Научная статья
УДК 538.9
DOI 10.18101/2306-2363-2025-4-20-25

Упругая энергия Франка сплюснутой нематической капли с буджумами в биполярных координатах

© Чимытов Тимур Андреевич
кандидат физико-математических наук, доцент,
Бурятский государственный университет имени Доржи Банзарова
Россия, 670000, г. Улан-Удэ, ул. Смолина, 24а
tchimytov@gmail.com

Аннотация. В работе представлено аналитическое вычисление упругой энергии Франка — Озеена для сплюснутой капли нематического жидкого кристалла с двумя точечными дефектами (буджумами) на полюсах. Для решения задачи предложена и использована модифицированная система координат, структурно близкая к биполярной, но адаптированная к геометрии капли с двумя выделенными полюсами. Показано, что в предположении тангенциального распределения директора жидкого кристалла энергия деформации в капле сводится к интегралу от квадрата дивергенции, в то время как вклад от ротора директора равен нулю. Путем вычисления интеграла получено точное выражение для упругой энергии, пропорциональное характерному размеру капли и параметру, определяющему ее сплюснутость. Результат демонстрирует эффективность использования криволинейных координат для расчета энергетики топологических дефектов в ограниченных жидкокристаллических системах.
Ключевые слова: жидкий кристалл, энергия Франка, биполярные координаты, буджум, топологический дефект, нематическая капля.

Благодарности
Исследование проведено при поддержке ФГБОУ ВО «Бурятский государственный университет имени Доржи Банзарова», грант № 25-09-01.

Для цитирования
Чимытов Т. А. Упругая энергия Франка сплюснутой нематической капли с буджумами в биполярных координатах // Вестник Бурятского государственного университета. Химия. Физика. 2025. Вып. 4. С. 20–25.

Введение

Исследование упругих свойств и топологических дефектов в ограниченных объемах жидких кристаллов вызывает фундаментальный интерес как для теоретической физики конденсированного состояния, так и для прикладных задач [1; 2]. В классической теории упругости нематиков, развитой Франком и Озееном, описывается плотность свободной энергии через градиенты поля директора **n(r)** и включает вклады от дивергенции, ротора и их комбинаций [3–5]. В предыдущих исследованиях [6] был проведен детальный анализ свойств симметрии, приводящих к уравнению Франка — Озеена, и сравнение микроскопического и макроскопического подходов к его выводу.

Особый класс задач возникает при рассмотрении нематических жидкокристаллических капель, где граничные условия и геометрия объема приводят к образованию стабильных топологических дефектов. В данной работе рассматривается модель сплюснутой капли (линзы) с двумя точечными дефектами, так называемыми буджумами, с зарядами +1, расположенными на полюсах капли. Такая конфигурация моделирует, например, каплю в полимерно-дисперсных жидкокристаллических пленках.

Целью настоящей работы является точное аналитическое вычисление упругой энергии Франка для указанной конфигурации. Для этого используется специальная система координат — биполярная, которая адаптирована к геометрии с двумя выделенными точками (полюсами). Подобный подход позволяет получить замкнутое выражение для энергии и проанализировать ее зависимость от параметров системы.

Постановка задачи и система координат

Рассматривается объем нематического жидкого кристалла в форме сплюснутой капли с буджумами на полюсах. Распределение директора внутри капли, вообще говоря, определяется граничными условиями на ее поверхности. Например, в системе «нематическая капля в полимерной матрице» в зависимости от соотношения упругих констант Франка может реализоваться как тангенциальное, так и нормальное закрепление молекул на границе раздела. В данной работе рассматриваются тангенциальные граничные условия, характерные, в частности, для капель нематика в матрице поливинилацетата [7]. При таких условиях возможны две основные конфигурации директора: биполярная и тороидальная. Выбор между ними зависит от соотношения упругих констант Франка. Наиболее распространенной и энергетически выгодной во многих случаях является биполярная структура, которой мы и ограничимся в дальнейшем. В этой конфигурации на полюсах капли формируются точечные топологические дефекты — буджумы, а поле директора имеет меридиональный характер, ориентируясь от одного буджума к другому.

Для расчета упругой энергии капли целесообразно ввести специальную криволинейную систему координат (σ, τ, φ), которая по своей структуре аналогична биполярной [8; 9], но адаптирована к конкретной геометрии рассматриваемой сплюснутой капли. σ — угол в текущей точке (x, y z), образованный двумя буджумами, τ — логарифм отношения расстояний от точки до каждого из буджумов. Связь с декартовыми координатами следующая:

$$x = \frac{a\sin\sigma}{\cosh\tau - \cos\sigma}\cos\varphi,\ y = \frac{a\sin\sigma}{\cosh\tau - \cos}\sin\varphi,\ z = \frac{a\sinh\tau}{\cosh\tau - \cos\sigma}.$$

где a — масштабный параметр, определяющий размер системы: в нашем случае это расстояние буджумов до центра капли. Координатные поверхности τ = const соответствуют сферам, а поверхности σ = const — сплюснутым торам. В частности, поверхность капли задается условием $\sigma = \sigma_0$, где $\sigma_0 \in (0, \pi)$. При этом буджумы располагаются при $\tau \to \pm\infty$, а параметр σ_0 определяет степень сплюснутости капли: при $\sigma_0 \to 0$ капля вырождается в тонкую нить, при $\sigma_0 \to \pi/2$ принимает сферическую форму, а при $\sigma_0 \to \pi$ становится бесконечно тонкой линзой.

Коэффициенты Ламэ в этой системе примут вид:

$$h_\sigma = h_\tau = \frac{a}{\cosh\tau - \cos\sigma}, h_\varphi = \frac{a\sin\sigma}{\cosh\tau - \cos\sigma}. \#(1)$$

Выберем поле директора вдоль координатной линии τ, что соответствует его меридиональному направлению от одного полюса к другому в данной геометрии:

$$\boldsymbol{n} = (n_\sigma, n_\tau, n_\varphi) = (0, 1,0)$$

Вычисление упругой энергии Франка

Свободная энергия Франка в одноконстантном приближении $K_{11} = K_{22} = K_{33} = K$ записывается как [3; 4]:

$$F = \frac{1}{2} K \int_V [(\mathrm{div}\, n)^2 + (n \cdot \nabla \times n)^2] dV \#(2)$$

Вычислим оба слагаемых отдельно в биполярных координатах.

Дивергенция. Используя общее выражение для дивергенции в криволинейных координатах, получаем:

$$\mathrm{div}\, n = \frac{1}{h_\sigma h_\tau h_\varphi}\left[\frac{\partial}{\partial \sigma}\left(h_\tau h_\varphi n_\sigma\right) + \frac{\partial}{\partial \tau}\left(h_\sigma h_\varphi n_\tau\right) + \frac{\partial}{\partial \varphi}\left(h_\sigma h_\tau n_\varphi\right)\right] \#(3)$$

Подставляя в это выражение коэффициенты Ламэ из (1), находим:

$$\mathrm{div}\, n = \frac{-2a^2 \sin\sigma \sinh\tau / D^3}{a^3 \sin\sigma / D^3} = -\frac{2\sinh\tau}{a}, \#(4)$$

где введено обозначение $D = \cosh\tau - \cos\sigma$.

Ротор. Аналогично вычисляем компоненты ротора:

$$(\nabla \times n)_\sigma = (\nabla \times n)_\tau = 0 \#(5)$$

$$(\nabla \times n)_\varphi = \frac{\sin\sigma}{a} \#(6)$$

Поскольку n=(0, 1, 0), то скалярное произведение директора и ротора, имеющего компоненты (5) и (6):

$$n \cdot (\nabla \times n) = 0.$$

Таким образом, вклад от второго слагаемого в энергии Франка (2) для выбранной конфигурации директора равен нулю.

Элемент объема и интегрирование. Элемент объема в криволинейных координатах равен:

$$dV = h_\sigma h_\tau h_\varphi \, d\sigma \, d\tau \, d\varphi = \frac{a^3 \sin\sigma}{D^3} \, d\sigma \, d\tau \, d\varphi \#(7)$$

Область интегрирования определяется геометрией капли:

$$\sigma \in [\sigma_0, \pi], \tau \in (-\infty, \infty), \varphi \in [0{,}2\pi)$$

Подставляя выражения (4), (7) в (2), получаем:

$$F = \frac{1}{2} K \int_{\sigma_0}^{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{2\pi} \frac{4\sinh^2\tau}{a^2} \cdot \frac{a^3 \sin\sigma}{D^3} \, d\varphi \, d\tau \, d\sigma \#(8)$$

Интегрирование по φ дает множитель 2π. После упрощения энергия (8) принимает вид:

$$F = 4\pi a K \int_{\sigma_0}^{\pi} \sin\sigma \, I(\sigma) \, d\sigma \#(9)$$

где

$$I(\sigma) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sinh^2\tau}{(\cosh\tau - \cos\sigma)^3} \, d\tau \#(10)$$

Вычисление интеграла (10) является ключевым шагом. Сделав подстановку *u*=cosh τ, получим:

$$I(\sigma) = 2\int_1^\infty \frac{\sqrt{u^2-1}}{(u-\cos\sigma)^3}\,du$$

Данный табличный интеграл может быть вычислен, например, с помощью вычетов или ссылки на известные формулы [10]. В результате получаем:

$$I(\sigma) = \frac{\pi}{2\sin\sigma}\#(11)$$

Подставляя (11) в (9) и произведя интегрирование, получим окончательный вид для упругой энергии Франка:

$$F = 2\pi^2 aK(\pi - \sigma_0)$$

Обсуждение

Полученный результат имеет наглядную геометрическую интерпретацию. Энергия линейно зависит от параметра σ_0, который является мерой "открытости" капли (углового размера области, занятой нематиком). При $\sigma_0 \to \pi$ (бесконечно тонкая линза) энергия стремится к нулю, что согласуется с исчезновением объема, подверженного деформации. При $\sigma_0 \to 0$ (вытянутая капля) энергия достигает максимального значения $2\pi a^3 K$, пропорционального характерному размеру системы a.

Важно отметить, что вся энергия деформации обусловлена первым членом в формуле Франка — квадратом дивергенции директора (*splay*-деформация). Вклад от кручения (*twist*) в данной конфигурации отсутствует, что является прямым следствием выбора радиального распределения директора $\mathbf{n}=\mathbf{e}_\tau$. Этот результат согласуется с качественными представлениями о структуре дефектов типа буджум.

Использование криволинейной системы координат оказалось чрезвычайно эффективным, так как позволило точно проинтегрировать энергию по сложной области. Данный метод может быть применен для расчета энергии и других конфигураций дефектов в неевклидовых геометриях.

Заключение

В работе методом аналитических вычислений в криволинейных координатах получено точное выражение для упругой энергии Франка сплюснутой нематической капли с двумя точечными дефектами на полюсах. Показано, что энергия определяется исключительно дивергенцией директора и линейно зависит от углового параметра, характеризующего геометрию капли. Полученная формула может служить основой для оценки энергетических барьеров и стабильности подобных конфигураций в экспериментальных системах, таких как нематические капли в полимерных матрицах или лиотропные фазы в микропорах.

Литература

1. Де Жен П. Физика жидких кристаллов. Москва: Мир, 1977. 400 с. Текст: непосредственный.

2. Kleman M., Lavrentovich O. D. Soft Matter Physics: An Introduction. Springer Science & Business Media, 2003. 659 p.

3. Frank F. C. I. Liquid crystals. On the theory of liquid crystals. *Discuss. Faraday Soc*. 1958; 25: 19–28.

4. Oseen C. W. The theory of liquid crystals. *Trans. Faraday Soc*. 1933; 29, 140: 883–889.

5. Nehring J., Saupe A. On the Elastic Theory of Uniaxial Liquid Crystals *J. Chem. Phys*. 1971; 54, 1: 337–343.

6. Чимытов Т.А. Теоретический анализ уравнения Франка-Озеена для неполярных жидких кристаллов // Вестник Бурятского государственного университета. Химия. Физика. 2024. Вып. 2. С. 13–21. Текст: непосредственный.

7. Чимытов Т.А., Номоев А.В., Калашников С.В. Эффект памяти в полимерно-жидкокристаллических композитах // Письма в ЖТФ. 2025. Т. 51, № 13. С. 3–6. Текст: непосредственный.

8. Koval'chuk A.V., Kurik M.V., Lavrentovich O.D., Sergan V.V. Structural transformations in nematic droplets located in an external magnetic field. *JETP*. 1988; 67, N. 5: 1065–1073.

9. Korn G.A., Korn T.M. Mathematical Handbook for Scientists and Engineers / McGraw-Hill Book Company, Inc. New York; Toronto; London, 1961.

10. Moon P., Spencer D.E. Field Theory Handbook / Springer-Verlag. Berlin, 1971.

Статья поступила в редакцию 04.12.2025; одобрена после рецензирования 09.12.2025; принята к публикации 10.12.2025.

Frank Elastic Energy of A Flattened Nematic Droplet With Boojums in Bipolar Coordinates

Timur A. Chimytov
Cand. Sci. (Physics and Mathematics), A/Prof.
Dorzhi Banzarov Buryat State University
24a Smolina St., 670000 Ulan-Ude, Russia
tchimytov@gmail.com

Abstract. The article shows an analytical calculation of the Frank–Oseen elastic energy for a flattened droplet of nematic liquid crystal containing two-point defects (boojums) at its poles. To solve the problem, a modified coordinate system structurally similar to bipolar coordinates was proposed and employed, adapted to the geometry of a droplet with two distinct poles. It is shown that, under the assumption of a tangential director distribution, the deformation energy within the droplet reduces to an integral of the squared divergence of the director field, while the contribution from the director's curl is zero. By evaluating this integral, an exact expression for the elastic energy is obtained, proportional to the characteristic size of the droplet and a parameter defining its flattening. The result has demonstrated the effectiveness of using curvilinear coordinates for calculating the energetics of topological defects in confined liquid-crystalline systems.

Keywords: liquid crystal, Frank energy, bipolar coordinates, boojums, topological defect, nematic droplet.

Acknowledgments
The study was carries out with the support of FSFEI HE *Dorzhi Banzarov Buryat State University*, grant No. 25-09-01.

For citation
Chimytov T. A. Frank Elastic Energy of a Flattened Nematic Droplet with Boojums in Bipolar Coordinates. *Bulletin of Buryat State University. Chemistry. Physics.* 2025; 4: 20–25 (in Russ).

The article was submitted 04.12.2025; approved after reviewing 09.12.2025; accepted for publication 10.12.2025.