

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

На правах рукописи

Тамбовцев Иван Михайлович

**ЛОКАЛИЗОВАННЫЕ ХИРАЛЬНЫЕ СОСТОЯНИЯ В  
ЖИДКИХ КРИСТАЛЛАХ И МАГНЕТИКАХ**

Научная специальность 1.3.3. Теоретическая физика

Диссертация на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:  
доктор физико-математических наук, профессор  
Уздин Валерий Моисеевич

Санкт-Петербург

2024

# Оглавление

<b>Введение</b> . . . . .	4
<b>Глава 1. Энергетические поверхности хиральных магнитных и жидкокристаллических систем</b> . . . . .	12
1.1. Свободная энергия хиральных магнетиков и жидких кристаллов.	12
1.2. Основное и метастабильные состояния магнетиков и жидкокристаллических систем в тонких пленках. . . . .	19
1.3. Определение модулей Франка жидких кристаллов содержащих комплексы лантаноидов . . . . .	23
<b>Глава 2. Переходы между локально устойчивыми состояниями в хиральных системах</b> . . . . .	39
2.1. Энергетическая поверхность и локально устойчивые спиральные состояния в пленках ХЖК различной толщины . . . . .	40
2.2. Пути с наименьшим перепадом энергии между состояниями с разным числом витков спирали в холестерических жидких кристаллах . . . . .	48
2.3. Эффекты гистерезиса при изменении электрического поля в холестерических жидких кристаллах . . . . .	54
<b>Глава 3. Топологические ЖК и магнитные структуры в условиях ограниченной геометрии</b> . . . . .	56
3.1. Спиральные и конические хиральные структуры во внешнем поле	56
3.2. Состояние наклонной спирали в тонких хиральных пленках . . .	63
3.3. Фазовая диаграмма хиральных магнетиков и жидких кристаллов в тонких пленках . . . . .	69

3.4. Локализованные состояния в хиральных жидких кристаллах и магнетиках . . . . .	71
<b>Глава 4. Скирмионные состояния тонких пленок кубических гелимагнетиков . . . . .</b>	<b>78</b>
4.1. Фазовая диаграмма пленки гелимагнетика. Состояния в магнитном поле в плоскости . . . . .	79
4.2. Магнитные состояния скирмионного типа в пленке гелимагнетика в магнитном поле . . . . .	84
<b>Заключение . . . . .</b>	<b>88</b>
<b>Благодарности . . . . .</b>	<b>89</b>
<b>Список литературы . . . . .</b>	<b>90</b>
<b>Приложение . . . . .</b>	<b>99</b>
Энергия и ее вариация для жидкокристаллических систем . . . . .	99
Вычисление энергии . . . . .	102
Вычисление вариации энергии . . . . .	110

## Введение

Развитие современных технологий хранения, обработки и отображения информации поставили ряд принципиальных задач, связанных с уменьшением характерного размера, реализации быстрой динамики и энергоэффективного управления локализованными магнитными и жидкокристаллическими (ЖК) структурами. Проблема устойчивости таких структур относительно тепловых флуктуаций и случайных возмущений должна решаться одновременно с возможностью контроля и управления соответствующими состояниями путем малых направленных воздействий. Наноразмерные магнитные системы рассматриваются сейчас, как кандидаты на роль битов информации в системах беговой магнитной памяти [1]. Локализованные структуры в ЖК могут служить миниатюрными, управляемыми и перестраиваемыми оптическими элементами. Их можно использовать для преобразования световых пучков [2], создания уникальных дифракционных решеток, а в случае образования устойчивых структур и для хранения и преобразования информации, закодированной в конфигурации директора [3]. Поэтому проблема описания устойчивости и динамики локализованных магнитных и ЖК структур, наряду с важностью для фундаментальной науки, очень актуальна и для практических приложений. При уменьшении характерных размеров структуры обеспечение ее устойчивости относительно случайных внешних воздействий становится все более сложным. Один из возможных путей заключается в использовании так называемой топологической защиты. У ряда локализованных неколлинеарных структур в магнетиках и ЖК можно ввести топологические индексы, которые представляют собой целые числа, сохраняющиеся при непрерывном изменении намагниченности/ директора ЖК. В этом случае непрерывная трансформация не меняет топологических индексов, и такая структура оказывается устойчивой относительно переходов, при которых индексы должны измениться. Соответствующие локализованные

неколлинеарные структуры в магнетиках/ЖК, имеющие индекс, отличный от однородного состояния, называют «топологическими солитонами». К ним относятся квазидвумерные скирмионы, антискирмионы, мероны, трехмерные тороны, хопфионы, геликнотоны и другие [4, 5]. Для магнитных моментов, заданных в узлах дискретной кристаллической решетки, топологическая защита, строго говоря, не действует. Однако, она должна проявляться косвенно, через величины активационных барьеров, которые необходимо преодолеть для магнитного перехода и в предельном случае, когда постоянная решетки мала по сравнению с размером структуры, соответствующие времена жизни состояний должны существенно увеличиваться [6, 7].

Часто за формирование и устойчивость топологических солитонов ответственны хиральные взаимодействия. Это относится и к магнитным структурам, в которых такие взаимодействия появляются при учете спин-орбитального вклада в энергию, и к ЖК системам холестерического типа. В приближении, одинаковых модулей Франка функционал энергии холестерического ЖК выглядит также, как и для микромагнитных систем с взаимодействием Дзялошинского-Мории. И в магнетиках, и в ЖК могут формироваться одинаковые локализованные топологические структуры. Для магнетиков одним из ключевых вопросов является оценка времен жизни топологических солитонов, являющейся количественной мерой их устойчивости. Такую оценку можно сделать в рамках теории переходного состояния, которая предполагает построение энергетической поверхности системы и путей с минимальным перепадом энергии между локальными минимумами, соответствующими разным состояниям [8]. В гармоническом приближении для формы энергетической поверхности в начальном минимуме и вблизи седловой точки на энергетической поверхности можно получить времена жизни состояний при произвольных температурах [9]. Для ЖК систем вопрос о температурной зависимости устойчивости локализованных состояний менее важен. Эти структуры существуют в относительно узком

интервале температур и можно считать, что их устойчивость в этом интервале не меняется. Однако и здесь анализ энергетической поверхности системы остается полезным подходом для описания равновесных свойств и переходов между топологически различными состояниями [10]. В ЖК трансформацию энергетической поверхности, рождение и исчезновение новых минимумов, приводящих к переходам между состояниями, вызывают обычно внешние факторы, такие как электромагнитное поле и условия сцепления ЖК директора с поверхностью [11]. Целью работы является исследование хиральных топологических состояний в ЖК и магнитных пленках заданной толщины на основе анализа многомерной энергетической поверхности системы. Будет показано влияние внешних полей, конечных размеров образца и граничных условий на пространственную структуру локально устойчивых состояний и рассчитаны наиболее вероятные сценарии переходов между ними. Будут представлены расчеты топологических солитонов, существующих в разных частях диаграммы состояний пленки холестерического жидкого кристалла/ хирального магнетика.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, 4 глав, заключения, благодарностей, списка литературы и приложения. Работа включает 121 страницу, 38 рисунков. Список литературы состоит из 82 наименований.

Достоверность полученных в диссертации результатов определяется с одной стороны тем, что в основе теоретического подхода лежат хорошо апробированные принципы статистической физики, а расчеты выполнены с использованием современных алгоритмов и методов вычислительной физики. С другой стороны, полученные результаты согласуются с теоретическими расчетами, полученными в рамках альтернативных моделей и результатами прецизионных экспериментов. Например, предложенный в работе метод поиска модулей Франка для лантонидомезогенов был проверен на жидком кристалле 5CB, для которого модули Франка уже известны, двумерные структуры типа наклонной спирали близки к экспериментальным, представленным в работе [12]. Все ос-

новные результаты диссертационного исследования были опубликованы в ведущих рецензируемых журналах, докладывались на научных семинарах СПбГУ, университета ИТМО, на Российских и международных конференциях.

#### Апробация работы

Результаты работы были представлены на следующих конференциях:

1. Международная конференция  
 ”Mathematical challenge of quantum transport in nanosystems – Pierre Duclos workshop”, Санкт-Петербург, 14-16 сентября, 2020 г.
2. Всероссийская конференция ”Наука СПбГУ - 2020”, Санкт-Петербург, 24 декабря, 2020 г.
3. Международная конференция  
 ”Promising element base of micro- and nanoelectronics using modern achievements of theoretical physics”, Москва, 20-23 апреля, 2020 г.
4. Международная конференция  
 ”15th European Conference on Liquid Crystals”, Вроцлав, 30 Июня - 5 Июля, 2019 г.

#### Список публикаций по теме диссертации

1. Tambovtsev, I.M. Topological structures in chiral media: Effects of confined geometry / I. M. Tambovtsev, A. O. Leonov, I.S. Lobanov, et al. // Physical Review B. — 2022. — Vol. 105, no. 3. — P. 034701. **WOS, Scopus.**
2. Tambovtsev, I.M. Hysteresis and Fréedericksz thresholds for twisted states in chiral nematic liquid crystals: Minimum-energy path approach / S.S. Tenishchev, I.M. Tambovtsev, A.D. Kiselev, V.M. Uzdin // Journal of Molecular Liquids — 2021. — Vol. 325 — P. 115242. **WOS, Scopus.**

3. Тамбовцев, И.М. МЕТОД РАСЧЁТА МОДУЛЕЙ ФРАНКА ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО КОМПЛЕКСА НА ОСНОВЕ ЭРБИЯ / И.М. Тамбовцев, Л.А. Добрун, А.П. Ковшик, Е.В. Аксенова, Е.И.Рюмцев // Вестник МГОУ. — 2020. — Vol. 3. — P. 6–12. **ВАК**.
4. Tambovtcev, I.M. Magnetic field-induced macroscopic alignment of liquid-crystalline lanthanide complexes / E.V. Aksenova, L.A. Dobrun, A.P. Kovshik, E.I. Ryumtsev, I.M. Tambovtcev // Crystals — 2019. — Vol. 9, no. 10 — P. 499. **WOS, Scopus**.
5. Tambovtcev, I.M. Stability of in-plane and out-of-plane chiral skyrmions in epitaxial MnSi (111)/Si (111) thin films: Surface twists versus easy-plane anisotropy / A.O. Leonov, I.M. Tambovtcev, I.S. Lobanov, V.M. Uzdin, // Physical Review B — 2020. — Vol. 102, no. 17 — P. 174415. **WOS, Scopus**.

Российские и международные гранты, поддержавшие исследования  
выполненные в диссертации:

1. «Исследование топологических магнитных текстур как основы для искусственных нейронных сетей», РФФ, 19-42-06302.
2. «Природа топологической устойчивости киральных магнитных и жидкокристаллических систем», фонд развития теоретической физики и математики «БАЗИС», 19-1-1-12-2.



## Основные научные результаты

1. Проведён анализ диаграммы состояний тонких пленок холестерического жидкого кристалла. Определены основное и метастабильные состояния системы для различных значений сцепления на границах ячейки и внешнего магнитного поля (работа [13], стр. 4 – 8, личный вклад 80%).
2. Показано, как локализованные хиральные структуры в пленках магнетиков и жидких кристаллов, включающие тороны, личи и скирмионные трубки, трансформируются под воздействием внешних магнитных и электрических полей (работа [13], стр. 8 – 10, личный вклад 90%).
3. Проведён анализ фазовой диаграммы тонких пленок кубических гелимагнетиков. Показано, что стабилизация скирмионных и спиральных структур зависит от анизотропии и ориентации магнитного поля (работа [14], стр. 1 – 7, личный вклад 60%).
4. В тонких плёнках холестерических жидких кристаллов и слоистых магнитных наносистемах выявлены переходы между локально устойчивыми спиральными состояниями с различным числом витков спирали. Барьеры этих переходов зависят от напряжения и параметров сцепления с подложками (работа [15], стр. 1 – 3, личный вклад 60%).
5. Разработан метод определения модулей Франка для жидких кристаллов на основе лантанидов, позволяющий рассчитывать их упругие свойства на основе анализа воздействия магнитного поля (работа [16], стр. 3, личный вклад 80%).
6. Выявлены эффекты гистерезиса при изменении внешнего электрического поля в холестерических жидких кристаллах, что позволяет улучшить

управление такими системами в практических приложениях (работа [15], стр. 5 – 7, личный вклад 60%).

7. Проведены исследования жидкокристаллических комплексов на основе гадолиния и эрбия. Определены модули Франка для таких комплексов с учётом их высокой анизотропии магнитной восприимчивости (работа [16], стр. 8 – 12, личный вклад 80%, работа [17], стр. 3, личный вклад 90% и [18], стр. 4 – 5, личный вклад 90%).

Положения, выносимые на защиту.

1. В рамках развитой методики обработки и интерпретации экспериментальных данных о зависимости диэлектрической проницаемости ячейки жидкого кристалла на основе лантанидомезогена от приложенного к нему магнитного поля в направлениях параллельно и перпендикулярно обкладкам ячейки можно определить модули Франка жидкого кристалла, что затруднено сделать другими методами.
2. В тонких пленках холестерических жидких кристаллов (и слоистых магнитных наносистемах сходных с ними) с планарным сцеплением на поверхности возможны переходы между локально устойчивыми спиральными состояниями с различным числом витков спирали. В зависимости от напряжения и параметров сцепления с подложками энергетический барьер между этими состояниями может существенно изменяться. В холестерических жидких кристаллах наблюдается гистерезис изменения энергетического барьера в зависимости от предыстории изменения приложенного напряжения.
3. В пленках холестерических жидких кристаллах (и слоистых магнитных наносистемах сходных с ними) с планарным сцеплением на поверхности

возможно формирование различных равновесных и метастабильных фаз, включая спиральные, и конические структуры, наклонные спиральные состояния, а также локализованные топологические солитоны: скирмионные трубки, тороны, пиявки. Топологические солитоны могут встраиваться в более крупные доменные узоры и трансформироваться из одного вида в другой при изменении внешних условий и параметров системы.

4. В тонких пленках кубических гелимагнетиков стабилизация скирмионных и спиральных структур зависит от анизотропии и ориентации магнитного поля. Для полей в плоскости пленки скирмионы демонстрируют эллиптическую неустойчивость и существуют только в узком диапазоне параметров. При ориентации поля перпендикулярно поверхности возможно существование различных магнитных структур, включающих скирмионные трубки с осью, выходящей из плоскости, при значительно больших толщинах пленки.

## Глава 1

# Энергетические поверхности хиральных магнитных и жидкокристаллических систем

Холестерические жидкие кристаллы (ЖК) и магнитные системы с взаимодействием Дзялошинского-Мориа могут быть описаны формально одинаковыми функционалами свободной энергии. Это приводит к возможности формирования в них одинаковых локализованных хиральных состояний, некоторые из которых относятся к «топологическим солитонам». В этой главе вводится функционал свободной энергии таких систем, описывается процедура построения соответствующих многомерных энергетических поверхностей, которые можно использовать для определения энергетических барьеров между состояниями. В заключении главы приводится метод определения модулей Франка для ЖК комплексов на основе лантаноидов на основе экспериментальных данных по зависимости диэлектрической проницаемости от внешнего электрического поля.

### 1.1. Свободная энергия хиральных магнетиков и жидких кристаллов.

Магнитные и жидкокристаллические структуры представляют собой конфигурации магнитных моментов или директора в конденсированных (твердых или жидких) средах с дальним порядком. Параметр порядка в магнетиках – векторное поле намагниченности. Магнитные моменты могут быть локализованы на узлах кристаллической решетки или распределены непрерывно по объему системы. В жидком кристалле упорядоченное состояние задается распределением поля директора, определяющего направление ориентации молекул относительно выделенного направления. Можно говорить о непрерывном распределении

директора в среде или о директоре, относящемся к отдельным элементам, на которые разбивается весь объем жидкого кристалла. Хотя магнитоупорядоченное и жидкокристаллическое состояния имеют много принципиальных различий, часто возникающие в них упорядоченные структуры похожи, и формально, в определенном приближении, они могут быть описаны одинаковыми функционалами энергии. И в ЖК и в магнетиках, могут присутствовать взаимодействия, приводящие к образованию хиральных состояний и топологических солитонов, представляющих большой интерес для фундаментальной физики и приложений.

Рассмотрим сначала континуальную модель, описывающую тонкую пленку хирального магнетика / ЖК. Функционал энергии запишем в виде:

$$F[\mathbf{m}] = \int_V (\mathcal{A}(\nabla \mathbf{m}(\mathbf{r}))^2 - \mathcal{D} \mathbf{m}(\mathbf{r}) \cdot [\nabla \times \mathbf{m}(\mathbf{r})] - \mathcal{K}_b (\mathbf{m}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{z})^2) dV - \mathcal{K}_s \int_S (\mathbf{m}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{z})^2 dS, \quad (1.1)$$

здесь первый интеграл берется по объему системы  $V$ , второй по ограничивающей поверхности  $S$ , которая представляет собой две плоскости, нормальные к оси  $z$ ; параметр порядка задается векторным полем  $\mathbf{m}(\mathbf{r})$ . Для магнитных систем  $\mathbf{m}(\mathbf{r})$  - единичный вектор вдоль намагниченности в точке  $\mathbf{r}$ , для жидкокристаллических – директор ЖК в этой точке.  $\mathbf{z}$  - единичный вектор вдоль оси анизотропии, который предполагается ортогональным к поверхностям  $S$ .

В магнитных системах первый член в ((1.1)) описывает обменное взаимодействие с параметром обменной жесткости  $\mathcal{A}$ , который будем считать одинаковым во всем объеме пленки. Второй член соответствует хиральному взаимодействию Дзялошинского-Мории (ВДМ), интенсивность которого определяется параметром  $\mathcal{D}$ . Третий вклад в первом интеграле и второй интеграл представляют

собой энергии магнитной анизотропии. Значения анизотропии внутри пленки  $\mathcal{K}_b$  и на ее границах  $\mathcal{K}_s$  могут отличаться:  $\mathcal{K}_s \neq \mathcal{K}_b$ .

Для жидкокристаллических систем, значение  $\mathcal{A}$  и постоянная хирального взаимодействия  $\mathcal{D}$  выражаются через модули упругости Франка [19]  $K_1, K_2, K_3$ . В одноконстантном приближении, когда все упругие константы предполагаются равными,  $K_1 = K_2 = K_3 = K$ :  $\mathcal{A} = K/2$  и  $\mathcal{D} = Kq_0$ , где  $q_0$  – волновое число спирального состояния в неограниченном ЖК. В жидкокристаллических системах,  $\mathcal{K}_b$  играет роль константы взаимодействия с внешним магнитным полем, в то время как  $\mathcal{K}_s$  определяется сцеплением с поверхностью жидкокристаллической ячейки (условия сцепления предполагаются гомеотропными, если это не указано специально).

Для определения основного и метастабильных состояний, соответствующих локальным минимумам энергии, от непрерывной удобно перейти к дискретной решеточной модели на трехмерной кубической сетке  $N_x \times N_y \times N_z$  и использовать метод нелинейных сопряженных градиентов в декартовых координатах с ограничениями, фиксирующими единичную длину векторов  $\mathbf{m}$  на узлах решетки.

Если рассматриваемая система представляет собой тонкую пленку, используются периодические граничные условия в плоскости  $xy$ .

Получающаяся при дискретизации модель соответствует обобщенной модели Гейзенберга, используемой в теории магнетизма, в частности, для описания топологических магнитных структур [20].

Отметим, что часто на наномасштабе магнитные моменты локализованы на атомах в узлах кристаллографической решетки. В этом случае непрерывную модель можно рассматривать, как предельный случай реальной дискретной модели, когда постоянная решетки мала по сравнению с характерными размерами магнитных структур. Заметим, что структуры с различными кристаллическими решетками и параметрами обменных взаимодействий могут соответствовать

одной и той же континуальной модели.

Запишем энергию для дискретной решеточной модели в виде

$$E[\mathbf{S}] = - \sum_{\langle i,j \rangle} (J \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + \mathbf{D}_{i,j} \cdot [\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j]) - \sum_i K_i (S_i^z)^2, \quad (1.2)$$

здесь  $\mathbf{S}_i \equiv \mathbf{m}_i$  - единичные вектора вдоль магнитного момента / директора ЖК на узле  $i$ . В дальнейшем, для краткости будем иногда называть эти вектора спинами. Суммирование  $\langle i, j \rangle$  в ((1.2)) выполняется по узлам – ближайшим соседям. Через  $J$  обозначен параметр Гейзенберговского обмена, а через  $\mathbf{D}_{ij}$  – вектор Дзялошинского-Мории, описывающие симметричное и антисимметричное взаимодействие между спинами, локализованными на узлах  $i$  и  $j$ . Вектор  $\mathbf{D}_{ij}$  будем считать направленным вдоль отрезка, соединяющего узлы  $i$  и  $j$ , что способствует стабилизации спиральных структур и доменных стенок Блоховского типа. Величина вектора  $|\mathbf{D}_{ij}| = D$  и параметра  $J$  предполагаются одинаковыми для всех соседних пар узлов.

Последний член в выражении для энергии ((1.2)) представляет собой вклад от одноосной магнитной анизотропии с осью анизотропии, нормальной к плоскости подложек (ось  $z$ ). В рассматриваемых далее системах предполагается, что значения параметра анизотропии  $K_i$  на границах и для внутренних узлов образца могут отличаться. Будем предполагать, что параметр анизотропии содержит вклад  $K^b$ , одинаковый для всех слоев решетки, но на границе к нему добавляется поверхностный вклад  $K^s$ . Таким образом,  $K_i = K^b$  для внутренних слоев и  $K_i = K^b + K^s$  для поверхностных.

В магнитных системах для описания взаимодействия с магнитным полем в объемную часть (1.1) добавляется дополнительный вклад Зеемановского взаимодействия:

$$w_Z = -\mu_0 M \mathbf{m}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{H}. \quad (1.3)$$

Между параметрами непрерывной модели ((1.1)) и моделью на дискретной решетке ((1.2)) имеется соответствие [7]. Для простой кубической решетки оно имеет вид:

$$2a\mathcal{A} = J, \quad a^2\mathcal{D} = D, \quad a^3\mathcal{K}(\mathbf{r}) = K_i, \quad (1.4)$$

где  $a$  - постоянная решетки.

Для ЖК параметры дискретной модели  $J$  и  $D$  определяются модулями Франка, причем выражение ((1.2)) выводится в одноконстантном приближении. Параметры анизотропии связаны с внешними полями и взаимодействием ЖК с границами ячейки, в которую он помещен.

Анизотропия типа “легкая плоскость” в объеме соответствует энергии взаимодействия ЖК, имеющего отрицательную анизотропию магнитной восприимчивости  $\Delta\chi < 0$ , с магнитным полем, приложенным перпендикулярно обкладкам ячейки.

Анизотропия типа легкая ось в объеме описывает взаимодействие с магнитным полем ЖК, имеющего  $\Delta\chi > 0$ .

Поверхностная анизотропия  $\mathcal{K}_s > 0$  отвечает гомеотропным условиям сцепления, а  $\mathcal{K}_s < 0$  – планарным. Отдельно стоит отметить модель жесткого сцепления, где ориентация жидкого кристалла на поверхности фиксируется в согласии с начальной ориентацией.

Хиральность ЖК характеризуется равновесным шагом спиральной структуры, представляющей основное состояние в неограниченном образце  $p_0$  и соответствующим волновым числом  $q_0 = 2\pi/p_0 = \arctan(D/J)$ . В нематическом жидком кристалле  $D = 0$  и, следовательно,  $p_0 = 0$ .

Задание функционала энергии позволяет найти не только равновесное состояние системы, но и ее динамику. В случае магнитных систем динамика определяется уравнением Ландау-Лифшица-Гильберта, в котором эффективное магнитное поле, действующее на каждый магнитный момент определяется произ-



водной от энергии по намагниченности.

Для жидкокристаллических систем, при описании динамики локализованных структур, например, в случае неоднородного распределения  $D$  в системе, одноконстантное приближение может оказаться недостаточным. В этом случае необходимо использовать более общее выражение для энергии ЖК. Остановимся на этом вопросе более подробно.

Плотность свободной энергии Франка  $\omega$  жидкого кристалла в предположении различных значений модулей Франка задается [19]:

$$\omega[\mathbf{n}] = \frac{1}{2} \left[ K_1(\operatorname{div} \mathbf{n})^2 + K_2(\mathbf{n} \cdot \operatorname{rot} \mathbf{n} + q_0)^2 + K_3(\mathbf{n} \times \operatorname{rot} \mathbf{n})^2 - \Delta\chi(\mathbf{n} \cdot \mathbf{H})^2 \right], \quad (1.5)$$

где  $K_1, K_2, K_3$  – константы Франка,  $q_0 = 2\pi/P$  – волновое число,  $P$  – период холестерической спирали,  $\mathbf{H}$  – внешнее магнитное поле, и  $\Delta\chi = \chi_{\parallel} - \chi_{\perp}$  – разность магнитной восприимчивости  $\Delta_{\parallel}$  в направлении  $\mathbf{n}$  и  $\Delta_{\perp}$  в перпендикулярном направлении [21]. Типичные значения констант Франка [22–26]:

$$0.5 < \frac{K_2}{K_1} < 0.8, \quad 0.5 < \frac{K_3}{K_1} < 3.0. \quad (1.6)$$

Волновое число  $q_0$  (функция от  $\mathbf{x}$ ) может быть положительным, отрицательным или равным нулю,  $q_0 > 0$  ( $q_0 < 0$ ) соответствует правовинтовой (левовинтовой) спирали. Значение  $\Delta\chi$  зависит от свойств ЖК и может быть положительным или отрицательным.

Как отмечалось ранее, выражение для плотности энергии можно значительно упростить, если все константы Франка одинаковы. Представим плотность энергии, соответствующую этому приближению в явном виде, рассматри-

вая другие вклады (1.3) как возмущение. Для этого используем тождество:

$$(\operatorname{div} \mathbf{n})^2 + (\operatorname{rot} \mathbf{n})^2 + \nabla \cdot ((\nabla \cdot \mathbf{n})\mathbf{n} - \mathbf{n}(\nabla \cdot \mathbf{n})) = (\operatorname{grad} \mathbf{n})^2. \quad (1.7)$$

Последнее слагаемое слева описывает поверхностное взаимодействие и при жестких граничных условиях не будет входить в ответ вследствие теоремы о дивергенции. Оставшаяся часть, при использовании явных индексов и обозначая  $n_{i,j} = \partial n_i / \partial x_j$ , записывается следующим образом:

$$\left( \sum_i n_{i,i} \right)^2 + \sum_i \left( \sum_{j,k} \varepsilon_{ijk} n_{k,j} \right)^2 = \sum_{i,j} (n_{i,j})^2. \quad (1.8)$$

Используем еще одно тождество, представляющее собой теорему Пифагора для  $\operatorname{rot} \mathbf{n}$ :

$$\mathbf{n}^2 (\nabla \times \mathbf{n})^2 = (\mathbf{n} \cdot (\nabla \times \mathbf{n}))^2 + (\mathbf{n} \times (\nabla \times \mathbf{n}))^2, \quad (1.9)$$

где слагаемые справа – это квадраты проекций  $\operatorname{rot} \mathbf{n}$  на направление  $\mathbf{n}(x)$  и ортогональное направление  $\mathbf{n}(x)^\perp$ . Учитывая (1.8), (1.9) и условие  $\mathbf{n}(x)^2 = 1$ , запишем плотность энергии следующим образом:

$$\begin{aligned} \omega = \frac{1}{2} \left[ K_1 (\nabla \mathbf{n})^2 - K_1 (\nabla \times \mathbf{n})^2 + K_2 (\mathbf{n} \cdot \nabla \times \mathbf{n})^2 + 2K_2 q_0 (\mathbf{n} \cdot \nabla \times \mathbf{n}) + K_2 q_0^2 + \right. \\ \left. + K_3 (\nabla \times \mathbf{n})^2 - K_3 (\mathbf{n} \cdot (\nabla \times \mathbf{n}))^2 - \Delta \chi (\mathbf{n} \cdot \mathbf{H})^2 \right]. \quad (1.10) \end{aligned}$$

Постоянное слагаемое может быть опущено. Собирая подобные члены, можно получить для плотности энергии следующее выражение:

$$\begin{aligned} \omega = \frac{1}{2} \left[ K_1 (\nabla \mathbf{n})^2 + (K_3 - K_1) (\nabla \times \mathbf{n})^2 + (K_2 - K_3) (\mathbf{n} \cdot \nabla \times \mathbf{n})^2 + \right. \\ \left. + 2K_2 q_0 (\mathbf{n} \cdot \nabla \times \mathbf{n}) - \Delta \chi (\mathbf{n} \cdot \mathbf{H})^2 \right]. \quad (1.11) \end{aligned}$$

Последнее слагаемое появляется, если ЖК находится во внешнем магнитном поле [27, 28]. За хиральное упорядочение отвечает предпоследний член, содержащий  $q_0$ . Второе и третье слагаемые в (1.11) отличны от нуля только если соответствующие константы Франка различны. Отметим, что все слагаемые в выражении для плотности энергии за исключением  $(\mathbf{n} \cdot \nabla \times \mathbf{n})^2$  квадратичны относительно  $\mathbf{n}$ . Если интерес представляет только процессы типа сжатия холестерических пальцев [29–31], которые контролируется параметром  $K_3$ , то можно упростить выражение, положив  $K_2 = K_3$ , и считать энергию квадратичной. Если, кроме того,  $K_1 = K_3$  (одноконстантное приближение) то выражение сводится к подынтегральной части уравнения (1.1).

## 1.2. Основное и метастабильные состояния магнетиков и жидкокристаллических систем в тонких пленках.

Локально устойчивым состояниям соответствуют минимумы на энергетической поверхности системы. Их можно определить численно, начиная с произвольной магнитной конфигурации путем смещения состояния на энергетической поверхности в направлении, противоположном градиенту энергии. На поверхности возможно существование несколько локальных минимумов с различной энергией, каждый из которых соответствует своей магнитной конфигурации. При этом неколлинеарная магнитная структура может быть локализована в небольшой области пространства, а может занимать весь образец.

Для магнитных систем, в достаточно большом магнитном поле, основное состояние соответствует однородному ферромагнитному состоянию. При наличии антисимметричного обменного взаимодействия в небольших магнитных полях минимуму энергии соответствует спиральная магнитная структура. На фоне этих делокализованных состояний возможно формирование компактных метастабильных структур, которым соответствуют менее глубокие минимумы

на энергетической поверхности.

В ограниченных образцах на форму энергетической поверхности существенное влияние могут оказывать граничные условия. Периодические граничные условия позволяют моделировать структуры, повторяющиеся в пространстве в одном, двух или трех направлениях. Однако, пространственный размер таких структур не превосходит размера рассматриваемой ячейки.

На границах рассматриваемого расчетного домена возможно изменение параметров системы, что позволяет описывать интерфейсы и свободные поверхности в магнитных системах или взаимодействие с поверхностью ячейки в жидких кристаллах. В последнем случае, как правило, для пограничных слов в функционал энергии вводится добавочный член имеющий вид одноосной анизотропии [13].

Рассмотрим в качестве примера структуру, основное состояние которой неколлинеарно, неоднородно в одном из направлений, но соответствующий минимум на энергетической поверхности может быть найден аналитически.

Рассмотрим магнетик/ЖК в полубесконечном пространстве  $z \geq 0$  с жесткими граничными условиями на поверхности, при которых магнитные моменты/директор зафиксированы ортогонально плоскости границы. Ось  $z$  выберем в этом же направлении. Будем искать равновесную конфигурацию, однородную в плоскости  $xy$ .

Направление каждого магнитного момента может быть задано полярным и азимутальным углами  $\theta(z)$  и  $\phi(z)$ , где  $\theta$  – угол между магнитным моментом (или директором) и осью  $z$ .

$$n_x = \cos \varphi \sin \theta, \quad n_y = \sin \varphi \sin \theta, \quad n_z = \cos \theta. \quad (1.12)$$

Для однородного в плоскости  $xy$  состояния  $\mathbf{n} = \mathbf{n}(z)$  и

$$F = S \int_{\mathbb{R}_+} \omega dz \quad (1.13)$$

где через  $\mathbb{R}_+$ , обозначена область  $z \geq 0$ , а за  $S$  – площадь ячейки.

В этом случае, согласно (1.11), свободную энергию можно переписать как

$$F = \frac{V}{2} K_2 q_0^2 + \frac{S}{2} \int_{\mathbb{R}_+} [A(\theta)(\theta')^2 + B(\theta)(\varphi')^2 - C(\theta)\varphi' + D(\theta)] dz, \quad (1.14)$$

где

$$A(\theta) = K_1 \sin^2 \theta + K_3 \cos^2 \theta, \quad (1.15)$$

$$B(\theta) = \sin^2 \theta (K_2 \sin^2 \theta + K_3 \cos^2 \theta), \quad (1.16)$$

$$C(\theta) = q_0 K_2 \sin^2 \theta, \quad (1.17)$$

$$D(\theta) = -\chi H^2 \cos^2 \theta. \quad (1.18)$$

Первая вариация свободной энергии может быть записана в виде:

$$\begin{aligned} \delta F = \frac{S}{2} \int_{\mathbb{R}_+} \left( [A'\theta'^2 \delta\theta + 2A\theta''(\delta\theta)' + B'\varphi'^2 \delta\varphi + 2B\varphi'](\delta\varphi)' - \right. \\ \left. - 2C'\varphi' \delta\theta - 2C(\delta\varphi)' + D'\delta\theta \right) dz. \quad (1.19) \end{aligned}$$

Приравнивая к нулю коэффициенты при вариациях  $\delta\theta$  и  $\delta\varphi$  под интеграла-

лом, получим 2 уравнения:

$$A'\theta'^2 + 2A\theta'' = B'\varphi'^2 - 2C'\varphi' + D', \quad (1.20)$$

$$\frac{d}{dz}(B\varphi' - C) = 0. \quad (1.21)$$

В одноконстантном приближении  $K = K_1 = K_2 = K_3$ :

$$2K\theta'' = 2K \sin \theta \cos \theta \varphi'^2 - 4q_0K \sin \theta \cos \theta \varphi' - \chi H^2 \sin \theta \cos \theta \quad (1.22)$$

и

$$\frac{d}{dz}(K \sin^2 \theta (\varphi' - q_0)) = 0. \quad (1.23)$$

Запишем граничные условия на  $\theta$ :

$$\theta(z)|_{z=0} = 0, \quad \theta(z)|_{z=\infty} = \frac{\pi}{2}. \quad (1.24)$$

При нулевом поле из уравнения уравнения (1.23) имеем

$$\varphi = q_0 z + \varphi_0, \quad (1.25)$$

и решение для  $\theta$ :

$$\theta(z) = 2 \arctan \exp |q_0 z| - \frac{\pi}{2} \quad (1.26)$$

где  $\varphi_0$  это значение угла  $\varphi$  при  $z = 0$ . Это решение описывает спиральное упорядочение магнитных моментов (направления директора), в котором при увеличении  $z$  происходит равномерное вращение моментов относительно оси  $z$  с уменьшающейся их проекцией на эту ось .

В пленках конечной толщины с конечным значением анизотропии на поверхности  $K^s$ , решение может быть получено численно. На рисунке 3.2 изображена зависимость проекции  $z$  (расстояние от нижней границы вдоль нормали) и соответствующая конфигурация.

Рассмотренные решения будут использоваться в дальнейшем при анализе фазовой диаграммы магнетика с анизотропным обменом/холестерического ЖК в тонких пленках/ЖК ячейках.

### 1.3. Определение модулей Франка жидких кристаллов содержащих комплексы лантаноидов

Для теоретического описания свойств жидких кристаллов на основе функционала энергии необходимо знание модулей Франка. Поэтому задача их определения на основе экспериментальных данных имеет принципиальное значение для построения количественной теории. Наиболее распространенные методы определения модулей Франка связаны с исследованием зависимости коэффициента преломления света от ориентации молекул в жидких кристаллах методами спектроскопии комбинационного и динамического рассеяния света [19].

Определение этих параметров для жидких кристаллов, содержащих комплексы лантаноидов с органическими лигандами (лантанидомезогенами) требует другого, не оптического подхода. Температура жидкокристаллической фазы для таких соединений находится в области 130 С, и они не прозрачны в оптическом диапазоне. Сцепление с поверхностью жидкокристаллической ячейки в этих соединениях таково, что угол между нормалью к поверхности и директором отличается от нуля или  $\pi/2$ .

Интерес к этим материалам объясняется тем, что они сочетают высокоэффективную люминесценцию с аномально большими значениями анизотропии магнитной восприимчивости  $\Delta\chi = \chi_{\parallel} - \chi_{\perp}$ , где  $\chi_{\parallel}$  и  $\chi_{\perp}$  - компоненты маг-

нитной восприимчивости в направлениях, параллельных и перпендикулярных оси преимущественной ориентации молекул [21]. Такие свойства нематических лантанидомезогенов позволяют создавать оптические среды с линейно поляризованной люминесценцией для использования в оптоэлектронных устройствах, управляемых магнитными и электрическими полями [32]. Некоторые жидкокристаллические комплексы на основе гадолиния применяются в качестве контрастных веществ в магнитно-резонансной томографии [33].

Для эффективного практического использования лантанидомезогенов необходимо понимание ориентационных процессов, происходящих в материале под действием магнитных и электрических полей. Ниже мы рассмотрим вопрос об определении модулей Франка в таких системах при учете пространственной неоднородности ориентации лантанидомезогенов.

Для решения этой задачи можно использовать метод, основанный на измерении диэлектрической проницаемости ячейки в зависимости от приложенных к ячейке внешних полей. Такой эксперимент был проведен для молекул ЖК  $Gd(CPDk_{3-5})_3Vру_{17-17}$  и  $Er(DDk_{3-5})_3Vру_{17-1}$ . Эти ЖК комплексы обладают большим значением анизотропии магнитной восприимчивости:  $\Delta\chi = 1805 \cdot 10^{-6} \text{ см}^3/\text{моль}$  для комплекса на основе гадолиния и  $\Delta\chi = 9894 \cdot 10^{-6} \text{ см}^3/\text{моль}$  для комплекса на основе эрбия [34, 35]. Положительный знак  $\Delta\chi$  был определен на основе анализа оптического двулучепреломления в ЖК в магнитном поле (эффект Коттона-Муттона) [36]. На рисунках 1.1 (а,б) показаны химические структуры молекулы ЖК.



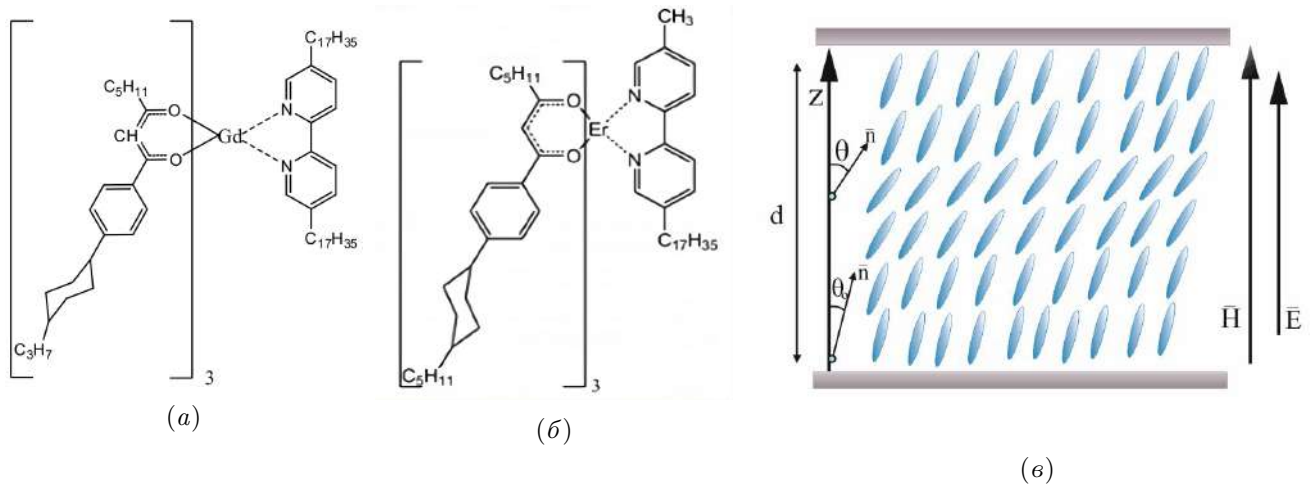


Рис. 1.1. Химическая структура жидкого кристалла на основе а) гадолиния и б) эрбия. в) Ориентация молекул нематических жидких кристаллов в ячейке с образцом с магнитным полем перпендикулярно обкладкам ячейки. Здесь  $\mathbf{n}$  – директор,  $\theta$  – угол между директором и осью  $z$ ),  $\theta_0$  – угол предварительного наклона директора на поверхностях ячейки.

Для анализа ориентации ЖК в магнитном поле измерялась электрическая емкость конденсатора, заполненного ЖК в зависимости от напряженности внешнего магнитного поля направленного в плоскости и перпендикулярно плоскости ячейки [37,38]. На рисунке 1.1 (в) схематически показано распределение директора внутри конденсатора, образованного поверхностями ячейки. Изменение ориентации директора ЖК во внешних полях сопровождается изменением электрической емкости ячейки. Измерение емкости жидкокристаллической ячейки при различной напряженности магнитного поля  $\mathbf{H}$  дает информацию о ориентации директора в образце. Максимальная величина магнитного поля в процессе измерений достигала 7500 Э.

Измерение емкости позволяет получить эффективную величину диэлектрической проницаемости  $\bar{\epsilon}$ , характеризующую материал внутри конденсатора:

$$\bar{\epsilon} = \frac{C \cdot d}{S}, \quad (1.27)$$

где:  $C$  – емкость конденсатора,  $d$  – расстояние между пластинами и  $S$  – площадь пластин конденсатора.

Экспериментально полученные зависимости эффективных диэлектрических проницаемостей от приложенного в плоскости и перпендикулярно плоскости магнитного поля представлены на Рисунке 1.2. Рисунок (а) соответствует ЖК с комплексом гадолиния, (б) - эрбия, а (в) – ЖК 5СВ. Отметим, что для представленных веществ поведение диэлектрической проницаемости, в зависимости от поля, различно: для поля, приложенного в плоскости обкладок конденсатора у образца 5СВ  $\bar{\epsilon}$  понижается с увеличением поля, для ЖК с гадолинием - увеличивается. Для обоих типов ЖК значение анизотропии магнитной восприимчивости  $\Delta\chi > 0$ , и директор ориентируется преимущественно вдоль магнитного поля в больших полях. Эффективное значение диэлектрической проницаемости ЖК становится ближе к значению  $\epsilon_{\perp}$ , так как директор становится ориентирован перпендикулярно электрическому полю. Для 5СВ  $\epsilon_{\parallel} > \epsilon_{\perp}$ , и поэтому  $\bar{\epsilon}$  падает. Для комплекса гадолиния и эрбия  $\Delta\epsilon = \epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp} > 0$ , и поэтому  $\bar{\epsilon}$  растёт.

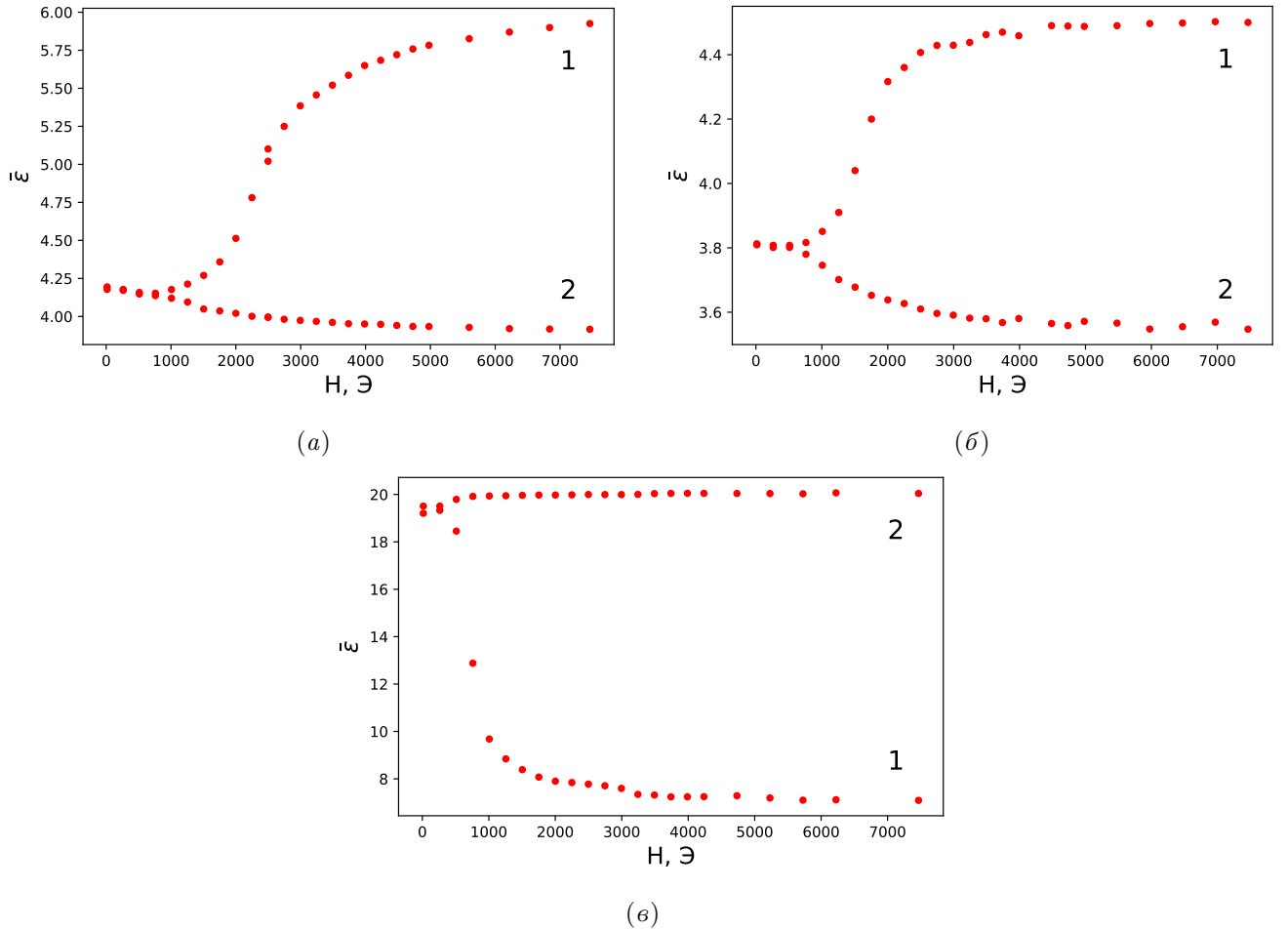


Рис. 1.2. а) Зависимость эффективной диэлектрической проницаемости  $\bar{\epsilon}$  ячейки с ЖК комплексом гадолиния (а), эрбия (б) и 5СВ (в) от напряженности магнитного поля для случая поля приложенного вдоль обкладок конденсатора (1) и поперек обкладок конденсатора (2)

Изменение ориентации директора в рассматриваемых системах связано с переходом Фредерикса. Классический эффект Фредерикса давно изучается и подробно описан как теоретически, так и экспериментально [19, 39, 40]. В последнее время большое внимание привлекает изучение этого эффекта в более сложных системах и в более сложных ситуациях, когда система неоднородна и ее свойства могут меняться под воздействием внешних полей [41–48]. При теоретическом описании перехода Фредерикса необходим аккуратный анализ граничных условий. Наиболее часто в литературе описывают сцепление молекул с ориентирующей поверхностью с помощью потенциала Рапини–Популяра гауссового типа [49]. В нематических жидких кристаллах с конечной энергией

сцепления переход Фредерикса является непрерывным, и ориентация директора выше порога изменяется во всем объеме, включая границу [39].

Между описанием эффекта Фредерикса в электрическом и магнитном полях имеется существенная разница. Она связана, в частности с тем, что электрическое поле внутри жидкого кристалла с неоднородным распределением директора не является пространственно однородным [27, 28]. Детали этой проблемы и выбор термодинамического потенциала, описывающего систему во внешнем поле, обсуждаются в работах [50–53].

Рассмотрим изменение ориентации директора при сильном и слабом сцеплении в присутствии внешнего электрического и магнитного полей. Для определения типа равновесной конфигурации директора используем метод, основанный на минимизации свободной энергии жидкого кристалла. При этом упругие постоянные Франка будем считать неизвестными параметрами, которые должны быть получены путем минимизации функционала свободной энергии.

Для теоретического описания приведенных на 1.2 результатов воспользуемся выражением (1.11) для свободной энергии. Будем считать, что ориентация молекул нематического жидкого кристалла в плоскости, перпендикулярной границам ячейки и параллельной электрическому полю  $\mathbf{E}$  и ориентирующего магнитного поля  $\mathbf{H}$  (для случая их параллельности) соответствует представленной на Рисунке 1.1 (б).

В предположении что директор зависит только от координаты  $z$ , получаем выражение для свободной энергии:

$$F = S \int_0^d dz \omega(z), \quad (1.28)$$

где  $S$  – площадь верхней и нижней поверхностей ячейки, представляющих собой обкладки конденсатора.

Для расчета диэлектрической проницаемости материала с  $\Delta\chi > 0$  направ-

ление директора можно задавать одним углом  $\theta$  [39]. Тогда, записывая вклад электрического поля через напряжение на обкладках конденсатора [54] получаем для плотности энергии:

$$\omega = \frac{1}{2} \left[ (K_1 \sin^2 \theta + K_3 \cos^2 \theta) (\theta')^2 \mp \Delta\chi H^2 \sin^2 \theta - \frac{\Delta\varepsilon}{4\pi} \frac{U^2 d}{\int_0^d (\varepsilon_{\perp} + \Delta\varepsilon \cos^2 \theta)^{-1} dz} \cos^2 \theta \right]. \quad (1.29)$$

Верхний знак соответствует  $\mathbf{H} \perp \mathbf{E}$ , а нижний –  $\mathbf{H} \parallel \mathbf{E}$ .

При заданном значении напряженности магнитного поля ориентация директора ЖК соответствует минимуму свободной энергии (1.28). Для заданной ориентации директора, эффективная диэлектрическая проницаемость образца  $\bar{\varepsilon}$  определяется через угол  $\theta$ :

$$\bar{\varepsilon} = \frac{d}{\int_0^d (\varepsilon_{\perp} + \Delta\varepsilon \cos^2 \theta)^{-1} dz}. \quad (1.30)$$

Для определения ориентации директора  $\theta(z)$  будем искать минимум (1.28) с дополнительными граничными условиями. В дальнейшем предполагается что граничные условия на поверхностях  $z = 0$  и  $z = d$  одинаковы. Будут рассмотрены модель сильного

$$\theta(0) = \theta(d) = \theta_0, \quad (1.31)$$

и слабого сцепления, которая сводится к добавлению к плотности энергии (1.29) следующего вклада:

$$\omega_{sur} = k \sin^2(\theta - \theta_0), \quad (1.32)$$

где коэффициент связи  $k$  и угол  $\theta_0$  – феноменологические параметры. Отметим, что модели с нулевым  $\theta_0$  не позволяют описать экспериментальные данные.

Модель мягкого сцепления соответствует модели Рапини-Папулара [49].

Для случая  $\mathbf{H} \perp \mathbf{E}$  при мягких граничных условиях

$$\theta[H \rightarrow \infty] \rightarrow \frac{\pi}{2} \implies \bar{\varepsilon}[H \rightarrow \infty] \rightarrow \varepsilon_{\perp}. \quad (1.33)$$

В случае  $H \rightarrow 0$ :

$$\theta[H \rightarrow 0] \rightarrow \theta_0. \quad (1.34)$$

Тогда, используя уравнение (1.30), можно получить

$$\bar{\varepsilon}[H \rightarrow 0] \rightarrow \varepsilon_{\perp} + \Delta\varepsilon \cos^2 \theta_0. \quad (1.35)$$

Это, в свою очередь, приводит к условию на  $\theta_0$ :

$$\theta_0 = \theta(0) = \theta(d) = \arccos \left( \sqrt{\frac{\bar{\varepsilon}_0 - \varepsilon_{\perp}}{\Delta\varepsilon}} \right), \quad (1.36)$$

где  $\bar{\varepsilon}_0$  – диэлектрическая проницаемость образца в отсутствие электрического и магнитного полей. Если напряженность электрического поля ниже порога Фредерикса, можно оценить угол преднаклона  $\theta_0$  из измерения при  $H = 0$ .

Профиль директора, т.е. зависимость  $\theta(z)$  определяется путем минимизации функционала свободной энергии (1.28) с граничными условиями (1.31) или (1.32). Таким образом можно определить зависимость  $\bar{\varepsilon}$  от  $H$  при заданных параметрах  $K_1$  и  $K_3$ . Эта задача решалась численно для различных значений  $K_1$ ,  $K_3$  для значений магнитного поля  $H$ , использованных в эксперименте.

Первым шагом численной процедуры по расчету модулей Франка было определение зависимости  $\theta$  от  $z$  для магнитных полей при которых измерялась емкость ячейки ЖК. Отметим, что прямое численное решение задачи минимизации, в отличие от решения с помощью уравнения Эйлера-Лагранжа [40], не требует вычисления второй производной.

Вторым шагом было найти значение модулей Франка  $K_1$ ,  $K_3$ , дающих теоретическую зависимость  $\bar{\varepsilon}$  от  $H$ , наиболее близкую к экспериментальной. Для этого использовался метод наименьших квадратов (Least Squares), предполагающий минимизацию величины

$$LS(K_1, K_3) = \frac{1}{|\Delta\varepsilon|N} \sqrt{\sum (\bar{\varepsilon}_{exp} - \bar{\varepsilon}(K_1, K_3))^2}, \quad (1.37)$$

где суммирование ведется по всем  $N$  точкам экспериментальной зависимости  $\bar{\varepsilon}_{exp}$  от поля  $H$ , а  $\bar{\varepsilon}(K_1, K_3)$  - численное значение, рассчитанное для этого поля. По критерию минимума (1.37) находим значения  $K_1$  и  $K_3$ , дающие наименьшее среднеквадратичное отклонение от экспериментальных данных.

Таким образом, последовательно решаются две задачи минимизации: одна для нахождения  $\theta(z)$ , а вторая для определения модулей  $K_1$ ,  $K_3$ , дающих результаты наиболее близкие к экспериментальным данным.

На рисунке 1.3 показана рассчитанная зависимость  $\theta(\bar{z})$ , где  $\bar{z} = z/d$  при  $K_1 = 2,5 \cdot 10^{-5}$  дин,  $K_3 = 1,7 \cdot 10^{-4}$  дин для комплекса гадолия.

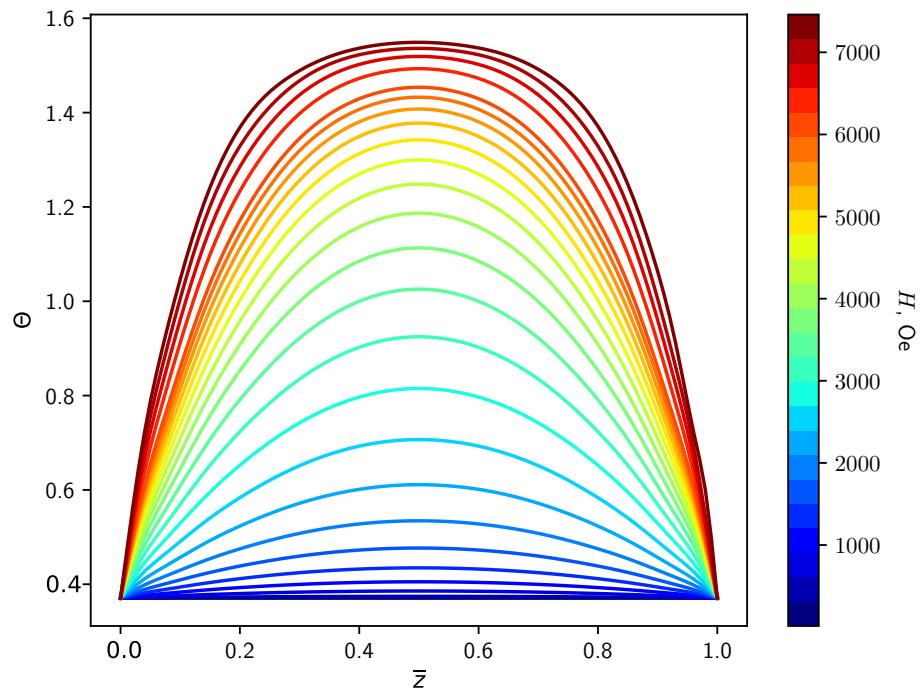


Рис. 1.3. Профили угла  $\theta$  в зависимости от  $\bar{z}$  ЖК комплексов на основе гадолиния с различными значениями  $H$  при  $K_1 = 2,5 \cdot 10^{-5}$  дин,  $K_3 = 1,7 \cdot 10^{-4}$  дин,  $\theta_0 = 20,6^\circ$ .

Аналогичные графики были получены для других значений модулей Франка  $K_1, K_3$  для всех веществ.



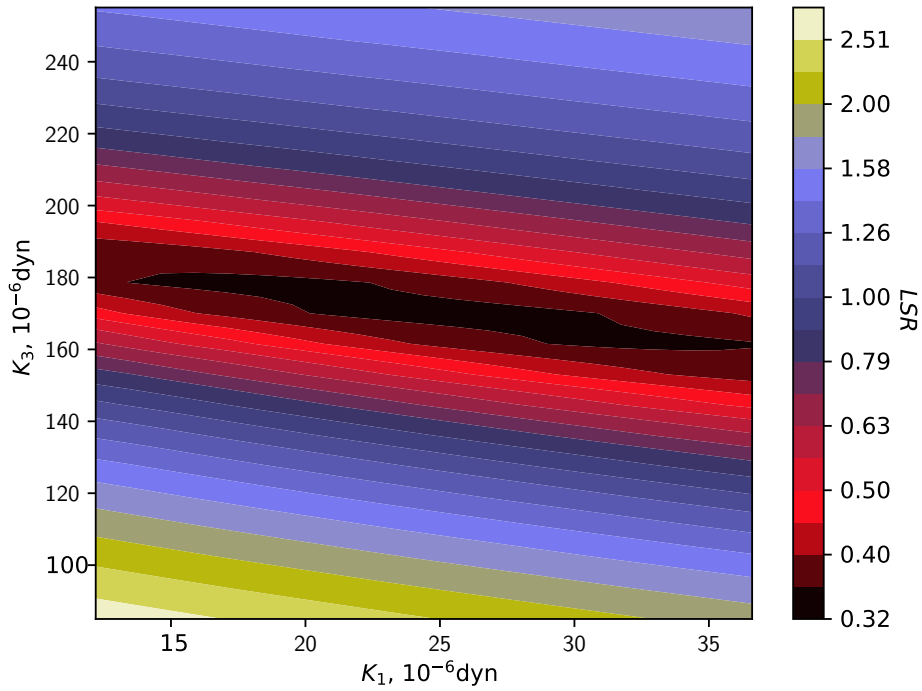


Рис. 1.4. Карта для критерия LS по  $K_1$ ,  $K_3$  для ЖК комплексов на основе гадолиния.

Это позволило построить карту  $LS(K_1, K_3)$ , показанную на Рисунке 1.4. Эта карта была составлена с использованием 1681 равномерно распределённых точек. Минимум был достигнут при  $K_1 = 2,5 \cdot 10^{-5}$  дин,  $K_3 = 1,7 \cdot 10^{-4}$  дин, именно этим значениям соответствуют зависимости на рисунке 1.3. Были проведены расчеты как для сильного, так и для слабого сцепления (с различными значениями коэффициента  $k$  в уравнении (1.32)). Наилучшее совпадение для лантанидомезогенов было достигнуто в случае сильных граничных условий.

Для исследования оценки погрешности была построена зависимость  $\bar{\varepsilon}(H)$  согласно уравнению (1.30) для того же набора магнитных полей  $H$ , что и в эксперименте. Были использованы оптимальные значения модулей Франка, указанные выше и  $\theta_0 = 20,6^\circ$ . Предположим, теперь что для данной зависимости  $K_1$  и  $K_3$  неизвестны, и будем искать их по критерию минимизации LS (1.37). Карта  $K_1$ ,  $K_3$ , полученная при этом, приведена на рисунке 1.5. Видно, что минимум обнаруживается при тех же  $K_1$ ,  $K_3$ , что и ожидалось. Для комплекса на

основе эрбия минимум был достигнут при  $K_1 = 7 \cdot 10^{-6}$  дин,  $K_3 = 6,7 \cdot 10^{-4}$  дин.

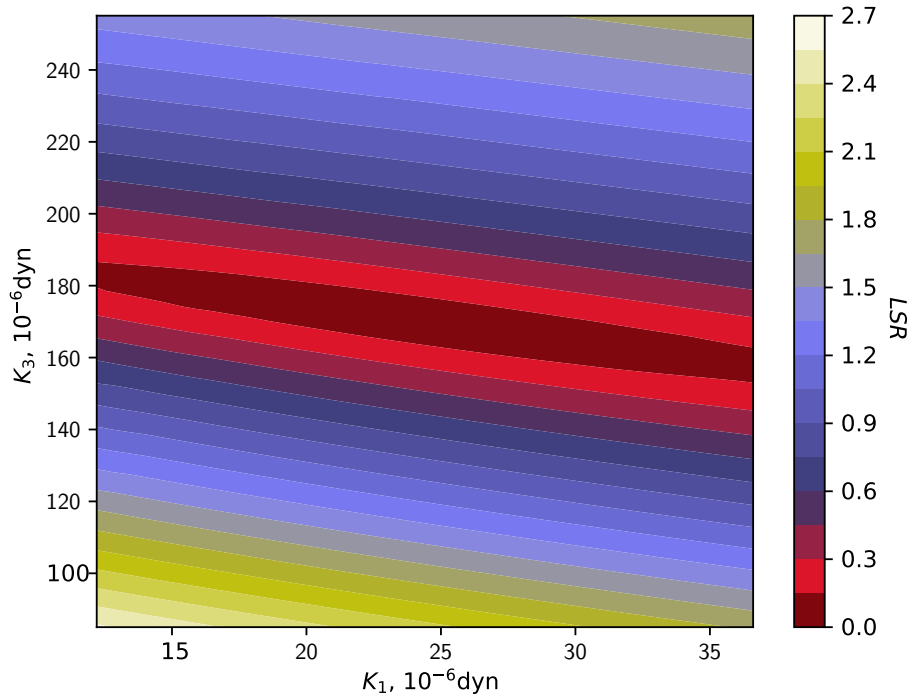
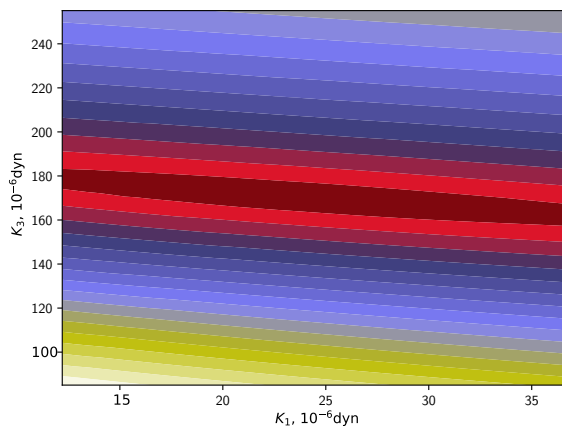
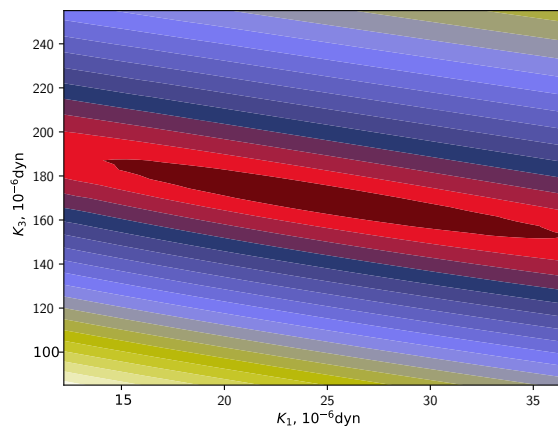


Рис. 1.5. Карта для критерия LS на  $K_1$ ,  $K_3$  для тестовой зависимости ЖК комплекса на основе гадолиния.

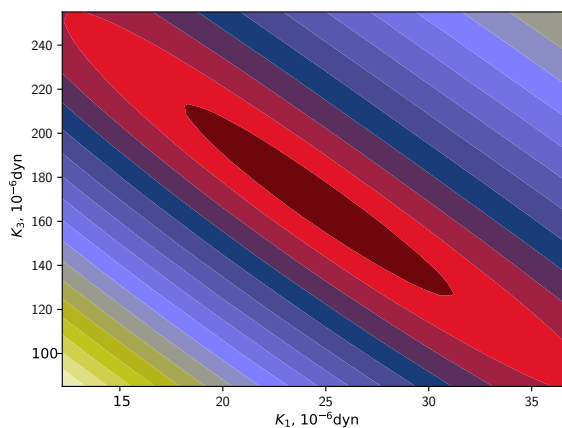
На рисунке 1.6 показана зависимость между углом предварительного наклона  $\theta_0$  и углом наклона длинной оси эллипсов при постоянном значении  $LS$  для комплекса гадолиния.



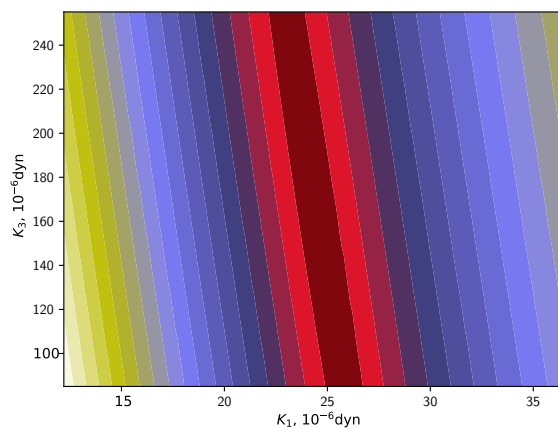
(a)



(б)



(в)



(г)

Рис. 1.6. Карта для критерия LS на  $K_1$ ,  $K_3$ . для тестовой зависимости ЖК комплекса на основе гадолиния для различных значений  $\theta_0$ :  $10^\circ$  (а),  $30^\circ$  (б),  $60^\circ$  (в),  $80^\circ$  (г). Здесь значения  $K_1$  и  $K_3$  отложены по осям в том же масштабе, что и на рисунке 1.5.

Другой способ провести самопроверку – выполнить те же измерения для ЖК с известными модулями Франка. В качестве такой системы был взят хорошо изученный ЖК 5СВ. Результаты измерений 5СВ для той же ячейки и той же геометрии представлены на рисунке 1.7.

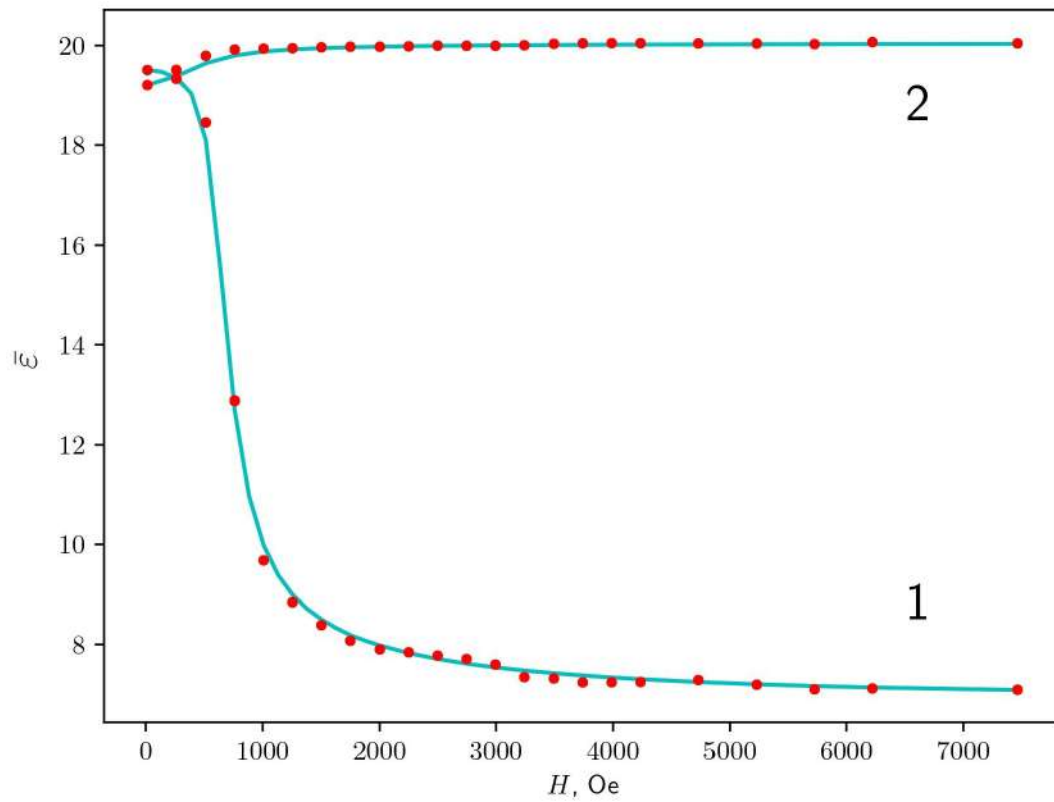


Рис. 1.7. Зависимости  $\bar{n}$  от  $H$  для 5СВ: экспериментальная (точки) и теоретическая (сплошная линия). Линия и точки, отмеченные цифрой 1, соответствуют случаю  $\mathbf{H} \perp \mathbf{E}$ . Линия и точки, отмеченные цифрой 2, соответствуют случаю  $\mathbf{H} \parallel \mathbf{E}$ .

Была применена численная процедура поиска модулей Франка описанная ранее. Соответствующая карта  $LS$  на  $K_1, K_3$  для 5СВ показана на Рисунке 1.8.

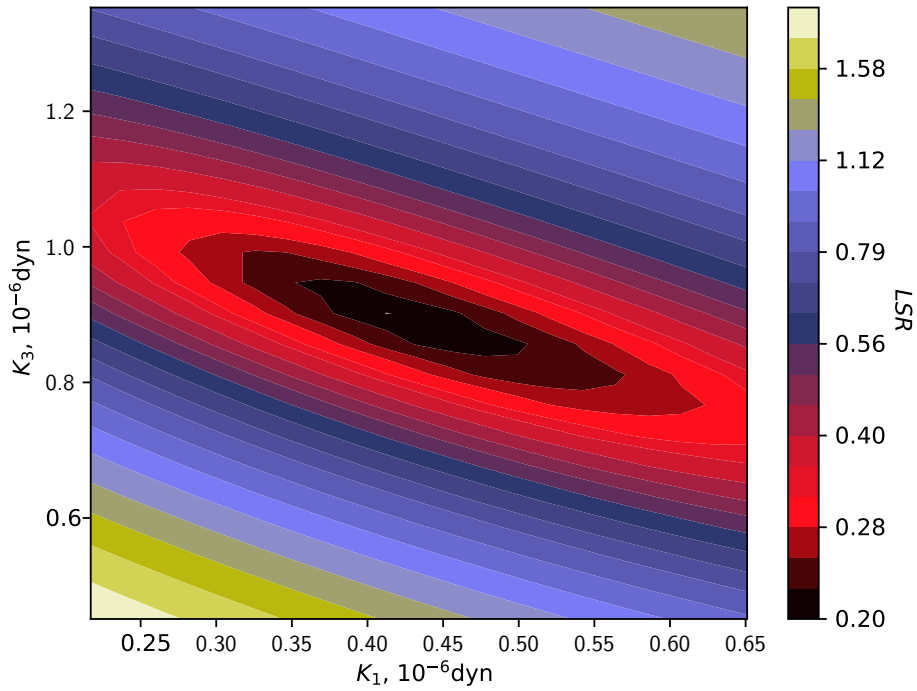


Рис. 1.8. Карта для критерия LS на  $K_1$ ,  $K_3$  для ЖК 5СВ.

Карта имеет минимум для  $K_1 = (0,4 \pm 0,2) \cdot 10^{-6}$  дин,  $K_3 = (0,8 \pm 0,1) \cdot 10^{-6}$  дин. Сравнивая с известными значениями для 5СВ [22–25]  $K_1 = 0,62 \cdot 10^{-6}$  дин,  $K_3 = 0,82 \cdot 10^{-6}$  дин, видно хорошее совпадение результатов для  $K_3$  и удовлетворительное совпадение для  $K_1$ . Сплошные линии на рисунке 1.7 рассчитаны на основе значений  $K_1$  и  $K_3$ , полученных из карты для критерия минимума LS. Видно хорошее совпадение экспериментальных данных с результатами расчетов.

Таким образом, можно считать приведенный метод позволяет найти поиска модулей Франка для ЖК с комплексами гадолиния. Сравнение эксперимента и теоретических значений приведено на Рисунке 1.9. Здесь сплошные линии соответствуют расчетам на основе значений  $K_1$  и  $K_3$ , полученных из карты для критерия минимума LS (Рисунок 1.4). Видно хорошее совпадение экспериментальных данных с результатами расчетов. Модули Франка для  $\text{Gd}(\text{CPDk}_{3-5})_3\text{Вру}_{17-17}$  определены как  $K_1 = (2,5 \pm 2) \cdot 10^{-5}$  дин,  $K_3 = (1,7 \pm$

$0,3) \cdot 10^{-4}$  дин, а для  $\text{Er}(\text{DDk}_{3-5})_3\text{Vpy}_{17-1}$  определены как  $K_1 = (7 \pm 6) \cdot 10^{-6}$  дин,  $K_3 = (6,7 \pm 0,5) \cdot 10^{-4}$  дин.

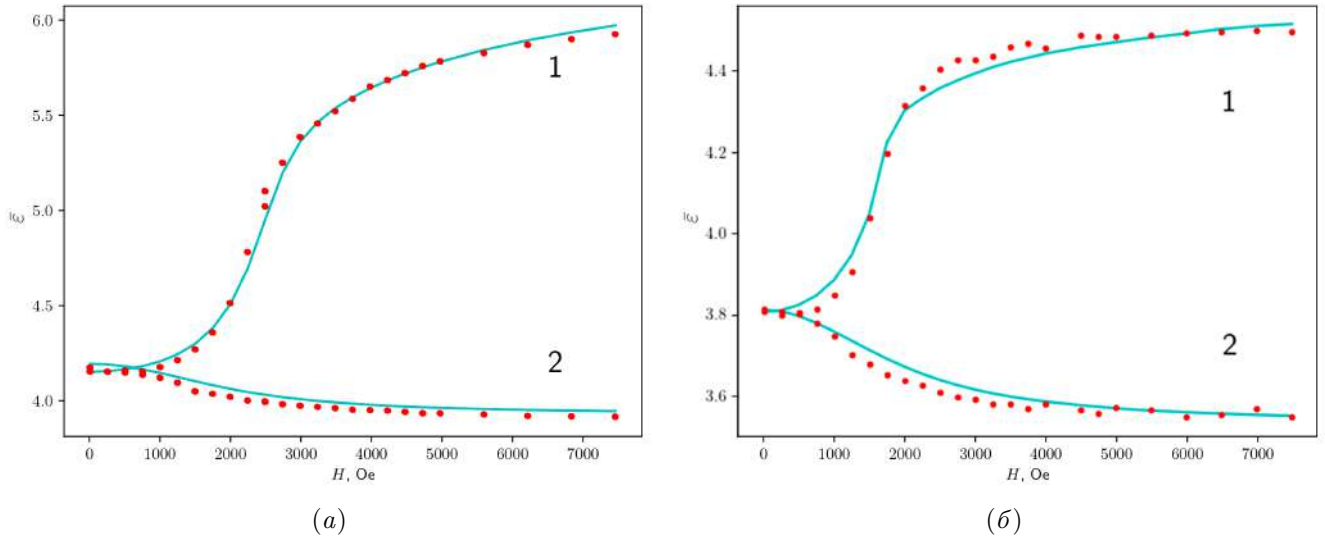


Рис. 1.9. Зависимости  $\bar{\epsilon}$  от  $H$  для ЖК комплексов на основе гадолиния (а) и эрбия (б): экспериментальная (точки) и теоретическая (сплошная линия). Линия и точки, отмеченные цифрой 1, соответствуют случаю  $\mathbf{H} \perp \mathbf{E}$ . Линия и точки, отмеченные цифрой 2, соответствуют случаю  $\mathbf{H} \parallel \mathbf{E}$ .

*Выводы к 1 главе.* Энергетические поверхности холестерических ЖК в одноконстантном приближении для модулей Франка и магнетиков с взаимодействием Дзялошинского-Мории совпадают при соответствующем выборе параметров моделей. Это должно приводить к формированию подобных равновесных неколлинеарным структур в этих системах. В общем случае энергетическая поверхность ЖК определяется его модулями Франка. Предложена методика их определения по зависимости эффективной диэлектрической проницаемости ЖК от продольного и поперечного по отношению к плоскости ЖК ячейки магнитного поля.

## Глава 2

# Переходы между локально устойчивыми состояниями в хиральных системах

Задание энергетической поверхности магнитных и жидкокристаллических систем позволяет определить основное и метастабильные состояния, которым соответствуют локальные минимумы энергии. Если таких минимумов несколько, между состояниями могут происходить спонтанные переходы, вызванные тепловыми флуктуациями и случайными внешними воздействиями. Это приводит к конечному времени жизни состояний, которое в рамках гармонического приближения теории переходного состояния приводит к закону Аррениуса. Для поиска энергетического барьера между локально устойчивыми состояниями и предэкспоненциального фактора в законе Аррениуса, строится путь с минимальным перепадом энергии между состояниями. Максимум вдоль пути определяет седловую точку на энергетической поверхности. Энергия активации равна разности энергий в седловой точке и начальном состоянии. Предэкспоненциальный фактор зависит от формы энергетической поверхности в этих точках. Если какие-то параметры системы меняются адиабатически медленно, можно говорить об эволюции энергетической поверхности и положения локально устойчивых состояний, вызванных этими изменениями. В настоящей главе будут рассмотрены такие процессы, когда форма энергетической поверхности эволюционирует при изменении внешнего электрического поля. В жидких кристаллах это может приводить к переходу между состояниями с различными конфигурациями директора, известному, как эффект Фредерикса. Будут исследованы холестерические жидкие кристаллы (ХЖК), находящихся в ячейках разной толщины.

## 2.1. Энергетическая поверхность и локально устойчивые спиральные состояния в пленках ХЖК различной толщины

Рассмотрим тонкую ячейку ХЖК толщиной  $L$ , в которой жидкий кристалл размещен между двумя параллельными ограничивающими пластинами:  $z = -L/2$  (нижняя подложка) и  $z = L/2$  (верхняя подложка). Условия сцепления на подложках планарные, с преимущественной ориентацией молекул на нижней (верхней) пластине, определяемой вектором легкой ориентации  $\hat{\mathbf{e}}_-$  ( $\hat{\mathbf{e}}_+$ )

$$\hat{\mathbf{e}}_{\pm} = \cos \psi_{\pm} \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{x}} + \sin \psi_{\pm} \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{y}}. \quad (2.1)$$

Здесь шляпки стоят над единичными векторами.

Запишем свободную энергию ХЖК, включив в нее наряду с объемным вкладом  $F_b$  поверхностный  $F_s$ , связанный с энергией сцепления на подложках  $W_{\nu}(\mathbf{n})$ :

$$\begin{aligned} F[\mathbf{n}, \mathbf{E}] &= F_b[\mathbf{n}, \mathbf{E}] + F_s[\mathbf{n}], \\ F_s[\mathbf{n}] &= \sum_{\nu=\pm} \int_{z=\nu L/2} W_{\nu}(\mathbf{n}) ds, \end{aligned} \quad (2.2)$$

где  $\mathbf{E}$  – электрическое поле. Поверхностный вклад в свободную энергию зададим через потенциал Рапини-Папуляра [49]:

$$\begin{aligned} W_{\nu}(\mathbf{n}) &= \frac{W_{\varphi}^{(\nu)}}{2} \left[ 1 - (\mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{\nu})^2 \right]_{z=\nu L/2} \\ &+ \frac{W_{\vartheta}^{(\nu)} - W_{\varphi}^{(\nu)}}{2} (\mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{z}})^2 \Big|_{z=\nu L/2}, \end{aligned} \quad (2.3)$$



где  $W_\varphi^{(+)}$  ( $W_\varphi^{(-)}$ ) и  $W_\vartheta^{(+)}$  ( $W_\vartheta^{(-)}$ ) – поверхностная плотность энергии, связанная с отклонением полярного и азимутального углов, задающих направление директора, от предпочтительного направления на верхней (нижней) подложке.

В рассматриваемом случае директор ХЖК удобнее параметризовать углами  $\vartheta = \vartheta(z)$  и  $\varphi = \varphi(z)$  следующим образом:

$$\mathbf{n} \equiv \mathbf{n}(\vartheta, \varphi) = \cos \vartheta (\cos \varphi \hat{\mathbf{e}}_x + \sin \varphi \hat{\mathbf{e}}_y) + \sin \vartheta \hat{\mathbf{e}}_z, \quad (2.4)$$

Эта параметризация аналогична ((1.12)) с заменой  $\vartheta = \pi/2 - \theta$ . Поверхностный потенциал ((2.3)) принимает теперь следующий вид:

$$F_s[\mathbf{n}]/S = \sum_{\nu=\pm} \left[ \frac{W_\varphi^{(\nu)}}{2} \cos^2 \vartheta_\nu \sin^2(\varphi_\nu - \psi_\nu) + \frac{W_\vartheta^{(\nu)}}{2} \sin^2 \vartheta_\nu \right], \quad (2.5)$$

где  $S$  – площадь подложек;  $\vartheta_\nu \equiv \vartheta(\nu L/2)$  и  $\varphi_\nu \equiv \varphi(\nu L/2)$ .

Объемная часть функционала свободной энергии ((2.2)) представляет собой сумму упругой энергии  $F_{\text{el}}[\mathbf{n}]$ , определяемой уравнением ((1.3)), и энергии взаимодействия электрического поля  $\mathbf{E}$  с молекулами ХЖК,  $F_{\text{E}}[\mathbf{n}, \mathbf{E}]$ :

$$F_b[\mathbf{n}, \mathbf{E}] = F_{\text{el}}[\mathbf{n}] + F_{\text{E}}[\mathbf{n}, \mathbf{E}] \quad (2.6)$$

После подстановки директора ХЖК ((2.4)) имеем:

$$F_{\text{el}}[\mathbf{n}]/S = \frac{1}{2} \int_{-L/2}^{L/2} \{ K_1(\vartheta) [\vartheta']^2 + K_2(\vartheta) \cos^2 \vartheta [\varphi']^2 - 2C(\vartheta) \varphi' + K_2 q_0^2 \} dz, \quad (2.7)$$

$$K_i(\vartheta) = K_i \cos^2 \vartheta + K_3 \sin^2 \vartheta, \quad C(\vartheta) = q_0 K_2 \cos^2 \vartheta, \quad (2.8)$$

где штрих обозначает производную по  $z$ . Это выражение соответствует уравнению ((1.29)) для нематического ЖК с холестерическим членом из выраже-

ния ((1.3)). Отметим, что для нематического ЖК модуль Франка  $K_2$  не дает вклада в энергию в рассматриваемой геометрии.

Будем считать, что электрическое поле нормально к подложкам  $\mathbf{E} = E_z(z)\hat{\mathbf{e}}_z$ ;  $E_z(z) = -V'(z)$ , где  $V(z)$  – электростатический потенциал. Если приложенное напряжение  $U = V(-L/2) - V(L/2)$  фиксировано, электростатическую часть энергии можно записать, как

$$F_E = -\frac{1}{2} \int_V (\mathbf{E} \cdot \mathbf{D}) dv, \quad (2.9)$$

где  $\mathbf{D} = \boldsymbol{\varepsilon} \mathbf{E}$  – электрическая индукция, а  $\boldsymbol{\varepsilon}$  – тензор диэлектрической проницаемости. Теперь  $F_E$ , принимает вид нелокального функционала:

$$F_E/S = -\frac{U^2}{2E[\vartheta]}, \quad E[\vartheta] = \int_{-L/2}^{L/2} \frac{dz}{\varepsilon_{zz}(\vartheta)}, \quad (2.10)$$

где  $\varepsilon_{zz}(\vartheta) = \varepsilon_{\perp} + \varepsilon_a \sin^2 \vartheta$ ,  $\varepsilon_a = \varepsilon_{\parallel} - \varepsilon_{\perp}$ ;  $\varepsilon_{\perp}$  и  $\varepsilon_{\parallel}$  – диэлектрические постоянные, задающие тензор диэлектрической проницаемости  $\boldsymbol{\varepsilon}$ . Это выражение аналогично вкладу с электрическим полем в флонуле ((1.29)).

В дальнейшем, при численных расчетах используются модули Франка типичные для ЖК 5СВ [23]:  $K_1 = 4,5$  пН,  $K_2 = 3,0$  пН,  $K_3 = 6,0$  пН. Анализ проводится для случая симметричной ячейки ХЖК толщиной  $L = 5$  мкм с  $W_{\varphi}^{(\pm)} \equiv W_{\varphi} = 0,05$  мДж/м<sup>2</sup> и  $\hat{\mathbf{e}}_{\pm} = \hat{\mathbf{e}}_x$  ( $\psi_{\pm} = 0$ ).

Рассмотрим состояние однородной спирали с осью закручивания, перпендикулярной подложке, известной как плоская структура (текстура) Гранжана. В ней молекулы жидкого кристалла, однородно упорядочены в слои, но ориентация молекул меняется от слоя к слою.

$$\begin{aligned} \mathbf{n}_0 &\equiv \mathbf{n}(0, u(z)) = \cos u \hat{\mathbf{e}}_x + \sin u \hat{\mathbf{e}}_y, \\ u(z) &= qz + \varphi_0, \end{aligned} \quad (2.11)$$

где  $q = 2\pi/P$  – волновое число, а  $P$  – шаг спирали. Запишем вариацию директора:

$$\mathbf{n}(\delta\vartheta, u(z) + \delta\varphi) \approx \mathbf{n}_0 + \delta\mathbf{n}_0, \quad \delta\mathbf{n}_0 = \delta\varphi \mathbf{n}_1 + \delta\vartheta \mathbf{n}_2, \quad (2.12)$$

где углы  $\delta\varphi$  и  $\delta\vartheta$  описывают плоскостное и внеплоскостное отклонения директора от равновесного состояния соответственно; величины  $\mathbf{n}_1$  и  $\mathbf{n}_2$  имеют вид

$$\mathbf{n}_1 = -\sin u(z) \hat{\mathbf{e}}_x + \cos u(z) \hat{\mathbf{e}}_y, \quad \mathbf{n}_2 = \hat{\mathbf{e}}_z. \quad (2.13)$$

Свободная энергия ((2.12)) теперь может быть разложена до членов второго порядка по малым отклонениям (флуктуациям) директора  $\boldsymbol{\psi} = \begin{pmatrix} \delta\varphi \\ \delta\vartheta \end{pmatrix}$ . Вектор  $\boldsymbol{\psi}$ , таким образом, описывает малые внутри- и внеплоскостные флуктуации ориентации директора жидкого кристалла. Эти флуктуации важны для анализа устойчивости и динамики ХЖК. Вторая вариация свободной энергии  $F^{(2)}[\boldsymbol{\psi}]$  представляет собой билинейный функционал, который описывает энергию флуктуаций директора, в гармоническом (гауссовском) приближении.

$$F[\mathbf{n}] \approx F[\mathbf{n}_0] + F^{(2)}[\boldsymbol{\psi}], \quad (2.14)$$

$$F^{(2)}[\boldsymbol{\psi}] = \int_V f_b^{(2)}[\boldsymbol{\psi}] dv + \sum_{\nu=\pm} \int_{z=\nu L/2} W_\nu^{(2)}(\boldsymbol{\psi}) ds. \quad (2.15)$$

Ограничимся случаем состояний, однородных в плоскости подложки. В этом случае  $\boldsymbol{\psi} \equiv \boldsymbol{\psi}(z)$ , а для энергии флуктуаций на единицу площади получается выражение

$$2F^{(2)}[\boldsymbol{\psi}]/S = \int_{-L/2}^{L/2} \boldsymbol{\psi}^\dagger \tilde{K} \boldsymbol{\psi} dz + \sum_{\nu=\pm} \boldsymbol{\psi}^\dagger \tilde{Q}^{(\nu)} \boldsymbol{\psi} \Big|_{z=\nu L/2}, \quad (2.16)$$

где операторы  $\tilde{K}$  и  $\tilde{Q}^{(\nu)}$  могут быть представлены следующим образом

$$\tilde{K} = \begin{pmatrix} -K_2 \partial_z^2 & 0 \\ 0 & -K_1 \partial_z^2 + q^2 K_q - \varepsilon_a E^2 \end{pmatrix}, \quad (2.17)$$

$$\begin{aligned} \tilde{Q}^{(\nu)} = & \nu \begin{pmatrix} K_2 \partial_z & 0 \\ 0 & K_1 \partial_z \end{pmatrix} \\ & + \begin{pmatrix} W_\varphi^{(\nu)} \cos 2u_\nu & 0 \\ 0 & W_\vartheta^{(\nu)} - W_\varphi^{(\nu)} \sin^2 u_\nu \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (2.18)$$

$E = U/L$ ,  $u_\nu = u(\nu L/2) - \psi_\nu$   $K_q$  – эффективная постоянная упругости

$$K_q = K_3 - 2K_2(1 - q_0/q). \quad (2.19)$$

Спектр  $\tilde{K}$  рассчитывается путем решения краевой задачи:

$$\hat{K} \psi_\lambda = \lambda \psi_\lambda, \quad (2.20)$$

$$\tilde{Q}^{(\nu)} \psi_\lambda \Big|_{z=\nu L/2} = 0, \quad (2.21)$$

где  $\lambda$  ( $\psi_\lambda$ ) – собственные значения (собственные моды) оператора. Из уравнений ((2.17)-(2.18)) видно, что операторы  $\tilde{K}$  и  $\tilde{Q}^{(\nu)}$  являются диагональными, следовательно вклады  $\delta\varphi$  и  $\delta\vartheta$  независимы. Это позволяет рассматривать плоскостные и внеплоскостные флуктуации независимо.

Спиральная конфигурация ((2.11)) обладает локальной устойчивостью при условии положительности всех собственных значений оператора второй вариации. Для симметричной ячейки ХЖК анализ устойчивости по отношению к плоскостным флуктуациям, был проведен в работе [55]. Были найдены разные ветви метастабильных спиральных состояний, отличающиеся числом полуобо-

рогов директора,  $k \in \mathbb{N}$ . Соответствующий параметр закрутки  $q$  удовлетворяет неравенству  $(k - 1/2)\pi < qL \equiv \beta < (k + 1/2)\pi$ . Он связан с волновым числом,  $q_0$ , в безграничной среде следующим образом:

$$q_0L \equiv \beta_0 = \beta + (-1)^k w_\varphi \sin \beta, \quad w_\varphi \equiv \frac{W_\varphi L}{2K_2}. \quad (2.22)$$

Ветви с  $0 \leq k \leq 3$  и  $w_\varphi \approx 41.67$  ( $W_\varphi = 0.05$  мДж/м<sup>2</sup>) показаны на Рисунке 2.1.

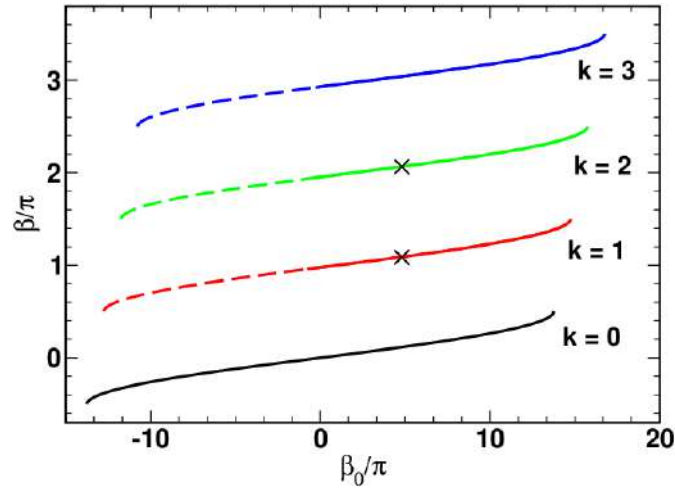


Рис. 2.1. Параметр закрутки в зависимости от параметра  $\beta_0/\pi = q_0L/\pi$  при различных значениях числа полуоборотов,  $k$ . Штриховыми линиями показаны состояния, неустойчивые по отношению к внеплоскостным возмущениям. Крестиками отмечены значения  $\beta_0/\pi = 4,725$  на кривых  $k = 1$  и  $k = 2$ .

Аналогично можно провести исследование устойчивости спиральных структур по отношению к внеплоскостным возмущениям. Для удобства перейдем от переменной  $\lambda$  к  $K_1(2/L)^2\lambda$ , обозначив ее тем же символом, и запишем задачу на собственные значения ((2.20)-(2.21)) для  $\vartheta$  следующим образом:

$$\left[ \partial_\tau^2 + (-r_q + \varepsilon_a U^2 / K_1) / 4 + \lambda \right] \vartheta_\lambda(\tau) = 0, \quad (2.23)$$

$$\left[ \pm \partial_\tau \vartheta_\lambda + w_\vartheta^{(\pm)} \vartheta_\lambda \right]_{\tau=\pm} = 0, \quad (2.24)$$

$$r_q = (qL)^2 K_q / K_1 = (r_3 - 2r_2)\beta^2 + 2r_2\beta_0\beta, \quad (2.25)$$

$$w_\vartheta^{(\nu)} \equiv \frac{(W_\vartheta^{(\nu)} - W_\varphi^{(\nu)} \sin^2 u_\nu) L}{2K_1}, \quad \beta = qL, \quad (2.26)$$

где  $\tau \equiv 2z/d$ ,  $r_i \equiv K_i/K_1$ , а  $\beta_0 = q_0L$ .

Условие устойчивости  $\lambda > 0$  теперь может быть записано так:

$$U < U_{\text{th}} = \sqrt{(4\lambda_{\min} + r_q)K_1/\varepsilon_a}, \quad (2.27)$$

где  $\lambda_{\min}$  – наименьшее собственное значение задачи ((2.23)), вычисленное при  $r_q = 0$  и  $U = 0$ . Выражение в правой части неравенства ((2.27)) дает критическое напряжение перехода Фредерикса. Выше этого напряжения приложенное электрическое поле делает вертикально стоящую спираль неустойчивой по отношению к внеплоскостным возмущениям директора.

Когда полярное сцепление сильно на обеих подложках,  $W_{\vartheta}^{(\pm)} \rightarrow \infty$ , для собственного значения  $\lambda_{\min}$  получается простое выражение:

$$\lambda_{\min} = (\kappa_{\min})^2 = \pi^2/4. \quad (2.28)$$

В противном случае  $\kappa_{\min}$  меньше  $\pi/2$  и может быть вычислено как корень трансцендентного уравнения, выведенного в приложении работы [55]

$$\tan 2\kappa_{\min} = \frac{\kappa_{\min}(w_{\vartheta}^{(+)} + w_{\vartheta}^{(-)})}{\kappa_{\min}^2 - w_{\vartheta}^{(+)}w_{\vartheta}^{(-)}}, \quad (2.29)$$

где  $0 < \kappa_{\min} \leq \pi/2$ .

Кривые зависимости критического напряжения от параметра  $\beta_0$ , представляющего собой угол поворота директора, в радианах, во фрагменте данного размера в бесконечном образце, показаны на Рисунке 2.2. Результаты, полученные с использованием одноконстантного приближения (см. Рисунок 2.2, б), можно сравнить с критическим полем, рассчитанным для упругих констант ЖК 5СВ [23]:  $K_1 = 4,5$  пН,  $K_2 = 3,0$  пН,  $K_3 = 6,0$  пН. Видно, что при отличном от нуля  $k$  в обоих случаях критическое поле (порог Фредерикса) для каждой

ветви растет с увеличением числа оборотов в отсутствие границ  $q_0$ . Для ветви с  $k \geq 1$  значение  $q_0$ , при котором порог обращается в нуль, определяет граничную точку, дающую наименьшее  $q_0$  при котором возможно формирование локально устойчивых структур. Когда  $q_0$  меньше этого значения, спиральные состояния неустойчивы по отношению к внеплоскостным возмущениям. На Рисунке 2.1 такие структуры обозначены пунктирными линиями. Сравнение кривых, представленных на Рисунке 2.2, *а* (5СВ) и 2.2, *б* (аналитический анализ для одноконстантного приближения), также показывает, что упругая анизотропия оказывает сильное влияние на зависимость коэффициента Фредерикса от  $q_0$ . Кривые рассчитаны по формуле ((2.27)) для случая сильного сцепления. Численная оценка порогов Фредерикса хорошо согласуется с теоретическими предсказаниями.

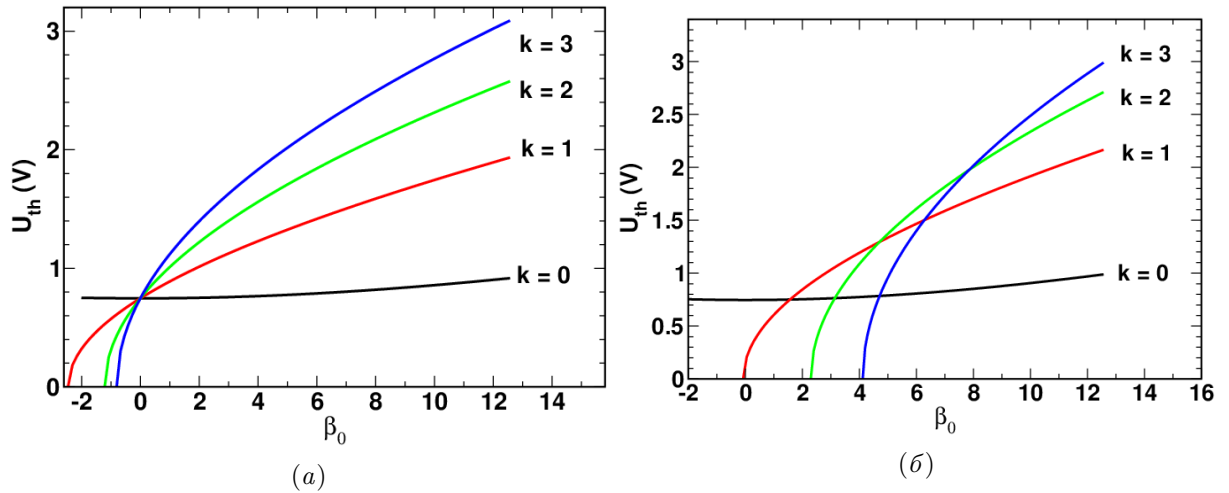


Рис. 2.2. Критическое напряжение перехода Фредерикса в зависимости от параметра  $\beta_0 = q_0 L$  для ветвей с числами полуоборотов  $0 \leq k \leq 3$  для (а) 5СВ и (б) одноконстантного приближения  $K_i = K_1$

## 2.2. Пути с наименьшим перепадом энергии между состояниями с разным числом витков спирали в холестерических жидких кристаллах

Рассмотрим переход из состояния с одним полувитком ( $k = 1$ ) в состояние с двумя полувитками ( $k = 2$ ), показанных на рисунке 2.1 при значении параметра  $\beta_0 = 4,725$ . Точки на кривых, соответствующие состояниям, между которыми происходит переход, отмечены крестиками. Равновесные конфигурации ХЖК зависят от приложенного электрического поля, так как поле влияет на ориентацию директора. Эта зависимость может быть получена путем минимизации функционала свободной энергии системы, включающего в себя как объемный ((2.6)), так и поверхностные вклады ((2.3)), ((2.5)). Уравнения Эйлера-Лагранжа определяют равновесные конфигурации директора, с учетом граничных условий ((2.21)), ((2.24)).

Особый интерес представляет эффект Фредерикса, возникающий при определенных значениях приложенного электрического поля, когда директор ХЖК начинает выходить из плоскости, параллельной границам ячейки. Это приводит к изменению энергии системы и может облегчать или затруднять переходы между спиральными состояниями с различным количеством полувитков.



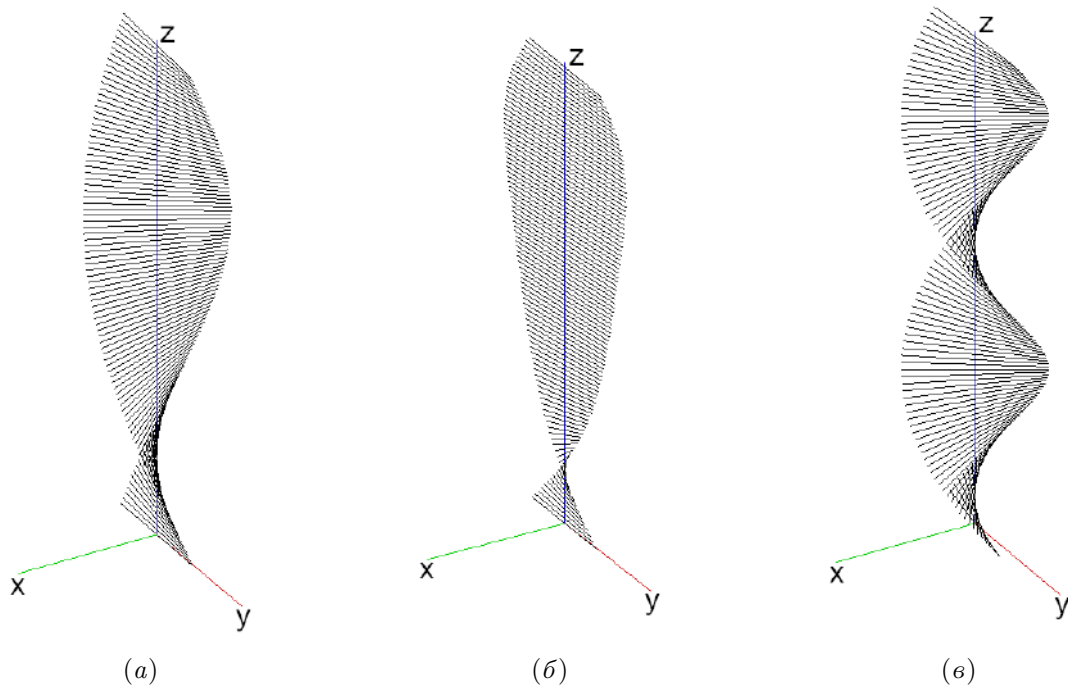


Рис. 2.3. Метастабильные спиральные конфигурации с разным числом полувитков  $k$  и различными значениями приложенного напряжения  $U$ : (а)  $k = 1$ ,  $U = 0$  В (б)  $k = 1$ ,  $U = 1,4$  В; и (в)  $k = 2$ ,  $U = 0$  В; при коэффициентах энергии сцепления  $W_\varphi = 0,05$  мДж/м<sup>2</sup> и  $W_\theta = 0,5$  мДж/м<sup>2</sup>.

На рисунке 2.3 представлены равновесные конфигурации директора для спиральных состояний ХЖК. На рисунке 2.3, а показано состояние с одним полувитком в отсутствие электрического поля ( $U = 0$  В) с директором лежащим в плоскости ячейки. При напряжении  $U = 1,4$  В структура начинает искажаться, выходя из плоскости, что соответствует превышению порога Фредерикса  $U_{\text{th}}^{(1)} \approx 1,3$  В для состояния с  $k = 1$  (рисунок 2.3, б). Рисунок 2.3, в иллюстрирует конфигурацию с двумя полувитками, в которой директор уже вышел из плоскости.

Оценка энергетического барьера для переходов между разными спиральными состояниями может быть получена, если построить путь с минимальным перепадом энергии (ПМПЭ) между этими состояниями. Исследование эволюции такого пути при изменении электрического поля позволяет найти полевою зависимость энергетического барьера.

ПМПЭ лежит на многомерной энергетической поверхности системы. Каж-

дая его точка соответствует минимуму энергии по всем направлениям за исключением направления вдоль пути. Таким образом вероятность обнаружить систему вблизи ПМПЭ в процессе перехода максимальна по сравнению с близкими путями. В седловой точке, соответствующей максимальному значению энергии вдоль пути, достигается минимум по всем направлениям кроме одного и максимум вдоль оставшегося направления. В случае существования нескольких ПМПЭ, каждый из них характеризуется своей седловой точкой, и возможно несколько сценариев перехода между рассматриваемыми (мета)стабильными состояниями.

При поиске ПМПЭ были использованы два различных начальных приближения для пути перехода между спиральными состояниями с разным числом полувитков. Первое было выбрано таким образом, чтобы директор не выходил из плоскости, параллельной границам ячейки. Второе - с выходом из плоскости в процессе перехода. Для каждого из начальных путей с помощью метода подталкивания упругой лентой [20] проводился поиск ПМПЭ. Для исследования влияния изменения электрического поля на процесс перехода между спиральными состояниями при каждом новом значении поля в качестве начального приближения использовались ПМПЭ, найденные для предыдущего, немного отличающегося значения поля. Это ускоряет процесс нахождения оптимальных путей.

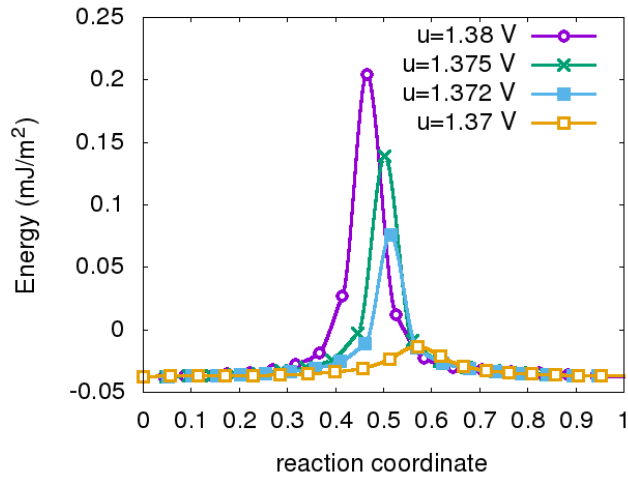


Рис. 2.4. Энергия на единицу площади вдоль пути с минимальным перепадом энергии из состояния с одним полувитком в состояние с двумя полувитками при различных напряжениях. Наблюдается переход от пути через состояния в плоскости к пути через состояния с выходом из плоскости. Параметры перечислены в подписи к Рисунку 2.3.

На Рисунке 2.4 представлены энергии конфигураций директора вдоль траектории с минимальным перепадом энергии, вычисленные при значениях коэффициентах энергии сцепления  $W_\varphi = 0,05\text{ мДж/м}^2$  и  $W_\vartheta = 0,5\text{ мДж/м}^2$  для перехода от пути через состояния в плоскости к пути через состояния с выходом из плоскости. Наблюдается значительное увеличение энергетического пика при приближении напряжения к значению  $U = 1,38\text{ В}$ . На Рисунке 2.5 иллюстрируется развитие внеплоскостных деформаций в седловых структурах в процессе перехода, которое можно интерпретировать, как изменение от проскальзывания директора к разрыву сцепления. Профили угла наклона для этих конфигураций представлены на Рисунке 2.6.

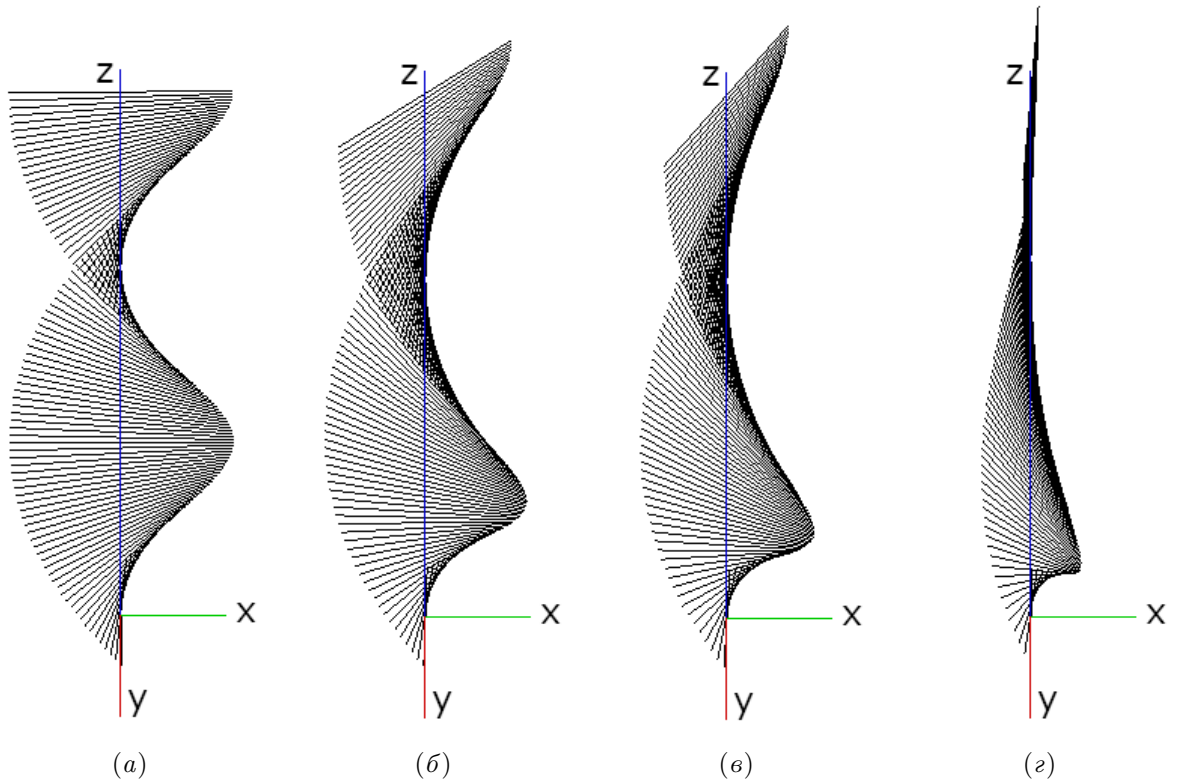


Рис. 2.5. Седловые структуры для пути с минимальным перепадом энергии, изображенными на Рисунке 2.4. (а)  $U = 1.37$  В, (б)  $U = 1.372$  В, (в)  $U = 1.375$  В, (г)  $U = 1.38$  В. Параметры перечислены в подписи к Рисунку 2.3.

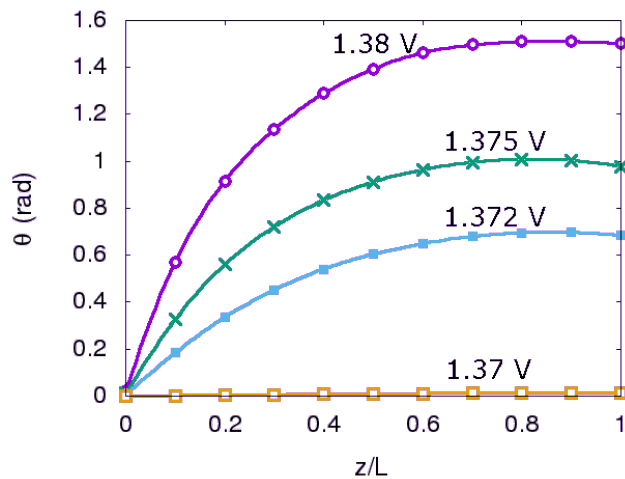


Рис. 2.6. Зависимости угла наклона для седловых структур представленных на Рисунке 2.5.

В качестве альтернативного начального приближения был использован путь с выходом директора из плоскости подробно описанный в работе [11]. Предполагается, что на равномерную закрутку от  $\varphi_- = 0$  до  $\varphi_+ = \pi/2$  налагается внеплоскостная деформация директора с изменением угла наклона  $\vartheta$

от  $\vartheta_- = 0$  до  $\vartheta_+$ . На первой половине начального пути угол наклона  $\vartheta_+$  на верхней подложке возрастает от нуля до  $\vartheta_+ \approx \pi/2$ . Далее, на второй половине пути, угол  $\vartheta_+$  возвращается к значению  $\vartheta_+ = 0$ . Таким образом, для поиска ПМПЭ с разрывом сцепления предполагается, что в переходном состоянии директор жидкого кристалла на верхней подложке почти перпендикулярен к ограничивающей поверхности.

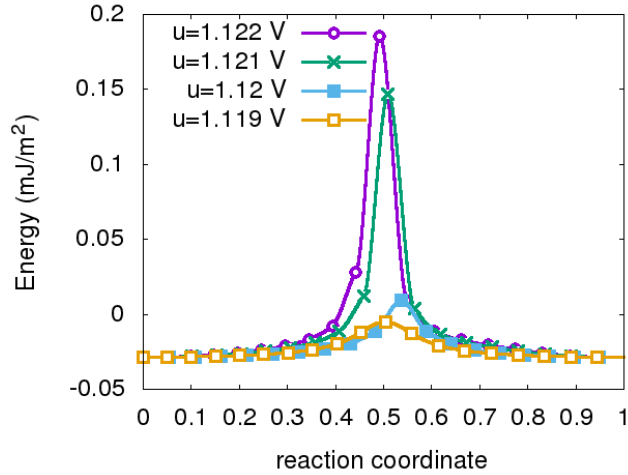


Рис. 2.7. Энергия на единицу площади вдоль ПМПЭ из состояния с двумя полувитками в состояние с одним полувитком при различных напряжениях. Наблюдается переход от путей через состояния с выходом из плоскости к путям через состояния в плоскости. Параметры перечислены в подписи к Рисунку 2.3.

На Рис. 2.7 показано, как при уменьшении напряжения с  $U = 1,122$  В до  $U = 1,119$  В поверхностная плотность энергии ЖК меняется вдоль ПМПЭ. Отметим, что эти напряжения ниже перехода Фредерикса, при котором структура в седловой точке характеризуется заметными наклонными деформациями. При высоких напряжениях, приближение проскальзывания директора и разрыва сцепления приводят к схожим результатам для ПМПЭ. Эти пути могут быть плавно продолжены к области низких напряжений. Заметим что при уменьшении напряжения энергетический барьер уменьшается. Наблюдаемые изменения ПМПЭ можно рассматривать, как переход от пути с выходом из плоскости к пути без выхода из плоскости.

### 2.3. Эффекты гистерезиса при изменении электрического поля в холестерических жидких кристаллах

В предыдущем разделе было показано, что при изменении напряжения ПМПЭ и сценарий перехода могут изменять свой характер. При низких напряжениях начальная конфигурация директора вдоль пути меняется без его выхода из плоскости, параллельной границе ячейки. С увеличением напряжения до критического значения  $U_{c\uparrow} \approx 1,38$  В наблюдается резкое увеличение энергетического барьера, связанного со сменой механизма перехода от конфигураций в плоскости к выходу из плоскости. При обратном процессе уменьшения напряжения со стороны высоких значений, система проходит путь от состояний с директором, выходящим из плоскости, к состояниям в плоскости при более низком напряжении. В результате  $U_{c\downarrow} \approx 1,12$  В становится порогом для смены механизма. Таким образом, зависимость энергетического барьера от напряжения образует петлю гистерезиса, что иллюстрируется на Рисунке 2.8.

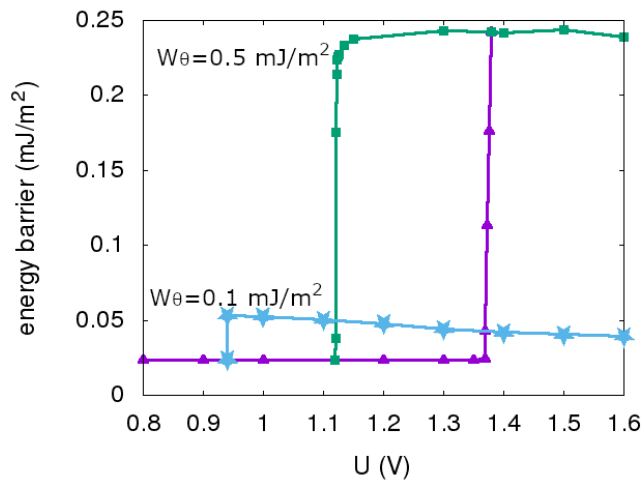


Рис. 2.8. Зависимость барьера ПМПЭ от напряжения для различных переходов: на пути с увеличением напряжения (фиолетовые треугольники) и на пути с уменьшением напряжения (зеленые квадраты и синие звезды) при различных значениях силы полярного сцепления. Параметр сцепления  $W_\varphi$  равен  $0,05$  мДж/м<sup>2</sup>.

Отметим, что критическое поле  $U_{c\downarrow}$  ниже, чем пороги Фредерикса как для начального, так и для конечного состояний, что указывает на возможность су-

уществования механизма разрыва сцепления даже при плоских конфигурациях директора в начальном и конечном состояниях. Энергетические барьеры, полученные при последовательном увеличении и уменьшении напряжения, формируют петлю гистерезиса, демонстрирующую изменение механизма перехода в зависимости от предыстории приложенного напряжения. Наблюдается также, что с уменьшением  $W_\varphi$  петля гистерезиса расширяется, что указывает на важную роль взаимодействия директора с подложками в динамике переходных процессов.

*Выводы ко 2 главе.* В холестерических ЖК изучены переходы между локально устойчивыми спиральными состояниями с различным числом витков спирали. Основные и метастабильные состояния ХЖК, которым соответствуют локальные минимумы энергии, определяются в зависимости от приложенного электрического поля. Показано, что при изменении внешних условий, таких как напряжение электрического поля, форма энергетической поверхности и положения минимумов изменяются, что может приводить к переходам между этими состояниями. Были рассмотрены пути с минимальным перепадом энергии между состояниями, а также описаны условия и механизмы их возникновения и изменения в зависимости от параметров системы и внешних воздействий. Обнаружено, что в зависимости от напряжения и параметров сцепления с подложками энергетический барьер между состояниями может существенно изменяться. В холестерических жидких кристаллах наблюдается гистерезис изменения энергетического барьера в зависимости от предыстории изменения приложенного напряжения.

## Глава 3

## Топологические ЖК и магнитные структуры в условиях ограниченной геометрии

Большой интерес как с точки зрения фундаментальной теории, так и практических приложений представляют локализованные в пространстве нано- и микро-размерные состояния в жидких кристаллах и магнетиках. Для развития новых технологий магнитной памяти и ЖК устройств особенно важно изучение таких структур в тонких пленках. Для предсказания их свойств, устойчивости и динамики необходимо знать, каково основное состояние системы, на фоне которого формируются локализованные структуры. Настоящая глава посвящена изучению различных основных состояний в тонких пленках, анализу их эволюции при изменении параметров системы, построению фазовой диаграммы возможных состояний. Далее будут рассмотрены локализованные состояния и области их существования.

### 3.1. Спиральные и конические хиральные структуры во внешнем поле

Рассмотрим систему с энергией задаваемой уравнением ((1.2)). Как отмечалось выше, в отсутствии анизотропии состоянием с минимальной энергией будет являться геликоидальная структура с периодом

$$p_0 = 2\pi / \arctan \frac{D}{J}, \quad (3.1)$$

В дальнейшем будет исследоваться структура с толщиной  $d = p_0 = 20a$ , где  $a$  – постоянная решетки при моделировании, которая в магнитной системе бу-



дет соответствовать постоянной решетки кристалла. Здесь, как и ранее, будут использоваться периодические граничные условия в плоскости пленки, вдоль осей  $x$  и  $y$ . Рассмотрим сначала состояния однородные вдоль оси  $y$ . Далее это ограничение будет снято.

Минимизируя энергию ((1.2)), можно найти конфигурации, соответствующие минимуму энергии. Эти состояния меняются при изменении анизотропии. Некоторые из них могут быть полностью неустойчивыми при одних значениях пары  $K^b$  и  $K^s$  и обладать наименьшей энергией (а значит быть основным состоянием) при других. Для того чтобы найти локальный минимум энергии, был использован метод сопряженных градиентов в декартовых координатах для векторов  $\mathbf{m}_k$ , при условии что  $\mathbf{m}_k^2 = 1$  [20, 56].

При заданных значениях анизотропии система может иметь наряду с глобальным несколько локальных минимумов, которые включают нелокализованные состояния, такие, как доменные стенки, спирали и т. п., и локализованные: скирмионы, тороны, хопфионы [57, 58]. Ограниченность ячейки вдоль оси  $z$  обеспечивает большее разнообразие метастабильных состояний, и влияет на то, какое из них будет соответствовать при заданных параметрах основному.

В неограниченном пространстве с уменьшением анизотропии  $K^b$  ферромагнитное (однородное) состояние с упорядочением магнитных моментов (директоров) вдоль оси  $z$ , являющееся основным при больших анизотропиях, переходит при некотором критическом значении  $K^b > 0$  в геликоидальное состояние с осью вращения в плоскости, перпендикулярной  $z$ . Когда  $K^b$  меняет знак, ось спирали переориентируется вдоль оси анизотропии легкой плоскости.

Похожее поведение имеет место у скирмионных трубок во внешнем магнитном поле. С уменьшением поля состояние с наименьшей энергией меняется от трубок ориентированных по полю к трубкам перпендикулярным полю [58]. Отметим, что во всех вышеописанных состояниях проекция моментов на ось спирали остается нулевой.

В пленках конечной толщины, наличие ограничивающих поверхностей вводит дополнительное выделенное направление. Глобальный минимум в ограниченной системе (рисунок 3.1) определяется многими факторами, включающими толщину пленки, анизотропию внутри и на поверхности пленки.

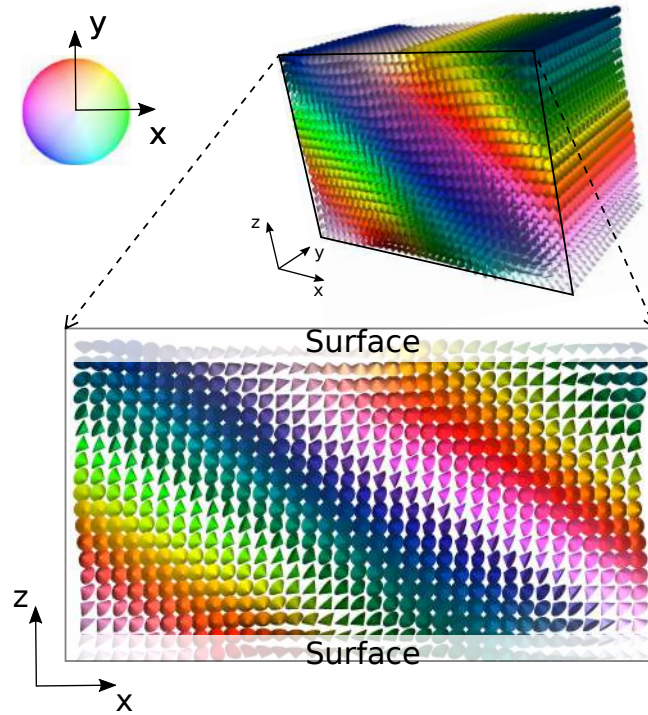


Рис. 3.1. Ячейка хиральной среды. Верхняя картинка показывает трехмерную систему с прямоугольной сеткой. На нижней картинке изображен один слой сетки в плоскости  $xz$ . Верхние и нижние поверхности соответствуют границам ячейки, где добавляется дополнительная анизотропия при моделировании ориентационно-зависимой части поверхностной энергии (в коллоидных жидких кристаллах ей соответствует энергия сцепления с поверхностью ячейки). Цветовая палитра описывает  $x$  и  $y$  проекции магнитных моментов. Предполагаются периодические граничные условия в плоскости  $xy$ .

В рассматриваемой системе при сравнительно малых  $K^b$  глобальным минимумом энергии является  $z$ -спираль ((1.25)) с периодом близким к  $p_0$ . В полубесконечном пространстве  $z \geq 0$  с жесткими граничными условиями, при которых магнитные моменты на границе направлены вдоль оси  $z$ , глобальный минимум может быть найден аналитически. Такое решение должно быть однородно в плоскости  $xy$  и может быть описано в терминах полярного и азимутального углов  $\theta(z)$  и  $\phi(z)$ , где  $\theta$  – угол между магнитным моментом (или директором)

и осью  $z$ . Запишем граничные условия на  $\theta$ :

$$\theta(z)|_{z=0} = 0, \quad \theta(z)|_{z=\infty} = \frac{\pi}{2}, \quad (3.2)$$

и решение:

$$\theta(z) = 2 \arctan \exp \left| \frac{\mathcal{D}}{2\mathcal{A}} z \right| - \frac{\pi}{2}, \quad \phi(z) = \phi_0 + \frac{\mathcal{D}}{2\mathcal{A}} z, \quad (3.3)$$

где  $\phi_0$  – значение угла  $\phi$  при  $z = 0$ . Это решение представляет собой такое упорядочение магнитных моментов (направления директора), при котором они равномерно вращаются относительно оси  $z$ , а их проекция на ось  $z$  уменьшается с ростом  $z$ .

В пленках конечной толщины с заданным значением анизотропии на поверхности  $K^s$ , решение может быть получено численно. На рисунке 3.2 показана зависимость  $z$ -проекции намагниченности от расстояния до нижней границы пленки для двух конфигураций, которые мы будем называть "конус-I" и "конус-II". Для первой конфигурации, изображенной слева,  $m_z$  представляет собой четную функцию от расстояния до середины образца. Для второй, справа, – нечетную. На том же рисунке представлены и сами конфигурации. Различные кривые соответствуют разным значениям параметра  $\kappa^s$ .

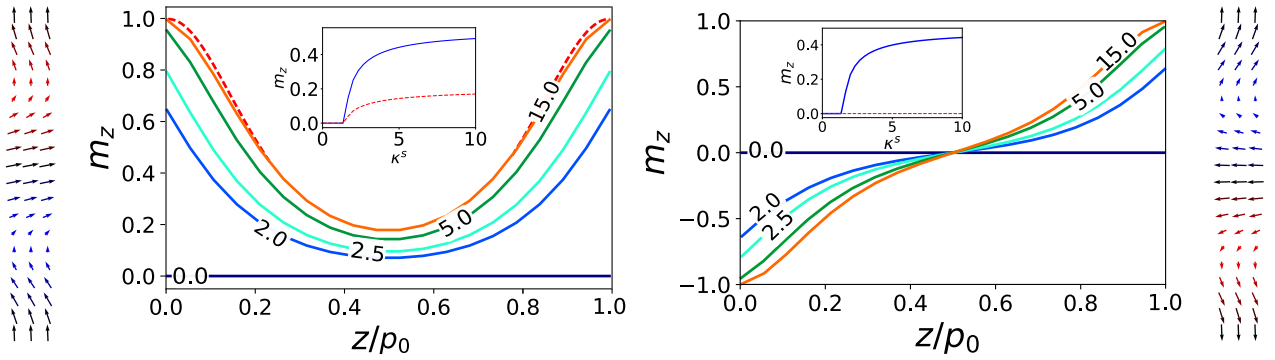


Рис. 3.2. Z-проекция нормированной намагниченности  $m_z$  для различных значений поверхностной анизотропии  $\kappa^s$  и объемной анизотропии  $\kappa^b = 0$ . На левой и правой панелях показаны решения конус-I и конус-II соответственно. На вставках приведены средние значения модуля  $m_z$  для всей пленки (синяя сплошная линия) и среднего слоя (красная пунктирная линия) в зависимости от  $\kappa^s$ . При  $\kappa^s < 1,4$  намагниченность лежит в плоскости пленки как для конуса-I, так и для конуса-II. Пунктирная линия представляет аналитическое решение для полубесконечного пространства и  $\kappa^s = \infty$ .

Для тонких пленок состояние конус-II, для которого z-проекция уменьшается и обращается в ноль по мере приближения к центру образца, является энергетически невыгодным. Однако это состояние, если оно сформировалось, может быть устойчивым, по аналогии с одномерными доменными стенками в магнетиках. В толстых пленках, в которых z проекция момента в центре близка к нулю для обоих состояний, их энергии практически совпадают. Отметим, что для ЖК знак проекции директора не важен, так что можно считать, что состояния неразличимы. Однако эти состояния топологически неэквивалентны.

При отличной от нуля анизотропии  $K^b < 0$ , переход из z-спирали (состояния с нулевой проекцией на ось z) в z конус происходит при разных значениях  $\kappa^s$ , увеличивающихся вместе с  $|\kappa^b|$ . Переход из z-спирали в z конус имеет много общего с классическим переходом Фредерикса, который происходит в ЖК под действием электрического или магнитного поля. Отметим, что оба эти состояния существуют, как минимум, как метастабильные, во всей изучаемой далее области фазовой диаграммы. В следующих разделах будет показано, что переход из z-спирали в конус-I, происходящий по мере увеличения  $K^s$ , может быть более сложным и проходить через состояние наклонной спирали.

В неограниченном образце с малой анизотропией  $K^b > 0$  вдоль оси  $z$  глобальным минимумом является  $x$  спираль с шагом  $p$  несколько большим чем  $p_0$ . При  $K^b < 0$  это уже не так. Тем не менее, в тонких пленках оказывается, что граничные условия с  $K^s > 0$  стабилизируют  $x$ -спиралевидные структуры, которые могут проявляться при различных значениях  $K^s$ , пока  $K^b$  не слишком велико.

На рисунке 3.3 представлены результаты расчета магнитной/ЖК структуры с периодическими условиями вдоль оси  $x$ , однородные в направлении оси  $y$ . Поверхностная анизотропия  $\kappa^s$  слева направо составляет 10, 20 и 30. Объемная анизотропия  $\kappa^b = 0$ . Показаны состояния с периодами, соответствующими минимуму энергии на узел решетки. Для их определения были выполнены расчеты с разными периодами  $l_x$ . Системы различного размера отличаются и по шагу спирали:  $p_x = l_x/n$ , где  $n$  – количество периодов структуры в промоделированной системе. Таким образом были определены и энергии метастабильных состояний с различным шагом  $p_x$  при различных  $\kappa^b$  и  $\kappa^s$ .

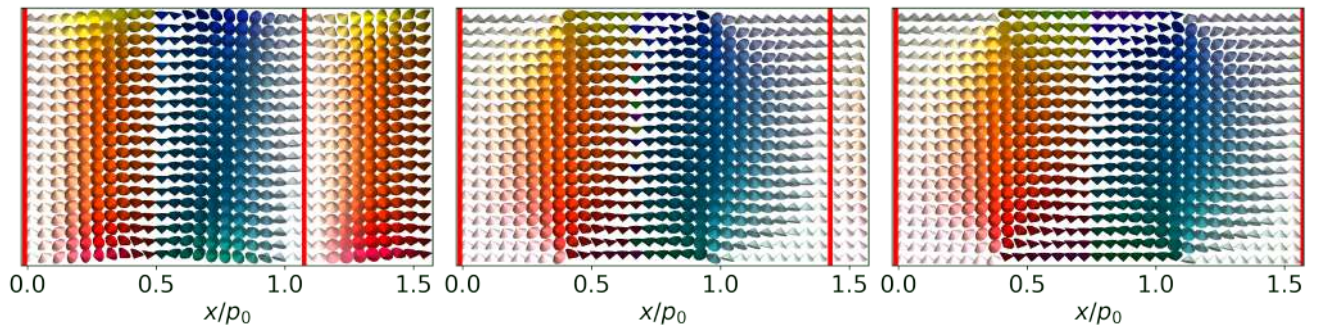


Рис. 3.3.  $x$ -спираль в отсутствие объемной анизотропии  $\kappa^b = 0$  и различных значениях поверхностной анизотропии  $\kappa^s$  : 0 (слева), 10 (посередине), 20 (справа). Один шаг  $x$ -спирали в магнитной пленке показан между красными линиями. Для жидкого кристалла шаг в два раза меньше.

Расчеты показали, что шаг спирали  $p_x$  зависит от анизотропии на поверхности, увеличиваясь с ростом  $\kappa^s$ . Для представленных структур, шаг спирали увеличился более чем в полтора раза.

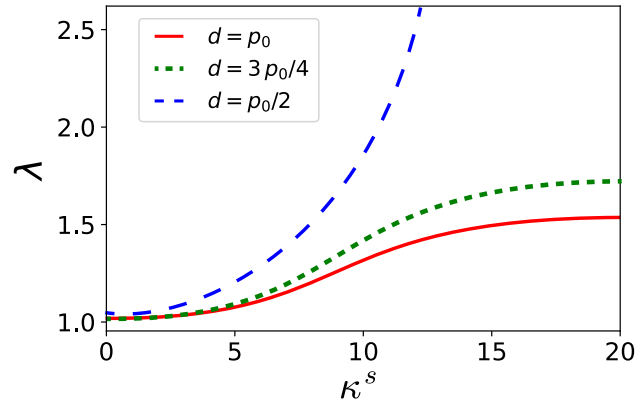


Рис. 3.4. Отношение шага  $x$ -спирали в пленке  $p_x$  и в безграничной среде  $p_0$ ,  $\lambda = p_x/p_0$ , как функция поверхностной анизотропии  $\kappa^s$  для пленок различной толщины  $d$ . Объемная анизотропия  $\kappa^b = 0$ .

На рисунке 3.4 показана зависимость нормированного шага спирали  $\lambda \equiv p/p_0$  от анизотропии на поверхности для пленок различной толщины  $d$ . Для малых поверхностных анизотропией  $\kappa^s$  шаг близок к  $p_0$  для всех толщин. В толстых пленках шаг спирали растет с увеличением  $\kappa^s$  и достигает конечного значения при  $\kappa^s \rightarrow \infty$ . В тонких пленках с  $d < p_0$  шаг спирали увеличивается неограниченно, что приводит к раскручиванию спирали. Это согласуется с результатами [59] о равновесных конфигурациях и фазовой диаграмме в тонких пленках с однородными граничными условиями.

Отметим, что похожие структуры изучались в работе [60], где было найдено аналитическое решение для случая жесткого граничного сцепления. Аналитическая работа была проведена в предположении, что директор всюду нормален к оси  $x$ . Однако при численном поиске минимума было показано, что такое предположение может привести к значительному несовпадению с реальным минимумом. Согласно расчетам для толстых пленок при  $\kappa^b = 0$ ,  $x$ -проекция намагниченности сначала уменьшается с  $\kappa^s$ , поскольку магнитные моменты вблизи границ упорядочиваются вдоль нормали к поверхности. После достижения минимума при  $\kappa^s \simeq 5$ , проекция на ось  $x$  начинает расти в связи с поворотом моментов на граничном слое. Такие структуры обсуждались в работе [61].

### 3.2. Состояние наклонной спирали в тонких хиральных пленках

Рассмотрим  $z$ -спираль и  $z$ -конус при различных параметрах анизотропии  $\kappa^b < 0$ ,  $\kappa^s > 0$ . Переход между этими двумя состояниями происходит при увеличении анизотропии  $\kappa^s$ . Отметим, что переход Фредерикса в холестерических ЖК под воздействием внешнего электрического и магнитного поля проходит через похожие состояния. Такой переход между состояниями с директором "в плоскости" и "вне плоскости" в ЖК может быть как непрерывным, так и разрывным в зависимости от параметров системы [54].

В отличие от перехода Фредерикса, в нашей модели переход от  $z$ -спирали к  $z$ -конусу проходит через новое состояние – наклонную спираль, показанную на рисунках 3.1 и 3.5. Более того, это состояние оказывается глобальным минимумом энергии в некотором диапазоне анизотропий  $\kappa^s$ . Отметим, что в неограниченном образце могут возникать аналогичные структуры, обусловленные конкуренцией между локальной кубической и обменной анизотропией [62].

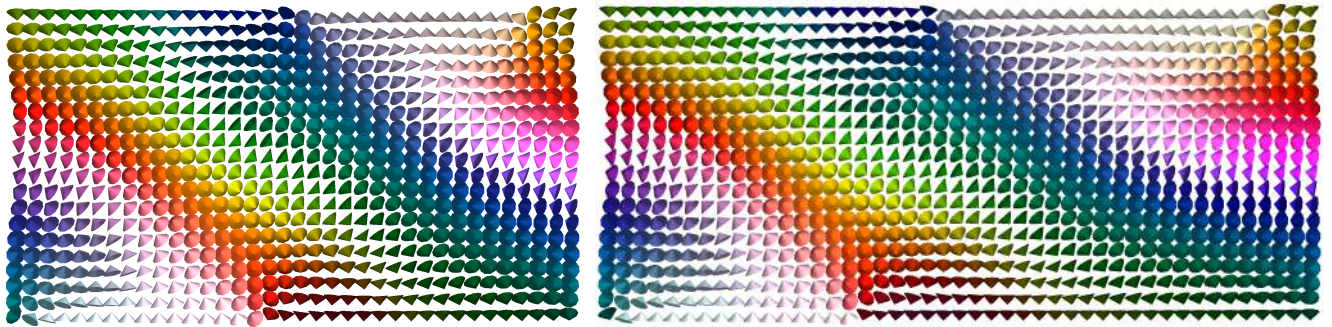


Рис. 3.5. Наклонная  $x$ -спираль при  $\kappa^b = 0$ ,  $\kappa^s = 10$  (левая панель) и  $\kappa^b = 0$ ,  $\kappa^s = 20$  (правая панель).

Состоянию наклонной спирали можно сопоставить период  $p$  и угол отклонения ее оси от оси  $z$ . Оба этих параметра зависят от анизотропий  $\kappa^s > 0$  и  $\kappa^b$ . На рисунке 3.5 показана наклонная спираль рассчитанная в отсутствии объемной анизотропии  $\kappa^b = 0$ , при двух разных значениях поверхностной ани-

зотропии  $\kappa^s = 10$  и  $\kappa^s = 20$ . Видно, что при  $\kappa^b = 0$  угол наклона спирали уменьшается с увеличением поверхностной анизотропии.

Для оценки угла наклона спирали заметим, что пространственная зависимость магнитного момента (директора ЖК) в объеме будет определяться проекцией  $s = \mathbf{r} \cdot \mathbf{q}/q^2$  вектора  $\mathbf{r}$  на ось спирали  $\mathbf{q}$ :

$$\mathbf{m}(\mathbf{r}) = \mathbf{m}(\mathbf{r}_0 + s\mathbf{q}) = \mathbf{m}(s), \quad (3.4)$$

для всех  $s$  и любого фиксированного  $\mathbf{r}_0$ . Поэтому элементы матрицы градиента намагниченности можно записать в виде:

$$(\nabla \mathbf{m})_{ij} \equiv \nabla_i m_j = \frac{q_i}{q^2} \frac{dm_j}{ds}. \quad (3.5)$$

В дискретной модели с энергией (1.2) матрица градиента представлена конечными разностями и имеет малые отклонения от этой формы. Для уменьшения ошибок  $\mathbf{q}$  аппроксимируется левосингулярным вектором матрицы градиента, соответствующим наибольшему сингулярному значению. В результате получаем выражение для угла отклонения  $\alpha$  в следующей форме:

$$\alpha = \arccos \frac{\mathbf{q} \cdot \mathbf{z}}{q^2}. \quad (3.6)$$

Наклонная спираль образуется в системе с ограниченной геометрией и существует как основное состояние только при определенных значениях толщины пленки  $d$ . Угол наклона  $\alpha$  и период  $p_x$  также зависят от толщины пленки. На рисунке 3.6 показывается зависимость безразмерного периода  $\lambda = p_x/p_0$  от толщины пленки. Видно, что период является монотонно возрастающей функцией толщины  $d$ , тогда как угол наклона уменьшается с толщиной. Таким образом, наклонная спираль переходит в  $z$ -конус в пределе пленки большой толщины. С уменьшением толщины наклонная спираль приближается к  $x$ -спирали вплоть



до критической толщины  $d \approx 0.65 p_0$ .

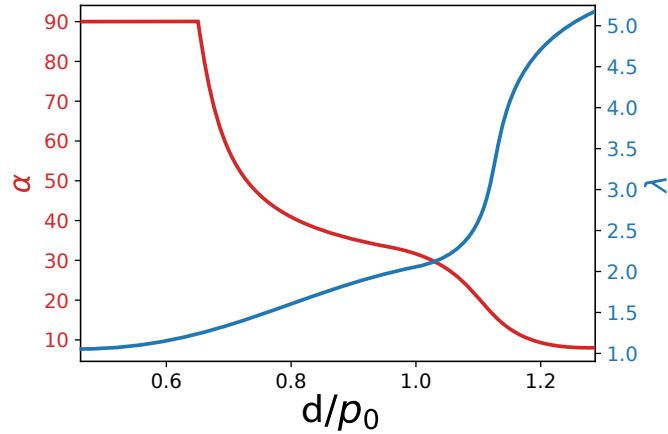


Рис. 3.6. Угол наклона  $\alpha$  и безразмерный период  $\lambda = p_x/p_0$  ( $p_0$  - равновесное значение шага спирали в массивном образце) наклонного конуса в зависимости от толщины пленки  $d$ , рассчитанные при  $\kappa^b = -0,2$  и  $\kappa^s = 0$ .

По аналогии с  $x$  спиралью, были рассмотрены метастабильные конфигурации наклонной спирали для различных размеров моделируемых областей, чтобы найти период  $p_x$  соответствующий минимуму энергии системы.  $x$ -спираль и наклонная спираль сосуществуют как метастабильные состояния и отличаются по периоду и энергии. Для оценки устойчивости этих состояний полезно построить энергетическую поверхность системы и найти ПМПЭ между этими состояниями. Максимум энергии вдоль этого пути даст значение энергетического барьера между состояниями. ПМПЭ можно, как указывалось выше, найти с помощью метода подталкивания упругой лентой [63] или других специальных методов [64, 65]. Такой подход используется для изучения стабильности как магнитных систем [9, 66, 67], так и жидких кристаллов [10, 11, 15].

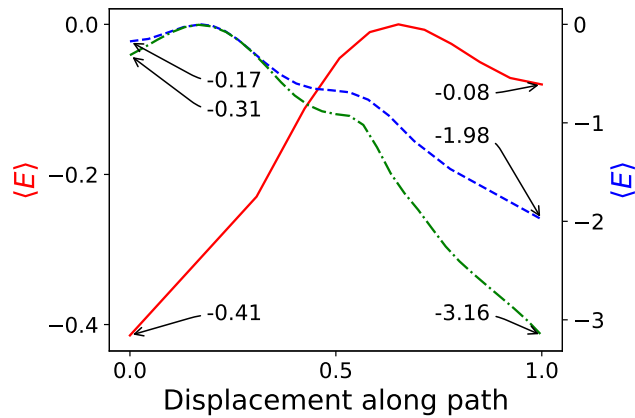


Рис. 3.7. ПМПЭ между наклонной спиралью и  $x$ -спиралью при  $\kappa^b = -0,05$  (левая ось, сплошная линия) и  $\kappa^b = -0,1$  (правая ось, штриховая линия) для фиксированной поверхностной анизотропии  $\kappa^s = 5$  и шага спирали  $\lambda = 1.1$ . Штрихпунктирная линия показывает ПМПЭ с оптимизацией шага спирали вдоль пути, как показано на рисунке 3.8. Средняя энергия на один магнитный момент  $\langle E \rangle$  представлена в единицах  $J \cdot 10^{-5}$  и отсчитывается от энергии в седловой точке.

На рисунке 3.7 показаны ПМПЭ между состояниями  $x$ -спирали и наклонной спирали при фиксированном размере моделируемой системы с безразмерным периодом  $\lambda = 1.1$  и анизотропией  $K^s = 5$  на поверхности. Сплошные и пунктирные линии показывают результаты при разных значениях анизотропии внутри образца:  $\kappa^b = -0.05$  и  $\kappa^b = -0.1$  соответственно. Таким образом оказывается, что  $x$ -спираль, бывшая основным состоянием при малых значениях  $|\kappa^b|$  становится метастабильной при увеличении внутренней анизотропии.

Результаты, отмеченные пунктирной линией с точками на рисунке 3.7 были получены путем минимизации энергии с учетом изменения периода  $p_x$ . На рисунке 3.8 показана тепловая карта показывающая энергию вдоль пути наименьшей энергии между состояниями  $x$ -спирали и наклонной спирали. Линии, проведенные при постоянном  $\lambda$  на карте соответствуют ПМПЭ, в системе с фиксированным размером ячейки вдоль оси  $x$ , а значит и с заданным периодом. Локальная координата (смещение вдоль ПМПЭ) принята равной 0 для  $x$ -спирали и 1 для наклонной спирали. Период соответствующий минимуму энергии  $x$ -спирали  $\lambda = 1.10$ , а наклонной спирали –  $\lambda = 1.12$ . Отметим, что

$\lambda$  меняется вдоль пути непрерывно.

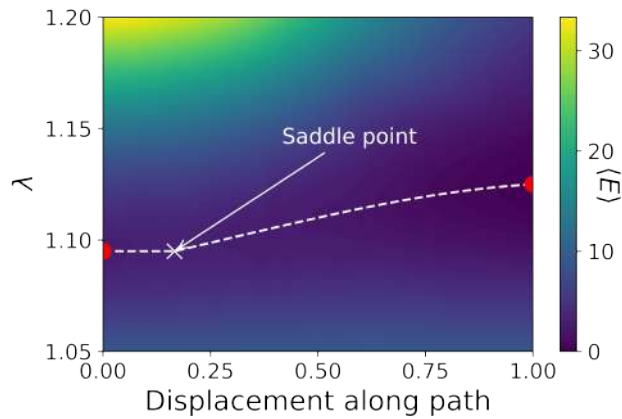


Рис. 3.8. Энергия как функция шага спирали  $\lambda$  и координаты реакции ММПЭ от  $x$ -спирали (левая граница) до наклонной спирали (правая сторона) при  $\kappa^b = -0,1$ ,  $\kappa^s = 5$ . ММПЭ отмечен пунктирной линией, а крестообразный маркер указывает на переходное состояние. Средняя энергия спина  $\langle E \rangle$  измеряется в единицах  $J \cdot 10^{-5}$  и отсчитывается от наименьшей энергии .

Таким образом, двухмерная поверхность, представленная на рисунке 3.8 вводит дополнительную степень свободы в виде возможности варьирования  $\lambda$ . Оптимальный ММПЭ проходит через хиральные структуры с разным периодом в процессе трансформации из  $x$ -спирали в наклонную спираль. Как начальная, так и конечная структуры для этого перехода имеют минимально возможную энергию при данных параметрах системы. Соответствующая энергия вдоль этого пути показана по рисунку 3.8 пунктирной линией, а также на рисунке 3.7 пунктирной линией с точками.

Энергии барьеров, полученные из ММПЭ могут быть использованы для оценки устойчивости состояний. Реальные переходы между состояниями могут проходить не во всем объеме, а постепенно, через локальные переходы структур в районе дефектов. По аналогии с движением доменных стенок, такой переход не потребует дополнительной энергии.

Состояния, ассоциированные с наклонной спиралью в хиральной среде наблюдались экспериментально в ЖК [29, 59]. Они принадлежат классу "холестерических пальцев". Поведение таких систем при изменении внешних условий

и переходы между соответствующими состояниями может быть описано с помощью описанной выше модели. Отметим, что в ЖК системах анизотропия  $\kappa^b$  вызывается внешним электрическим или магнитным полем. В экспериментах с жидкими кристаллами наблюдали переход из состояния наклонной спирали в  $z$ -конус, когда значение анизотропии “легкая плоскость”  $\kappa^b < 0$  увеличивалось [12]. На Рисунке 3.9 показана эволюция состояний при изменении внешнего поля. С увеличением угла наклона происходит переход в  $z$ -спираль, что отлично согласуется с зависимостью распределения директора, которое наблюдалось в эксперименте с холестерическими жидкими кристаллами [12].

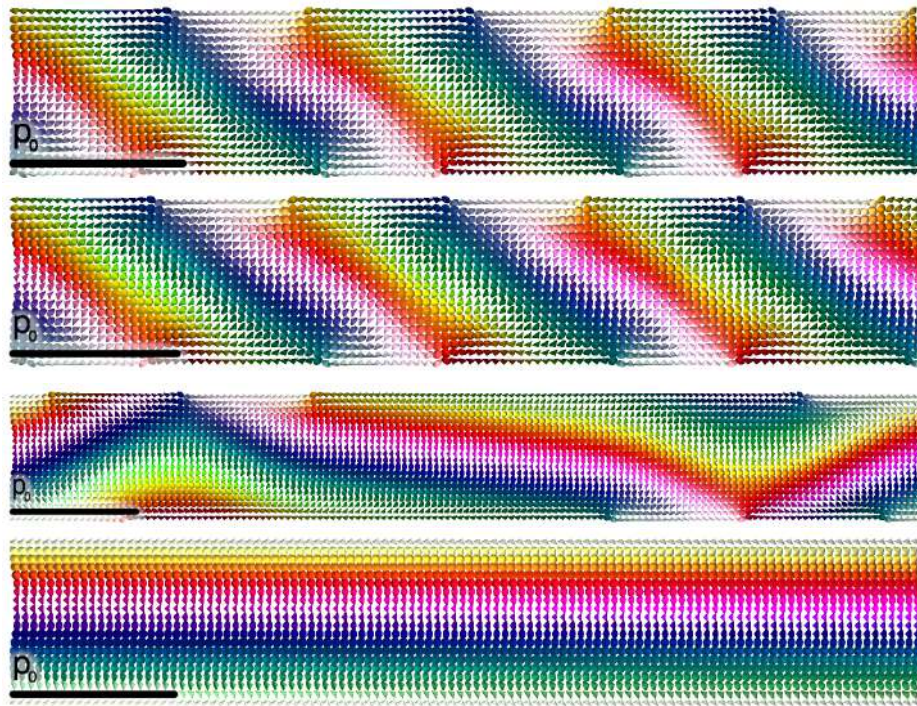


Рис. 3.9. Эволюция наклонной спирали при изменении объемной анизотропии  $\kappa^b$  от значения 0 (вверху), через  $-0,2$  и  $-0,8$  до  $-2,4$  (внизу) в предположении постоянной поверхностной анизотропии  $\kappa^s = 11$ .

### 3.3. Фазовая диаграмма хиральных магнетиков и жидких кристаллов в тонких пленках

Расчет энергии магнитных/ЖК конфигураций хиральной среды в тонких пленках позволяет построить диаграмму состояний в зависимости от параметров анизотропии внутри пленки  $\kappa^b$  и на ее поверхности  $\kappa^s$ . Такая диаграмма приведена на рисунке 3.10.

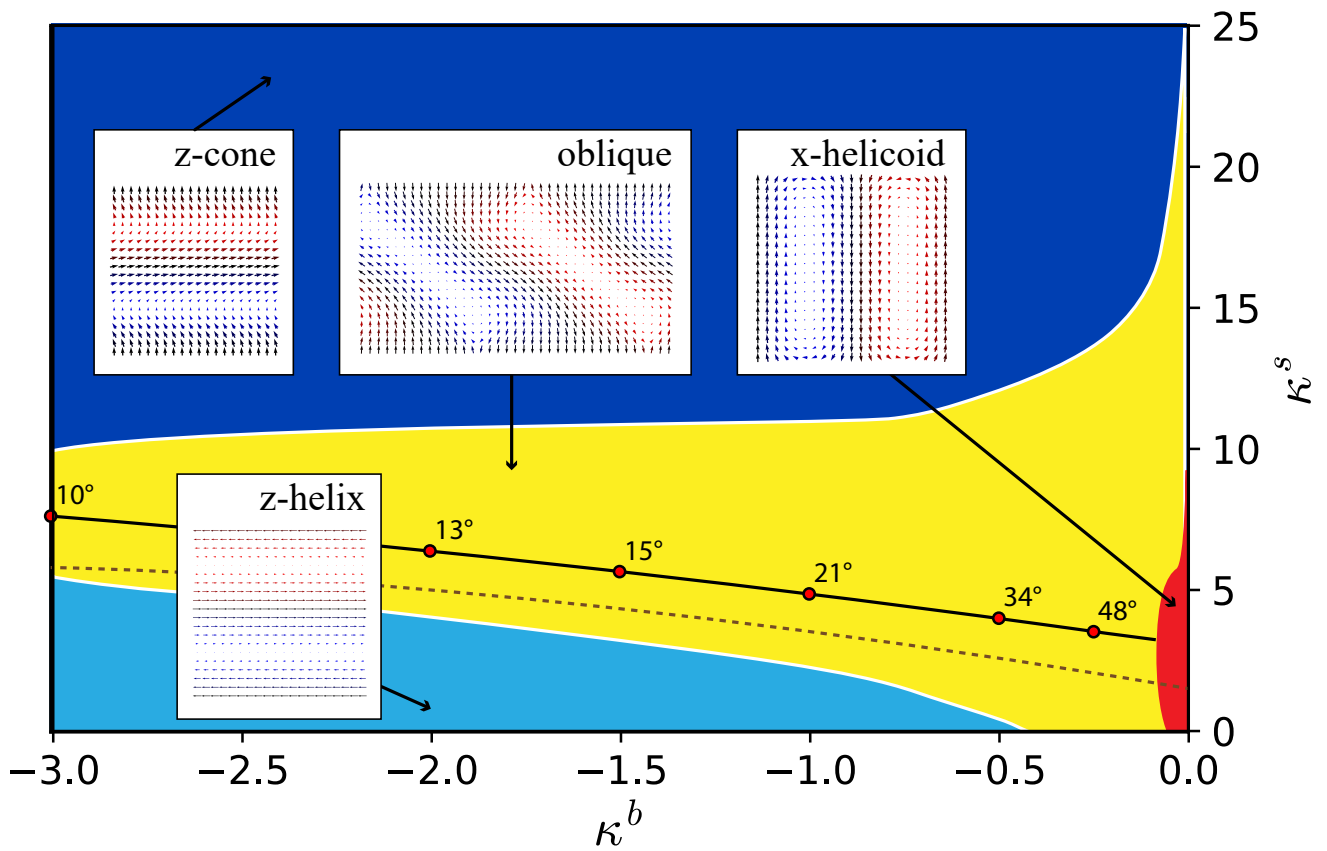


Рис. 3.10. Фазовая диаграмма хиральной среды в плоскости  $\kappa^b$ - $\kappa^s$ , рассчитанная при толщине пленки  $d = p_0$ . Конфигурации магнитной системы/ЖК показаны на вставках. Кривая равных энергий для  $z$ -спирали и  $z$ -конуса обозначена штриховой линией. Черной сплошной линией отмечены состояния с максимальным углом наклона  $\alpha$  оси наклонной спирали.

Во всей области  $\kappa^b \leq 0$  и  $\kappa^s \geq 0$  показанной на рисунке 3.10, существуют состояния  $z$ -спираль и конус I, как основные или метастабильными состояниями. Области, в которых  $z$ -спираль и конус I являются состояниями с наименьшей энергией отмечены на рисунке 3.10 голубым и синим цветом соответственно.

На вставках показаны примеры конфигураций в указанных стрелками точках. Черная пунктирная линия соответствует кривой на плоскости  $\kappa^b$ - $\kappa^s$ , где энергии этих состояний становятся равными. Отметим, что при заданном значении  $\kappa^b$  переход от  $z$ -спирали к конусу-I происходит при превышении порогового значения анизотропии на поверхности  $\kappa^s$ . Это значение - монотонно возрастающая функция  $|\kappa^b|$ . Сам переход реализуется через промежуточное состояние - наклонную спираль, которая является основным состоянием в области, отмеченной на фазовой диаграмме желтым цветом.

Угол отклонения  $\alpha$  оси наклонной спирали от нормали к пленке, введенный выше ((3.6)) сначала увеличивается от нуля до максимального значения, отмеченном на фазовой диаграмме черной линией, а затем снова уменьшится до нуля, когда наклонная спираль превращается в конус-I. Так как наклоненная спираль существует только в ограниченной области фазовой диаграммы, при больших значениях  $\kappa^b$  (этот участок с большими полями не показан на фазовой диаграмме) переход между  $z$  спиралью и конусом-I происходит без наклонной спирали в качестве промежуточного состояния.

При малой объемной анизотропии, в области, отмеченной на фазовой диаграмме красным, основным состоянием является  $x$  спираль. Ранее уже отмечалось, что такая конфигурация стабилизируется за счет граничных условий в отсутствие  $\kappa^b$ . Увеличение  $\kappa^s$  переводит  $x$  спираль в наклонную спираль.

На Рисунке 3.11 показана зависимость угла отклонения  $\alpha$  наклонной спирали от объемной и поверхностной анизотропии. На левом рисунке приведена зависимость  $\alpha$  от анизотропии внутри образца при различных значениях анизотропии на поверхности. Можно заметить, что угол  $\alpha$  - убывающая функция анизотропии внутри образца  $|\kappa^b|$ . Максимально значение этого угла близко к  $\pi/2$  и достигается при значении  $\kappa^s$  меньше 10. Угол стремится к нулю в пределе больших полей.

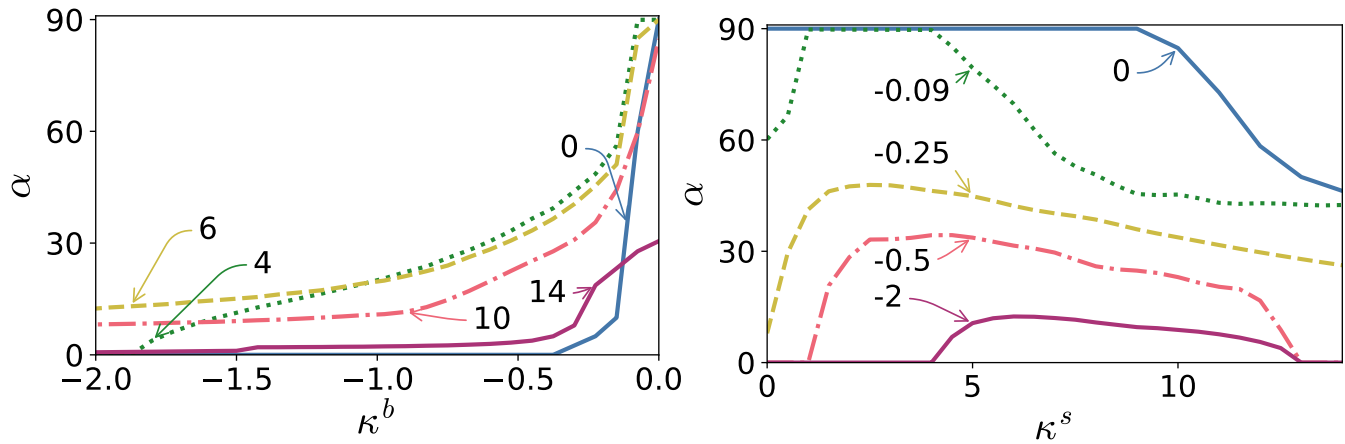


Рис. 3.11. Угол наклона  $\alpha$  (в градусах) наклонной спирали как функция объемной анизотропии  $\kappa^b$  (слева) и поверхностной анизотропии  $\kappa^s$  (справа). Предельные случаи с  $\alpha = 0$  и  $\alpha = 90^\circ$  соответствуют  $z$ -конусу и  $x$ -спирали соответственно.

На правом рисунке 3.11 показана зависимость  $\alpha$  от анизотропии на поверхности образца при различных значениях анизотропии внутри образца. Когда  $|\kappa^b|$  мал, максимальный угол принимает значение  $\pi/2$ , что соответствует  $x$  спирали. С увеличением  $|\kappa^b|$  максимальный угол отклонения уменьшается в соответствии с фазовой диаграммой (Рисунок 3.10).

### 3.4. Локализованные состояния в хиральных жидких кристаллах и магнетиках

Локализованные структуры в хиральных средах, которые иногда называют "топологическими солитонами" могут возникать в разных частях фазовой диаграммы. Проблемы их устойчивости, взаимных превращений и динамики представляют большой интерес с точки зрения фундаментальной физики и приложений.

На рисунке 3.12 представлены три типа локализованных магнитных конфигураций, называемых скирмионной трубкой, пиявкой и тороном. Показана ориентация магнитных моментов, отличающихся от направлений моментов в

содержащей их матрице на угол больше, чем  $15^\circ$ . Подобные структуры, называемые «детскими скирмионами», экспериментально наблюдались в гомеотропно ориентированных ЖК-ячейках [68].

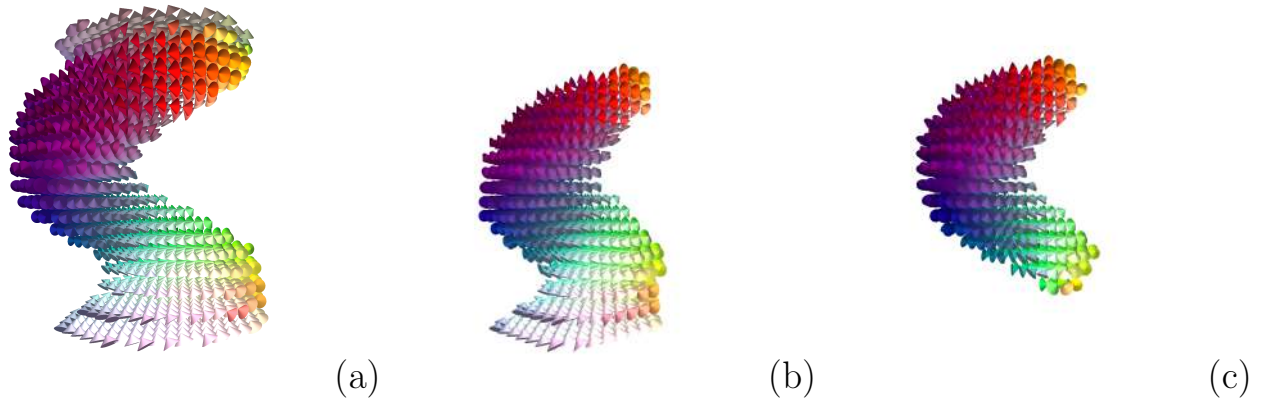


Рис. 3.12. Топологические структуры, встречающиеся в конической фазе: скирмионная трубка (a), пивка (b), торон (c). Спины, ориентированные так же, как и в конусе, не показаны.

Магнитная конфигурация, называемая скирмионной трубкой, показана на рисунке 3.12a. Эта структура в пленке похожа на вертикальные скирмионные трубки в объемных хиральных магнитах в магнитном поле [58,69]. Известно, что в сравнительно небольшом магнитном поле магнитно-индуцированная коническая фаза оказывает скручивающее действие на трубку, ведущую к структуре коленчатого вала.

Другая конфигурация, показанная на рисунке 3.12c, называется тороном в соответствии с обозначениями, введенными в [31]. Она расположена в объеме пленки и касается граничных поверхностей. Такие структуры наблюдались в ЖК и магнитных системах [70]. Магнитные моменты на поверхностях пленки с тороном почти не меняют ориентации, тогда как в горизонтальном сечении в середине пленки структура аналогична скирмионной трубке. Хотя торон на рисунке 3.12c напоминает описанный в [31], в данном случае тороны окружены конической фазой, которая, как и в случае скирмионной трубки, вызывает закручивание торонов.

Структура, изображенная на рисунке 3.12b, представляет собой промежу-



точный случай между скирмионной трубкой и тороном: она прикреплена только к одной из границ и, так же, как и у торона имеет хвост 3.12*с*. Эта структура называется пиявкой. Отметим, что пиявкоподобные структуры, формирующиеся в асимметричных ячейках ЖК, ранее были описаны в [31, 71] как гибриды скирмион/торон. В отличие от гибридов, наши структуры формируются в симметричных ячейках и скручены из-за наличия окружающей их конической фазы.

Кроме топологических солитонов, касающихся или прилегающих к обоим поверхностям пленки были обнаружены структуры, локализованные вблизи одной из граничных поверхностей. Аналогичные структуры, называемые хиральными поплавками (боберами), были предсказаны и наблюдались в толстых магнитных пленках [30, 70]. Структура поплавок показана на рисунке 3.13. Поверхность уровня для  $m_z$  изображена в правой части рисунка 3.13. Цвета этой поверхности кодируют ориентацию спинов в плоскости  $xy$ , которая задается азимутальным углом. Кодировка аналогична представленной на 3.1

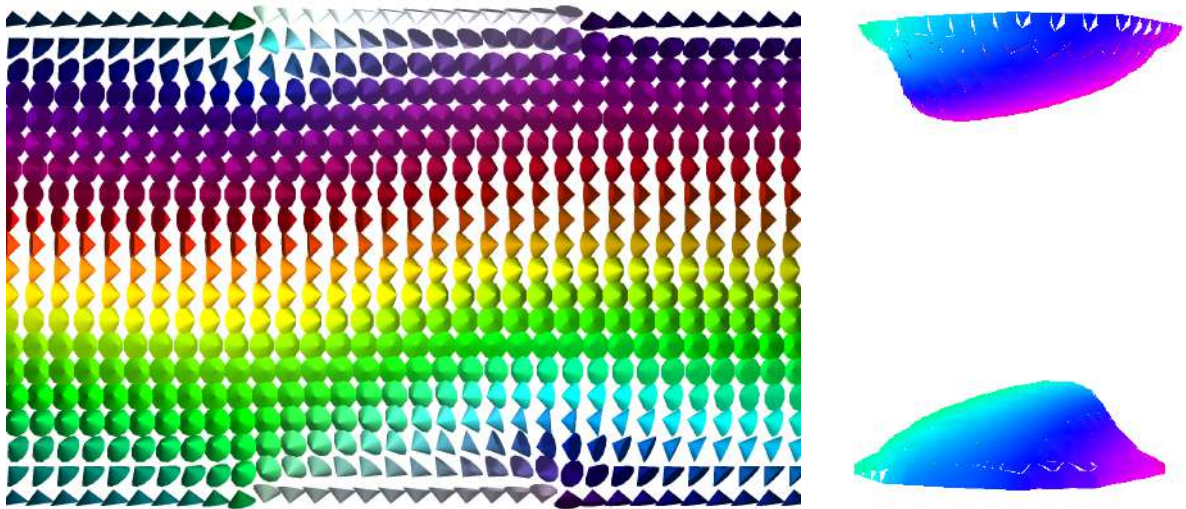


Рис. 3.13. Поплавок(бобер) в конической фазе, проекция  $yz$ , слева: показаны все спины одного слоя, справа: поверхность уровня постоянной  $m_z = 0,85$ .

На рисунке 3.14 показаны области локальной устойчивости для различных локализованных топологических состояний на фазовой диаграмме. Видно, что

в конической фазе находится область, в которой одновременно сосуществуют все вышеперечисленные состояния: 3.12-3.13.

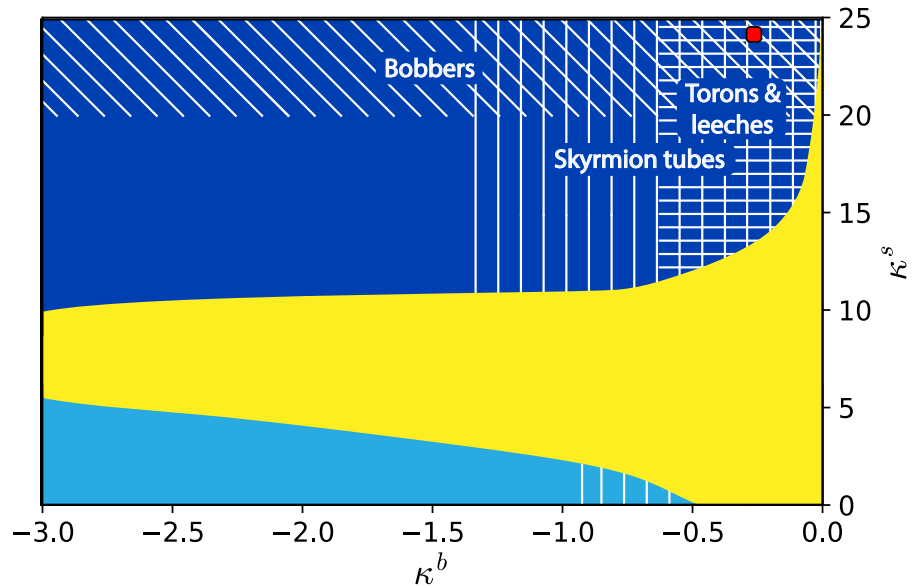


Рис. 3.14. Области, в которых существуют различные типы метастабильных топологических состояний: скирмионные трубки - вертикально заштрихованная область; тороны и пиявки - горизонтально заштрихованная область; поплавки - косо заштрихованная область.

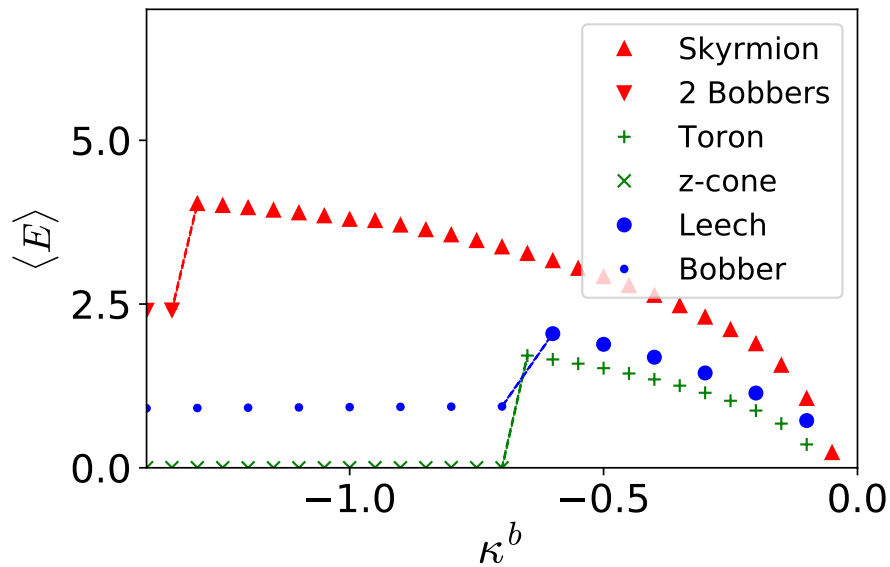


Рис. 3.15. Зависимость энергии различных топологических солитонов от объемной анизотропии  $\kappa^b$  при  $\kappa^s = 24$ . С увеличением абсолютной величины  $\kappa^b$  энергия локализованных состояний растет вплоть до разрушения старого состояния и образования нового с меньшей энергией.

На рисунке 3.15 приведены энергии различных топологических солитонов

в зависимости от параметра  $\kappa^b$ . При  $\kappa^b > -0.6$  торон обладает самой низкой энергией из рассмотренных квазичастиц. Энергия торона увеличивается с  $|\kappa^b|$ , а поперечный размер уменьшается, что приводит к вытягиванию его формы вдоль оси  $z$ . При  $\kappa^b$  приблизительно  $-0,6$  торон становится неустойчивым и переходит в коническую фазу. Несмотря на то, что энергия скирмионной трубки больше, чем у торона, она остается локально стабильной вплоть до более высоких значений  $|\kappa^b|$ . При дальнейшем увеличении  $|\kappa^b|$  ее центральная часть становится тоньше. Трубка теряет устойчивость при  $\kappa^b$  приблизительно  $-1,45$  и распадается на пару хиральных поплавков, расположенных вблизи верхней и нижней граничных поверхностей.  $\kappa^b$ .

Пиявки и тороны имеют одинаковое пороговое значение  $|\kappa^b|$ , выше которого они становятся неустойчивыми. Выше порога пиявки превращаются в одиночные поплавки, тогда как тороны исчезают.

Отметим, что, как показано на рисунке 3.15, удвоенная энергия одиночного хирального поплавка заметно меньше энергии пары поплавков, образовавшейся при распаде скирмионной трубки. Можно показать, что энергия пары поплавков как функция расстояния, разделяющего поплавки, имеет два локальных минимума. Один из минимумов при толщине ячейки  $d$  соответствует метастабильному состоянию, тогда как минимум энергии на большем расстоянии (его можно оценить примерно в  $3,6d$ ) оказывается меньше удвоенной энергии одиночного поплавка.

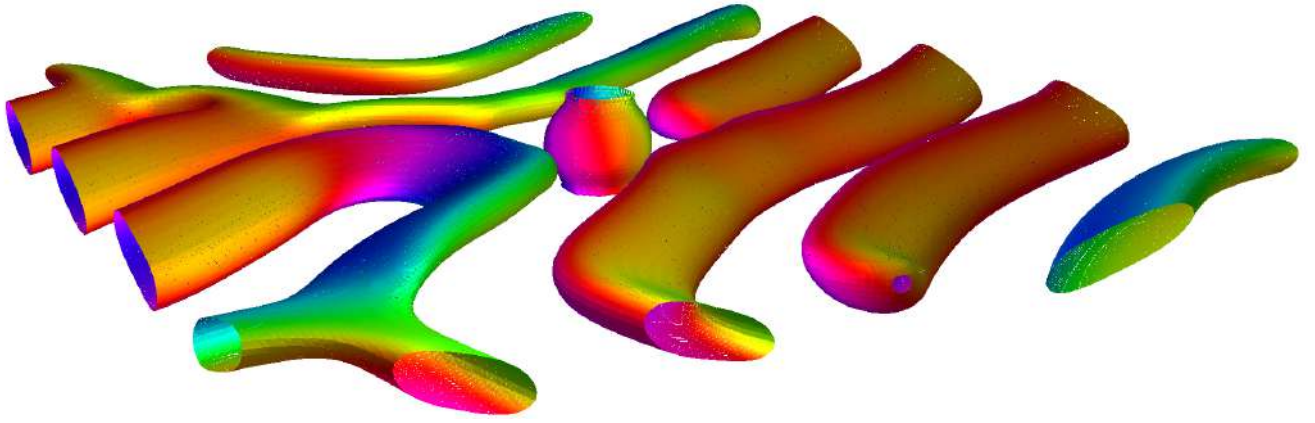


Рис. 3.16. Скирмион встроенный в структуру наклонного отпечатка пальца. Поверхность соответствует значению  $m_z = 0$ .  $\kappa^b = 0$ ,  $\kappa^s = 18$  Ориентация магнитных моментов в плоскости  $xy$  кодируется цветом.

В области фазовой диаграммы, где основным состоянием является наклонная спираль (обозначена желтым цветом на Рисунке 3.14), в структуру отпечатков пальцев могут встраиваться локализованные топологические структуры. Примеры таких конфигураций для случая скирмионной трубки и торона показаны на рисунках 3.16 и 3.17 соответственно. На рисунках показаны поверхности на которой  $m_z = const$  Цвет кодирует азимутальный угол. Когда скирмионная трубка и торон окружены ферромагнитной фазой, их структура полностью аналогична соответствующим конфигурациям в гомеотропной ЖК-ячейке.

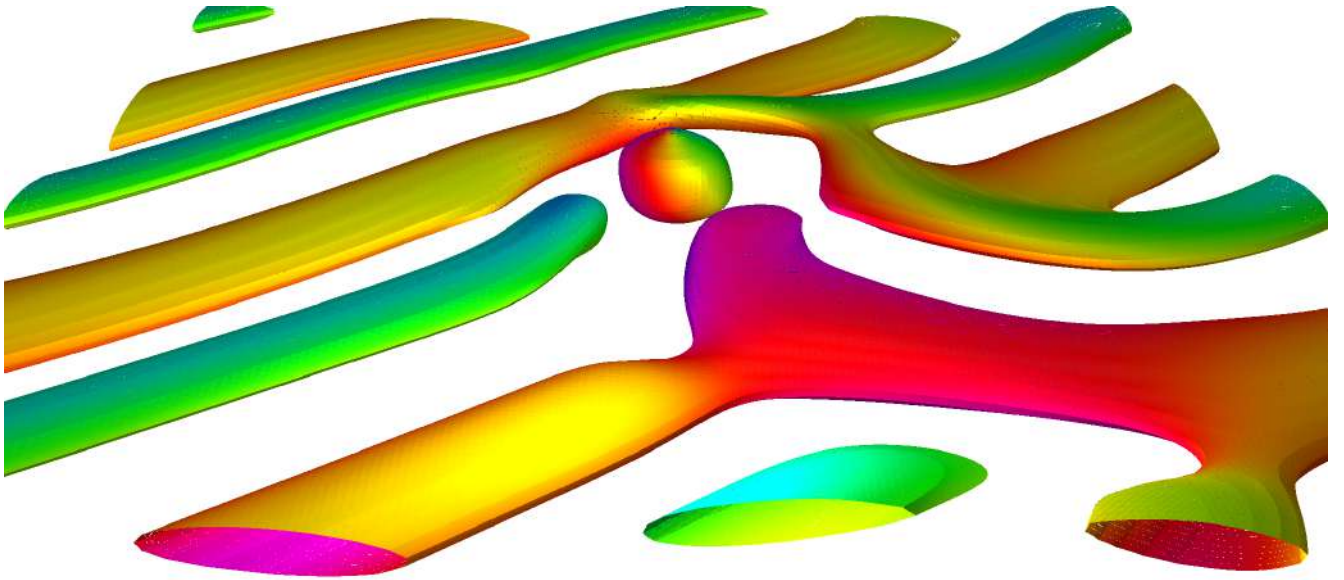


Рис. 3.17. Торон, встроенный в структуру наклонного отпечатка пальца. Поверхность соответствует постоянному  $m_z = -0.1$ .  $\kappa^b = -0.05$ ,  $\kappa^s = 24$ . Цветом кодируется направление проекции магнитного момента в плоскости  $xy$ .

*Выводы к 3 главе.* В ЖК и магнитных системах в условиях ограниченной геометрии, таких, как тонкие пленки, возможно формирование различных равновесных и метастабильных фаз, включая спиральные и конические структуры, наклонные спиральные состояния, а также локализованные топологические солитоны. Была изучена фазовая диаграмма состояний магнитных и ЖК конфигураций от внутренней и поверхностной анизотропии. Показано, что топологические солитоны могут встраиваться в более крупные доменные узоры и трансформироваться из одного вида в другой при изменении внешних условий и параметров системы.

## Глава 4

## Скирмионные состояния тонких пленок кубических гелимагнетиков

Открытые в  $\text{MnSi}$  и других гелимагнетиках топологически защищенные трехмерные магнитные структуры представляют интерес для множества технологических приложений, включая магнитную память и устройства обработки данных. В этой главе будут представлены результаты исследования устойчивости и свойств хиральных магнитных скирмионов в тонких пленках кубических гелимагнетиков, влияния на них внешних полей и геометрии образца. В отличие от системы, которая изучалась в Главе 3 здесь будет в явном виде включен земеновский вклад в энергию (1.3). Будет рассмотрен эффект влияния анизотропии и наличия поверхности на формирование скирмионных решеток.

Существует два механизма, с которыми можно связать устойчивость скирмионных структур в рассматриваемых системах. Для первого механизма анизотропия основного состояния (коническая фаза) и небольшие анизотропные деформации играют ключевую роль в стабилизации скирмионов. Во втором – важную роль играют изменения, вызванные поверхностными слоями и интерфейсами.

Далее будут обсуждаться различия фазовых диаграмм тонких пленок и объемных образцов  $\text{MnSi}$ , с акцентом на влияние одноосной анизотропии типа "легкая плоскость". Это позволяет выявить условия, при которых возможно существование как скирмионных трубок в плоскости, так ортогонально плоскости пленки, а также оценить их устойчивость и возможность управлять состояниями с помощью магнитных полей.

Наряду с этим будут представлены теоретические исследования наклонной спирали, введенной в разделе 3.2 для систем без земеновского вклада в

энергию. Эта структура может существовать в тонких пленках, но отсутствует в объемных кубических гелимагнетиках. Состояние наклонной спирали будет рассмотрено с точки зрения его равновесных параметров и возможности перехода к другим магнитным конфигурациям.

## 4.1. Фазовая диаграмма пленки гелимагнетика.

### Состояния в магнитном поле в плоскости

Для описания ориентации намагниченности в системе введем, как и раньше, единичный вектор  $\mathbf{m} = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta)$  вдоль намагниченности,  $\mathbf{M} = \mathbf{m}M$ . К функционалу энергии ((1.1)) добавим вклад, связанный с наличием магнитного поля  $\mathbf{H}$ ,  $-\mu_0 M(\mathbf{m} \cdot \mathbf{H})$ . Будут исследоваться обе ориентации приложенного поля: ортогонально плоскости ( $\mathbf{H} \parallel z$ ) и в плоскости ( $\mathbf{H} \perp z$ ).

Введем характерную длину  $L_D = \mathcal{A}/|\mathcal{D}|$ . Величина  $4\pi L_D$  представляет собой период спирали для объемных гелимагнетиков в отсутствие внешнего магнитного поля и анизотропии. Для объемного *MnSi* этот период составляет около 18 нм. Будем измерять все длины в единицах  $L_D$ . Определим критическое поле  $\mu_0 H_D = \mathcal{D}^2/(\mathcal{A}M)$ . Для конической фазы в объемных гелимагнетиках поле насыщения, при котором все магнитные моменты устанавливаются вдоль поля, равно  $H_D/2$ . Управляющими безразмерными параметрами, от которых зависят магнитные конфигурации будем считать приведенное магнитное поле  $h = H/H_D$  и величину безразмерной одноосной анизотропии  $k_u = \mathcal{K}\mathcal{A}/\mathcal{D}^2$ .

Пренебрежем эффектами, обусловленными пространственной неоднородностью наведенной анизотропии. Пленку будем считать бесконечной в направлениях  $x$  и  $y$ , используя периодические граничные условия. Толщина пленки выберем равной  $L = 1.2L_D$ , что позволяет работать только с одним рядом скирмионов в плоскости. Введем координаты так, чтобы пленка была ограничена параллельными плоскостями при  $z = \pm 0.6L_D$ .

По аналогии с методом, использованным в главе 3, путем сравнения равновесных энергий одномерных спиральных состояний, двумерных скирмионных решеток и поляризованных ферромагнитных (ФМ) состояний можно построить фазовые диаграммы состояний в зависимости от величин  $(k_u, h_x)$  (Рисунок 4.1(a)) и  $(k_u, h_z)$  (Рисунок 4.1(b)). Области модулированных состояний, соответствующих глобальному минимуму функционала энергии, обозначены разными цветами. Отметим, что ФМ-состояние, с намагниченностью вдоль магнитного поля в плоскости (белая область на Рисунке 4.1(a)), приобретает закрутку в плоскости (цветной график для  $h_x = 0.4$  на Рисунке 4.2(a)), которая никогда полностью не насыщается [72]. Для магнитного поля, ортогонального плоскости пленки ФМ-состояние становится полностью насыщенным [73] (белая область на Рисунке 4.1(b)) в результате перехода из конического состояния при критическом поле  $h_{z0} = \frac{1+4k_u}{2}$ .

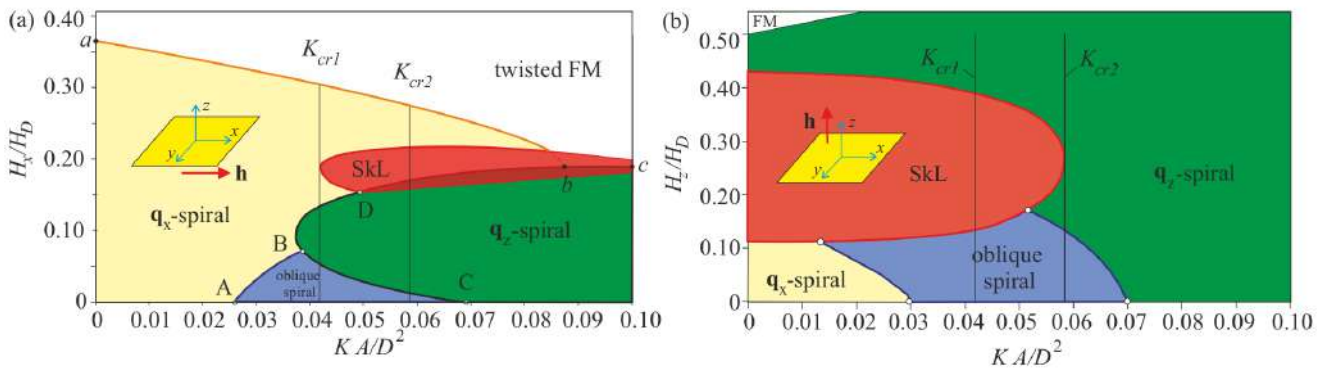


Рис. 4.1. Фазовые диаграммы состояний на плоскости  $(k_u, h_x)$  (a) и  $(k_u, h_z)$  (b). Области разного цвета соответствуют скирмионной решетке (красный),  $q_x$ -спиралям (желтый),  $q_z$ -спиралям (зеленый) и наклонной спирали (синий). Белая область на (a) обозначает ФМ-состояние с завихрениями в плоскости поверхности, а на (b) – ФМ-состояние, полностью насыщенное по полю. Критические значения анизотропии указывают на интервал перекрытия  $[K_{cr1}, K_{cr2}]$  с сосуществующими скирмионами в плоскости и ортогонально плоскости.

На Рисунке 4.1(a)  $q_x$ -спирали занимают отмеченную желтым цветом область фазовой диаграммы. При  $h_x = k_u = 0$  за счет дополнительных завихрений магнитной структуры в плоскости поверхности такие спирали имеют меньшую энергию, чем  $q_z$ -спирали. Таким образом, отличительной особенностью



стью фазовой диаграммы в области 0 – А является баланс энергии, связанной с одноосной анизотропией "легкая плоскость" и энергии поверхностных вихрей, который делает такую структуру предпочтительнее других одномерных состояний. Для объемных гелимагнетиков точка А перемещается к нулю на фазовой диаграмме, как это показано на Рисунке 2 в [74].

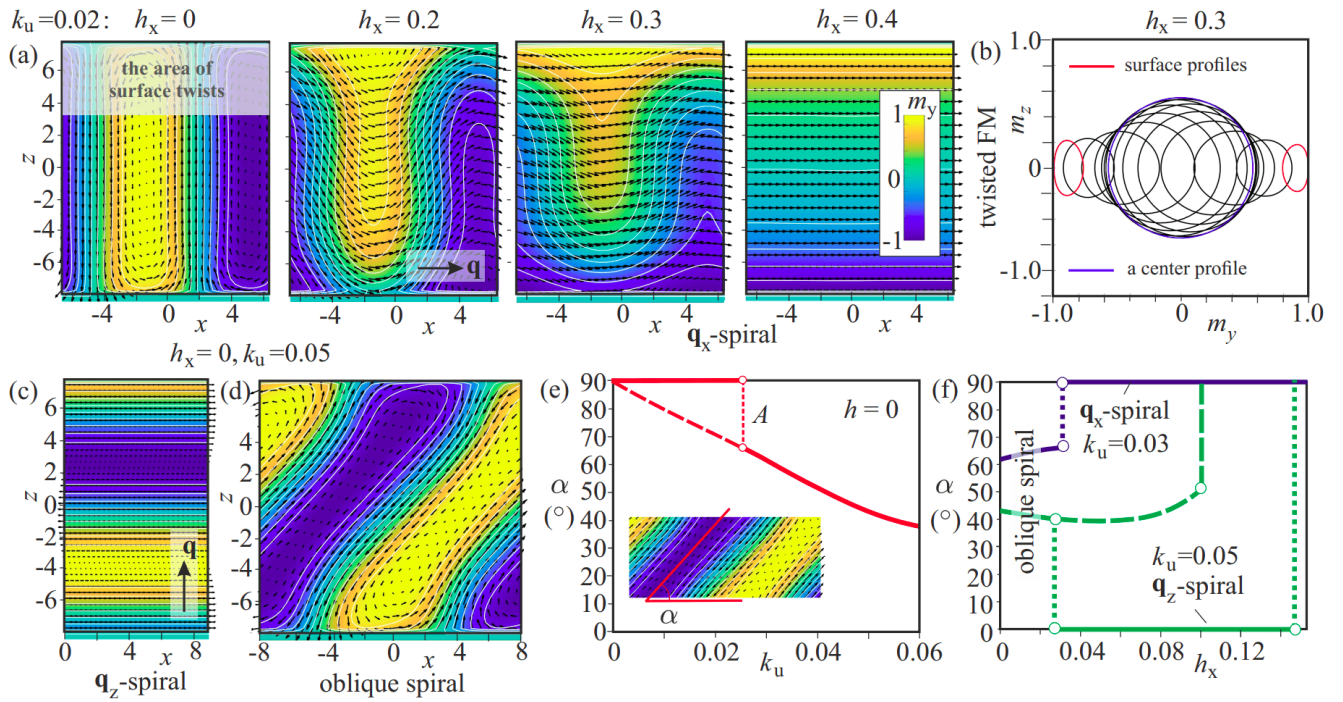


Рис. 4.2. Одномерные спиральные состояния для магнитного поля в плоскости пленки. Цветом кодируется  $m_y$ -компонента намагниченности;  $m_x$  и  $m_z$  показаны тонкими черными стрелками. (а): Управляемое полем преобразование  $q_x$ -спирали в скрученное ФМ состояние. (б): Набор профилей  $m_y$ - $m_z$  по толщине пленки: синей линией обозначен профиль в середине слоя ( $z = 0$ ), красными кривыми – на обеих поверхностях ( $z = \pm L/2$ ). (с):  $q_z$ -спираль имеет только одну петлю вращения намагниченности, которая раскручивается путем перехода в закрученное ФМ-состояние (линия  $b - c$  на Рисунке 4.1 (а) или в  $q_x$ -спираль (линия  $B-D-b$  на фазовой диаграмме). При  $h_x = 0$  (в точке А на Рисунке (е) из  $q_x$ -спирали формируется наклонная спираль (d) с определенным углом наклона  $\alpha$  (е), который плавно уменьшается с  $k_u$  вплоть до перехода в  $q_z$ -спираль. (f): Эволюция наклонной спирали под действием поля для  $k_u = 0.03$  (синие кривые) и  $k_u = 0.05$  (зеленые кривые) с переходами в обычные конические и геликоидальные спирали.

Преобразование  $q_x$ -спирали в закрученное ФМ состояние на линии  $a - b$  (Рисунке 4.1(a)) под действием поля показано на Рисунке 4.2 с  $q$ -вектором. Помимо такой закрученной структуры в плоскости  $xz$ , включающей конусообразное вращение в середине пленки с искажениями, вызванными наличием поверх-

ности, одноосная анизотропия вызывает небольшие эллиптические деформации  $q_x$ -спиралей в плоскости  $yz$ .

На Рисунке 4.2(b) виден поворот намагниченности при движении от середины слоя (синяя кривая) к ограничивающим поверхностям (красные кривые). В этой геометрии  $q_z$ -спирали ориентированные перпендикулярно полю энергетически предпочтительнее в зеленой области на фазовой диаграмме (Рисунок 4.1(a)). Поскольку обычно толщина пленки не является кратной длине волны спирали (в нашем случае  $1.2L_D$ ), намагниченность  $q_z$ -спирали имеет некомпенсированное значение даже в нулевом магнитном поле.

Решения для этой искривленной полем спирали можно получить из известных дифференциальных уравнений для нелинейного маятника [75, 76]. Экспериментально был выявлен набор фазовых переходов первого рода, связанных с процессами раскручивания спиральных петель в приложенном магнитном поле [72]. Линия  $b - c$  указывает на соответствующий переход между  $q_z$ -спиралью (Рисунок 4.2(c)) и закрученным ФМ состоянием. В остальной части зеленой области фазовой диаграммы отсутствуют такие фазовые переходы. Однако вдоль линии перехода  $B - D - b$  скрученное ФМ-состояние должно приобрести текстуру и трансформироваться в  $q_x$ -спираль, показанную на Рисунке 4.2(a) (контурные графики для  $h_x = 0.2, 0.3$ ). На линии  $B - C$  при фазовом переходе первого рода  $q_z$ -спираль приобретает наклон.

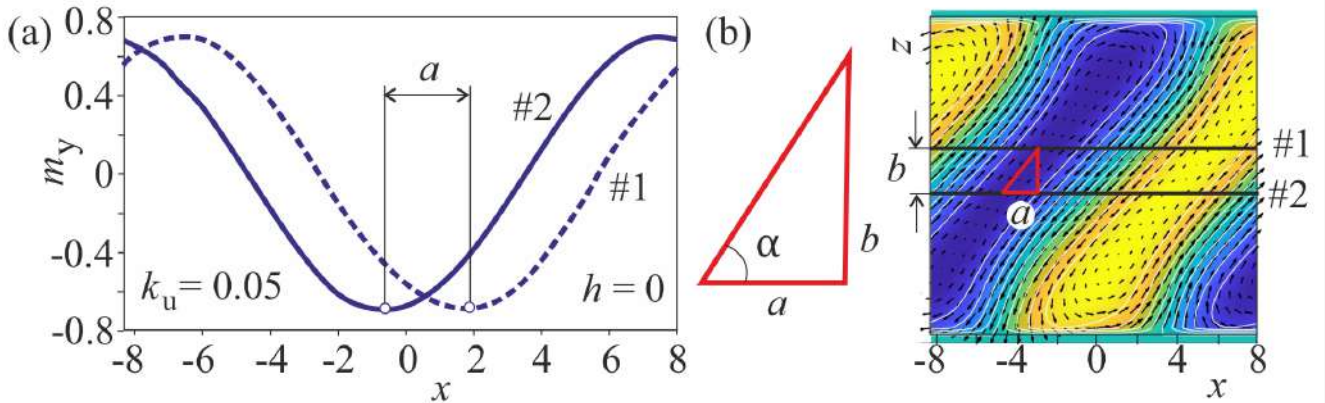


Рис. 4.3. Процедура определения угла наклона для состояния наклонной спирали.

Тонкопленочная геометрия также допускает стабильную наклонную спираль (Рисунок 4.2(d)), наклон которой определяется энергией поверхностных завихрений и вкладом анизотропии "легкая плоскость". В то время как отрицательная энергия, связанная с поверхностными эффектами, остается почти неизменной, наклон приводит к понижению энергии анизотропии. Угол наклона  $\alpha$  при  $h_x = 0$  (Рисунок 4.2(d)) монотонно уменьшается с ростом одноосной анизотропии. Угол  $\alpha$  определяется на рисунке 4.3. Однако до точки А (штриховая линия) наклонная спираль является метастабильным решением по сравнению с "прямой" спиралью (сплошная линия). При  $k_u = 0.069$  наклонная спираль превращается в  $q_z$ -спираль с  $\alpha = 0$ . На Рисунке 4.2(e) показана эволюция угла наклона под действием поля для  $k_u = 0.03$  (синие кривые) и  $k_u = 0.05$  (зеленые кривые), которая демонстрирует резкие скачки между соответствующими устойчивыми состояниями спирали (сплошные линии).

Более того, при  $k_u = 0.05$  эволюция, управляемая полем, может происходить по двум различным путям. Первый вариант показан пунктирной и сплошной зелеными линиями: наклонная спираль перескакивает в  $q_z$ -спираль с  $\alpha = 0$ , которая в конце концов трансформируется в  $q_x$ -спираль с  $\alpha = 90^\circ$ . Все переходы происходят на границах соответствующих областей устойчивости на фазовой диаграмме (Рисунок 4.1(a)). Однако во втором варианте (показан зеленым пунктиром) наклонная спираль может сохраняться как метастабильное состояние, а затем перейти прямо в  $q_x$ -спираль, минуя область с  $q_z$ -спиралью. Для обоих направлений поля область устойчивости этой спирали достаточно велика и располагается в непосредственной близости от других спиральных состояний. Это может быть причиной того, что экспериментально такое состояние еще не идентифицировано: фазовый переход первого рода этой спирали в коническое состояние легко ошибочно интерпретировать как процесс намагничивания, связанный с  $q_z$ -спиралью.

## 4.2. Магнитные состояния скирмионного типа в пленке гелимагнетика в магнитном поле

В случае поля в плоскости пленки скирмионы зажаты стабилизирующими их границами. В такой геометрии поверхностные вихревые состояния слабо влияют на внутреннюю структуру скирмионов.

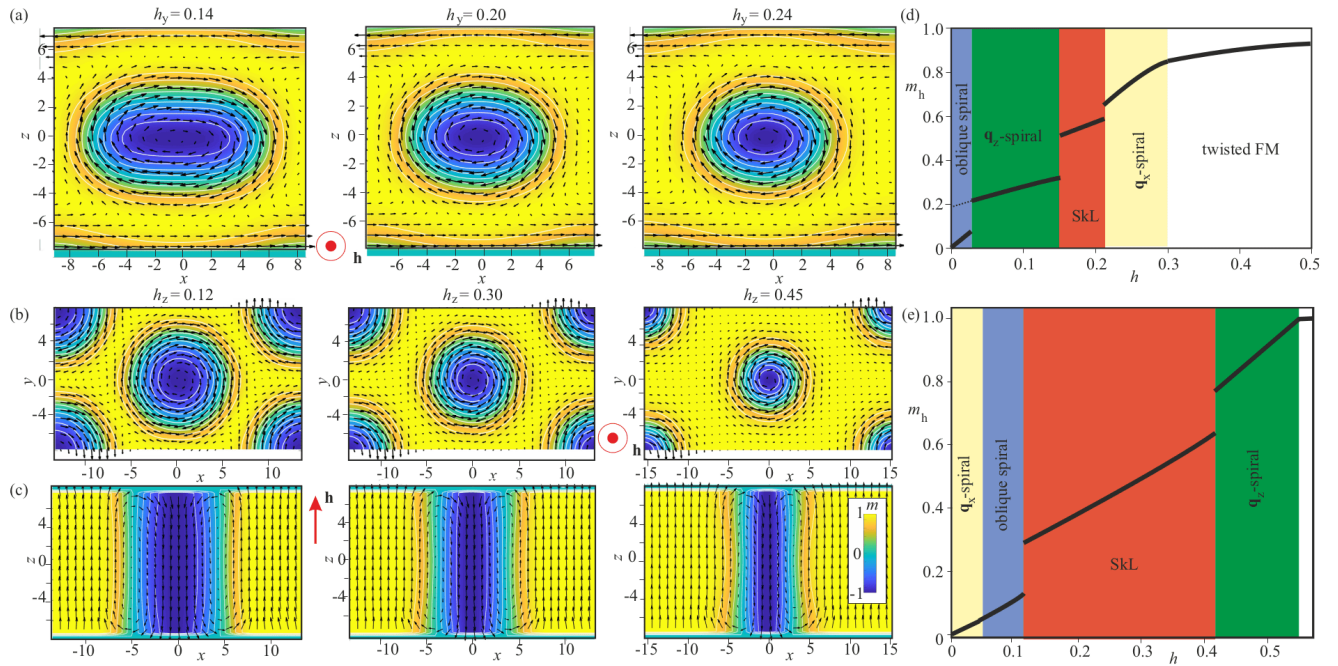


Рис. 4.4. Магнитная структура скирмионов с  $k_u = 0.05$  в плоскости пленки (а) характеризуется эллиптической неустойчивостью в магнитном поле. У скирмионных решеток, состоящих из ортогональных плоскости пленки скирмионных трубок  $k_u = 0.025$  (b), (c) наблюдается увеличение периода при увеличении поля. Их внутренняя структура иллюстрируется в двух взаимно перпендикулярных плоскостях:  $xy$  (b) и  $xz$  (c). Кривые намагниченности в зависимости от приложенного магнитного поля  $\mathbf{m} - h$  для поля в плоскости пленки (d) и перпендикулярно плоскости (e) имеют скачки на линиях фазовых переходов, что соответствует границам фаз на Рисунке 4.1.

Из-за анизотропии “легкая плоскость”  $xy$ , скирмионы испытывают эллиптическую неустойчивость (Рисунок 4.4(a)). В результате они оказываются стабильными только в довольно узком диапазоне параметров (красная область на Рисунке 4.1(a)). Обычно скирмионы, расположенные в несколько рядов занимают поперечное сечение пленки [77]. Таким образом, при изменении магнитного поля в скирмионной фазе в системе будет наблюдаться каскад фазовых переходов.

дов первого рода между состояниями с разным числом скирмионов [77].

В случае магнитного поля, перпендикулярного плоскости характерно появление скирмионов и  $q_x$ -спиралей [78, 79]. Такие решения можно рассматривать как суперпозицию соответствующих решений в объемных гелимагнетиках и специфических изменений закрутки вблизи поверхностей.

При  $k_u = 0$  на теоретических фазовых диаграммах для тонких слоев кубических гелимагнетиков были идентифицированы следующие фазовые переходы первого рода: от  $q_x$ -спирали к скирмионной решетке, от скирмионной решетки к  $q_z$ -спирали и от  $q_z$ -спирали к ферромагнитному (ФМ) состоянию [79, 80]. Мы не будем рассматривать области фазовых диаграмм, относящиеся к различным поверхностным состояниям, таким как хиральные поплавки и/или сложенные спирали [80]. При  $k_u = 0.02$  присутствуют два дополнительных перехода: от наклонной спирали к скирмионной решетке и от  $q_x$ -спирали к наклонной спирали. Однако последний переход практически не идентифицируется на кривых намагничивания (Рисунок 4.4(d)).

Было предсказано, что в отдельно стоящих слоях скирмионные решетки существуют вплоть до очень больших толщин пленки ( $L/4\pi L_D \simeq 8$ ) [79, 81]. Однако экспериментально в клинообразных образцах FeGe скирмионная решетка наблюдалась только при толщине менее 130 нм, что меньше 2 в единицах  $4\pi L_D$ . Уменьшение влияния поверхностных эффектов объяснялось температурной зависимостью параметров материала. В эпитаксиальных системах MnSi(111)/Si(111), напротив, наблюдалось хорошее согласие между численным моделированием с учетом поверхностных эффектов и экспериментальной реализацией [72]. Таким образом, влияние поверхностных воздействий на ортогональные плоскости пленки скирмионные трубки также может способствовать их устойчивости [79, 81].

Интервал перекрытия  $[K_{cr1}, K_{cr2}]$  также указывает на то, что скирмионы могут существовать в присутствии наклонных магнитных полей. Это позволяет

предложить экспериментальную стратегию для наблюдения скирмионов, не лежащих в плоскости пленки: постепенно менять направление магнитного поля, сохраняя его величину. Если для поля в плоскости пленки плоские скирмионные состояния устойчивы, изменение направления поля приведет к переходу в область "внеплоскостных" состояний. Также возможно формирование скирмионных кластеров с взаимно ортогональными скирмионными трубками, аналогичных структурам, недавно описанным в хиральных жидких кристаллах [69, 81].

Термодинамически устойчивые скирмионы могут быть индуцированы и в условиях, когда магнитное поле не лежит в плоскости пленки. Для подавления влияния поверхности, требуются относительно большие значения анизотропии "легкая плоскость" ( $k_u > 0.058$ , т.е. больше критического значения  $K_{cr2}$ ) по сравнению, например, с анизотропией, необходимой для устойчивости эллиптически искаженных плоскостных скирмионов ( $k_u > 0.042$ , т.е. больше критического значения  $K_{cr1}$ ). Таким образом, оба типа скирмионных решеток могут сосуществовать в определенном диапазоне параметров анизотропии  $[K_{cr1}, K_{cr2}] = [0.042, 0.058]$ . Однако для понимания эволюции фазовых диаграмм с изменением толщины слоя требуется дополнительный анализ.

С увеличением толщины пленки влияние поверхностных завихрений уменьшается, что может привести к уменьшению области устойчивости скирмионов для магнитных полей, не лежащих в плоскости образца, и значения  $K_{cr2}$ . В то же время значение  $k_u$  из-за деформации растяжения также может уменьшаться, что делает реализацию "внеплоскостных" скирмионов возможной даже при относительно больших толщинах пленки. Также следует учитывать влияние размагничивающих полей, которыми пренебрегалось в расчетах, представленных выше, особенно для случаев ориентации магнитного поля ортогонально пленке.

В заключение отметим, что проведенные расчеты показали существование новой спиральной магнитной конфигурации при малом значении поля, находя-

щейся между обычными коническим и геликоидальным состояниями, устойчивой в широком диапазоне параметров. Такая наклонная спираль отличается от ранее известных магнитных структур, присутствующих на фазовых диаграммах объемных гелимагнетиков. Ее детальное изучение, контроль и разработка методов управления наклоном спирали может позволить создавать новые топологические магнитные дефекты, такие как изолированные скирмионы, обладающие уникальными статическими и динамическими свойствами.

Полученные результаты подчеркивают важную роль магнитной анизотропии и вихревых магнитных поверхностных состояний в стабилизации скирмионных конфигураций различной ориентации и могут быть использованы для управления структурой и свойствами скирмионов в реальных экспериментах, например, в эпитаксиальных тонких пленках  $\text{MnSi}(111)/\text{Si}(111)$ . Недавние эксперименты с находящимися под воздействием механического напряжения гелимагнетиками  $\text{FeGe}$  [82] с коллективизированными электронными состояниями демонстрируют возможную роль деформации растяжения в создании и управлении магнитными солитонными текстурами, что дает возможность проверки теоретических концепций, представленных в настоящей главе, и в этой системе.

*Выводы к 4 главе.* Исследование тонких пленок кубических гелимагнетиков показало, что стабилизация скирмионных и спиральных структур зависит от анизотропии и ориентации магнитного поля. При ориентации магнитного поля в плоскости пленки скирмионы демонстрируют эллиптическую неустойчивость и существуют только в узком диапазоне параметров. При ориентации поля перпендикулярно поверхности возможно существование различных магнитных структур, включая скирмионные трубки с осью, выходящей из плоскости, при значительно больших толщинах пленки.

## Заключение

В ходе работы были рассмотрены системы магнетиков и жидких кристаллов с энергиями, являющимися функционалами, зависящими от одной, двух и трех координат. Для случая, позволяющего свести функционал энергии к одномерному, были рассмотрены задачи, связанные с изучением влияния граничных условий на состояние системы: найден метод получения модулей Франка жидких кристаллов на основе комплексов лантаноидов по зависимости диэлектрической проницаемости ячейки с жидким кристаллом от приложенного к нему магнитного поля, при условии мягких граничных условий и нетривиальным углом начального сцепления. Найден и объяснен гистерезис в переходе между состояниями в хиральной системе, изучены виды разрыва сцепления. Для двумерного случая изучено поведение тонкого слоя жидкого кристалла / многослойной системы магнетика и найдены основные состояния такой системы в зависимости от параметров приложенного поля и силы сцепления с поверхностью ячейки / анизотропии в объеме и на поверхности магнетика. Изучены как уже ранее известные состояния, такие как конусы и спирали вдоль осей  $x$  и  $z$ , так и найдено и описано новое – наклонная спираль: спираль с осью, отличной от оси  $z$  на некоторый угол  $\alpha$ .



## Благодарности

Автор выражает глубокую благодарность своему научному руководителю проф. Уздину В. М. Автор также выражает благодарность Лобанову И.С. и Аксёновой Е.В. за плодотворное сотрудничество. Автор благодарит своих родителей и жену за поддержку.

## Список литературы

1. The 2020 Skyrmionics Roadmap / C. Back, V. Cros, H. Ebert [и др.] // Journal of Physics D: Applied Physics. 2020. . Т. 53, № 36. С. 363001.
2. Control of Light by Topological Solitons in Soft Chiral Birefringent Media / Andrew J. Hess, Guilhem Poy, Jung-Shen B. Tai [и др.] // Physical Review X. 2020. . Т. 10, № 3. С. 031042.
3. Kos Žiga, Dunkel Jörn. Nematic Bits and Universal Logic Gates // Science Advances. 2022. . Т. 8, № 33. С. eabp8371.
4. Wu Jin-Sheng, Smalyukh Ivan I. Hopfions, Heliknotons, Skyrmions, Torons and Both Abelian and Nonabelian Vortices in Chiral Liquid Crystals // Liquid Crystals Reviews. 2022. . Т. 10, № 1-2. С. 34–68.
5. Editorial: Nucleation and Stability of Exotic Solitons in Condensed Matter / Valery M. Uzdin, Danny Thonig, Børge Göbel [и др.] // Frontiers in Physics. 2023. . Т. 11.
6. Lifetime of Skyrmions in Discrete Systems with Infinitesimal Lattice Constant / M. N. Potkina, I. S. Lobanov, H. Jónsson [и др.] // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. 2022. . Т. 549. С. 168974.
7. Stability of Magnetic Skyrmions: Systematic Calculations of the Effect of Size from Nanometer Scale to Microns / M. N. Potkina, I. S. Lobanov, H. Jónsson [и др.] // Physical Review B. 2023. . Т. 107, № 18. С. 184414.
8. Лобанов И. С., Поткина М. Н., Уздин В. М. УСТОЙЧИВОСТЬ И ВРЕМЕНА ЖИЗНИ МАГНИТНЫХ СОСТОЯНИЙ НАНО- И МИКРОСТРУКТУР (МИНИОБЗОР) // ПИСЬМА В ЖУРНАЛ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ И ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ. 2021. Т. 113, № 11-12(6). С. 833–847.
9. Bessarab Pavel F, Uzdin Valery M, Jónsson Hannes. Harmonic Transition-State Theory of Thermal Spin Transitions // Physical Review B. 2012. Т. 85, № 18. С. 184409.

10. Energy Surface and Minimum Energy Paths for Fréedericksz Transitions in Bistable Cholesteric Liquid Crystals / A. V. Ivanov, P. F. Bessarab, E. V. Aksenova [и др.] // Physical Review E. 2016. Т. 93, № 4. С. 042708.
11. Multiple Minimum-Energy Paths and Scenarios of Unwinding Transitions in Chiral Nematic Liquid Crystals / Semen S Tenishchev, Alexei D Kiselev, Aleksei V Ivanov [и др.] // Physical Review E. 2019. Т. 100, № 6. С. 062704.
12. Electric-Field-Induced Nematic-Cholesteric Transition and Three-Dimensional Director Structures in Homeotropic Cells / Ivan I Smalyukh, BI Senyuk, P Palffy-Muhoray [и др.] // Physical Review E. 2005. Т. 72, № 6. С. 061707.
13. Topological Structures in Chiral Media: Effects of Confined Geometry / IM Tambovtsev, AO Leonov, IS Lobanov [и др.] // Physical Review E. 2022. Т. 105, № 3. С. 034701.
14. Stability of In-Plane and out-of-Plane Chiral Skyrmions in Epitaxial MnSi(111)/Si(111) Thin Films: Surface Twists versus Easy-Plane Anisotropy / Andrey O. Leonov, Ivan M. Tambovtcev, Igor S. Lobanov [и др.] // Phys. Rev. B. 2020. . Т. 102, № 17. С. 174415.
15. Hysteresis and Fréedericksz Thresholds for Twisted States in Chiral Nematic Liquid Crystals: Minimum-energy Path Approach / Semen S Tenishchev, Ivan M Tambovtcev, Alexei D Kiselev [и др.] // Journal of Molecular Liquids. 2021. Т. 325. С. 115242.
16. Magnetic Field-Induced Macroscopic Alignment of Liquid-Crystalline Lanthanide Complexes / Elena Aksenova, Liliya Dobrun, Alexander Kovshik [и др.] // Crystals. 2019. Т. 9, № 10. С. 499.
17. Frank Constants Calculation Method for Erbium-Based Liquid Crystal / I Tambovtcev, E Aksenova, L Dobrun [и др.] // Journal of Physics: Conference Series. Т. 1560. IOP Publishing, 2020. С. 012036.
18. Тамбовцев И.М. Добрун Л.А. Ковшик А.П. Аксенова Е.В. Рюмцев Е.И. МЕТОД РАСЧЁТА МОДУЛЕЙ ФРАНКА ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО

- КОМПЛЕКСА НА ОСНОВЕ ЭРБИЯ // Вестник МГОУ. 2020. Т. 3. С. 6–12.
19. The Physics of Liquid Crystals / P. G. de Gennes, J. Prost, P. G. de Gennes [и др.]. International Series of Monographs on Physics. Second Edition, Second Edition изд. Oxford, New York: Oxford University Press, 1995. .
  20. Lobanov I. S., Potkina M. N., Uzdin V. M. Stability and Lifetimes of Magnetic States of Nano- and Microstructures (Brief Review) // ЖЭТФ Letters. 2021. . Т. 113, № 12. С. 801–813.
  21. Mesomorphic Behaviour and Luminescent Properties of Mesogenic-Diketonate Lanthanide Adducts with 5, 5'-Di (Heptadecyl)-2, 2'-Bipyridine / Andrey A Knyazev, Elena Yu Molostova, Aleksandr S Krupin [и др.] // Liquid Crystals. 2013. Т. 40, № 7. С. 857–863.
  22. Hakemi H, Jagodzinski EF, DuPre DB. The Determination of the Elastic Constants of a Series of N-Alkylcyanobiphenyls by Anisotropy of Turbidity // The Journal of Chemical Physics. 1983. Т. 78, № 3. С. 1513–1518.
  23. Bogi A, Faetti Sandro. Elastic, Dielectric and Optical Constants of 4'-Pentyl-4-Cyanobiphenyl // Liquid crystals. 2001. Т. 28, № 5. С. 729–739.
  24. Bradshaw MJ, Raynes EP. Pre-Transitional Effects in the Electric Permittivity of Cyano Nematics // Molecular Crystals and Liquid Crystals. 1981. Т. 72, № 2-3. С. 73–78.
  25. Determination of the Frank Elastic Constant Ratios in Nematic Liquid Crystals (nCB) by Observing Angular Dependence of Rayleigh Light Scattering Intensity / Masahiko Hara, Jun-Ichi Hirakata, Takehiro Toyooka [и др.] // Molecular Crystals and Liquid Crystals. 1985. Т. 122, № 1. С. 161–168.
  26. Srivastava Amit, Singh Shri. Elastic Constants of Nematic Liquid Crystals of Uniaxial Symmetry // Journal of Physics: Condensed Matter. 2004. Т. 16, № 41. С. 7169.
  27. Deuling Heinz J. Deformation of Nematic Liquid Crystals in an Electric Field // Molecular Crystals and Liquid Crystals. 1972. Т. 19, № 2. С. 123–131.

28. Cheng Julian, Thurston RN, Berreman DW. Boundary-Layer Model of Field Effects in a Bistable Liquid-Crystal Geometry // *Journal of Applied Physics*. 1981. T. 52, № 4. C. 2756–2765.
29. Oswald P, Baudry J, Pirkl S. Static and Dynamic Properties of Cholesteric Fingers in Electric Field // *Physics Reports*. 2000. T. 337, № 1-2. C. 67–96.
30. New Type of Stable Particlelike States in Chiral Magnets / F. N. Rybakov, A. B. Borisov, S. Blügel [и др.] // *Physical Review Letters*. 2015. T. 115. C. 117201.
31. Tai Jung-Shen B, Smalyukh Ivan I [и др.]. Surface Anchoring as a Control Parameter for Stabilizing Torons, Skyrmions, Twisted Walls, Fingers, and Their Hybrids in Chiral Nematics // *Physical Review E*. 2020. T. 101, № 4. C. 042702.
32. Polarized Luminescence from Aligned Samples of Nematogenic Lanthanide Complexes / Yury G Galyametdinov, Andrey A Knyazev, Vagif I Dzhabarov [и др.] // *Advanced materials*. 2008. T. 20, № 2. C. 252–257.
33. Mulet Xavier, Boyd Ben J, Drummond Calum J. Advances in Drug Delivery and Medical Imaging Using Colloidal Lyotropic Liquid Crystalline Dispersions // *Journal of colloid and interface science*. 2013. T. 393. C. 1–20.
34. Dzhabarov V. I. Synthesis, Phase Behavior, Magnetic and Optical Properties of Tris(Beta-Diketonates) Lanthanum Nematic Adducts with the Lewis Bases. Ph.D. thesis: Thesis for the degree of candidate of chemical sciences. 2009.
35. Magnetic Alignment Study of Rare-Earth-Containing Liquid Crystals / Yury G Galyametdinov, Wolfgang Haase, Bart Goderis [и др.] // *The Journal of Physical Chemistry B*. 2007. T. 111, № 50. C. 13881–13885.
36. Anisotropy of the Magnetic Susceptibility of Mesogeneous Lanthanide Complexes / VI Dzhabarov, AA Knyazev, VF Nikolaev [и др.] // *Russian Journal of Physical Chemistry A*. 2011. T. 85, № 8. C. 1450–1453.
37. Meyerhofer D. Field Induced Distortions of a Liquid Crystal with Various Surface Alignments // *Physics Letters A*. 1975. T. 51, № 7. C. 407–408.

38. Effect of an Electric Field on the Orientation of a Liquid Crystal in a Cell with a Nonuniform Director Distribution / EV Aksenova, AA Karetnikov, NA Karetnikov [и др.] // Journal of Experimental and Theoretical Physics. 2016. T. 122, № 5. С. 942–949.
39. Pikin S. A. Structural Transformations in Liquid Crystals. Gordon and Breach Science Publishers, 1991.
40. Stewart Iain W. The Static and Dynamic Continuum Theory of Liquid Crystals: A Mathematical Introduction. Crc Press, 2019.
41. Brown CV, Mottram NJ. Influence of Flexoelectricity above the Nematic Fréedericksz Transition // Physical Review E. 2003. T. 68, № 3. C. 031702.
42. Laser Trapping of Low Refractive Index Colloids in a Nematic Liquid Crystal / M Škarabot, M Ravnik, D Babič [и др.] // Physical Review E. 2006. T. 73, № 2. C. 021705.
43. Structural Changes in the 6CHBT Liquid Crystal Doped with Spherical, Rodlike, and Chainlike Magnetic Particles / Peter Kopčansk, Natalia Tomašovičová, Martina Koneracká [и др.] // Physical Review E. 2008. T. 78, № 1. C. 011702.
44. Light-and Electric-Field-Induced First-Order Orientation Transitions in a Dendrimer-Doped Nematic Liquid Crystal / EA Babayan, IA Budagovsky, SA Shvetsov [и др.] // Physical Review E. 2010. T. 82, № 6. C. 061705.
45. Makarov DV, Zakhlevnykh AN. Tricritical Phenomena at the Fréedericksz Transition in Ferronematic Liquid Crystals // Physical Review E. 2010. T. 81, № 5. C. 051710.
46. Bevilacqua Giuseppe, Napoli Gaetano. Periodic Splay-Twist Fréedericksz Transition for Nematics Confined between Two Concentric Cylinders // Physical Review E. 2010. T. 81, № 3. C. 031707.
47. Shelestiuk Sergii M, Reshetnyak Victor Yu, Sluckin Timothy J. Frederiks Transition in Ferroelectric Liquid-Crystal Nanosuspensions // Physical Review

- E. 2011. T. 83, № 4. C. 041705.
48. Chernyshuk SB, Tovkach OM, Lev BI. Theory of Elastic Interaction between Colloidal Particles in a Nematic Cell in the Presence of an External Electric or Magnetic Field // Physical Review E. 2012. T. 85, № 1. C. 011706.
49. Rapini A, Papoular M. Distorsion d'une Lamelle Nématique Sous Champ Magnétique Conditions d'ancrage Aux Parois // Le Journal de Physique Colloques. 1969. T. 30, № C4. C. C4–54.
50. Thurston RN, Berreman DW. Equilibrium and Stability of Liquid-Crystal Configurations in an Electric Field // Journal of Applied Physics. 1981. T. 52, № 1. C. 508–509.
51. Berreman DW, Heffner WR. New Bistable Liquid-Crystal Twist Cell // Journal of Applied Physics. 1981. T. 52, № 4. C. 3032–3039.
52. Thurston RN. Exact Solutions for Liquid Crystal Configurations and an Improved Boundary Layer Model // Journal of applied physics. 1983. T. 54, № 9. C. 4966–4988.
53. Threshold Behavior and Electro-Optical Properties of Twisted Nematic Layers with Weak Anchoring in the Tilt and Twist Angle / Ralf Hirning, Werner Funk, H-R Trebin [и др.] // Journal of applied physics. 1991. T. 70, № 8. C. 4211–4216.
54. Val'kov A. Yu., Aksenova E. V., Romanov V. P. First-Order and Continuous Fréedericksz Transitions in Cholesteric Liquid Crystals // Phys. Rev. E. 2013. T. 87. C. 022508.
55. Kiselev AD, Sluckin TJ. Twist of Cholesteric Liquid Crystal Cells: Stability of Helical Structures and Anchoring Energy Effects // Physical Review E. 2005. T. 71, № 3. C. 031704.
56. Lobanov IS, Uzdin VM. The Lifetime of Micron Scale Topological Chiral Magnetic States with Atomic Resolution // Computer Physics Communications. 2021. T. 269. C. 108136.
57. Skyrmions and Anomalous Hall Effect in a Dzyaloshinskii-Moriya Spiral

- Magnet / Su Do Yi, Shigeki Onoda, Naoto Nagaosa [и др.] // Physical Review B. 2009. . Т. 80, № 5. С. 054416.
58. Leonov Andrey O, Bogdanov Alex N, Inoue Katsuya. Toggle-Switch-like Crossover between Two Types of Isolated Skyrmions within the Conical Phase of Cubic Helimagnets // Physical Review B. 2018. Т. 98, № 6. С. 060411.
59. Electric-Field Induced Transitions in a Cholesteric Liquid-Crystal Film with Negative Dielectric Anisotropy / EC Gartland, H Huang, OD Lavrentovich [и др.] // Journal of Computational and Theoretical Nanoscience. 2010. Т. 7, № 4. С. 709–725.
60. Helicoids in Chiral Liquid Crystals under External Fields / G De Matteis, L Martina, C Naya [и др.] // Physical Review E. 2019. Т. 100, № 5. С. 052703.
61. Afghah Sajedah, Selinger Jonathan V. Theory of Helicoids and Skyrmions in Confined Cholesteric Liquid Crystals // Physical Review E. 2017. Т. 96, № 1. С. 012708.
62. Leonov Andrey O, Pappas Catherine, Kézsmárki Istvan. Field and Anisotropy Driven Transformations of Spin Spirals in Cubic Skyrmion Hosts // Physical Review Research. 2020. Т. 2, № 4. С. 043386.
63. Bessarab Pavel F, Uzdin Valery M, Jónsson Hannes. Method for Finding Mechanism and Activation Energy of Magnetic Transitions, Applied to Skyrmion and Antivortex Annihilation // Computer Physics Communications. 2015. Т. 196. С. 335–347.
64. Truncated Minimum Energy Path Method for Finding First Order Saddle Points / I. S. Lobanov, M. N. Potkina, H. Jónsson [и др.] // Nanosyst. Phys. Chem. Math. 2017. Т. 8, № 5. С. 586.
65. Duplication, Collapse, and Escape of Magnetic Skyrmions Revealed Using a Systematic Saddle Point Search Method / Gideon P Müller, Pavel F Bessarab, Sergei M Vlasov [и др.] // Physical review letters. 2018. Т. 121, № 19. С. 197202.
66. Lobanov Igor S, Jónsson Hannes, Uzdin Valery M. Mechanism and Activation



- Energy of Magnetic Skyrmion Annihilation Obtained from Minimum Energy Path Calculations // *Physical Review B*. 2016. T. 94, № 17. C. 174418.
67. Energy Surface and Lifetime of Magnetic Skyrmions / Valery M Uzdin, Maria N Potkina, Igor S Lobanov [и др.] // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 2018. T. 459. C. 236–240.
68. Two-Dimensional Skyrmions and Other Solitonic Structures in Confinement-Frustrated Chiral Nematics / Paul J Ackerman, Rahul P Trivedi, Bohdan Senyuk [и др.] // *Physical Review E*. 2014. T. 90, № 1. C. 012505.
69. Vlasov Sergei M, Uzdin Valery M, Leonov Andrey O. Skyrmion Flop Transition and Congregation of Mutually Orthogonal Skyrmions in Cubic Helimagnets // *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2020. T. 32, № 18. C. 185801.
70. Leonov AO, Inoue K. Homogeneous and Heterogeneous Nucleation of Skyrmions in Thin Layers of Cubic Helimagnets // *Physical Review B*. 2018. T. 98, № 5. C. 054404.
71. Smalyukh Ivan I. Knots and Other New Topological Effects in Liquid Crystals and Colloids // *Reports on Progress in Physics*. 2020. T. 83, № 10. C. 106601.
72. Surface Twist Instabilities and Skyrmion States in Chiral Ferromagnets / SA Meynell, MN Wilson, H Fritzsche [и др.] // *Physical Review B*. 2014. T. 90, № 1. C. 014406.
73. Stabilization of Skyrmion Textures by Uniaxial Distortions in Noncentrosymmetric Cubic Helimagnets / AB Butenko, AA Leonov, UK Röblier [и др.] // *Physical Review B*. 2010. T. 82, № 5. C. 052403.
74. Chiral Modulations and Reorientation Effects in MnSi Thin Films / EA Karhu, UK Röblier, AN Bogdanov [и др.] // *Physical Review B*. 2012. T. 85, № 9. C. 094429.
75. Extended Elliptic Skyrmion Gratings in Epitaxial MnSi Thin Films / MN Wilson, EA Karhu, AS Quigley [и др.] // *Physical Review B*. 2012. T. 86, № 14. C. 144420.

76. Dzyaloshinskii IE. Phys. JETP-USSR 19, 960 (1964) // J. Sov. Phys. JETP-USSR. 1965. T. 20. C. 223.
77. Degeneracies and Fluctuations of Néel Skyrmions in Confined Geometries / Rick Keesman, AO Leonov, P van Dieten [и др.] // Physical Review B. 2015. T. 92, № 13. C. 134405.
78. Rybakov FN, Borisov AB, Bogdanov AN. Three-Dimensional Skyrmion States in Thin Films of Cubic Helimagnets // Physical Review B. 2013. T. 87, № 9. C. 094424.
79. Chiral Surface Twists and Skyrmion Stability in Nanolayers of Cubic Helimagnets / AO Leonov, Yoshihiko Togawa, TL Monchesky [и др.] // Physical review letters. 2016. T. 117, № 8. C. 087202.
80. New Spiral State and Skyrmion Lattice in 3D Model of Chiral Magnets / Filipp N Rybakov, Aleksandr B Borisov, Stefan Blügel [и др.] // New Journal of Physics. 2016. T. 18, № 4. C. 045002.
81. Real-Space Observation of Skyrmion Clusters with Mutually Orthogonal Skyrmion Tubes / Hayley RO Sohn, Sergei M Vlasov, Valeriy M Uzdin [и др.] // Physical Review B. 2019. T. 100, № 10. C. 104401.
82. Metastable Solitonic States in the Strained Itinerant Helimagnet FeGe / Victor Ukleev, Yuichi Yamasaki, Oleg Utesov [и др.] // Physical Review B. 2020. T. 102, № 1. C. 014416.

## Приложение

### Энергия и ее вариация для жидкокристаллических систем

Свободная энергия Франка определяется как интеграл плотности энергии  $\omega$  по объему  $V$  рассматриваемого жидкого кристалла (ЖК):

$$E[\mathbf{n}] = \int_V \omega[\mathbf{n}] d\mathbf{x}. \quad (4.1)$$

Вариация  $\delta E/\delta \mathbf{n}$  свободной энергии играет важную роль в динамике ЖК:

$$E[\mathbf{n} + \varepsilon \delta \mathbf{n}] = E[\mathbf{n}] + \varepsilon \int_V \delta E[\mathbf{n}] \cdot \delta \mathbf{n} d\mathbf{x} + o(\varepsilon), \text{ при } \varepsilon \rightarrow 0. \quad (4.2)$$

Далее предполагается неявная зависимость всех величин от пространственных координат  $\mathbf{x}$ . Обозначение  $a_i$  используется для  $i$ -й координаты вектора  $\mathbf{a} = (a_1, a_2, a_3)$ , а частные производные по компонентам  $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$  обозначаются запятой в нижних индексах:

$$a_{i,j} = \frac{\partial a_i}{\partial x_j}. \quad (4.3)$$

Энергию  $E$  можно представить в виде суммы нескольких вкладов вида:

$$F[\mathbf{n}] = \int_V f(\mathbf{n}, \nabla \mathbf{n}) d\mathbf{x}, \quad (4.4)$$

Сначала выведем общее правило для вариации функционала  $F$  заданной формы:

$$\begin{aligned} F[\mathbf{n} + \varepsilon \delta \mathbf{n}] &= \int_V f(\mathbf{n} + \varepsilon \delta \mathbf{n}, \nabla \mathbf{n} + \varepsilon \nabla \delta \mathbf{n}) d\mathbf{x} = \\ &= F[\mathbf{n}] + \varepsilon \int_V \left[ \frac{\partial f}{\partial n_i} \delta n_i + \frac{\partial f}{\partial n_{i,j}} \delta n_{i,j} \right] d\mathbf{x} + o(\varepsilon). \end{aligned} \quad (4.5)$$

Суммирование по повторяющимся индексам предполагается, если не указано иное. Интегрируя по частям и отбрасывая интегралы по границе (должны быть установлены соответствующие граничные условия), получаем:

$$F[\mathbf{n} + \varepsilon \delta \mathbf{n}] - F[\mathbf{n}] = \varepsilon \int_V \left[ \frac{\partial f}{\partial n_i} - \frac{\partial}{\partial x_j} \frac{\partial f}{\partial n_{i,j}} \right] \delta n_i d\mathbf{x} + o(\varepsilon). \quad (4.6)$$

Таким образом, для вариации  $F$  имеем:

$$\delta F_i = \delta \int_V f d\mathbf{x} = \frac{\partial f}{\partial n_i} - \frac{\partial}{\partial x_j} \frac{\partial f}{\partial n_{i,j}}. \quad (4.7)$$

Теперь вычислим вариацию для каждого из слагаемых, входящих в энергию  $E$ , затем восстановим постоянные множители и запишем результат, суммируя все вклады.

Нас интересует вариация  $\mathbf{n}$  при условии  $\mathbf{n}(x)^2 = 1$ , что накладывает ограничения на вариации  $\delta \mathbf{n}$ :

$$1 = (\mathbf{n} + \varepsilon \delta \mathbf{n})^2 = \mathbf{n}^2 + 2\varepsilon \mathbf{n} \cdot \delta \mathbf{n} + \varepsilon^2 \delta \mathbf{n}^2 = 1 + 2\varepsilon \mathbf{n} \cdot \delta \mathbf{n} + O(\varepsilon^2). \quad (4.8)$$

Поскольку вариации малы,  $\varepsilon \rightarrow 0$ , возмущения  $\mathbf{n}$  должны лежать в касательном пространстве к ограничивающему многообразию:

$$\mathbf{n}(x) \cdot \delta \mathbf{n}(x) = 0 \quad \forall x. \quad (4.9)$$

Это означает, что любой компонент вариации  $\delta E$ , параллельный  $\mathbf{n}$ , не вносит вклад и может быть опущен. Более того, динамика жидких кристаллов определяется релаксацией, то есть  $d\mathbf{n}/dt = \dot{\mathbf{n}}$  должно быть антипараллельно  $\delta E[\mathbf{n}]$  в касательном пространстве конфигурационного пространства. Учитывая, что  $\mathbf{n}$  всегда нормирован:  $\mathbf{n}^2(x) = 1$ ,  $\delta E$  в динамике необходимо проецировать на

касательное пространство:

$$\lambda \dot{\mathbf{n}} = \delta E - (\delta E \cdot \mathbf{n})\mathbf{n} \quad \forall x, \quad (4.10)$$

где  $\lambda$  - некоторая постоянная, обеспечивающая правильное масштабирование времени.

Энергия системы определена во всем многомерном пространстве состояний, но имеет физический смысл только на ограничивающем многообразии  $\mathbf{n}(x)^2 = 1$ . Если задача сформулирована корректно, динамика системы должна оставаться неизменной, независимо от того, как энергия определена вне многообразия. Для проверки этого предположения рассмотрим добавку  $\tilde{E} = (1 - \mathbf{n}^2)G(\mathbf{n}, \nabla \mathbf{n})$  к энергии системы, где квадрат вектора  $\mathbf{n}$  вычисляется по координатно как  $\mathbf{n}^2(x) = \mathbf{n}(x) \cdot \mathbf{n}(x)$ , а функция  $G$  является гладкой. Такая добавка  $\tilde{E}$  к энергии включает все гладкие преобразования энергии, которые не изменяют значение энергии на ограничивающем многообразии.

Вариация добавки  $\tilde{E}$  задается как

$$\delta \tilde{E} = -2\mathbf{n}G + (1 - \mathbf{n}^2)\delta G, \quad (4.11)$$

где первый член исчезает при проекции на касательное пространство, а второй равен нулю на ограничивающем многообразии. Следовательно, изменения энергии вне конфигурационного пространства не влияют на динамику системы, что соответствует ожиданиям. Таким образом, формула для энергии может быть упрощена с использованием произвольных выражений, которые сохраняют значения энергии при  $\mathbf{n}(x)^2 = 1$ .

## Вычисление энергии

Некоторые вклады в энергию представляют собой квадраты более простых функций. Выведем вариацию для квадратов  $f(\mathbf{n}, \nabla \mathbf{n}) = g(\mathbf{n}, \nabla \mathbf{n})^2$ , где  $g$  может быть векторной функцией:

$$f = g_p g_p, \quad \frac{\partial f}{\partial n_i} = 2g_p \frac{\partial g_p}{\partial n_i}, \quad \frac{\partial f}{\partial n_{i,j}} = 2g_p \frac{\partial g_p}{\partial n_{i,j}},$$

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \frac{\partial f}{\partial n_{i,j}} = 2 \frac{dg_p}{dx_j} \frac{\partial g_p}{\partial n_{i,j}} + 2g_p \frac{\partial}{\partial x_j} \frac{\partial g_p}{\partial n_{i,j}}. \quad (4.12)$$

$$\frac{dg_p}{dx_j} = \sum_i \frac{\partial g_p}{\partial n_i} n_{i,j} + \sum_{i,k} \frac{\partial g_p}{\partial n_{i,k}} n_{i,k,j}. \quad (4.13)$$

Таким образом, вариация квадрата функции может быть выражена через вариацию самой функции:

$$\delta_i \int_V g^2 d\mathbf{x} = 2g_p \delta_i \int_V g_p d\mathbf{x} - 2 \sum_j \frac{dg_p}{dx_j} \frac{\partial g_p}{\partial n_{i,j}}. \quad (4.14)$$

В этом выражении мы использовали правило произведения для дифференцирования и суммирование по повторяющимся индексам.

(I) Рассмотрим  $f = \|\nabla \mathbf{n}\|^2 = \sum_{ij} n_{i,j}^2$  и получим следующие производные:

$$\frac{\partial f}{\partial n_i} = 0, \quad \frac{\partial f}{\partial n_{k,j}} = 2n_{k,j}, \quad \sum_j \frac{\partial}{\partial x_j} \frac{\partial f}{\partial n_{k,j}} = 2 \sum_j n_{k,j,j}. \quad (4.15)$$

Следовательно, вариация функционала энергии выражается как

$$\delta_k \int_V \|\nabla \mathbf{n}\|^2 d\mathbf{x} = -2 \sum_j n_{k,j,j}, \quad (4.16)$$

или, используя векторные обозначения, можно записать

$$\delta \int_V \|\nabla \mathbf{n}\|^2 d\mathbf{x} = -2\Delta \mathbf{n}, \quad (4.17)$$

где через  $\Delta$  обозначает лапласиан, действующий на каждую компоненту вектора  $\mathbf{n}$ .

(II) Рассмотрим  $g = \nabla \times \mathbf{n}$ . Координаты векторного произведения и ротора могут быть выражены с использованием символов Леви-Чивиты  $\varepsilon_{ijk}$ :

$$(\mathbf{a} \times \mathbf{b})_k = \varepsilon_{ijk} a_i b_j = \varepsilon_{kij} a_i b_j, \quad (\nabla \times \mathbf{a})_k = \varepsilon_{klm} \frac{\partial}{\partial x_l} a_m = \varepsilon_{klm} a_{m,l}. \quad (4.18)$$

Используем свойство свертки символов Леви-Чивиты:

$$\varepsilon_{ijk} \varepsilon_{imn} = \delta_{jm} \delta_{kn} - \delta_{jn} \delta_{km}. \quad (4.19)$$

Первые производные ротора являются постоянными, следовательно, его вариация равна нулю:

$$\frac{\partial g_p}{\partial n_k} = 0, \quad \frac{\partial g_p}{\partial n_{i,j}} = \varepsilon_{pji}, \quad \frac{d}{dx_j} \frac{\partial g_p}{\partial n_{i,j}} = 0, \quad \Rightarrow \quad \delta \int_V (\nabla \times \mathbf{n}) d\mathbf{x} = 0. \quad (4.20)$$

Однако вариация квадрата ротора не исчезает:

$$\frac{dg_p}{dx_j} = \frac{\partial g_p}{\partial n_{i,k}} n_{i,kj} = \varepsilon_{pkl} n_{l,kj}, \quad (4.21)$$

$$\begin{aligned} \delta_i \int_V (\nabla \times \mathbf{n})^2 d\mathbf{x} &= -2 \frac{dg_p}{dx_j} \frac{\partial g_p}{\partial n_{i,j}} = -2 \varepsilon_{pkl} n_{l,kj} \varepsilon_{pji} \\ &= -2(\delta_{kj} \delta_{li} - \delta_{ki} \delta_{lj}) n_{l,kj} = -2(n_{i,kk} - n_{j,ij}). \end{aligned} \quad (4.22)$$

Таким образом, векторная форма вариации принимает вид:

$$\delta \int_V (\nabla \times \mathbf{n})^2 d\mathbf{x} = -2(\Delta \mathbf{n} - \nabla(\nabla \cdot \mathbf{n})). \quad (4.23)$$

Это выражение показывает, как изменяется энергия системы в зависимости от вариаций поля  $\mathbf{n}$ .

(III) Пусть  $g = \mathbf{n} \cdot (\nabla \times \mathbf{n})$  или в координатной форме:

$$g = n_p \varepsilon_{plm} n_{m,l}. \quad (4.24)$$

На этот раз мы имеем дело с квадратичной формой  $g$  от  $\mathbf{n}$ , следовательно, частные производные не исчезают:

$$\frac{\partial g}{\partial n_i} = \varepsilon_{ilm} n_{m,l}, \quad \frac{\partial g}{\partial n_{i,j}} = n_p \varepsilon_{pji}, \quad \frac{d}{dx_j} \frac{\partial g}{\partial n_{i,j}} = n_{p,j} \varepsilon_{pji}. \quad (4.25)$$

Таким образом, вариация  $g$  сама по себе представляет собой следующее линейное преобразование  $\mathbf{n}$ :

$$\begin{aligned} \delta_i \int_V (\mathbf{n} \cdot (\nabla \times \mathbf{n})) d\mathbf{x} &= \frac{\partial g}{\partial n_i} - \frac{\partial}{\partial x_j} \frac{\partial g}{\partial n_{i,j}} = \varepsilon_{ilm} n_{m,l} - n_{p,j} \varepsilon_{pji} \\ &= \varepsilon_{ilm} n_{m,l} - n_{m,l} \varepsilon_{mli} = 2\varepsilon_{ilm} n_{m,l}, \end{aligned} \quad (4.26)$$

или в векторных обозначениях:

$$\delta \int_V (\mathbf{n} \cdot (\nabla \times \mathbf{n})) d\mathbf{x} = 2(\nabla \times \mathbf{n}). \quad (4.27)$$

Теперь можно вывести вариацию квадрата  $g$ . Используя выражение

$$\delta_i \int_V (\mathbf{n} \cdot (\nabla \times \mathbf{n}))^2 d\mathbf{x} = 2g \delta_i \int_V g d\mathbf{x} - 2 \frac{dg}{dx_j} \frac{\partial g}{\partial n_{i,j}}, \quad (4.28)$$



и применяя выведенное выше соотношение, второй член может быть переписан как:

$$\frac{dg}{dx_j} \frac{\partial g}{\partial n_{i,j}} = g_{,j} n_p \varepsilon_{pji} = (\mathbf{n} \times \nabla g)_i. \quad (4.29)$$

Таким образом, получаем:

$$\delta \int_V (\mathbf{n} \cdot (\nabla \times \mathbf{n}))^2 d\mathbf{x} = 4(\mathbf{n} \cdot (\nabla \times \mathbf{n}))(\nabla \times \mathbf{n}) - 2\mathbf{n} \times \nabla(\mathbf{n} \cdot (\nabla \times \mathbf{n})). \quad (4.30)$$

(IV) Пусть  $f = qg$ , где  $g = \mathbf{n} \cdot (\nabla \times \mathbf{n})$  и  $q$  — функция, зависящая только от  $\mathbf{x}$ . Тогда частные производные  $f$  выражаются следующим образом:

$$\frac{\partial f}{\partial n_i} = q \frac{\partial g}{\partial n_i}, \quad \frac{\partial f}{\partial n_{i,j}} = q \frac{\partial g}{\partial n_{i,j}}, \quad \frac{d}{dx_j} \frac{\partial f}{\partial n_{i,j}} = \frac{\partial q}{\partial x_j} \frac{\partial g}{\partial n_{i,j}} + q \frac{d}{dx_j} \frac{\partial g}{\partial n_{i,j}}. \quad (4.31)$$

Следовательно, вариация  $f$  выражается как:

$$\delta_i \int_V f d\mathbf{x} = \frac{\partial f}{\partial n_i} - \sum_j \frac{\partial}{\partial x_j} \frac{\partial f}{\partial n_{i,j}} = q \delta_i \int_V g d\mathbf{x} - \frac{\partial q}{\partial x_j} \frac{\partial g}{\partial n_{i,j}}. \quad (4.32)$$

Используя

$$\frac{\partial g}{\partial n_{i,j}} = n_p \varepsilon_{pji} \Rightarrow \frac{\partial q}{\partial x_j} \frac{\partial g}{\partial n_{i,j}} = \frac{\partial q}{\partial x_j} n_p \varepsilon_{pji} = (\mathbf{n} \times \nabla q)_i, \quad (4.33)$$

имеем:

$$\delta \int_V q(\mathbf{n} \cdot (\nabla \times \mathbf{n})) d\mathbf{x} = q \delta \int_V (\mathbf{n} \cdot (\nabla \times \mathbf{n})) d\mathbf{x} - \mathbf{n} \times \nabla q = 2q(\nabla \times \mathbf{n}) - \mathbf{n} \times \nabla q. \quad (4.34)$$

Наконец, для полной вариации энергии получаем:

$$\begin{aligned}
\delta E = & -K_1 \Delta \mathbf{n} - (K_3 - K_1) [\Delta \mathbf{n} - \nabla(\nabla \cdot \mathbf{n})] + \\
& + (K_2 - K_3) [2(\mathbf{n} \cdot (\nabla \times \mathbf{n}))(\nabla \times \mathbf{n}) - \mathbf{n} \times \nabla(\mathbf{n} \cdot (\nabla \times \mathbf{n}))] + \\
& + K_2 [2q(\nabla \times \mathbf{n}) - \mathbf{n} \times \nabla q] = -K_1 \nabla(\nabla \cdot \mathbf{n}) - K_3 [\Delta \mathbf{n} - \nabla(\nabla \cdot \mathbf{n})] + \\
& + (K_2 - K_3) [2(\mathbf{n} \cdot (\nabla \times \mathbf{n}))(\nabla \times \mathbf{n}) - \mathbf{n} \times \nabla(\mathbf{n} \cdot (\nabla \times \mathbf{n}))] + \\
& + K_2 [2q(\nabla \times \mathbf{n}) - \mathbf{n} \times \nabla q]. \quad (4.35)
\end{aligned}$$

Для численных расчетов используем дискретную квадратную решетку с энергией, включающей суммирование по всем узлам:

$$\begin{aligned}
E = \frac{1}{2} \sum_{i,j,k} C^{\{ijk\}} \left[ K_1 (\nabla \mathbf{n}^{\{ijk\}})^2 + (K_3 - K_1) (\nabla \times \mathbf{n}^{\{ijk\}})^2 + \right. \\
+ (K_2 - K_3) (\mathbf{n}^{\{ijk\}} \cdot (\nabla \times \mathbf{n}^{\{ijk\}}))^2 + \\
\left. + 2K_2 q_0 (\mathbf{n}^{\{ijk\}} \cdot (\nabla \times \mathbf{n}^{\{ijk\}})) - \Delta \chi (\mathbf{n}^{\{ijk\}} \cdot \mathbf{H}^{\{ijk\}})^2 \right]. \quad (4.36)
\end{aligned}$$

Индексы  $\{ijk\}$  соответствуют позициям ячеек вдоль осей  $x, y, z$  соответственно. Для введения дифференциальных операций используем локальную индексацию внутри каждого куба  $\{ijk\}$  (см. Рисунок 4.5).

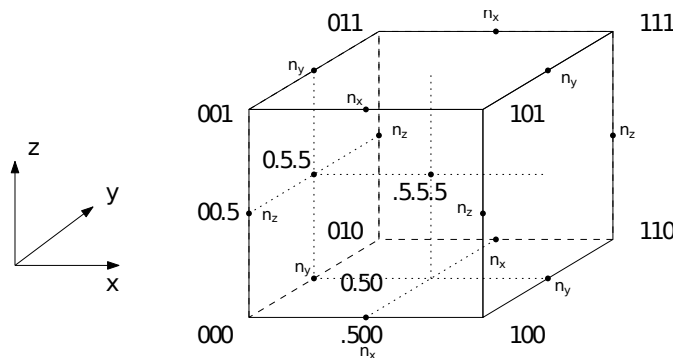


Рис. 4.5. Локальное индексирование

Для упрощения численных расчетов вводится следующая индексация:

$$n_x^{i+\frac{1}{2},j,k} = n_x^{\{ijk\}}, \quad n_y^{i,j+\frac{1}{2},k} = n_y^{\{ijk\}}, \quad n_z^{i,j,k+\frac{1}{2}} = n_z^{\{ijk\}}, \quad (4.37)$$

$$n_x^{\frac{1}{2},\frac{1}{2},0} = [n_x^{0,0,0} + n_x^{0,1,0} + n_x^{0,0,1} + n_x^{0,1,1} + n_x^{1,0,0} + n_x^{1,1,0} + n_x^{1,0,1} + n_x^{1,1,1}]/8, \quad (4.38)$$

и обозначения:

$$\partial_y^{\frac{1}{2},\frac{1}{2},0} n_z = n_z^{0,1,\frac{1}{2}} - n_z^{0,0,\frac{1}{2}}, \quad (4.39)$$

при этом остальные компоненты определяются аналогичными преобразованиями.

Объем системы задается как:

$$V = [0, l_x N_x] \times [0, l_y N_y] \times [0, l_z N_z]. \quad (4.40)$$

Рассмотрим вопрос о погрешности, связанной с размещением сеток  $\mathbf{n}$  в различных точках для каждой из компонент энергии.

Если заменить интеграл по переменной  $x$  соответствующей конечной суммой с коэффициентами, соответствующими методу трапеций, получаем:

$$\int_0^{l_x N_x} f(x) dx = \sum_{i=0}^{N_x} C_t^i f(il_x) l_x + O(l_x^2),$$

$$l_x \rightarrow 0, \quad l_x N_x = L_x = \text{const},$$

$$C_t^0 = C_t^{N_x} = \frac{1}{2}, \quad C_t^j = 1 \text{ для } j \neq 0, N_x. \quad (4.41)$$

Аналогично для метода прямоугольников:

$$\int_0^{l_x N_x} f(x) dx = \sum_{i=0}^{N_x-1} C_r^i f\left(\left(i + \frac{1}{2}\right) l_x\right) l_x + O(l_x), \quad C_r^i = 1. \quad (4.42)$$

Повторяем процедуру для интегрирования по трехмерному пространству:

$$\begin{aligned} \iiint_V f(x, y, z) dx dy dz &= \sum_{i=0}^{N_x} \sum_{j=0}^{N_y} \sum_{k=0}^{N_z} f(il_x, jl_y, kl_z) C_t^i C_t^j C_t^k l_x l_y l_z + \\ &+ O(l_x^2) + O(l_y^2) + O(l_z^2). \end{aligned} \quad (4.43)$$

Таким образом, погрешность этой замены не превышает квадрата разбиения вдоль каждой из осей. Проверим, что операции дифференцирования не ухудшают точность аппроксимации:

$$(\partial_x n_x)^{i,j,k} = \frac{n_x^{i+0.5,j,k} - n_x^{i-0.5,j,k}}{l_x} + O(l_x^2), \quad (4.44)$$

$$\begin{aligned} \iiint_V (\partial_x n_x)^2 dx dy dz &= \\ &= \sum_{i=0}^{N_x} \sum_{j=0}^{N_y} \sum_{k=0}^{N_z} l_x^{-2} (n_x^{i+0.5,j,k} - n_x^{i-0.5,j,k})^2 C_t^i C_t^j C_t^k l_x l_y l_z + \\ &+ O(l_x^2) + O(l_y^2) + O(l_z^2). \end{aligned} \quad (4.45)$$

Можно показать, что такой порядок погрешности сохраняется для всех подобных замен. Эта процедура была применена ко всем компонентам энергии.

Вклад  $(\nabla \mathbf{n})^2$  может быть представлен в виде суммы:

$$\begin{aligned}
\int_V (\nabla \mathbf{n})^2 dV &= \sum_{i=0}^{N_x} \sum_{j=0}^{N_y} \sum_{k=0}^{N_z} C_t^i C_t^j C_t^k [(\partial_x n_x)^2 + (\partial_y n_y)^2 + (\partial_z n_z)^2]^{ijk} l_x l_y l_z + \\
&+ \sum_{i=0}^{N_x-1} \sum_{j=0}^{N_y-1} \sum_{k=0}^{N_z} C_r^i C_r^j C_t^k [(\partial_x n_y)^2 + (\partial_y n_x)^2]^{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k} l_x l_y l_z + \\
&+ \sum_{i=0}^{N_x-1} \sum_{j=0}^{N_y} \sum_{k=0}^{N_z-1} C_r^i C_t^j C_r^k [(\partial_x n_z)^2 + (\partial_z n_x)^2]^{i+\frac{1}{2}, j, k+\frac{1}{2}} l_x l_y l_z + \\
&+ \sum_{i=0}^{N_x} \sum_{j=0}^{N_y-1} \sum_{k=0}^{N_z-1} C_t^i C_r^j C_r^k [(\partial_y n_z)^2 + (\partial_z n_y)^2]^{i, j+\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}} l_x l_y l_z. \quad (4.46)
\end{aligned}$$

Операция  $\mathbf{n} \cdot (\nabla \times \mathbf{n})$  для каждой ячейки решетки выражается как:

$$\begin{aligned}
\mathbf{n} \cdot (\nabla \times \mathbf{n}) &= n_x (\partial_y n_z - \partial_z n_y) + \\
&+ n_y (\partial_z n_x - \partial_x n_z) + n_z (\partial_x n_y - \partial_y n_x). \quad (4.47)
\end{aligned}$$

Таким образом, вклад в энергию, содержащий  $\mathbf{n} \cdot (\nabla \times \mathbf{n})$  представляется в виде суммы:

$$\int_V \mathbf{n} \cdot (\nabla \times \mathbf{n}) dV = \sum_{i=0}^{N_x} \sum_{j=0}^{N_y} \sum_{k=0}^{N_z} [\mathbf{n} \cdot (\nabla \times \mathbf{n})]^{ijk} C_t^i C_t^j C_t^k l_x l_y l_z. \quad (4.48)$$

Вклад в энергию, пропорциональный  $(\mathbf{n} \cdot \mathbf{H})^2$  может быть выражен следующим образом:

$$\int_V (\mathbf{n} \cdot \mathbf{H})^2 dV = \sum_{i=0}^{N_x} \sum_{j=0}^{N_y} \sum_{k=0}^{N_z} [(\mathbf{n} \cdot \mathbf{H})^2]^{ijk} C_t^i C_t^j C_t^k l_x l_y l_z. \quad (4.49)$$

## Вычисление вариации энергии

В решеточной модели градиент по  $\mathbf{n}$  аналогичен вариации энергии в непрерывной модели. Для записи соответствующего выражения вычислим градиент каждой компоненты энергии в решеточной модели в направлении  $\mathbf{n}$ .

(VI.1) Рассмотрим градиент компоненты  $(\nabla \mathbf{n})^2$  в узле решетки  $\{ijk\}$ :

$$\begin{aligned} \partial_{\mathbf{n}\{ijk\}} & \left[ \sum_{j=0}^{N_y} \sum_{k=0}^{N_z} C_t^i C_t^j C_t^k \left[ (n_x^{\{ijk\}} - n_x^{\{i-1jk\}})^2 + (n_y^{\{ijk\}} - n_y^{\{ij-1k\}})^2 + \right. \right. \\ & \left. \left. + (n_z^{\{ijk\}} - n_z^{\{ijk-1\}})^2 \right] \right] = \\ & = 2 \begin{bmatrix} C_t^i C_t^j C_t^k (n_x^{\{ijk\}} - n_x^{\{i-1jk\}}) - C_r^{i+1} C_r^j C_t^k (n_x^{\{i+1jk\}} - n_x^{\{ijk\}}) \\ C_t^i C_t^j C_t^k (n_y^{\{ijk\}} - n_y^{\{ij-1k\}}) - C_r^i C_r^{j+1} C_t^k (n_y^{\{ij+1k\}} - n_y^{\{ijk\}}) \\ C_t^i C_t^j C_t^k (n_z^{\{ijk\}} - n_z^{\{ijk-1\}}) - C_r^i C_r^j C_t^{k+1} (n_z^{\{ijk+1\}} - n_z^{\{ijk\}}) \end{bmatrix}, \quad (4.50) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \partial_{\mathbf{n}\{ijk\}} & \left[ \sum_{i=0}^{N_x-1} \sum_{j=0}^{N_y-1} \sum_{k=0}^{N_z} C_r^i C_r^j C_t^k \left[ (n_y^{\{i+1jk\}} - n_y^{\{ijk\}})^2 + (n_x^{\{ij+1k\}} - n_x^{\{ijk\}})^2 \right] \right] = \\ & = 2 \begin{bmatrix} C_r^i C_r^{j-1} C_t^k (n_x^{\{ijk\}} - n_x^{\{ij-1k\}}) - C_r^i C_r^j C_t^k (n_x^{\{ij+1k\}} - n_x^{\{ijk\}}) \\ C_r^{i-1} C_r^j C_t^k (n_y^{\{ijk\}} - n_y^{\{i-1jk\}}) - C_r^i C_r^j C_t^k (n_y^{\{i+1jk\}} - n_y^{\{ijk\}}) \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (4.51) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \partial_{\mathbf{n}\{ijk\}} & \left[ \sum_{i=0}^{N_x-1} \sum_{j=0}^{N_y} \sum_{k=0}^{N_z-1} C_r^i C_t^j C_r^k \left[ (n_z^{\{i+1jk\}} - n_z^{\{ijk\}})^2 + (n_x^{\{ijk+1\}} - n_x^{\{ijk\}})^2 \right] \right] = \\ & = 2 \begin{bmatrix} C_r^i C_t^j C_r^{k-1} (n_x^{\{ijk\}} - n_x^{\{ijk-1\}}) - C_r^i C_t^j C_r^k (n_x^{\{ijk+1\}} - n_x^{\{ijk\}}) \\ 0 \\ C_r^{i-1} C_t^j C_r^k (n_z^{\{ijk\}} - n_z^{\{i-1jk\}}) - C_r^i C_t^j C_r^k (n_z^{\{i+1jk\}} - n_z^{\{ijk\}}) \end{bmatrix}, \quad (4.52) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\partial_{\mathbf{n}\{ijk\}} & \left[ \sum_{i=0}^{N_x} \sum_{j=0}^{N_y-1} \sum_{k=0}^{N_z-1} C_t^i C_r^j C_r^k [(n_z^{\{ij+1k\}} - n_z^{\{ijk\}})^2 + (n_y^{\{ijk+1\}} n_y^{\{ijk\}})^2] \right] = \\
& = 2 \begin{bmatrix} 0 \\ C_t^i C_r^j C_r^{k-1} (n_y^{\{ijk\}} - n_y^{\{ijk-1\}}) - C_t^i C_r^j C_r^k (n_y^{\{ijk+1\}} - n_y^{\{ijk\}}) \\ C_t^i C_r^{j-1} C_r^k (n_z^{\{ijk\}} - n_z^{\{ij-1k\}}) - C_t^i C_r^j C_r^k (n_z^{\{ij+1k\}} - n_z^{\{ijk\}}) \end{bmatrix}. \quad (4.53)
\end{aligned}$$

(VI.2) Рассмотрим градиент каждой компоненты  $(\nabla \times \mathbf{n})^2$  в узле решетки  $\{ijk\}$ :

$$\begin{aligned}
\partial_{\mathbf{n}\{ijk\}} & \left[ \sum_{i=0}^{N_x} \sum_{j=0}^{N_y-1} \sum_{k=0}^{N_z-1} C_t^i C_r^j C_r^k [(n_z^{\{ij+1k\}} - n_z^{\{ijk\}}) - (n_y^{\{ijk+1\}} - n_y^{\{ijk\}})]^2 \right] = \\
& = 2 \begin{bmatrix} 0 \\ D_{1,ijk} - D_{1,ijk-1} \\ -D_{1,ijk} + D_{1,ij-1k} \end{bmatrix}, \quad (4.54)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\partial_{\mathbf{n}\{ijk\}} & \left[ \sum_{i=0}^{N_x-1} \sum_{j=0}^{N_y} \sum_{k=0}^{N_z-1} C_r^i C_t^j C_r^k [(n_x^{\{ijk+1\}} - n_x^{\{ijk\}}) - (n_z^{\{i+1jk\}} - n_z^{\{ijk\}})]^2 \right] = \\
& = 2 \begin{bmatrix} -D_{2,ijk} + D_{2,ijk-1} \\ 0 \\ D_{2,ijk} + D_{2,i-1jk} \end{bmatrix}, \quad (4.55)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\partial_{\mathbf{n}\{ijk\}} \left[ \sum_{i=0}^{N_x-1} \sum_{j=0}^{N_y-1} \sum_{k=0}^{N_z} C_r^i C_r^j C_t^k \left[ (n_y^{\{i+1jk\}} - n_y^{\{ijk\}}) - (n_x^{\{ij+1k\}} - n_x^{\{ijk\}}) \right]^2 \right] = \\
= 2 \begin{bmatrix} D_{3,ijk} - D_{3,ij-1k} \\ -D_{3,ijk} + D_{3,i-1jk} \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (4.56)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\partial_{\mathbf{n}\{ijk\}} \left[ \sum_{i=0}^{N_x-1} \sum_{j=0}^{N_y} \sum_{k=0}^{N_z-1} C_r^i C_t^j C_r^k \left[ (n_x^{\{ijk+1\}} - n_x^{\{ijk\}}) - (n_z^{\{i+1jk\}} - n_z^{\{ijk\}}) \right]^2 \right] = \\
= 2 \begin{bmatrix} -D_{4,ijk} + D_{4,ijk-1} \\ 0 \\ D_{4,ijk} + D_{4,i-1jk} \end{bmatrix}, \quad (4.57)
\end{aligned}$$



где:

$$\begin{aligned}
D_{1,ijk} &= C_t^i C_r^j C_r^k \left[ (n_z^{\{ij+1k\}} - n_z^{\{ijk\}}) - (n_y^{\{ijk+1\}} - n_y^{\{ijk\}}) \right], \\
D_{1,ijk-1} &= C_t^i C_r^j C_r^{k-1} \left[ (n_z^{\{ij+1k-1\}} - n_z^{\{ijk-1\}}) - (n_y^{\{ijk\}} - n_y^{\{ijk-1\}}) \right], \\
D_{1,ij-1k} &= C_t^i C_r^{j-1} C_r^k \left[ (n_z^{\{ijk\}} - n_z^{\{ij-1k\}}) - (n_y^{\{ij-1k+1\}} - n_y^{\{ij-1k\}}) \right], \\
D_{2,ijk} &= C_r^i C_t^j C_r^k \left[ (n_x^{\{ijk+1\}} - n_x^{\{ijk\}}) - (n_z^{\{i+1jk\}} - n_z^{\{ijk\}}) \right], \\
D_{2,ijk-1} &= C_r^i C_t^j C_r^{k-1} \left[ (n_x^{\{ijk\}} - n_x^{\{ijk-1\}}) - (n_z^{\{i+1jk-1\}} - n_z^{\{ijk-1\}}) \right], \\
D_{2,i-1jk} &= C_r^{i-1} C_t^j C_r^k \left[ (n_x^{\{i-1jk+1\}} - n_x^{\{i-1jk\}}) - (n_z^{\{ijk\}} - n_z^{\{i-1jk\}}) \right], \\
D_{3,ijk} &= C_r^i C_r^j C_t^k \left[ (n_y^{\{i+1jk\}} - n_y^{\{ijk\}}) - (n_x^{\{ij+1k\}} - n_x^{\{ijk\}}) \right], \\
D_{3,ij-1k} &= C_r^i C_r^{j-1} C_t^k \left[ (n_y^{\{i+1j-1k\}} - n_y^{\{ij-1k\}}) - (n_x^{\{ijk\}} - n_x^{\{ij-1k\}}) \right], \\
D_{3,i-1jk} &= C_r^{i-1} C_r^j C_t^k \left[ (n_y^{\{ijk\}} - n_y^{\{i-1jk\}}) - (n_x^{\{i-1j+1k\}} - n_x^{\{i-1jk\}}) \right], \\
D_{4,ijk} &= D_{2,ijk}, \quad D_{4,ijk-1} = D_{2,ijk-1}, \quad D_{4,i-1jk} = D_{2,i-1jk}.
\end{aligned}$$

(VI.3) Рассмотрим каждую из компонент градиента каждой компоненты  $\mathbf{n} \cdot (\nabla \times \mathbf{n})$  в узле решетки  $\{ijk\}$ :

$$\begin{aligned}
& \partial_{n_x^{\{ijk\}}} \left[ \frac{1}{8} \sum_{i=0}^{N_x} \sum_{j=0}^{N_y-1} \sum_{k=0}^{N_z-1} C_t^i C_r^j C_r^k \left[ n_x^{\{ijk\}} + n_x^{\{ij+1k\}} + n_x^{\{ijk+1\}} + n_x^{\{ij+1k+1\}} + \right. \right. \\
& \quad \left. \left. + n_x^{\{i-1jk\}} + n_x^{\{i-1j+1k\}} + n_x^{\{i-1jk+1\}} + n_x^{\{i-1j+1k+1\}} \right] \right. \\
& \quad \left. \left[ (n_z^{\{ij+1k\}} - n_z^{\{ijk\}}) - (n_y^{\{ijk+1\}} - n_y^{\{ijk\}}) \right] \right] = \\
& = \frac{1}{8} \left[ C_t^i C_r^j C_r^k \left[ (n_z^{\{ij+1k\}} - n_z^{\{ijk\}}) - (n_y^{\{ijk+1\}} - n_y^{\{ijk\}}) \right] + \right. \\
& \quad + C_t^i C_r^{j-1} C_r^k \left[ (n_z^{\{ijk\}} - n_z^{\{ij-1k\}}) - (n_y^{\{ij-1k+1\}} - n_y^{\{ij-1k\}}) \right] + \\
& \quad + C_t^i C_r^j C_r^{k-1} \left[ (n_z^{\{ij+1k-1\}} - n_z^{\{ijk-1\}}) - (n_y^{\{ijk\}} - n_y^{\{ijk-1\}}) \right] + \\
& \quad + C_t^i C_r^{j-1} C_r^{k-1} \left[ (n_z^{\{ijk-1\}} - n_z^{\{ij-1k-1\}}) - (n_y^{\{ij-1k\}} - n_y^{\{ij-1k-1\}}) \right] + \\
& \quad + C_t^{i+1} C_r^j C_r^k \left[ (n_z^{\{i+1j+1k\}} - n_z^{\{i+1jk\}}) - (n_y^{\{i+1jk+1\}} - n_y^{\{i+1jk\}}) \right] + \\
& \quad + C_t^{i+1} C_r^{j-1} C_r^k \left[ (n_z^{\{i+1jk\}} - n_z^{\{i+1j-1k\}}) - (n_y^{\{i+1j-1k+1\}} - n_y^{\{i+1j-1k\}}) \right] + \\
& \quad + C_t^{i+1} C_r^j C_r^{k-1} \left[ (n_z^{\{i+1j+1k-1\}} - n_z^{\{i+1jk-1\}}) - (n_y^{\{i+1jk\}} - n_y^{\{i+1jk-1\}}) \right] + \\
& \quad \left. + C_t^{i+1} C_r^{j-1} C_r^{k-1} \left[ (n_z^{\{i+1jk-1\}} - n_z^{\{i+1j-1k-1\}}) - (n_y^{\{i+1j-1k\}} - n_y^{\{i+1j-1k-1\}}) \right] \right], \tag{4.58}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \partial_{n_y^{\{ijk\}}} \left[ \frac{1}{8} \sum_{i=0}^{N_x} \sum_{j=0}^{N_y-1} \sum_{k=0}^{N_z-1} C_t^i C_r^j C_r^k \left[ n_x^{\{ijk\}} + n_x^{\{ij+1k\}} + n_x^{\{ijk+1\}} + n_x^{\{ij+1k+1\}} + \right. \right. \\
& \quad \left. \left. + n_x^{\{i-1jk\}} + n_x^{\{i-1j+1k\}} + n_x^{\{i-1jk+1\}} + n_x^{\{i-1j+1k+1\}} \right] \right. \\
& \quad \left. \left[ (n_z^{\{ij+1k\}} - n_z^{\{ijk\}}) - (n_y^{\{ijk+1\}} - n_y^{\{ijk\}}) \right] \right] = \\
& = -\frac{1}{8} \left[ C_t^i C_r^j C_r^{k-1} \left[ n_x^{\{ijk-1\}} + n_x^{\{ij+1k-1\}} + n_x^{\{ijk\}} + n_x^{\{ij+1k\}} + \right. \right. \\
& \quad \left. \left. n_x^{\{i-1jk-1\}} + n_x^{\{i-1j+1k-1\}} + n_x^{\{i-1jk\}} + n_x^{\{i-1j+1k\}} \right] - \right. \\
& \quad \left. - C_t^i C_r^j C_r^k \left[ n_x^{\{ijk\}} + n_x^{\{ij+1k\}} + n_x^{\{ijk+1\}} + n_x^{\{ij+1k+1\}} + \right. \right. \\
& \quad \left. \left. n_x^{\{i-1jk\}} + n_x^{\{i-1j+1k\}} + n_x^{\{i-1jk+1\}} + n_x^{\{i-1j+1k+1\}} \right] \right], \quad (4.59)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \partial_{n_z^{\{ijk\}}} \left[ \frac{1}{8} \sum_{i=0}^{N_x} \sum_{j=0}^{N_y-1} \sum_{k=0}^{N_z-1} C_t^i C_r^j C_r^k \left[ n_x^{\{ijk\}} + n_x^{\{ij+1k\}} + n_x^{\{ijk+1\}} + n_x^{\{ij+1k+1\}} + \right. \right. \\
& \quad \left. \left. + n_x^{\{i-1jk\}} + n_x^{\{i-1j+1k\}} + n_x^{\{i-1jk+1\}} + n_x^{\{i-1j+1k+1\}} \right] \right. \\
& \quad \left. \left[ (n_z^{\{ij+1k\}} - n_z^{\{ijk\}}) - (n_y^{\{ijk+1\}} - n_y^{\{ijk\}}) \right] \right] = \\
& = \frac{1}{8} \left[ C_t^i C_r^{j-1} C_r^k \left[ n_x^{\{ij-1k\}} + n_x^{\{ijk\}} + n_x^{\{ij-1k+1\}} + n_x^{\{ijk+1\}} + \right. \right. \\
& \quad \left. \left. n_x^{\{i-1j-1k\}} + n_x^{\{i-1j-1k\}} + n_x^{\{i-1j-1k+1\}} + n_x^{\{i-1jk+1\}} \right] - \right. \\
& \quad \left. - C_t^i C_r^j C_r^k \left[ n_x^{\{ijk\}} + n_x^{\{ij+1k\}} + n_x^{\{ijk+1\}} + n_x^{\{ij+1k+1\}} + \right. \right. \\
& \quad \left. \left. n_x^{\{i-1jk\}} + n_x^{\{i-1j+1k\}} + n_x^{\{i-1jk+1\}} + n_x^{\{i-1j+1k+1\}} \right] \right], \quad (4.60)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \partial_{n_x^{\{ijk\}}} \left[ \frac{1}{8} \sum_{i=0}^{N_x-1} \sum_{j=0}^{N_y} \sum_{k=0}^{N_z-1} C_r^i C_t^j C_r^k \left[ n_y^{\{ijk\}} + n_y^{\{i+1jk\}} + n_y^{\{ijk+1\}} + n_y^{\{i+1jk+1\}} + \right. \right. \\
& \quad \left. \left. + n_y^{\{ij-1k\}} + n_y^{\{i+1j-1k\}} + n_y^{\{ij-1k+1\}} + n_y^{\{i+1j-1k+1\}} \right] \right. \\
& \quad \left. \left[ (n_x^{\{ijk+1\}} - n_x^{\{ijk\}}) - (n_z^{\{i+1jk\}} - n_z^{\{ijk\}}) \right] \right] = \\
& = \frac{1}{8} \left[ C_r^i C_t^j C_r^{k-1} \left[ n_y^{\{ijk-1\}} + n_y^{\{i+1jk-1\}} + n_y^{\{ijk\}} + n_y^{\{i+1jk\}} + \right. \right. \\
& \quad \left. \left. n_y^{\{ij-1k-1\}} + n_y^{\{i+1j-1k-1\}} + n_y^{\{ij-1k\}} + n_y^{\{i+1j-1k\}} \right] - \right. \\
& \quad \left. - C_r^i C_t^j C_r^k \left[ n_y^{\{ijk\}} + n_y^{\{i+1jk\}} + n_y^{\{ijk+1\}} + n_y^{\{i+1jk+1\}} + \right. \right. \\
& \quad \left. \left. n_y^{\{ij-1k\}} + n_y^{\{i+1j-1k\}} + n_y^{\{ij-1k+1\}} + n_y^{\{i+1j-1k+1\}} \right] \right], \quad (4.61)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \partial_{n_y^{\{ijk\}}} \left[ \frac{1}{8} \sum_{i=0}^{N_x-1} \sum_{j=0}^{N_y} \sum_{k=0}^{N_z-1} C_r^i C_t^j C_r^k \left[ n_y^{\{ijk\}} + n_y^{\{i+1jk\}} + n_y^{\{ijk+1\}} + n_y^{\{i+1jk+1\}} + \right. \right. \\
& \quad \left. \left. + n_y^{\{ij-1k\}} + n_y^{\{i+1j-1k\}} + n_y^{\{ij-1k+1\}} + n_y^{\{i+1j-1k+1\}} \right] \right. \\
& \quad \left. \left[ (n_x^{\{ijk+1\}} - n_x^{\{ijk\}}) - (n_z^{\{i+1jk\}} - n_z^{\{ijk\}}) \right] \right] = \\
& = \frac{1}{8} \left[ C_r^i C_t^j C_r^k \left[ (n_x^{\{ijk+1\}} - n_x^{\{ijk\}}) - (n_z^{\{i+1jk\}} - n_z^{\{ijk\}}) \right] + \right. \\
& \quad + C_r^{i-1} C_t^j C_r^k \left[ (n_x^{\{i-1jk+1\}} - n_x^{\{i-1jk\}}) - (n_z^{\{ijk\}} - n_z^{\{i-1jk\}}) \right] + \\
& \quad + C_r^i C_t^j C_r^{k-1} \left[ (n_x^{\{ijk\}} - n_x^{\{ijk-1\}}) - (n_z^{\{i+1jk-1\}} - n_z^{\{ijk-1\}}) \right] + \\
& \quad + C_r^{i-1} C_t^j C_r^{k-1} \left[ (n_x^{\{i-1jk\}} - n_x^{\{i-1jk-1\}}) - (n_z^{\{ijk-1\}} - n_z^{\{i-1jk-1\}}) \right] + \\
& \quad + C_r^i C_t^{j+1} C_r^k \left[ (n_x^{\{ij+1k+1\}} - n_x^{\{ij+1k\}}) - (n_z^{\{i+1j+1k\}} - n_z^{\{ij+1k\}}) \right] + \\
& \quad + C_r^{i-1} C_t^{j+1} C_r^k \left[ (n_x^{\{i-1j+1k+1\}} - n_x^{\{i-1j+1k\}}) - (n_z^{\{ij+1k\}} - n_z^{\{i-1j+1k\}}) \right] + \\
& \quad + C_r^i C_t^{j+1} C_r^{k-1} \left[ (n_x^{\{ij+1k-1\}} - n_x^{\{ij+1k-1\}}) - (n_z^{\{i+1j+1k-1\}} - n_z^{\{ij+1k-1\}}) \right] + \\
& \quad \left. + C_r^{i-1} C_t^{j+1} C_r^{k-1} \left[ (n_x^{\{i-1j+1k\}} - n_x^{\{i-1j+1k-1\}}) - (n_z^{\{ij+1k-1\}} - n_z^{\{i-1j+1k-1\}}) \right] \right], \tag{4.62}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \partial_{n_z^{\{ijk\}}} \left[ \frac{1}{8} \sum_{i=0}^{N_x-1} \sum_{j=0}^{N_y-1} \sum_{k=0}^{N_z-1} C_r^i C_t^j C_r^k \left[ n_y^{\{ijk\}} + n_y^{\{i+1jk\}} + n_y^{\{ijk+1\}} + n_y^{\{i+1jk+1\}} + \right. \right. \\
& \quad \left. \left. + n_y^{\{ij-1k\}} + n_y^{\{i+1j-1k\}} + n_y^{\{ij-1k+1\}} + n_y^{\{i+1j-1k+1\}} \right] \right. \\
& \quad \left. \left[ (n_x^{\{ijk+1\}} - n_x^{\{ijk\}}) - (n_z^{\{i+1jk\}} - n_z^{\{ijk\}}) \right] \right] = \\
& = -\frac{1}{8} \left[ C_r^{i-1} C_t^j C_r^k \left[ n_y^{\{i-1jk\}} + n_y^{\{ijk\}} + n_y^{\{i-1jk+1\}} + n_y^{\{ijk+1\}} + \right. \right. \\
& \quad \left. \left. + n_y^{\{i-1j-1k\}} + n_y^{\{ij-1k\}} + n_y^{\{i-1j-1k+1\}} + n_y^{\{ij-1k+1\}} \right] - \right. \\
& \quad \left. - C_r^i C_t^j C_r^k \left[ n_y^{\{ijk\}} + n_y^{\{i+1jk\}} + n_y^{\{ijk+1\}} + n_y^{\{i+1jk+1\}} + \right. \right. \\
& \quad \left. \left. n_y^{\{ij-1k\}} + n_y^{\{i+1j-1k\}} + n_y^{\{ij-1k+1\}} + n_y^{\{i+1j-1k+1\}} \right] \right], \quad (4.63)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \partial_{n_x^{\{ijk\}}} \left[ \frac{1}{8} \sum_{i=0}^{N_x-1} \sum_{j=0}^{N_y-1} \sum_{k=0}^{N_z-1} C_r^i C_r^j C_t^k \left[ n_z^{\{ijk\}} + n_z^{\{ij+1k\}} + n_z^{\{i+1jk\}} + n_z^{\{i+1j+1k\}} + \right. \right. \\
& \quad \left. \left. + n_z^{\{ijk-1\}} + n_z^{\{ij+1k-1\}} + n_z^{\{i+1jk-1\}} + n_z^{\{i+1j+1k-1\}} \right] \right. \\
& \quad \left. \left[ (n_y^{\{i+1jk\}} - n_y^{\{ijk\}}) - (n_x^{\{ij+1k\}} - n_x^{\{ijk\}}) \right] \right] = \\
& = -\frac{1}{8} \left[ C_r^i C_r^{j-1} C_t^k \left[ n_z^{\{ij-1k\}} + n_z^{\{ijk\}} + n_z^{\{i+1j-1k\}} + n_z^{\{i+1jk\}} + \right. \right. \\
& \quad \left. \left. n_z^{\{ij-1k-1\}} + n_z^{\{ijk-1\}} + n_z^{\{i+1j-1k-1\}} + n_z^{\{i+1jk-1\}} \right] - \right. \\
& \quad \left. - C_r^i C_r^j C_t^k \left[ n_z^{\{ijk\}} + n_z^{\{ij+1k\}} + n_z^{\{i+1jk\}} + n_z^{\{i+1j+1k\}} + \right. \right. \\
& \quad \left. \left. + n_z^{\{ijk-1\}} + n_z^{\{ij+1k-1\}} + n_z^{\{i+1jk-1\}} + n_z^{\{i+1j+1k-1\}} \right] \right], \quad (4.64)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \partial_{n_y^{\{ijk\}}} \left[ \frac{1}{8} \sum_{i=0}^{N_x-1} \sum_{j=0}^{N_y-1} \sum_{k=0}^{N_z} C_r^i C_r^j C_t^k \left[ n_z^{\{ijk\}} + n_z^{\{ij+1k\}} + n_z^{\{i+1jk\}} + n_z^{\{i+1j+1k\}} + \right. \right. \\
& \quad \left. \left. + n_z^{\{ijk-1\}} + n_z^{\{ij+1k-1\}} + n_z^{\{i+1jk-1\}} + n_z^{\{i+1j+1k-1\}} \right] \right. \\
& \quad \left. \left[ (n_y^{\{i+1jk\}} - n_y^{\{ijk\}}) - (n_x^{\{ij+1k\}} - n_x^{\{ijk\}}) \right] \right] = \\
& = \frac{1}{8} \left[ C_r^{i-1} C_r^j C_t^k \left[ n_z^{\{i-1jk\}} + n_z^{\{i-1j+1k\}} + n_z^{\{ijk\}} + n_z^{\{ij+1k\}} + \right. \right. \\
& \quad \left. \left. n_z^{\{i-1jk-1\}} + n_z^{\{i-1j+1k-1\}} + n_z^{\{ijk-1\}} + n_z^{\{ij+1k-1\}} \right] - \right. \\
& \quad \left. - C_r^i C_r^j C_t^k \left[ n_z^{\{ijk\}} + n_z^{\{ij+1k\}} + n_z^{\{i+1jk\}} + n_z^{\{i+1j+1k\}} + \right. \right. \\
& \quad \quad \left. \left. n_z^{\{ijk-1\}} + n_z^{\{ij+1k-1\}} + n_z^{\{i+1jk-1\}} + n_z^{\{i+1j+1k-1\}} \right] \right], \quad (4.65)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\partial_{n_z^{\{ijk\}}} & \left[ \frac{1}{8} \sum_{i=0}^{N_x-1} \sum_{j=0}^{N_y-1} \sum_{k=0}^{N_z} C_r^i C_r^j C_t^k \left[ n_z^{\{ijk\}} + n_z^{\{ij+1k\}} + n_z^{\{i+1jk\}} + n_z^{\{i+1j+1k\}} + \right. \right. \\
& \quad \left. \left. + n_z^{\{ijk-1\}} + n_z^{\{ij+1k-1\}} + n_z^{\{i+1jk-1\}} + n_z^{\{i+1j+1k-1\}} \right] \right. \\
& \quad \left. \left[ (n_y^{\{i+1jk\}} - n_y^{\{ijk\}}) - (n_x^{\{ij+1k\}} - n_x^{\{ijk\}}) \right] \right] = \\
& = \frac{1}{8} \left[ C_r^i C_r^j C_t^k \left[ (n_y^{\{i+1jk\}} - n_y^{\{ijk\}}) - (n_x^{\{ij+1k\}} - n_x^{\{ijk\}}) \right] + \right. \\
& \quad + C_r^i C_r^{j-1} C_t^k \left[ (n_y^{\{i+1j-1k\}} - n_y^{\{ij-1k\}}) - (n_x^{\{ijk\}} - n_x^{\{ij-1k\}}) \right] + \\
& \quad + C_r^{i-1} C_r^j C_t^k \left[ (n_y^{\{ijk\}} - n_y^{\{i-1jk\}}) - (n_x^{\{i-1j+1k\}} - n_x^{\{i-1jk\}}) \right] + \\
& \quad + C_r^{i-1} C_r^{j-1} C_t^k \left[ (n_y^{\{ij-1k\}} - n_y^{\{i-1j-1k\}}) - (n_x^{\{i-1jk\}} - n_x^{\{i-1j-1k\}}) \right] + \\
& \quad + C_r^i C_r^j C_t^{k+1} \left[ (n_y^{\{i+1jk+1\}} - n_y^{\{ijk+1\}}) - (n_x^{\{ij+1k+1\}} - n_x^{\{ijk+1\}}) \right] + \\
& \quad + C_r^i C_r^{j-1} C_t^{k+1} \left[ (n_y^{\{i+1j-1k+1\}} - n_y^{\{ij-1k+1\}}) - (n_x^{\{ijk+1\}} - n_x^{\{ij-1k+1\}}) \right] + \\
& \quad + C_r^{i-1} C_r^j C_t^{k+1} \left[ (n_y^{\{ijk+1\}} - n_y^{\{i-1jk+1\}}) - (n_x^{\{i-1j+1k+1\}} - n_x^{\{i-1jk+1\}}) \right] + \\
& \quad \left. + C_r^{i-1} C_r^{j-1} C_t^{k+1} \left[ (n_y^{\{ij-1k+1\}} - n_y^{\{i-1j-1k+1\}}) - (n_x^{\{i-1jk+1\}} - n_x^{\{i-1j-1k+1\}}) \right] \right]. \tag{4.66}
\end{aligned}$$

(VI.4) Рассмотрим градиент  $(\mathbf{n} \cdot \mathbf{H})^2$  в узле решетки  $\{ijk\}$ :

$$\begin{aligned}
\partial_{\mathbf{n}^{\{ijk\}}} & \left[ \sum_{k=0}^{N_z} C_r^i C_r^j C_t^k \left( n_x^{\{ijk\}} H_x^{\{ijk\}} \right)^2 + \sum_{i=0}^{N_x} \sum_{j=0}^{N_y-1} \sum_{k=0}^{N_z} C_t^i C_r^j C_t^k \left( n_y^{\{ijk\}} H_y^{\{ijk\}} \right)^2 + \right. \\
& \quad \left. \sum_{i=0}^{N_x} \sum_{j=0}^{N_y} \sum_{k=0}^{N_z-1} C_t^i C_t^j C_r^k \left( n_z^{\{ijk\}} H_z^{\{ijk\}} \right)^2 \right] = 2 \begin{bmatrix} C_r^i C_t^j C_t^k \left( n_x^{\{ijk\}} H_x^{\{ijk\}} \right) \\ C_t^i C_r^j C_t^k \left( n_y^{\{ijk\}} H_y^{\{ijk\}} \right) \\ C_t^i C_t^j C_r^k \left( n_z^{\{ijk\}} H_z^{\{ijk\}} \right) \end{bmatrix}. \tag{4.67}
\end{aligned}$$

После подстановки выражений (V.1-V.4) в уравнение ((4.36)), можно найти выражение для энергии жидкого кристалла в приближении решетки с смещени-



ем компонент директора. Используя то же уравнение и выражения (VI.1-VI.4), можно получить уравнение для вариации энергии.