

Фазовые переходы в эллипсоидальных каплях нематических жидких кристаллов

А. В. Емельяненко^{1,a}, В. Ю. Рудяк¹, Дж.-Х. Лю²

¹Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, физический факультет, кафедра физики полимеров и кристаллов. Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2.

²Национальный университет имени Чена-Куна. Тайнань 70101, Тайвань.

E-mail: ^aemel@polly.phys.msu.ru

Статья поступила 12.10.2015, подписана в печать 20.11.2015.

Мы предлагаем простой метод расчета поля директора в каплях нематических жидких кристаллов (ЖК) любой формы, учитывающий взаимодействие ЖК с поверхностью капли, а также влияние постоянного электрического поля. В отличие от других подходов, предлагаемый в настоящей работе подход не требует никаких упрощающих предположений относительно структуры поля директора ЖК. Используется континуальная теория упругости, дополненная возможностью рассмотрения точечных и линейных дефектов. Вычисления проводятся методом Монте-Карло на простой прямоугольной решетке. Для учета граничных условий в каплях сложной формы используется специальная процедура триангуляции. Предлагаемый подход может быть использован для изучения свойств полимер-дисперсных жидкокристаллических материалов (ПДЖК). В работе изучены топологические фазовые переходы в нематическом ЖК 4-циано-4'-пентил-бифенил (5CB) в сферический и эллипсоидальных каплях.

Ключевые слова: жидкие кристаллы, моделирование, континуальная теория упругости Франка–Озеена, Монте-Карло, дефекты, капли.

УДК: 544.25.022.5. PACS: 61.30.Dk.

Введение

Для многих практических применений требуется создание гибких пленок или покрытий, обладающих электроуправляемой анизотропией свойств. Часто для этого используются полимер-дисперсные жидкокристаллические (ПДЖК) материалы [1–6]. Обычно ЖК-наполнитель присутствует в пленках в виде микрокапель, окруженных полимерной матрицей. Одной из наиболее важных особенностей ПДЖК являются их электроуправляемые оптические свойства [7, 8]. Так, некоторые изначально непрозрачные ПДЖК становятся прозрачными в электрическом поле. На основе таких материалов можно создавать электроуправляемые шторы, рекламные щиты, дорожные знаки, настраиваемые оптические фильтры и т. д. ПДЖК-материалы не требуют использования поляризаторов, поэтому их можно применять для создания небольших, экономящих энергию, гибких электрооптических устройств — [9, 10]. Оптимизация свойств таких материалов — важная практическая задача.

В некоторых простых геометриях ЖК-параметры порядка и константы упругости могут быть рассчитаны в рамках молекулярной теории [11, 12]. В частности, есть небольшое число публикаций [13], в которых рассмотрен вопрос теоретического предсказания поля директора в ПДЖК. В то же время теоретическое предсказание поля директора в общем случае ограниченных систем произвольной формы является крайне сложной задачей из-за сложных граничных условий.

Для решения таких задач обычно используют методы компьютерного моделирования. Один из

наиболее простых подходов — моделирование методом Монте-Карло (МК) с применением решеточной модели [14]. Вычисления в рамках такого подхода оказываются быстрыми, благодаря простой модели, но сам подход неприменим к сложным ЖК-структурам. Для них были разработаны два других подхода. В работах [15, 16] была предложена модель конечных элементов на основе уравнений Франка–Озеена, использующая векторное представление поля директора. Однако для сложных ЖК-систем в рамках данного подхода требуется итерационное решение задачи, начинающееся с корректной осмысленной стартовой геометрии поля директора. Даже с такими ограничениями метод оказывается пригоден только для решения двумерных задач. Другой подход представляет собой модель Ландау — де Жена [17–19], рассматриваемую также в рамках конечно-элементной схемы и явных алгоритмов релаксации [20, 21]. Этот подход очень хорошо воспроизводит детальную структуру ЖК с дефектами разных типов и в целом оказывается точнее методов, основанных на континуальной теории упругости. Однако главным недостатком такого метода является крайне высокая вычислительная сложность и, как следствие, большие времена вычислений.

В то же время многие задачи, возникающие при исследовании ПДЖК, требуют относительно быстрых расчетов структуры для большого набора внешних условий. Для решения таких задач необходим метод быстрого расчета структуры, использующий минимальный набор входных данных.

В настоящей работе мы предлагаем такой метод, использующий континуальную теорию упруго-

сти [22] и реализованный численно на простой прямоугольной трехмерной сетке. Этот подход в целом похож на подход, рассмотренный в работе [15], но имеет три существенных отличия. Во-первых, мы будем применять метод Монте-Карло с алгоритмом имитации отжига [23] для минимизации свободной энергии системы. Эта процедура не требует предположения какой-либо стартовой конфигурации системы, достаточно быстрая и легко распараллеливается. Во-вторых, мы будем учитывать точечные и линейные дефекты в неявном виде и таким образом получим гораздо более общий подход. В-третьих, мы будем использовать методику триангуляции для представления граничных условий, позволяющую рассматривать ограничивающие поверхности любой формы, в том числе капли, цилиндрические полости, каналы и т. п.

Такой подход позволяет предсказать структуру поля директора в каплях сложной геометрии, когда отсутствие симметрии высокого порядка не позволяет провести аналитические расчеты. В настоящей работе мы рассмотрим эллипсоидальные капли нематического жидкого кристалла, имеющие форму сплющенного эллипсоида, диаметром в несколько микрометров. ПДЖК-материалы, состоящие из таких капель в полимере, могут быть применены в дисплейных технологиях [24–28], для создания дифракционных линз [29] и в других технологиях [30–34]. Сферические капли нематического ЖК были ранее исследованы в работах [35–38], были описаны различные структуры, возникающие в зависимости от типа граничных условий [39], а также фазовые переходы в присутствии электрического поля [17, 40]. В то же время структуры, возникающие в сплюснутых каплях нематического ЖК, гораздо более многообразны, мало изучены и представляют особый интерес с точки зрения применений. Исследования сферических нематических капель показывают возможность существования в них нескольких фаз: радиальной, биполярной, радиальной с круговым дефектом — в зависимости от внешних условий. Однако полная фазовая диаграмма для сплюснутых капель во внешнем электрическом поле оказывается более многообразной. Недавние исследования [40] показали нетривиальное поведение таких систем при отрицательной электрической анизотропии. Данная работа посвящена исследованию поведения сплюс-

нутых капель ЖК с положительной электрической анизотропией в электрическом поле.

В частности, в настоящей работе будет найдено подтверждение тому факту, что линейный дефект может существовать в сплюснутых каплях даже при отсутствии электрического поля, как ранее было предсказано в [41]. В работе также будет предсказан неизвестный ранее фазовый переход, связанный с переориентацией кругового дефекта, возникающий при приложении электрического поля в плоскости, перпендикулярной главной (короткой) оси сплющенного эллипсоида. Будет показано, что при данном переходе оптические свойства ПДЖК-материала могут претерпевать существенные изменения. Этот эффект может быть использован для создания высококонтрастных оптических устройств на основе ПДЖК-материалов, состоящих из сплюснутых эллипсоидальных капель нематика в полимере. Данный эффект не наблюдается в сферических каплях.

1. Метод

1.1. Геометрия системы

В настоящей работе рассматриваются капли нематического ЖК с регулярными гладкими границами. Предлагаемый нами метод вычисления поля директора сочетает технику триангуляции поверхности и разбиение объема простой кубической решеткой. Такой подход позволяет работать с каплями ЖК любой формы, включая каналы и полости внутри конечного объема.

Аппроксимируем истинную границу раздела фаз ЖК и окружающего материала многогранником, состоящим из треугольников (т. е. проведем триангуляцию поверхности [42]). Триангулированная поверхность (Т) любой сложности может быть создана в любом пакете САД или вручную.

Для дискретизации объема ЖК, в котором нужно рассчитать поле директора $\mathbf{n}(\vec{r})$, будем использовать простую кубическую решетку. Для этого непрерывное поле директора в объеме ЖК, ограниченном поверхностью Т, заменяется на набор векторов $\mathbf{n}(\vec{r}_{ijk})$, где i, j, k — индексы решетки, $\vec{r}_{ijk}$ — положение узлов решетки (зеленые точки на рис. 1).

Решетка разбивает внутренний объем ЖК на прямоугольные ячейки, каждая из которых ограничена восемью соседними узлами решетки. Все ячейки можно разделить на три группы: внутрен-

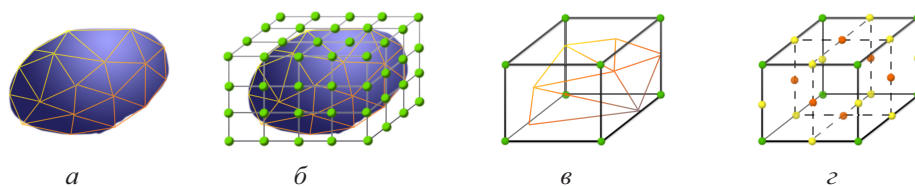


Рис. 1. (В цвете онлайн.) Схематическое представление учета влияния поверхности в триангулированном виде: а — триангулированная поверхность; б — кубическая решетка, используемая при расчетах (директор задается в узлах решетки, показанных зеленым цветом); в — ретриангуляция поверхности в одной ячейке; г — дополнительные точки в центрах ребер (желтые) и граней (красные) кубической ячейки

ние ячейки — ячейки, лежащие полностью внутри поверхности T , внешние ячейки — расположенные целиком снаружи T и поверхностные ячейки — пересекающиеся с T . К поверхности T применяется процедура ретриангуляции, в результате которой T переразбивается на набор треугольников T_i , лежащих строго внутри каждой отдельной ячейки i (см. рис. 1).

1.2. Свободная энергия

В рамках континуальной теории упругости свободная энергия системы F представляет собой функционал, зависящий от поля директора. Поскольку мы разбили весь объем на ячейки с помощью кубической решетки, можно записать свободную энергию в виде суммы свободных энергий каждой отдельной ячейки:

$$F = \sum_i F^{(i)},$$

где $F^{(i)}$ — свободная энергия i -й ячейки, не зависящая от других ячеек. Для каждой ячейки $F^{(i)}$ раскладывается на четыре составляющие:

$$F^{(i)} = F_{\text{el}}^{(i)} + F_S^{(i)} + F_{\text{ext}}^{(i)} + F_{\text{def}}^{(i)},$$

где $F_{\text{el}}^{(i)}$ — энергия упругости, $F_S^{(i)}$ — энергия сцепления ЖК с поверхностью капли, $F_{\text{ext}}^{(i)}$ — энергия взаимодействия ЖК с внешним электрическим полем, $F_{\text{def}}^{(i)}$ — энергия дефектов. Первые три слагаемых обычно записываются в рамках континуальной теории упругости, а вид четвертого слагаемого, $F_{\text{def}}^{(i)}$, описывающего энергию дефектов, обычно зависит от модели. Ниже рассмотрен каждый вклад отдельно.

Энергия упругости Франка [22] в нематическом ЖК может быть записана в следующем виде:

$$f_{\text{el}} = \frac{K_{11}}{2} (\text{div } \mathbf{n})^2 + \frac{K_{22}}{2} (\mathbf{n} \cdot \text{rot } \mathbf{n})^2 + \frac{K_{33}}{2} [\mathbf{n} \times \text{rot } \mathbf{n}]^2,$$

где K_{11} , K_{22} и K_{33} — константы упругости поперечного изгиба, кручения и продольного изгиба. Энергия упругости каждой ячейки $F_{\text{el}}^{(i)} = \int_V f_{\text{el}}^{(i)} dV$ вычисляется как среднее от $f_{\text{el}}^{(i,\alpha)} V_i$ по четырем из восьми узлов ячейки, пронумерованных индексом α . В этих узлах градиентные слагаемые $\frac{\partial \mathbf{n}}{\partial \mathbf{r}}$ находятся численно, а затем вычисляется $f_{\text{el}}^{(i,\alpha)}$. Здесь объем i -й ячейки, попадающей внутрь T , обозначен как V_i (он равен полному объему ячейки V_0 для внутренних ячеек, равен нулю для внешних ячеек и находится в диапазоне от нуля до V_0 для поверхностных ячеек).

Мы используем приближение Рапини для описания энергии сцепления ЖК с поверхностью капли [43]. Полная поверхностная энергия вычисляется как сумма энергий для каждого из треугольников, полученных в результате ретриангуляции:

$$F_S = \sum_t \frac{W_t S_t}{2} \begin{cases} (\mathbf{n}_t \cdot \mathbf{a}_t)^2 & \text{— планарная,} \\ 1 - (\mathbf{n}_t \cdot \mathbf{a}_t)^2 & \text{— гомеотропная,} \end{cases}$$

где W_t — энергия сцепления в расчете на единицу площади для t -го треугольника, S_t — площадь t -го треугольника, $\mathbf{n}_t$ — направление директора в центре t -го треугольника, $\mathbf{a}_t$ — направление оси легкого ориентирования для t -го треугольника. Как видно из формулы, поверхностная энергия вычисляется по-разному для планарных граничных условий (когда директор нематического порядка предпочитает быть параллельным поверхности) и гомеотропных граничных условий (когда директор нематического порядка предпочитает быть перпендикулярным поверхности).

Энергия взаимодействия ЖК с электрическим полем может быть записана в следующем виде [44]:

$$f_{\text{ext}}^{(i)} = -\varepsilon_0 \Delta \varepsilon (\mathbf{E} \cdot \mathbf{n})^2,$$

где $\mathbf{E}$ — напряженность электрического поля. Распределение $\mathbf{E}$ предполагается независимым от поля директора. Интегрирование $f_{\text{ext}}^{(i)}$ по объему ячейки заменяется суммированием по 26 ключевым точкам на поверхности ячейки:

$$F_{\text{ext}}^{(i)} = \sum_k v_k f_{\text{ext}}^{(i)},$$

где v_k — часть объема ячейки, относящаяся к k -й ключевой точке ($v_k = \frac{1}{64} V_i$ для узлов, $\frac{1}{32} V_i$ — для центров граней и $\frac{1}{12} V_i$ — для центров ребер).

1.3. Определение положения точечных и линейных дефектов

Как было указано выше, в ограниченных объемах важно учитывать наличие дефектов, которые существенным образом влияют на формирование той или иной структуры ЖК. Однако континуальная теория упругости описывает только малое возмущение поля директора и не включает в себя описание дефектов. Минимизация свободной энергии без учета энергии дефектов может привести к неправильному распределению нематического директора в капле ЖК. Чтобы учесть сильное возмущение поля директора в определенных местах внутри капли, необходимо описать сильное возмущение (дефект) специальным образом. Мы предлагаем простой алгоритм определения дефектов на прямоугольной решетке, позволяющий рассчитать их положение и тип. В основе этого алгоритма лежит идея несовместимости (существенного различия) направлений поля директора в различных точках, близких к дефекту.

На рис. 2 приведен пример такой несовместимости. Как показано на рисунке, существуют два варианта вычисления директора в центре грани любой ячейки. В первом варианте усреднение сначала ведется по горизонтальному направлению, а затем по вертикальному. Во втором варианте, наоборот, сначала директор усредняется по вертикальному направлению, потом — по горизонтальному. Вообще говоря, эти два пути усреднения приводят к разным результатам (см. также рис. 2, а, б). Эмпирически

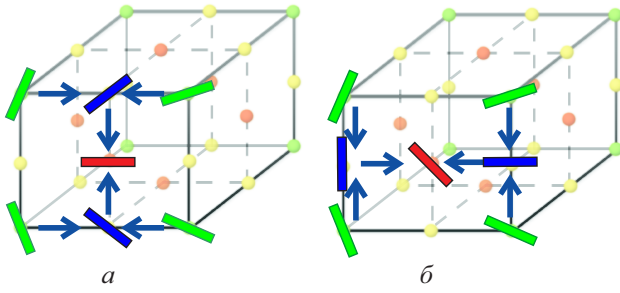


Рис. 2. (В цвете онлайн.) Вычисление невязки директора. Зелеными прямоугольниками помечены векторы директора, заданные в узлах решетки. Синими прямоугольниками показан директор в центрах ребер ячейки, полученный усреднением по двум соседним узлам. Красными прямоугольниками показан директор в центре грани, полученный усреднением по двум серединам ребер. Рисунки *a* и *б* показывают два возможных пути усреднения, приводящих к разным результатам $\tilde{n}_1$ и $\tilde{n}_2$

обнаружено, что в случае небольшого возмущения поля директора эта разница незначительна, тогда как в случае сильного возмущения поля директора она может быть велика, и тем самым, может служить критерием для определения наличия дефектов в определенных ячейках. Введем *невязку* для прямоугольной грани ячейки (красная точка на рис. 1, *г*) как

$$m_{\text{facet}} = 1 - \cos^2(\tilde{n}_1, \tilde{n}_2),$$

где $\tilde{n}_1$ и $\tilde{n}_2$ — средние значения поля директора вдоль осей, образованных сторонами грани (отмечены белым на рис. 2), а для центра ячейки — как $m_{\text{av}} = 1 - \min \{ \cos^2(\tilde{n}_x, \tilde{n}_y); \cos^2(\tilde{n}_x, \tilde{n}_z); \cos^2(\tilde{n}_y, \tilde{n}_z) \}$, где $\tilde{n}_x$, $\tilde{n}_y$ и $\tilde{n}_z$ — средние значения директора для пары противоположных граней. Ожидается, что невязка будет мала для ячеек с небольшой деформацией поля директора и велика для ячеек с большой деформацией, соответствующих наличию дефекта.

Каждой ячейке соответствует набор из семи невязок ($m_i = 1, \dots, 7$) (шесть центров граней и один центр ячейки). Введем два критических значения невязки $m_{\min}$ и $m_{\max}$. При величине невязки менее $m_{\min}$ будем считать, что дефекта в ячейке нет. При значении невязки выше $m_{\max}$ будем считать, что дефект в ячейке есть и его энергия описывается специальными выражениями (см. ниже). В диапазоне невязки между $m_i^{\min}$ и $m_i^{\max}$ будем считать ситуацию пограничной и будем учитывать энергию дефекта для таких ячеек с понижающим коэффициентом, определяемым следующей аппроксимационной формулой:

$$d_i = \sum_n \alpha_n m_i^n,$$

где достаточно учесть первые четыре слагаемых, чтобы понижающий множитель был гладкой функцией невязки, представленной на рис. 3.

Следует заметить, что точечные и линейные дефекты описываются по-разному. Будем рассчитывать коэффициент, понижающий энергию дефекта

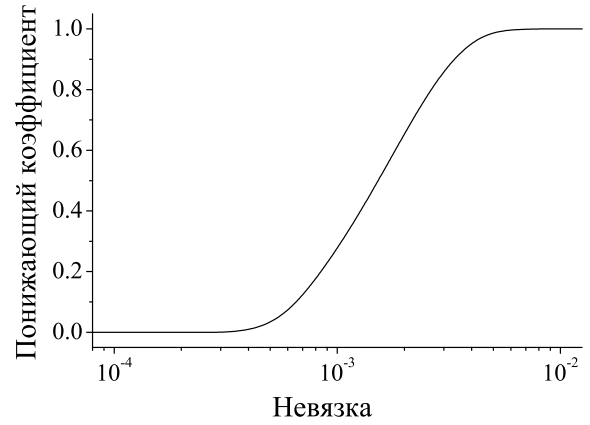


Рис. 3. Зависимость понижающего коэффициента энергии дефекта (d) от величины невязки. Здесь $m_{\min} = 10^{-4}$, $m_{\max} = 5 \cdot 10^{-3}$

(в указанном выше смысле), на шести отрезках, соединяющих середины граней с центром ячейки. Определим понижающий коэффициент на сегменте как квадратный корень из произведения понижающих коэффициентов в центральной точке и середине соответствующей грани. Если понижающий коэффициент на каком-то из сегментов отличен от нуля, то будем считать, что вдоль этого сегмента расположен линейный дефект. Если на всех сегментах понижающий коэффициент равен нулю, но в центре ячейки понижающий коэффициент отличен от нуля, будем считать, что в ячейке присутствует точечный дефект. Кроме того, введем максимальное значение $(\text{div } \mathbf{n})^2$, при превышении которого будем считать, что в ячейке присутствует точечный дефект, независимо от значений понижающих коэффициентов на сегментах.

Описанный выше эмпирический алгоритм определения дефектов не учитывает топологический заряд дефектов, и поэтому рассчитываемая линейная плотность энергии ядра линейных дефектов будет одинаковой для всех дефектов. Этот недостаток метода, однако, незначителен при отсутствии линейных дефектов с существенно отличным топологическим зарядом, и метод будет работать корректно.

Для минимизации полной свободной энергии системы запускаем описанный выше алгоритм определения положений дефектов на каждом шаге Монте-Карло. Таким образом, мы уточняем положение и типы дефектов после каждого изменения поля директора. При этом энергия линейных и точечных дефектов рассчитывается методом, описанным ниже.

Запишем формулы для расчета свободной энергии дефектов F_{def} . Энергию точечного дефекта можно записать следующим образом:

$$F_{\text{def}} = F_{\text{core}}^{\text{point}} d_{\text{av}},$$

где $F_{\text{core}}^{\text{point}}$ — заданное значение энергии ядра точечного дефекта, являющееся входным параметром системы (так же как и константы упругости материала). Энергию линейного дефекта будем рассчитывать

так:

$$F_{\text{def}} = \sum_{\alpha} f_{\text{core}}^{\text{line}} d_{\alpha} L_{\alpha}^{\text{inside}},$$

где $f_{\text{core}}^{\text{line}}$ — линейная плотность энергии ядра линейного дефекта (также является входным параметром), $L_{\alpha}^{\text{inside}}$ — часть длины сегмента α , находящаяся внутри объема V .

Для оценки плотности энергии ядра линейного дефекта будем использовать подход, описанный в работе [45]. Будем считать, что ядро линейного дефекта представляет собой цилиндр (рис. 4) радиуса r_c , внутри которого материал ЖК находится в изотропном состоянии, а снаружи находится однородная нематическая фаза с параметром порядка S .

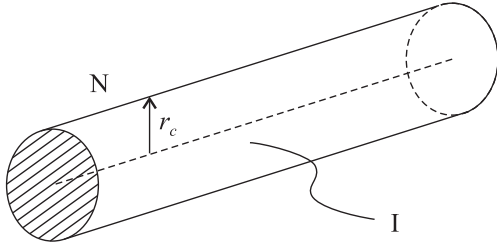


Рис. 4. Модель линейного дефекта. Цилиндрическое изотропное ядро дефекта (I) окружено идеальным нематиком (N)

Ограничим всю систему цилиндром большого радиуса $r \gg r_c$. Считая разницу плотности свободной энергии между нематической и изотропной фазой f_c известной, можем рассчитать полную свободную энергию системы внутри цилиндра r по формуле

$$F = l \left(\pi K k^2 \ln \frac{r}{r_c} + f_c \pi r_c^2 \right),$$

где K — константа упругости материала в одноконстантном приближении, k — индекс дефекта, l — длина цилиндра. Минимизируя свободную энергию F по r_c , получим следующее выражение для оптимального радиуса ядра дефекта: $r_c = k \sqrt{\frac{K}{f_c}}$. Если полученное значение меньше корреляционной длины, то будем считать r_c равным корреляционной длине.

Из теории Ландау — де Жена можно рассчитать f_c (см., например, [20]):

$$f_c = \frac{3}{4} a (T - T_{\text{Ni}}^*) S^2 + \frac{1}{4} B S^3 + \frac{9}{16} C S^4,$$

где S — параметр порядка нематической фазы. Заменяя a , B и C типичными значениями для ЖК 4-циано-4'-пентил-бифенил (5ЦБ) ($10^5 \text{ J m}^{-3} \text{ K}^{-1}$, -10^6 J m^{-3} и 10^6 J m^{-3} , согласно работе [20]) и считая $S = 0.535$ [46] и $k = \frac{1}{2}$, получим $f_c \approx 2.74 \cdot 10^5 \text{ J m}^{-3}$, и следовательно, $r_c \approx 2.5 \text{ nm}$. Корреляционная длина ЖК 5ЦБ составляет примерно 6.6 нм [47]. Таким образом, радиус ядра дефекта тоже будем считать равным 6.6 нм вместо 2.5 нм и получим $f_{\text{line}}^{\text{core}} \approx 3.75 \cdot 10^{-11} \text{ J m}^{-1}$, что соответствует $f_{\text{line}}^{\text{core}} \text{ K}^{-1} \approx 6.1$.

1.4. Минимизация свободной энергии

Как было описано выше, метод отжига Монте-Карло (МК) [23] с критерием Метрополиса [48] не требует каких-либо предположений для стартовой структуры. Этот метод может стартовать из случайной структуры и будет сходиться к глобальному минимуму. Для проверки сходимости можно использовать результат серии независимых стартов.

На каждом шаге МК будем выбирать случайный узел решетки. Затем зададим случайное изменение директора $\mathbf{n}$ в этом узле решетки в соответствии с текущей МК-температурой (T_{MC}): $\mathbf{n} \rightarrow \mathbf{n} + \Delta \mathbf{n}$, где среднеквадратичная проекция $\Delta \mathbf{n}$ на каждую из осей, Δn_x , Δn_y и Δn_z , пропорциональна $\sigma \cdot \sqrt{k_B T_{\text{MC}}}$ и сгенерирована с помощью преобразований Бокса-Мюллера [49]. Затем новое значение директора $\mathbf{n}$ приводится по модулю к единице.

Мы будем начинать оптимизацию с достаточно большого стартового значения температуры $T_{\text{MC}}^{\text{start}}$, чтобы система имела достаточно большую свободную энергию в начале процедуры отжига. Таким образом, мы гарантируем независимость получаемых результатов от начального состояния системы, а также то, что в конце процедуры будет найден глобальный, а не локальный минимум свободной энергии. В описанных ниже расчетах мы используем величину $k_B T_{\text{MC}}^{\text{start}} = 2 \cdot 10^{-15} \text{ J} \approx 5 \cdot 10^5 k_B T$, подобранную эмпирически. Конечная температура МК $T_{\text{MC}}^{\text{final}}$ определяет качество оптимизации на завершающем этапе расчетов. Мы будем использовать $k_B T_{\text{MC}}^{\text{final}} = 2 \cdot 10^{-22} \text{ J} \approx 5 \cdot 10^{-2} k_B T$, ниже которой распределение директора не претерпевает сколь-либо заметных изменений.

В ходе оптимизации температура МК понижается экспоненциально. При этом количеством шагов оптимизации равно 10^4 в расчете на один узел решетки.

2. Переходы во внешнем электрическом поле в сферических каплях с гомеотропными граничными условиями

Рассмотрим результаты расчетов предлагаемым методом. В расчетах мы использовали константы упругости для ЖК 5ЦБ при температуре 10 К ниже температуры перехода из нематической фазы в изотропную [50]: $K_{11} = 6.2 \cdot 10^{-12} (\text{J/m})$, $K_{22} = 3.9 \cdot 10^{-12} (\text{J/m})$ и $K_{33} = 9.8 \cdot 10^{-12} (\text{J/m})$. Выбранные величины также хорошо согласуются с представленными в работе [46].

Известно, что подходы континуальной теории хорошо описывают капли простой геометрии, например, сферические капли. Поэтому в настоящей работе мы сначала проверим наш метод на сферических каплях, а затем применим его к описанию капель более сложной геометрии, которые заведомо не описываются другими методами. Мы опишем структуру и топологические фазовые переходы в каплях, имеющих вид сплюсненного эллипсоида, и покажем,

что в таких каплях наблюдается неизвестный ранее фазовый переход.

2.1. Равновесные структуры

Мы провели расчеты поля директора в нематических каплях сферической формы микрометровых размеров с гомеотропными граничными условиями. Для удобства вводим безразмерную энергию сцепления $\mu = \frac{WR}{K_{11}}$, которая может изменяться от 10 до 2000, а также безразмерную напряженность электрического поля $e = ER \left(\frac{\epsilon_0 \Delta \epsilon}{K_{11}} \right)^{1/2}$, которая меняется от нуля до 150 (здесь и далее радиус капли обозначен как R). Чтобы получить равновесные структуры капли, для каждой пары значений μ и e мы провели оптимизацию Монте-Карло с восемью независимыми запусками, после чего выбрали структуру с наименьшей энергией. В результате мы нашли три типа равновесных структур, показанных на фазовой диаграмме на рис. 5.

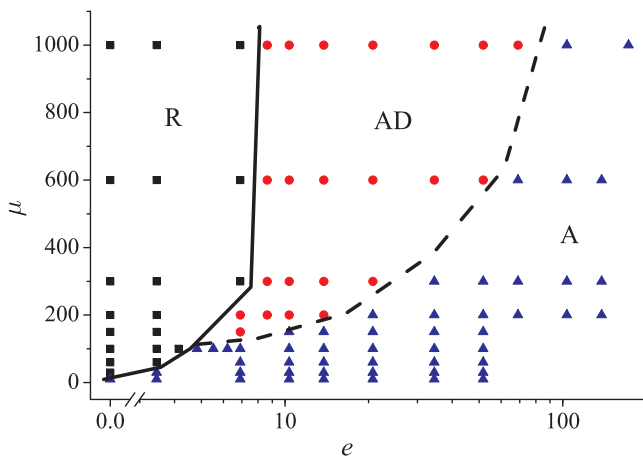


Рис. 5. (В цвете онлайн.) Диаграмма состояний нематического ЖК 5CB в сферической капле с гомеотропными граничными условиями в присутствии электрического поля. Безразмерная напряженность электрического поля обозначена как e , безразмерная энергия сцепления на поверхности обозначена как μ . На диаграмме показаны радиальная фаза (R), аксиальная фаза (A) и аксиальная фаза с линейным дефектом (AD)

1. Радиальная структура (R, отмечена черными квадратами), также называемая структурой типа «еж», в которой существует один точечный дефект в центре капли. Эта структура возникает при доминировании энергии поверхностного сцепления над энергией упругости и/или взаимодействием ЖК с электрическим полем.

2. Аксиальная структура без дефектов (A, отмечена синими треугольниками). Эта структура возникает при доминировании энергии упругости и/или взаимодействия ЖК с электрическим полем над энергией поверхностного взаимодействия.

3. Аксиальная структура с линейным дефектом (AD, отмечена красными кругами). Возникает в промежуточной области между аксиальной и радиальной структу-

рами при достаточно сильном поверхностном сцеплении и умеренной напряженности электрического поля.

Полученные структуры и фазовая диаграмма хорошо согласуются с результатами, описанными в работе [51]. Количественное сравнение наших результатов с результатами работы [51], а также описание обнаруженных фазовых переходов (R–A, R–AD и AD–A) представлены ниже.

2.2. Переход между аксиальной и радиальной структурами (A–R)

Переход между аксиальной и радиальной структурами наблюдается при приложении электрического поля к нематическим каплям со слабым поверхностным сцеплением (см. левую нижнюю часть диаграммы на рис. 5). Поведение структуры при этом переходе можно описать в терминах тензорного параметра порядка $Q_{\alpha\beta} = \langle \frac{1}{2}(3n_\alpha n_\beta - \delta_{\alpha\beta}) \rangle$, где n_α и n_β — проекции локального вектора директора $\mathbf{n}$ на оси координат α и β , а $\delta_{\alpha\beta}$ — символ Кронекера. Угловые скобки означают здесь усреднение по всей капле. Легко заметить, что тензорный параметр порядка $Q_{\alpha\beta}$ вводится по аналогии с нематическим параметром порядка, с той лишь разницей, что в нем используется поле директора вместо направлений длинных осей молекул и усреднение происходит на масштабе всей капли. Поэтому в однородной нематической капле с директором, направленным вдоль оси z , диагональные элементы директора $Q_{\alpha\beta}$ будут равны $-1/2$, $-1/2$ и 1 , а для идеальной структуры типа «еж» в сферической капле все диагональные элементы будут равны нулю. Недиagonальные элементы будут равны нулю для любого распределения директора, имеющего симметрию относительно осей координат.

Зависимость производной безразмерной свободной энергии по величине поверхностного сцепления $\frac{1}{K_{11}R} \frac{\partial F}{\partial \mu}$ от величины безразмерной энергии сцепления μ при отсутствии внешнего электрического поля представлена на рис. 6. Там же показана зависимость диагональных элементов тензорного параметра порядка $Q_{\alpha\beta}$ от величины безразмерной энергии сцепления μ . Производная претерпевает скачкообразное изменение при $\mu_{A-R} = 24 \pm 1$, что явно указывает на фазовый переход первого рода. Величина поверхностного сцепления, соответствующего фазовому переходу, близка к величине, полученной в работе [51].

2.3. Аксиальная структура с дефектом (AD)

На диаграмме присутствует критическая точка ($\mu_c \approx 280$, $e_c \approx 4$), выше которой между аксиальной и радиальной структурами возникает аксиальная структура с дефектом (AD) (см. рис. 5). Этот результат подтверждает данные, полученные в работе [51], в которой были показаны структуры с круговым

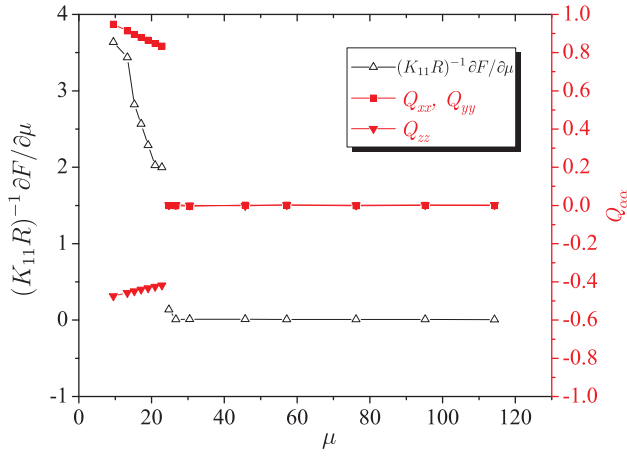


Рис. 6. (В цвете онлайн.) Зависимость первой производной безразмерной свободной энергии системы $\frac{1}{K_{11}R} \frac{\partial F}{\partial \mu}$ и диагональных элементов тензора параметра порядка $Q_{\alpha\beta}$ от безразмерной энергии сцепления с поверхностью μ для случая нематического ЖК 5ЦБ в сферической капле при отсутствии электрического поля ($e = 0$). При $\mu \approx 24 \pm 1$ наблюдается фазовый переход первого рода из аксиальной фазы (A) в радиальную фазу (R)

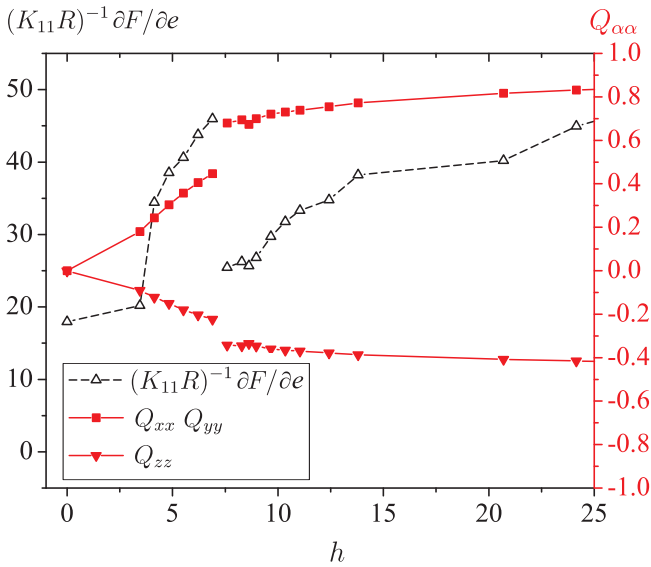


Рис. 7. (В цвете онлайн.) Зависимость первой производной безразмерной свободной энергии системы $\frac{1}{K_{11}R} \frac{\partial F}{\partial e}$ и диагональных элементов тензора параметра порядка $Q_{\alpha\beta}$ от безразмерной напряженности электрического поля e для случая нематического ЖК 5ЦБ в сферической капле с сильным поверхностным сцеплением ($\mu = 1100$). При $e \approx 7.3 \pm 0.3$ наблюдается фазовый переход первого рода из радиальной фазы (R) в аксиальную фазу с линейным дефектом (AD)

дефектом в плоскости, перпендикулярной направлению электрического поля, при энергии поверхностного сцепления больше $\mu_c \approx 240$ в одноконстантном приближении. На рис. 7 показана зависимость производной безразмерной свободной энергии системы по величине напряженности электрического поля $\frac{1}{K_{11}R} \frac{\partial F}{\partial e}$ и диагональных элементов тензорного параметра порядка $Q_{\alpha\beta}$ от величины напряженности электрического поля при $\mu = 1100$. На рисунке

видно, что и производная, и параметр порядка изменяются скачкообразно при $e = 7.3 \pm 0.3$, что также указывает на фазовый переход первого рода.

Дальнейшее увеличение напряженности электрического поля приводит к увеличению диаметра кольца дефекта. Можно ожидать, что когда размер кольца достигнет размера капли, структура перейдет в аксиальную без дефекта посредством фазового перехода второго рода. Однако в используемом нами приближении, в котором не предполагается определенная симметрия решения, этот переход оказывается размыт. Кольцо дефекта при этом разбивается на отдельные фрагменты, а затем длина этих фрагментов постепенно уменьшается при увеличении напряженности e , пока дефект не исчезнет полностью. В данный момент остается неясным, является ли такой сценарий исключительно следствием используемых в методе приближений. Зависимость безразмерной энергии дефектов, ее производной по величине напряженности электрического поля, а также диагональных элементов тензора от напряженности электрического поля представлены на рис. 8. Как видно из рисунка, энергия дефектов и параметр порядка изменяются непрерывно. Итак, наш метод не дает оснований говорить о том, что данное изменение является фазовым переходом, поэтому на фазовой диаграмме (см. рис. 5) нанесена прерывистая линия в области, соответствующей максимальному значению $\left| \frac{dF_{\text{def}}}{dh} \right|$.

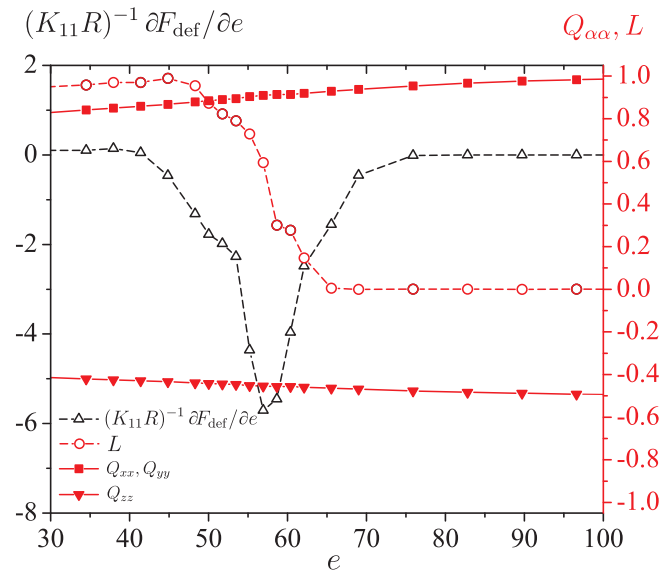


Рис. 8. (В цвете онлайн.) Зависимость первой производной безразмерной свободной энергии системы $\frac{1}{K_{11}R} \frac{\partial F}{\partial e}$, безразмерной длины дефекта $L = \frac{l}{2\pi R}$, где l — истинная длина дефекта, и диагональных элементов тензора параметра порядка $Q_{\alpha\beta}$ от безразмерной напряженности электрического поля e для случая нематического ЖК 5ЦБ в сферической капле с сильным поверхностным сцеплением ($\mu = 1100$). Наблюдается непрерывный переход из аксиальной фазы с линейным дефектом (AD) в аксиальную фазу (A)

3. Фазовые переходы в сплюснутых каплях нематического ЖК с гомеотропными граничными условиями под действием электрического поля

3.1. Равновесные структуры

Рассмотрим сплюснутую эллипсоидальную каплю с двумя равными большими главными осями d_x и d_y и короткой главной осью d_z . Определим для такой капли степень сплюснутости как $\delta = \frac{d_x}{d_z}$, которая всегда будет больше или равна единице. Рассмотрим, как будет вести себя ЖК 5ЦБ в такой капле с сильными гомеотропными условиями на поверхности ($\mu = 2000$). Введем для сплюснутой капли характерный размер R , равный радиусу сферы с тем же объемом. Существенное отличие структуры ЖК в сплюснутых каплях от структуры ЖК в сферических каплях наблюдается даже без приложения электрического поля: в зависимости от степени сплюснутости капли δ наблюдаются следующие два различных состояния (рис. 9, а–в).

1. Радиальная структура (R), или структура типа «еж», возникающая при $\delta < 3.125$. Деформация директора в такой структуре плавно увеличивается при увеличении степени сплюснутости (рис. 9, а–в), но топология дефектов остается неизменной (существует только один точечный дефект в центре капли).

2. Аксиальная структура с линейным дефектом (AD), возникающая при $\delta > 3.125$. При высокой степени сплюснутости в плоскости Oxy появляется круговой дефект, диаметр которого близок к d_x , как показано на рис. 9, г. В центральной части капли поле директора практически однородно, в то время как по краям структура сильно искажена. В отличие от сферических капель, такая структура (AD) возникает при отсутствии электрического поля исключительно за счет гомеотропного сцепления на границе капли.

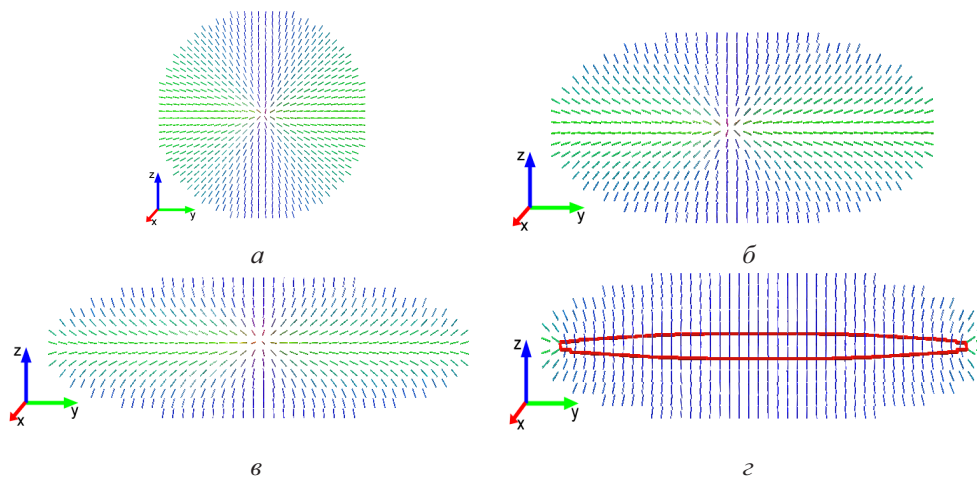


Рис. 9. (В цвете онлайн.) Распределение поля директора 5ЦБ в капле с сильным поверхностным сцеплением ($\mu = 2000$) и различными степенями сплюснутости: $\delta = 1$ (а), $\delta = 2$ (б), $\delta = 3$ (в), $\delta = 3.5$ (г). Цвет директора соответствует его направлению. Дефекты обозначены толстой красной линией

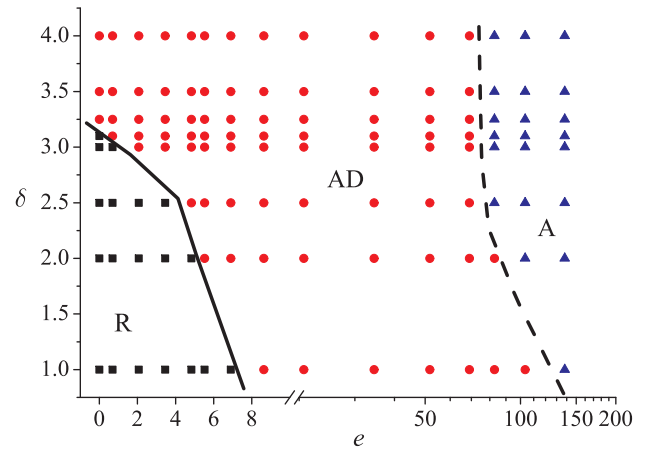


Рис. 10. (В цвете онлайн.) Диаграмма состояний нематического ЖК 5ЦБ в сплюснутой капле с гомеотропными граничными условиями ($\mu = 2000$) в присутствии электрического поля, направленного вдоль короткой оси капли. Безразмерная напряженность электрического поля обозначена как e , сплюснутость обозначена как δ . Сплошная линия показывает границу фазового перехода $R \rightarrow AD$, пунктирная линия — переход $AD \rightarrow A$

При приложении однородного электрического поля вдоль короткой оси капли (оси симметрии) возникающий набор состояний зависит от степени сплюснутости капли δ , но всегда остается достаточно простым. При $\delta < 3.125$ последовательность состояний при увеличении напряженности поля такая же, как и для сферической капли: $R \rightarrow AD \rightarrow A$. При $\delta > 3.125$ фаза AD существует при нулевом значении напряженности e (вместо фазы R) и последовательность состояний упрощается до $AD \rightarrow A$. Соответствующая фазовая диаграмма в координатах сплюснутость–напряженность электрического поля показана на рис. 10. Здесь фаза R помечена красными квадратами, AD — красными кругами, A — зелеными треугольниками. Пороговые значения напряженности электрического поля уменьшаются при

увеличении δ , но типы переходов остаются такими же, как и в случае сферической капли.

Намного интереснее оказывается случай, в котором электрическое поле прилагается вдоль одной из длинных осей капли. В этом случае симметрия системы нарушается и возникают новые типы фаз. В результате моделирования мы обнаружили следующие равновесные состояния такой системы.

1. Радиальная структура (R), уже описанная выше (рис. 9, а–в).

2. Аксиальная структура с дефектом (AD), также описанная выше (рис. 9, г и рис. 11, а).

3. Асимметричная структура с наклоном директора в центре капли (TD), где директор пытается переориентироваться вдоль электрического поля. Структура такого состояния показана на рис. 11, б. Такая структура возникает при $\delta > 3.125$ при приложении слабого электрического поля.

4. Асимметричная структура с наклоном директора и наклоном кольца дефекта (TTD), показанная на рис. 11, в. Эта структура возникает при любой степени сплюснутости δ , если электрическое поле достаточно сильное, чтобы подавить энергию упругости ЖК. Кольцо дефекта постепенно поворачивается с увеличением электрического поля и становится перпендикулярно направлению электрического поля при e , стремящемся к бесконечности (рис. 11, в–г). Предельный наклон кольца дефекта в фазе TTD такой же, как и в фазе AD для сферической капли.

5. Аксиальная структура без дефекта (A). Эта структура возникает при достаточно высокой напряженности электрического поля, когда взаимодействие ЖК с электрическим полем подавляет взаимодействие ЖК с поверхностью капли (рис. 11, д).

Фазовая диаграмма в координатах сплюснутость–напряженность электрического поля показана

на рис. 12, где фаза R отмечена красными квадратами, AD — фиолетовыми треугольниками, TD — зелеными ромбами, TTD — красными кругами, а фаза A — синими треугольниками.

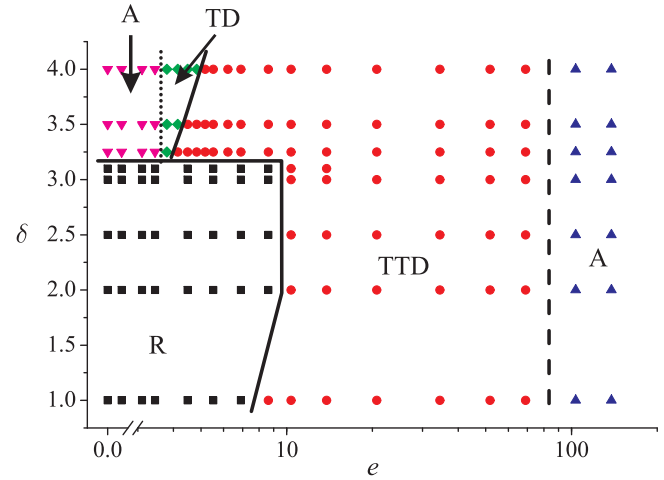


Рис. 12. (В цвете онлайн.) Диаграмма состояний нематического ЖК 5ЦБ в сплюсненной капле с гомеотропными граничными условиями ($\mu = 2000$) в присутствии электрического поля, направленного вдоль длинной оси капли. Безразмерная напряженность электрического поля обозначена как e , сплюснутость обозначена как δ . Сплошными линиями показаны фазовые переходы первого рода, короткой пунктирной линией показан фазовый переход второго рода, длинной пунктирной линией — переход TTD $\rightarrow$ A

Механизмы переходов $R \rightarrow$ TTD и TTD $\rightarrow$ A в сплюсненных каплях такие же, что и механизмы переходов $R \rightarrow$ AD и AD $\rightarrow$ A в сферических каплях. Переходы $R \rightarrow$ AD, AD $\rightarrow$ TD и TD $\rightarrow$ TTD наблюдаются только в сплюсненных каплях и детально описаны ниже.

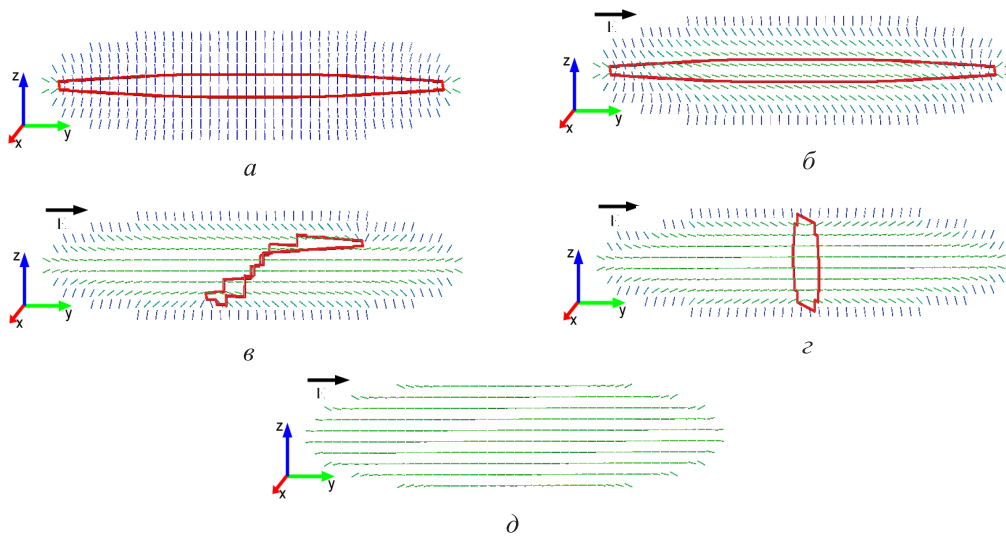


Рис. 11. (В цвете онлайн.) Распределение поля директора 5ЦБ в капле с сильным поверхностным сцеплением ($\mu = 2000$) и степенью сплюснутости $\delta = 4$ при различной напряженности электрического поля: фаза AD при $e = 0$ (а), фаза TD при $e = 4.0$ (б), фаза TTD при $e = 5.0$ (в), фаза TTD при $e = 52.5$ (г), фаза A при $e = 103.5$ (д). Цвет директора соответствует его направлению. Дефекты обозначены толстой красной линией

3.2. Переход из радиальной структуры в аксиальную с дефектом (R-AD)

Радиальная структура в сферической капле возникает в случае гомеотропных граничных условий (см. рис. 9, а). В слабо сплюсненной капле (см. рис. 9, б, в) возникает деформированная радиальная структура с наибольшей деформацией в плоскости длинных осей капли. При увеличении степени сплюсненности δ деформация поля директора также растет. При достижении критического значения сплюсненности происходит фазовый переход в аксиальную структуру с линейным дефектом (AD). Возникающее при этом кольцо дефекта лежит в той же плоскости и расположено вблизи границы капли. Поле директора глубоко внутри кольца оказывается практически однородным, а сильная деформация наблюдается только вблизи кольца (рис. 9, г). Суммарная энергия упругости в такой структуре оказывается меньше, чем в радиальной структуре с точечным дефектом, за счет меньшего объема деформированной зоны, что компенсируется высокой энергией ядра линейного дефекта. Первая производная свободной энергии $\frac{1}{K_{11}R} \frac{\partial F}{\partial \delta}$ и параметр порядка $Q_{\alpha\beta}$ претерпевают скачок при критическом значении $\delta_{R \rightarrow AD} = 3.125 \pm 0.025$ (рис. 13). Таким образом, мы наблюдаем фазовый переход первого рода, показанный сплошной черной линией на рис. 12.

3.3. Фазовый переход от аксиальной структуры с дефектом к наклонной структуре с дефектом (AD-TD)

Этот переход наблюдается при $\delta > \delta_{R \rightarrow AD}$ в умеренном электрическом поле. При величине напряженности электрического поля ниже критической $e < e_{AD \rightarrow TD}$ структура поля директора примерно такая же, как и при $e = 0$ (см. рис. 11, а). При $e_{AD \rightarrow TD} = 3.6 \pm 0.1$ наблюдается дополнительный переход в фазу с наклоном директора в центре капли, в которой положение дефекта практически не изменяется (см. рис. 11, б). Для анализа типа перехода мы вычислили производную свободной энергии системы и параметр порядка как функции от e (рис. 14). Линейная аппроксимация первой производной безразмерной свободной энергии до и после перехода показана на рис. 14 красными линиями. Пересечение этих прямых происходит в точке перехода $e < e_{AD \rightarrow TD}$. Полученная таким образом точка фазового перехода подтверждается также анализом зависимости второй производной свободной энергии от величины поля ($\frac{1}{K_{11}R} \frac{\partial^2 F}{\partial e^2}$, показана пустыми кругами на рис. 14). Параметр порядка (синие ромбы на рис. 14) практически не изменяется до точки перехода, а затем плавно увеличивается. Таким образом, мы наблюдаем фазовый переход второго рода, показанный на фазовой диаграмме (рис. 12) мелкой пунктирной линией.

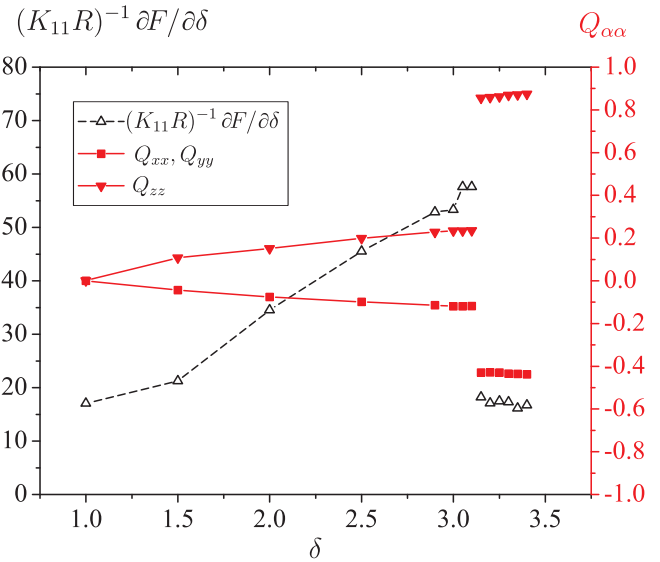


Рис. 13. (В цвете онлайн.) Зависимость первой производной свободной энергии $\frac{1}{K_{11}R} \frac{\partial F}{\partial \delta}$ и диагональных элементов тензора порядка $Q_{\alpha\beta}$ от степени сплюсненности капли δ при отсутствии электрического поля. При $\delta_{R \rightarrow AD} = 3.125 \pm 0.025$ наблюдается фазовый переход первого рода

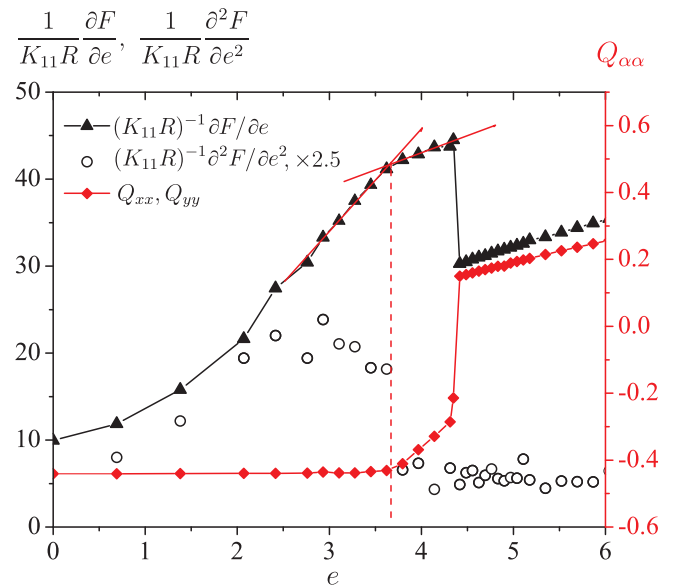


Рис. 14. (В цвете онлайн.) Зависимость первой и второй производных свободной энергии $\frac{1}{K_{11}R} \frac{\partial F}{\partial e}$ и $\frac{1}{K_{11}R} \frac{\partial^2 F}{\partial e^2}$ и диагонального элемента тензора порядка Q_{yy} от безразмерной величины электрического поля в сплюсненной капле ($\delta = 3.5$) с высокой энергией поверхностного сцепления ($\mu = 2000$). Сплошными красными линиями показана линейная аппроксимация $\frac{1}{K_{11}R} \frac{\partial F}{\partial e}$ до и после точки перехода AD $\rightarrow$ TD второго рода ($e_{AD \rightarrow TD} = 3.6 \pm 0.1$). Фазовый переход первого рода TD $\rightarrow$ TTD наблюдается при $e_{TD \rightarrow TTD} = 4.38 \pm 0.04$

3.4. Фазовый переход из состояния с наклоненным директором в состояние с наклоненным директором и наклоненным дефектом (TD-TTD)

При еще большем пороговом значении напряженности электрического поля $e_{TD \rightarrow TTD}$ и степени сплюсненности капли $\delta > \delta_{R \rightarrow AD}$ наблюдается фа-

зовый переход первого рода, при котором линия дефекта резко наклоняется по отношению к направлению электрического поля. До точки $e_{TD \rightarrow TTD}$ наклон претерпевает только поле директора в центре капли, а положение дефекта остается неизменным. Выше точки $e_{TD \rightarrow TTD}$ весь круговой дефект резко поворачивается на угол около 30° вокруг длинной оси эллипсоида, перпендикулярной направлению электрического поля (рис. 11, в). Из рис. 14 видно, что этот переход достаточно близок к переходу $AD \rightarrow TD$ (например, $e_{TD \rightarrow TTD} = 4.38 \pm 0.04$ при $\delta = 3.5$). Разница между двумя значениями критического поля, $e_{AD \rightarrow TD}$ и $e_{TD \rightarrow TTD}$, возрастает при увеличении сплюсненности капли δ , в то время как при степени сплюсненности, близкой к критической $\delta_{R \rightarrow AD}$, оба перехода сливаются в один.

Заключение

В настоящей работе предложен метод вычисления структуры поля директора в жидкокристаллических каплях в рамках континуальной теории упругости, дополненной вычислением энергии точечных и линейных дефектов в явном виде. Для этого был использован эмпирический подход, не требующий детальной информации о дефектах (например, топологического заряда и внутренней структуры ядра дефекта [18, 19, 52]). Метод вычислений базируется на стохастической оптимизации структуры ЖК по методу Монте-Карло с отжигом для поиска глобального минимума свободной энергии. Для учета граничных условий используется специальная техника триангуляции, что позволяет рассматривать капли произвольной формы.

В подразд. 2.1 показано, что предложенный метод находит правильные структуры нематического ЖК для случая сферических капель во внешнем электрическом поле, известные из литературы. Несмотря на простое представление дефектов, результаты расчетов соответствуют данным, полученным более точным методом в рамках теории Ландау — де Жена. В частности, наблюдаются радиальная структура (R), аксиальная структура без дефекта (A) и аксиальная структура с круговым дефектом (AD), а фазовая диаграмма очень близка к предсказанной ранее в [51].

С помощью предложенного метода мы рассчитали структуры, возникающие в сплюсненных каплях нематического ЖК, которые невозможно рассчитать другими методами. Было показано, что высокая степень сплюсненности капли приводит к наличию кругового дефекта даже при отсутствии электрического поля, в результате чего существует несколько новых типов структур и фазовых переходов между ними. В частности, мы обнаружили фазу с наклоном поля директора в центре (TD) и фазу с наклоном поля директора и поворотом кольца дефекта (TTD).

ПДЖК-материалы из сферических или слабо сплюсненных капель обычно непрозрачны в состоянии R без электрического поля и прозрачны в со-

стоянии AD в присутствии электрического поля. В то же время ПДЖК-материалы, состоящие из сильно сплюсненных капель, должны быть прозрачны в состоянии AD без электрического поля и непрозрачны в состоянии TD в присутствии слабого поля. Из наших вычислений следует, что переход между состояниями AD и TD в сильно сплюсненных каплях должен происходить при напряженности поля, примерно вдвое меньшей критического поля перехода R-AD в случае сферических капель (при одинаковом поверхностном сцеплении). Таким образом, ПДЖК-материалы, состоящие из сильно сплюсненных капель, могут быть использованы для создания низковольтных электрооптических устройств.

ПДЖК-материалы, состоящие из сильно сплюсненных капель, также могут быть использованы для создания высококонтрастных устройств с электроуправляемым двулучепреломлением. Двулучепреломление в таких системах должно возникать в одном из двух аксиальных состояний (A) и исчезать в другом (AD). Существование двух промежуточных состояний (TD и TTD) между указанными аксиальными состояниями делает возможным реализацию нескольких цветов двулучепреломления при разном напряжении [53].

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты 15-59-32410, 15-32-20859, 15-02-08269).

Все вычисления были проведены на суперкомпьютере «Ломоносов» МГУ имени М. В. Ломоносова.

Список литературы

1. Handbook of Liquid Crystals / Ed. by D. Demus, J. Goodby, G. Gray, H. Spiess, V. Vill. Weinheim: Wiley — VCH Verlag GmbH, 1998.
2. Montgomery G., Smith C., Vaz N. Liquid Crystalline and Mesomorphic Polymers. N. Y.: Weinheim, 1995.
3. Crawford G., Zumer S. Liquid Crystals in Complex Geometries. L.: Taylor & Francis, 1996.
4. Sonin A.S., Churochkina N.A. // Polym. Sci., Ser. A. 2010. **52**. P. 463.
5. Guo J., Yang H., Li R. et al. // J. Phys. Chem. C. 2009. **113**. P. 16538.
6. Bloisi F., Vicari L. Optical Application of Liquid Crystals. L.: Taylor & Francis, 2003.
7. Loiko V.A., Konkolovich A.V., Maksimenko P.G. // J. Soc. Inf. Disp. 2006. **14**. P. 595.
8. Loiko V.A., Konkolovich A.V., Miskevich A.A. // J. Exp. Theor. Phys. 2007. **105**. P. 846.
9. Yang D.-K., West J.L., Chien L.-C., Doane J.W. // J. Appl. Phys. 1994. **76**. P. 1331.
10. Chari K., Rankin C.M., Johnson D.M. et al. // Appl. Phys. Lett. 2006. **88**. P. 043502.
11. Emelyanenko A.V., Osipov M.A., Dunmur D.A. // Phys. Rev. E. 2000. **62**. P. 2340.
12. Emelyanenko A.V. // Phys. Rev. E. 2003. **67**. P. 031704.
13. Zyryanov V.Y., Krakhalev M.N., Prishchepa O.O., Shabanov A.V. // JETP Lett. 2007. **86**. P. 383.
14. Lebwohl P., Lasher G. // Phys. Rev. A. 1972. **6**. P. 426.

15. Yao I.-An, Lai Y.-C., Chen S.-H., Wu J.-J. // Phys. Rev. E. 2004. **70**. P. 051705.
16. Yao I.-A., Wu J.-J., Chen S.-H. // Jpn. J. Appl. Phys. 2004. **43**. P. 1488.
17. Kralj S., Virga E.G., Zumer S. // Phys. Rev. E. 1999. **60**. P. 1858.
18. Svensen D., Zumer S. // Phys. Rev. E. 2004. **70**. P. 040701.
19. Svetec M., Kralj S., Bradac Z., Zumer S. // Eur. Phys. J. E. 2006. **20**. P. 71.
20. Ravnik M., Zumer S. // Liq. Cryst. 2009. **36**. P. 1201.
21. Ravnik M., Zumer S. // Soft Matter. 2009. **5**. P. 269.
22. Frank F.C. // Discuss. Faraday Soc. 1958. **25**. P. 19.
23. Kirkpatrick S., Gelatt C.D., Vecchi M.P. // Science. 1983. **220**. P. 671.
24. Bowley C.C., Fontecchio A.K., Crawford G.P. et al. // Appl. Phys. Lett. 2000. **76**. P. 523.
25. Shiyonovskaya I., Green S., Khan A. et al. // J. Soc. Inf. Disp. 2008. **16**. P. 113.
26. Lv K., Liu D., Li W. et al. // Dyes Pigm. 2012. **94**. P. 452.
27. Liang H.H., Wu C.C., Wang P.H., Lee J.Y. // Opt. Mater. 2011. **33**. P. 1195.
28. Li Q., Li Y., Ma J. et al. // Adv. Mater. 2011. **23**. P. 5069.
29. Domash L.H., Chen Y.-M., Gomatam B. et al. // Proc. SPIE. 1996. **2689**. P. 188.
30. Popovich M., Sagan S. // SID Digest of Tech. Pap. 2000. **31**. P. 1060.
31. Fiske T.G., Silverstein L.D., Colegrove J., Yuan H. // SID Digest of Tech. Pap. 2000. **31**. P. 1134.
32. Enz E., Lagerwall J. // J. Mater. Chem. 2010. **20**. P. 6866.
33. Manabe T., Sonoyama K., Takanishi Y. et al. // J. Mater. Chem. 2008. **18**. P. 3040.
34. Huck N.P.N., Staube I., Thirouard A., Deboer D.K.G. // Jpn. J. Appl. Phys. 2003. **42**. P. 5189.
35. Chiccoli C., Pasini P., Semeria F. et al. // Mol. Cryst. Liq. Cryst. 1995. **266**. P. 241.
36. Berggren E., Zannoni C., Chiccoli C. et al. // Phys. Rev. E. 1994. **49**. P. 614.
37. Chiccoli C., Pasini P., Semeria F., Zannoni C. // Phys. Lett. A. 1990. **150**. P. 311.
38. Wu B.-G., Erdmann J.H., Doane J.W. // Liq. Cryst. 1989. **5**. P. 1453.
39. Bharadwaj R.K., Bunning T.J., Farmer B.L. // Liq. Cryst. 2000. **27**. P. 591.
40. Otten R.H.J., van der Schoot P. // J. Chem. Phys. 2012. **137**. P. 154901.
41. Jazbinsek M., Olenik D., Zgonik M. et al. // J. Appl. Phys. 2001. **90**. P. 3831.
42. de Berg M., van Kreveld M., Overmans M., Schwarzkopf O. Computational Geometry: Algorithms and Applications. 2nd ed. B.: Springer-Verlag, 2000.
43. Rapini A., Papoular M.J. // J. Phys. Colloq. 1969. **30**. P. C4.
44. de Gennes P.G., Prost J. The Physics of Liquid Crystals. 2nd ed. Oxford: Clarendon Press, 1993.
45. Kleman M., Lavrentovich O. // Soft Matter Physics: An Introduction. N.Y.: Springer, 2002.
46. Madhusudana N.V., Pratibha R. // Mol. Cryst. Liq. Cryst. 1999. **331**. P. 49.
47. Ravnik M., Crnko B., Zumer S. // Mol. Cryst. Liq. Cryst. 2009. **208**. P. 150.
48. Beicht I., Sullivan F. // Comput. Sci. Eng. 2000. **2**. P. 65.
49. Box G.E.P., Muller M.E. // Ann. Math. Stat. 1958. **29**. P. 610.
50. Chen G.-P., Takezoe H., Fukuda A. // Liq. Cryst. 1989. **5**. P. 341.
51. Kralj S., Zumer S. // Phys. Rev. A. 1992. **45**. P. 2461.
52. Bradac Z., Kralj S., Zumer S. // Phys. Rev. E 1998. **58**. P. 7447.
53. Emelyanenko A.V., Pozhidaev E.P., Shtykov N.M., Molkin V.E. // J. Soc. Inf. Disp. 2008. **8**. P. 16.

Phase transition in ellipsoidal droplets of nematic liquid crystals

A. V. Emelyanenko^{1,a}, V. Yu. Rudyak¹, J. -H. Liu²

¹Department of Physics of Polimers and Crystals, Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University, Moscow 119991, Russia.

²National Cheng Kung University, Tainan 70101, Taiwan. E-mail: ^aemel@polly.phys.msu.ru.

We developed a simple method for the calculation of the director field distribution in the droplets of nematic liquid crystals (LCs) of any shape, allowing for the interaction of LCs with the droplet surface, as well as the influence of constant electric field. In contrast to different approaches, the approach that is developed in the present paper does not require any simplifying suppositions about the structure of the LC director field. The elastic-continuum theory is used, complemented with the possibility of consideration of point and linear defects. Calculations are performed using the Monte Carlo method on a simple grid. The triangulation technique is used to take the boundary conditions of droplets of a complex shape into account. The developed approach can be used for investigation of the properties of polymer-dispersed liquid crystals (PDLCs). The topological phase transitions in the nematic LC 4-cyano-4'-pentyl-biphenyl (5CB) in spherical and ellipsoidal droplets are investigated in this paper.

Keywords: liquid crystals, computer simulation, Frank–Oseen elastic continuum theory, Monte Carlo, defects, droplets.

PACS: 61.30.Dk.

Received 12 October 2015.

English version: *Moscow University Physics Bulletin*. 2016. **71**, No. 1. Pp. 52–64.

Сведения об авторах

1. Емельяненко Александр Вячеславович — доктор физ.-мат. наук, вед. науч. сотрудник; тел.: (495) 939-10-13, e-mail: emel@polly.phys.msu.ru.

2. Рудяк Владимир Юрьевич — канд. физ.-мат. наук, науч. сотрудник; тел.: (495) 939-10-13, e-mail: vurdizm@gmail.com.

3. Лю Дж.-Х. (Liu Jui-Hsiang).