

УДК 532.783, 544.252.22

DOI: 10.18384/2310-7251-2020-3-6-12

МЕТОД РАСЧЁТА МОДУЛЕЙ ФРАНКА ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО КОМПЛЕКСА НА ОСНОВЕ ЭРБИЯ

Тамбовцев И. М., Добрун Л. А., Ковшик А. П., Аксенова Е. В., Рюмцев Е. И.

*Санкт-Петербургский государственный университет
199034, г. Санкт-Петербург, Университетская набережная, д. 7–9, Российская Федерация*

Аннотация.

Цель: определить модули Франка жидкокристаллического комплекса на основе эрбия.

Процедура и методы. Ёмкостным методом исследовано ориентирующее влияние магнитного поля на жидкокристаллический комплекс на основе эрбия. Получена зависимость эффективных значений компонент диэлектрической проницаемости комплекса от магнитного поля. Предложен теоретический подход и численный метод определения упругих постоянных Франка на основе экспериментальной зависимости эффективных значений компонент диэлектрической проницаемости от магнитного поля.

Результаты. Построены и объяснены зависимости диэлектрической проницаемости образца от приложенного магнитного поля; найдены модули Франка для данного вещества.

Теоретическая и практическая значимость. Парамагнитные нематические жидкокристаллические комплексы на основе ионов лантаноидов (лантанидомезогены), обладают высокоэффективной люминесценцией и аномально большой для жидких кристаллов анизотропией магнитной восприимчивости. Указанные свойства нематических лантанидомезогенов позволяют создавать оптические среды с линейно поляризованной люминесценцией для использования в оптоэлектронных устройствах, управляемых с помощью электрических и магнитных полей.

Ключевые слова: жидкие кристаллы, лантанидомезогены, диэлектрическая проницаемость, модули Франка, фазовый переход, эффект Фредерикса

ERBIUM-BASED LIQUID CRYSTAL COMPLEX FRANK CONSTANTS CALCULATION METHOD

I. Tambovtcev, L. Dobrun, A. Kovshik, E. Aksenova, E. Ryumtsev

Saint Petersburg University

7–9 Universitetskaya naberezhnaya, St. Petersburg 199034, Russian Federation

Abstract.

Aim is to determine the Frank elastic constants of an erbium-based liquid crystal complex.

Methodology. The orienting effect of a magnetic field on an erbium-based liquid crystal complex was studied by a capacitive method. The dependence of the effective values of the components of the dielectric permittivity of the complex on the magnetic field is obtained. A theoretical approach and a numerical method for determining the Frank elastic constants are proposed based on the experimental dependence of the effective values of the permittivity of a cell on a magnetic field.

Results. The dependences of the permittivity of the sample on the applied magnetic field explained, and Frank elastic constants for this substance are found.

Research implications. Paramagnetic nematic liquid crystal complexes based on lanthanide ions (lanthanide mesogens) possess highly efficient luminescence and anisotropy of magnetic susceptibility is anomalously large for liquid crystals. The indicated properties of nematic lanthanide mesogens make it possible to create optical media with linearly polarized luminescence for use in optoelectronic devices controlled by electric and magnetic fields.

Keywords: liquid crystals, lanthanide mesogens, dielectric permittivity, Frank elastic constants, phase transition, Frédericksz transition

Введение

В настоящее время интенсивно изучаются жидкокристаллические парамагнитные координационные соединения лантаноидов (лантанидомезогены). Лантанидомезогены могут использоваться в различных устройствах оптической электроники, органических светоизлучающих диодах различного цвета, плоских и гибких дисплеях, солнечных батареях, люминесцентных биозондах и т. д. [1; 2].

Объектом данного исследования являлся новый мезогенный комплекс трис[1-(4-(4- пентилциклогексил)фенил)октан-1,3-дионато]-[5- гептадецил-5'-метил-2,2'-бипиридин]эрбия. Этот комплекс $\text{Er}(\text{DDk}_{3-5})_3\text{Vpy}_{17-1}$ синтезирован в Казанском национальном исследовательском технологическом университете [3]. Химическая структура исследуемого материала показана на рис. 1. Комплекс эрбия образует нематическую жидкокристаллическую фазу в диапазоне температур 130–160°C.

Для исследуемого вещества получена зависимость эффективных значений компонент диэлектрической проницаемости от величины ориентирующего магнитного поля H .

На основе этой зависимости численным методом найдены модули Франка для комплекса эрбия.

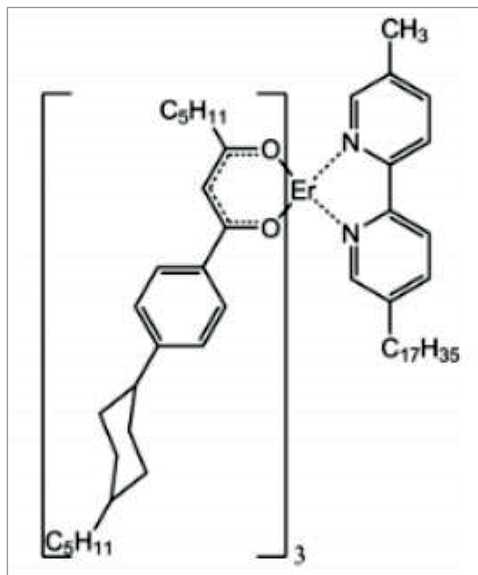


Рис. 1 / Fig. 1. Химическая структура жидкокристаллического комплекса эрбия. /
The chemical structure of the liquid crystal complex of erbium.

Источник: данные авторов / Source: authors' data.

Методы

Предложенный численный метод состоит из двух этапов. Сначала выполняется поиск минимума свободной энергии ячейки жидкого кристалла [4–6]:

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

где плотность свободной энергии имеет вид:

$$\omega = \frac{1}{2} \left[\left(K_{11} \sin^2 \theta + K_{33} \cos^2 \theta \right) (\theta')^2 \mp \Delta \chi H^2 \sin^2 \theta - \frac{\Delta \epsilon}{4\pi} \frac{U^2 d \cos^2 \theta}{\int_0^d (\epsilon_{\perp} + \Delta \epsilon \cos^2 \theta)^{-1} dz} \right],$$

В качестве граничных условий рассматриваются модели жёсткого и мягкого сцепления (потенциал Рапини) [7] с различными условиями преднаклона на границах. Здесь знак «–» соответствует магнитному полю \mathbf{H} , перпендикулярному измерительному электрическому полю, а знак «+» – магнитному полю, параллельному измерительному электрическому полю. Эта модель также позволяет учитывать неоднородность электрического поля внутри образца.

На втором этапе решается обратная задача по нахождению модулей Франка K_{11} и K_{33} путём минимизации отклонения в рамках метода наименьших квадратов [8].

На рис. 2 представлены экспериментальные и теоретические зависимости эффективной диэлектрической проницаемости образца от приложенного магнитного поля, иллюстрирующие результаты нашего исследования. Совпадение рассчитанных и экспериментальных данных показывает, что предложенный способ позволяет достичь высокой точности при использовании небольшого количе-

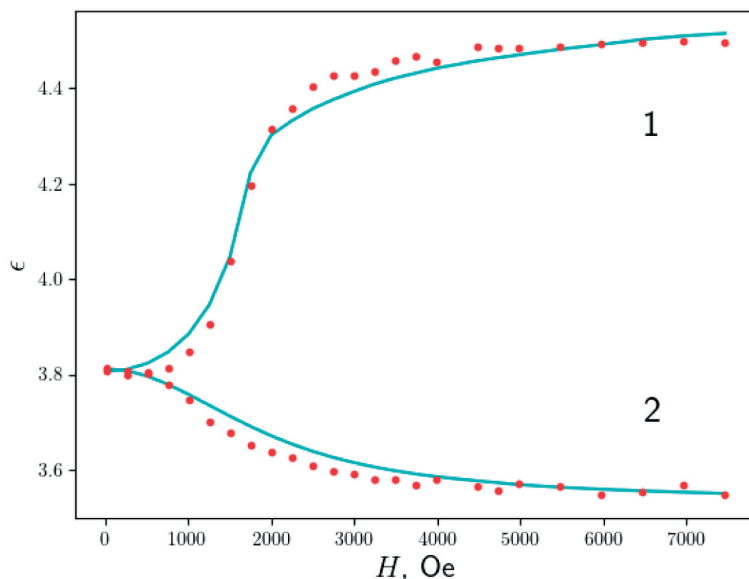


Рис. 2 / Fig. 2. Зависимость эффективной диэлектрической проницаемости образца от приложенного магнитного поля (1 – в направлении параллельном и 2 – перпендикулярном направлению измерительного электрического поля): экспериментальные данные (точки) и результаты расчётов (сплошные линии). / Dependence of the effective dielectric constant of the sample on the applied magnetic field (1 – in the direction parallel and 2 – perpendicular to the direction of the measuring electric field): experimental data (points) and calculation results (solid lines).

Источник: данные авторов / Source: authors' data.

ства экспериментальных данных. Это утверждение подтверждается анализом погрешностей измерений.

Данное исследование состояло из трёх частей: в первую очередь было необходимо оценить способность метода находить минимум на данных без шума. Для этого, полагая K_{11} и K_{33} фиксированными, определялась теоретическая зависимость диэлектрической проницаемости образца от магнитного поля, после чего по полученной зависимости определялись K_{11} и K_{33} , соответствующие минимуму отклонения в рамках метода наименьших квадратов. Таким образом было выяснено, что на синтетических данных метод может давать точность вплоть до четвертого знака. Вторым этапом была проверка метода на жидком кристалле, для которого модули Франка хорошо известны. В качестве такого объекта был использован распространённый жидкий кристалл 5CB. Для 5CB были рассчитаны значения модулей Франка K_{11} и K_{33} . Они совпали с полученными с помощью других экспериментальных методов значениями с точностью в пределах 5% [9].

В заключительной части исследования с помощью описанного метода были определены модули Франка K_{11} и K_{33} для комплекса эрбия и проведена оценка их погрешностей:

$$K_{11} = (7 \pm 6) 10^{-6} \text{ дин}, K_{33} = (6,7 \pm 0,5) 10^{-4} \text{ дин} = (6,7 \pm 0,5) 10^{-9} \text{ Н}$$

Заключение

Очевидно, этот метод не может предоставить точную информацию о модуле K_{11} для комплекса эрбия, но, по крайней мере, он даёт нам информацию, что модуль K_{11} в несколько раз меньше, чем K_{33} . Предложенный метод не обладает такой высокой точностью, как, например, оптические методы, но может быть полезным для некоторых особых случаев, когда другие более точные методы оказываются неприменимыми. Следует отметить, что значения модулей Франка для комплекса эрбия оказались достаточно большими по сравнению с обычными жидкокристаллическими соединениями.

Статья поступила в редакцию 31.07.2020 г.

ЛИТЕРАТУРА

1. Enhanced full color tunable luminescent lyotropic liquid crystals from P123 and ionic liquid by doping lanthanide complexes and AIEgen / Lei N, Shen D., Wang X., Wang J., Li Q., Chen X. // *Journal of Colloid and Interface Science*. 2018. Vol. 529. P. 122–129. DOI: 10.1016/j.jcis.2018.06.012.
2. Chiriac L. F., Iliş M., Cîrcu V. Luminescent lanthanides complexes with mesogenic pyridone ligands: Emission and liquid crystals properties // *Polyhedron*. 2020. Vol. 190. P. 114748. DOI: 10.1016/j.poly.2020.114748.
3. Tris (β -diketonates) lanthanum nematic adducts / Dzhabarov V. I., Knyazev A. A., Strelkov M. V., Molostova E. Y., Schustov V. A., Haase W., Galyametdinov Y. G. // *Liquid Crystals*. 2010. Vol. 37. Iss. 3. P. 285–291. DOI: 10.1080/02678290903506040.
4. Stewart I. W. *The Static and Dynamic Continuum Theory of Liquid Crystals: A Mathematical Introduction*. London: Taylor & Francis, 2004. 351 p. (The Liquid Crystals Book Series).
5. Val'kov A. Y., Aksenova E. V., Romanov V. P. First-order and continuous Fréedericksz transitions in cholesteric liquid crystals // *Physical Review E*. 2013. Vol. 87. Iss. 2. P. 022508. DOI: 10.1103/PhysRevE.87.022508.
6. Wales D. J. *Energy Landscapes: Applications to Clusters, Biomolecules and Glasses*. Cambridge: Cambridge University Press, 2003. 692 p.
7. Rapini A., Papoular M. Distorsion d'une lamelle nématique sous champ magnétique conditions d'ancrage aux parois // *Journal de Physique Colloques*. 1969. Vol. 30 (C4). P. C4-54–C4-56. DOI: 10.1051/jphyscol:1969413.
8. Magnetic field-induced macroscopic alignment of liquid-crystalline lanthanide complexes / Aksenova E., Dobrun L., Kovshik A., Ryumtsev E., Tambovtcev I. // *Crystals*. 2019. Vol. 9. Iss. 10. P. 499. DOI: 10.3390/cryst9100499.
9. *Physical Properties of Liquid Crystals: Nematics* / ed. by D. A. Dunmur, A. Fukuda, G. R. Luckhurst. London: The Institution of Electrical Engineers (INSPEC), 2001. 671 p. (EMIS Datareviews Series No. 25).

REFERENCES

1. Lei N, Shen D., Wang X., Wang J., Li Q., Chen X. Enhanced full color tunable luminescent lyotropic liquid crystals from P123 and ionic liquid by doping lanthanide complexes and AIEgen. In: *Journal of Colloid and Interface Science*, 2018, vol. 529, pp. 122–129. DOI: 10.1016/j.jcis.2018.06.012.

2. Chiriac L. F., Iliş M., Cîrcu V. Luminescent lanthanides complexes with mesogenic pyridone ligands: Emission and liquid crystals properties. In: *Polyhedron*, 2020, vol. 190, pp. 114748. DOI: 10.1016/j.poly.2020.114748.
3. Dzhabarov V. I., Knyazev A. A., Strelkov M. V., Molostova E. Y., Schustov V. A., Haase W., Galyametdinov Y. G. Tris(β -diketonates) lanthanum nematic adducts. In: *Liquid Crystals*, 2010, vol. 37, iss. 3, pp. 285–291. DOI: 10.1080/02678290903506040.
4. Stewart I. W. The Static and Dynamic Continuum Theory of Liquid Crystals: A Mathematical Introduction. London, Taylor & Francis Publ., 2004. 351 p. (The Liquid Crystals Book Series).
5. Val'kov A. Y., Aksenova E. V., Romanov V. P. First-order and continuous Fréedericksz transitions in cholesteric liquid crystals. In: *Physical Review E*, 2013, vol. 87, iss. 2, pp. 022508. DOI: 10.1103/PhysRevE.87.022508.
6. Wales D. J. Energy Landscapes: Applications to Clusters, Biomolecules and Glasses. Cambridge, Cambridge University Press Publ., 2003. 692 p.
7. Rapini A., Papoular M. Distorsion d'une lamelle nématique sous champ magnétique conditions d'ancrage aux parois. In: *Journal de Physique Colloques*, 1969, vol. 30 (C4), pp. C4-54–C4-56. DOI: 10.1051/jphyscol:1969413.
8. Aksenova E., Dobrun L., Kovshik A., Ryumtsev E., Tambovtcev I. Magnetic field-induced macroscopic alignment of liquid-crystalline lanthanide complexes. In: *Crystals*, 2019, vol. 9, iss. 10, pp. 499. DOI: 10.3390/cryst9100499.
9. Dunmur D. A., Fukuda A., Luckhurst G. R., eds. Physical Properties of Liquid Crystals: Nematics. London, The Institution of Electrical Engineers (INSPEC) Publ., 2001. 671 p. (EMIS Datareviews Series No. 25).

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

Тамбовцев Иван Михайлович – аспирант кафедры статистической физики Санкт-Петербургского государственного университета;
e-mail: imtambovtcev@gmail.com;

Добрун Лилия Александровна – кандидат физико-математических наук, старший преподаватель кафедры молекулярной биофизики и физики полимеров Санкт-Петербургского государственного университета;
e-mail: l.dobrun@spbu.ru;

Ковшик Александр Петрович – доктор физико-математических наук, профессор кафедры молекулярной биофизики и физики полимеров Санкт-Петербургского государственного университета;
e-mail: sashakovshik@yandex.ru;

Аксенова Елена Валентиновна – доктор физико-математических наук, профессор кафедры статистической физики Санкт-Петербургского государственного университета;

e-mail: e.aksenova@spbu.ru;

Рюмцев Евгений Иванович – доктор физико-математических наук, профессор кафедры молекулярной биофизики и физики полимеров Санкт-Петербургского государственного университета;
e-mail: rei39@mail.ru.

INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

Ivan M. Tambovtcev – Postgraduate student, Department of Statistical Physics, Saint Petersburg University;

e-mail: imtambovtcev@gmail.com;

Liliya A. Dobrun – Cand. Sci. (Phys.-Math.), Senior Lecturer, Department of Molecular Biophysics and Polymer Physics, Saint Petersburg University;

e-mail: l.dobrun@spbu.ru;

Alexander P. Kovshik – Dr. Sci. (Phys.-Math.), Prof., Department of Molecular Biophysics and Polymer Physics, Saint Petersburg University;

e-mail: sashakovshik@yandex.ru;

Elena V. Aksenova – Dr. Sci. (Phys.-Math.), Prof., Department of Statistical Physics, Saint Petersburg University;

e-mail: e.aksenova@spbu.ru;

Evgeny I. Ryumtsev – Dr. Sci. (Phys.-Math.), Prof., Department of Molecular Biophysics and Polymer Physics, Saint Petersburg University;

e-mail: rei39@mail.ru.

ПРАВИЛЬНАЯ ССЫЛКА НА СТАТЬЮ

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 Московского государственного областного университета. Серия: Физика-Математика. 2020. № 3. С. 6–12.

DOI: 10.18384/2310-7251-2020-3-6-12

FOR CITATION

Tambovtcev I. M., Dobrun L. A., Kovshik A. P., Aksenova E. V., Ryumtsev E. I. Erbium-based liquid crystal complex Frank constants calculation method. In: *Bulletin of the Moscow Region State University. Series: Physics-Mathematics*, 2020, no. 3, pp. 6–12.

DOI: 10.18384/2310-7251-2020-3-6-12