ПЕРЕХОД ФРЕДЕРИКСА В НЕМАТИЧЕСКОМ ЖИДКОМ КРИСТАЛЛЕ, ДОПИРОВАННОМ НАНОТРУБКАМИ

А. Н. Захлевных, С. Ю. Гродзинская

Пермский государственный национальный исследовательский университет, 614990, Пермь, Букирева, 15

Углеродные нанотрубки обладают исключительными свойствами. Простейшая нанотрубка состоит из слоя ячеистой цепочки атомов углерода, который закатан в трубчатую форму. Одноосная углеродная нанотрубка имеет диаметр от 0.4 нм до 2.0 нм и длину от 20 нм до 100 нм. Одной из особенностей углеродных нанотрубок является высокое значение диамагнитной восприимчивости. Углеродные нанотрубки обладают уникальными электрическими и механическими свойствами и могут рассматриваться в качестве «строительных блоков» для нанотехнологий. Примеры возможных приложений включают в себя химические датчики, полевые транзисторы на углеродных нанотрубках, активные матрицы, органические светоизлучающие устройства отображения информации и др. Для их применения используются внешние поля для изменения поведения композитной системы. Однако при разработке указанных выше устройств оказывается необходимым обеспечить контролируемое образование ансамблей таких нанообъектов в упорядоченные структуры, т.е. нужно ориентировать главные оси углеродных нанотрубок. По этой причине весьма привлекательным выглядит использование нематических жидких кристаллов (ЖК) в качестве матрицы для диспергирования углеродных нанотрубок. Ниже точки перехода из изотропной фазы в нематическую жидкий кристалл спонтанно упорядочивается, что влечет за собой упорядочение нанотрубок.

В настоящей работе рассматривается ЖК-суспензия углеродных нанотрубок, в которых находятся ферромагннтные частицы, либо поверхность нанотрубок покрыта солями железа – так называемые функционализированные нанотрубки [1–3]. Такие нанотрубки обладают собственным магнитным моментом и аномально сильным диамагнетизмом. Будем полагать, что суспензия получена путем охлаждения из изотропной фазы в подмагничивающем поле, тогда магнитные моменты частиц в нематической фазе будут упорядочены в одном направлении. Полученную таким образом суспензию называют ферронематиком (ФН).

Рассмотрим слой ферронематика толщиной *L*, заключенный между двумя параллельными пластинами. Сцепление директора *n* на границах слоя будем считать жестким и планарным, т.е. директор на границах направлен вдоль оси легкого ориентирования. Магнитное поле H = (0, 0, H) направим перпендикулярно границам слоя. Найдем равновесные состояния суспензии в магнитном поле. Они отвечают минимуму свободной энергии.

Объемная плотность свободной энергии ФН содержит сумму вкладов [4]: плотность свободной энергии ориентационно - упругих деформаций поля

директора, вклады, описывающие влияние магнитного поля на диамагнитные углеродные нанотрубки, диамагнитную ЖК-матрицу и магнитные моменты феррочастиц, вклад энергии сцепления, т.е. ориентационную связь директора *n* и намагниченности *m*.

Под действием поля, направленного по оси *z*, начальная ориентация ферронематика начинает искажаться в плоскости (*x*, *z*) и компоненты директора *n* и вектора намагниченности *m* можно искать в виде $n = (\cos\varphi(z), 0, \sin\varphi(z)), m = (-\sin\psi(z), 0, \cos\psi(z)), где \varphi(z) и \psi(z) - углы$ отклонения директора и намагниченности от оси легкого ориентирования<math>e = (1,0,0) на стенках слоя. Минимизация свободной энергии по углам $\varphi(z)$ и $\psi(z)$ позволяет получить систему уравнений ориентационного состояния.

Ниже представлены результаты исследования поведения суспензии вдали от границ слоя. В этом случае система уравнений ориентационного состояния ФН допускает решения, отвечающие фазам ФН с различным типом сцепления частиц с ЖК. Одно из них – $\varphi = \psi = 0$, отвечает исходной однородной фазе 1 с гомеотропным сцеплением частиц и директора, частицы в ней ориентированы по полю, директор ортогонален полю n = (1, 0, 0);m = (0, 1, 0), т.е. $n \perp m \parallel H$]. Эта фаза устойчива в полях $h < h_{\perp}$, где поле перехода h_{\perp} из фазы 1 в фазу 2 в зависимости от безразмерной энергии сцепления магнитных частиц с ЖК – матрицей и параметра γ определяется уравнением $h_{\perp}^3 \gamma + h_{\perp}^2 + 2h_{\perp}\sigma - 2h_{\perp}\sigma\gamma - 2\sigma = 0.$

Здесь $h = HL\sqrt{\chi_a/K_{11}}$ – безразмерная напряженность магнитного поля, $\gamma = f\chi_a^p / \chi_a$ – безразмерный параметр, определяющий отношение восприимчивостей углеродных нанотрубок и диамагнитной ЖК-матрицы; безразмерный параметр $\sigma = W f L^2 / (d K_{11})$ определяет энергию сцепления магнитных частиц с ЖК-матрицей.

Фаза 2 – угловая фаза, в которой $\varphi = \varphi_0(h, \sigma, \gamma), \ \psi = \psi_0(h, \sigma, \gamma)$, т.е. угол между директором и намагниченностью зависит от поля и материальных параметров суспензии σ и γ и под действием магнитного поля меняется от $\pi/2$ до нуля, т.е. в ней намагниченность и директор стремятся стать параллельными друг другу и внешнему полю. Эта фаза устойчива при $h_{\perp} \leq h \leq h_{\parallel}$, где уравнение для поля перехода h_{\parallel} из фазы 2 в фазу 3 в зависимости от безразмерной энергии сцепления магнитных частиц с ЖК – матрицей и параметра γ имеет вид $h_{\parallel}^3 \gamma + h_{\parallel}^2 - 2h_{\parallel}\sigma - 2h_{\parallel}\sigma\gamma - 2\sigma = 0$.

Фаза 3 – фаза магнитного насыщения, в которой угол $\varphi = \pi/2$, $\psi = 0$ [n = (0, 1, 0), m = (0, 1, 0), т.е. n || m || H] характеризуется планарным (n || m) сцеплениям магнитных частиц с директором, в ней директор и магнитные частицы ориентированы по полю.

На рис. 1 показана фазовая диаграмма и зависимости углов ориентации директора и частиц от поля h при $\gamma = 1.5$. В полях, меньших h_{\perp} , ФН находится в начальном состоянии, отвечающем фазе 1, затем выше h_{\perp} угол φ растет с ростом поля (фаза 2) и при $h = h_{\parallel}$ достигает значения $\varphi = \pi/2$, т.е. директор становится параллельным полю (фаза 3). Угол ψ увеличивается с ростом поля т. е. магнитные частицы отклоняются от направления поля ввиду гомеотропного сцепления с матицей, достигает максимума, а затем стремится к нулю, т. е. частицы снова становятся параллельными полю.



Рис. 1. Фазовая диаграмма ферронематика (слева) и зависимости углов ориентации директора и частиц (справа) от поля h при $\gamma = 1.5$

Список литературы

- Mitróová Z., Koneracká M., Timko M., Jadzyn J., Vávra I., Éber N., Fodor-Csorba K., Tóth-Katona T., Vajda A., Kopcansky P. Structural transitions in nematic liquid crystals doped with magnetite functionalized single walled carbon nanotubes // Physics Procedia. 2010. Vol. 9. P. 41–44.
- Mitróvá Z., Tomasovicová N., Timko M., Koneracká M., Kovác J., Jadzyn J., Vávra I., Éber N., Toth-Katona T., Beaugnon E., Chaud X., and Kopcansky P. The sensitivity of liquid crystal doped with functionalized carbon nanotubes to external magnetic fields // New J. Chem. 2011. Vol. 35. P. 1260–1264.
- Kopčanský P., Tomašovičová N., Timko M., Koneracká M., Závišová V., Tomčo L., Jadzyn J. The sensitivity of ferronematics to external magnetic fields // J. of Physics: Conference Series. 2010. Vol. 200. 072055.
- Zakhlevnykh A. N. Threshold magnetic field and Freedericksz transition in a ferronematic // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. 2004. Vol. 269. P. 238–244.