объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

3694/82

9/8-82

Р17-82-324

Н.Ангелеску, В.А.Загребнов

РЕШЕТОЧНАЯ МОДЕЛЬ ЖИДКОГО КРИСТАЛЛА С МАТРИЧНЫМ ПАРАМЕТРОМ ПОРЯДКА

Направлено в "Journal of Physics A"

1982

Основная задача теории жидких кристаллов - это построение моделей, которые при достаточно низких температурах описывают ориентационный дальний порядок /ДП/, который не сопровождается трансляционным ДП во всех направлениях. В простейшем случае такая ситуация реализуется при фазовом переходе "изотропная жидкость - нематик". Этот переход обязан, в большинстве случаев, наряду с эффектами исключенного объема притягивающему взаимодействию между длинными акиральными молекулами, из которых состоит жидкость /см. гл.1.3 в [1]/.

Феноменологическая теория жидких кристаллов, основанная на теории Ландау и континуальной теории векторного поля директора, в настоящий момент хорошо развита /см. гл.3 в [1] и [2]/. Попытки построить микроскопическую теорию, основанные на представлении о длинных акиральных молекулах как твердых стержнях восходит к Онзагеру[3]. Он обнаружил ориентационный ДП в такой системе при достаточно большой плотности стержней в приближении, соответствующем некоторому варианту теории самосогласованного поля. Дальнейшее развитие этой идеи привело к решеточным моделям жидких кристаллов /решетка частично учитывает эффекты исключенного объема/, у которых ориентация длинных осей молекул возможна лишь в направлениях, определенных векторами ближайших соседних узлов решетки /обсуждение и ссылки см. в[1], гл.2.2/. Например, в работе[4] было показано, что система твердых стержней на простой кубической решетке испытывает в приближении Бете фазовый переход в состояние с ориентационным ДП при достаточно больших плотностях. Однако строгое рассмотрение простейшей модели такого рода /мономер - димерная система/ привело к доказательству отсутствия фазового перехода[5]. В недавних работах[6,7] модель жидкого кристалла представлена как мономер - димерная система на простой кубической решетке с анизотропным притягивающим взаимодействием между димерами /молекулами, стержнями/, которое для наиболее интересного случая отлично от нуля только для колинеарных димеров. Используя свойство отражательной положительности состояний и аргументы Пайерлса, авторам удалось доказать, что в таких моделях при достаточно низких температурах действительно возникает ориентационный ДП. Доказать, что при этом отсутствует трансляционный ДП, авторам не удалось, хотя ими был приведен ряд веских аргументов в пользу того, что такое упорядочение в предложенных моделях отсутствует.

Решеточные модели нематического жидкого кристалла, предложенные в работах [4,6,7] /см. также [1], гл.2.1/, страдают по крайней мере одним недостатком: непрерывная группа симметрии /группа вращений $O(3)$/ заменена дискретной группой. Это приводит к искажению физического поведения системы и, в частности, картины флуктуаций, которая хорошо исследована для нематиков экспериментально /см.[1], гл.3/. Цель настоящей работы - предложить новую решеточную модель жидких кристаллов /для случая нематиков/, которая лишена упомянутого выше недостатка и учитывает физические особенности микроскопического взаимодействия длинных молекул.

Как было замечено Майером и Заупе[8], для жидкостей, состоящих из длинных жестких молекул, лишенных постоянного дипольного момента, фазовый переход из изотропного в нематическое состояние /длинные оси молекул спонтанно поляризуются в одном преимущественном направлении/ может являться результатом дисперсионного взаимодействия. Это взаимодействие между молекулами возникает вследствие взаимного притяжения флуктуирующих электрических мультипольных моментов. В случае центрально-симметричных акиральных /совпадающих со своим зеркальным отражением/ молекул, которые обычно образуют нематическую фазу, наиболее существенный вклад в энергию дисперсионного взаимодействия дают лишь флуктуирующие дипольные моменты. В работе [9] отмечается, что это взаимодействие, вычисленное во втором порядке теории возмущений в квантовой механике, можно представить в виде

$$V_{ij} = -a(|r_i - r_j|)\,P_2(\cos\theta_{ij}), \qquad a(r) \sim r^{-6} \quad (r \to \infty). \qquad /1/$$

Здесь r_i, r_j - радиус-векторы молекул, а θ_{ij} - угол между длинными осями d_i и d_j молекул i,j ($|d_i| = |d_j| = 1$). Если ввести матрицу

$$Q_i^{\alpha\beta} = d_i^{\alpha} d_i^{\beta} - \frac{1}{3}\delta_{\alpha\beta} \qquad (\alpha,\beta = 1,2,3), \qquad /2/$$

то взаимодействие /1/ можно представить в виде

$$V_{ij} = -\frac{2}{3}a(|r_i - r_j|)\,\mathrm{tr}(Q_i Q_j). \qquad /3/$$

Из представления /3/, в частности, следует, что матрицы являются наиболее адекватным объектом для описания состояния молекул в жидких кристаллах, поскольку дают возможность описывать квадрупольное упорядочение. Исследование взаимодействия /3/ в приближении молекулярного поля [8,9] приводит к феноменологическому описанию нематиков в терминах матричного параметра порядка $\langle Q\rangle$ /см. [1,2]/.

Микроскопическая модель жидкого кристалла, предлагаемая в настоящей работе, сводится к следующему. В качестве пространства состояний молекулы выберем пространство M_0 вещественных симметричных 3x3-матриц Q со следом $\mathrm{tr}\,Q = 0$. Группа вращений $O(3)$ действует на M_0 следующим образом: $Q \to RQR^{-1}$ ($R \in O(3)$). На M_0 задана $O(3)$-инвариантная вероятностная мера ν такая, что

$$\nu(\{0\}) = 0, \qquad \int d\nu(Q)\, e^{A\,\mathrm{tr}Q^2} < \infty, \qquad A > 0 \qquad /4/$$

/например, чтобы описать одноосные молекулы, для которых Q определяется выражением /2/, в качестве ν выбирается $O(3)$-инвариантная вероятностная мера, сосредоточенная на множестве $\{Q: \mathrm{tr}Q^2 = 2/3,\ \mathrm{tr}Q^3 = 2/9\}$/. Молекулы могут находиться лишь в узлах простой кубической решетки $\mathbf{Z}^3$. Их конфигурации задаются индикаторами $\{n_x:\ x \in \mathbf{Z}\}$, то есть функциями $\mathbf{Z}^3 \ni x \to n_x \in \{0,1\}$, а для каждого x, для которого $n_x = 1$, еще и состоянием $Q_x \in M_0$ в узле x. Взаимодействие между молекулами задается выражением /3/, а каждая молекула несет химический потенциал μ. Итак, энергия конфигурации $(n,Q) = \{(n_x, Q_x): x \in \Lambda\}$ для системы, заключенной в параллелепипед $\Lambda \subset \mathbf{Z}^3$ с периодическими условиями, определяется гамильтонианом:

$$H_\Lambda(n,Q) = -\sum_{\{x,y\}\subset\Lambda} J_{xy}\, n_x n_y\, \mathrm{tr}(Q_x Q_y) - \mu \sum_{x\in\Lambda} n_x, \qquad /5/$$

где $J_{xy} = \frac{3}{2} \sum_{\{z\in \mathbf{Z}^3:\, z = y (\mathrm{mod}\Lambda)\}} a(|x-z|)$. Соответствующее гиббсовское состояние определяется стандартным образом:

$$\langle f\rangle_\Lambda = Z_\Lambda^{-1} \sum_{\{n_x = 0,1:\, x\in\Lambda\}} \int \prod_{\{x\in\Lambda:\, n_x = 1\}} d\nu(Q_x)\, e^{-\beta H_\Lambda(n,Q)} f(n,Q), \qquad /6/$$

где Z_Λ - статистическая сумма.

От явного рассмотрения чисел заполнения $\{n_x: x\in\Lambda\}$ можно избавиться, если изменить априорную меру на M_0 следующим образом: $d\nu \to d\nu_0 = d\nu + \delta_0$, где δ_0 - единичная масса, сосредоточенная в точке $0 \in M_0$. Тогда в новых переменных $D_x = n_x Q_x$, $x\in\Lambda$, гамильтониан /5/ принимает вид

$$H_\Lambda(D) = -\sum_{\{x,y\}\subset\Lambda} J_{xy}\, \mathrm{tr}(D_x D_y) - \mu \sum_{x\in\Lambda} (1 - \delta_0(\{D_x\})). \qquad /5'/$$

<u>Предложение</u>

Пусть функция $a(|x|)$ ($x \in \mathbf{Z}^3$) имеет следующий вид: $a\cdot\delta_{|x|,1}$ либо $a\cdot|x|^{-\gamma}$ ($\gamma > 3$), где $a > 0$. Тогда существует μ_0 (<0) такое, что для $\mu > \mu_0$ найдется $\beta(\mu)$ такая, что для $\beta > \beta(\mu)$ каждая предельная точка $\langle\cdot\rangle$ гиббсовских состояний $\langle\cdot\rangle_\Lambda$ описывает ориентационный ДП*, то есть

$$\lim_{|x-y|\to\infty} \mathrm{tr}\langle D_x D_y\rangle > \mathrm{tr}\langle D_x\rangle^2 = 0. \qquad /7/$$

Доказательство этого предложения сводится, по существу, к инфракрасным оценкам, которые имеют место потому, что взаимодействие в предложенной модели обладает свойством отражательной положительности по отношению к плоскости, не содержащей узлов решетки /см. /10,11//. Поэтому ниже мы ограничимся изложением лишь главных моментов необходимых рассуждений.

Прежде всего заметим, что состояние $\langle\cdot\rangle_\Lambda$ обладает свойством

$$\langle D_x\rangle_\Lambda = 0. \qquad /8/$$

Действительно, матрица $\langle D_x\rangle_\Lambda \in M_0$ и может быть диагонализована поворотом $R \in O(3)$; с другой стороны, применяя преобразование R ко всем D_y, $y\in\Lambda$ и учитывая $O(3)$-инвариантность состояния $\langle\cdot\rangle_\Lambda$, получаем, что матрица $\langle D_x\rangle_\Lambda$ всегда имеет диагональный вид. Аналогично можно убедиться /используя преобразования, меняющие оси координат/, что матричные элементы $\langle D_x^{aa}\rangle_\Lambda$ не зависят от a. Поскольку $\mathrm{tr}\langle D\rangle = 0$, то мы получаем /8/.

Используя трансляционную инвариантность /циклические граничные условия/ модели, имеем

$$c_\Lambda \equiv |\Lambda|^{-2} \sum_{x,y\in\Lambda} \langle \mathrm{tr}(D_x D_y)\rangle_\Lambda = |\Lambda|^{-1}\, \mathrm{tr}\langle \hat{D}_0^2\rangle_\Lambda = \qquad /9/$$

$$= \mathrm{tr}\langle D_x^2\rangle_\Lambda - |\Lambda|^{-1} \sum_{\{p\in\Lambda^*:p\neq 0\}} \mathrm{tr}\langle \hat{D}_p \hat{D}_{-p}\rangle_\Lambda ,$$

где Λ^* решетка фурье-дуальная Λ, а $\hat{D}_p = |\Lambda|^{-1/2} \sum_{x\in\Lambda} e^{-ip\cdot x} D_x$.

Для доказательства /7/ достаточно показать, что $\liminf_{\Lambda\nearrow Z^3} c_\Lambda > 0$.

Это можно сделать, устанавливая подходящие нижнюю и верхнюю границы для первого и, соответственно, второго члена в правой части /9/.

Верхняя граница на $\mathrm{tr}\langle \hat{D}_p \hat{D}_{-p}\rangle_\Lambda$ для $p\neq 0$ получается стандартным путем из отражательной положительности /11/:

---

*Подчеркнем, что /7/ не означает наличия трансляционного ДП. Трансляционный ДП означает на самом деле, что

$$\lim_{|x-y|\to\infty} [\langle n_x n_y\rangle - \langle n_x\rangle\langle n_y\rangle] > 0.$$

$$\langle \mathrm{tr}(\hat{D}_p \hat{D}_{-p})\rangle_\Lambda \le \mathrm{const}/[\beta(\hat{J}(0) - \hat{J}(p))], \qquad /10/$$

где $\hat{J}$ - фурье-преобразование функции J. Наши предположения о взаимодействии обеспечивают мажорирование правой части /10/ интегрируемой функцией. Следовательно, суммирование правой части /10/ по Λ^* с последующим делением на $|\Lambda|$ дает величину, которая сходится при $\Lambda\nearrow Z^3$ к $\mathrm{const}\cdot\beta^{-1}\int d^3p\,(\hat{a}(0) - \hat{a}(p))^{-1}$.

Нижняя граница на $\langle \mathrm{tr} D_x^2\rangle_\Lambda$ получается с помощью шахматных оценок /см. /11// следующим образом. Пусть $\chi_x^{(\epsilon)}$ - индикатор события $\{\mathrm{tr} D_x^2 < \epsilon\}$, тогда

$$\langle \mathrm{tr} D_x^2\rangle_\Lambda \ge \epsilon(1 - \langle\chi_x^{(\epsilon)}\rangle_\Lambda). \qquad /11/$$

С помощью шахматных оценок /11/ получаем

$$\langle\chi_x^{(\epsilon)}\rangle_\Lambda \le [\langle \prod_{y\in\Lambda} \chi_y^{(\epsilon)}\rangle_\Lambda]^{1/|\Lambda|},$$

поэтому для получения результата необходимо оценить сверху вероятность того, что $\mathrm{tr} D_y^2 < \epsilon$ для всех узлов $y\in\Lambda$. Энергия такой конфигурации мажорируется с помощью неравенства

$$|\mathrm{tr}(D_x D_y)| \le (\mathrm{tr} D_x^2)^{1/2}\,(\mathrm{tr} D_y^2)^{1/2};$$

отсюда

$$-H_\Lambda(D) \le \epsilon \sum_{\{x,y\}\subset\Lambda} J_{xy} + \mu\theta(\mu)|\Lambda| = [\epsilon\|a\| + \mu\theta(\mu)]|\Lambda|, \qquad /12/$$

где $\theta(\mu)=1$ для $\mu\ge 0$ и $=0$ для $\mu<0$, а $\|a\| = \frac{3}{2}\sum_{x\in Z^3} a(|x|)$.

Чтобы получить оценку снизу статистической суммы Z_Λ, выберем $\bar{D}\in\mathrm{supp}\,\nu$ и окрестность $V_{\epsilon'}$ матрицы $\bar{D}$ такую, что

$$\mathrm{tr} D' D'' > \mathrm{tr}\bar{D}^2(1-\epsilon') > 0, \qquad D', D'' \in V_{\epsilon'}. \qquad /13/$$

Для конфигураций $\{D_x : x\in\Lambda\}$ таких, что $D_x \in V_{\epsilon'}$ для всех $x\in\Lambda$, следует

$$-H_\Lambda(D) \ge \mathrm{tr}\bar{D}^2(1-\epsilon') \sum_{\{x,y\}\subset\Lambda} J_{xy} + \mu|\Lambda| = \qquad /14/$$

$$= [(1-\epsilon')\,\mathrm{tr}\bar{D}^2\, \|a\| + \mu]|\Lambda|.$$

Ограничиваясь интегрированием только по таким конфигурациям из /14/, находим

$$Z_\Lambda^{1/|\Lambda|} \ge \nu(V_{\epsilon'})\, \exp(\beta[(1-\epsilon')\,\mathrm{tr}\bar{D}^2\, \|a\| + \mu]). \qquad /15/$$

Используя эту оценку вместе с /12/, в выражении $< \prod_{y \in \Lambda} \chi_y^{(\epsilon)} >_\Lambda$ получаем

$$<\chi_x^{(\epsilon)}> \le \frac{1+\nu(\chi^{(\epsilon)})}{\nu(V_{\epsilon'})} \exp\{-\beta[||a||(\mathrm{tr}\,\bar{D}^2(1-\epsilon')-\epsilon)+\mu\theta(-\mu)]\}. \quad /16/$$

Отсюда следует, что для $\mu > \mu_0 = -||a|| \cdot \max_{\bar{D} \in \mathrm{supp}\,\nu} \mathrm{tr}\,\bar{D}^2$ среднее $<\chi_x^{(\epsilon)}>_\Lambda \to 0$ при $\beta \to \infty$ равномерно по Λ. Тогда из /11/ имеем среднее $<\mathrm{tr}\,D_x^2>_\Lambda$, ограниченное снизу величиной, которая больше нуля.

Используя все эти оценки в /9/, получаем $c_\Lambda \ge \mathrm{const} > 0$ для $\mu > \mu_0$ и $\beta > \beta(\mu)$ с $\mu_0, \beta(\mu)$, которые не зависят от Λ, что и доказывает предложение.

Согласно /7/ матрица $<D_x>$ должна быть отлична от нулевой матрицы в чистой фазе. Поэтому $<D_x> = <Q_x>$ играет роль параметра порядка в нематических жидких кристаллах. С другой стороны, можно убедиться, что при высоких температурах ДП отсутствует: функция $\mathrm{tr}<D_x D_y>$ убывает с ростом $|x-y|$ в некотором условном смысле так же быстро, как взаимодействие /12/.

В заключение сделаем несколько замечаний. Мы полагаем, что по крайней мере наличие полной O(3)-инвариантности делает нашу модель жидкого кристалла более привлекательной /с физической точки зрения/, чем модель взаимодействующих димеров*. Технически наша модель также выглядит более приемлемой: например, для исследования подробностей фазового перехода она допускает использование метода ренормализационной группы. Кроме того, наше доказательство существования ДП применимо и для случая дальнодействующих сил со степенным убыванием, а не только для взаимодействия ближайших соседей - единственного допустимого в моделях взаимодействующих димеров /6,7/. С другой стороны, в нашем подходе мы почти полностью пренебрегли эффектами исключенного объема /частично их учитывает наличие решетки/; их полное рассмотрение привело бы к необходимости добавить в гамильтониан члены, которые бы нарушили его свойство отражательной положительности. У нас нет также доказательства отсутствия трансляционного ДП в предложенной модели жидкого кристалла. Однако мы считаем, что для нашей модели это действительно так: каждое предельное состояние $<\cdot>$, суженное на переменные $\{n_x : x \in Z^3\}$, является кластерным, по крайней мере для больших μ и β в той части фазовой диаграммы, где существует ориентационный ДП. Эта гипотеза основана на том, что в этой области типичные Q-конфигурации медленно меняются в пространстве, а это приводит к эффективному притягивающему взаимодействию между молекулами. Таким образом, с точки зрения чисел заполнения $\{n_x\}$ модель в этой области фазовой диаграммы ведет себя как решеточный газ с притягивающим взаимодействием при больших μ.

---

*Как показал Ромерио /13/, вращательная инвариантность приводит к отсутствию ориентационного порядка для одно- и двухмерных жидких кристаллов даже для непрерывной системы, однако в предположении о наличии твердой сердцевины у молекул. Последнее ограничение было снято в работе /14/.

Мы глубоко благодарим Я.Г.Синая за полезные обсуждения, в результате которых возникла идея написания настоящей работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Де Жен П. Физика жидких кристаллов. "Мир", М., 1977.
2. Пикин С.А. Структурные превращения в жидких кристаллах. "Наука", М., 1981.
3. Onsager L. Ann.N.Y. Acad.Sci., 1949, vol.51, p.627.
4. Di Marzio E.A. J.Chem.Phys., 1961, vol.35, p.658.
5. Heilmann O.J., Lieb E.H. Comm.Math.Phys., 1972, vol.25, p.190.
6. Heilmann O.J., Lieb E.H. J.Stat.Phys., 1979, vol.20, p.679.
7. Abraham D.B., Heilmann O.J. J.Phys.A: Math.Gen., 1980, vol.13, p.1051.
8. Maier W., Saupe A. Z.Naturforsch., 1960, vol.A15, p.287; Maier W., Saupe A. Z.Naturforsch., 1959, vol.A14, p.882.
9. Blinc R., Lugomer S., Žekš B. Phys.Rev., 1974, vol.A9, p.2214; Блинц Р., Жекш Б. Сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектрики. "Мир", М., 1975, гл.12, §3.
10. Fröhlich J. Bull.Am.Math.Soc., 1978, vol.84, p.165.
11. Fröhlich J. et al. Comm.Math.Phys., 1978, vol.62, p.1.
12. Gross L. Comm.Math.Phys., 1979, vol.68, p.9.
13. Romerio M. J.Math.Phys., 1978, vol.19, p.802.
14. Shlosman S.B. Continuous Models with Continuous Symmetries in Two Dimensions. In: Colloquia Mathematica Societatis Ianos Bolyai 27 Random Fields, Esztergom, Hungary, 1979.

Рукопись поступила в издательский отдел
5 мая 1982 года.

НЕТ ЛИ ПРОБЕЛОВ В ВАШЕЙ БИБЛИОТЕКЕ?

Вы можете получить по почте перечисленные ниже книги, если они не были заказаны ранее.

Д13-11182	Труды IX Международного симпозиума по ядерной электронике. Варна, 1977.	5 р. 00 к.
Д17-11490	Труды Международного симпозиума по избранным проблемам статистической механики. Дубна, 1977.	6 р. 00 к.
Д6-11574	Сборник аннотаций XV совещания по ядерной спектроскопии и теории ядра. Дубна, 1978.	2 р. 50 к.
Д3-11787	Труды III Международной школы по нейтронной физике. Алушта, 1978.	3 р. 00 к.
Д13-11807	Труды III Международного совещания по пропорциональным и дрейфовым камерам. Дубна, 1978.	6 р. 00 к.
	Труды VI Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц. Дубна, 1978 /2 тома/	7 р. 40 к.
Д1,2-12036	Труды V Международного семинара по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1978	5 р. 00 к.
Д1,2-12450	Труды XII Международной школы молодых ученых по физике высоких энергий. Приморско, НРБ, 1978.	3 р. 00 к.
	Труды VII Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц, Дубна, 1980 /2 тома/	8 р. 00 к.
Д11-80-13	Труды рабочего совещания по системам и методам аналитических вычислений на ЭВМ и их применению в теоретической физике, Дубна, 1979	3 р. 50 к.
Д4-80-271	Труды Международной конференции по проблемам нескольких тел в ядерной физике. Дубна, 1979.	3 р. 00 к.
Д4-80-385	Труды Международной школы по структуре ядра. Алушта, 1980.	5 р. 00 к.
Д2-81-543	Труды VI Международного совещания по проблемам квантовой теории поля. Алушта, 1981	2 р. 50 к.
Д10,11-81-622	Труды Международного совещания по проблемам математического моделирования в ядерно-физических исследованиях. Дубна, 1980	2 р. 50 к.
Д1,2-81-728	Труды VI Международного семинара по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1981.	3 р. 60 к.
Д17-81-758	Труды II Международного симпозиума по избранным проблемам статистической механики. Дубна, 1981.	5 р. 40 к.
Д1,2-82-27	Труды Международного симпозиума по поляризационным явлениям в физике высоких энергий. Дубна, 1981.	3 р. 20 к.
Р18-82-117	Труды IV совещания по использованию новых ядерно-физических методов для решения научно-технических и народнохозяйственных задач. Дубна, 1981.	3 р. 80 к.

Заказы на упомянутые книги могут быть направлены по адресу:
101000 Москва, Главпочтамт, п/я 79
Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований

Ангелеску Н., Загребнов В.А. Р17-82-324
Решеточная модель жидкого кристалла с матричным параметром порядка

Предложена решеточная модель с полной вращательной симметрией для описания нематических жидких кристаллов. С помощью метода инфракрасных оценок доказано наличие в этой модели при достаточно низких температурах ориентационного дальнего порядка.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1982

Angelescu N., Zagrebnov V.A. P17-82-324
A Lattice Model of Liquid Crystal with Matrix Order Parameter

A lattice model with full rotational invariance is proposed for describing nematic liquid crystals. Orientational long range order at low temperature is proved using the infrared bound method.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1982

Перевод авторов.