

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ  
ІНСТИТУТ ТЕОРЕТИЧНОЇ ФІЗИКИ ІМ. М. М. БОГОЛЮБОВА

**ТОВКАЧ ОЛЕГ МИКОЛАЙОВИЧ**

УДК 53.01, 530.17

**ВЗАЄМОДІЇ І ФОРМУВАННЯ СТРУКТУР В  
ОБМЕЖЕНИХ РІДКОКРИСТАЛІЧНИХ КОЛОЇДАХ**

01.04.02 — теоретична фізика

Автореферат  
дисертації на здобуття наукового ступеня  
кандидата фізико-математичних наук

Київ — 2014

Дисертацією є рукопис.

Робота виконана в Інституті теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова Національної академії наук України.

Науковий керівник: член-кореспондент НАН України,  
доктор фізико-математичних наук, професор  
**Лев Богдан Іванович**,  
Інститут теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова  
НАН України, завідувач відділу синергетики

Офіційні опоненти: доктор фізико-математичних наук,  
член-кореспондент НАН України, професор  
**Томчук Петро Михайлович**,  
Інститут фізики НАН України, завідувач відділу  
теоретичної фізики;  
доктор фізико-математичних наук, професор  
**Пінкевич Ігор Павлович**,  
Київський національний університет імені Тараса  
Шевченка, фізичний факультет, професор кафедри  
теоретичної фізики

Захист відбудеться «\_\_\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2014 р. о \_\_\_\_\_ годині на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 26.191.01 Інституту теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова НАН України за адресою: вул. Метрологічна 14-б, м. Київ, 03680, Україна.

З дисертацією можна ознайомитись у науковій бібліотеці Інституту теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова НАН України за адресою: вул. Метрологічна 14-б, м. Київ, 03680, Україна.

Автореферат розісланий «\_\_\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2014 р.

Вчений секретар  
спеціалізованої вченої ради Д 26.191.01,  
доктор фізико-математичних наук

В. Є. Кузьмичев

## ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

**Актуальність теми.** Колоїдні розчини оточують нас у повсякденному житті. Однак, їх вивчення є важливим не лише з прикладної, але й з фундаментальної точки зору, оскільки вони є зручними модельними системами багатьох фізичних процесів, починаючи з броунівського руху, і, закінчуючи появою топологічних дефектів у ранньому Всесвіті.

В останнє десятиліття особливу увагу привертають рідкокристалічні колоїди – дисперсні системи, в яких роль дисперсійного середовища відіграють, власне, рідкі кристали. Своїми незвичними властивостями вони завдячують далекому орієнтаційному порядку, що присутній в будь-якому рідкому кристалі. Колоїдні частинки порушують впорядкування молекул останнього, і таким чином ефективно взаємодіють між собою. Характерною особливістю цих взаємодій є їхній далекодіючий характер та направленість в просторі. Це, в свою чергу, робить можливим існування в таких системах великого різноманіття регулярних колоїдних структур з цікавими механічними та електрооптичними характеристиками. Тому рідкокристалічні колоїди є перспективними об'єктами для технологічних проривів в питаннях створення гнучких дисплеїв, керування світлом (фотонні кристали та оптичні хвилеводи), в сонячній енергетиці.

Теоретичне описання даних систем вимагає розв'язання нелінійних диференціальних рівнянь, і в абсолютній більшості випадків здійснюється лише чисельно. Аналітичні підходи ґрунтуються на феноменологічному ефективному функціоналі вільної енергії, запропонованому в [1\*]. Однак, всі вони, в основному, присвячені необмеженим колоїдам. На практиці ж завжди доводиться мати справу з обмеженими системами. А це може суттєво впливати на взаємодію між частинками. Тому в першій частині дисертації (розділи 2-5) ми пропонуємо загальний метод описання ефективних пружних взаємодій між колоїдними частинками довільної форми та розміру в обмежених нематиках.

Друга частина дисертації (розділи 6, 7) присвячена взаємодіям в холестеричних та смектичних колоїдах. Завдяки своїй спіральній та шаруватій структурі ці середовища є надзвичайно подібними на такі важливі біологічні об'єкти, як розчини ДНК та клітинні мембрани. Тому розуміння процесів, що в них відбуваються, окрім технологічного значення, може пролити світло на деякі аспекти фізики живого.

**Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами.** Результати, що увійшли в дисертаційну роботу, отримано в рамках планової наукової тематики відділу синергетики ІТФ ім. М. М. Боголюбова НАН України ("Мікроскопічні та феноменологічні моделі фундаментальних фізичних процесів у мікро- та макросвіті" (цільова), шифр 1.4.1, 1.4.2, 1.4.5, 1.4.7, 1.4.8,

1.4.9, РК № 0112U000056; “Формування структур та нерівноважні процеси у відкритих системах”, шифр 1.4.7, 1.4.7.1, 1.4.7.2, РК № 0113U001093).

**Мета і завдання дослідження.** Метою дисертаційної роботи є теоретичне описання ефективних пружних взаємодій між колоїдними частинками в обмежених рідких кристалах. Зокрема, розв’язувалися наступні задачі:

- отримання загальних виразів для взаємодії колоїдних частинок довільної форми в обмежених нематичних рідких кристалах; встановлення зв’язку між пружними мультипольними моментами частинки та симетрією поля директора в околі її поверхні;
- дослідження впливу зовнішнього електричного або магнітного поля на взаємодію аксіально-симетричних частинок в нематичній комірці;
- розрахунок параметрів одно-, дво- та тривимірних колоїдних структур в нематиках;
- отримання загального виразу для взаємодії малих сферичних частинок в холестеричній комірці;
- знаходження потенціалу взаємодії малих колоїдних частинок в смектичному рідкому кристалі з врахуванням обмежень, накладених його шаруватою структурою.

*Об’єктами дослідження* є обмежені рідкокристалічні колоїди (нематичні, холестеричні та смектичні).

*Предметом дослідження* є ефективні пружні взаємодії між колоїдними частинками.

**Методи дослідження.** Для вирішення поставлених задач застосовувалися метод ефективного функціоналу вільної енергії [1\*], метод функцій Гріна [2\*], а також загальні методи теоретичної фізики та теорії спеціальних функцій.

**Наукова новизна одержаних результатів.** В дисертації вперше:

1. Послідовно встановлено зв’язок пружних мультипольних моментів з симетрією поля директора в околі колоїдної частинки довільної форми.
2. Передбачено ефект керованого анізотропного притягання між дипольними частинками в гомеотропній комірці, поміщеній в зовнішнє електричне або магнітне поле.
3. Пояснено формування дво- і тривимірних колоїдних структур та визначено їхні параметри. Описано ефект гігантської електрострикції.
4. Розраховано параметри колоїдних структур, індукованих неоднорідним розподілом директора на поверхнях, що обмежують нематичний рідкий кристал.
5. Визначено характер і величину взаємодії малих сферичних частинок в холестеричній комірці.

6. Отримано загальні вирази для взаємодії малих колоїдних частинок в смектичному рідкому кристалі з врахуванням його шаруватої структури.

**Практичне значення одержаних результатів.** Робота носить теоретичний характер. Отримані в ній результати можуть бути використані як основа для подальших теоретичних та експериментальних досліджень обмежених рідкокристалічних колоїдних систем. Всі теоретичні передбачення, висловлені в дисертації, підлягають експериментальній перевірці.

**Особистий внесок здобувача.** Результати, що виносяться на захист, отримані автором самостійно. У дослідженнях, виконаних в співавторстві, дисертант брав участь в постановці задач та обговоренні результатів. У роботі [1] автору належить ідея знаходження зв'язку між пружними мультипольними моментами та симетрією поля директора поблизу колоїдної частинки та відповідні аналітичні розрахунки. У роботі [2] здобувачем виконані аналітичні розрахунки, що дозволили передбачити ефект керованого притягання між пружними диполями в зовнішньому електричному полі. У роботах [3, 4] дисертантом розраховані параметри одно-, дво- та тривимірних колоїдних структур. В роботі [3] автору також належить пояснення ефекту гігантської електрострикції. В роботах [5, 6] здобувачем виконані всі аналітичні та чисельні розрахунки.

**Апробація результатів дисертації.** Основні результати роботи доповідалися на “Planer-Smoluchowski Soft Matter Workshop on Liquid Crystal Colloids” (Lviv, Ukraine, October 5-7, 2011), International conference of young scientists “Modern Problems of Theoretical Physics” (Kiev, Ukraine, December 21-23, 2011), Young scientists conference “Modern Problems of Theoretical Physics” (Kyiv, Ukraine, October 23-26, 2012), XIII Всеукраїнська школа-семинар зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини (Львів, Україна, 5-7 червня, 2013), Young scientists conference “Modern Problems of Theoretical Physics” (Kyiv, Ukraine, December 24-27, 2013), “Боголюбівські читання 2013” (Київ, 5-6 листопада, 2013), на семінарах Nanosystem Research Institute (National Institute of Advanced Industrial Science and Technology, Japan), на семінарах відділу синергетики ІТФ НАНУ та відділу теоретичної фізики Інституту фізики НАН України.

**Публікації.** Результати дисертації опубліковані в 6 статтях [1–6] в реферованих наукових журналах і додатково висвітлені в 5 збірниках тез конференцій [7–11].

**Структура дисертації.** Робота складається зі вступу, 7 розділів, висновків, списку використаних джерел зі 104 найменувань та 1 додатку. Дисертація викладена на 137 сторінках машинописного тексту із врахуванням 45 рисунків і 3 таблиць.

## ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У **вступі** обґрунтовано актуальність обраної теми, сформульовано мету і задачі дослідження, зазначено наукову новизну отриманих результатів.

В **першому розділі** аналізуються основні аналітичні підходи до описання взаємодій між колоїдними частинками в рідких кристалах. Попри деякі відмінності всі вони ґрунтуються на формальній аналогії між малими деформаціями поля нематичного директора та електростатичним потенціалом, створеним системою зарядів на великих відстанях від неї. В результаті, колоїдна частинка скінченних розмірів може бути представлена певним точковим джерелом деформацій рідкого кристалу, що описуються мультипольним розкладом. Характеристики такого ефективного джерела називаються пружними мультипольними моментами. Вводиться також важливе в подальшому поняття шуби як уявної поверхні, яка оточує частинку, містить всередині всі топологічні дефекти та нелінійні деформації і має таку ж симетрію, що й реальне поле директора поблизу поверхні частинки. Всюди за межами шуби відхилення директора від основного стану є малими.

**Другий розділ** присвячений побудові загального методу описання пружних взаємодій між колоїдними частинками довільної форми та розміру в обмежених нематичних рідких кристалах. Відправною точкою є запропонований в [1\*] ефективний функціонал вільної енергії, який в дисертації узагальнюється до

$$F_{\text{eff}} = K \int d\mathbf{x} \left[ \frac{(\nabla n_\mu \cdot \nabla n_\mu)^2}{2} - 4\pi q_\mu(\mathbf{x})n_\mu - 4\pi p_\mu^\alpha(\mathbf{x})\partial_\alpha n_\mu - 4\pi Q_\mu^{\alpha\beta}(\mathbf{x})\partial_\alpha \partial_\beta n_\mu \right], \quad (1)$$

де  $K$  – пружна константа (в одноконстантному наближенні),  $n_\mu$  – малі відхилення директора від основного стану  $\mathbf{n}_0 = (0, 0, 1)$ ,  $\mu$  пробігає значення  $x$  та  $y$ , а  $\alpha$  і  $\beta$  – значення  $x, y, z$  (за грецькими індексами, що повторюються, ведеться підсумовування) і, нарешті,  $q_\mu(\mathbf{x}) = q_\mu \delta(\mathbf{x})$ ,  $p_\mu^\alpha(\mathbf{x}) = p_\mu^\alpha \delta(\mathbf{x})$ ,  $Q_\mu^{\alpha\beta}(\mathbf{x}) = Q_\mu^{\alpha\beta} \delta(\mathbf{x})$  є густинами пружних монопольного, дипольного та квадрупольного моментів, відповідно. Походження таких термінів стає очевидним з рівнянь Ейлера-Лагранжа для функціоналу (1)

$$\Delta n_\mu = -4\pi q_\mu(\mathbf{x}) + 4\pi [\partial_\alpha p_\mu^\alpha(\mathbf{x}) - \partial_\alpha \partial_\beta Q_\mu^{\alpha\beta}(\mathbf{x})], \quad (2)$$

які водночас є рівняннями Пуассона. Їхні розв'язки можуть бути знайдені за допомогою теореми Гріна:

$$n_\mu = \int_V d\mathbf{x}' G_\mu(\mathbf{x}, \mathbf{x}') [q_\mu(\mathbf{x}') - \partial'_\alpha p_\mu^\alpha(\mathbf{x}') - \partial'_\alpha \partial'_\beta Q_\mu^{\alpha\beta}(\mathbf{x}')], \quad (3)$$

де  $G_\mu(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$  є відповідними функціями Гріна:  $\Delta G_\mu(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = -4\pi\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$  для всіх  $\mathbf{x}, \mathbf{x}'$  в об'ємі  $V$ , обмеженому поверхнею  $\Sigma$ , і  $G_\mu(\mathbf{x}, \mathbf{s}) = 0$  для всіх  $\mathbf{s} \in \Sigma$ . Тоді, підставивши (3) в (1) і врахувавши, що в силу лінійності рівнянь (2), для системи  $N$  частинок справедливим є принцип суперпозиції деформацій, отримаємо енергію колоїдної системи у вигляді суми одно- та дво- частинкових енергій

$$F_{\text{eff}} = \sum_{i=1}^N U^i(\mathbf{x}_i) + \sum_{i=1}^N \sum_{j<i}^N U^{ij}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j). \quad (4)$$

Останні, в свою чергу, є сумами монополь-монопольної, монополь-дипольної, монополь-квадрупольної, диполь-дипольної, диполь-квадрупольної і квадруполь-квадрупольної взаємодій,  $U^{ij} = U_{\text{qq}} + U_{\text{qd}} + U_{\text{qQ}} + U_{\text{dd}} + U_{\text{dQ}} + U_{\text{QQ}}$ , де

$$\begin{aligned} U_{\text{qq}} &= -4\pi K q_{\mu,i} q_{\mu,j} G_\mu(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j), \\ U_{\text{qd}} &= -4\pi K \{ q_{\mu,i} p_{\mu,j}^\alpha \partial'_\alpha G_\mu(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}'_j) + q_{\mu,j} p_{\mu,i}^\alpha \partial_\alpha G_\mu(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}'_j) \}, \\ U_{\text{dd}} &= -4\pi K p_{\mu,i}^\alpha p_{\mu,j}^\beta \partial_\alpha \partial'_\beta G_\mu(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}'_j) \quad \text{і т. п.} \end{aligned} \quad (5)$$

Вирази (5) описують взаємодії між колоїдними частинками в термінах їхніх пружних мультипольних моментів і відповідних похідних від функцій Гріна, що визначаються геометрією поверхні  $\Sigma$ , яка оточує рідкий кристал.

Мультипольні моменти  $q_\mu, p_\mu^\alpha, Q_\mu^{\alpha\beta}$  є ефективними характеристиками частинки, що визначають поле директора в області малих деформацій. Інакше кажучи, всюди за межами шуби. Самі ж моменти визначаються поведінкою директора поблизу поверхні частинки, а відтак є практично однаковими як в обмежених, так і в необмежених системах. Тому, підставивши директор (3) з  $G_x = G_y = 1/|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|$  в точний одночастинковий функціонал

$$F = \frac{K}{2} \int d\mathbf{x} (\nabla n_\mu \cdot \nabla n_\mu)^2 + \oint ds W(\mathbf{s}) [\mathbf{n}(\mathbf{s}) \cdot \boldsymbol{\nu}(\mathbf{s})]^2, \quad (6)$$

в якому  $W$  – константа зчеплення, а  $\boldsymbol{\nu}$  – нормаль до поверхні частинки в точці  $\mathbf{s}$ , отримаємо  $F$  як функцію мультипольних моментів. З умови її мінімуму випливає система лінійних алгебраїчних рівнянь  $\mathbf{A}\mathbf{m} = -\mathbf{c}$  для знаходження мультипольних моментів, представлених тут вектор-стовпчиком  $\mathbf{m}$ . Вектор-стовпчик  $\mathbf{c}$  визначається поверхневим інтегралом з (6), а значить, симетрією шуби. Матриця  $\mathbf{A}$  задається об'ємною частиною (6). Вона завжди може бути приведена до блочно-діагонального вигляду  $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_{nh} & 0 \\ 0 & \mathbf{A}_n \end{pmatrix}$  шляхом перестановки рядків і стовпчиків і є позитивно визначеною,  $\det \mathbf{A} =$

$\det \mathbf{A}_{nh} \cdot \det \mathbf{A}_h > 0$ . При цьому  $\mathbf{A}_{nh}$  задає неоднорідну,  $\mathbf{A}_h$  – незалежну однорідну підсистему рівнянь, яка має ненульовий визначник і, як наслідок, лише тривіальний розв'язок. Таким чином, якщо деякий елемент стовпчика вільних членів є нульовим, то нульовим є і відповідний йому мультиполь. А відтак, ненульовими є лише ті моменти, які дозволені симетрією директора в околі колоїдної частинки, тобто, симетрією шуби. За відсутності топологічних дефектів остання співпадає з симетрією самої частинки, а при їхній наявності – може бути легко встановлена експериментально. Таким чином, запропонований метод дозволяє визначити характер ефективної взаємодії між колоїдними частинками довільної форми та розміру в довільним чином обмеженому нематичному рідкому кристалі.

В **третьому розділі** вивчається вплив зовнішнього електричного або магнітного поля на взаємодію аксіально-симетричних частинок в нематичній комірці – в нематику, обмеженому двома паралельними площинами розділеними відстанню  $L$ . Для цього ефективний функціонал (1) має бути доповнений доданком, що описує взаємодію рідкого кристалу з полем,

$$F_{\text{eff}}^{\text{field}} = F_{\text{eff}} - \int dx \frac{k^2}{2} (\mathbf{e} \cdot \mathbf{n})^2, \quad (7)$$

де  $k^2 = (4\pi)^{-1} \Delta \varepsilon E^2$ , якщо маємо справу з електричним полем, або  $k^2 = \Delta \chi H^2$ , якщо з магнітним;  $\Delta \varepsilon = \varepsilon_{\parallel} - \varepsilon_{\perp}$  і  $\Delta \chi = \chi_{\parallel} - \chi_{\perp}$  – анізотропія діелектричної та магнітної проникності, відповідно;  $\mathbf{e} = \mathbf{E}/E$  ( $\mathbf{e} = \mathbf{H}/H$ ) – орт поля і  $\mathbf{n} = (n_x, n_y, 1)$  – директор. Залежно від знаку  $\Delta \varepsilon$  (далі розглядаємо лише електричне поле), крайових умов на стінках комірки та взаємної орієнтації  $\mathbf{e}$  і  $\mathbf{n}$ , поле по-різному впливає на взаємодію і приводить до появи низки ефектів. Серед яких найбільш практично значимим є кероване притягання між частинками, поміщеними в комірku з нормальною (гомеотропною) орієнтацією директора на стінках. При  $E = 0$  взаємодія між частинками, розташованими посередині такої комірки, є ізотропною і повністю відштовхувальною. Зовнішнє поле, прикладене паралельно до стінок, порушує симетрію взаємодії та індукє зони притягання, які можуть бути локалізовані або вздовж поля, якщо  $\Delta \varepsilon < 0$ , або перпендикулярно до нього, якщо  $\Delta \varepsilon > 0$ . При цьому рівноважна відстань між частинками  $\rho_0(E)$  залежить від напруженості поля  $E$ : чим більше  $E$ , тим менше  $\rho_0$  (див. Рис. 1). В нематику з негативною анізотропією діелектричної проникності  $\rho_0(E)$  може бути як завгодно малою (звичайно, слід мати на увазі природне обмеження, пов'язане зі скінченністю розмірів частинок, а також можливий вплив нелінійних ефектів на малих міжчастинкових відстанях). Якщо ж  $\Delta \varepsilon > 0$ , напруженість поля не може перевищувати порогового значення  $E_t = \pi/L\sqrt{4\pi K/|\Delta \varepsilon|}$  для переходу Фредерікса. Це обмежує рівноважну відстань знизу: тепер  $\rho_0 \gtrsim$



$0.8 L$  для диполів, і  $\rho_0 \gtrsim 4.1 L$  для пружних квадруполів (Рис. 1). Така залежність дозволяє керувати положеннями колоїдних частинок за допомогою зовнішнього електричного або магнітного поля.

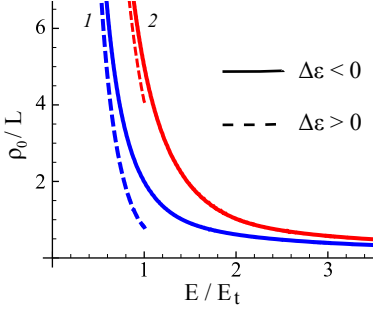


Рис. 1 Рівноважна відстань між дипольними (лінії 1) і квадрупольними (лінії 2) частинками в гомеотропній нематичній комірці як функція напруженості однорідного електричного поля паралельного підкладкам.

**Четвертий розділ** присвячено пружним мультипольним моментам вищих, порівняно з квадрупольним, порядків. Результати попередніх розділів отримані в наближенні малих відхилень  $|n_\mu| \ll 1$ ,  $\mu = \{x, y\}$ , директора від його основного стану  $\mathbf{n}_0 = (0, 0, 1)$ . За таких умов  $\mathbf{n} \approx (n_x, n_y, 1)$ . Енергія деформацій при цьому може бути представлена в гармонічній формі

$$F_{\text{har}} = \frac{K}{2} \int d\mathbf{x} (\nabla n_\mu \cdot \nabla n_\mu)^2, \quad (8)$$

з якої випливає, що  $\Delta n_\mu = 0$ . Ангармонічна поправка до  $F_{\text{har}}$ , пов'язана з тим, що за означенням  $\mathbf{n}^2 \equiv 1$ , а тому  $n_z^2 = 1 - (n_x^2 + n_y^2) = 1 - n_\perp^2 \neq 1$ , визначається функціоналом

$$F_{\text{anhar}} = \frac{K}{2} \int d\mathbf{x} (\nabla n_z)^2 \approx \frac{K}{8} \int d\mathbf{x} (\nabla n_\perp^2)^2,$$

з якого тепер  $\Delta n_\mu + \frac{1}{2} n_\mu \Delta n_\perp^2 = 0$ . Інакше кажучи, якщо основний вклад в  $n_\mu$  дає дипольний доданок, то ангармонічна поправка веде себе як  $r_\mu/r^7$ . А тому в рамках гармонічного наближення мультипольний розклад для частинки дипольної симетрії повинен містити доданки до  $1/r^5$  включно.

Як приклад, розглядається сферична частинка з точковим топологічним дефектом-компаньйоном (так званий гіперболічний їжак). Симетрія такої конфігурації дозволяє дипольний, квадрупольний, октупольний та 16-польний пружні моменти. Їхні величини знаходимо, апроксимуючи експериментальні дані [3\*]. Зазначимо одразу, що врахування 16-поля посилює розбіжності між теорією та експериментом, тому покладаємо його нульовим. Вважаючи крім того шуби частинок абсолютно твердими сфероїдами, розраховуємо параметри одно-, дво- та тривимірних колоїдних структур шля-

хом мінімізації енергії міжчастинкових взаємодій. Отримані параметри добре узгоджуються з вимірними експериментально. Повторивши ці ж дії з врахуванням лише дипольного та квадрупольного моментів, отримаємо результати далекі від реальності. Це дозволяє стверджувати, що важлива роль в процесах утворення колоїдних структур належить мультиполям високих порядків.

В цьому ж розділі пропонується теоретичне описання відкритого нещодавно ефекту гігантської електрострикції.

У **п'ятому розділі** розглядаються аксіально-симетричні колоїдні частинки в нематичній комірці з неоднорідними крайовими умовами. Мається на увазі, що в деяких областях на поверхні  $\Sigma$  відхилення директора  $n_\mu$ , де  $\mu = \{x, y\}$ , від його основного стану  $\mathbf{n}_0 = (0, 0, 1)$  є ненульовими. Якщо  $n_\mu$  при цьому зберігають свою малість, то ефективний функціонал (1) не змінюється. Але самі відхилення визначаються тепер наступним виразом:

$$n_\mu(\mathbf{x}) = \int_V d\mathbf{x}' G_\mu(\mathbf{x}, \mathbf{x}') [-\partial'_\mu P(\mathbf{x}') + \partial'_z \partial'_\mu C(\mathbf{x}')] - \frac{1}{4\pi} \oint_\Sigma ds' n_\mu(s') \frac{\partial G_\mu}{\partial \mathbf{n}'}(\mathbf{x}, s'). \quad (9)$$

Тут  $\Delta G_\mu(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = -4\pi\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$  для всіх  $\mathbf{x}, \mathbf{x}' \in V$ ,  $G_\mu(\mathbf{x}, \mathbf{s}) = 0$  для всіх  $\mathbf{s} \in \Sigma$ , а  $\mathbf{n}'$  є зовнішньою нормаллю до  $\Sigma$ . Поверхневий інтеграл в (9) не містить мультипольних моментів. Тому він дає вклад лише в одностинковій енергії  $U^i$ , які внаслідок цього стають функціями трьох координат частинки,  $U^i = U^i(x, y, z)$ , і за певних умов можуть домінувати над двочастинковими енергіями  $U^{ij}$ . В результаті, в об'ємі нематика можуть існувати колоїдні структури, стабільність яких забезпечується не потенціалами парних взаємодій, як в розділі 5, а енергією взаємодії окремої частинки з поверхнями, що обмежують рідкий кристал.

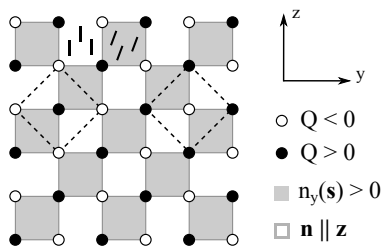


Рис. 2 Двовимірна структура, утворена квадрупольними частинками (білими або чорними), в планарній нематичній комірці з “шахівницями” на обох підкладках. Штриховими лініями зображено відповідні елементарні комірки.

Так, наприклад, в звичайній комірці з однорідною тангенціальною (планарною) орієнтацією директора на стінках частинки квадрупольної симетрії утворюють досить щільно упаковану двовимірну ґратку з елементарною коміркою у вигляді паралелограма. Якщо ж на стінки нанесено “шахівницю”

неоднорідних крайових умов, квадруполі формуватимуть квадратну ґратку з як завгодно великою сталою (Рис. 2).

В шостому розділі розглядаються взаємодії в обмежених холестериках. Малі деформації їхнього директора  $\mathbf{n}$  описуються полями  $u(\mathbf{x})$  і  $v(\mathbf{x})$  такими, що  $\mathbf{n} = (\cos qz - u \sin qz, \sin qz + u \cos qz, v)$ , де  $q = 2\pi/p$  – хвильове число холестеричної спіралі з кроком  $p$ . Енергія об'єму холестерика визначається функціоналом

$$F_{\text{bulk}} = \frac{K}{2} \int d\mathbf{x} [(\nabla v)^2 + (\nabla u)^2 + q^2 v^2 + q \left( \frac{\partial u}{\partial x} v - \frac{\partial v}{\partial x} u \right) \cos qz + q \left( \frac{\partial u}{\partial y} v - \frac{\partial v}{\partial y} u \right) \sin qz], \quad (10)$$

який містить доданки типу  $\frac{\partial u}{\partial x} v$ ,  $\frac{\partial v}{\partial x} u$  тощо. В результаті, строгий розгляд  $F_{\text{bulk}}$  є досить складним. Тому ми наївно відкинемо такі доданки і знайдемо енергію міжчастинкової взаємодії. А тоді оцінимо їхній вклад у знайдений потенціал (підрозділ 6.3). Після “розділення” змінних у (10) матимемо два незалежні лінійні рівняння для знаходження  $u(\mathbf{x})$  і  $v(\mathbf{x})$ . Ці рівняння, однак, вже не є рівняннями Лапласа, як це було в нематиках. Відтак і ефективні характеристики частинки в холестериках не можуть бути знайдені з прямої електростатичної аналогії. Тому далі ми обмежимося частинками меншими за крок спіралі. Це дозволяє представити поверхневу енергію  $i$ -ї частинки  $F_{\text{surf}} = \oint ds W [\boldsymbol{\nu} \cdot \mathbf{n}]^2$  в лінеаризованому вигляді

$$F_{\text{surf}} \approx \widehat{B}_i u(\mathbf{x}_i) + \widehat{C}_i v(\mathbf{x}_i), \quad (11)$$

розвинувши директор в ряд навколо її центру мас  $\mathbf{x}_i$ . Оператори  $\widehat{B}_i$  та  $\widehat{C}_i$  визначаються формою частинки, а ними, в свою чергу, задається енергія парної взаємодії

$$U_{ij} = -\frac{1}{4\pi K} \left[ \widehat{B}_i \widehat{B}_j G_u(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) + \widehat{C}_i \widehat{C}_j G_v(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) \right]. \quad (12)$$

Тут  $\Delta G_u(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = -4\pi\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ ,  $\Delta G_v(\mathbf{x}, \mathbf{x}') - q^2 G_v(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = -4\pi\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$  і обидві функції Гріна  $G_u$  і  $G_v$  є нульовими всюди на поверхні  $\Sigma$ . В рамках зроблених припущень вираз (12) описує взаємодію двох малих (менших за крок спіралі) колоїдних частинок довільної форми в довільним чином обмеженому холестеріку.

В якості прикладу розглянуто сферичні частинки в холестеричній комірці (рідкий кристал, обмежений двома площинами нормальними до осі спіралі). Відсутність трансляційної симетрії холестеричної фази проявляє себе в складнішому, більш анізотропному аніж в нематиках характері взаємодії.

Додатковим фактором впливу при цьому є число півкроків спіралі, що вкладаються в комірку. Цікавою особливістю холестериків, яка водночас підкреслює їхню відмінність від нематиків, є неквадрупольний характер взаємодії між сферичними частинками. Так, в нематиках енергія взаємодії двох сфер змінюється з відстанню як  $U_{\text{QQ}} \propto 1/r^5$  при  $r \rightarrow 0$ . А в холестериках  $U_{\text{QQ}}$  містить крім того “повільніші” доданки типу  $\exp[-qr]/r^m$ , де  $m = \{1, 2, 3\}$ .

В підрозділі 6.3 показано, що вклад у потенціал взаємодії перехресних доданків, присутніх у вільній енергії (10), є незначним, якщо відстань між частинками перевищує відстань між стінками комірки  $L$ . На менших відстанях їхнім вкладом в загальному випадку нехтувати не можна. Однак, він є строго нульовим вздовж певних напрямків, які визначаються положеннями частинок та відношенням  $L/p$ .

**Сьомий розділ** присвячений особливостям колоїдних взаємодій в смектичних рідких кристалах. Їхні молекули формують регулярні шари товщини  $\lambda \sim 1$  nm, але в самих шарах розташовуються хаотично. Подібний позиційний квазіпорядок накладає певні обмеження на хвильові вектори  $\mathbf{q}$  можливих деформацій рідкого кристалу. Вперше на це було вказано в дослідженнях ефекту Казимира в шаруватих середовищах, де виключення з розгляду флуктуацій з довжинами хвиль меншими за розміри молекул дозволяє отримати скінченну величину відповідної сили Казимира. Ми використаємо аналогічну умову: будемо вважати, що в смектиках можуть існувати лише деформації з  $|\mathbf{q}| \leq q_0 \sim 1/\lambda$ .

Якщо амплітуда деформацій при цьому є малою, то смектичний рідкий кристал може бути повністю описаний в термінах скалярного поля  $u(\mathbf{x})$ , яке в кожній точці задає відхилення шару вздовж нормалі до нього. Об’ємна частина вільної енергії в термінах  $u(\mathbf{x})$  записується як

$$F_{\text{bulk}} = \frac{B}{2} \int d\mathbf{x} [(\nabla_z u)^2 + \lambda^2 (\nabla_{\perp}^2 u)^2], \quad (13)$$

де  $B$  – модуль стиснення,  $\nabla_{\perp}$  – оператор градієнту в площині  $xy$  (вісь  $z$  вибираємо перпендикулярною до площини шарів). Звідси стає очевидним, що пряма аналогія з електростатикою в смектиках неможлива. Через те, як і в холестериках, обмежимося малими (співвимірними з  $\lambda$ ) частинками. Тоді знову можемо лінеаризувати поверхневу частину вільної енергії, розвинувши директор  $\mathbf{n} = (-\nabla_x u, -\nabla_y u, 1)$  в ряд навколо центру  $\mathbf{x}_i$   $i$ -ї частинки,

$$F_{\text{surf}} = - \sum_{i=1}^N \hat{a}_i \nabla_{\perp} u(\mathbf{x}_i). \quad (14)$$

Явний вигляд оператора  $\hat{a}_i$  визначається формою  $i$ -ї частинки. Розв’язавши тепер рівняння Ейлера-Лагранжа для функціоналу  $F_{\text{bulk}} + F_{\text{surf}}$ , задані вираза-

ми (13) і (14), та, підставивши в нього знайдений розв'язок, отримаємо енергію парної взаємодії між малими частинками довільної форми

$$U_{ij} = \frac{2}{\pi^2 B} \widehat{a}_i \widehat{a}_j \left[ -\frac{2}{q_0} \cos q_0 z + iz E_1(iq_0 z) - iz E_1(-iq_0 z) \right] \times \\ \times \left[ 2 \frac{q_0^2}{r_{\perp}^2} J_2(q_0 r_{\perp}) - \frac{q_0^3}{r_{\perp}} J_3(q_0 r_{\perp}) \right], \quad (15)$$

де  $z$  – відстань між частинками вздовж нормалі до шарів, а  $r_{\perp}$  – в їхній площині;  $E_1(x) = \int_x^{\infty} dt e^{-t}/t$  – інтегральна показникова функція, а  $J_2$  і  $J_3$  позначають відповідні функції Бесселя. Характерними особливостями потенціалу (15) є немонотонна осциляційна поведінка та скінченні значення енергії у всьому діапазоні відстаней між частинками. Жодна з цих властивостей не була представлена у попередніх дослідженнях, які враховували деформації з як завгодно малими довжинами хвиль та давали нефізичні результати при  $z = 0$ .

У **висновках** коротко підсумовуються головні результати дисертації.

**Додаток** містить похідні від функцій Гріна для холестеричної комірки.

## ВИСНОВКИ

1. Запропоновано загальний метод теоретичного описання ефективної пружної взаємодії між колоїдними частинками довільної форми, розміру та типу зчеплення в обмежених нематичних рідких кристалах. Характер та величина взаємодії визначається деякими ефективними характеристиками частинок – пружними мультипольними моментами. Встановлено зв'язок останніх із симетрією поля директора поблизу поверхні колоїдної частинки.
2. Передбачено появу керованого анізотропного притягання між аксіально-симетричними частинками в гомеотропній комірці, поміщеній в однорідне зовнішнє електричне або магнітне поле паралельне її стінкам. Цей ефект дозволяє маніпулювати колоїдними частинками, а відтак може мати практичне застосування.
3. Показано важливу роль пружних моментів вищих порядків (зокрема, октупольного) у формуванні колоїдних структур з дипольних частинок. Розраховано параметри таких структур та пояснено відкритий недавно ефект гігантської електрострикції тривимірних колоїдних кристалів.
4. Передбачено існування колоїдних структур, індукованих неоднорідним розподілом директора на поверхнях, що обмежують нематичний рідкий кристал. Їхні характеристики не залежать від особливостей потенціалу міжчастинкової взаємодії, а визначаються лише одночастинковою енергією (енергією взаємодії частинки з обмежувачими поверхнями). Це пе-

редбачення потенційно теж може бути використане для управління колоїдними частинками.

5. Встановлено характер взаємодії сферичних частинок, діаметри яких є меншими за крок спіралі, в холестеричній комірці. У потенціалі взаємодії присутні доданки неквадрупольної природи (нагадаємо, що самі частинки мають квадрупольну симетрію, і в нематиках взаємодіють як квадруполі). Цей ефект є яскравою ілюстрацією того, як зміна типу орієнтаційного порядку в рідкому кристалі може впливати на характер взаємодії між колоїдними частинками.
6. Отримано загальний вираз для енергії взаємодії малих (співвимірних з товщиною шару) частинок довільної форми в смектичному рідкому кристалі. Показано, що послідовне врахування шаруватої структури такого середовища в рамках континуального наближення приводить до принципово іншого міжчастинкового потенціалу. Його характерною особливістю є немонотонна залежність від відстані. Це вказує на можливість існування у смектиках стабільних колоїдних структур з малих частинок.

### **СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ**

1. *Tovkach O. M.* Theory of elastic interaction between arbitrary colloidal particles in confined nematic liquid crystals / O. M. Tovkach, S. B. Chernyshuk, B. I. Lev // *Phys. Rev. E.* — 2012. — Vol. 86. — P. 061703.
2. *Chernyshuk S. B.* Theory of elastic interaction between colloidal particles in a nematic cell in the presence of an external electric or magnetic field / S. B. Chernyshuk, O. M. Tovkach, B. I. Lev // *Phys. Rev. E.* — 2012. — Vol. 85. — P. 011706.
3. *Chernyshuk S. B.* Elastic octopoles and colloidal structures in nematic liquid crystals / S. B. Chernyshuk, O. M. Tovkach, B. I. Lev // *Phys. Rev. E.* — 2014. — Vol. 89. — P. 032505.
4. *Chernyshuk S. B.* Surface-induced structures in nematic liquid crystal colloids / S. B. Chernyshuk, O. M. Tovkach, B. I. Lev // *Phys. Rev. E.* — 2014. — Vol. 90. — P. 020502.
5. Interaction of small spherical particles in confined cholesteric liquid crystals / B. I. Lev, Jun-ichi Fukuda, O. M. Tovkach, S. B. Chernyshuk // *Phys. Rev. E.* — 2014. — Vol. 89. — P. 012509.
6. *Tovkach O. M.* Peculiarity of the interaction of small particles in smectic liquid crystals / O. M. Tovkach, Jun-ichi Fukuda, B. I. Lev // *Phys. Rev. E.* — 2013. — Vol. 88. — P. 052502.
7. *Chernyshuk S. B.* Theory of elastic interaction between colloidal particles in the nematic cell in the presence of an electric or magnetic field / S. B. Chernyshuk, O. M. Tovkach, B. I. Lev // *Emergent Phenomena and Functional Materials: Planer-Smoluchowski Soft Matter Workshop on Liquid*

Crystal Colloids, October 5–7: Programme & Abstracts. — Ukraine, Lviv, 2011. — P. 63.

8. *Tovkach O. M.* Theory of elastic interaction between colloidal particles in a nematic cell placed in an external field / O. M. Tovkach, S. B. Chernyshuk, B. I. Lev // Modern Problems of Theoretical Physics: III Young Scientists Conference, December 21–23: Program & Abstracts. — Ukraine, Kyiv, 2011. — P. 61.
9. *Tovkach O. M.* Elastic monopoles and external torques in nematic liquid crystal colloids / O. M. Tovkach, S. B. Chernyshuk, B. I. Lev // Modern Problems of Theoretical Physics: IV Young Scientists Conference, October 23–26: Program & Abstracts. — Ukraine, Kyiv, 2012. — P. 63.
10. *Товкач О.* Пружний октупольний момент і формування колоїдних структур в нематичних рідких кристалах / О. Товкач, С. Чернишук, Б. І. Лев // 13-та Всеукраїнська школа-семинар та конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини, 5–7 червня: збірка тез. — Україна, Львів, 2013. — С. 44.
11. *Tovkach O. M.* Peculiarity of the interaction of small particles in smectic liquid crystals / O. M. Tovkach, Jun-ichi Fukuda, B. I. Lev // Problems of Theoretical Physics: V Young Scientists Conference, December 24–27: Program & Proceedings. — Kyiv, Ukraine: 2013. — P. 44.

### СПИСОК ЦИТОВАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

- 1\*. Topological defects and interactions in nematic emulsions / T. C. Lubensky, David Petey, Nathan Currier, Holger Stark // *Phys. Rev. E.* — 1998. — Vol. 57. — Pp. 610–625.
- 2\*. *Chernyshuk S. B.* Elastic interaction between colloidal particles in confined nematic liquid crystals / S. B. Chernyshuk, B. I. Lev // *Phys. Rev. E.* — 2010. — Vol. 81. — P. 041701.
- 3\*. Measurement of Elastic Forces between Iron Colloidal Particles in a Nematic Liquid Crystal / C. M. Noël, G. Bossis, A.-M. Chaze et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2006. — Vol. 96. — P. 217801.

### АНОТАЦІЯ

**Товкач О. М. Взаємодії і формування структур в обмежених рідкокристалічних колоїдах. — На правах рукопису.**

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.02 — теоретична фізика. — Інститут теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова НАН України, Київ, 2014.

Дисертація присвячена побудові теорії ефективних пружних взаємодій в обмежених рідкокристалічних колоїдах. На основі аналогії з електростатикою пропонується загальний метод описання подібних взаємодій між ча-

стинками довільної форми та розміру в обмежених нематичних рідких кристалах. Отримані результати узагальнюються на випадок зовнішнього електричного поля. Аналізується роль вищих пружних мультиполів в процесах утворення колоїдних структур. Розглядаються також структури, індуковані неоднорідним розподілом директора на підкладках нематичної комірки. Показано, що вищий ступінь впорядкованості холестериків та смектиків приводить до потенціалів взаємодії, які суттєво відрізняються від своїх нематичних аналогів.

*Ключові слова:* рідкокристалічні колоїди, пружні взаємодії, пружні мультиполи, колоїдні структури, нематична комірка.

### АННОТАЦИЯ

**Товкач О. Н. Взаимодействия и формирование структур в ограниченных жидкокристаллических коллоидах. — На правах рукописи.**

Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 — теоретическая физика. — Институт теоретической физики им. Н. Н. Боголюбова НАН Украины, Киев, 2014.

Диссертация посвящена построению теории эффективных упругих взаимодействий в ограниченных жидкокристаллических коллоидах. На основе аналогии с электростатикой предлагается общий метод описания подобных взаимодействий между частицами произвольной формы и размера в ограниченных нематических жидких кристаллах. Полученные результаты обобщаются на случай внешнего электрического поля. Анализируется роль высших упругих мультиполей в процессах образования коллоидных структур. Рассматриваются также структуры, индуцированные неоднородным распределением директора на стенках нематической ячейки. Показано, что высшая степень упорядоченности холестериков и смектиков приводит к взаимодействиям, которые существенно отличаются от своих нематических аналогов.

*Ключевые слова:* жидкокристаллические коллоиды, упругие взаимодействия, упругие мультиполи, коллоидные структуры, нематическая ячейка.

### ABSTRACT

**Tovkach O. M. Interactions and structures formation in confined liquid crystal colloids. — Manuscript.**

Thesis for the Doctor of Philosophy degree (Candidate of Science in Physics and Mathematics) in speciality 01.04.02 — theoretical physics. — Bogolyubov Institute for Theoretical Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, 2014.

The dissertation is devoted to confined liquid crystal colloids. These systems are of considerable interest because of their unusual properties arising from a specific type of interactions between colloidal particles via the distortions they



produce in liquid crystal media. Such highly anisotropic long-range interactions never occur in usual isotropic hosts and result in various regular superstructures.

Departing from an analogy between small director distortions and the electric potential, we show that in a nematic liquid crystal a colloidal particle of finite size can be treated as some effective point-like source of the deformations. The latter obey the Laplace equation and thus allow the multipole expansion. Namely these effective particles' characteristics, coefficients of the expansion referred as elastic multipoles, determine the interactions. The manuscript establishes a link from the director's symmetry in the particle's vicinity to the corresponding multipoles. Since this symmetry is easily experimentally observable, the results we present are applicable to particles of arbitrary shapes, sizes, and anchoring strengths.

Influence of an external electric or magnetic field on the interaction of axially symmetric particles in a nematic cell is examined. Different cells and orientations of the field are considered. It is predicted, in particular, that the field parallel to the substrates of a homeotropic cell gives rise to controllable attraction between the particles. Their equilibrium positions depend on the field strength: The stronger the field, the closer the particles. In nematics with negative dielectric anisotropy  $\Delta\epsilon$ , the particles align along the field. If  $\Delta\epsilon > 0$ , they prefer the perpendicular direction.

A simple theoretical model which explains a formation of dipolar two- and three-dimensional colloidal structures in nematic liquid crystals is proposed. Colloidal particles are assumed to be effective hard spheroids interacting via their elastic dipole, quadrupole and octupole moments. It is shown that the octupole moment plays an important role in the formation of two- and three-dimensional superstructures of colloidal particles. We generalize this assumption on the case of the external electric field presence and theoretically explain a giant electrostriction effect which was discovered recently.

The existence of colloidal structures governed by surface patterns on the substrates of a nematic cell is theoretically predicted as well. These bulk structures arise from non-uniform boundary conditions for the director distortions at the confining surfaces. Characteristics of the lattices are determined by the one-particle energies and may be substantially different from those of the usual structures which are formed by the interparticle interactions. In particular, we demonstrate that quadrupole spherical particles (like spheres with boojums or Saturn-ring director configurations) form a square lattice inside a planar nematic cell with checkerboard patterns on both its plates. At the same time, in a "smooth" planar cell the beads arrange into a close-packed lattice with a parallelogram unit cell.

The elastic interaction of spherical colloidal particles immersed into a confined cholesteric liquid crystal is examined in less detail. Here we are restricted to the case of weak anchoring on the particles' surfaces. Under this assumption,

we derive a general expression for the energy of the interaction between small beads (with radii much smaller than the cholesteric pitch) suspended in the liquid crystal confined by two planes normal to the helix axis. The resulting form of the interaction energy has more complex spatial pattern and energy vs. distance dependence than that in nematic colloids. An interesting peculiarity of the interaction is the presence of the non-quadrupole terms (i.e. the terms, which do not behave as  $1/r^5$  if  $r \rightarrow 0$ ) in the interaction potential for the particles of quadrupole symmetry. This effect reflects breaking of the symmetry of the director distribution around the particle in the case of the helical ground state. The off-diagonal coupling in the bulk free energy was shown to be of minor importance at interparticle distances larger than the cell thickness. Though its impact is non-negligible at small  $r$ , it can be vanishing along some particular directions.

Finally, we investigate the peculiarity of the elastic interactions in a smectic liquid crystal. A layered structure of such a host imposes restrictions on possible distortions of its ordering. Within the continuous description only the distortions (displacements of smectic layers) with characteristic wavelengths larger than the layer spacing can exist. In fact, this constraint is identical to the natural restriction of Debye frequency in solid state systems or to the restrictions on possible fluctuations commonly used in the calculations of Casimir forces in layered media. Using this suggestion we derive the interaction potential valid for colloidal particles of arbitrary shape in a full range of interparticle distances. Its distinctive features are non-monotonic oscillating behavior and finite values in both, normal and parallel to the layers, directions. None of these peculiarities was obtained in the previous studies, which took into account the distortions with arbitrarily small wavelengths and gave improper results for the interaction potential within one molecular layer. Promisingly, the predicted interaction is sufficient for the formation of various stable superstructures of small colloidal particles. We hope they could be observed experimentally.

*Keywords:* liquid crystal colloids, elastic interactions, elastic multipoles, colloidal structures, nematic liquid crystal cell.

Товкач Олег Миколайович

Взаємодії і формування структур в обмежених рідкокристалічних колоїдах  
(Автореферат дисертації на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-  
математичних наук)

---

Зам. – 9

Формат 60 × 84/16

Обл.-вид. арк. - 1.00

Підписано до друку 06.11.2014 р.

Тираж 100 прим.

---

Поліграфічна дільниця ІТФ ім. М. М. Боголюбова НАН України,  
03680, м. Київ, вул. Метрологічна 14-б