ВЕСТНИК ПЕРМСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

2022 **• ФИЗИКА •** **Вып. 2**

УДК 512.81, 537.9
PACS 02.20.Sv; 42.70.Df; 61.30.Gd

КРАТКОЕ СООБЩЕНИЕ

Групповой анализ уравнений равновесия нематохолестерика

И. И. Клебанов[1,2†], О. А. Скалдин[3], А. Кханна[4], Г. В. Сорокин[1]

[1] Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет), Челябинск, Россия
[2] Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия
[3] Уфимский Федеральный исследовательский центр Российской академии наук, Уфа, Россия
[4] Индийский технологический институт в Бомбее, Мумбаи, Индия

[†] klebanov.igor2010@yandex.ru

Вычислена алгебра Ли, допускаемая системой уравнений равновесия нематохолестерика, моделирующей равновесные конфигурации упругого поля в одноконстантном приближении континуальной теории. Установлено, что в случае чистого нематика допускаемая алгебра Ли десятимерна, а в случае холестерика четырехмерна. Получены частные аналитические решения системы модельных уравнений.

Ключевые слова: жидкие кристаллы; уравнение равновесия; алгебра Ли; инвариантное решение

Поступила в редакцию 20.11.2021; после рецензии 12.04.2022; принята к опубликованию 12.04.2022

Group analysis of equilibrium equations for a nematocholesteric

I. I. Klebanov[1,2†], O. A. Skaldin[3], A. Khanna[4], G. V. Sorokin[1]

[1] South Ural State University (National Research University), Chelyabinsk, Russia
[2] Chelyabinsk State University, Chelyabinsk, Russia
[3] Ufa Federal Research Center RAS, Ufa, Russia
[4] Indian Institute of Technology Bombay, Powai, Mumbai, India

[†] klebanov.igor2010@yandex.ru

We obtain a Lie algebra admitted by the system of equilibrium equations for a nematocholesteric, which models equilibrium configurations of the elastic field in the one-constant approximation of the continuum theory. In the case of a pure nematic, the system is found to admit a ten-dimensional Lie algebra, while in the case of a cholesteric, the system admits a four-dimensional Lie algebra. In addition, we have received particular analytical solutions of the system of model equations.

Keywords: liquid crystals; equilibrium equation; Lie algebra; invariant solution

Received 20 November 2021; revised 12 April 2022; accepted 12 April 2022

doi: 10.17072/1994-3598-2022-2-11-14

1. Введение

Жидкие кристаллы (ЖК) представляют собой анизотропные жидкости, характеризующиеся наличием макроскопического молекулярного упорядочения. Это придает им сходство с твердым телом, и они являются общепризнанными модельными системами для изучения общих принципов формирования надмолекулярных структур в физике конденсированных сред.

С одной стороны, это связано с конечностью всех реальных систем, и, как следствие, на мезоуровне поверхностная и объемная части энергии становятся сравнимыми по величине. С другой стороны, неоднородное по пространству распределение молекулярной ориентации в ЖК, являющееся основой пространственно-временной дисперсии свойств (твист, супертвист, гибридная ориентации), неравенство поверхностной энергии на границах плоского слоя задают дополнительную анизотропию надмолекулярного характера в объеме ЖК. Последнее может приводить к реализации существенно иного типа неустойчивостей при внешнем воздействии по сравнению с обычным однородным случаем, а также определять разнообразие как статических [1], так и динамических структур и их симметрию [2].

Не менее важным является изучение влияния топологических особенностей границ на спектр равновесных конфигураций поля директора, например, нематического ЖК [3]. С этой точки зрения, представляется весьма актуальным проведение группового анализа уравнений равновесия и их возможных решений для поля директора, связанных с симметрией среды, в частности, для случая холестерического ЖК.

Групповой анализ, областью применения которого изначально была газодинамика, в настоящее время охватывает широкий круг задач нелинейной математической физики. Например, он был успешно применен одним из авторов работы (И. И. К.) при изучении динамики самогравитирующего газа [4–6], представляющей большой интерес для астрофизики. Цель настоящей работы – групповой анализ уравнений нематостатики.

2. Симметрии уравнений равновесия нематохолестерика

Рассматривается общая задача расчета упругого поля нематического и холестерического жидкого кристалла в одноконстантном приближении континуальной теории [7]. Компоненты поля директора (единичного вектора, указывающего направление преимущественной ориентации длинных осей молекул) представим в виде:

$$\begin{aligned} n_1 &= \sin\alpha\ \cos\beta, \\ n_2 &= \sin\alpha\ \sin\beta, \\ n_3 &= \cos\alpha, \end{aligned} \tag{1}$$

где α и β – функции пространственных переменных x, y, z. В одноконстантном приближении континуальной теории выражение для свободной энергии деформации упругого поля имеет вид:

$$F = \frac{K}{2}\int((\operatorname{div}\mathbf{n})^2 + (\operatorname{rot}\mathbf{n})^2 + 2q\mathbf{n}\operatorname{rot}(\mathbf{n}) + q^2)dV, \tag{2}$$

где K – модуль Франка, q – параметр хиральности ($q \neq 0$ для холестерика и $q=0$ для чистого нематика), интегрирование проводится по объему, занятому жидким кристаллом. Минимизация функционала (2) приводит к системе уравнений равновесия

$$\begin{gathered} (\alpha_{xx} + \alpha_{yy} + \alpha_{zz}) - \sin\alpha\cos\alpha\,(\beta_x^2 + \beta_y^2 + \beta_z^2) + 2q\sin\alpha\left[(\beta_x\cos\beta + \beta_y\sin\beta)\sin\alpha + \beta_z\cos\alpha\right] = 0, \\ \sin\alpha\,(\beta_{xx} + \beta_{yy} + \beta_{zz}) + 2\cos\alpha\,(\alpha_x\beta_x + \alpha_y\beta_y + \alpha_z\beta_z) - 2q\sin\alpha\,(\alpha_y\sin\beta + \alpha_x\cos\beta) = 0. \end{gathered} \tag{3}$$

Генератор группы симметрии, допускаемой системой (3), будем искать в виде:

$$\hat{X} = \xi^x\partial x + \xi^y\partial y + \xi^z\partial z + \eta^\alpha\partial\alpha + \eta^\beta\partial\beta, \tag{4}$$

где компоненты касательного векторного поля ξ и η – функции зависимых и независимых переменных. Расчет по стандартному алгоритму Ли-Овсянникова [8] с применением специализированного пакета Gem [9] приводит к системам определяющих уравнений.

Для $q \neq 0$ (холестерик) мы получим следующую систему:

$$\begin{aligned} &\xi_x^{(x)} = \xi_z^{(x)} = \xi_y^{(y)} = \xi_z^{(y)} = 0, \\ &\xi_x^{(z)} = \xi_y^{(z)} = \xi_z^{(z)} = \xi_\alpha^{(z)} = \xi_\beta^{(z)} = 0, \\ &\xi_x^{(y)} = \eta^{(\beta)}, \qquad \xi_y^{(x)} = -\eta^{(\beta)}, \\ &\eta_x^{(\beta)} = \eta_y^{(\beta)} = \eta_z^{(\beta)} = 0, \\ &\xi_\alpha^{(x)} = \xi_\alpha^{(y)} = \xi_\beta^{(x)} = \xi_\beta^{(y)} = 0, \\ &\eta_\alpha^{(\beta)} = \eta_\beta^{(\beta)} = \eta^{(\alpha)} = 0. \end{aligned} \tag{5}$$

Решение системы (5) дает четырехмерную алгебру Ли с генераторами:

$$\begin{aligned} &X_1 = \partial x, \qquad X_2 = \partial y, \qquad X_3 = \partial z, \\ &X_4 = \partial\beta - y\partial x + x\partial y. \end{aligned} \tag{6}$$

Для $q = 0$ (нематик) мы получим следующую систему:

$$\begin{aligned} &\xi_{yy}^{(x)} = \xi_{yz}^{(x)} = \xi_{zz}^{(x)} = \xi_{zz}^{(y)} = \xi_{zz}^{(z)} = 0, \\ &\eta_{\beta\beta}^{(\alpha)} = -\eta^{(\alpha)}, \qquad \eta_y^{(\alpha)} = \eta_x^{(\beta)} = 0, \\ &\xi_x^{(x)} = \xi_z^{(z)} = \xi_x^{(y)} = 0, \\ &-\xi_y^{(x)}\xi_x^{(z)} = -\xi_z^{(x)}\eta_x^{(\alpha)} = 0, \\ &\xi_y^{(y)} = \xi_z^{(z)} = \xi_y^{(z)} = -\xi_z^{(y)}, \\ &\eta_y^{(\beta)} = \eta_z^{(\alpha)} = \eta_z^{(\beta)} = \eta_\alpha^{(\alpha)} = 0, \\ &\xi_\alpha^{(x)} = \xi_\alpha^{(y)} = \xi_\alpha^{(z)} = 0, \\ &\eta_\alpha^{(\beta)} = \frac{\eta_\beta^{(\alpha)}}{\cos\alpha^2 - 1}, \\ &\xi_\beta^{(z)} = \xi_\beta^{(y)} = \xi_\beta^{(z)} = 0, \\ &\eta_\beta^{(\beta)} = \frac{\eta^{(\alpha)}\cos\alpha\sin\alpha}{\cos\alpha^2 - 1}. \end{aligned} \tag{7}$$

Решение системы (7) дает десятимерную алгебру Ли с генераторами:

$$
\begin{aligned}
&X_1 = \partial x, \qquad X_2 = \partial y,\\
&X_3 = \partial z, \qquad X_4 = \partial \beta,\\
&X_5 = x\partial x + y\partial y + z\partial z,\\
&X_6 = y\partial x - x\partial y,\\
&X_7 = z\partial x - x\partial z,\\
&X_8 = z\partial y - y\partial z,\\
&X_9 = \sin\beta \frac{\partial}{\partial\alpha} + \frac{\cos\beta}{\tan\alpha}\frac{\partial}{\partial\beta},\\
&X_{10} = \cos\alpha \frac{\partial}{\partial\alpha} - \frac{\sin\beta}{\tan\alpha}\frac{\partial}{\partial\beta}.
\end{aligned}
\tag{8}
$$

Таким образом, в случае нематика допускаемая алгебра Ли расширяется.

3. Инвариантные решения

Рассмотрим частные инвариантные решения системы (3) при $q=0$ (нематик).

Случай 1: Решение, порождаемое двумерной подалгеброй <X_2, X_3> (решение, инвариантное относительно параллельных переносов в плоскости xy).

Фактор-система:

$$
\begin{aligned}
&\alpha_{xx} - \beta_x^2 \sin\alpha\cos\alpha = 0,\\
&\beta_{xx}\sin\alpha + 2\alpha_x\beta_x\cos\alpha = 0.
\end{aligned}
\tag{9}
$$

Случай 2: Решение, порождаемое двумерной подалгеброй <X_3, X_6> (аксиально-симметричное решение, независящее от z).

Фактор-система:

$$
\begin{aligned}
&\rho\frac{d}{d\rho}(\rho d\rho) - \sin\alpha\cos\alpha\left(\rho\beta_\rho\right)^2 = 0,\\
&\sin\alpha\,\rho\frac{d}{d\rho}\left(\rho\beta_\rho\right) + 2\cos\alpha\,(\rho d\rho)\left(\rho\beta_\rho\right) = 0,
\end{aligned}
\tag{10}
$$

где $\rho = \sqrt{x^2+y^2}$. Подстановкой $\xi = \ln\rho$ система (10) приводится к (9) с дифференцированием по переменной ξ.

Случай 3: Решение, порождаемое трехмерной подалгеброй <X_6, X_7, X_8> (сферически симметричное решение).

Фактор-система:

$$
\begin{aligned}
&\frac{1}{\rho^2}\frac{d}{d\rho}\left(\rho^2\alpha_\rho\right) - \sin\alpha\cos\alpha\,{\beta_\rho}^2 = 0,\\
&\sin\alpha\frac{1}{\rho^2}\frac{d}{d\rho}\left(\rho^2\beta_\rho\right) + 2\cos\alpha\,\alpha_\rho\beta_\rho = 0,
\end{aligned}
\tag{11}
$$

где $\rho = \sqrt{x^2+y^2+z^2}$. Подстановкой $\xi = 1/\rho$ система (11) приводится к системе (9) с дифференцированием по переменной ξ.

Интегрирование системы (9) дает выражение для α и β

$$
\begin{aligned}
&\cos\alpha = \sqrt{\tfrac{C_2-C_1^2}{C_2}}\cos(\sqrt{C_2}x + C_3),\\
&\tan(\beta-\beta_0) = \tfrac{\sqrt{C_2}}{C_1}\tan(\sqrt{C_2}x + C_3),
\end{aligned}
\tag{12}
$$

где C_1, $C_2>0$, C_3, β_0 – константы интегрирования.

Соответственно, интегрирование систем (10) и (11) дает те же выражения с заменой переменной x на ξ. Во всех случаях решения описывают структуры упругого поля, содержащие топологические дефекты вида «расплавленная дисклинация», подобные описанным в работе [10]. Детальный анализ геометрии и устойчивости этих структур является темой отдельной публикации.

4. Выводы

Полученные результаты являются основой для поиска новых инвариантных и частично инвариантных решений уравнений равновесия нематика и холестерика, которые в принципе допускают экспериментальную проверку. Для этого необходимо рассчитать оптимальные системы подалгебр допустимых групп Ли, что является предметом дальнейших исследований.

Список литературы

1. *Курик М. В., Лаврентович О. Д.* Дефекты в жидких кристаллах: гомотопическая теория и экспериментальные исследования // УФН. 1988. Т. 154. С. 381–431.
2. *Cross M. C., Greenside H. S.*, Pattern formation and dynamics in nonequilibrium systems // Cambridge: Cambridge University Press, 2009. 552 p.
3. *Бурылов С. В.* К вопросу о равновесных конфигурациях нематического жидкого кристалла в цилиндрическом объеме // ЖЭТФ. 1997. Т. 112. № 5. С. 1603–1629.
4. *Klebanov I., Startsun O., Ivanov S.* Model of the Newtonian cosmology: Symmetries, invariant and partially invariant solutions // Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation. 2016. Vol. 39. P. 248–251.
5. *Klebanov I., Panov A., Ivanov S., Maslova O.* Group analysis of dynamics equations of self-gravitating polytropic gas // Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation. 2018. Vol. 59. P. 437–443.
6. *Adarchenko V., Panov A., Voronin S., Klebanov I.* Group classification of dynamics equations of self-gravitating gas // Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation. 2019. Vol. 76. P. 109–115.
7. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Теория упругости: М.: Наука, 1987. 248 с.
8. *Овсянников Л. В.* Групповые свойства дифференциальных уравнений. Новосибирск: Изд-во СО АН СССР, 1962. 239 с.
9. *Cheviakov A. F.* Symbolic computation of local symmetries of nonlinear and linear partial and ordinary differential equations // Mathematics in Computer Science. 2010. Vol. 4. P. 203–222.
10. *Skaldin O. A., Klebanov I. I., Timirov Yu. I., Basyrova E. R., Delev V. A.* Cascade “melting” of

a linear disclination in chiral nematic droplets // JETP Letters. 2018. Vol. 107 (11). P. 695–698.

References

1. Kurik M. V., Lavrentovich O. D. Defects in liquid crystals: homotopy theory and experimental studies. *Sov. Phys. Usp.*, 1988, vol. 31, pp. 196–224.
2. Cross M. C., Greenside H. S. *Pattern formation and dynamics in nonequilibrium systems*. Cambridge: Cambridge University Press, 2009, 552 p.
3. Burylov S. V. Equilibrium configuration of a nematic liquid crystal confined to a cylindrical cavity. *JETP*, 1997, vol. 85, no. 5, pp. 873–886.
4. Klebanov I., Startsun O., Ivanov S. Model of the Newtonian cosmology: Symmetries, invariant and partially invariant solutions. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, 2016, vol. 39, pp. 248–251
5. Klebanov I., Panov A., Ivanov S., Maslova O. Group analysis of dynamics equations of self-gravitating polytropic gas. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, 2018, vol. 59, pp. 437–443
6. Adarchenko V., Panov A., Voronin S., Klebanov I. Group classification of dynamics equations of self-gravitating gas. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, 2019, vol. 76, pp. 109–115
7. Landau L. D., Pitaevskii L. P., Kosevich A. M., Lifshitz E. M. *Theory of Elasticity*. Oxford: Butterworth-Heinemann, 1986. 195 p.
8. Ovsyannikov L.V. *Gruppovye svoistva differentsial'nykh uravnenii* [Group Properties of Differential Equations]. Novosibirsk: Siberian Branch of the USSR Academy of Sciences, 1962, 239 p. (In Russian).
9. Cheviakov A. F. Symbolic computation of local symmetries of nonlinear and linear partial and ordinary differential equations. *Mathematics in Computer Science*, 2010, vol. 4, pp. 203–222.
10. Skaldin O. A., Klebanov I. I., Timirov Yu. I., Basyrova E. R., Delev V. A. Cascade “melting” of a linear disclination in chiral nematic droplets. *JETP Letters*, 2018, vol. 107 (11), pp. 695–698.

Просьба ссылаться на эту статью в русскоязычных источниках следующим образом:
Клебанов И. И., Скалдин О. А., Кханна А., Сорокин Г.В. Групповой анализ уравнений равновесия нематохолестерика // Вестник Пермского университета. Физика. 2022. № 2. С. 11–14. doi: 10.17072/1994-3598-2022-2-11-14

Please cite this article in English as:
Klebanov I. I., Skaldin O. A., Khanna A., Sorokin G. V. Group analysis of equilibrium equations for a nemato-cholesteric. *Bulletin of Perm University. Physics*, 2022, no. 2, pp. 11–14. doi:10.17072/1994-3598-2022-2-11-14

Сведения об авторах
1. *Игорь Иосифович Клебанов*, канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры системного программирования, Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет), 454080, пр. Ленина, 76, Челябинск.
2. *Скалдин Олег Алексеевич*, проф., д-р. физ.-мат. наук, заведующий лаборатории физики твердого тела, Уфимский Федеральный исследовательский центр Российской академии наук, 450054, пр. Октября, 71, г. Уфа.
3. *Aditya Khanna*, postgraduate student, Indian Institute of Technology Bombay. Department of Electrical Engineering, Mumbai 400 076, India.
4. *Сорокин Георгий Владимирович*, аспирант кафедры системного программирования, Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет), 454080, пр. Ленина, 76, Челябинск.

Author information
1. *Igor I. Klebanov*, Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, School of Electronic Engineering and Computer Science, South Ural State University (National Research University); 76, prospekt Lenina, Chelyabinsk, 454080, Russia
2. *Oleg A. Skaldin*, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Head of the Laboratory of Solid State Physics, Ufa Federal Research Center of the Russian Academy of Sciences; 71, prospekt Oktyabrya, Ufa, 450054, Russia
3. *Aditya Khanna*, Postgraduate Student, Indian Institute of Technology Bombay, Department of Electrical Engineering
4. *Georgii V. Sorokin*, Postgraduate Student, School of Electronic Engineering and Computer Science, South Ural State University (National Research University); 76, prospekt Lenina, Chelyabinsk, 454080, Russia