

ПРОЦЕССЫ САМООРГАНИЗАЦИИ И ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ ДЕФЕКТЫ В НАНОСЛОЯХ НЕМАТИЧЕСКОГО ЖИДКОГО КРИСТАЛЛА

A. Н. Чувыров^a, Ф. М. Гирфанова^{a*}, И. С. Мальцев^b

^aБашкирский государственный университет
450074, Уфа, Россия

^bБашкирский государственный педагогический университет им. М. Акмуллы
450000, Уфа, Россия

Поступила в редакцию 9 апреля 2007 г.

Методом атомно-силовой микроскопии (ACM) изучены процессы самоорганизации при формировании топологических дефектов в наномолекулярных слоях нематического жидкого кристалла, имеющего гомеотропную ориентацию молекул относительно подложки. Обнаружено, что в такой ситуации на самой подложке образуется смектический монослой толщиной, равной длине молекулы (примерно 2.2 нм), а выше формируется наномолекулярный слой нематического жидкого кристалла. В таких практических двумерных слоях образуется множество разнообразных нанокластеров [1], имеющих правильную геометрию, близкую к геометрии твердых кристаллов: хат-структуры, пирамиды и рафт-структуры с симметрией C_{nm} , где $n = 2, 4, 5, 6, 7, \dots, \infty$, конусы и нанопулы. В нанопулах и рафт-структурах спонтанно возникают модулированные линейные структуры и точечные топологические дефекты.

PACS: 61.30.Jf, 61.46.Hk, 68.37.Ps

1. ВВЕДЕНИЕ

В нематических жидкких кристаллах (НЖК) возможно существование множества различного рода дефектов структуры (неоднородных распределений поля директора), число и разновидность которых определяются топологией ограничивающей поверхности и ориентацией молекул жидкких кристаллов (ЖК) на границе. В различных ситуациях наблюдаются сингулярные (линейные и точечные дисклинации) или несингулярные (солитоны, доменные стеки, солитоноподобные волны) особенности. К характерным чертам последних относятся отсутствие разрывов в ориентации директора, малый размер самого возмущения, устойчивость во времени при движении и конечность энергии ядра. По-видимому, первыми примерами наблюдавшихся несингулярных дефектов являются доменные стеки, возникающие в НЖК в однородном магнитном поле [2], или несингулярные линейные дефекты в НЖК в цилиндрическом капилляре [3].

В различных ситуациях появление солитонов или бризеров в НЖК конечной толщины описано, например, в работах [4–12], а качественная теория предложена в работе [5]. Для наблюдения таких дефектов достаточно эффективна техника двойного лучепреломления света. Однако развитие новых методов техники физического эксперимента, в частности, атомно-силовой микроскопии (ACM), позволяет проводить исследования дефектов и нанокластеров в сверхтонких слоях органических жидкостей и полимеров. Интерес к этому связан с тем, что на их основе возможно дальнейшее развитие технологий получения пленок Ленгмиора–Блоджета [13]. Как правило, такие пленки получают на поверхностях металлов и окислов, параметры решетки которых близки к межмолекулярным расстояниям органических соединений (около 0.4 нм) или кратны длине молекул. Благодаря этому осуществляется эпитаксия органических молекул на поверхности и образование большого количества двумерных кластеров: двумерных кристаллов, полисинтетических двойников, полосчатых структур и т. д. Особенно ярко это

*E-mail: Girfanova@bsu.bashedu.ru

реализуется в нанослоях, но при гомеотропной ориентации молекул в них всегда образуется двумерный смектический слой [13]: при плотности заполнения поверхности $\vartheta = 1$ — это смектик А, но при $\vartheta < 1$ он переходит в смектик С ($\vartheta = 1$ соответствует максимально возможному количеству молекул в нанослое заданной площади).

В настоящей работе методом АСМ исследованы образование и структура нанослоев НЖК вблизи подложки, а также формирование нанокластеров в сверхтонких слоях от 2.2 до 60 нм, проведена их классификация и изучена форма огранки.

2. ТЕХНИКА ПОЛУЧЕНИЯ НАНОСЛОЕВ НЖК И АНАЛИЗ ОРИЕНТАЦИИ МОЛЕКУЛ В НИХ

Рассмотрим методику получения наномолекулярных слоев НЖК. Объектом исследования в настоящей работе был НЖК *N*-(*n*-метоксибензилиден)-*n*-бутиланилин (МББА), молекула которого не имеет полярных концевых групп.

Основную трудность при исследованиях нанослоев НЖК представляет техника подготовки атомарно-чистых поверхностей подложки и самого нанослоя. Распространенная техника заключается в том, что ЖК, наносимые на поверхность подложки, растворяются в подходящем растворителе, который в дальнейшем выпариваются [13].

В нашем случае подложкой служила слюда, которая имеет слоистую структуру, причем перед проведением исследований верхний слой подложки отщепляли для получения атомарно-гладкой поверхности, т. е. скола. На поверхность такого скола наносили каплю НЖК, а затем его «сдували» сжатым воздухом в течение часа. Контроль АСМ-изображений при различных временах «сдува» показал, что этого времени достаточно для получения на поверхности слюды нанослоев НЖК.

Наномолекулярные слои НЖК исследовались с помощью атомно-силового микроскопа Solver PRO. Измерения проводились при температуре 300 К с использованием кантителевера NSG01 с резонансной частотой 156 кГц, шаг сканирования составлял 8.6 нм, амплитуда колебания зонда — порядка 30–50 нм.

Для изучения структуры НЖК эффективнее использовать полуконтактный режим работы атомно-силового микроскопа, который создавался с целью исследования нежестких поверхностей [14, 15]. Необходимо отметить, что именно этот метод наиболее подходит при изучении молекулярно-статистических объектов, имеющих сильный

температурный дрейф, так как в остальных случаях интерпретация АСМ-изображения очень затруднена. Поэтому для этих объектов важны надежность и достоверность результатов измерений, которые, как правило, достигаются многократным сканированием (до десяти раз) выбранного участка НЖК.

В режиме полуконтактной микроскопии образец сканируется острием кантителевера, колеблющегося около поверхности образца в вертикальном направлении. Особенность состоит в том, что колеблющееся острие находится настолько близко к поверхности, что оно слегка «стучит» по поверхности образца при сканировании, контактируя с поверхностью в зоне минимальной энергии ван-дер-ваальса взаимодействия в нижней части своего размаха, благодаря чему этот метод позволяет преодолеть одну из важнейших трудностей при интерпретации АСМ-изображений НЖК. Поскольку ван-дер-ваальсов взаимодействие НЖК и острия кантителевера зависит от ориентации молекул, на АСМ-изображениях, полученных прерывисто-контактным методом, положение и форма поверхности НЖК определяются по положению соприкосновения кантителевера с поверхностью. Топологические дефекты в таких слоях различаются изменением пространственной ориентации молекул, которая фиксируется «текущим» силовым взаимодействием НЖК и острия кантителевера.

Для анализа АСМ-изображений молекулярно-статистических объектов типа НЖК впервые были применены одномерное и двумерное вейвлет-преобразования [16–18]:

$$W(a, b) = \frac{1}{\sqrt{a}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \varphi\left(\frac{x-b}{a}\right) dx,$$

$$W(a, b, y) = \frac{1}{\sqrt{a}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x, y) \varphi\left(\frac{x-b}{a}\right) dx,$$

где $f(x)$ — АСМ-сигнал с кантителевера. В качестве базового вейвлет-преобразования использовался вейвлет типа гауссиана:

$$\varphi(x) = \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) - \frac{1}{2} \exp\left(-\frac{x^2}{8}\right).$$

В случае одномерного вейвлет-преобразования функция, описывающая АСМ-изображения в плоскости xz , имеет вид $W(a, b)$, а в случае двумерного вейвлет-преобразования — $W(a, b, y)$, где a — параметр масштаба, показывающий глубину преобразо-

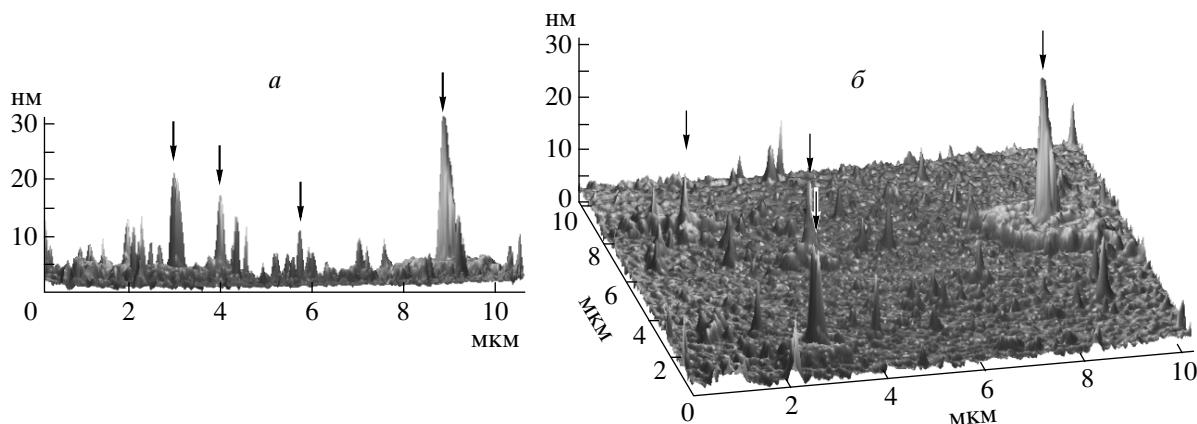


Рис. 1. Вид потенциального рельефа, полученный методом АСМ (вертикальные стрелки показывают расположение нанопуллов): *а* — в плоскости *xz*; *б* — в пространстве *xyz*

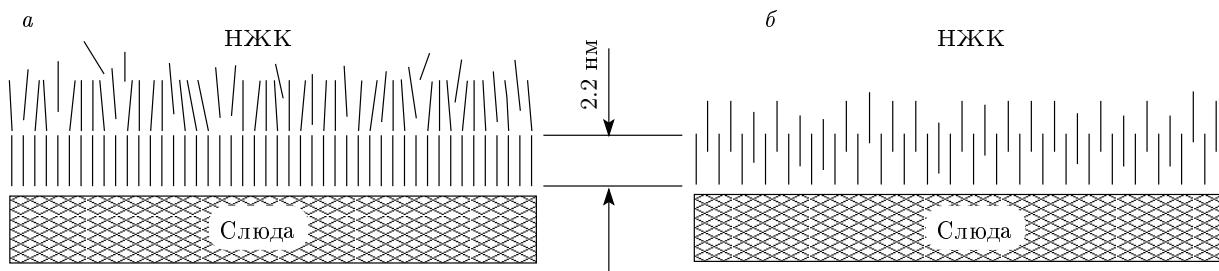


Рис. 2. Исследуемые объекты и ожидаемая ориентация молекул в них (молекулы НЖК обозначены штрихами): *а* — реальная ориентация молекул НЖК в первых двух слоях, обнаруженная при проведении исследований методом АСМ; *б* — общепринятая гипотетическая ситуация ориентации молекул НЖК около подложки

вания, b — параметр сдвига, y — номер среза сигнала по вертикальной оси. По сути, $W(a, b, y)$ — это двумерное представление трехмерных объектов или, по-другому, карта поверхности нанослоя НЖК с квадратной сеткой. Объем и форма кластеров на такой карте представляются в цветовых гаммах, причем красный цвет соответствует максимальной высоте, а синий — минимальной высоте граней кластеров. В черно-белом изображении функция $W(a, b, y)$ представляется в виде серых террас различного контраста: уменьшение черно-белого контраста соответствует увеличению высоты кластера.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ НАНОСЛОЕВ НЖК МЕТОДОМ АТОМНО-СИЛОВОЙ МИКРОСКОПИИ

Рассмотрим формирование в НЖК различныхnanoструктур, содержащих, в том числе, топологи-

ческие дефекты в центре путем их самоорганизации, т. е. спонтанным образом.

Общий вид АСМ-изображения в *xz*-срезе наномолекулярной пленки НЖК толщиной около 60–70 нм приведен на рис. 1. Главная его особенность — наличие изолированного монослоя в плоскости *xy*, причем толщина монослоя точно равна длине молекулы МББА (2.5 нм по краям слоя и 1.5–1.8 нм ближе к его центру), а упаковка молекул в нем более плотная, чем в НЖК. Это типичная ситуация для исследованных в этой работе нанослоев различной толщины (до 30 нм), т. е. первый моносвой в гомеотропно-ориентированном НЖК представляет собой двумерный смектический ЖК (рис. 2), в котором формируются устойчивые топологические дефекты в виде стенок шириной примерно 50–60 нм и длиной до 180–200 нм, которые уменьшают эффективную толщину слоя. Общий вид дефектов и их распределение на плоскости *xy* показан на рис. 3, причем углы ориентации молекул относительно вертикаль-

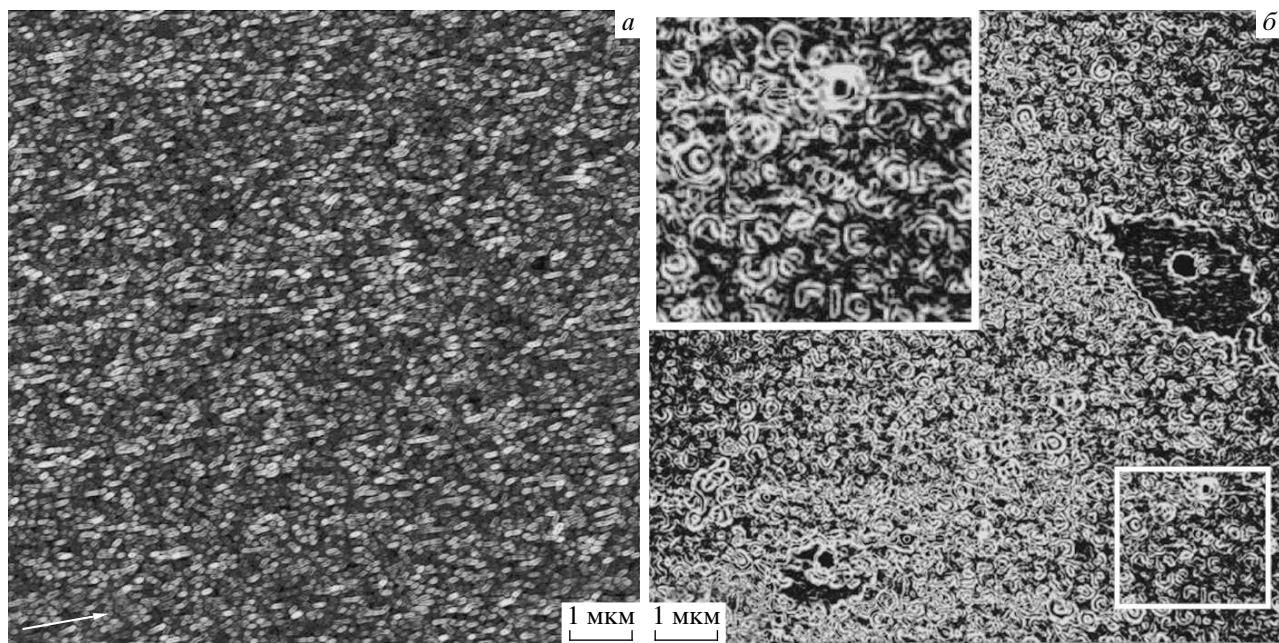


Рис. 3. ACM-изображения после двумерного вейвлет-преобразования: *а* — реальная ориентация молекул первого монослоя, содержащего топологические дефекты типа стенок в плоскости *ху* (стрелка указывает направление ориентации молекул); *б* — топологические дефекты и второй нанослой в плоскости *ху* (пятно с правого края соответствует устойчивому топологическому нанопулу)

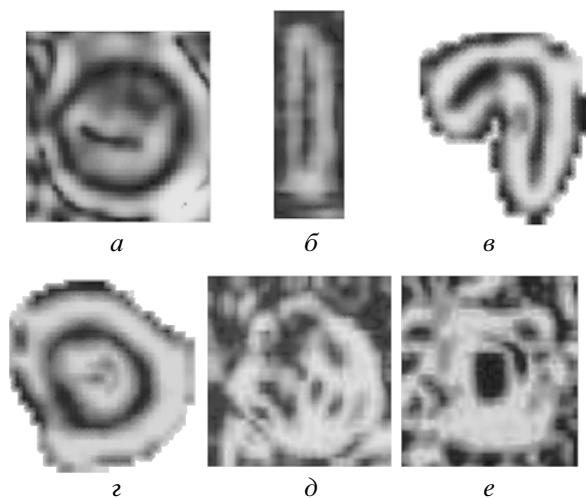


Рис. 4. Примеры двумерного вейвлет-преобразования основных устойчивых молекулярных конфигураций в плоскости *ху*: *а* — конус; *б* — хат-кластер; *в* и *г* — соответственно шестиугольный и восьмиугольный рафт-кластеры; *д* и *е* — пирамиды

ной оси меняются в каждой «стенке» от $+θ$ до $-θ$.

Во втором нанослое, вейвлет-изображение которого приведено на рис. 4, наблюдается множе-

ство различных топологических дефектов (нанокластеров и топологических солитонов) и нанопулов глубиной до 30 нм и с эффективным диаметром до 2000 нм. В результате двумерного вейвлет-преобразования удалось выявить образование нанокластеров с топологическими дефектами в центре, имеющих форму правильных геометрических тел (рис. 4): трехгранных призм — хат-кластеров; пирамид с поворотными осями четвертого и шестого порядков и, соответственно, с четырьмя и шестью плоскостями симметрии; конусов с поворотными осями бесконечного порядка. Эти фигуры описываются соответственно группами симметрии C_{2m} , C_{4m} , C_{6m} , $C_{\infty m}$. Фигуры с поворотной осью третьего порядка по какой-то причине запрещены при образовании нанокластеров в НЖК. Хат-кластер представляет собой трехграниную призму, лежащую одной гранью на подложке, ограниченную двумя кристаллическими гранями и имеющую в связи с этим симметрию C_{2m} (рис. 4*a*). Хат-кластеры чаще всего образуют полисинтетические двойники в виде замкнутых фигур — рафт-кластеров. Симметрия рафт-кластеров гораздо разнообразнее, так как они имеют форму неизометрических фигур, содержащих любую поворотную ось выше второго порядка, кроме оси третьего порядка. Соответствен-

но, их симметрия описывается группами C_{nm} , где $n = 2, 4, 5, 6, 7, \dots, \infty$, а не кристаллографическими группами симметрии, как в случае пирамидальных нанокластеров. Борта рафт-кластеров образуют линейные хат-кластеры, т. е. происходит самоорганизация хат-кластеров, образующих рафт-кластеры правильной геометрии. Рафт-кластеры могут быть частично залиты НЖК, причем чаще толщина заливки меньше высоты бортов. При этом в центре рафт-кластера имеется топологическая особенность. Если рафт-кластер заливается полностью, то образуется пирамида, усеченная пинакоидом, которая наследует особенность в центре.

Таким образом, важным для выяснения природы образования нанокластеров в НЖК является отсутствие пирамидальных нанокластеров и рафт-кластеров с симметриями C_{3m} и сравнительно небольшое количество рафт-кластеров с симметриями C_{5m} (их около 0.1 %) и C_{7m} (их около 0.02 %). Также необходимо отметить, что формирование подобных пирамидальных структур и рафт-кластеров в НЖК невозможно из-за наличия оси бесконечного порядка, описывающей симметрию НЖК.

Далее рассмотрим подробнее геометрию нанопуллов. Нанопулы всегда ограничены бордюром в виде ленточной пилы, отдельный «зубец» которой образует два хат-кластера, каждый длиной 120 нм и шириной 20 нм. Если бордюр прямолинеен (в противном случае нужно провести его компьютерную развертку и спрямление), то углы между хат-кластерами («зубцами») составляют 120° . В идеальном случае нанопулы имеют форму круга, ограниченного зубчатой (т. е. форме зубчатого колеса), причем симметрия нанопула зависит от числа n зубцов. Это означает, что нанопул имеет поворотную симметрию, кратную n , и n плоскостей симметрии m и описывается группой симметрии C_{nm} , где число n и угол зубца зависят от радиуса нанопула. Внутри нанопуллов, как правило, формируются два типа топологических дефектов, которые имеют вид полос типа миеленовых структур в холестерических ЖК или торов. Период полосчатой структуры постоянен и составляет примерно 50 нм, т. е. соответствует глубине нанопула. Радиус кольцевых дефектов может быть произвольным.

Рассмотрим применение одномерного и двумерного вейвлет-преобразований для анализа результатов АСМ-изображений некоторых из перечисленных выше нанокластеров, наблюдавшихся в нанослоях НЖК. На рис. 5 приведены примеры функций, описывающих высоту ограничивающих плоскостей для одномерного вейвлет-преобразования в xz -срезе для

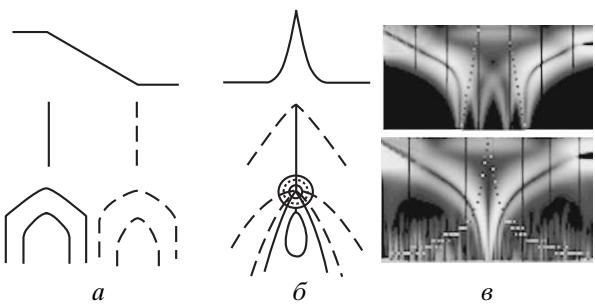


Рис. 5. Основные примеры вейвлет-преобразования сигнала с особенностями, описывающими линии ориентации молекул НЖК, которые реально наблюдаются в АСМ-изображениях: *а* — линейная ступенька; *б* — функция $|x|^{-1/3}$; *в* — ее ожидаемое изображение после одномерного вейвлет-преобразования

хат-кластеров, нанопирамид, наноконусов, рафтов и бордюров нанопуллов. Из анализа полученных с помощью одномерного вейвлет-преобразования изображений выяснилось, что существуют 1) группы смыкающихся дуг, 2) спаренная группа смыкающихся дуг, 3) группа дуг, имеющих вверху соосные черные и белые кольца и круги. Для выяснения формы граней нанокластеров в плоскости xz был проведен анализ полученных изображений известных элементарных и специальных функций. Оказалось, что изображения на рис. 4 соответствуют функциям, описывающим высоту h граней в плоскости среза xz : $h \approx \gamma|x|^\lambda$, $\lambda = -1/3$ (рис. 4*a,b,d,e*); $h \approx \delta|x|$ (рис. 4*e,f*), где γ , δ — константы, причем $h = \text{const}$ внутри рафта или нанопула (рис. 4*a,b,d,e*). На рис. 5 приведены одномерные вейвлет-преобразования этих функций в плоскости xz . Кроме картины преобразования сигналов представлены линии локальных экстремумов (они более характерны) и схематически изображены несколько линий уровня значений коэффициентов $W(a, b)$ (сплошные линии относятся к положительным, штриховые — к отрицательным значениям). Геометрические размеры, как правило, определяются из АСМ-изображений кластеров (см. рис. 1).

Анализируя спектры, представленные на рис. 6, и сравнивая их со спектрами на рис. 5, можно сделать заключение, какая конкретная функция описывает зависимость формы граней нанокластеров от координаты x . Положения граней хат-кластеров и бортов рафт-кластеров хорошо описываются степенными функциями типа $|x|^\lambda$, при этом чаще всего $\lambda = -1/3$. Это следует из анализа картин одномер-

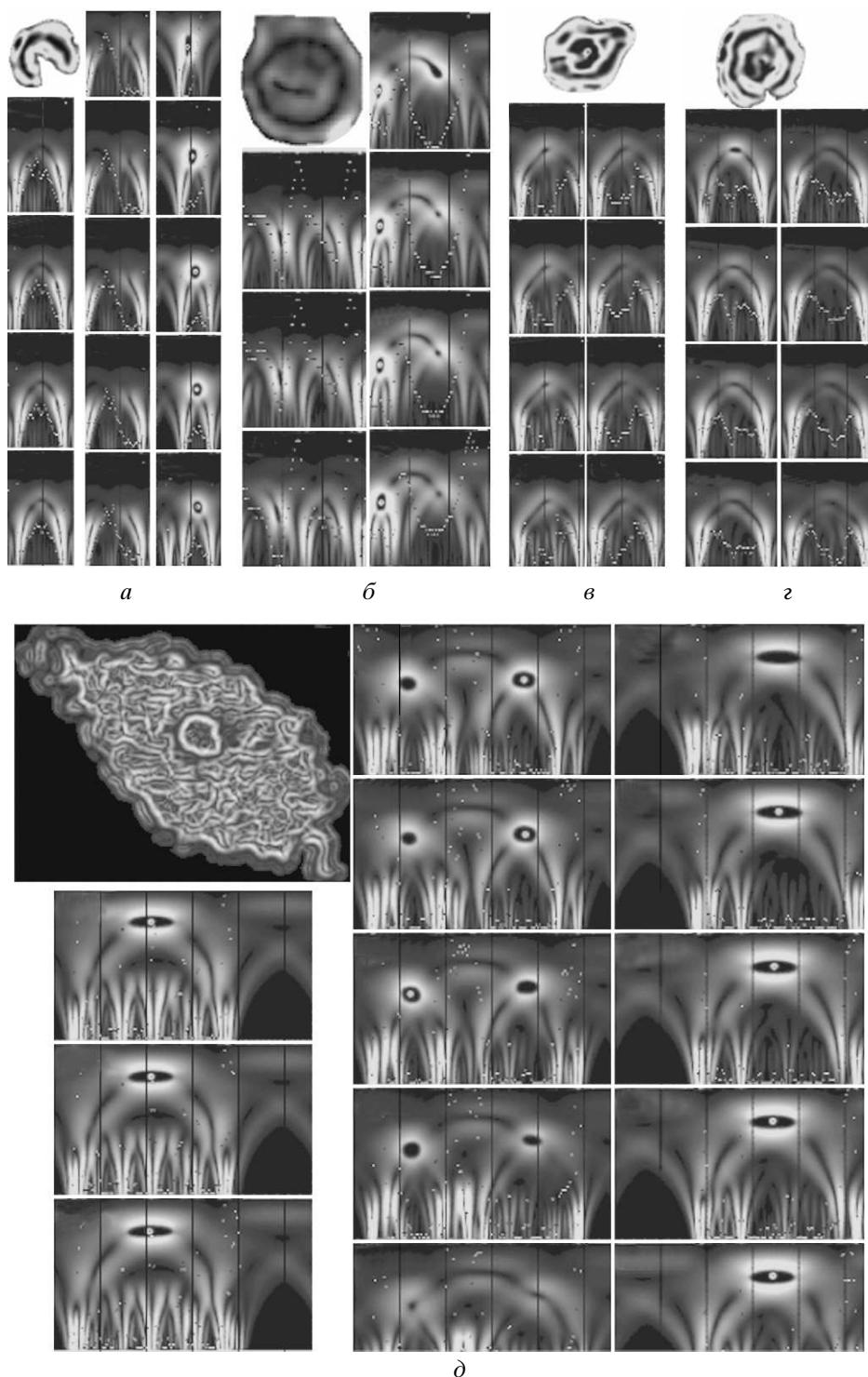


Рис. 6. Примеры одномерного вейвлет-преобразования: *а* — хат-кластеры; *б* — октаэдрические пирамиды; *в* — конусы; *г* — усеченные конусы; *д* — миеленовые структуры в нанопулах. Каждый кадр соответствует разрезу с шагом 8.6 нм вдоль оси *y*

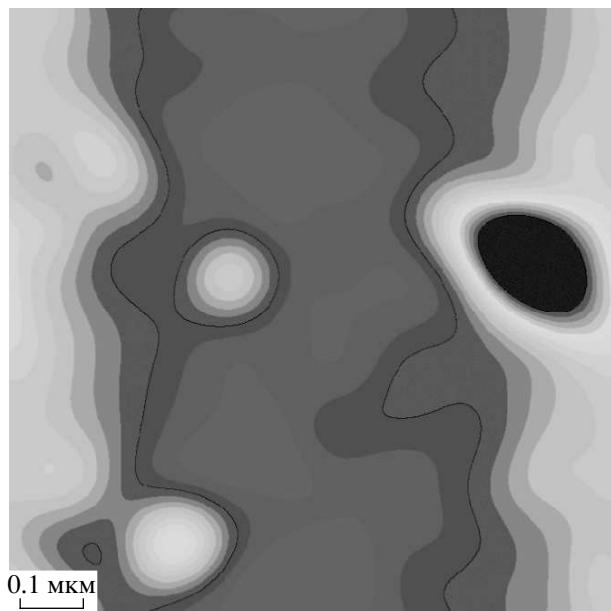


Рис. 7. Примеры конусообразных нанокластеров, выявленных АСМ-методом. Хорошо видны террасы равного потенциального рельефа

ного вейвлет-преобразования, они имеют вид гладких изогнутых дуг, сходящихся под углом примерно 120° , на «вершине» которых образуются соосные светлые и черные круговые образования (см. рис. 6). Отметим, что в других случаях, а именно, для высот конусов и граней пирамид, зависимость соответствует рис. 6б, в и реже рис. 6а, т. е. боковые поверхности пирамид — плоскости, как и в обычных кристаллах, тогда как борта рафт-кластеров и хат-кластеров чаще ограничены вогнутыми поверхностями. В них острое кантилевера не фиксирует изменения толщины, т. е. формирование АСМ-изображений внутри этих кластеров происходит из-за изменения ориентации молекул в плоскостях xz и xy . На рис. 7 представлена квадратная карта $W(a, b, y)$ одного из фрагментов рис. 3б (верхняя вставка). На приведенном рисунке хорошо видны конусы, ограниченные террасами, и дефекты, соответствующие, по-видимому, ядрам дисклинаций (темные кольца).

Отметим, что все описанное выше точно соответствует предсказанию возможности образования структур типа нанокластеров, аналогичных твердым кристаллам в сверхтонких жидкокристаллических пленках [1], но в данном случае происходит реализация двух ситуаций. При больших размерах пирамид и конусов с основанием около 60 нм можно попытаться описать форму «огранки» с помощью континуально-

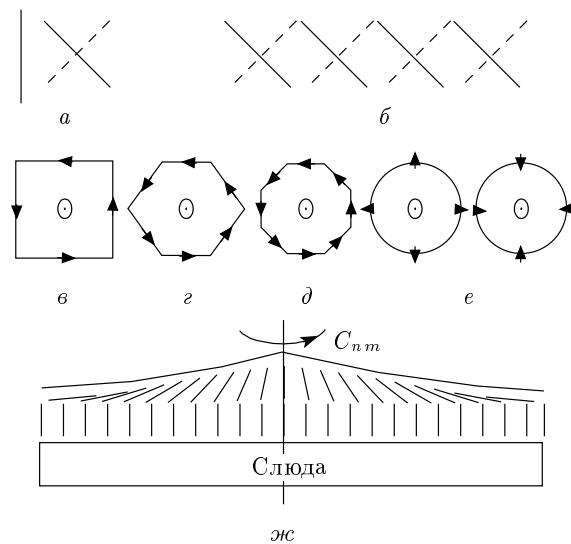


Рис. 8. Ориентация молекул в молекулярных нанокластерах НЖК: *а* — индивидуальные молекулы и ортогональные пары (штриховая линия соответствует молекуле, расположенной сзади); *б* — стенки из ортогональных пар; *в-д* — основные виды нанокластеров в виде пирамид с симметриями C_{4m} , C_{6m} , C_{8m} ; *е* — конусы (треугольники обозначены проекциями молекул на плоскость xy , кружок с точкой — направление директора); *жс* — срез в плоскости xz реально наблюдаемых топологических дефектов *б-е*, в которых грани описываются функцией $|x|^{-1/3}$

го приближения. Для этого будем считать, что она определяется, как и в кристаллах, только поверхностным напряжением α . Если пренебречь силами Ван-дер-Ваальса со стороны подложки, то условие равновесия будет определяться классическим уравнением Херинга [19], решение которого приведено в [1]: грань будет плоской, что реально реализуется в нанослоях толщиной более 10 нм. В тонких слоях существенны силы Ван-дер-Ваальса и наблюдается другая классическая зависимость толщины пленки от координаты x , которая в общем случае была получена в работе [20], а также рассмотрена в монографии [21] для описания высоты мениска в жидком гелии и имеет вид $h \propto |x|^{-1/3}$ (рис. 8).

4. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ ИССЛЕДОВАНИЙ ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ДЕФЕКТОВ В НАНОСЛОЯХ НЖК

Таким образом, в гомеотропно-ориентированных нанослоях методами АСМ и вейвлет-анализа удалось установить, что образуются по крайней мере

четыре типа нанокластеров, а на поверхности подложки формируется монослой смектического ЖКК.

Рассмотрим каждую ситуацию в отдельности.

4.1. Хат-кластеры, пирамидальные и конусоидальные кластеры

Здесь наиболее важной является природа возникновения их огранки. Для описания механизма образования хат-кластеров и топологических дефектов с симметрией типа C_{2m} в нанослоях НЖК может быть взята устойчивая конфигурация двух молекул в стационарном ортогональном положении, которая обсуждалась в работе [22]. Тогда достаточно просто составить «ядро нанокластеров» с топологическим дефектом в центре [23]. Стабильную ортогональную ориентацию молекул, видимо, может поддерживать электрическое поле поверхностной поляризации [24]. Возможные разновидности кластеров, сконструированные на основе этой модели и соответствующие реально наблюдаемым, приведены на рис. 8.

4.2. Солитоны в плоских нанослоях НЖК, нанопулах и рафт-кластерах

Рассмотрим полную энергию НЖК, которая в отсутствие внешних полей складывается из объемной упругой энергии $F(\mathbf{n})$ [11] и поверхностной энергии F_s в форме потенциала Рапини [12]:

$$E = F(\mathbf{n}) + F_s,$$

$$F(\mathbf{n}) = \int_V \left[\frac{1}{2} k_1 (\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + \frac{1}{2} k_2 [\mathbf{n} \times \text{rot } \mathbf{n}]^2 + \frac{1}{2} k_3 (\mathbf{n} \cdot \text{rot } \mathbf{n})^2 \right] dV, \quad (1)$$

$$F_s = \int_S \frac{1}{2} W(\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\nu})^2 dS,$$

где k_i — константы упругости, характеризующие различные типы деформаций поля директора \mathbf{n} , W определяется энергией взаимодействия молекул ЖК с внешней средой; $\boldsymbol{\nu}$ — нормаль к поверхности НЖК.

Для описания топологических дефектов в НЖК введем компоненты директора в виде

$$n_x = \sin u \sin \vartheta, \quad n_y = \cos u \sin \vartheta, \quad n_z = \cos \vartheta,$$

причем $\mathbf{n}^2 = 1$. Здесь u — угол ориентации проекции директора относительно оси x , а ϑ — угол

между директором и осью z . В случае плоского слоя НЖК толщиной d в цилиндрической системе координат (ρ, φ, z) , где ось z направлена перпендикулярно поверхности, а нижняя граница совпадает с плоскостью $z = 0$, рассмотрим симметричное по углу φ распределение директора. При этом $U = U(\rho, z)$, $V = \varphi + C$, U и V — функции углов ориентации, а C — произвольная постоянная. Из уравнения равновесия в одноконстантном приближении ($k_1 = k_2 = k_3 = k$)

$$\mathbf{n} \cdot \nabla^2 \mathbf{n} = 0$$

получим

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial U}{\partial \rho} \right) + \frac{\partial^2 U}{\partial z^2} - \frac{1}{\rho^2} \sin U \cos U = 0, \quad (2)$$

$$0 \leq \rho < \infty, \quad 0 \leq z \leq d.$$

Нелинейное уравнение (2) не может быть решено аналитически в общем виде, однако, как показывает анализ группы точечных преобразований [25, 26], допускаемых уравнением (2), существует единственное нетривиальное автомодельное решение $f(x) = 2U$, где $x = \text{arsh}(z/\rho)$, а функция $f(x)$ удовлетворяет уравнению

$$\frac{d^2 f}{dx^2} - \sin f = 0, \quad x \geq 0. \quad (3)$$

Автомодельные решения уравнения (3), соответствующие жестким тангенциальным условиям на нижней границе ($U|_{z=0} = \pi/2$), имеют вид

$$U_s = 2 \arctg \left[\eta \frac{z}{\rho} + \sqrt{\left(\frac{z}{\rho} \right)^2 + 1} \right], \quad U_a = -U_s \quad (4)$$

и представляют собой статические солитон U_s и антисолитон U_a уравнения синус-Гордон (3). Ориентация директора в слое будет следующей: точечная дисклинация (бужум) на нижней границе и несингулярный дефект с нетривиальным топологическим зарядом ($q = 1$) на верхней. Параметр $\eta = -\sqrt{k/4Wd}$ определяется из условия минимума полной энергии (1). Учитывая, что возмущение поля директора локализовано в области $|\eta|d/\rho_0 \approx 1/2$, для размера солитона имеем оценку

$$\rho_0 = \sqrt{kd/W}. \quad (5)$$

Подобные дефекты встречаются в двух случаях: внутри рафт-кластеров, если они залиты НЖК, и в нанопулах. АСМ-изображения представляют собой круг (например, внутри гексагонального

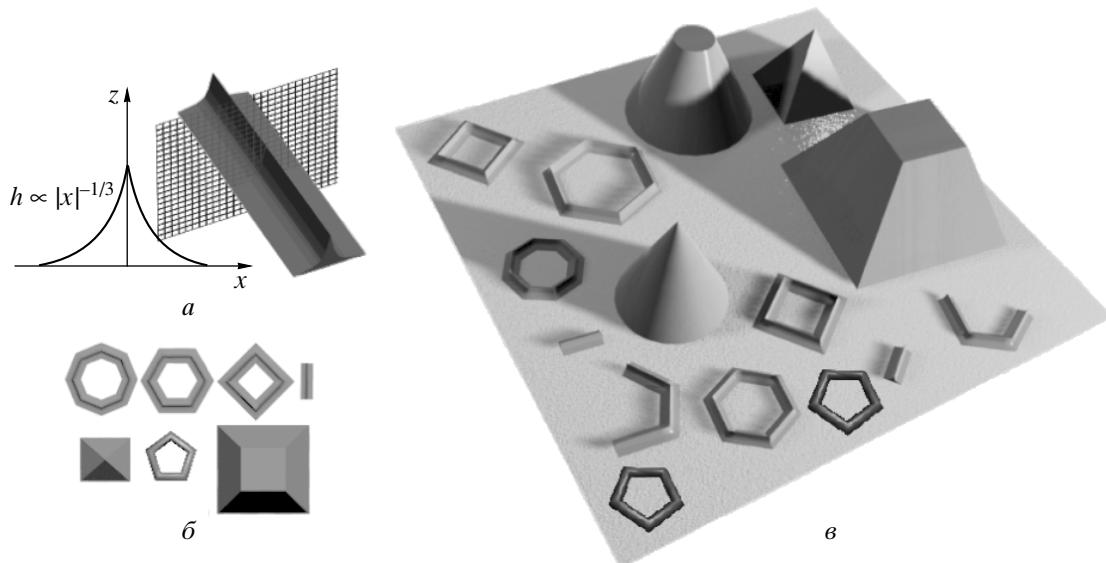


Рис. 9. Примеры нанокластеров, наблюдаемых в нанослоях НЖК: *а* — хат-кластер и его разрез; *б* — двумерные изображения рафт-, хат- и конусообразных кластеров и нанопирамид; *в* — реальная ориентация различных кластеров на подложке

рафт-кластера) и точку в центре круга. Круг соответствует ядру дисклинации на дне рафт-кластера, а точка в центре круга — несингулярному дефекту или топологическому солитону. Используя рис. 4 и принимая $k \approx 6 \cdot 10^{-10}$ Н/м, $d \approx 10$ нм, $W \approx 0.1$ Дж, имеем $\rho_0 \approx 8$ нм, что близко к реальной ситуации (см. рис. 6б).

4.3. Решетки солитонов в нанопулах

Рассмотрим возможность образования решетки линейных солитонов в плоском слое НЖК толщиной d . Пусть ось z декартовой системы координат направлена перпендикулярно поверхности, нижняя граница ЖК совпадает с плоскостью $z = 0$. Найдем однородное вдоль оси y распределение директора в слое: $U = U(x, z)$. Будем полагать, что на нижней границе задана жесткая гомеотропная ориентация ($U|_{z=0} = 0$), а ориентация на верхней границе определяется минимумом полной энергии (1). Тогда из уравнения равновесия в объеме и условия минимума энергии (1) для функции $f = 2U(x, z)$ имеем уравнение

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial z^2} = 0, \quad -\infty < x < \infty, \quad 0 \leq z \leq d \quad (6)$$

и граничные условия

$$k \frac{\partial f}{\partial z} - W f = 0, \quad z = d,$$

$f = 0$ при $z = 0$. Данная задача допускает решение вида $f = \sin(qx) \operatorname{sh}(qz)$. Используя граничное условие для определения параметра q , получаем уравнение

$$\frac{k}{W} q = \operatorname{th}(qd). \quad (7)$$

Легко показать, что уравнение (7) имеет решение $q \neq 0$ лишь при $d > d_c = k/W$, т. е. существует критическая толщина слоя НЖК $d_c = k/W$, такая, что при $d < d_c$ и $U = 0$ распределение директора представляет собой периодическую (с периодом π/q по оси x) систему линейных локализованных возмущений на верхней границе ЖК. Оценим d_c для топологического дефекта в пулах: при $k \approx 6 \cdot 10^{-10}$ Н/м, $W \approx 0.1$ Дж, имеем $d_c \approx 2.5$ нм.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Подведем итоги нашего исследования нанослоев НЖК. Во-первых, методом АСМ в сочетании с вейвлет-преобразованием убедительно продемонстрировано, что при формировании нанослоев реализуется ситуация, в которой первым монослоем является двухмерный смектический ЖК, далее идет переходная область, где реализуется фазовый переход смектик–нематик, а выше формируется НЖК (см. рис. 2). Все это меняет установленные традиционные представления о взаимодействии НЖК с

подложкой, а также требует уточнений при определении поверхностной энергии и теплового равновесия системы. Совершенно неожиданным является формирование нанокластеров (рис. 9) в тонких слоях НЖК в виде правильных геометрических фигур, описываемых группами симметрии C_{nm} ($n = 2, 4, 5, 6, 7, \dots, \infty$). В дальнейшем представляется интересным установить условия для образования регулярных (на основе кластеров с симметрией C_{2m} , C_{4m} , C_{6m}) и полурегулярных (на основе кластеров с симметрией C_{5m} , C_{7m} , C_{8m}, \dots) узоров.

Полученные в этой работе результаты необходимо воспринимать гораздо шире, чем описание эффектов самоорганизации НЖК. Существует еще одна возможность, на которую указали Ландау и Лифшиц [1], — это образование жидких кристаллов из изотропной жидкости в нанослоях, в которых возможна реализация описанных выше эффектов и образование нанокластеров.

Авторы признательны А. П. Крехову за помощь в решении задач по топологическим дефектам, сотруднику ЗАО «Нанотехнология МДТ» г. Зеленограда А. А. Тихомирову за помощь при проведении исследований и получение качественных ACM-изображений нанослоев НЖК, Р. З. Бахтизину и З. Х. Куватову за предварительные дискуссии при интерпретации ACM-изображений.

ЛИТЕРАТУРА

1. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Статистическая физика*, ч. 1, Наука, Москва, сс. 477–478, 542 (1964).
2. J. Nehring and A. Saupe, J. Chem. Soc. Farad. Trans. II **68**, 1 (1972).
3. C. Williams, P. Pieranski, and P. E. Cladis, Phys. Rev. Lett. **29**, 30 (1972).
4. G. Zhu, Phys. Rev. Lett. **49**, 1332 (1982).
5. L. Lin., C.-Q. Shu, J.-L. Shen et al., Phys. Rev. Lett. **49**, 1335 (1982).
6. S. Zheng, Z. C. Liand, R. F. Shao et al., Phys. Rev. A **38**, 5941 (1988).
7. В. Г. Каменский, ЖЭТФ **87**, 1262 (1984).
8. В. Г. Каменский, С. С. Рожков, ЖЭТФ **89**, 106 (1985).
9. Ф. Х. Абдуллаев, А. А. Абдумаликов, ДАН СССР **298**, 841 (1988).
10. F. K. Abdulaev, A. A. Abdumalikov, and E. N. Tsoi, Phys. Stat. Sol. (b) **146**, 457 (1988).
11. П. де Жен, *Физика жидких кристаллов*, Мир, Москва (1977).
12. A. Rapini and M. J. Papoula, J. de Phys. Colloq. **30**, 4 (1969).
13. W. Azzam, *Dissertation zur Erlangung des Grades eines Doktors der Naturwissenschaften*, Bochum, Ruhr-Universität (2003), p. 164.
14. Руководство пользователя Solver P47, ЗАО НТ-МДТ, Зеленоград (2005).
15. Н. М. Астафьева, УФН **166**, 1145 (1996).
16. J. Frohlich and K. Schneider, J. Comp. Phys. **130**, 174 (1997).
17. К. Блаттер, *Вейвлет-анализ. Основы теории*, Техносфера, Москва (2004).
18. К. Оура, В. Г. Лифшиц, А. А. Саранин, А. В. Зотов, М. Катаяма, *Введение в физику поверхности*, Наука, Москва (2006).
19. Современная кристаллография, т. 3, под. ред. Б. К. Вайнштейна, А. А. Чернова, Л. А. Шувалова, Наука, Москва (1980), с. 36.
20. И. Е. Дзялошинский, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, ЖЭТФ **37**, 229 (1959).
21. Ю. С. Бараш, *Силы Ван-дер-Ваальса*, Наука, Москва (1988), с. 255.
22. R. B. Meyer, Mol. Cryst. Liq. Cryst. **16**, 355 (1972).
23. R. Zwanzig, J. Chem. Phys. **39**, 1714 (1963).
24. G. Barbero, A. N. Chuvyrov, and A. P. Krekhov, Int. J. Mod. Phys. B **6**, 437 (1991).
25. Н. Х. Ибрагимов, *Группы преобразований в математической физике*, Наука, Москва (1983), с. 96.
26. М. Абловиц, Х. Сигур, *Солитоны и метод обратной задачи*, Мир, Москва (1987).