k}(l_2, z_1) \right]. \quad (4.16)$$

Для вычисления $\hat{g}(z, z_1)$ можно также использовать альтернативный метод, основанный на решении уравнения Эйлера (3.24) (идентичного (3.13)) с граничными условиями третьего рода (3.25).

Подставляя (4.5) в (3.25), получим систему линейных уравнений, определяющую вектор \mathbf{C}_0 для этих граничных условий, из которой находим

$$\mathbf{C}_0 = -\hat{F}_2^{-1} \hat{R}_{01} \hat{X}_2 \int_{l_1}^{l_2} \hat{\Psi}(z') \epsilon(z') dz', \quad (4.17)$$

где $2n \times 2n$ -матрица \hat{F}_2 имеет блочный вид

$$\hat{F}_2 = \begin{pmatrix} \hat{X}_1 \\ \hat{X}_2 \end{pmatrix}, \quad (4.18)$$

а $n \times 2n$ -матрицы

$$\hat{X}_j = \hat{a} \hat{\Phi}'(l_j) + (\hat{b} + (-1)^j \hat{w}_j) \hat{\Phi}(l_j). \quad (4.19)$$

После подстановки (4.17) в (4.5) видим, что зависимость $\bar{\phi}$ от ϵ оказывается линейной. Производная $\delta/\delta\epsilon$ в (3.9) тривиально вычисляется, и мы с учетом (4.6) получаем корреляционную функцию в виде

$$\begin{aligned} \hat{g}(z, z_1) &= k_B T \left[\hat{\Phi}(z) \hat{F}_2^{-1} \hat{R}_{01} \hat{X}_2 \hat{\Psi}(z_1) - \hat{k}(z, z_1) \right] = \\ &= k_B T \hat{\Phi}(z) \left[\hat{F} - \theta(z - z_1) \hat{I} \right] \hat{\Psi}(z_1), \end{aligned} \quad (4.20)$$

где

$$\hat{F} = \hat{F}_2^{-1} \hat{R}_{01} \hat{X}_2,$$

а \hat{I} — единичная матрица порядка $2n$.

Проводя несложные, но громоздкие вычисления, основанные на свойствах аналога определителя Вронского для оператора (3.16), можно показать, что выражения (4.16) и (4.20) тождественно совпадают. Для определенности мы будем далее использовать формулу (4.20). Дальнейшие упрощения можно провести, если учесть явное выражение для функций $\hat{\Phi}(z)$ в (4.4).

Введем матрицу \hat{U} размерности $n \times 2n$ с компонентами $U_{\alpha i} = e_\alpha^{(i)}$ и диагональную матрицу $\hat{\Lambda}$ порядка $2n$ с числами λ_i на диагонали, $\Lambda_{ij} = \lambda_i \delta_{ij}$.

Здесь по индексу i нет суммирования. Через матрицы \hat{U} и $\hat{\Lambda}$ выражаются все матрицы в (4.20):

$$\begin{aligned} \hat{\Phi}(z) &= \hat{U} e^{\hat{\Lambda} z}, \quad \hat{\Psi}(z) = e^{-\hat{\Lambda} z} \hat{V}, \\ \hat{V} &= \begin{pmatrix} \hat{a} \hat{U} \hat{\Lambda} \\ \hat{U} \end{pmatrix}^{-1} \hat{R}_{10}, \\ \hat{X}_j &= (\hat{a} \hat{U} \hat{\Lambda} + (\hat{b} + (-1)^j \hat{w}_j) \hat{U}) e^{\hat{\Lambda} l_j}. \end{aligned} \quad (4.21)$$

Подставляя (4.21) в (4.20), имеем

$$\begin{aligned} \hat{g}(z, z_1) &= k_B T \hat{U} e^{\hat{\Lambda} z} \times \\ &\times \left[\hat{F} - \theta(z - z_1) \hat{I} \right] e^{-\hat{\Lambda} z_1} \hat{V}. \end{aligned} \quad (4.22)$$

Как мы видели выше, числа λ_i связаны условиями $\lambda_{i+n} = -\lambda_i^*$. В общем случае антиэрмитовой матрицы $\hat{b} - \hat{b}^+$ для векторов $e^{(i)}$ такой простой связи нет. Однако, как мы увидим в разд. 5, для всех основных геометрий СЖК-А и НЖК матрица $\hat{b} - \hat{b}^+$ симметрична, а следовательно, мнимая (причем для смектиков $A\hat{b} = 0$). Тогда из уравнения (4.2) следует $e^{(i+n)} = e^{(i)*}$. Поэтому можно записать матрицы $\hat{\Lambda}$ и \hat{U} в блочной форме:

$$\hat{\Lambda} = \begin{pmatrix} \hat{\lambda} & \hat{0} \\ \hat{0} & -\hat{\lambda}^* \end{pmatrix}, \quad \hat{U} = (\hat{u}, \hat{u}^*), \quad (4.23)$$

где $\hat{\lambda}$ — диагональная матрица порядка n с числами $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ на диагонали, \hat{u} — матрица размерности $n \times n$ с элементами $u_{\alpha i} = e_\alpha^{(i)}$. Удобно считать, что $\operatorname{Re} \lambda_i > 0$, $i = 1, \dots, n$.

Тогда нетрудно проверить, что матрица \hat{V} в (4.21) может быть записана в виде

$$\hat{V} = \hat{D} \hat{T} \hat{U}^+, \quad (4.24)$$

где

$$\begin{aligned} \hat{T} &= \begin{pmatrix} \hat{0} & \hat{1} \\ \hat{1} & \hat{0} \end{pmatrix}, \quad \hat{D} = \begin{pmatrix} \hat{d} & 0 \\ 0 & -\hat{d}^* \end{pmatrix}, \\ \hat{d} &= (\hat{u}^T \hat{s} \hat{u})^{-1}, \quad \hat{s} = 2\hat{a} \operatorname{Re}(\hat{u} \hat{\lambda} \hat{u}^{-1}). \end{aligned} \quad (4.25)$$

Здесь матрица \hat{T} — матрица перестановок, $\hat{T}^2 = \hat{T}$; \hat{d} , \hat{s} — $n \times n$ -матрицы, причем \hat{d} диагональна, а \hat{s} вещественна. Верхний индекс « T » обозначает транспонирование.

Подставляя уравнения (4.23)–(4.25) в уравнения (4.21), (4.22), представим корреляционную матрицу в виде

$$\hat{g}(z, z_1) = k_B T [\hat{g}^{(1)}(z, z_1) + \hat{g}^{(2)}(z, z_1)], \quad (4.26)$$

где

$$\begin{aligned}\hat{g}^{(1)}(z, z_1) &= \hat{u} e^{\hat{\lambda} z} [\hat{f}^{(11)} - \hat{1} \theta(z - z_1)] \hat{d} \times \\ &\times e^{-\hat{\lambda} z_1} \hat{u}^T - \\ &- \hat{u}^* e^{-\hat{\lambda}^* z} [\hat{f}^{(22)} - \hat{1} \theta(z - z_1)] \hat{d}^* e^{\hat{\lambda}^* z_1} \hat{u}^+, \quad (4.27) \\ \hat{g}^{(2)}(z, z_1) &= \hat{u}^* e^{-\hat{\lambda}^* z} \hat{f}^{(21)} \hat{d} e^{-\hat{\lambda} z_1} \hat{u}^T - \\ &- \hat{u} e^{\hat{\lambda} z} \hat{f}^{(12)} \hat{d}^* e^{\hat{\lambda}^* z_1} \hat{u}^+.\end{aligned}$$

Здесь $\hat{f}^{(ij)}$ — $n \times n$ -матрицы, определяемые блочным представлением

$$\hat{F} = \begin{pmatrix} \hat{f}^{(11)} & \hat{f}^{(12)} \\ \hat{f}^{(21)} & \hat{f}^{(22)} \end{pmatrix}. \quad (4.28)$$

Обратим внимание, что в силу тождества

$$\hat{u} \hat{d} \hat{u}^T = \hat{u}^* \hat{d}^* \hat{u}^+$$

функция $\hat{g}^{(1)}(z, z_1)$ непрерывна при $z = z_1$, несмотря на наличие в ее определении разрывных θ -функций.

Для нахождения блоков $\hat{f}^{(ij)}$ необходимо явное выражение для матрицы \hat{F}_2^{-1} . Поскольку \hat{F}_2 в общем случае представляет собой полную матрицу $2n \times 2n$, соответствующая обратная матрица для нематика ($n = 2$) весьма громоздка.

Для преодоления этой трудности в не очень тонких образцах удобно использовать теорию возмущений по малым параметрам $e^{-|\lambda_j|L}$.

Выберем начало отсчета так, что $l_1 = -L/2$, $l_2 = L/2$. В этом случае матрицы $\hat{X}_{1,2}$ в (4.19) можно записать в блочном виде:

$$\hat{X}_j = \left(\hat{X}_j^{(1)} e^{\hat{\lambda} l_j}, \hat{X}_j^{(2)} e^{-\hat{\lambda}^* l_j} \right), \quad (4.29)$$

$j = 1, 2$, где

$$\begin{aligned}\hat{X}_j^{(1)} &= \hat{a} \hat{u} \hat{\lambda} + (\hat{b} + (-1)^j \hat{w}_j) \hat{u}, \\ \hat{X}_j^{(2)} &= -\hat{a} \hat{u}^* \hat{\lambda}^* + (\hat{b} + (-1)^j \hat{w}_j) \hat{u}^*.\end{aligned} \quad (4.30)$$

В главном порядке по параметрам $e^{-|\lambda_j|L}$ из (4.18), (4.28), (4.29) имеем

$$\begin{aligned}\hat{f}^{(11)} &= \hat{1}, \quad \hat{f}^{(22)} = \hat{0}, \\ \hat{f}^{(12)} &= e^{-\hat{\lambda} L/2} \left(\hat{X}_2^{(1)} \right)^{-1} \hat{X}_2^{(2)} e^{-\hat{\lambda}^* L/2}, \quad (4.31) \\ \hat{f}^{(21)} &= -e^{-\hat{\lambda}^* L/2} \left(\hat{X}_1^{(2)} \right)^{-1} \hat{X}_1^{(1)} e^{-\hat{\lambda} L/2}.\end{aligned}$$

Следующие поправки к матрицам $\hat{f}^{(11)}, \hat{f}^{(22)}$ имеют порядок $e^{-2\lambda_j L}$, а к матрицам $\hat{f}^{(12)}, \hat{f}^{(21)}$ — порядок $e^{-3\lambda_j L}$.

Подставляя формулы (4.31) в (4.27), получаем

$$\begin{aligned}\hat{g}^{(1)}(z, z_1) &= \hat{u} \hat{d} e^{\hat{\lambda}(z-z_1)} \hat{u}^T \theta(z_1 - z) + \\ &+ \hat{u}^* \hat{d}^* e^{-\hat{\lambda}^*(z-z_1)} \hat{u}^+ \theta(z - z_1), \\ \hat{g}^{(2)}(z, z_1) &= -\hat{u}^* e^{-\hat{\lambda}^*(L/2+z)} \times \\ &\times \hat{Y}_1 e^{-\hat{\lambda}(L/2+z_1)} \hat{u}^T - \\ &- \hat{u} e^{\hat{\lambda}(z-L/2)} \hat{Y}_2 e^{\hat{\lambda}^*(z_1-L/2)} \hat{u}^+, \quad (4.32)\end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}\hat{Y}_1 &= \left(\hat{X}_1^{(2)} \right)^{-1} \hat{X}_1^{(1)} \hat{d}, \\ \hat{Y}_2 &= \left(\hat{X}_2^{(1)} \right)^{-1} \hat{X}_2^{(2)} \hat{d}^*\end{aligned} \quad (4.33)$$

— эрмитовы $n \times n$ -матрицы. Отметим, что при $L \rightarrow \infty$ член $\hat{g}^{(2)}$ в (4.32) стремится к нулю и, следовательно, $\hat{g} = \hat{g}^{(1)}$. Таким образом, член $\hat{g}^{(1)}$ в (4.32) описывает флуктуации в безграничной среде в \mathbf{q}, z -представлении, а член $\hat{g}^{(2)}$ — поправки, связанные с ограниченностью образца и сцеплением с поверхностью.

5. КОРРЕЛЯЦИОННАЯ ФУНКЦИЯ ФЛУКТУАЦИЙ В СМЕКТИКАХ А И НЕМАТИКАХ

Применим полученные общие формулы для нахождения корреляционных функций в конкретных случаях.

5.1. Флуктуации в смектиках *A*

Для упругой части энергии из формулы (2.3) имеем

$$\Phi_e = \frac{1}{2} \int dz \left\{ B |\partial_z u_{\mathbf{q}}(z)|^2 + K q^4 |u_{\mathbf{q}}(z)|^2 \right\}. \quad (5.1)$$

Согласно (2.4) вклад внешнего поля в \mathbf{r} -представлении для $\chi_a > 0$ имеет вид

$$F_f = \frac{1}{2} \chi_a H^2 \left[1 - (\nabla_{\perp} u)^2 \right],$$

а для $\chi_a < 0$

$$F_f = -\frac{1}{2} \chi_a H^2 \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2.$$

В последнем случае мы направили ось x вдоль внешнего поля $\mathbf{H} = (H, 0, 0)$.

Соответствующие величины Φ_f имеют вид

$$\Phi_f = \begin{cases} \frac{1}{2}\chi_a H^2 q^2 \int dz |u_{\mathbf{q}}(z)|^2, & \chi_a > 0, \\ -\frac{1}{2}\chi_a H^2 q_1^2 \int dz |u_{\mathbf{q}}(z)|^2, & \chi_a < 0, \end{cases} \quad (5.2)$$

где $\mathbf{q} = (q_1, q_2, 0)$.

Как следует из формулы (2.7), плотность поверхностной энергии равна

$$\Phi_{sf} = \frac{1}{2} \sum_{j=1,2} \left(\gamma_1^{(j)} + q^2 \gamma_2^{(j)} \right) |u_{\mathbf{q}}(l_j)|^2. \quad (5.3)$$

В данном случае матрицы $\hat{a}, \hat{b}, \hat{c}, \hat{w}_j$ ($j = 1, 2$) в (2.9) имеют размерность 1, т. е. являются скалярами:

$$\begin{aligned} a &= B, \quad b = 0, \quad w_j = \gamma_1^{(j)} + \gamma_2^{(j)} q^2, \\ c &= \begin{cases} Kq^4 + \chi_a H^2 q^2, & \chi_a > 0, \\ Kq^4 - \chi_a H^2 q_1^2, & \chi_a < 0. \end{cases} \end{aligned} \quad (5.4)$$

Характеристическое уравнение является квадратным и имеет корни

$$\lambda_1 = -\lambda_2 = \sqrt{\frac{c}{B}}. \quad (5.5)$$

«Векторы» $\mathbf{e}^{(j)}$ также являются скалярами и их можно положить равными единице: $e^{(1)} = 1, e^{(2)} = 1$. «Матрицы» $\hat{\lambda} = \lambda, \hat{u} = 1, d = (2B\lambda)^{-1}$. Отсюда находим

$$\begin{aligned} \hat{V} &= \frac{1}{2B\lambda} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \\ \hat{X}_1 &= \left((B\lambda - w_1)e^{-\lambda L/2}, -(B\lambda + w_1)e^{\lambda L/2} \right), \\ \hat{X}_2 &= \left((B\lambda + w_2)e^{\lambda L/2}, (-B\lambda + w_2)e^{-\lambda L/2} \right). \end{aligned} \quad (5.6)$$

Подставляя (5.6) в (4.28)–(4.31), получим корреляционную функцию (4.26), (4.27) в виде

$$\begin{aligned} g(\mathbf{q}; z, z_1) &= \frac{k_B T}{2B\lambda\Delta} \left\{ (B^2\lambda^2 - w_1 w_2) \operatorname{ch}[(z + z_1)\lambda] + \right. \\ &\quad + B\lambda(w_1 - w_2) \operatorname{sh}[(z + z_1)\lambda] + \\ &\quad + (B^2\lambda^2 + w_1 w_2) \operatorname{ch}[(L - |z - z_1|)\lambda] + \\ &\quad \left. + B\lambda(w_1 + w_2) \operatorname{sh}[(L - |z - z_1|)\lambda] \right\}, \end{aligned} \quad (5.7)$$

где

$$\begin{aligned} \Delta &= (B^2\lambda^2 + w_1 w_2) \operatorname{sh}(\lambda L) + \\ &\quad + B(w_1 + w_2)\lambda \operatorname{ch}(\lambda L). \end{aligned}$$

Формула (5.7) описывает оба случая $\chi_a > 0$ и $\chi_a < 0$.

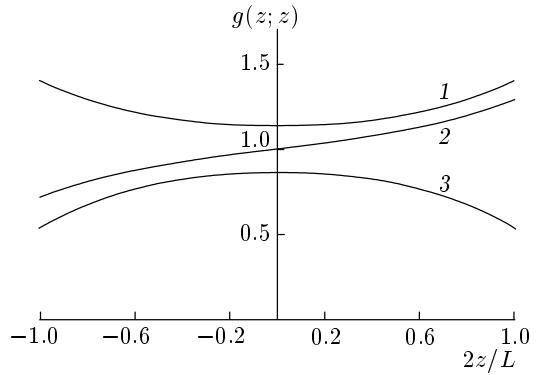


Рис. 1. Поведение корреляционной функции $g(z; z)$ в СЖК-А для различных поверхностных натяжений. Использованы следующие параметры: $\gamma_1^{(1,2)} = 0, B = 3 \cdot 10^7$ дин/см², $K = 10^{-6}$ дин, $q = 10^5$ см⁻¹, $L = 10^{-3}$ см, $T = 300$ К, $H = 0$. 1 — Слабое сцепление на обеих поверхностях, $\gamma_2^{(1)} = \gamma_2^{(2)} = 2.5$ эрг/см²; 2 — сильное сцепление на поверхности $z = -L/2$, $\gamma_2^{(1)} = 10$ эрг/см², и слабое сцепление на поверхности $z = L/2$, $\gamma_2^{(2)} = 3$ эрг/см²; 3 — сильное сцепление на обеих поверхностях, $\gamma_2^{(1)} = \gamma_2^{(2)} = 15$ эрг/см². Все графики нормированы на $g(0, 0)$ для $\gamma_2^{(1)} = \gamma_2^{(2)} = 15$ эрг/см²

Выделим два типа поведения жидкого кристалла на границе, которые можно назвать случаями сильного и слабого сцепления. В случае сильного сцепления флуктуации вблизи поверхности подавляются. Если же энергия сцепления с данной поверхностью мала, то флуктуации вблизи нее могут быть больше, чем в объеме. Качественно причина этого состоит в том, что вблизи поверхности возвращающая сила определяется как поверхностным, так и объемным вкладами, причем роль объемных сил на границе меньше, чем внутри образца.

Смысл этого иллюстрируется на рис. 1. Если взять простейший случай $\gamma_1^{(1,2)} = 0, \gamma_2^{(1)} = \gamma_2^{(2)} = \gamma$, то переход от случая сильного сцепления к случаю слабого происходит при $\gamma \sim \sqrt{KB}$.

Обсудим влияние внешнего поля на корреляционную функцию в СЖК-А.

Из условий $\lambda L \sim 1$ и $\chi_a H^2 \sim Kq^2$ имеем характерное значение поля в СЖК-А:

$$H_S \sim (KB)^{1/4} (\chi_a L)^{-1/2}.$$

Для типичных значений $K \sim 10^{-6}$ дин, $B \approx 3 \cdot 10^7$ дин/см², $\chi_a \sim 10^{-7}$ при $L \approx 3 \cdot 10^{-3}$ см это дает $H_S \sim 10^5$ Гс. Как видим, характерное поле для смектиков весьма велико.

Перейдем теперь к рассмотрению нематиков.

5.2. Гомеотропная ориентация, $\chi_a > 0$

В этом случае равновесный вектор директора \mathbf{n}^0 параллелен вектору напряженности внешнего поля \mathbf{H} и направлен вдоль оси z , $\mathbf{n}^0 = (0, 0, 1)$, $\mathbf{H} = (0, 0, H)$. Вектор флуктуаций директора

$$\delta \mathbf{n}(\mathbf{q}, z) = (\delta n_{1\mathbf{q}}(z), \delta n_{2\mathbf{q}}(z), 0).$$

Следуя [1], выберем ось x вдоль волнового вектора $\mathbf{q} = (q, 0, 0)$. Из формулы (2.2) для энергии Франка имеем

$$\Phi_e = \frac{1}{2} \int dz \left[q^2 \left(K_{11} |\delta n_{1\mathbf{q}}|^2 + K_{22} |\delta n_{2\mathbf{q}}|^2 \right) + K_{33} \left(|\partial_z \delta n_{1\mathbf{q}}|^2 + |\partial_z \delta n_{2\mathbf{q}}|^2 \right) \right]. \quad (5.8)$$

Вклад внешнего поля равен

$$\Phi_f = \frac{1}{2} \chi_a H^2 \int dz \left(|\delta n_{1\mathbf{q}}|^2 + |\delta n_{2\mathbf{q}}|^2 \right). \quad (5.9)$$

Отсюда получаем матрицы \hat{a} , \hat{b} и \hat{c} :

$$\begin{aligned} \hat{a} &= K_{33} \hat{1}, \quad \hat{b} = \hat{0}, \\ \hat{c} &= \begin{pmatrix} K_{11} q^2 + \chi_a H^2 & 0 \\ 0 & K_{22} q^2 + \chi_a H^2 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (5.10)$$

Для поверхностной энергии в этой геометрии чаще всего используется модель (2.5), в которой матрицы \hat{w}_1 и \hat{w}_2 в (2.11) пропорциональны единичной:

$$\hat{w}_1 = W_1 \hat{1}, \quad \hat{w}_2 = W_2 \hat{1}. \quad (5.11)$$

Таким образом, имеем

$$\Phi_{sf} = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1,2} |\delta n_{i\mathbf{q}}(l_j)|^2 W_j. \quad (5.12)$$

Отметим, что если матрицы \hat{w}_1 и \hat{w}_2 не пропорциональны единичной, то они будут в общем случае недиагональными и зависящими от направления вектора \mathbf{q} .

Корни соответствующего характеристического уравнения равны

$$\lambda_i = -\lambda_{i+2} = \sqrt{\frac{K_{ii} q^2 + \chi_a H^2}{K_{33}}}. \quad (5.13)$$

Собственные векторы имеют вид

$$\mathbf{e}^{(1)} = \mathbf{e}^{(3)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{e}^{(2)} = \mathbf{e}^{(4)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (5.14)$$

Матрица \hat{u} в (4.23) при этом оказывается единичной, $\hat{u} = \hat{1}$, а матрица \hat{d} в (4.25) равна

$$\hat{d} = \frac{1}{2K_{33}} \begin{pmatrix} \lambda_1^{-1} & 0 \\ 0 & \lambda_2^{-1} \end{pmatrix}. \quad (5.15)$$

Блочные матрицы $\hat{f}^{(ij)}$ легко вычисляются и имеют диагональный вид

$$\begin{aligned} \hat{f}^{(11)} &= \text{diag}(\varphi_j^+ / \Delta_j), \\ \hat{f}^{(22)} &= \text{diag}(\varphi_j^- / \Delta_j), \\ \hat{f}^{(12)} &= \text{diag}(\psi_j^- / \Delta_j), \\ \hat{f}^{(21)} &= \text{diag}(\psi_j^+ / \Delta_j), \end{aligned} \quad (5.16)$$

где через $\text{diag}(\mu_j)$ мы обозначаем диагональную матрицу с элементами μ_1, μ_2, \dots на диагонали,

$$\begin{aligned} \varphi_j^\pm &= \frac{1}{2} [\pm (K_{33}^2 \lambda_j^2 + W_1 W_2) + \\ &\quad + K_{33} \lambda_j (W_1 + W_2)] e^{\pm \lambda_j L}, \\ \psi_j^\pm &= \frac{1}{2} \times \\ &\quad \times [\pm (K_{33}^2 \lambda_j^2 - W_1 W_2) + K_{33} \lambda_j (W_2 - W_1)], \\ \Delta_j &= [(K_{33}^2 \lambda_j^2 + W_1 W_2) \text{sh}(\lambda_j L) + \\ &\quad + K_{33} \lambda_j (W_1 + W_2) \text{ch}(\lambda_j L)]. \end{aligned} \quad (5.17)$$

Подставляя (5.14)–(5.17) в (4.26), (4.27), найдем корреляционную матрицу флуктуаций директора, которая в данном случае является диагональной, $g_{12} = g_{21} = 0$,

$$g_{jj}(\mathbf{q}; z, z_1) = \frac{k_B T}{2K_{33}} \mathcal{E}_j(\mathbf{q}, z, z_1), \quad j = 1, 2, \quad (5.18)$$

где

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_j(\mathbf{q}; z, z_1) &= \frac{1}{\lambda_j \Delta_j} \{ (K_{33}^2 \lambda_j^2 + W_1 W_2) \times \\ &\quad \times \text{ch}[\lambda_j(L - |z - z_1|)] + \\ &\quad + K_{33} \lambda_j (W_1 + W_2) \text{sh}[\lambda_j(L - |z - z_1|)] + \\ &\quad + (K_{33}^2 \lambda_j^2 - W_1 W_2) \text{ch}[\lambda_j(z + z_1)] + \\ &\quad + K_{33} \lambda_j (W_1 - W_2) \text{sh}[\lambda_j(z + z_1)] \}. \end{aligned} \quad (5.19)$$

Характерная величина внешнего поля в НЖК $H_N \approx L^{-1} (K_{ii}/\chi_a)^{1/2}$ [1]. Для типичных значений $K \sim K_{ii} \sim 10^{-6}$ дин, $\chi_a \sim 10^{-7}$ при $L \approx 3 \cdot 10^{-3}$ см это дает $H_N \sim 10^3$ Гс. Поэтому для обычно используемых в эксперименте напряженностей $H_N \sim 10^3$ – 10^4 Гс влияние поля может быть заметным, в отличие от СЖК- A .

Реальные значения энергии сцепления лежат в интервале $W \sim 10^{-2}$ – 10^{-4} эрг/см² [27, 28]. В случае

больших значений $q \sim 10^4\text{--}10^5 \text{ см}^{-1}$ для обеих мод g_{jj} будет иметь место случай слабого сцепления. Если же $q \sim 10^3 \text{ см}^{-1}$, то может иметь место случай сильного сцепления, а также становятся существенными эффекты поля.

5.3. Гомеотропная ориентация, $\chi_a < 0$

В этом случае вектор напряженности внешнего поля \mathbf{H} перпендикулярен директору $\mathbf{n}^0 = (0, 0, 1)$. Ось x выберем вдоль направления $\mathbf{H} = (H, 0, 0)$. Флуктуации директора и волновой вектор при данном выборе осей имеют вид $\delta\mathbf{n} = (\delta n_1, \delta n_2, 0)$, $\mathbf{q} = (q_1, q_2, 0)$.

Энергия Франка равна

$$\begin{aligned}\Phi_e = \frac{1}{2} \int dz \left[& (K_{11}q_1^2 + K_{22}q_2^2) |\delta n_{1\mathbf{q}}|^2 + \right. \\ & + (K_{11}q_2^2 + K_{22}q_1^2) |\delta n_{2\mathbf{q}}|^2 + \\ & + q_1 q_2 (K_{11} - K_{22}) (\delta n_{1\mathbf{q}} \delta n_{2\mathbf{q}}^* + \delta n_{1\mathbf{q}}^* \delta n_{2\mathbf{q}}) + \\ & \left. + K_{33} (|\partial_z \delta n_{1\mathbf{q}}|^2 + |\partial_z \delta n_{2\mathbf{q}}|^2) \right], \quad (5.20)\end{aligned}$$

а вклад внешнего поля

$$\Phi_f = -\frac{1}{2} \chi_a H^2 \int dz |\delta n_{1\mathbf{q}}|^2. \quad (5.21)$$

Поверхностная энергия имеет такой же вид (5.12), как и в случае $\chi_a > 0$.

Таким образом, в этой геометрии получаем такие же матрицы \hat{a} , \hat{b} , \hat{w}_j , как в (5.10), (5.11), а матрица \hat{c} имеет вид

$$\hat{c} = \begin{pmatrix} A_2 & B \\ B & A_1 \end{pmatrix}, \quad (5.22)$$

где

$$\begin{aligned}A_1 &= K_{11}q_2^2 + K_{22}q_1^2, \quad B = q_1 q_2 (K_{11} - K_{22}), \\ A_2 &= K_{11}q_1^2 + K_{22}q_2^2 - \chi_a H^2.\end{aligned} \quad (5.23)$$

Характеристическое уравнение имеет вещественные корни

$$\begin{aligned}\lambda_i = -\lambda_{i+2} = & \\ = & \left[\frac{1}{2K_{33}} \times \right. \\ \times & \left. ((K_{11} + K_{22})q^2 - \chi_a H^2 + (-1)^{i+1}Q) \right]^{1/2}, \quad (5.24)\end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}Q = & [q^4(K_{11} - K_{22})^2 - 2\chi_a H^2(K_{11} - K_{22}) \times \\ & \times (q_1^2 - q_2^2) + \chi_a^2 H^4]^{1/2},\end{aligned}$$

$i = 1, 2$. Векторы $\mathbf{e}^{(i)}$ с точностью до нормировки равны

$$\mathbf{e}^{(i)} = \mathbf{e}^{(i+2)} = \begin{pmatrix} B \\ K_{33}\lambda_i^2 - A_2 \end{pmatrix}. \quad (5.25)$$

Далее мы могли бы проводить вычисления по формулам (4.26), (4.27). Однако конечный результат можно получить значительно проще. Заметим, что векторы $\mathbf{e}^{(1)}$ и $\mathbf{e}^{(2)}$ в (5.25) ортогональны и вещественны. Следовательно, матрица \hat{u} в (4.23) ортогональна: $\hat{u}^{-1} = \hat{u}^T$. После перехода в плоскости (x, y) к системе координат с осями $\mathbf{e}^{(1)}$ и $\mathbf{e}^{(2)}$ матрица \hat{c} диагонализуется. Так как матрицы \hat{w}_1 и \hat{w}_2 пропорциональны в данной геометрии единичным, то они не изменяются при переходе к новой системе координат. Тогда задача (3.26) для $\chi_a < 0$ (и дифференциальное уравнение, и граничные условия) становится формально совпадающей с этой же задачей для $\chi_a > 0$. Единственная разница состоит в том, что теперь λ_i определяются формулами (5.24), а не (5.13). Возвращаясь к исходной системе координат, корреляционную функцию для $\chi_a < 0$ можно записать в виде

$$\hat{g}_{\chi_a < 0} = \hat{u} \hat{g}_{\chi_a > 0} \hat{u}^{-1}, \quad (5.26)$$

$\hat{g}_{\chi_a > 0}$ — диагональная матрица с компонентами g_{jj} , определенными в (5.18).

Подставляя (5.23), (5.25) в (5.26), найдем

$$\begin{aligned}g_{ll} &= \frac{k_B T}{2QK_{33}} \times \\ & \times \sum_{j=1,2} (-1)^j (A_l - \lambda_j^2 K_{33}) \mathcal{E}_j(\mathbf{q}; z, z_1), \quad l = 1, 2, \\ g_{12} &= g_{21} = \frac{k_B T B}{2QK_{33}} \times \\ & \times \sum_{j=1,2} (-1)^{j+1} \mathcal{E}_j(\mathbf{q}; z, z_1).\end{aligned} \quad (5.27)$$

Системы с $\chi_a < 0$ изучены не столь подробно, как с $\chi_a > 0$. Для нас они интересны тем, что в них внешнее поле \mathbf{H} подавляет лишь одну из двух флуктуирующих мод, а вторая остается конечной в пределе $H \rightarrow \infty$ [24]. Для таких систем при малых q , выбрав достаточно большое поле, можно получить слабое сцепление на границе для одной моды и сильное сцепление для другой. Эти эффекты иллюстрируются на рис. 2a, 2б. Отметим также наличие перекрестной чисто мнимой компоненты корреляционной функции $g_{12}(\mathbf{q}; z, z_1)$, показанной на рис. 2б.

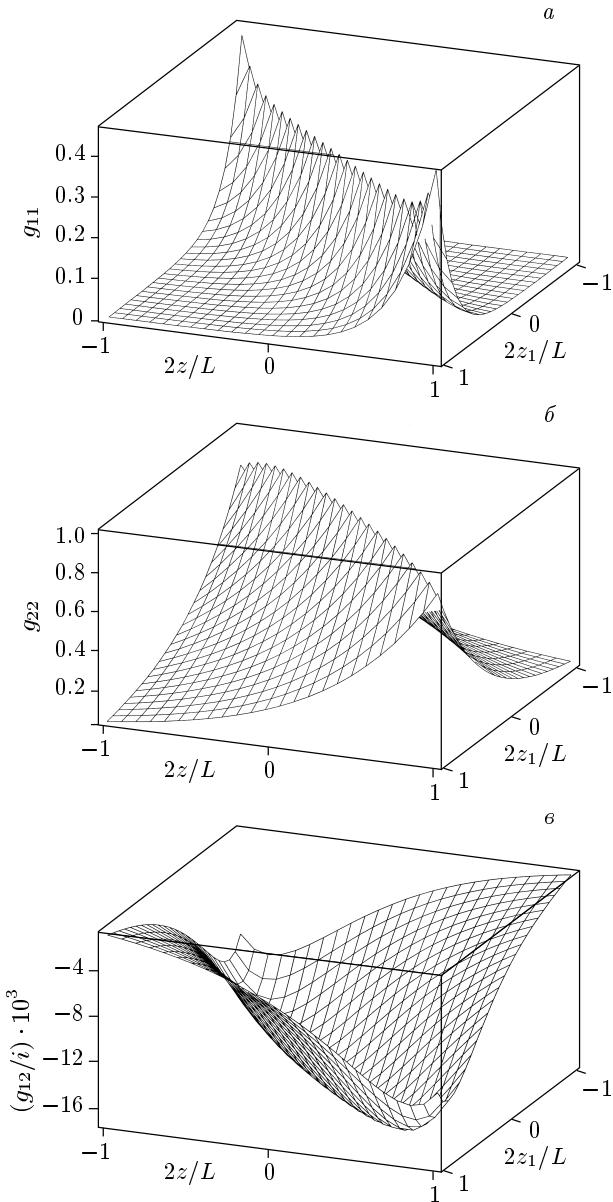


Рис. 2. Элементы корреляционной матрицы НЖКК для гомеотропной ориентации при $\chi_a < 0$. Использованы следующие параметры: $\chi_a = -10^{-7}$, $K_{11} = 10^{-6}$ дин, $K_{22} = 0.5 \cdot 10^{-6}$ дин, $K_{33} = 2 \cdot 10^{-6}$ дин, $T = 300$ К, $H = 10^4$ Гс, $q_1 = 10^3$ см $^{-1}$, $q_2 = 2 \cdot 10^3$ см $^{-1}$, $W_1 = 5 \cdot 10^{-3}$ эрг/см 2 , $W_2 = 4 \cdot 10^{-3}$ эрг/см 2 , $L = 10^{-2}$ см. а — $g_{11}(z, z_1)$, б — $g_{22}(z, z_1)$, в — $g_{12}(z, z_1)/i$. Графики нормированы на $g_{22}(0, 0)$

5.4. Планарная ориентация $\chi_a > 0$

Направим ось y вдоль вектора директора, $\mathbf{n}^0 \parallel \mathbf{H}$. Флуктуации директора и волновой вектор в этой системе координат имеют вид $\delta \mathbf{n} = (\delta n_1, 0, \delta n_2)$,

$$\mathbf{q} = (q_1, q_2, 0).$$

Энергия Франка равна

$$\Phi_e = \frac{1}{2} \int dz \left\{ (K_{11}q_1^2 + K_{33}q_2^2) |\delta n_{1q}|^2 + K_{22} |\partial_z \delta n_{1q}|^2 + (K_{22}q_1^2 + K_{33}q_2^2) |\delta n_{2q}|^2 + K_{11} |\partial_z \delta n_{2q}|^2 + iq_1 [K_{11}(\delta n_{1q} \partial_z \delta n_{2q}^* - \delta n_{1q}^* \partial_z \delta n_{2q}) - K_{22}(\delta n_{2q} \partial_z \delta n_{1q}^* - \delta n_{2q}^* \partial_z \delta n_{1q})] \right\}. \quad (5.28)$$

Вклад внешнего поля равен

$$\Phi_f = \frac{1}{2} \chi_a H^2 \int dz (|\delta n_{1q}|^2 + |\delta n_{2q}|^2). \quad (5.29)$$

Поверхностная энергия (2.6) в данной геометрии записывается в виде

$$\Phi_{sf} = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1,2} W_j^{(i)} |\delta n_{iq}(l_j)|^2. \quad (5.30)$$

Таким образом, в этой геометрии матрицы \hat{a} , \hat{b} , \hat{c} и \hat{w}_j ($j = 1, 2$) равны

$$\begin{aligned} \hat{a} &= \begin{pmatrix} K_{22} & 0 \\ 0 & K_{11} \end{pmatrix}, \\ \hat{b} &= iq_1 \begin{pmatrix} 0 & -K_{22} \\ K_{11} & 0 \end{pmatrix}, \\ \hat{w}_j &= \begin{pmatrix} W_j^{(1)} & 0 \\ 0 & W_j^{(2)} \end{pmatrix}, \\ \hat{c} &= \begin{pmatrix} A_3 & 0 \\ 0 & A_4 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (5.31)$$

где

$$\begin{aligned} A_3 &= K_{11}q_1^2 + K_{33}q_2^2 + \chi_a H^2, \\ A_4 &= K_{22}q_1^2 + K_{33}q_2^2 + \chi_a H^2. \end{aligned} \quad (5.32)$$

Характеристическое уравнение (4.3) имеет следующие корни:

$$\lambda_1 = -\lambda_3 = \sqrt{\frac{A_3}{K_{11}}}, \quad \lambda_2 = -\lambda_4 = \sqrt{\frac{A_4}{K_{22}}}. \quad (5.33)$$

Векторы $\mathbf{e}^{(i)}$ в данном случае равны (с точностью до нормировки):

$$\begin{aligned} \mathbf{e}^{(1)} &= \mathbf{e}^{(3)*} = \begin{pmatrix} q_1 \\ -i\lambda_1 \end{pmatrix}, \\ \mathbf{e}^{(2)} &= \mathbf{e}^{(4)*} = \begin{pmatrix} -i\lambda_2 \\ q_1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (5.34)$$

Тогда

$$\hat{u} = \begin{pmatrix} q_1 & i\lambda_2 \\ -i\lambda_1 & q_1 \end{pmatrix}. \quad (5.35)$$

Матрица \hat{d} в (4.25) при этом равна

$$\hat{d} = -\frac{1}{2\Omega} \begin{pmatrix} \lambda_1^{-1} & 0 \\ 0 & \lambda_2^{-1} \end{pmatrix}, \quad (5.36)$$

где $\Omega = K_{33}q_2^2 + \chi_a H^2$.

В отличие от гомеотропной геометрии матрица \hat{F}_2 в (4.18) не имеет специальной структуры и компоненты обратной матрицы \hat{F}_2^{-1} в (4.20) (а значит, и матриц $\hat{f}^{(ij)}$ в (4.28)) будут весьма громоздкими. Поэтому для численных расчетов удобно пользоваться общими выражениями (4.26), (4.27) для корреляционной матрицы.

Отметим, что для планарной ориентации коэффициенты $W_{1,2}^{(1)}$ определяют вклад в поверхностную энергию моды δn_1 , а коэффициенты $W_{1,2}^{(2)}$ — моды δn_2 . Тогда можно ожидать, что компонента g_{11} определяется в основном только коэффициентом $W_j^{(1)}$ и почти не зависит от $W_{1,2}^{(2)}$, а компонента g_{22} — коэффициентом $W_j^{(2)}$ и почти не зависит от $W_{1,2}^{(1)}$. Этот эффект однако маскируется взаимодействием мод δn_1 и δn_2 в объемной энергии. Тем не менее для реальных значений параметров зависимость g_{ll} только от $W_j^{(l)}$ выполняется с высокой точностью. Из рис. 3 видно, что величина g_{ll} действительно зависит только от $W_j^{(l)}$. Эта зависимость для $z = z_1 = \pm L/2$ приближенно описывается формулой

$$g_{ll}^{(2)}(\pm L/2, \pm L/2) = -k_B T \frac{\lambda_1 \lambda_2 - q_1^2}{2\lambda_l \Omega} \times \times \frac{W_j^{(l)}(\lambda_1 \lambda_2 - q_1^2) - \lambda_l \Omega}{W_j^{(l)}(\lambda_1 \lambda_2 - q_1^2) + \lambda_l \Omega}, \quad (5.37)$$

где $l = 1, 2$, а верхний знак соответствует $j = 1$, нижний — $j = 2$. При z, z_1 , не лежащих одновременно на одной из границ образца, компонента g_{ll} будет зависеть об обоих коэффициентах $W_{1,2}^{(l)}$.

Условия сильного и слабого сцепления на границах $z = \pm L/2$ определяются знаком производных

$$\frac{\partial}{\partial z} g_{ll}(z, z)|_{z=\pm L/2}.$$

Переход от одного случая к другому происходит при

$$W_j^{(l)} \approx \Omega \lambda_l / (\lambda_1 \lambda_2 - q_1^2).$$

Заметим, что это условие соответствует также смене знака $g_{ll}^{(2)}$ в формуле (5.37).

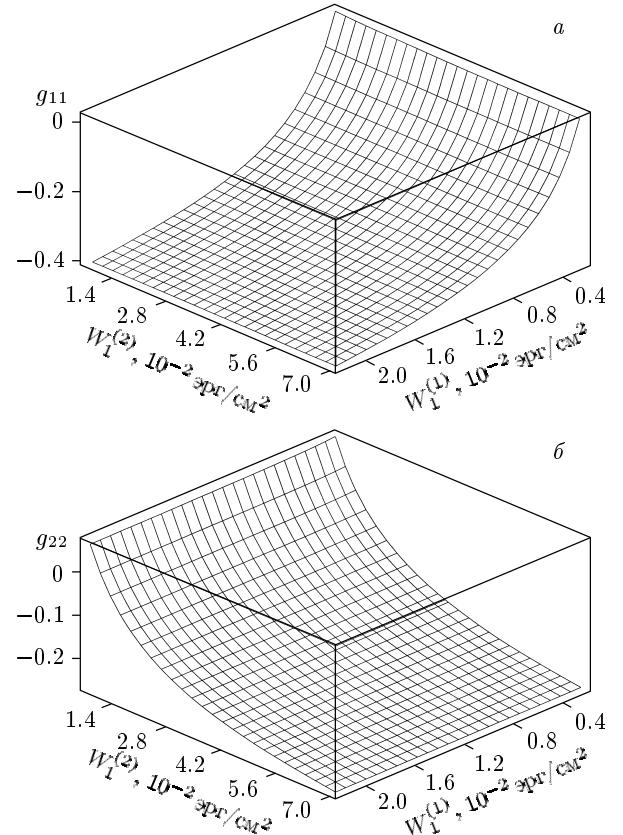


Рис. 3. Элементы корреляционной матрицы НЖК g_{11} и g_{22} (произвольные единицы) для планарной ориентации при $\chi_a > 0$ для $z = z_1 = L/2$ как функции $W_1^{(1)} = W_2^{(1)}$ и $W_1^{(2)} = W_2^{(2)}$ при $H = 0$, $L = 10^{-2}$ см. Остальные параметры такие же, как на рис. 2. *a* — $g_{11}(L/2, L/2)$, *б* — $g_{22}(L/2, L/2)$

5.5. Планарная ориентация $\chi_a < 0$

В этой геометрии вектор напряженности внешнего поля перпендикулярен директору и может образовывать произвольный угол α с плоскостью x, y . Так же, как в планарной геометрии при $\chi_a > 0$, направим ось y вдоль \mathbf{n}^0 . Тогда $\mathbf{H} = H(\cos \alpha, 0, \sin \alpha)$, $\delta \mathbf{n} = (\delta n_1, 0, \delta n_2)$, $\mathbf{q} = (q_1, q_2, 0)$.

Энергия Франка и поверхностная энергия имеют здесь тот же вид (5.28), (5.30), как и в предыдущем случае.

Вклад внешнего поля равен

$$\Phi_f = -\frac{1}{2} \chi_a H^2 \times \times \int dz |\delta n_{1q} \cos \alpha + \delta n_{2q} \sin \alpha|^2. \quad (5.38)$$

Таким образом, в этой геометрии матрицы \hat{a} , \hat{b} , \hat{w}_j такие же, как в (5.31), а матрица \hat{c} равна

$$\hat{c} = \begin{pmatrix} A_5 & A_7 \\ A_7 & A_6 \end{pmatrix}, \quad (5.39)$$

где

$$\begin{aligned} A_5 &= K_{11}q_1^2 + K_{33}q_2^2 - \chi_a H^2 \cos^2 \alpha, \\ A_6 &= K_{22}q_1^2 + K_{33}q_2^2 - \chi_a H^2 \sin^2 \alpha, \\ A_7 &= -\chi_a H^2 \sin \alpha \cos \alpha. \end{aligned} \quad (5.40)$$

Характеристическое уравнение в этом случае содержит линейный по λ член:

$$K_{11}K_{22}\lambda^4 - [A_5K_{11} + A_6K_{22} - q_1^2(K_{11} - K_{22})^2]\lambda^2 + 2iq_1A_7(K_{11} - K_{22})\lambda + A_5A_6 - A_7^2 = 0. \quad (5.41)$$

Решения этого уравнения $\lambda_1 = -\lambda_3^*$, $\lambda_2 = -\lambda_4^*$ при $0 < \alpha < \pi/2$ и $K_{11} \neq K_{22}$ всегда содержат мнимую часть. Ненормированные векторы $\mathbf{e}^{(j)}$ равны

$$\mathbf{e}^{(j)} = \begin{pmatrix} A_7 - iq_1(K_{11} - K_{22})\lambda_j \\ K_{22}\lambda_j^2 - A_5 \end{pmatrix}. \quad (5.42)$$

В наиболее простых случаях, когда $\alpha = 0$ или $\alpha = \pi/2$, коэффициент $A_7 = 0$ и уравнение (5.41) становится биквадратным. Его решения имеют вид

$$\begin{aligned} \lambda_j = -\lambda_{j+2} &= \left\{ \frac{1}{2K_{11}K_{22}} \times \right. \\ &\times \left[2K_{11}K_{22}q_1^2 + K_{33}(K_{11} + K_{22})q^2 - \right. \\ &\left. \left. - K_{ii}\chi_a H^2 + (-1)^{j+1}\sqrt{D} \right] \right\}^{1/2}, \end{aligned} \quad (5.43)$$

где

$$\begin{aligned} D &= K_{33}^2(K_{11} - K_{22})^2q_2^4 + K_{ii}^2\chi_a^2H^4 + \\ &+ 2(-1)^i(K_{11} - K_{22})\chi_a H^2(2K_{11}K_{22}q_1^2 + K_{ii}K_{33}q_2^2). \end{aligned}$$

Здесь $i = 1$ соответствует случаю $\alpha = \pi/2$, а $i = 2$ — случаю $\alpha = 0$. Отметим, что решения (5.43) могут быть комплексными.

Пользуясь формулами (5.43), (5.42), можно получить аналитические выражения для матриц \hat{u} , \hat{U} в (4.23). Мы не приводим выражение для корреляционной матрицы в этом случае, так как оно чрезвычайно громоздко даже в рамках теории возмущений. Однако численные расчеты элементов корреляционной матрицы с помощью формул (4.26), (4.27) или (4.32) не представляют труда и в этом случае.

Особенностью рассматриваемого случая является комплексность собственных чисел λ_j при

$0 < \alpha < \pi/2$. Однако, как показывают оценки при реальных значениях параметров НЖК, амплитуды внешнего поля H и волновых чисел q_1 и q_2 , всегда выполняется неравенство $\text{Im } \lambda_j \ll \text{Re } \lambda_j$. Поэтому осцилляции компонент матриц $\hat{g}(z, z_1)$ отсутствуют. Еще одна особенность этого случая — комплексность всех компонент корреляционной матрицы.

Что касается влияния внешнего поля, то ситуация здесь аналогична случаю гомеотропной ориентации с $\chi_a < 0$. А именно, компонента флюктуаций директора, перпендикулярная \mathbf{H} , не подавляется внешним полем. В данной геометрии такой компонентой является линейная комбинация

$$\delta\mathbf{n} = -\delta\mathbf{n}_1 \sin \alpha + \delta\mathbf{n}_2 \cos \alpha.$$

В частности, при $\alpha = 0$ поле не подавляет компоненту g_{22} , а при $\alpha = \pi/2$ — компоненту g_{11} корреляционной матрицы.

Отметим проблему, возникающую в точных формулах (4.22), (4.26) при проведении по ним численных расчетов. Сомножители $\exp(\hat{\Lambda}l_j)$ в (4.21) содержат как очень большие, так и очень малые по абсолютной величине компоненты, которые нужно учитывать одновременно, не пренебрегая последними. Для реальных параметров НЖК, например при решении оптической задачи в образце толщиной $L \sim 100$ мк, это приводит к необходимости одновременно учитывать в промежуточных вычислениях величины порядка $10^{\pm 2000}$. Это делает формулу (4.22) непригодной для численных расчетов. Эта проблема не возникает при рассмотрении тонких образцов, когда $|\lambda_j|L$ невелики. В случае больших λL для численных расчетов можно использовать формулы теории возмущений (4.32). Расчеты, проводимые по точным формулам (4.22) и формулам (4.32) теории возмущений, дают отличное совпадение вплоть до значений $\lambda L \leq 2-3$. Наиболее заметные расхождения расчетов по этим формулам возникают, когда z и z_1 расположены на противоположных краях образца: $L/2$ и $-L/2$. Эти расхождения устраняются, если учитывать второй порядок теории возмущений. Однако при этом $g_{\alpha\beta}(L/2, -L/2)$ пренебрежимо малы по сравнению с $g_{\alpha\beta}(z, z_1)$ при $z = z_1$, поэтому эти поправки не представляют интереса.

6. РАССЕЯНИЕ СВЕТА

Одним из методов анализа пространственных корреляционных функций является измерение угловой и поляризационной зависимостей интенсивности рассеянного света. С оптической точки зрения

СЖК-*A* и НЖК являются одноосными средами с тензором диэлектрической проницаемости

$$\varepsilon_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{\perp}\delta_{\alpha\beta} + \varepsilon_a n_{\alpha}(\mathbf{r})n_{\beta}(\mathbf{r}), \quad (6.1)$$

где $\varepsilon_a = \varepsilon_{\parallel} - \varepsilon_{\perp}$, ε_{\parallel} и ε_{\perp} — диэлектрические проницаемости вдоль и поперек оптической оси. Флуктуации диэлектрической проницаемости $\delta\varepsilon_{\alpha\beta}$, которые в линейном по $\delta\mathbf{n}$ приближении имеют вид

$$\delta\varepsilon_{\alpha\beta} = \varepsilon_a(n_{\alpha}^0\delta n_{\beta} + n_{\beta}^0\delta n_{\alpha}), \quad (6.2)$$

приводят к рассеянию света.

Интенсивность рассеяния в анизотропном плоском слое может быть записана в виде (ср. [29])

$$I(\mathbf{e}^{(i)}, \mathbf{e}^{(s)}) = \frac{V I_0^{(i)} \omega^4}{16\pi^2 R^2 c^4} A^{(is)}(\mathbf{k}^{(s)}, \mathbf{k}^{(i)}) \times \\ \times e_{\nu}^{(s)} e_{\mu}^{*(s)} D_{\nu\rho\mu\eta}(\mathbf{q}_{sc}; L) e_{\rho}^{(i)} e_{\eta}^{*(i)}, \quad (6.3)$$

где V — рассеивающий объем, ω — круговая частота, c — скорость света в вакууме,

$$D_{\nu\rho\mu\eta}(\mathbf{q}_{sc}; L) = \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} \times \\ \times \int_{-L/2}^{L/2} D_{\nu\rho\mu\eta}(\mathbf{q}_{sc\perp}; z, z_1) e^{-iq_{sc\parallel}(z-z_1)} dz dz_1, \quad (6.4)$$

а $D_{\nu\rho\mu\eta}(\mathbf{q}_{sc\perp}; z, z_1)$ — корреляционная функция флуктуаций тензора диэлектрической проницаемости, которая в координатном представлении имеет вид

$$D_{\nu\rho\mu\eta}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \langle \delta\varepsilon_{\nu\rho}(\mathbf{r}_1) \delta\varepsilon_{\mu\eta}(\mathbf{r}_2) \rangle, \quad (6.5)$$

$\mathbf{q}_{sc} = \mathbf{k}^{(i)} - \mathbf{k}^{(s)}$ — вектор рассеяния. Здесь i, s обозначают падающую (i) и рассеянную (s) волны, $\mathbf{e}^{(i)}, \mathbf{e}^{(s)}$ — векторы поляризации этих волн, $\mathbf{k}^{(i)}, \mathbf{k}^{(s)}$ — волновые векторы. В одноосной среде $\mathbf{e}^{(s)}, \mathbf{k}^{(s)}$ и $\mathbf{e}^{(i)}, \mathbf{k}^{(i)}$ могут принимать по два значения, относящиеся к обычной и необычной волнам. Множитель $A^{(is)}(\mathbf{k}^{(s)}, \mathbf{k}^{(i)})$ — угловой фактор, R — расстояние от рассеивающего объема до точки наблюдения, $I_0^{(i)}$ — интенсивность падающего света. В формуле (6.3) не учитывается преломление на границах образца. Этот вопрос обсуждается в [30].

Корреляционная функция $\hat{D}(\mathbf{q}_{\perp}; z, z_1)$ в формуле (6.3) согласно (6.2) связана с корреляционной функцией флуктуаций директора \hat{G} :

$$D_{\nu\rho\mu\eta} = \varepsilon_a^2 (n_{\nu}^0 n_{\mu}^0 G_{\rho\eta} + n_{\nu}^0 n_{\eta}^0 G_{\rho\mu} + \\ + n_{\rho}^0 n_{\mu}^0 G_{\nu\eta} + n_{\rho}^0 n_{\eta}^0 G_{\nu\mu}), \quad (6.6)$$

где для нематика $\hat{G} = \hat{g}$, а для смектика

$$G_{\alpha\beta}(\mathbf{q}_{\perp}; z, z_1) = q_{\alpha} q_{\beta} g(\mathbf{q}_{\perp}; z, z_1).$$

Интеграл по z и z_1 в формуле (6.4) может быть вычислен в общем виде по формуле (4.22). Имеем

$$\int_{-L/2}^{L/2} \int_{-L/2}^{L/2} \hat{G}(\mathbf{q}_{\perp}; z, z_1) e^{-iq_{\parallel}(z-z_1)} dz dz_1 = \\ = k_B T \hat{U} \hat{J}^{-1} \left(4 \sinh \frac{\hat{J}L}{2} \hat{F} \sinh \frac{\hat{J}L}{2} + L \hat{J} + \hat{I} - e^{\hat{J}L} \right) \times \\ \times \hat{J}^{-1} \hat{V}, \quad (6.7)$$

где $\hat{J} = \hat{\Lambda} - iq_{\parallel} \hat{I}$ — диагональная матрица.

Для необыкновенного луча длина волнового вектора \mathbf{k} зависит от направления, а вектор поляризации \mathbf{e} , лежащий в плоскости $(\mathbf{k}, \mathbf{n}^0)$, не ортогонален \mathbf{k} . Для нас наиболее существенно влияние анизотропии среды на длину вектора рассеяния $\mathbf{q}_{sc} = \mathbf{k}^{(i)} - \mathbf{k}^{(s)}$, поскольку в неограниченной среде при $H = 0$ интенсивность рассеяния $\sim 1/q_{sc}^2$ [1]. В остальных величинах анизотропией будем пренебречь, что позволит считать $\mathbf{e} \perp \mathbf{k}$ и $A^{(is)}(\mathbf{k}^{(s)}, \mathbf{k}^{(i)}) = 1$.

Проанализируем для гомеотропной и планарной геометрий НЖК с $\chi_a > 0$ возможности определения энергий сцепления из данных по рассеянию света.

6.1. Гомеотропная ориентация

Рассмотрим случай, когда падающий луч нормален к поверхности ячейки. Геометрия рассеяния показана на рис. 4. Здесь падающий луч — обычный, а рассеянный — необыкновенный.

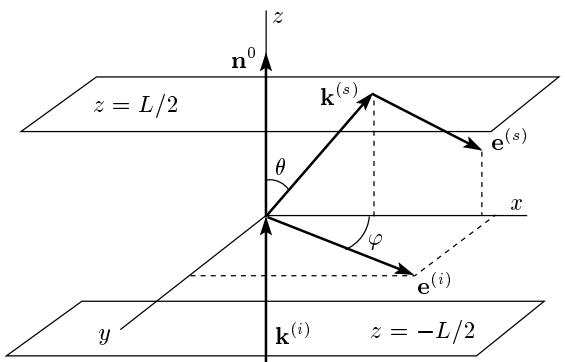


Рис. 4. Геометрия рассеяния света для гомеотропной ориентации НЖК

Угловая зависимость интенсивности рассеянного света при этом имеет вид

$$I(\theta, \varphi) = C_0 \sin^2 \theta \times \\ \times \left[G_{(2)} + (G_{(1)} - G_{(2)}) \cos^2 \varphi \cos^2 \frac{\theta}{2} \right], \quad (6.8)$$

где

$$C_0 = I_0^{(i)} V \left(\frac{\omega^2 \varepsilon_a}{4\pi R c^2} \right)^2$$

— постоянная, а $G_{(j)}$ имеет вид

$$G_{(j)} = \frac{k_B T}{K_{33}(\lambda_j^2 + q_{\parallel}^2)L} \times \\ \times \left\{ L + \frac{q_{\parallel}^2 - \lambda_j^2}{\lambda_j(\lambda_j^2 + q_{\parallel}^2)} + \frac{K_{33}^2 \lambda_j^2 - W_1 W_2}{\lambda_j \mathcal{K}_j^+} + 4e^{-\lambda_j L} \lambda_j \times \right. \\ \times \frac{(W_1 W_2 - K_{33}^2 q_{\parallel}^2) \cos(Lq_{\parallel}) - K_{33} q_{\parallel} (W_1 + W_2) \sin(Lq_{\parallel})}{(\lambda_j^2 + q_{\parallel}^2) \mathcal{K}_j^+} + \\ \left. + \frac{e^{-2\lambda_j L}}{\lambda_j \mathcal{K}_j^+} \left[K_{33}^2 \lambda_j^2 - W_1 W_2 - \left(\lambda_j L + \frac{\lambda_j^2 - q_{\parallel}^2}{\lambda_j^2 + q_{\parallel}^2} \right) \mathcal{K}_j^- \right] \right\} \times \\ \times \left[1 - e^{-2\lambda_j L} \frac{\mathcal{K}_j^-}{\mathcal{K}_j^+} \right]^{-1}, \quad (6.9)$$

где

$$\mathcal{K}_j^{\pm} = (K_{33} \lambda_j \pm W_1)(K_{33} \lambda_j \pm W_2),$$

$$q_{\parallel} = 2\sqrt{\varepsilon_{\perp}} \frac{\omega}{c} \sin^2(\theta/2),$$

а λ_j вычисляются по формуле (5.13) с

$$q = q_{\perp} = \sqrt{\varepsilon_{\perp}} \frac{\omega}{c} \sin \theta.$$

При больших $\lambda_j L$ экспоненциальные члены в (6.9) можно опустить, и величина $G_{(j)}$ определяется первыми тремя слагаемыми. Первое из них соответствует пределу неограниченной среды, $L \rightarrow \infty$,

$$G_{(j)} = \frac{k_B T}{K_{33}} \frac{1}{\lambda_j^2 + q_{\parallel}^2} = \frac{k_B T}{K_{33} q_{\parallel}^2 + K_{jj} q_{\perp}^2 + \chi_a H^2},$$

что совпадает с известным результатом [1].

Второе слагаемое связано с учетом конечности объема в экспоненциальном приближении, $\text{ch } x \approx \text{sh } x \approx \exp x$ в (5.19) при интегрировании пространственно-однородной корреляционной функции неограниченной среды, когда

$$g(\mathbf{q}, z, z_1) \approx g(\mathbf{q}, |z - z_1|).$$

По этой причине оно не зависит от энергий сцепления W_1, W_2 .

Третий член в (6.9), зависящий от W_1 и W_2 , возникает из-за интегрирования в конечных пределах третьего слагаемого в (5.19) в экспоненциальном приближении, которое учитывает пространственную неоднородность корреляционной функции. Заметим, что пространственно-неоднородное слагаемое, связанное с четвертым членом в (5.19), не вносит вклада в рассеяние по причинам симметрии.

Обратим внимание, что третье слагаемое в (6.9) по абсолютной величине соизмеримо с первыми двумя в не очень толстых образцах.

Как видно из формулы (6.8), угол φ определяет лишь относительный вклад мод δn_1 и δn_2 в рассеяние. Поэтому основная информация о параметрах W_1 и W_2 содержится в зависимости $I(\theta, \varphi)$ от угла θ , которая показана на рис. 5. Здесь приведена зависимость интенсивности рассеяния, вычисленная по формулам (6.8), (6.9) для двух наборов энергии сцепления в интервале углов от 0.003 до 0.03 рад. На вставке к рис. 5а эта зависимость показана в расширенном интервале углов $0 \leq \theta \leq \pi/3$. На каждом из рис. 5а и 5б приведены три графика, соответствующие разным значениям внешнего поля: $H = 0, 700$ Гс и 2000 Гс. Отметим, что при использовании в формуле (6.9) первых трех слагаемых расхождение с точными результатами начинают наблюдаться для углов $\theta \leq 10^{-2}$ рад.

Различие между ходом кривых на рис. 5а и 5б показывает, что измерение угловой зависимости интенсивности рассеяния при разных значениях внешнего поля может служить эффективным методом для определения энергий сцепления.

6.2. Планарная ориентация

При изучении рассеяния света в НЖК наиболее интересно рассматривать случай $q_{sc} \rightarrow 0$, поскольку при этом интенсивность рассеяния максимальна [1]. В силу анизотропии среды такая ситуация может быть реализована, когда падающий и рассеянный лучи одного типа — оба обычные (*oo*) или оба необыкновенные (*ee*). Поскольку по геометрическим причинам рассеяние (*oo*)-типа отсутствует [1], мы рассмотрим рассеяние (*ee*)-типа. В отличие от гомеотропной ориентации, здесь приходится рассматривать случай наклонного падения, поскольку интенсивность рассеяния света на нулевой угол при нормальном и скользящем падении обращается в нуль [29]. Для простоты выберем угол падения $\theta^{(i)} = \pi/4$, поскольку при этом коэффициент extinction близок к максимальному [29], и ограничим-

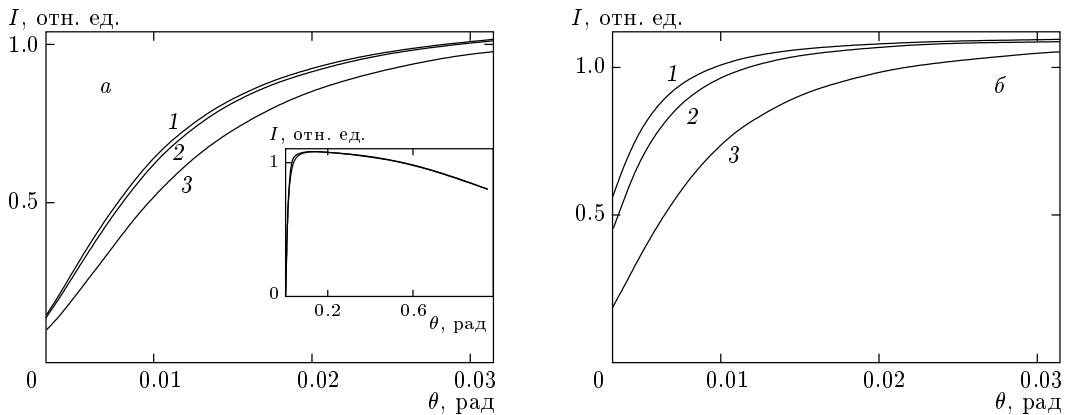


Рис. 5. Угловая зависимость интенсивности рассеянного света для гомеотропной ориентации НЖК во внешнем поле при $L = 3 \cdot 10^{-3}$ см, $\chi_a = 10^{-7}$, $k_0 = \sqrt{\varepsilon_{\perp}}(\omega/c) = 10^5$ см $^{-1}$. Значения K_{jj} , $j = 1, 2, 3$ такие же, как на рис. 2. *a* — $W_1 = 10^{-3}$ эрг/см 2 , $W_2 = 2 \cdot 10^{-3}$ эрг/см 2 , $\delta - W_1 = 10^{-4}$ эрг/см 2 , $W_2 = 2 \cdot 10^{-4}$ эрг/см 2 . 1 — $H = 0$, 2 — $H = 700$ Гс, 3 — $H = 2000$ Гс

ся случаем, когда падающий и рассеянный лучи лежат в одной плоскости с нормалью к поверхности. Азимутальный угол φ между проекциями векторов $\mathbf{k}^{(i)}, \mathbf{k}^{(s)}$ на плоскость xy и осью x будем считать произвольным.

Относительный вклад мод $\delta n_{1,2}$ флюктуаций директора $\delta \mathbf{n} = (\delta n_1, 0, \delta n_2)$ в рассеяние определяется множителем

$$\begin{aligned} e_{\alpha}^{(s)} e_{\gamma}^{(s)} D_{\alpha\beta\gamma\rho} e_{\beta}^{(i)} e_{\rho}^{(i)} &= (\mathbf{e}^{(s)} \cdot \mathbf{n}^{(0)})^2 (\mathbf{e}^{(i)} \cdot \hat{g} \mathbf{e}^{(i)}) + \\ &+ (\mathbf{e}^{(s)} \cdot \mathbf{n}^{(0)}) (\mathbf{e}^{(i)} \cdot \mathbf{n}^{(0)}) \left[(\mathbf{e}^{(i)} \cdot \hat{g} \mathbf{e}^{(s)}) + (\mathbf{e}^{(s)} \cdot \hat{g} \mathbf{e}^{(i)}) \right] + \\ &+ (\mathbf{e}^{(i)} \cdot \mathbf{n}^{(0)})^2 (\mathbf{e}^{(s)} \cdot \hat{g} \mathbf{e}^{(s)}). \quad (6.10) \end{aligned}$$

При $\varphi = \pi/2$ для малоуглового рассеяния векторы $\mathbf{k}^{(i)} \approx \mathbf{k}^{(s)} \perp \mathbf{e}^{(i)} \approx \mathbf{e}^{(s)}$ лежат в плоскости yz . Следовательно, все свертки типа $(\mathbf{e}^{(i,s)} \cdot \hat{g} \mathbf{e}^{(i,s)})$ в (6.10) не содержат вклада моды $\delta \mathbf{n}_1$ — компоненты флюктуаций директора вдоль оси x . Таким образом, в этой геометрии непосредственно измеряется вклад моды $\delta \mathbf{n}_2$ и связанные с ней поверхностные энергии $W_1^{(2)}$ и $W_2^{(2)}$. Это иллюстрируется на рис. 6а, где изображена зависимость интенсивности рассеяния от угла $\theta^{(s)}$ между $\mathbf{k}^{(s)}$ и осью z . Формально здесь изображены графики интенсивности для четырех наборов значений поверхностных энергий. Поскольку, как мы видели в разд. 5.4 (рис. 3), компонента g_{22} практически не зависит от $W_{1,2}^{(1)}$, на рис. 6а пары графиков, соответствующих одному набору $W_{1,2}^{(2)}$, но разным значениям $W_{1,2}^{(1)}$, неотличимы друг от друга. Таким образом, эта геометрия наиболее удобна для определения пары энергий $W_{1,2}^{(2)}$.

Для определения двух других энергий сцепления

$W_{1,2}^{(1)}$ необходимо измерять вклад моды δn_1 в рассеяние, т. е. проводить измерения при $\varphi \neq \pi/2$. При этом следует иметь в виду, что при $\varphi = 0$ векторы $\mathbf{e}^{(s,i)}$ совпадают по направлению с вектором директора \mathbf{n}^0 , и поэтому все свертки типа $(\mathbf{e}^{(i,s)} \cdot \hat{g} \mathbf{e}^{(i,s)})$ в (6.10) равны нулю в силу условия $\delta \mathbf{n} \perp \mathbf{n}^0$. Поэтому такие измерения следует проводить при $0 < \varphi < \pi/2$. На рис. 6б показана угловая зависимость интенсивности рассеяния для тех же четырех наборов энергий сцепления $W_{1,2}^{(1,2)}$, что и на рис. 6а. Видно, что за счет вклада моды $\delta \mathbf{n}_1$ интенсивность рассеяния начинает зависеть и от энергий сцепления $W_{1,2}^{(1)}$.

Влияние внешнего поля в планарной геометрии иллюстрируется на рис. 7. Видно, что характерные поля, при которых значительно уменьшается интенсивность малоуглового рассеяния, имеют порядок $H \sim 10^4$ Гс.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложена общая схема вычисления корреляционных функций флюктуаций ориентации в ограниченных образцах жидких кристаллов с учетом влияния ориентирующих поверхностей и внешних полей. Для случая плоскопараллельных ячеек были найдены пространственные корреляционные функции для нематических и смектических жидкких кристаллов без использования упрощающих предположений типа одноконстантного приближения. Рассмотрены случаи положительной и отрицательной анизотро-

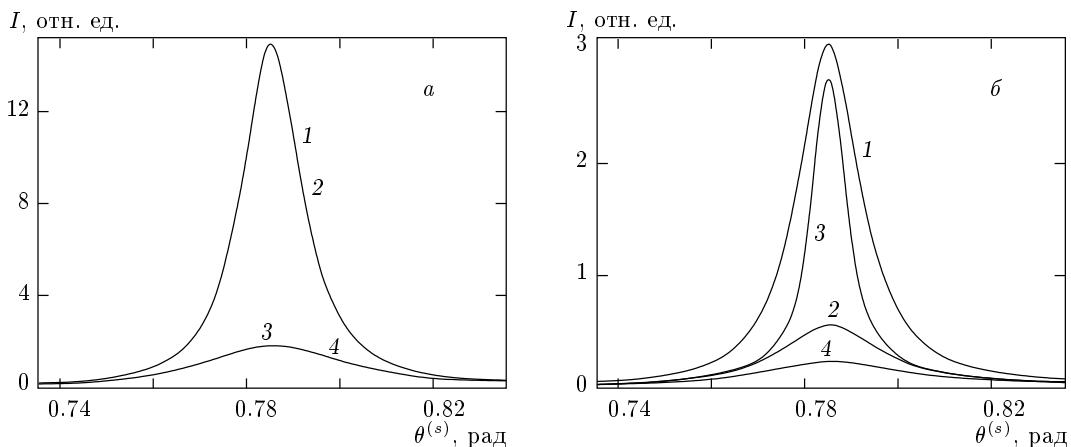


Рис. 6. Угловая зависимость интенсивности рассеяния (*ee*)-типа при $\theta^{(i)} = \pi/4$ для планарной ориентации НЖК. *a* — $\varphi = \pi/2$, *б* — $\varphi = \pi/20$. При расчетах полагалось $\varepsilon_{\parallel} = 3.5$, $\varepsilon_{\perp} = 2.5$, $L = 10^{-3}$ см, $H = 0$. Значения K_{jj} ($j = 1-3$) такие же, как на рис. 2. 1 — $W_1^{(1)} = 2$, $W_1^{(2)} = 7$, $W_2^{(1)} = 1.9$, $W_2^{(2)} = 8.6$; 2 — $W_1^{(1)} = 200$, $W_1^{(2)} = 7$, $W_2^{(1)} = 190$, $W_2^{(2)} = 8.6$; 3 — $W_1^{(1)} = 2$, $W_1^{(2)} = 700$, $W_2^{(1)} = 1.9$, $W_2^{(2)} = 860$; 4 — $W_1^{(1)} = 200$, $W_1^{(2)} = 700$, $W_2^{(1)} = 190$, $W_2^{(2)} = 860$. Эти величины указаны в единицах 10^{-4} эрг/см². Интенсивности нормированы на одинаковую величину

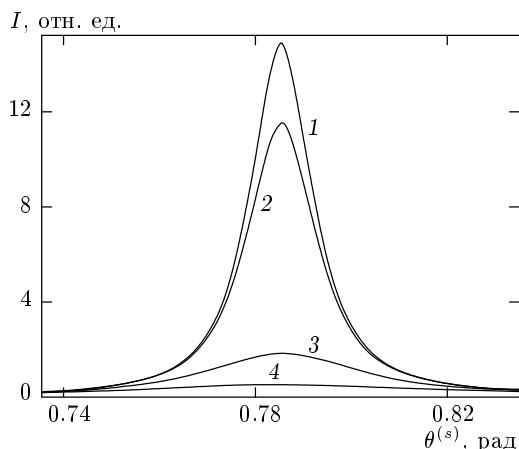


Рис. 7. Влияние внешнего поля на угловую зависимость интенсивности рассеянного света в той же геометрии, что и на рис. 6.а. При расчетах использованы такие же параметры, как и на рис. 6. Энергии сцепления положены равными $W_1^{(1)} = 2$, $W_1^{(2)} = 7$, $W_2^{(1)} = 1.9$, $W_2^{(2)} = 8.6$ (в единицах 10^{-4} эрг/см²), $\chi_a = 10^{-7}$. 1 — $H = 0$, 2 — $H = 2 \cdot 10^3$ Гс, 3 — $H = 10^4$ Гс, 4 — $H = 2 \cdot 10^4$ Гс

пии диэлектрической проницаемости или магнитной восприимчивости.

Полученные результаты были использованы для расчета угловой зависимости интенсивности рассеянного света в различных геометриях. Оказалось, что интенсивность рассеяния в ограниченных ячей-

ках очень чувствительна как к значениям энергий сцепления, так и к величине приложенного внешнего поля. Показано, в частности, что с помощью таких экспериментов при планарной ориентации НЖК можно измерять отдельно поверхностные энергии, связанные с поворотом директора в ориентирующей плоскости, и отклонения от нее.

Самостоятельный интерес может представлять изучение рассеяния света в нематических жидкокристаллах с отрицательной анизотропией, поскольку здесь имеются дополнительные возможности исследования вещества, связанные с тем, что флуктуационные моды по-разному меняются во внешнем поле.

Развитый подход может быть обобщен и на другие геометрии, такие как сферическая и цилиндрическая, которые существенны при описании флуктуаций ориентации в каплях жидкокристаллов, заключенных в полимерной матрице или пористых средах, а также на использование более реалистичных поверхностных потенциалов [27], отличных от потенциала Рапини (2.11).

Работа выполнена при поддержке образовательной программой ISSEP. Авторы выражают признательность В. А. Белякову за обсуждение работы и полезные советы и А. Н. Шалагинову за ценные беседы.

ЛИТЕРАТУРА

1. P. G. de Gennes and J. Prost, *The Physics of Liquid Crystals*, Clarendon Press, Oxford (1993).
2. T. Bellini, N. A. Clark, C. D. Muzny et al., Phys. Rev. Lett. **69**, 788 (1992); N. A. Clark, T. Bellini, R. M. Malzbender et al., Phys. Rev. Lett. **71**, 3505 (1993); F. M. Aliev, Mol. Cryst. Liq. Cryst. **243**, 91 (1994).
3. A. Poniewierski and A. Samborski, Phys. Rev. E **53**, 2436 (1996).
4. P. Ziherl, A. Sarlah, and S. Zumer, Phys. Rev. E **59**, 602 (1998).
5. B. Alkhairalla, H. Allinson, N. Boden, S. D. Evans, and J. R. Henderson, Phys. Rev. E **59**, 3033 (1999).
6. S. Sprunt, M. S. Spector, and J. D. Litster, Phys. Rev. A **45**, 7355 (1992); R. Hall, K. Miyachi, D. Newton, H. Takezoe, and A. Fukuda, Jap. J. Appl. Phys. **31**, 329 (1992); T. Bellini, N. A. Clark, and D. W. Schaefer, Phys. Rev. Lett. **74**, 2740 (1995); S. Stallinga, M. M. Wittebrood, D. H. Luijendijk, and Th. Rasing, Phys. Rev. E **53**, 6085 (1996); A. N. Shalaginov, Phys. Rev. E **53**, 3623 (1996).
7. H. Li and M. Kardar, Phys. Rev. Lett. **67**, 3275 (1991).
8. H. Li, M. Paczuski, K. Kardar, and K. Huang, Phys. Rev. B **44**, 8274 (1991).
9. A. Adjari, L. Peliti, and J. Prost, Phys. Rev. Lett. **66**, 1481 (1991).
10. A. Ajdari, B. Duplantier, D. Hone, L. Peliti, and J. Prost, J. de Phys. II **2**, 487 (1992).
11. D. Kang and C. Rosenblatt, Phys. Rev. E **53**, 2976 (1996).
12. S. Matsumoto, M. Houlbert, T. Hayashi, and K. Kubodera, Appl. Phys. Lett. **69**, 1044 (1996); L. Vicari, Phys. Rev. E **58**, 3280 (1998).
13. O. D. Lavrentovich, Phys. Rev. A **46**, R722 (1992); Yu. Panarin, S. T. MacLughadha, and J. K. Vij, Phys. Rev. E **52**, R17 (1995); B. Cull, Y. Chi, and S. Kumar, Phys. Rev. E **51**, 526 (1995); R. E. Kraig, P. L. Taylor, R. Ma, and D. Yang, Phys. Rev. E **58**, 4594 (1998); U. Kuhnau, A. G. Petrov, G. Klose, and H. Schmiedel, Phys. Rev. E **59**, 578 (1999).
14. R. J. Ondris-Crawford, G. P. Crawford, S. Zumer, and J. W. Doane, Phys. Rev. Lett. **70**, 194 (1993); L. Limat and J. Prost, Liq. Cryst. **13**, 101 (1993); M. Ambrozic and S. Zumer, Phys. Rev. E **59**, 4159 (1999).
15. P. G. de Gennes, C. R. Acad. Sci. Paris **266**, 15 (1968); J. Phys. (Paris) Colloq. **30**, (Suppl. C4) 65 (1969).
16. В. Л. Покровский, Е. И. Кац, ЖЭТФ **73**, 774 (1977); А. Ю. Вальков, В. П. Романов, ЖЭТФ **83**, 1777 (1982).
17. Б. Я. Зельдович, Н. В. Табиран, ЖЭТФ **81**, 1788 (1981).
18. Т. Я. Марусий, Ю. А. Резников, В. Ю. Решетняк, М. С. Соскин, А. И. Хижняк, ЖЭТФ **91**, 851 (1986).
19. K. Eidner, M. Lewis, H. K. M. Vithana, and D. L. Johnson, Phys. Rev. A **40**, 6388 (1989).
20. В. П. Романов, А. Н. Шалагинов, ЖЭТФ **102**, 884 (1992).
21. A. Poniewierski and A. Holyst, Phys. Rev. B **47**, 9840 (1993).
22. A. Rapini and M. Popoular, J. Phys. (Paris) Colloq. **30**, (Suppl. C4) 54 (1969).
23. A. N. Shalaginov and V. P. Romanov, Phys. Rev. E **48**, 1073 (1993).
24. А. Ю. Вальков и М. В. Романов, Colloid and Surfaces A **148**, 179 (1999).
25. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Статистическая физика*, ч. 1, Наука, Москва (1976).
26. Р. Фейнман, *Статистическая механика*, Мир, Москва (1978).
27. Л. М. Блинов, Е. И. Кац, А. А. Сонин, УФН **152**, 449 (1987).
28. В. Н. Матвеенко, Е. А. Кирсанов, *Поверхностные явления в жидкокристаллах*, МГУ, Москва (1991).
29. А. Ю. Вальков, В. П. Романов, А. Н. Шалагинов, УФН **164**, 149 (1994).
30. M. Lax, D. F. Nelson, in *Proc. of the 3rd Rochester Conf. on Coher. and Quant. Opt.*, ed. by L. Mandel and E. Wolf, Plenum, N. Y. (1973), p. 415.