

**НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ ФІЗИКИ**

На правах рукопису

ТЕРЕНТЬЄВА ЮЛІЯ ГЕОРГІЇВНА

**СПОНТАННІ ТА ІНДУКОВАНІ ПОРУШЕННЯ
ОДНОРІДНОСТІ В РІДКИХ КРИСТАЛАХ**

01.04.15- фізика молекулярних і рідких кристалів

АВТОРЕФЕРАТ

дисертації на здобуття наукового ступеня кандидата
фізико-математичних наук

Київ - 1997



Робота виконана в Інституті ядерних досліджень
Національної Академії наук України

Науковий керівник: доктор фізико-математичних наук
Сергій Владиславович ШИЯНОВСЬКИЙ

Офіційні опоненти: доктор фізико-математичних наук,
професор
Олександр Васильович ЧАЛИЙ

доктор фізико-математичних наук
Богдан Іванович ЛЕВ

Провідна організація: Національний університет ім.Т.Г.Шевченка

Захист відбудеться 22.05 1997 р. о 14 год. 30 хв.
на засіданні спеціалізованої Вченої ради К.01.96.02
при Інституті фізики НАН України
(адреса Київ - 22, Проспект науки 46)

З дисертацією можна ознайомитися в науковій бібліотеці
Інституту ядерних досліджень НАН України.

Автореферат розіслано 22 квітня 1997 року

Вчений секретар
спеціалізованої вченої ради

О.В.Пржонська

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми

Фізика рідких кристалів (РК) є одним із найбільш популярних напрямків наукових досліджень. Завдяки сполученню унікальних макроскопічних та мікроскопічних властивостей РК використовуються в багатьох областях техніки, медицини, для запису та обробки інформації. Зокрема, використання немато-холестеричних сумішей (НХС) дозволяє міняти макроскопічні властивості РК-зразків при відносно малих зовнішніх впливах, що дає можливість використання НХС для неразрушаючих методів контролю, в медичній діагностиці. Науковий інтерес до НХС зумовлений також тим, що про явний вигляд мікроскопічної взаємодії, якою спричиняється все багатство РК-структур, відомо недостатньо, а інформація про неї може бути одержана із аналізу взаємодії НХС із зовнішніми полями, а також із аналізу фазової поведінки таких систем. На сьогоднішній день накопичено багато експериментальних даних, але теоретичне описання міжмолекулярної взаємодії розвинуто недостатньо. Таким чином, актуальність досліджень, проведених в роботі, містить в собі як чисто науковий, так і прикладний аспект.

Метою роботи є теоретичне вивчення впливу орієнтаційної міжмолекулярної взаємодії на спонтанну дерацемізацію статистичного НРК та порушення концентраційної однорідності немато-холестеричної суміші під впливом зовнішніх полів.

Наукова новизна роботи полягає в тому, що вперше:

- на основі теорії самоузгодженого поля з урахуванням орієнтаційної взаємодії розвинута мікроскопічна теорія для статистичного нематика. Показано, що кореляція між дерацемізацією та орієнтаційним параметром порядку призводить до появи нових фазових діаграм;

- показано, що фазовий перехід НРК-ХРК може бути фазовим переходом як першого, так і другого роду, а тип переходу залежить від потенціалів взаємодії між енантіомерами;

- на основі моделі Майєра-Заупе розвинута мікроскопічна теорія для НХС, в якій роль нематичної компоненти відіграє статистичний НРК. Передбачено існування двох холестеричних фаз і фазового переходу першого роду між ними, що супроводжується

просторовим розшаруванням з утворенням класичної двофазної області;

- побудована теорія НХС в зовнішніх (електричних і магнітних) полях, яка враховує можливість порушення концентраційної однорідності. Показано, що залежності локальних значень закручуючої здатності та діелектричної (діамагнітної) анізотропії від концентрації холестеричної компоненти приводить до виникнення концентраційної хвилі в зовнішньому полі та, як результат, до зміни типу критичної поведінки кроку спіралі з логарифмічної на обернену степеневу і зсуву критичного поля.

Практична цінність роботи

Результати роботи можуть бути використані для подальшого вивчення процесів перемикання твіст і супертвіст комірок і покращення їх характеристик, а також для знаходження нових фаз в термотропних та ліотропних РК.

Положення, що виносяться на захист

1. В статистичних нематичних рідких кристалах, що являють собою статистично-рівноважну суміш енантіомерів, спонтанне порушення концентраційної рівноваги між енантіомерами (дерацемізація) може бути фазовим переходом першого роду внаслідок кореляції між дерацемізацією та орієнтаційним упорядкуванням.
2. Побудована теорія немато-холестеричної суміші, в якій нематичною компонентою є статистичний нематик, передбачає можливість існування двох холестеричних фаз і фазового переходу першого роду між ними.
3. Розвинута теорія немато-холестеричної суміші в зовнішньому електричному або магнітному полі передбачає виникнення в системі просторової концентраційної хвилі, внаслідок чого критична поведінка кроку холестеричної спіралі трансформується від логарифмічної на обернену степеневу.

Внесок автора

* Автор брав участь в постановці задач, розглянутих в дисертації; разом із науковим керівником розробив теорію немато-холестеричної суміші, в якій нематичною компонентою є статистичний нематик, і теорію немато-холестеричної суміші в

зовнішньому електричному або магнітному полі. Автором виконані всі аналітичні викладки для розрахунку вільної енергії немато-холестеричної суміші, знайдено точний аналітичний розв'язок для польової залежності кроку холестеричної спіралі при наявності концентраційної неоднорідності системи, написані тексти програм та виконані всі чисельні розрахунки. Аналіз результатів проводився разом з науковим керівником.

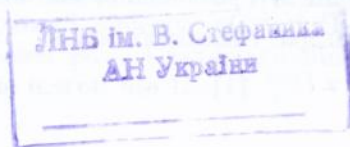
Достовірність результатів зумовлена високою точністю розрахунків. Граничні випадки, одержані в рамках використаної моделі, співпадають з результатами інших авторів.

Апробація роботи.

Основні результати дисертаційної роботи були представлені на 14-(Піза,1992) Міжнародній конференції з рідких кристалів, Літній Європейській конференції з рідких кристалів (Вільнюс, 1991), 18-ій Міжнародній конференції з статистичної фізики (Берлін, 1992), Міжнародному симпозіумі Україна-Франція (Львів, 1993), Київському семінарі з рідких кристалів, а також на наукових семінарах в Інституті фізики НАН України, Київському університеті імені Тараса Шевченка, Лабораторії конденсованого середовища при Університеті імені Софії Антіполіс (Ніцца, 1996) та інших установах.

Публікації. По темі дисертаційної роботи опубліковано 8 друкованих робіт.

Об'єм роботи. Дисертація викладена на 121 сторінці друкованого тексту і містить 23 малюнки. Бібліографія містить 40 найменувань.



ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

Дисертація складається з вступу, чотирьох розділів, заключення, трьох додатків і списку цитованої літератури.

У вступі висвітлено актуальність теми, сформульовано мету дисертаційної роботи, визначені її основні наукові результати, положення, що виносяться на захист.

Перший розділ присвячений огляду теоретичних та експериментальних досліджень, що були виконані на немато-холестеричних сумішах. Обговорюються сучасні уявлення про природу спонтанної дерацемізації. Проведено аналіз експериментальних робіт, присвячених впливу зовнішніх полів на немато-холестеричну суміш, зокрема, робіт по дослідженню критичної поведінки НХС. Крім того, у першому розділі розглянуто деякі теоретичні моделі (модель самоузгодженого поля, модель де Жена розкручування холестеричної спіралі зовнішнім полем), які були взяті за основу при виконанні дисертаційної роботи.

В другому розділі викладена мікроскопічна теорія немато-холестеричних сумішей (НХС).

Система, що вивчається в даному розділі, являє собою рідкий кристал, молекули якого мають два енергетично еквівалентні конформаційні стани (котрі будемо позначати згідно до їх оптичної активності знаками + і -), розділені невеликим енергетичним бар'єром, так що в кожний момент часу система знаходиться в динамічній рівновазі щодо концентрацій C_+ та C_- [3].

Для описання спонтанної дерацемізації скористаємося моделлю Майєра-Заупе, яку розвинемо на випадок багатокомпонентної суміші. В цій моделі самоузгоджені потенціали W_α для енантіомерів (α - знаки +, -) мають вигляд

$$W_\alpha(\theta_\alpha) = -\sum_{\alpha} C_\beta [U_{\alpha\beta}^{(0)} + U_{\alpha\beta}^{(2)} S_\beta P_2(\cos\theta_\alpha)] \quad , \quad (1)$$

де θ_α - кут між довгою віссю молекули α -го енантіомера та директором, S_β і C_β - параметр орієнтаційного порядку та концентрація β - го енантіомера (β - знаки +, -), $U_{\alpha\beta}^{(i)}$ - коефіцієнти розвинення міжмолекулярної взаємодії по поліномах Лежандра. Вважаємо, що $U_{++}^{(i)} = U_{--}^{(i)}$, $U_{+-}^{(i)} = U_{-+}^{(i)}$, $U_{++}^{(i)} \neq U_{+-}^{(i)}$ [1]. В цій моделі вільна енергія на одну молекулу

$$F = -\frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} C_{\alpha} C_{\beta} (U_{\alpha\beta} + U_{\alpha\beta} S_{\alpha} S_{\beta}) + T \sum_{\alpha} C_{\alpha} \left[\ln C_{\alpha} + \int \rho_{\alpha}(\theta_{\alpha}) \ln \rho(\theta_{\alpha}) d(\cos \theta_{\alpha}) \right] \quad (2)$$

Енергетично вигідним станам системи відповідають мінімуми вільної енергії F по орієнтаційним функціям розподілу $\rho_{\alpha}(\theta_{\alpha})$ та відносній дерацемізації $y = C_{+} - C_{-}$. Мінімізація F по $\rho_{\alpha}(\theta_{\alpha})$ дає $\rho_{\alpha}(\theta_{\alpha}) \sim \exp(w_{\alpha} \cos \theta_{\alpha})$ та рівняння самоузгодження

$$S_{\alpha} = Z_{\alpha}^{-1} \int_0^1 P_2(x) \exp(w_{\alpha} x^2) dx, \quad \text{де}$$

$$Z_{\alpha} = \int_0^1 \exp(w_{\alpha} x^2) dx, \quad w_{\alpha} = 3 \sum_{\beta} S_{\beta} C_{\beta} U_{\alpha\beta}^{(2)} / 2T. \quad (3)$$

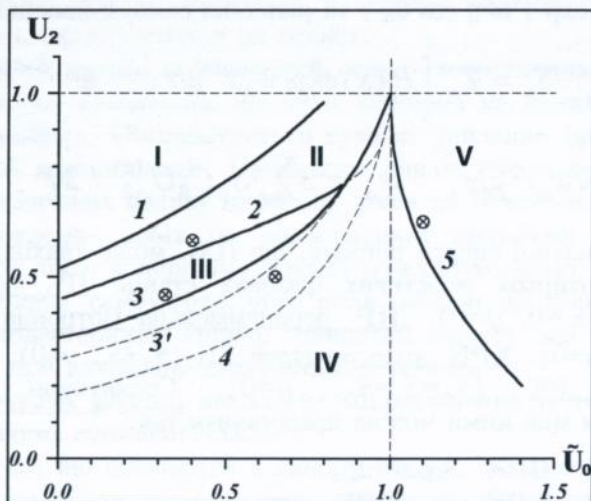
Аналіз вільної енергії показує, що НХС може знаходитися в одному з чотирьох можливих фазових станів: ІР- ізотропна рідина ($S_{+}=S_{-}=0, y=0$), ДІР- дерацемізована ізотропна рідина ($S_{+}=S_{-}=0, y \neq 0$), ХРК- холестеричний РК ($S_{+} \neq S_{-}, y \neq 0$), НРК- нематичний РК ($S_{+}=S_{-}=S_N, y=0$). Схематично фазові перетворення між ними можна представити так:

ІР - НРК - кристал,
ІР - НРК - 2 - ХРК - кристал,
ІР - НРК - 1 - ХРК - кристал,
ІР - 1 - ХРК - кристал,
ІР - 2- ДІР - 1 - ХРК - кристал,

де цифрами позначено тип фазового переходу. Залежність фазових діаграм від параметрів $U_2 = U_{+-}^{(2)} / U_{++}^{(2)}$ та $\tilde{U}_0 = (U_{++}^{(0)} - U_{+-}^{(0)}) / 2T$ наведено на рис. 1.

В межах використаної моделі при $U_2 < 1$ холестерична фаза має при низьких температурах реалізовуватись завжди. Але, якщо температура фазового переходу НРК-ХРК (T_{NC}) лежить значно нижче від температури фазового переходу ІР-НРК (T_{IN}), то холестерична фаза не встигає утворитися, оскільки кристалізація відбувається раніше дерацемізації і крива 1 обмежує область I, в якій холестерична фаза відсутня ($T_{NC} < T_{\text{кристалізації}}$). Крива 2 являється лінією трикритичних точок з характерною температурною залежністю [1]. Крива 3 обмежує області II та III, для яких існує стабільна нематична фаза, і являється лінією

потрійних точок ($f_I(T_{IN}) = f_N(T_{IN}) = f_C(T_{IN})$). Крива 4 обмежує частину області IV, в якій нематик може існувати в метастабільному стані. Крива 5 являється границею виникнення дерацемізованої ізотропної фази, одночасно являючись трійною лінією ($f_{is}^I(T_{ID}) = f_{is}^D(T_{ID}) = f_C(T_{ID})$). Вона пересікає пряму $U_0=1$ тільки при $U_2=1$, оскільки при $U_2 < 1$ та $U_0=1$ температура $T_{IN} < T_{IC}$.



• Рис.1

Залежність фазових діаграм від параметрів U_2 та U_0 :

I - ізотропна рідина (IP)-НРК - кристал, II - IP-НРК-2-ХРК, III - IP-НРК-1-ХРК, IV - IP-1-ХРК, V - IP -2- дерацемізована IP - 1 - ХРК.

Точками вказані величини параметрів U_2 та U_0 , для яких в дисертації наведені конкретні розрахунки.

В третьому розділі викладена мікроскопічна теорія немато-холестеричних сумішей, в яких нематичною компонентою являється статистичний нематик, та холестеричної домішки. Для побудови теорії використовувалась, як і в попередньому розділі, модель Майєра-Заупе для багатокомпонентної суміші. Наявність холестеричної домішки, яка має фіксований знак оптичної активності, приводить до порушення симетрії відносно знаку дерацемізації і, як результат, до неможливості утворення рацемічних фаз. Натомість виникають слабо дерацемізовані ізотропна та холестерична фази. Якщо аналізувати, до яких якісних змін у фазовій діаграмі, наведеній на рис.1 приведе внесення до статис-

тичного нематика холестеричної домішки, приходимо до слідуючих висновків. В області II відбувається фазовий перехід першого роду ізотропна рідина - слабо дерацемізований ХРК, а подальше зниження температури приводить до плавного і швидкого зростання параметру дерацемізації і виникнення сильно дерацемізованого ХРК. Таку фазову поведінку системи можна інтерпретувати, як "слід", що лишився від фазового переходу другого роду після внесення в систему холестеричної домішки. В області III буде відбуватися фазовий перехід першого роду між двома холестеричними фазами - слабо та сильно дерацемізованою, а в області IV - фазовий перехід першого роду між слабо дерацемізованою ізотропною та сильно дерацемізованою холестеричною фазами. Таким чином, в такій системі, по-перше, зникає фазовий перехід другого роду між нематичною та холестеричною фазами, по-друге, можливе утворення двох різних холестеричних фаз, фазовий перехід між якими є переходом першого роду. Такий перехід має супроводжуватись просторовим розшаруванням системи на дві області з різними значеннями концентрації холестеричної домішки. На рис.2 зображена "сигара", яка описує концентраційне розшарування НХС поблизу фазового переходу ХРК1-ХРК2.

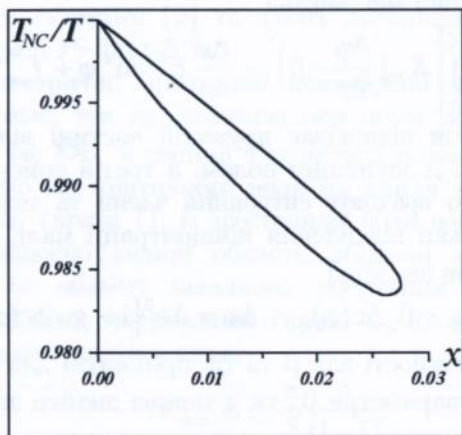


Рис.2

Концентраційне розшарування НХС в області фазового переходу ХРК1-ХРК2

В четвертому розділі побудована мікроскопічна теорія НХС в зовнішньому електричному або магнітному полі. Теорія враховує можливість порушення концентраційної однорідності в системі.

Порушення концентраційної однорідності в НХС можливе з наступних причин [2а]. Із зростанням зовнішнього поля області, де молекули зорієнтовані за полем, збільшуються, а швидкість обертання директора ($\partial\varphi/\partial z$) стає просторово неоднорідною, тому збагачення областей із високою швидкістю обертання директора молекулами хіральної компоненти зменшує загальну вільну енергію системи. Крім того, оскільки діелектричні анізотропії компонент НХС можуть різнитися не тільки за абсолютною величиною, але й за знаком, виникнення просторової концентраційної хвилі в зразку може привести до відчутного відхилення локальної діелектричної анізотропії від середнього значення $\Delta\epsilon$ ($\Delta\epsilon = \epsilon_{||} - \epsilon_{\perp}$), що, в свою чергу, повністю вносить корективи у взаємодію суміші з полем. Нехай $c = c_0 + \Delta c(z)$, де c_0 - середня концентрація холестеричної компоненти, $\Delta c(z)$ - мале відхилення від середнього, що задовольняє умову

$$\int_0^p \Delta c(z) dz = 0 \quad (4)$$

Вираз для усередненої густини вільної енергії немато-холестеричної суміші має вигляд

$$\bar{f} = \frac{1}{2p} \int_0^p \left[K_{22} \left(\frac{\partial\varphi}{\partial z} - \beta \right)^2 - \frac{\Delta\epsilon}{4\pi} E^2 \sin^2 \varphi + f_{mic} \right] dz, \quad (5)$$

де перший доданок відповідає пружній частині вільної енергії, другий - взаємодії із зовнішнім полем, а третій описує ту частину вільної енергії, що враховує ентропійні члени та міжмолекулярну взаємодію. Оскільки відхилення концентрації малі, обмежимося лінійними членами за $\Delta c(z)$

$$\beta = \beta_0 + \beta_c \Delta c(z), \quad \Delta\epsilon = \Delta\epsilon^0 [1 - g \cdot \Delta c(z)] \quad (6)$$

Якщо лінійні залежності для β та $\Delta\epsilon$ прийнятні для всіх значень концентрації, то параметри β_c та g можна знайти за формулами

$$\beta_c \equiv \frac{\beta_0}{c_0}, \quad g \equiv \frac{\Delta\epsilon^N - \Delta\epsilon^{Ch}}{\Delta\epsilon^0} \text{ де } \Delta\epsilon^N, \Delta\epsilon^{Ch} - \text{діелектричні анізотропії}$$

нематичної та холестеричної компонент відповідно, а $\Delta\epsilon^0$ - діелектрична анізотропія однорідної суміші. f_{mic} можна розкласти в ряд по $\Delta c(z)$ (явний вигляд коефіцієнтів розкладу $f_{mic}^{(i)}$ можна одержати, наприклад, в рамках теорії Майєра-Заупе, як це було

зроблено в розділі 2 та 3), коефіцієнт $f^{(2)}_{mic}$ має бути додатним, щоб забезпечити мінімум вільної енергії при однорідній концентрації у відсутності поля. З огляду на малість величини $\Delta c(z)$ можна обмежитися першими трьома членами розвинення f_{mic} . Вільна енергія системи відрахована від вільної енергії нематичної фази набуває вигляду

$$\Delta \bar{f} = \frac{K_{22}}{2P} \int_0^P \left[b \Delta c(z)^2 + \left(\frac{\partial \Phi}{\partial z} - \beta_0 - \beta_c \cdot \Delta c(z) \right)^2 - \beta_0^2 + \left(h \frac{\pi}{2} \right)^2 \beta_0 \cos^2 \varphi + g \cdot \Delta c(z) \sin^2 \varphi \right] dz, \quad \text{де } h^2 = \frac{E^2}{E_0^2}, \quad E_0^2 = \frac{2\pi^2 \beta_0 K_{22}}{\Delta \epsilon^0}, \quad b = \frac{f_{mic}^{(2)}}{K_{22}} \quad (7)$$

E_0 - це критичне поле для однорідної суміші, вираз для якого був одержаний де Женом [2]. Мінімізація функціоналу (7) дає можливість знайти залежність кроку спіралі від зовнішнього поля $P(h)$. Здатність системи до розшарування характеризується параметром

$$\delta = K_{22} \beta_c^2 / (b + K_{22} \beta_c^2), \quad (8)$$

який для однорідної системи (чистого холестерика) дорівнює нулю.

Для однорідної системи ($b \rightarrow \infty$ і $\Delta c(z) = 0$) наші результати ідентичні з результатами [2] та дають логарифмічну залежність для кроку спіралі $P \sim -\ln(1-h/h_c)$.

Якщо діелектричні анізотропії нематичної та холестеричної компонент близькі, так що різницю між ними можна знехтувати, але в той же час $\delta > 0$, в системі з'являється концентраційна хвиля (рис.3). Далеко від критичного поля ця хвиля має майже синусоїдальну форму (крива 1), із зростанням поля вона деформується, утворюючи відносно великі області, збіднені на холестеричну компоненту, та області швидкого обертання директора, що насичені хіральними молекулами (криві 2, 3, 4). Максимальна амплітуда концентраційної хвилі

$$\Delta c_{\max} = c_0 \frac{\pi}{2} \frac{\delta}{(1-\delta)} \quad (9)$$

лишається відносно малою. В критичній області форма концентраційних піків вже сформована і збільшення напруженості зовнішнього поля приводить лише до їх "розбігання". Залежності $P(h)$ на рис.4 представлені в логарифмічному масштабі таким чином, щоб випадку $\delta = 0.0$ відповідала суцільна пряма лінія. Оскільки поява концентраційної хвилі стає помітною лише при наблизенні до

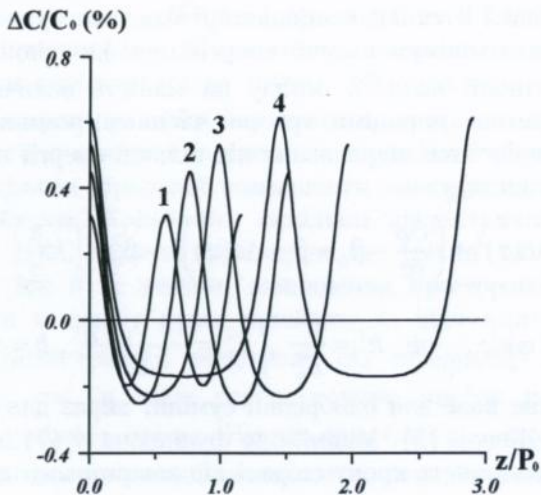


Рис.3

Концентраційна хвиля поблизу критичного поля, $\delta=0,0005$
 1 - $h/h_c=0,8586$, $P/P_0=1,154$; 2 - $h/h_c=0,9795$, $P/P_0=1,581$;
 3 - $h/h_c=0,9973$, $P/P_0=1,9657$; 4 - $h/h_c=0,9998$, $P/P_0=4,48$

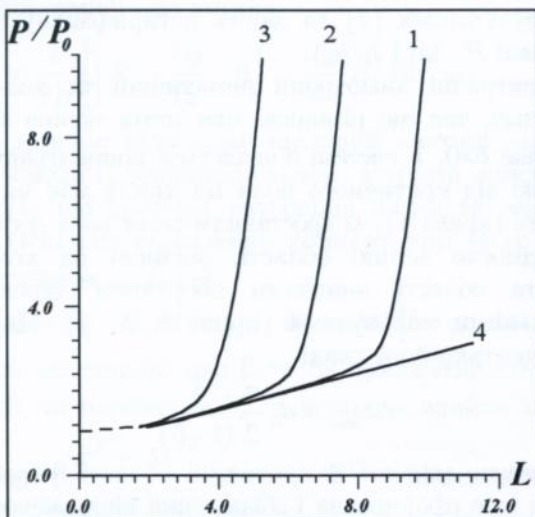


Рис.4

Критична поведінка кроку спіралі P .
 Величина $L=-\ln(1-h/h_c)$, де h_c - критичне поле де Жена;
 криві: 4 ($\delta=0.0$), 1 ($\delta=0.0005$), 2 ($\delta=0.005$), 3 ($\delta=0.05$)

критичного поля, в першу чергу це вносить корективи до величини самого критичного поля $h_c = 1/\sqrt{1-\delta}$. Із аналізу кривих 1 ($\delta=0.0005$), 2 ($\delta=0.005$), 3 ($\delta=0.05$) та 4 ($\delta=0.0$), видно, що вдалині від критичного поля та коли $1-h \gg \delta$, концентраційне розшарування має нехтовно малий вплив. В той же час, видно, що криві 1, 2 та 3 мають іншу, ніж крива 4, асимптотику, коли $h \rightarrow h_c$ (на графіку $L \rightarrow \infty$). Аналіз явного виду залежності $P(h)$, одержаної із мінімізації функціоналу (7), дає, що в критичній області вона стає оберненостепенною.

Таким чином, навіть для дуже малих значень δ відбувається зміна критичної поведінки кроку спіралі.

Різниця між діелектричними анізотропіями компонент вносить свій вклад в розшарування системи - як в величину критичного поля $h_c = \frac{1}{\sqrt{1-\delta}}(1 + \delta \frac{g(g+3)\pi^2}{48(1-\delta)})$, так і в критичну поведінку кроку спіралі.

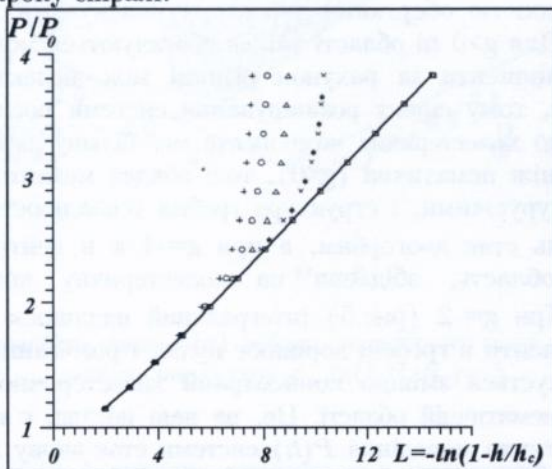


Рис.5

Залежності $P(h)$ в околі критичного поля h_c для $\delta=0,0005$, $g=2.0$ (+), $g=1.0$ (O), $g=0.0$ (Δ), $g=-1.0$ (x), $g=-2.0$ (\square), $g=-3.0$ (*), суцільна лінія відповідає випадку $\delta = 0$

На рис.5 наведені залежності кроку спіралі для різних значень параметра g для $\delta=0,0005$. У випадку рівних діелектричних анізотропій компонент (крива Δ) критична пове-

дінка кроку спіралі оберненостепенева. Збільшення параметра g приводить до розширення критичної області, де проявляється оберненостепенева поведінка кроку спіралі (криві \circ та $+$). При $g < 0$ перехід до оберненостепеневої поведінки має більш складний характер: він може відбуватися при більших значеннях поля (крива \times), при $g = -2$ він взагалі не відбувається (крива \square), при $g < -2$ область оберненостепеневої критичної поведінки знову розширюється (крива $*$). Щоб зрозуміти причину зміни критичної поведінки, розглянемо структуру виникаючої концентраційної хвилі.

Функція $\Delta C(z)/C_0$, яка для різних g наведена на рис.6, при $h \rightarrow 1$ розділяє період структури на дві області: квазінематичну, коли директор співнапрямлений з полем (збіднену на холестеричну компоненту) і гребінь концентраційної хвилі. Із наближенням до критичного поля форма гребеня хвилі майже не змінюється, а квазінематична область розширюється. Коли діелектричні анізотропії компонент однакові концентраційна хвиля збагачує області з високою швидкістю обертання директора молекулами хіральної компоненти. Для $g > 0$ ці області також збагачуються молекулами хіральної компоненти за рахунок різниці між діелектричними анізотропіями, тому ефект розшарування системи посилюється. Навпаки, якщо холестерична компонента має більшу діелектричну анізотропію, ніж нематична ($g < 0$), тоді обидва механізми виявляються конкуруючими, і структура гребня ускладнюється. При $g = -1/\pi$ гребінь стає двогорбим, а при $g = -4/\pi$ в центрі гребня з'являється область, збіднена на холестеричну компоненту ($\Delta C(z) < 0$). При $g = -2$ (рис.5) інтегральний надлишок холестеричної компоненти в гребені дорівнює нулю, і розбігання гребнів не супроводжується зміною концентрації холестеричної компоненти в квазінематичній області. Це, на наш погляд, є причиною того, що критична поведінка $P(h)$ системи стає знову логарифмічною. Але необхідно зазначити, що хоча в цьому випадку обидва механізми компенсують один одного, система залишається неоднорідною (рис.6) і критичне поле більше за одиницю. При $g < -2$ електростатичний механізм стає домінуючим, і хіральні молекули збагачують області, де директор зорієнтований вздовж поля.

Амплітуда концентраційної хвилі та область з обернено-степеневою залежністю визначаються значеннями параметрів δ та g . Тому, експериментальні дослідження було б доцільно про-

водити на термотропних сумішах з холестеричною компонентою, яка б мала високу швидкість обертання директора, та на сумішах, з великою різницею діелектричних анізотропій компонент.

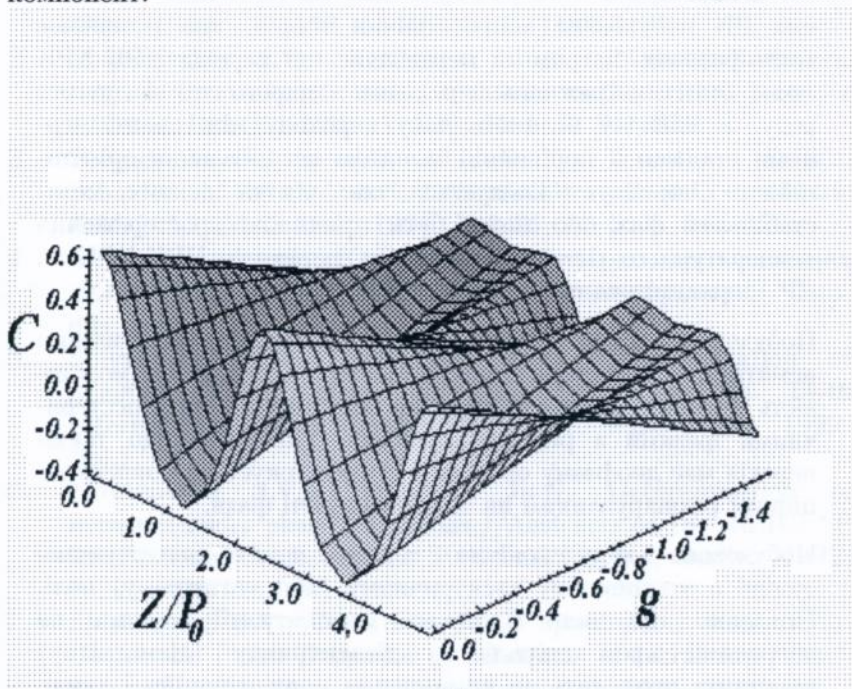


Рис.6

Концентраційна хвиля $c(z)$ поблизу критичного поля для різних значень параметру g , $\ln(1-H/H_c)=-5$

В додатку А вивчено питання про можливість концентраційного розшарування в межах однієї фази. Показано, що таке розшарування неможливе.

В додатку В та **в додатку С** наведені тексти програм, що були написані для розрахунків в розділах 2-4.

В заключенні сформульовані **основні результати та висновки** дисертаційної роботи, які полягають в слідуючому:

1. На основі теорії Майєра-Заупе для статистичних нематичних РК побудована мікроскопічна теорія, яка розширює типи фазових діаграм та передбачає що перехід НРК-ХРК може бути як фазовим переходом першого так і другого роду. У випадку великого часу переходу між енантімерними станами в порівнянні із часом встановлення орієнтаційного порядку збільшується час життя деяких метастабільних фаз, що може бути причиною спостереження температурного гістерезису фазових переходів НРК-ХРК та ДР (дерацемізована рідина)-ХРК.
2. Побудована мікроскопічна теорія взаємодії статистичного нематика з холестеричною домішкою. Предбачена можливість фазового переходу першого роду між двома холестеричними фазами з різними кроками. Показано, що такий перехід має двофазну область і супроводжується концентраційним розшаруванням на дві співіснуючі фази.
3. Побудована мікроскопічна теорія немато-холестеричної суміші в зовнішньому електричному (або магнітному) полі. Показано, що вплив локальної концентрації домішки на обернений крок спіралі та діелектричну (діамагнітну) константу приводить до виникнення концентраційної хвилі. Вираз для критичного поля НХС залежить від здатності системи до розшарування. Хоча концентраційна хвиля має невелику амплітуду, критична поведінка системи змінюється з логарифмічної на обернену степеневу.

Публікації по темі дисертаційної роботи

1. Терентьева Ю.Г., Шияновский С.В. Спонтанная дерацимизация НЖК при фазовых переходах. // Журн. Эксп. Теор. Физ. -1992. -Т. 102. № 4(10). -С. 1189-1196.
2. Shiyonovskii S.V., Terentieva Ju.G. Nematic-cholesteric mixture in a magnetic field: A change in the critical behavior // Phys. Rev. E. -1994. Vol.49. № 1. P. 916-918.
3. Serguey V. Shiyonovskii and Julia G. Terentieva. Critical behaviour of the cholesteric to nematic transition in an electric field.// Liquid Crystals -1996, Vol. 21, № 5. P. 645-650.
4. С.В.Шияновський, Ю.Г.Терентьева. Критична поведінка немато-холестеричної суміші в електричному полі.// Укр. фіз. журн. -1996. Т. 41. № 5-6. с. 545-549.
5. Shiyonovskii S.V., Terentieva Ju.G. Deracemization of nematics under phase transitions.//Abstracts of 14-th International Liquid Crystal Conference. Pisa, Italy. -1992. Vol.1. P.475
6. Shiyonovskii S.V., Terentieva Ju.G. Deracemization of nematics under phase transitions.//Abstracts of 18 - th IUPAP International Conference on Statistical Physics, Berlin. -1992. P.247.
7. Shiyonovskii S.V., Terentieva Ju.G. Spontaneous Nematic-to-Cholesteric Phase Transition // Abstracts of Ukrainian-French Symposium "Condensed Matter: Science & Industry", Lviv. - 1993. P.213.
8. Shiyonovskii S.V., Terentieva Ju.G. Deracemization of nematics under phase transitions. // Abstracts of Summer European Liquid Crystal Conference, Vilnius. -1991.Vol.1. P.183.

Цитована література

1. Gotarelli G., Osipov M.A., Spada G.P. // J. Phys. Chem. 1991. V. 95. P. 3879
2. P.G. de Gennes // Solid State Commun. **6**, 163 (1968)
3. Зельдович Я.Б. // ЖЭТФ. 1974. Т. 67. С. 2357.
4. Durand G., Leger L., Rondeles F., Veissie M. // Phys. Rev. Lett., -1969, - N 22, - p.227.

Terentieva J.G. Spontaneous and induced distortions of homogeneity in liquid crystals.

Thesis for a Physics and Mathematics candidate's degree on the speciality 01.04.15 - Molecular and Liquid Crystals Physics, Institute of Physics, National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, 1997.

The spontaneous and induced distortions of concentration homogeneity in nematic-cholesteric mixtures are studied in this work. The microscopic theory of nematic-cholesteric mixture, where the nematic component is a statistical nematic is built. It is shown that the phase transition of first order nematic-cholesteric and the phase transition of first order between two cholesteric phases are possible. The microscopic theory of nematic-cholesteric mixture in an external electric or magnetic field is built. It is shown that the distortion of the concentration homogeneity changes the cholesteric pitch critical behaviour.

Терентьева Ю.Г. Спонтанные и индуцированные нарушения однородности в жидких кристаллах.

Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.15 - физика молекулярных и жидких кристаллов.

В работе приведены теоретические исследования нарушений концентрационной однородности в немато-холестерической смеси, возникающие либо спонтанно, как результат взаимодействия ориентационного упорядочения и дерацемизации, либо под воздействием внешних электрических или магнитных полей. Построена микроскопическая теория немато-холестерической смеси, в которой нематической компонентой является статистический нематик. Показано, что в такой системе возможен фазовый переход первого рода нематик - холестерк и фазовый переход первого рода между двумя холестерическими фазами. Построена микроскопическая теория немато-холестерической смеси во внешнем электрическом или магнитном поле с учетом пространственного концентрационного расслоения. Показано, что возникновение концентрационной волны приводит к изменению критического поведения шага холестерической спирали.

Ключові слова: рідкий кристал, дерацемізація, немато-холестерична суміш, концентрація, фазовий перехід.

Терентьєва Юлія Георгіївна

**Спонтанні та індуковані порушення однорідності
в рідких кристалах**

Підписано до друку 08 квітня 1997 р. Формат паперу

Папір оцетний 80 гр/м². Офсетний друк.

Ум.-друк. аркушів 1. Об.-вид. аркушів 0,7.

Тираж 100 екз.

Безкоштовно

435098

Р

АВ 37.742

Безкоштовно