НАУЧНЫЕ ВЕДОМОСТИ. 2004. № 3. Вып. 9.

УДК: 532.783

КЛАССИФИКАЦИЯ СОСТОЯНИЙ РАВНОВЕСИЯ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛОВ С НАРУШЕННОЙ НЕПРЕРЫВНОЙ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ СИММЕТРИЕЙ

П.В. Канцедал, М.Ю. Ковалевский*, Л.В. Логвинова [1], Л.В. Пантеенко

Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт»
61108, Харьков, Академическая,1

[1] Белгородский государственный университет
308015, Белгород, Победы 85

На основе концепции квазисредних проведена классификация состояний равновесия жидких кристаллов, симметрия которых спонтанно нарушена относительно смещений и поворотов в конфигурационном пространстве. Дано представление оператора параметра порядка жидких кристаллов в терминах полевых операторов. Сформулированы условия ненарушенной симметрии и пространственной симметрии для состояний равновесия таких конденсированных сред. Установлена связь этих условий симметрии с одноосной и двухосной структурой параметра порядка жидких кристаллов для нематического и холестерического упорядочения в случае непрерывного характера свойств симметрии состояния равновесия. В случае дискретного характера свойств симметрии состояния равновесия жидких кристаллов выяснена связь структуры генераторов ненарушенной и пространственной симметрии с жидкокристаллическим упорядочением типа смектиков.

ВВЕДЕНИЕ.

Из феноменологической теории известно, что адекватное описание термодинамики и неравновесных процессов в конденсированных средах с нарушенной симметрией требует введения в теорию дополнительных термодинамических параметров, не связанных с законами сохранения, а обусловленных физической природой термодинамической фазы. В жидкокристаллических конденсированных средах имеет место спонтанное нарушение симметрии состояния равновесия относительно поворотов и трансляций в конфигурационном пространстве. Феноменология классификации состояний равновесия конденсированных сред, основанная на подходе Гинзбурга-Ландау, требует знания свободной энергии как функции параметра порядка. Другой теоретико-групповой подход использует представление о ненарушенной симметрии вырожденного состояния равновесия как о подгруппе симметрии нормальной фазы и связан с соответствующими трансформационными свойствами параметра порядка при преобразованиях симметрии. Классификация однородных состояний в рамках обоих указанных подходов проводилась для сверхтекучего ^{3}He [1-3], характеризующегося тензорным параметром порядка. Другим важным примером вырожденных конденсированных сред являются жидкие кристаллы, которые также описываются тензорным параметром порядка. Состояние равновесия таких сред в ряде случаев неоднородно, что не позволяет непосредственно использовать теоретико-групповой подход для их классификации.

В настоящей работе предложен микроскопический подход описания жидких кристаллов, использующий концепцию квазисредних [4, 5]. Классификация состояний равновесия жидких кристаллов осуществляется, исходя из условий ненарушенной и пространственной симметрии при ненулевых значениях параметра порядка. Установлена связь этих условий симметрии с одноосной и двухосной структурами параметра порядка жидких кристаллов для нематического и холестерического упорядочения в случае непрерывного характера свойств симметрии состояния равновесия. В случае дискретного

* kovalevskiy@bsu.edu.ru

характера свойств симметрии состояния равновесия жидких кристаллов выяснена связь структуры генераторов ненарушенной и пространственной симметрии с жидкокристаллическим упорядочением типа смектиков. В рамках предложенного подхода возможно также рассмотрение других жидкокристаллических состояний, для которых имеет место дискретное нарушение симметрии состояний равновесия, соответствующее дискотикам, киральным смектикам и голубым фазам жидких кристаллов.

КВАЗИСРЕДНИЕ И ПАРАМЕТР ПОРЯДКА ЖИДКИХ КРИСТАЛЛОВ.

Теоретическим фундаментом статистической физики конденсированных сред со спонтанно нарушенной симметрией является концепция квазисредних Н.Н. Боголюбова [4], которая обобщает распределение Гиббса на вырожденные конденсированные среды. Для состояния равновесия жидких кристаллов согласно [4-6], квазисреднее физической величины в состоянии статистического равновесия с нарушенной симметрией определяется формулой

$$\langle\hat{a}(x)\rangle \equiv \lim_{\nu \to 0} \lim_{V \to \infty} Sp\hat{w}_{\nu}\hat{a}(x), \tag{2.1}$$

$$\hat{w}_{\nu} \equiv \exp(\Omega_{\nu} - Y_a\hat{\gamma}_a - \nu\hat{F}). \tag{2.2}$$

Здесь $\hat{\gamma}_a$ – аддитивные интегралы движения ($\mathbf{H}$ – гамильтониан, P_k – оператор импульса, $\hat{N}$ – оператор числа частиц), $(Y_a \equiv Y_0, Y_k, Y_4)$ – соответствующие им термодинамические параметры в лабораторной системе отсчета. В собственной системе отсчета, описываемой статистическим оператором Гиббса $\hat{w}(Y')$, в состоянии равновесия отсутствуют макроскопические потоки, т.е. $Y'_k = 0$ (термодинамические параметры в этой системе отсчета обозначены со штрихом). Термодинамический потенциал Ω_{ν} определяется условием нормировки $Sp\hat{w} = 1$. Оператор $\hat{F}$ обладает симметрией исследуемой фазы конденсированной среды и представляет собой линейный функционал оператора параметра порядка $\hat{Q}_{ik}(x)$

$$\hat{F} = \int d^3x f_{ik}(x)\hat{Q}_{ik}(x). \tag{2.3}$$

Здесь $f_{ik}(x)$ – некоторая функция координат, сопряженная оператору параметра порядка, которая задает его равновесные значения в смысле квазисредних $Q_{ik}(x) = \langle\hat{Q}_{ik}(x)\rangle$. Структура функций $f_{ik}(x)$ определяется свойствами симметрии исследуемых состояний жидких кристаллов и дает возможность ввести в рамках микроскопической теории дополнительные термодинамические параметры в распределение Гиббса. Оператор параметра порядка жидких кристаллов $\hat{Q}_{ik}(x)$ определим в терминах операторов рождения и уничтожения частицы в точке $\vec{x}$ [6]:

$$\hat{Q}_{uv}(x) \equiv \nabla_u\hat{\psi}^+(x)\nabla_v\hat{\psi}(x) + \nabla_v\psi^+(x)\nabla_u\hat{\psi}(x) - \frac{2}{3}\delta_{uv}\nabla_j\hat{\psi}^+(x)\nabla_j\hat{\psi}(x). \tag{2.4}$$

Операторы числа частиц $\hat{N}$ импульса P_i, спина $\hat{S}_i$ и орбитального момента L_i определяются формулами

$$\hat{N}=\int d^3x\hat{n}(x)\ ,\ P_i=\int d^3x\hat{\pi}_i(x),\ L_i=\int d^3x\hat{l}_i(x),$$

где соответствующие плотности $\hat{n}(x)$, $\hat{\pi}_i(x)$, $\hat{l}_i(x)$ в терминах операторов рождения и уничтожения $\hat{\psi}^+(x),\hat{\psi}(x)$ имеют вид

$$\hat{n}(x)=\hat{\psi}^+_\sigma(x)\hat{\psi}_\sigma(x),\qquad \hat{\pi}_i(x)=-\frac{i}{2}\{\hat{\psi}^+_\sigma(x)\nabla_i\hat{\psi}_\sigma(x)-\nabla_i\hat{\psi}^+_\sigma(x)\hat{\psi}_\sigma(x)\},$$

$$\hat{l}_i(x)=\frac{i}{2}\hat{\psi}^+_\sigma(x)\varepsilon_{ikl}(x_l\nabla_k-x_k\nabla_l)\hat{\psi}_\sigma(x)=\varepsilon_{ikl}x_k\hat{\pi}_l(x).$$

В силу определения (2.4), вида операторов числа частиц, импульса и орбитального момента получим операторную алгебру:

$$[\hat{N},\hat{Q}_{uv}(x)]=0,\ \ \mathrm{i}[P_k,\hat{Q}_{uv}(x)]=-\nabla_k\hat{Q}_{uv}(x), \tag{2.5}$$

$$\mathrm{i}[L_i,\hat{Q}_{uv}(x)]=-\varepsilon_{iuj}\hat{Q}_{jv}(x)-\varepsilon_{ivj}\hat{Q}_{ju}(x)-\varepsilon_{ikl}x_k\nabla_l\hat{Q}_{uv}(x).$$

Среднее значение параметра порядка $Q_{ik}(x,\hat{\rho})=Sp\hat{\rho}\hat{Q}_{ik}(x)$, где $\hat{\rho}$ – произвольный статистический оператор, обладает свойствами $Q_{uv}(x,\hat{\rho})=Q_{vu}(x,\hat{\rho})$, $Q_{uu}(x,\hat{\rho})=0$, и поэтому имеет пять независимых величин. В стандартной параметризации величина $Q_{ik}(x,\hat{\rho})$ записывается в форме

$$Q_{ik}(x,\hat{\rho})\equiv Q(x,\hat{\rho})[n_i(x,\hat{\rho})n_k(x,\hat{\rho})-\frac{1}{3}\delta_{ik}]+Q'(x,\hat{\rho})[m_i(x,\hat{\rho})m_k(x,\hat{\rho})-\frac{1}{3}\delta_{ik}]. \tag{2.6}$$

Здесь Q,Q' – модули параметра порядка, оси анизотропии $\vec{n}$ и $\vec{m}$ представляют собой единичные и взаимно ортогональные векторы (директоры): $\vec{n}^2=\vec{m}^2=1$, $\vec{n}\vec{m}=0$.

Конденсированные среды в нормальном состоянии равновесия в собственной системе отсчета характеризуются свойствами симметрии

$$[\hat{w}(Y'),P_k]=0,\qquad [\hat{w}(Y'),L_k]=0,\qquad [\hat{w}(Y'),\hat{N}]=0. \tag{2.7}$$

Эти свойства отражают трансляционную инвариантность, пространственную изотропию и фазовую инвариантность состояния равновесия нормальной фазы покоящейся конденсированной среды. Условие пространственной изотропии в (2.7) и алгебра квантовых скобок (2.5) приводят к равенству

$$\mathrm{i}Sp\left[\hat{w}(Y'),L_i\right]\hat{Q}_{uv}(x)=Q(Y')(\varepsilon_{iuj}n_jn_v+\varepsilon_{ivj}n_jn_u)+Q'(Y')(\varepsilon_{iuj}m_jm_v+\varepsilon_{ivj}m_jm_u)=0,$$

откуда ввиду отсутствия выделенных направлений в состоянии равновесия $Q(Y')=Q'(Y')=0$. Поэтому в нормальном состоянии в системе покоя среднее значение параметра порядка жидких кристаллов обращается в нуль

$$Sp\hat{w}(Y')\hat{Q}_{uv}(x)=0. \tag{2.8}$$

Обратим внимание, что в лабораторной системе отсчета, где термодинамический параметр $Y_k\neq 0$, параметр порядка отличен от нуля. С этой целью рассмотрим преобразование Галилея

$$U_{\vec{u}} = \exp(-i)u_i \int d^3 x x_i m\hat{n}(x), \qquad (2.9)$$

где m – масса частицы и $\hat{n}(x)$ – плотность числа частиц, u_i – параметр преобразования. Очевидно, имеют место соотношения

$$U_{\vec{u}} P_i U_{\vec{u}}^+ = P_i + u_i \hat{N}, \qquad U_{\vec{u}} \hat{N} U_{\vec{u}}^+ = \hat{N}, \qquad (2.10)$$

$$U_{\vec{u}} \mathbf{H} U_{\vec{u}}^+ = \mathbf{H} + P_i u_i + \frac{u^2}{2} m\hat{N}.$$

В силу определения оператора (2.4) и соотношений

$$e^{-im\vec{u}\vec{x}} \hat{\psi}^+(x) = U_{\vec{u}} \hat{\psi}^+(x) U_{\vec{u}}^+, \qquad e^{im\vec{u}\vec{x}} \hat{\psi}(x) = U_{\vec{u}} \hat{\psi}(x) U_{\vec{u}}^+$$

получим трансформационное свойство параметра порядка при преобразовании Галилея

$$U_{\vec{u}} \hat{Q}_{ik}(x) U_{\vec{u}}^+ = \hat{Q}_{ik}(x) + 2m\left(u_i P_k + u_i P_k - \frac{2}{3} u_i P_k \delta_{ik}\right) + 2m^2 \hat{N}\left(u_i u_k - \frac{1}{3} u^2 \delta_{ik}\right). \qquad (2.11)$$

Состояние равновесия в нормальной фазе описывается распределением Гиббса

$$\hat{w}(Y) \equiv \exp(\Omega - Y_a \hat{\gamma}_a). \qquad (2.12)$$

Преобразование Галилея приводит к соотношению

$$U_{\vec{u}} \hat{w}(Y) U_{\vec{u}}^+ \equiv \exp(\Omega - Y'_a \hat{\gamma}_a) = w(Y'), \qquad (2.13)$$

$$Y'_0 = Y_0, \qquad Y'_k = Y_k + Y_0 u_k, \qquad Y'_4 = Y_4 + Y_k u_k + Y_0 u^2 / 2.$$

Выбирая параметр преобразования Галилея в виде $u_k = -Y_k / Y_0$, получим $Y'_k = 0$. Замечая далее справедливость соотношений в собственной системе отсчета $Spw(Y')\hat{\pi}_k(x) = 0$, где $\hat{\pi}_k(x)$- плотность оператора импульса и $Spw(Y')\hat{Q}_{ik}(x) = 0$, получим вид равновесного значения параметра порядка в лабораторной системе отсчета

$$Sp\hat{w}(Y)\hat{Q}_{ik}(x) = 2m^2 Sp\hat{w}\hat{n}(0) \frac{Y_k^2}{Y_0^2}\left(\frac{Y_i Y_k}{\vec{Y}^2} - \frac{1}{3}\delta_{ik}\right) \neq 0. \qquad (2.14)$$

Свойства симметрии состояния равновесия в лабораторной системе отсчета имеют вид

$$[\hat{w}(Y), P_k] = 0, \qquad [\hat{w}(Y), \hat{\mathbf{L}}_k] = 0, \qquad [\hat{w}(Y), \hat{N}] = 0, \qquad (2.15)$$

где введен обобщенный оператор орбитального момента

$$\hat{\mathbf{L}}_k = \hat{L}_k + \hat{L}_k^{\vec{Y}}, \qquad \hat{L}_i^{\vec{Y}} \equiv -i\varepsilon_{ikl} Y_k \frac{\partial}{\partial Y_l}. \qquad (2.16)$$

Этот оператор действует в гильбертовом пространстве и в пространстве термодинамических функций. На векторы Y_i дифференциальный оператор действует так: $i[\hat{L}_i^Y, Y_j] = \varepsilon_{ikj} Y_k$. Соответствующие средние значения коммутаторов с операторами момента имеют вид $Sp[\hat{w}, \hat{L}_i + \hat{L}_i^Y]\hat{b}(x) = Sp\hat{w}[\hat{L}_i, \hat{b}(x)] - [\hat{L}_i^Y, Sp\hat{w}\hat{b}(x)]$ для произвольных квазилокальных операторов $\hat{b}(x)$. Согласно определению (2.16), операторы $\hat{\mathbf{L}}_i$ удовлетворяют соотношениям

$$i[\hat{\mathbf{L}}_i, \hat{\mathbf{L}}_k] = -\varepsilon_{ikl}\hat{\mathbf{L}}_l\,. \tag{2.17}$$

ОДНООСНЫЕ НЕМАТИКИ.

Рассмотрим трансляционно-инвариантные состояния равновесия жидкокристаллических конденсированных сред и установим возможные равновесные структуры параметра порядка в них. Анализ трансляционно-инвариантных подгрупп ненарушенной симметрии равновесных состояний в соответствии с [7,8] осуществим в собственной системе отсчета, исходя из соотношения

$$[\hat{w}(Y'), \hat{T}] = 0, \tag{3.1}$$

где генератор ненарушенной симметрии $\hat{T}$ представляет собой линейную комбинацию интегралов движения. Учитывая, что фазовая инвариантность в жидких кристаллах не нарушена – $[\hat{w}(Y'), \hat{N}] = 0$, имеем

$$\hat{T} \equiv a_i \hat{L}_i, \tag{3.2}$$

здесь $a_i \equiv al_i$ – действительные числовые параметры.

Унитарные преобразования $U = \exp i\hat{T}(a)$ образуют непрерывные подгруппы ненарушенных симметрий $U(\vec{a})U(\vec{a}') = U(\vec{a}''(\vec{a}, \vec{a}'))$ равновесного состояния. Согласно (3.1), (3.2) имеем $Sp\left[\hat{w}(Y'), a_i\hat{L}_i\right]\hat{Q}_{uv}(x) = 0$. Поэтому, учитывая алгебру (2.5), приходим к уравнению

$$F^{uv}_{jk} Q_{jk} = 0, \tag{3.3}$$

где $a_l(\varepsilon_{iuj}\delta_{vk} + \varepsilon_{iuv}\delta_{uk}) \equiv F^{uv}_{jk}$. Переходя в формуле (3.3) от двойного суммирования к одинарному, при котором индексы $uv; jk$ пробегают значения $\alpha, \beta : 11 \equiv 1, 12 \equiv 2, \ldots 33 \equiv 9$, получим уравнение

$$F^{\beta}_{\alpha} Q_{\alpha} = 0. \tag{3.4}$$

Легко видеть, что условие $\det\left\|F^{\beta}_{\alpha}\right\| = 0$ существования нетривиального решения $Q_{uv}(x) \neq 0$ выполняется при произвольных значениях векторного параметра a_i. В этом легко убедиться, если выписать этот детерминант в системе отсчета, в которой вектор a_i имеет компоненты $(0,0,1)$. Решение уравнения (3.3) имеет вид

$$Q_{ik}(Y', \vec{a}) = Q(Y')\left(a_i a_k - \frac{1}{3}a^2\delta_{ik}\right)\frac{1}{a^2}$$

и соответствуют случаю одноосного нематика. Аналогично рассуждая, нетрудно показать, что функция f_{uv} имеет вид

$$f_{uv}(x,t) = (l_u l_v - \frac{1}{3}\delta_{uv})\,.$$

Таким образом, рассматриваемое жидкокристаллическое состояние описывается статистическим оператором $\hat{w} = \hat{w}(Y', \vec{l})$, который зависит от термодинамических параметров и директора, причем зависимость равновесных средних от последнего аргумента сохраняется и после термодинамического предельного перехода:

$V \to \infty, v \to 0$. В лабораторной системе координат статистический оператор Гиббса $\hat{w}(Y,\vec{l}) = U_{\vec{u}}^{+}\hat{w}(Y',\vec{l})U_{\vec{u}}$ обладает свойствами симметрии

$$[\hat{w}(Y), l_k\hat{L}_k] = 0 .$$

Используя это соотношение приходим к уравнению для параметра порядка

$$a_i\left(\varepsilon_{iuj}Q_{jv} + \varepsilon_{ivj}Q_{ju} + \varepsilon_{ikl}Y_k\frac{\partial Q_{uv}}{\partial Y_l}\right) = 0 .$$

Нетрудно показать, что решение этого уравнения для равновесного значения параметра порядка в лабораторной системе отсчета имеет вид

$$Q_{ik}(Y,\vec{a}) = Q(Y)\left(a_i a_k - \frac{1}{3}a^2\delta_{ik}\right)\frac{1}{a^2} + 2m^2 n\left(u_i u_k - \frac{1}{3}u^2\delta_{ik}\right).$$

ОДНООСНЫЕ ХОЛЕСТЕРИКИ.

Исследуем случай, когда пространственная симметрия состояния равновесия имеет более сложный характер и определяется равенством

$$\hat{\mathbf{P}}_k(t) \equiv \hat{P}_k - t_{kj}\hat{L}_j , \tag{4.1}$$

здесь $\hat{\mathbf{P}}_k(t)$ – генератор пространственной симметрии, t_{ik} – с-числовая матрица, характеризующая пространственную симметрию. Генератор ненарушенной симметрии для таких неоднородных состояний также представляет собой линейную комбинацию операторов импульса и орбитального момента

$$\hat{T}(\vec{a},\vec{d}) \equiv a_i\hat{L}_i + d_i\hat{P}_i , \tag{4.2}$$

где a_i, d_i – действительные векторные параметры. Не ограничивая общности рассмотрения, полагаем, что вектор $\vec{a}$ – единичный: $\vec{a}^2 = 1$. Условие пространственной симметрии состояния равновесия

$$[\hat{w}(Y'), \hat{\mathbf{P}}_k] = 0 \tag{4.3}$$

рассматриваемых жидких кристаллов следует дополнить условием ненарушенной симметрии состояния равновесия (3.1), где теперь генератор $\hat{T}$ определяется равенством (4.2). В соответствии с этими условиями симметрии (4.2) и (4.3) запишем соотношения

$$\mathrm{i}Sp[\hat{w}, \hat{T}(\vec{a},\vec{d})]\hat{Q}_{uv}(x) = 0 , \qquad \mathrm{i}Sp[\hat{w}, \hat{P}_i(t)]\hat{Q}_{uv}(x) = 0 . \tag{4.4}$$

Откуда получим уравнения, устанавливающие равновесную структуру параметра порядка, и найдем ограничения на векторные параметры a_i, d_i генератора $\hat{T}$ и тензорный параметр t_{jk} генератора пространственной симметрии $\hat{\mathbf{P}}_k$. Условие пространственной симметрии (4.3), вид генератора $\hat{\mathbf{P}}_k$ (4.1) и алгебра (2.5) приводят к системе уравнений

$$\nabla_k Q_{uv}(x) = t_{kj}Q^j_{uv}(x), \qquad t_{kj}\varepsilon_{jsq}t_{qp}Q^p_{uv}(x) = 0 , \tag{4.5}$$

здесь введено обозначение $Q^j_{uv} \equiv \varepsilon_{ju\lambda} Q_{\lambda v}(x) + \varepsilon_{jv\lambda} Q_{\lambda u}(x)$. Второе соотношение в (4.5) является следствием требования отсутствия линейного по координате слагаемого в условии пространственной симметрии (4.4) и первого соотношения в (4.5). Условие ненарушенной симметрии в (4.4), принимая во внимание вид генератора (4.2), приводит к уравнениям

$$a_i \varepsilon_{ikl} t_{lj} Q^j_{uv}(x) = 0, \qquad \underline{a}_i Q^i_{uv}(x) = 0, \tag{4.6}$$

где $\underline{a}_i \equiv a_i + d_j t_{ji}$. Дополнительные связи параметров генераторов симметрии, введенных соотношениями (4.1), (4.2), установим, используя тождество Якоби. Для операторов $\hat{w}, \hat{T}, \hat{\hat{\mathbf{P}}}$, принимая во внимание свойства симметрии (3.1), (4.3), приходим к равенству $Sp[\hat{w},[\hat{T},\hat{\mathbf{P}}_k]]\hat{Q}_{uv}(x) = 0$. Откуда, учитывая (4.1),(4.2),(2.5), получаем соотношения

$$a_i t_{kj} \varepsilon_{ij\lambda} \varepsilon_{\lambda st} t_{tp} Q^p_{uv}(x) = 0, \qquad a_i t_{kj} \varepsilon_{ijp} Q^p_{uv}(x) = 0. \tag{4.7}$$

Используя далее тождество Якоби для операторов $\hat{w}, \hat{\mathbf{P}}_i, \hat{\mathbf{P}}_k$ и учитывая свойство пространственной симметрии (4.3), приходим к равенству $Sp[\hat{w},[\hat{\mathbf{P}}_i,\hat{\mathbf{P}}_k]]\hat{Q}_{uv}(x) = 0$. Отсюда следуют уравнения

$$t_{i\lambda} t_{kj} \varepsilon_{\lambda jq} \varepsilon_{qst} t_{t\sigma} Q^\sigma_{uv}(x) = 0, \qquad t_{i\lambda} t_{kj} \varepsilon_{\lambda jq} Q^q_{uv}(x) = 0. \tag{4.8}$$

Система уравнений (4.5)-(4.8) полностью определяет допустимую структуру параметров генератора симметрии и вид параметра порядка. Покажем, что решение системы уравнений (4.5)-(4.8) может быть представлено в виде

$$Q_{ik}(x) = Q(Y)\left\{\left(m_i \cos\varphi(x) + n_i \sin\varphi(x)\right)\left(m_k \cos\varphi(x) + n_k \sin\varphi(x)\right) - \frac{1}{3}\delta_{ik}\right\}. \tag{4.9}$$

Действительно, если подставить выражение для параметра порядка (4.9) в уравнения (4.5), то эти уравнения выполняются тождественно. Далее, первое соотношение (4.6) приводит при $\vec{a} \parallel \vec{l}$ к равенству $t = -1/\overline{dl}$. Аналогично можно показать, что и остальные уравнения в (4.7) выполняются при этих же условиях. В рассматриваемом случае неоднородная структура параметра порядка описывает холестерическое состояние и характеризуется функцией $\varphi(x) = \varphi - \vec{t}\vec{x}$, где вектор холестерической спирали $\vec{t}$ направлен по оси $\vec{l} \equiv \vec{m} \times \vec{n}$, величина $2\pi/t$ имеет физический смысл шага этой спирали. Матрица t_{ik}, задающая генератор пространственной симметрии (4.1), имеет вид $t_{ik} = t l_i l_k$. Решение подобного вида для параметра порядка ранее получалось (см., например, [9]) из условия минимума модельного выражения энергии как функции поля директора.

ДВУХОСНЫЕ НЕМАТИКИ.

Рассмотрим однородные состояния жидких кристаллов, генератор ненарушенной симметрии которых имеет вид

$$\hat{T}(\vec{a},\vec{m},\vec{n}) \equiv a_i \hat{\mathbf{L}}_i(\vec{m},\vec{n}). \tag{5.1}$$

Здесь обобщенный оператор орбитального момента в собственной системе отсчета определяется равенствами

$$\hat{\mathbf{L}}_i(\vec{m},\vec{n}) \equiv \hat{L}_i + \hat{L}_i^{\vec{m}} + \hat{L}_i^{\vec{n}}, \tag{5.2}$$
$$\hat{L}_i^{\vec{m}} \equiv -\mathrm{i}\varepsilon_{ikl} m_k \frac{\partial}{\partial m_l}, \qquad \hat{L}_i^{\vec{n}} \equiv -\mathrm{i}\varepsilon_{ikl} n_k \frac{\partial}{\partial m_l}.$$

Здесь векторы $\vec{n}$ и $\vec{m}$ единичны и ортогональны $\vec{n}\vec{m}=0$. В силу определения (5.2) имеют место перестановочные соотношения

$$\mathrm{i}[\hat{\mathbf{L}}_i(\vec{m},\vec{n}),\hat{\mathbf{L}}_k(\vec{m},\vec{n})] = -\varepsilon_{ikl}\hat{\mathbf{L}}_l(\vec{m},\vec{n}). \tag{5.3}$$

Кроме того, для производных, связанных с единичными векторами $\vec{m}$ и $\vec{n}$, справедливы соотношения

$$\frac{\partial n_i}{\partial n_k} = \frac{\partial m_i}{\partial m_k} \equiv \delta_{ik} - n_i n_k - m_i m_k = l_i l_k. \tag{5.4}$$

Используя условие симметрии (3.1) с генератором вида (5.1) (5.2), приходим к уравнению

$$a_i\left(\varepsilon_{iuj}Q_{jv} + \varepsilon_{ivj}Q_{ju} + \varepsilon_{ikl}n_k\frac{\partial Q_{uv}}{\partial n_l} + \varepsilon_{ikl}m_k\frac{\partial Q_{uv}}{\partial m_l}\right) = 0. \tag{5.5}$$

Решение этого уравнения ищем в виде

$$Q_{uv} \equiv Q_1[e_u^{(1)}e_v^{(1)} - \frac{1}{3}\delta_{uv}] + Q_2[e_u^{(2)}e_v^{(2)} - \frac{1}{3}\delta_{uv}],$$

где единичные векторы $\vec{e}^{(1)}$ и $\vec{e}^{(2)}$ определены равенствами

$$\vec{e}^{(1)} \equiv \vec{m}\cos\varphi + \vec{n}\sin\varphi, \qquad \vec{e}^{(2)} \equiv -\vec{m}\sin\varphi + \vec{n}\cos\varphi.$$

Учитывая далее формулы (5.4), уравнение (5.5) преобразуется к виду

$$a_i\varepsilon_{iuj}\left[Q_1\left(e_j^{(1)}e_v^{(1)} - \frac{1}{3}\delta_{jv}\right) + Q_2\left(e_j^{(1)}e_v^{(1)} - \frac{1}{3}\delta_{jv}\right)\right] + a_i\varepsilon_{ivj}\left[Q_1\left(e_j^{(1)}e_u^{(1)} - \frac{1}{3}\delta_{ju}\right) + Q_2\left(e_j^{(1)}e_u^{(1)} - \frac{1}{3}\delta_{ju}\right)\right] =$$
$$= \vec{a}\vec{n}\left[Q_1\cos\varphi\left(l_u e_v^{(1)} + l_v e_u^{(1)}\right) - Q_2\sin\varphi\left(l_u e_v^{(2)} + l_v e_u^{(2)}\right)\right] -$$
$$-\vec{a}\vec{m}\left[Q_1\sin\varphi\left(l_u e_v^{(1)} + l_v e_u^{(1)}\right) + Q_2\cos\varphi\left(l_u e_v^{(2)} + l_v e_u^{(2)}\right)\right] \tag{5.6}$$

Для установления допустимых значений вектора $\vec{a}$ ищем его в виде

$$a_i = \alpha n_i + \beta m_i + \gamma l_i, \tag{5.7}$$

где числа α,β,γ связаны соотношением $\alpha^2+\beta^2+\gamma^2=1$. Подставляя (5.7) в (5.6) в результате получим равенство

$$\gamma(Q_1 - Q_2)\left(e_u^{(1)}e_v^{(2)} + e_v^{(1)}e_u^{(2)}\right) = 0.$$

Отсюда следует, что при $Q_1 \neq 0$, $Q_2 \neq 0$, $Q_1 \neq Q_2$ параметр $\gamma = 0$. Это решение описывает пространственно-однородный двухосный нематик

$$Q_{uv} = Q_1\left(e_u^{(1)}e_v^{(1)} - \frac{1}{3}\delta_{uv}\right) + Q_2\left(e_u^{(2)}e_v^{(2)} - \frac{1}{3}\delta_{uv}\right).$$

Другое решение получается из (5.6), если $Q_1 = Q_2$. В этом случае вектор $\vec{a}$ – произвольный. В силу соотношения $n_u n_v + m_v m_u + l_u l_v = \delta_{uv}$, параметр порядка приобретает вид $Q_{uv} = -Q\left(l_u l_v - \frac{1}{3}\delta_{uv}\right)$ и соответствует одноосному нематику.

ДВУХОСНЫЕ ХОЛЕСТЕРИКИ.

Рассматриваемый случай жидкокристаллического упорядочения в соответствии с формулами (4.2) (5.1) может быть характеризован генератором ненарушенной симметрии вида

$$\hat{T}\left(\vec{a},\vec{d},\vec{m},\vec{n}\right) \equiv a_i \hat{\mathbf{L}}_i\left(\vec{m},\vec{n}\right) + d_l \hat{\mathbf{P}}_l\left(t,\vec{m},\vec{n}\right). \qquad (6.1)$$

Здесь генератор обобщенного орбитального момента задан равенствами (5.1) (5.2), и генератор пространственной симметрии определяется соотношением

$$\hat{\mathbf{P}}_k\left(t,\vec{m},\vec{n}\right) \equiv \hat{P}_k - t_{kj}\hat{L}_j\left(\vec{m},\vec{n}\right). \qquad (6.2)$$

Допустимые ограничения на параметры генераторов ненарушенной и пространственной симметрии находятся из соотношений

$$\mathrm{i}Sp[\hat{w},\hat{T}(\vec{a},\vec{d},\vec{m},\vec{n})]\hat{Q}_{uv}(x) = 0, \qquad \mathrm{i}Sp[\hat{w},\hat{\mathbf{P}}_i(t,\vec{m},\vec{n})]\hat{Q}_{uv}(x) = 0. \qquad (6.3)$$

Дополнительные соотношения возникают при учете тождества Якоби для операторов $\hat{w},\hat{\mathbf{P}}_i,\hat{\mathbf{P}}_k$ и $\hat{w},\hat{T},\hat{\mathbf{P}}_k$

$$Sp[\hat{w},[\hat{T},\hat{\mathbf{P}}_k]]\hat{Q}_{uv}(x) = 0, \qquad Sp[\hat{w},[\hat{\mathbf{P}}_l,\hat{\mathbf{P}}_k]]\hat{Q}_{uv}(x) = 0. \qquad (6.4)$$

Из соотношений (6.3), учитывая алгебру (2.5), получим уравнения

$$\nabla_k Q_{uv}(x) = t_{kj} Q^j_{uv}(x), \qquad t_{kj}\varepsilon_{jsq}t_{qp}Q^p_{uv}(x) = 0, \qquad (6.5)$$

$$a_i\varepsilon_{ikl}t_{lj}Q^j_{uv}(x) = 0, \qquad \underline{a}_i Q^j_{uv}(x) = 0, \qquad (6.6)$$

где величина $Q^q_{uv}(x)$ определена равенством

$$Q^j_{uv}(x) \equiv \varepsilon_{ju\lambda}Q_{\lambda v}(x) + \varepsilon_{jv\lambda}Q_{\lambda u}(x) + \varepsilon_{jst}n_s\frac{\partial Q_{uv}(x)}{\partial n_t} + \varepsilon_{jst}m_s\frac{\partial Q_{uv}(x)}{\partial m_t}. \qquad (6.7)$$

Из тождеств Якоби приходим к уравнениям

$$a_i t_{kj}\varepsilon_{ij\lambda}\varepsilon_{\lambda st}t_{tp}Q^p_{uv}(x) = 0, \qquad a_i t_{kj}\varepsilon_{ijp}Q^p_{uv}(x) = 0,$$

$$t_{i\lambda}t_{kj}\varepsilon_{\lambda jq}\varepsilon_{qst}t_{t\sigma}Q^\sigma_{uv}(x) = 0, \qquad t_{i\lambda}t_{kj}\varepsilon_{\lambda jq}Q^q_{uv}(x) = 0. \qquad (6\ 8)$$

Поступая далее так же, как и при рассмотрении одноосного холестерика, нетрудно показать, что при $\vec{a} \parallel \vec{l}$ и $t = -1/\vec{d}\vec{l}$ уравнения (6.5)-(6.8) выполняются, а параметр порядка в состоянии равновесия приобретает вид

$$Q_{ik}(x) = Q_1\left(e^{(1)}_i(x)e^{(1)}_k(x) - \frac{1}{3}\delta_{ik}\right) + Q_1\left(e^{(2)}_i(x)e^{(2)}_k(x) - \frac{1}{3}\delta_{ik}\right),$$

где

$$e^{(1)}_i(x) = m_i\cos\varphi(x) + n_i\sin\varphi(x), \qquad e^{(2)}_i(x) = -m_i\sin\varphi(x) + n_i\cos\varphi(x)$$

– единичные и взаимно ортогональные векторы, и зависимость фазы от координаты имеет вид $\varphi(x) = \varphi - l_i x_i / d_j l_j$.

В табл. приведена итоговая таблица классификации допустимых состояний равновесия жидких кристаллов со спонтанно нарушенной непрерывной пространственной симметрией.

Таблица

Итоговая классификация

Состояние Равновесия	**Генератор Ненарушенной Симметрии $\hat{T}$**	**Генератор Пространственной Симметрии $\hat{P}_k$**	**Параметр порядка $Q_{ik}(x)$**
Нормальная Жидкость	$\hat{L}_i$	$\hat{P}_k$	0 $\vec{m},\vec{n},\vec{l}$ - ортонормированный репер
Одноосный Нематик	$n_i\hat{L}_i$	$\hat{P}_k$	$Q\left(n_i n_k - \frac{1}{3}\delta_{ik}\right)$
Одноосный Холестерик	$l_i\hat{L}_i + d_i\hat{P}_i$	$P_k + \frac{l_k}{d_j l_j} l_i\hat{L}_i$	$Q\left(e_i(x)e_k(x) - \frac{1}{3}\delta_{ik}\right)$; $e_i(x) = m_i\cos\varphi(x) + n_i\sin\varphi(x)$, $\varphi(x) = \varphi - l_i x_i / d_l l_l$
Двухосный Нематик	$(\alpha n_i + \beta m_i)\hat{\mathbf{L}}_i(\vec{m},$ $\alpha^2 + \beta^2 = 1$	$\hat{P}_k$	$Q_1\left(e_i^{(1)}e_k^{(1)} - \frac{1}{3}\delta_{ik}\right) + Q_1\left(e_i^{(2)}e_k^{(2)} - \frac{1}{3}\right.$ $e_i^{(1)} = m_i\cos\varphi + n_i\sin\varphi$, $e_i^{(2)} = -m_i\sin\varphi + n_i\cos\varphi$,
Двухосный Холестерик	$l_i\hat{\mathbf{L}}_i(m_k,n_k) + d_i\hat{\mathbf{P}}_i$	$\hat{P}_k + \frac{l_k}{d_l l_l} l_i\hat{\mathbf{L}}_i(\vec{m},\vec{n})$	$Q_1\left(e_i^{(1)}(x)e_k^{(1)}(x) - \frac{1}{3}\delta_{ik}\right) +$ $+Q_1\left(e_i^{(2)}(x)e_k^{(2)}(x) - \frac{1}{3}\delta_{ik}\right.$ $e_i^{(1)}(x) = m_i\cos\varphi(x) + n_i\sin\varphi(x)$, $e_i^{(2)}(x) = -m_i\sin\varphi(x) + n_i\cos\varphi(x)$ $\varphi(x) = \varphi - l_i x_i / d_l l_l$

7. СМЕКТИКИ.

Во всех приведенных выше примерах имело место нарушение непрерывной группы симметрии, связанной с поворотами и трансляциями в конфигурационном пространстве. В этом разделе рассмотрим случай дискретного нарушения трансляционной симметрии, что характерно для ряда жидкокристаллических состояний. К ним, в частности, относятся смектики, дискотики и голубые фазы жидких кристаллов. В этой работе мы рассмотрим только случай смектического упорядочения жидких кристаллов.

А-смектик. Для этого состояния жидких кристаллов условия пространственной симметрии имеют вид

$$[\hat{w}, l_i\hat{L}_i] = 0, \tag{7.1}$$

$$[\hat{w}, \vec{l}\times\hat{\vec{P}}] = 0, \qquad e^{i\hat{\vec{P}}\vec{l}b}\hat{w}e^{-i\hat{\vec{P}}\vec{l}b} = \hat{w}. \tag{7.2}$$

Свойства симметрии (7.1),(7.2) показывают, что вдоль оси анизотропии $\vec{l}$ имеет место периодическая кристаллическая структура, а в плоскости ортогональной к этой оси реализуется двумерное жидкое состояние конденсированной среды. Соотношение (7.1) и операторная алгебра (2.5) приводят к следующей равновесной структуре параметра порядка

$$Q_{uv}(x,Y,\vec{l},b) = Q(x,Y,\vec{l}b)(l_u l_v - \frac{1}{3}\delta_{uv}).$$

Анизотропия этого жидкокристаллического упорядочения характеризуется вектором $\vec{l}$ и совпадает со структурой параметра порядка одноосного нематика. Но в отличие от него в рассматриваемом случае возникает зависимость от пространственной координаты модуля параметра порядка. Зависимость модуля параметра порядка от координаты ищем в виде

$$Q(x,Y,\vec{l},b) = Q(\varphi(x,\vec{l},b),Y), \qquad \varphi(\vec{x},\vec{l},b) = \varphi(\vec{x}+k\vec{l}b).$$

В этом случае условие (7.2) приводит к равенствам $[\vec{l}\times\nabla\varphi]=0$, откуда

$$\varphi(x) = \varphi(0) + p\vec{l}\,\vec{x}.$$

Далее, в силу второго соотношения (7.2), получим $\varphi(\vec{x}) = \varphi(\vec{x}+b\vec{l})$. Разложим величину $\varphi(x)$ в ряд Фурье

$$\varphi(x) = \sum_k \varphi_k \exp(ikp\vec{l}\,\vec{x}) = \sum_k \varphi_k \exp(ikp\vec{l}\,(\vec{x}+b\vec{l})).$$

Следовательно, $p = 2\pi/b$, где k – целое натуральное число. Таким образом, пространственная зависимость функции $\varphi(x)$ имеет вид

$$\varphi(x) = \sum_k \varphi_k \exp(2\pi ik\vec{l}\vec{x}/b).$$

С-смектик. Условия пространственной симметрии этого вида жидких кристаллов имеют вид

$$[\hat{w}, m_i\hat{L}] = 0, \qquad [\hat{w},\vec{l}\times\hat{\vec{P}}] = 0,$$

$$e^{i\hat{\vec{P}}\vec{l}b}\hat{w}e^{-i\hat{\vec{P}}\vec{l}b} = \hat{w}, \tag{7.3}$$

где векторы $\vec{l}$ и $\vec{m}$ удовлетворяют соотношениям $\vec{l}^{\,2} = \vec{m}^2 = 1, \vec{l}\vec{m} = cos\,\theta$. У этого вида жидких кристаллов в каждой плоскости длинные оси молекул (оптическая ось $\vec{m}$) наклонены по отношению к кристаллической оси $\vec{l}$ на угол θ. Условия симметрии (7.3) приводят к следующей равновесной структуре параметра порядка

$$Q_{uv}(x,Y,\vec{l},\vec{m}) = Q_{uv}(\varphi(x),Y)\left(m_u m_v - \frac{1}{3}\delta_{uv}\right), \quad \varphi(x) = \sum_k \varphi_k \exp(2\pi ik\vec{l}\vec{x}/b).$$

Эта работа частично поддержана грантами УНТЦ (GR 14J), РФФИ (№ 03-02-17695) и INTAS (№ 00-00577).

Список литературы

1. G. Barton, M. Moore - J. Phys. C, v. 7, p. 4220, (1974).
2. F.W. Nijhoff, H.W. Capel, A. Den Breems - Physica v. 130, p. 375, (1985).
3. C. Bruder, D. Vollhardt - Phys. Rev. B, v. 34, p. 131, (1986).
4. Н.Н. Боголюбов - Препринт Д-781, Дубна, (1961).

5. Н.Н. Боголюбов (мл.) М.Ю. Ковалевский, А.М. Курбатов, С.В. Пелетминский, А.Н. Тарасов - Успехи физических наук, т. 154, с. 585, (1989).
6. М.Ю. Ковалевский, Н.Н. Чеканова - Вестник Харьковского национального университета № 541, серия физическая, вып. 4(16), с. 59, (2001).
7. V.P. Mineev - Soviet Scientific Reviews, Physics Reviews, v. 2, p. 173, (1980).
8. М.Ю. Ковалевский, С.В. Пелетминский, Н.Н. Чеканова - Теоретическая и математическая физика т. 135, № 1, с. 159, (2003).
9. В.В. Лебедев, Е.М. Кац - Динамика жидких кристаллов, Наука, 144 с., (1988).

CLASSIFICATION OF EQUILIBRIUM STATES OF LIQUID CRYSTALS WITH BROKEN CONTINUOUS SPATIAL SYMMETRY

P.V. Kanzedal, M.Y. Kovalevsky, L.V. Logvinova, L.V. Panteenko,

National centre of science "Kharkov institute of physics and technologies"
Academicheskaya, 1, Kharkov, 61108, Ukraine

Belgorod State University,
Pobedy 85, Belgorod 308015, , Russia
The classification of an equilibrium states of nematic liquid crystals is carried out on the basis of the quasiaveragyes concept. The representation of an order parameter operator for liquid crystals in the terms of field operators is given. The generalization of a requirement of the residual symmetry for nonuniform equilibrium states is formulated. The admissible requirements of a spatial symmetry in the terms of integrals of motion are found. The connection of these requirements of a symmetry with uniaxial and biaxial structure of an order parameter of liquid crystals for nematic and cholesteric ordering is established.

KEY WORDS: quasiaveragues, liquid crystals, order parameter, nematic, equilibrium, symmetry, cholesteric, smectic.