УДК 539.64:913
DOI: 10.18384/2310-7251-2018-4-84-91

АКТИВНЫЙ РЕЖИМ ЛИОТРОПНЫХ НЕМАТИКОВ И КАЛИБРОВОЧНОЕ ПОЛЕ ДЕФЕКТОВ

Ельникова Л.В.
Институт теоретической и экспериментальной физики имени А.И. Алиханова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»
117218, г. Москва, ул. Большая Черемушкинская, д. 25, Российская Федерация

Аннотация. В свете калибровочной полевой теории на решетке обсуждаются лиотропные нематические жидкие кристаллы, проявляющие самоорганизованное течение, так называемые активные нематики. Эволюция топологических дефектов в таких системах взаимосвязана с этим потоком. Тип фазового перехода «нематик-изотропная» фаза в активных нематиках может быть отличен от такового в системах без активности.

***Ключевые слова**:* активные нематики, жидкие кристаллы, теория упругости, топологические дефекты, дифференциальные формы на решетке, метод Монте-Карло

AN ACTIVE STATE IN LYOTROPIC NEMATICS AND THE GAUGE FIELD OF THEIR DEFECTS

L.V. Elnikova
A.I. Alikhanov Institute for Theoretical and Experimental Physics, National Research Centre "Kurchatov Institute"
ul. Bolshaya Cheremushkinskaya 25, 117218 Moscow, Russian Federation

***Abstract**.* Lyotropic nematic liquid crystals (NLCs) exhibiting a self-organizing flow (so called 'active nematics') are discussed within the framework of the lattice gauge field theory. The evolution of topological defects in such systems is mutually caused by the flow regime. It is shown that the 'nematic–isotropic' phase transition in active NLCs may differ from that in conventional NLCs.

***Key words**:* active nematic liquid crystals, elasticity, topological defects, lattice differential forms, Monte Carlo

Введение

Активные нематические жидкие кристаллы (НЖК), как правило, являются лиотропными ЖК системами, их основные свойства – коллективное поведение и способность к самоорганизованному течению. История формирования спиновой полевой концепции таких активных систем восходит к работам Вильчека, Грина, Тонера и Вителли [1; 10; 13; 17], которые, в свою очередь, базируются на пионерских трудах Заупе и уравнении Эриксена и Лесли [5–9].

Примеры активных НЖК можно найти среди метаматериалов, частиц Януса, активных коллоидов, ротаторов Квинке, бактериальных колоний и пр. [1; 10; 20].

Благодаря способности искажения или переориентации параметра порядка под воздействием внешних факторов (например, электрических или магнитных полей) активные НЖК могут применяться в рабочих элементах с переключаемыми и настраиваемыми физическими характеристиками, т. е. как материалы современных датчиков, фотоэлектрических устройств, исполнительных механизмов и т. д.

В теории диэлектрической релаксации НЖК формулируется представление о динамике директора, обусловленной балансом диэлектрических, вязких и упругих моментов через уравнение Эриксена-Лесли. В рамках теории Грина, Тонера, Вителли (ГТВ) и аналогичных подходов [1; 13] отдельные НЖК-частицы могут быть связаны с локальными спиновыми переменными классической *XY* модели [16] с дальним порядком, когда динамика системы не потенциальна, т.е. диссипативна.

С другой стороны, существует динамическая калибровочная теория линейных дефектов, предложенная Кадич и Эделеном (КЭ) [3], в этом представлении структура дефектов как калибровочное поле эволюционирует через лагранжианы с полупрямым произведением группы $SO(3)$ с группой трансляций. Коллоидные фазы активных НЖК обладают такими топологическими дефектами [2; 5], поэтому мы можем использовать подход ГТВ с учётом симметрии и нетривиального действия её группы.

Ниже мы представим конфигурации точечных и линейных дефектов (конденсат бужумов и дисклинаций) активных нематиков в терминах монополей и дисклинаций калибровочной теории, подобно подходу Янга-Миллса [18], представив энергию Франка с активной силой в гидродинамике в духе теории ГТВ [1]. Мы проведём численное моделирование для наблюдаемых гидродинамических величин и корреляционных функций, применяя формализм дифференциальных форм на решетке.

Динамика, теория упругости и калибровочное поле

Согласно теории Эриксена-Лесли [6] гидродинамическая модель нематика в режиме тока включает уравнения Навье-Стокса и уравнения нематодинамики соответственно [1; 13]:

$$\rho_0 \frac{\partial v_k}{\partial t} = -\partial_k P + \eta \nabla^2 v_k + \alpha \partial_j (n_j n_k) + \partial_j \left(\lambda_{ijk} \frac{\delta F}{\delta n_i} \right), \tag{1}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \tag{2}$$

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} = \lambda_{ijk} \partial_j v_k - \frac{1}{\gamma_1} \left[\frac{\delta F}{\delta n_i} - \left(\frac{\delta F}{\delta \hat{n}} \cdot \hat{n} \right) n_i \right], \tag{3}$$

производные вектора директора по времени и поле вектора скорости

$$\frac{D v_k}{D t} = \frac{\partial v_k}{\partial t} + v \cdot \nabla v_k, \;\; \frac{D v_n}{D t} = \frac{\partial n_k}{\partial t} + v \cdot \nabla \mathbf{n}, \tag{4}$$

тензор λ_{ijk} определён как

$$\lambda_{ijk} = \left(\frac{\lambda+1}{2}\right) n_j \delta_{ik} + \left(\frac{\lambda-1}{2}\right) n_k \delta i_j - \lambda n_i n_j n_k. \qquad (5)$$

Здесь $\boldsymbol{v}(\boldsymbol{r},t)$ – поле скоростей (типичная скорость активных частиц ~ 10–40 мкм/с), $\boldsymbol{r}(x,y,z)$ – положение вектора в декартовых координатах x, y, z, время t и $\boldsymbol{n}(\boldsymbol{r},t)$ поле вектора директора. Уравнение (2) выражает условие несжимаемости, которое выводится из уравнения непрерывности в предположении постоянства плотности ρ_0. P – динамическое давление, $\frac{\delta F}{\delta \hat{n}}$ – молекулярное поле, δ_{ij} – символ Кронекера, η – сдвиговая вязкость, предполагаемая здесь для простоты изотропной, γ_1 – вращательная вязкость $\gamma_1 = \alpha_3 - \alpha_2$, где α_2 и α_3 – коэффициенты вязкости Лесли. Безразмерный выстраивающий в направлении потока параметр λ в (5) выражает анизотропный отклик нематогена на сдвиг. Третий член в правой части (1) – компонента активной силы в направлениях k-осей (k =1, 2, 3) который может быть сжимающим, если параметр активности $\alpha > 0$ или растягивающим, если $\alpha < 0$, в зависимости от типа системы. Активная сила, порождаемая искажением поля директора, может быть представлена как $\mathbf{F}_a = \alpha[\mathbf{n}(\nabla \cdot \mathbf{n}) + (\mathbf{n} \cdot \nabla)\mathbf{n}]$.

Упругая энергия Озена-Франка одноосного нематика F даётся выражением:

$$F = \frac{1}{2}\int_V \left[K_1(\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + K_2(\mathbf{n} \cdot (\nabla \times \mathbf{n}))^2 + K_3 \left|\mathbf{n} \times (\nabla \times \mathbf{n})\right|^2 \right] dV, \qquad (6)$$

Она содержит упругие константы K_1, K_2 и K_3, относящиеся к компонентам сдвига ($\nabla \cdot \mathbf{n}$), кручения ($\mathbf{n} \cdot (\nabla \times \mathbf{n})$) и изгиба ($\mathbf{n} \times (\nabla \times \mathbf{n})$) в (2) соответственно. Объём, занятый активным нематиком, обозначен V. Здесь мы принимаем для упрощения одноконстантное приближение $K_1 = K_2 = K_3 = K$ [2; 5].

Модель, описываемая уравнениями (1) – (5) и (6), с точки зрения молекулярного поля базируется на комбинации материальных параметров, выражающих вязкость, инерцию и эффекты упругости в терминах чисел Эриксена и Рейнольдса и коэффициентов Лесли [4; 14; 19].

Термин «динамической дисклинации» в калибровочном приближении, введённый в [3], позволяет изучать упругие свойства материалов с дефектами, которые нелинейны по своей природе. Цель калибровочной теории – трансформировать концепцию «силы лобового сопротивления» в геометрическое понятие связности. Его будет в действительности достаточно, если мы будем знать о наличии течения, вызванного эволюцией конфигурации топологических дефектов, в отдельных самоорганизующихся нематических коллоидах. В динамике дефектов и по теории КЭ матрица градиента деформации должна быть заменена на тензор деформации. Так, например, на основании подхода КЭ, было найдено аналитическое решение типа монополя для дисклинации, связанной с лагранжианов в $SO(3)$ [11].

Неабелева группа вращений $SO(3)$ лагранжиана директора нематика локально изоморфна группе $SU(2)$. В абелевой проекции 3D на $U(1)$ [12] имеем лагранжиан

$$L = \frac{1}{g^2} G_{\mu\nu}^2 + \left| D_\mu \Phi \right|^2 + \lambda_2 \left(\left| \Phi \right|^2 - 1 \right)^2, \tag{7}$$

с полем монополя Φ и затравочным зарядом g, $D_\mu = \partial_\mu + iB_\mu$. $G_{\mu\nu} = \partial_\mu B_\nu - \partial_\nu B_\mu$, B_μ есть дуальное калибровочное поле, аналогичное электромагнитному полю $G_{\mu\nu} = ½\varepsilon_{\mu\nu\alpha\beta} (\partial_\alpha A_\beta - \partial_\beta A_\alpha)$, где $\varepsilon_{\mu\nu\alpha\beta}$ – символ Леви-Чивиты и A_i – обычное калибровочное поле, λ_2 – коэффициент самодействия скалярного поля. Поле $G_{\mu\nu}$ относится к диссипативной и полной кинетической энергии. Отметим, что это поле и коэффициент Эриксена может быть введены из (1)–(5) и (6) как параметры. Все монополи взаимодействуют трубкой тока через кулоновский потенциал идентично дисклинации с ядром. Статсумма монопольных токов между двумя бужумами в отдельной капле нематика может быть представлена в виде дифференциальных операторов.

Результаты вычислений на решетке

Чтобы охарактеризовать эволюцию топологических дефектов в активных НЖК, мы изучаем свойства статсуммы токов j в виде [12]

$$Z = \text{const} \sum_{\substack{{}^*j \in Z(C_{k+2}) \\ \delta j = 0}} \exp\left\{ -4\pi^2 \beta (j, \Delta^{-1} j) \right\}. \tag{4}$$

Здесь суммирование ведётся по $(D - k - 2)$-формам монопольных токов j как сумма по всем монопольным дефектам (здесь, бужумам) оригинальной теории, где k – ранг дифференциальной формы, C_k – k-мерная ячейка решётки, β – обратная температура, Δ – оператор Лапласа на операторах дуальной решётки. В такой записи при $k = 0$, $D = 3$, мы имеем XY модель со стандартным действием $1/T\sum_{x,\mu} \cos(\varphi_x - \varphi_{x+k})$, где x – узлы решетки, φ_i – компактные динамические переменные, пробегающие от $-\pi$ до π, $i = 1 \ldots 4$, при обходе по плакетам вдоль дуальной кубической решётки. Дуальные токи, вычисленные по модулю 2π, есть ${}^*j = ½\pi\, (|\varphi_1 - \varphi_2|_{2\pi} + |\varphi_2 - \varphi_3|_{2\pi} + |\varphi_3 - \varphi_4|_{2\pi} + |\varphi_4 - \varphi_1|_{2\pi})$.

На рис. 1 показаны вычисленные термодинамические величины, наблюдаемые, это, например, теплопроводность на дуальной решётке с самодуальными условиями. Здесь калибровочное поле A_i отражено в гидродинамическом параметре, числе Эриксена $Er = \gamma_1 v r_0 / K$, где γ_1 – вращательная вязкость поля директора $\gamma_1 = \alpha_3 - \alpha_2$ с коэффициентами Лесли α_3 и α_2. Величина v – скорость в точке r_o в формулах (1)–(5). Второй стандартный параметр модели – химический потенциал.

Ожидаемый переход из нематической в изотропную фазу ($N \to I$) соответствует переходу «конфайнмент-деконфайнмент» в теории струн. По сравнению с традиционными нематиками [15] этот переход сдвинут в область более высоких температур (рис. 1), имеет гладкий экстремум и некий пороговый характер при увеличении температуры.

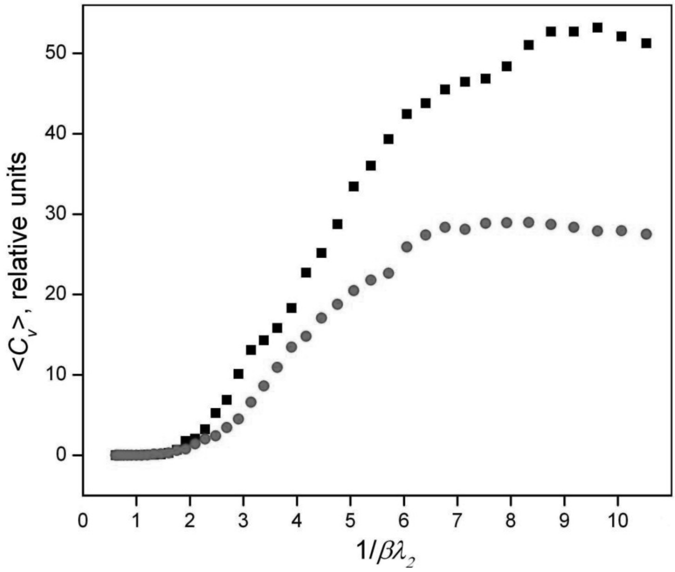

Рис. 1. Температурная зависимость теплоёмкости
для двух решёток 48^3 (квадраты) и 64^3 (кружки), ошибки вычислений не показаны.
Выбрано произвольно число *Er* = 10 и химпотенциал 0,1.

Заключение

В работе мы аргументировали применимость калибровочной теории для диссипативных систем с неабелевым параметром порядка в поле топологических дефектов, т.е. для случая активных НЖК, где компоненты силы лобового сопротивления, например, капли нематика, соединены в калибровочном поле.

Вследствие применения такого метода калибровочного поля и дифференциальных форм, мы можем в принципе задавать гидродинамические значения в отсутствие некоторых экспериментальных данных в режиме течения, что важно для предсказания фазового поведения и упругих свойств новых материалов.

Мы показали, что типичный фазовый переход N $\rightarrow$ I в коллоидных каплях активных НЖК отличается от такового обычных лиотропных нематиков.

Статья поступила в редакцию 19.09.2018 г.

ЛИТЕРАТУРА

1. Green R., Toner J., Vitelli V. Geometry of thresholdless active flow in nematic microfluidics // Physical Review Fluids. 2017. Vol. 2. Iss. 10. P. 104201-1–104201-31.
2. Де Жен. П. Физика жидких кристаллов. М.: Мир, 1977. 400 с.
3. Кадич А., Эделен Д. Калибровочная теория дислокаций и дисклинаций. М.: Мир, 1987. 166 с.
4. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т. VI. Гидродинамика. М.: Физматлит, 2001. 736 с.
5. Lavrentovich O.D. Active colloids in liquid crystals // Current Opinion in Colloid & Interface Science. 2016. Vol. 21. P. 97–110.

6. Leslie F.M. Some constitutive equations for anisotropic fluids // The Quarterly Journal of Mechanics and Applied Mathematics. 1966. Vol. 19. Iss. 3. P. 357–370.
7. Maier W., Saupe A. Eine einfache molekulare Theorie des nematischen kristallinflьssigen Zustandes // Zeitschrift fьr Naturforschung. 1958. Vol. 13a. P. 564–566.
8. Maier W., Saupe A. Eine einfache molekular-statistische Theorie der nematischen kristallinflьssigen Phase. Teil I // Zeitschrift fьr Naturforschung. 1959. Vol. 14a. P. 882–900.
9. Maier W., Saupe A. Eine einfache molekular-statistische Theorie der nematischen kristallinflьssigen Phase. Teil II // Zeitschrift fьr Naturforschung. 1960. Vol. 15a. P. 287–292.
10. Hydrodynamics of soft active matter / Marchetti M.C., Joanny J.F., Ramaswamy S., Liverpool T.B., Prost J., Rao Madan, Aditi Simha R. // Reviews of Modern Physics. 2013. Vol. 85. Iss. 3. P. 1143–1189.
11. Osipov V.A. A Monopole-like solution for static disclinations in continuum media // Physics Letters A. 1990. Vol. 146. Iss. 1–2. P. 67–70.
12. Поликарпов М.И. Фракталы, топологические дефекты и невылетание в решеточных калибровочных теориях // Успехи физических наук. 1995. Т. 165. Вып. 6. С. 627–644.
13. Ryskin G., Kremenetsky M. Drag force on a line defect moving through an otherwise undisturbed field: Disclination Line in a Nematic Liquid Crystal // Physical Review Letters. 1991. Vol. 67. Iss. 12. P. 1574–1577.
14. Sengupta A. Topological microfluidics: Nematic liquid crystals and nematic colloids in microfluidic environment. Switzerland: Springer International Publishing, 2013. 165 p.
15. Skačej G., Zannoni C. Biaxial liquid-crystal elastomers: A lattice model // The European Physical Journal E. 2008. Vol. 25. No. 2. P. 181–186.
16. Toner J., Tu Y. Long-Range Order in a Two-Dimensional Dynamical XY Model: How Birds Fly Together // Physical Review Letters. 1995. Vol. 75. Iss. 23. P. 4326–4329.
17. Novel type of phase transition in a system of self-driven particles / Vicsek T., Czirok A., Ben-Jacob E., Cohen I., Shochet O. // Physical Review Letters. 1995. Vol. 75. Iss. 6. P. 1226–1229.
18. Yang C.N., Mills R. Conservation of Isotopic Spin and Isotopic Gauge Invariance // Physical Review. 1954. Vol. 96. Iss. 1. P. 191–195.
19. Zakharov A.V., Vakulenko A.A. Dynamics of the modulated distortions in confined nematic liquid crystals // The Journal of Chemical Physics. 2013. Vol. 139. Iss. 24. P. 244904-1–244904-6.
20. Living liquid crystals / Zhou S., Sokolov A., Lavrentovich O.D., Aranson I.S. // Proceedings of the National Academy of Sciences. 2014. Vol. 111. Iss. 4. P. 1265–1270.

REFERENCES

1. Green R., Toner J., Vitelli V. Geometry of thresholdless active flow in nematic microfluidics. In: *Physical Review Fluids*, 2017, vol. 2, iss. 10. pp. 104201-1–104201-31.
2. de Gennes P. The physics of liquid crystals. Oxford, Clarendon, 1974.
3. Kadic A., Edelen D. A gauge theory of dislocations and disclinations. Berlin, Springer, 1983.
4. Landau L.D., Lifshits E.M. Course of Theoretical. Physics, Vol. 6: *Fluid Mechanics.* 2nd Ed., Oxford, Pergamon Press, 1987. 539 p.
5. Lavrentovich O.D. Active colloids in liquid crystals. In: *Current Opinion in Colloid & Interface Science*, 2016, vol. 21, pp. 97–110.
6. Leslie F.M. Some constitutive equations for anisotropic fluids. In: *The Quarterly Journal of Mechanics and Applied Mathematics*, 1966. vol. 19, iss. 3, pp. 357–370.
7. Maier W., Saupe A. Eine einfache molekulare Theorie des nematischen kristallinflьssigen Zustandes. In: *Zeitschrift fьr Naturforschung*, 1958, vol. 13a, pp. 564–566.

8. Maier W., Saupe A. Eine einfache molekular-statistische Theorie der nematischen kristallinflьssigen Phase. Teil I. In: *Zeitschrift fьr Naturforschung*, 1959, vol. 14a, pp. 882–900.
9. Maier W., Saupe A. Eine einfache molekular-statistische Theorie der nematischen kristallinflьssigen Phase. Teil II. In: *Zeitschrift fьr Naturforschung*, 1960, vol. 15a, pp. 287–292.
10. Marchetti M.C., Joanny J.F., Ramaswamy S., Liverpool T.B., Prost J., Rao Madan, Aditi Simha R. Hydrodynamics of soft active matter. In: *Reviews of Modern Physics*, 2013, vol. 85, iss. 3, pp. 1143–1189.
11. Osipov V.A. A Monopole-like solution for static disclinations in continuum media. In: *Physics Letters A*, 1990, vol. 146, iss. 1–2, pp. 67–70.
12. Polikarpov M.I. [Fractals, topological defects, and confinement in lattice gauge theories]. In: *Advances in Physical Sciences*, 1995, vol. 165, iss. 6, pp. 627–644.
13. Ryskin G., Kremenetsky M. Drag force on a line defect moving through an otherwise undisturbed field: Disclination Line in a Nematic Liquid Crystal. In: *Physical Review Letters*, 1991, vol. 67, iss. 12, pp. 1574–1577.
14. Sengupta A. Topological microfluidics: Nematic liquid crystals and nematic colloids in microfluidic environment. Switzerland, Springer International Publishing, 2013. 165 p.
15. Skačej G., Zannoni C. Biaxial liquid-crystal elastomers: A lattice model. In: *The European Physical Journal E*, 2008, vol. 25, no. 2, pp. 181–186.
16. Toner J., Tu Y. Long-Range Order in a Two-Dimensional Dynamical XY Model: How Birds Fly Together. In: *Physical Review Letters*, 1995, vol. 75, iss. 23, pp. 4326–4329.
17. Vicsek T., Czirok A., Ben-Jacob E., Cohen I., Shochet O. Novel type of phase transition in a system of self-driven particles. In: *Physical Review Letters*, 1995, vol. 75, iss. 6, pp. 1226–1229.
18. Yang C.N., Mills R. Conservation of Isotopic Spin and Isotopic Gauge Invariance. In: *Physical Review*, 1954, vol. 96, iss. 1, pp. 191–195.
19. Zakharov A.V., Vakulenko A.A. Dynamics of the modulated distortions in confined nematic liquid crystals. In: *The Journal of Chemical Physics*, 2013, vol. 139, iss. 24, pp. 244904-1–244904-6.
20. Zhou S., Sokolov A., Lavrentovich O.D., Aranson I.S. Living liquid crystals. In: *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 2014, vol. 111, iss. 4, pp. 1265–1270.

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

Ельникова Лилия Вячеславовна – кандидат физико-математических наук, научный сотрудник лаборатории физической химии Института теоретической и экспериментальной физики им. А.И. Алиханова Научно-исследовательского центра «Курчатовский институт»;
e-mail: elnikova@itep.ru.

INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

Liliia V. Elnikova – PhD in Physical and Mathematical Sciences, Researcher of the Laboratory of Physical Chemistry, Alikhanov Institute for Theoretical and Experimental Physics of National Research Centre “Kurchatov Institute”;
e-mail: elnikova@itep.ru.

ПРАВИЛЬНАЯ ССЫЛКА НА СТАТЬЮ

Ельникова Л.В. Активный режим лиотропных нематиков и калибровочное поле дефектов // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-Математика. 2018. № 4. С. 84–91.
DOI: 10.18384/2310-7251-2018-4-84-91

FOR CITATION

Elnikova L.V. An active state in lyotropic nematics and the gauge field of their defects In*: Bulletin of Moscow Region State University. Series: Physics and Mathematics*, 2018, no. 4, pp. 84–91.
DOI: 10.18384/2310-7251-2018-4-84-91