

SUB 301253

205



ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ АН УССР

Препринт КИЯИ-82-10

В.И.Сугаков, С.В.Шияновский

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ
КОГЕРЕНТНОГО РАССЕЯНИЯ МЕДЛЕННЫХ
НЕЙТРОНОВ НЕМАТИЧЕСКИМИ ЖИДКИМИ
КРИСТАЛЛАМИ

КИЕВ-1982

В.И.СУГАКОВ, С.В.ШИЯНОВСКИЙ

**ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ КОГЕРЕНТНОГО РАССЕЯНИЯ
МЕДЛЕННЫХ НЕЙТРОНОВ НЕМАТИЧЕСКИМИ ЖИДКИМИ КРИСТАЛЛАМИ**

Получено точное выражение для сечения когерентного квазиупругого рассеяния нейтронов в нематических жидких кристаллах. Выражения проанализированы для больших и малых значений волнового вектора рассеяния. В первом случае рассеяние происходит на отдельных молекулах и существенным оказывается учет нецилиндричности формы молекул. Во втором случае большой вклад в сечение вносят межмолекулярные корреляции. Найдена связь парной корреляционной функции с флуктуациями плотности, дипольного момента и параметров порядка. Проведенный анализ сечения позволяет из экспериментальных данных по рассеянию медленных нейтронов определить важные микроскопические характеристики нематического жидкого кристалла.

An exact expression is obtained for neutron coherent quasi-elastic scattering cross section in nematic liquid crystals. Expressions are analyzed for big and small values of scattering wave vector. In the first case scattering is occurred on the separate molecules and the account of the molecule form noncylindricity is to be essential. In the second case an intermolecular correlations contribute greatly to cross sections. A connection is formed for pair correlation function with fluctuation for density, dipole moment and order parameters. The performed cross section analysis allow to determine the significant microscopic parameters of the nematic liquid crystal from the experimental data of slow neutron scattering.

Theoretical Study of the slow Neutron Coherent
Scattering by Nematic Liquid Crystals

V.I.Sugakov, S.V.Shiyanovskii

АКАДЕМИЯ НАУК УССР

УДК 532.783:539.171.4.162.2

В.И.СУТАНОВ, С.В.ШИЯНОВСКИЙ

**ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ КОГЕРЕНТНОГО
РАССЕЯНИЯ МЕДЛЕННЫХ НЕЙТРОНОВ НЕМАТИЧЕСКИМИ
ЖИДКИМИ КРИСТАЛЛАМИ**

Киев, Институт ядерных исследований, 1982

Ключевые слова:

жидкие кристаллы, медленные нейтроны, упругое рассеяние, когерентное рассеяние, дифференциальное сечение рассеяния, корреляционные функции;

liquid crystals, slow neutrons, elastic scattering, coherent scattering, differential cross sections, correlation functions.

ВВЕДЕНИЕ

Измерение сечения когерентного рассеяния медленных нейтронов является одним из наиболее точных методов исследования структуры и динамических свойств различных веществ [1,2]. В твердых телах этот метод позволяет определить как структуру молекул, так и параметры элементарной ячейки. В одноатомных жидкостях по нейтрону рассеянию может быть найдена парная корреляционная функция. В последние годы был проведен ряд экспериментов по квазиупругому (без возбуждения внутренних степеней свободы молекул) рассеянию нейтронов для определения структуры жидких кристаллов [3-5], однако из-за отсутствия точного теоретического описания микроскопические характеристики структуры не могли быть вычислены из полученных результатов. В данной работе найдено выражение для когерентного квазиупругого рассеяния медленных нейтронов нематическими жидкими кристаллами с учетом межмолекулярных корреляций и нецилиндричности формы молекул.

Для вычисления сечения используем хорошо известную формулу:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left\langle \sum_{j,j'} \sum_{\nu,\nu'} b_{\nu} b_{\nu'} \exp \{ i \vec{Q} (\vec{R}_j - \vec{R}_{j'} + \vec{u}_j^{\nu} - \vec{u}_{j'}^{\nu'}) \} \right\rangle_T \quad (1)$$

где b_{ν} - когерентная длина рассеяния ν -го ядра;

\vec{Q} - волновой вектор рассеяния;

\vec{u}_j^{ν} - радиус-вектор ν -го ядра j -й молекулы отно-

сительно ее центра масс;

\vec{R}_j - радиус-вектор центра масс j -й молекулы;

$\langle \rangle$ - усреднение на равновесной функции распределения.

Сечение рассеяния удобно представить в виде двух слагаемых. Первое слагаемое $\frac{d\sigma_s}{d\Omega}$ содержит члены с $j = j'$ и описывает рассеяние на отдельных молекулах. Второе слагаемое $\frac{d\sigma_s}{d\Omega}$ описывает интерференцию амплитуд рассеяния разных молекул. При больших значениях волнового вектора ($Qa \gg 1$, где a - размер молекулы) основной вклад дает первый член, при малых значениях - необходимо учитывать оба члена.

РАССЕЯНИЕ НА ОТДЕЛЬНЫХ МОЛЕКУЛАХ.

Сечение когерентного рассеяния на отдельных молекулах выражается через одночастичную функцию распределения $f_1(\vec{\Psi})$, где $\vec{\Psi}$ - совокупность углов Эйлера α, β, γ , которые определяют ориентацию молекулы относительно директора (рис.):

$$\frac{d\sigma_s}{d\Omega} = \bar{n} V \sum_{j, j'} b_j b_{j'} \int \exp\{i\vec{Q}\vec{u}_{jj'}\} f_1(\vec{\Psi}) d\vec{\Psi} \quad (2)$$

$$\int d\vec{\Psi} = \int_0^{2\pi} d\alpha \int_0^{\pi} \sin\beta d\beta \int_0^{2\pi} d\gamma$$

$$\vec{u}_{jj'} = \vec{u}_j - \vec{u}_{j'}$$

где \bar{n} - средняя плотность молекул;

V - рассеивающий объем.

Обычно считают, что, поскольку нематическая фаза является одноосной, функция распределения f_1 зависит только от угла β между длинной осью молекулы и директором [6,7]. Такое допущение несправедливо, так как форма молекул далека от цилиндрической и скорее напоминает плоскую фигуру. Нецилиндричность формы может при-

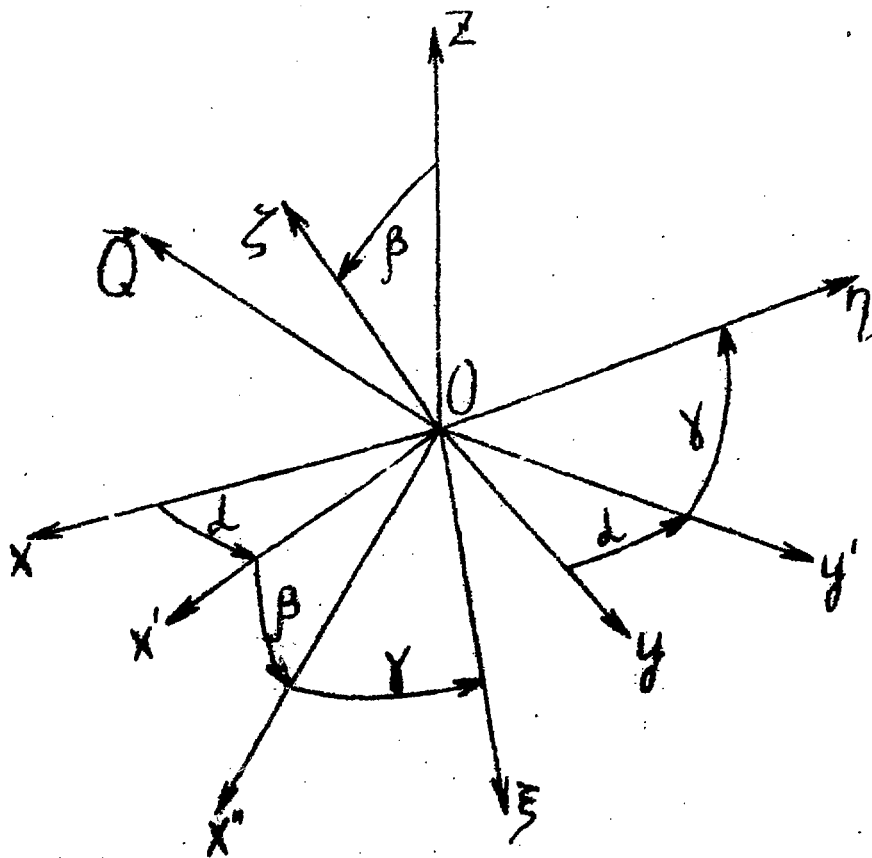


Рис. Выбор углов Эйлера- α, β, γ .

Последовательность вращений $(Oxyz)$ для перехода в молекулярную систему координат $(O\xi\eta\zeta)$ такова:

1. Вращение $(Oxyz)$ на угол α вокруг оси Oz дает $(Ox'y'z)$.

2. Вращение $(Ox'y'z)$ на угол β вокруг оси Oy' дает $(Ox''y''z)$.

3. Вращение $(Ox''y''z)$ на угол γ вокруг оси Oz дает $(O\xi\eta\zeta)$.

Вектор \vec{Q} лежит в плоскости $Ox\alpha$.

вести к появлению двуосных нематической [8] и смектической A [9] фаз, однако эти фазы экспериментально не наблюдались. Тем не менее даже в одноосной фазе такая форма молекул приводит к более сложному виду функции распределения $f_1(\vec{\Psi})$.

Представим $f_1(\vec{\Psi})$ в виде ряда по D -функциям Вигнера с целыми ℓ , являющимися полной системой функций (свойства D -функций, используемые в данной работе, приведены в Приложении А):

$$f_1(\vec{\Psi}) = \sum_{\ell, m, k} \frac{2\ell+1}{8\pi^2} S_{mk}^{\ell} D_{mk}^{\ell*}(\vec{\Psi}), \quad (3)$$

где из условия ортогональности (А.1)

$$S_{mk}^{\ell} = \int D_{mk}^{\ell}(\vec{\Psi}) f_1(\vec{\Psi}) d\vec{\Psi}. \quad (4)$$

Поскольку нематическая фаза имеет симметрию $D_{\infty h}$, $S_{mk}^{\ell} \neq 0$, если $m=0$ и ℓ - четное ($S_{0k}^{\ell} \equiv S_{\ell k}$). Молекулы нематиков имеют плоскость симметрии, параллельную длинной оси, поэтому, направив ось Oz перпендикулярно этой плоскости, получим, что коэффициенты $S_{\ell k}$ - действительны ($S_{\ell k} = (-1)^k S_{\ell, -k}$). Из условия нормировки $S_{00} = 1$. Остальные коэффициенты являются характеристиками ориентационной упорядоченности молекул, сильно зависящими от температуры. Величины $S_{\ell 0}$ ($S_{\ell 0} = \langle P_{\ell}(\cos \beta) \rangle_T$) совпадают с обычными параметрами порядка, характеризующими упорядоченность длинных осей. Отличие от нуля коэффициентов $S_{\ell k}$ при $k \neq 0$ указывает на зависимость функции распределения от ориентации коротких осей относительно директора.

Чтобы проинтегрировать формулу (2), разложим экспоненту в ряд по сферическим гармоникам

$$\exp\{i\vec{Q}\vec{u}_{vv}\} = 4\pi \sum_{\ell, m} i^{\ell} J_{\ell}(Qu_{vv}) Y_{\ell m}(\vec{Q}) Y_{\ell m}^*(\vec{u}_{vv}), \quad (5)$$

где J_ℓ - сферическая функция Бесселя;
 $Y_{\ell m}(\vec{Q})$ - сферическая гармоника от углов, определяющих направление вектора \vec{Q} в системе координат $Oxyz$.

Используя формулы преобразования сферических гармоник (А:5) и ортогональность D -функций (А:1), получаем выражение для сечения когерентного рассеяния на отдельных молекулах:

$$\frac{d\sigma_s}{d\Omega} = \sum_{\ell, k} S_{\ell k} A_{\ell k}(Q) P_\ell(\cos \theta), \quad (6)$$

где $A_{\ell k}(Q) = i^\ell \sqrt{4\pi(2\ell+1)} \sum_{v, v'} b_v b_{v'} J_\ell(Q\vec{u}_{vv'}) \tilde{Y}_{\ell k}^*(\vec{u}_{vv'})$ определяется структурой молекулы и не зависит от ее ориентации;

$\tilde{Y}_{\ell k}^*(\vec{u}_{vv'})$ - сферическая гармоника в молекулярной системе координат $Oxyz$;

θ - угол между волновым вектором и директором.

ВЛИЯНИЕ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНЫХ КОРРЕЛЯЦИЙ

Интерференционный член $\frac{d\sigma_s}{d\Omega}$, являющийся динамической переменной бинарного типа, может быть записан через парную корреляционную функцию $g(\vec{R} = \vec{R}_1 - \vec{R}_2, \vec{\Psi}_1, \vec{\Psi}_2)$, так как произведение одночастичных функций $f_1(\vec{\Psi}_1) f_1(\vec{\Psi}_2)$ не дает вклада в рассеяние:

$$\frac{d\sigma_s}{d\Omega} = \bar{n} V \int g(\vec{R}, \vec{\Psi}_1, \vec{\Psi}_2) e^{i\vec{Q}\vec{R}} W(\vec{Q}, \vec{\Psi}_1) W^*(\vec{Q}, \vec{\Psi}_2) d\vec{R} d\vec{\Psi}_1 d\vec{\Psi}_2, \quad (7)$$

$$\text{где } W(\vec{Q}, \vec{\Psi}_j) = \sum_v b_v \exp\{i\vec{Q}\vec{u}_v^j\}. \quad (8)$$

Интегрирование по ориентации молекул проведем так же, как в предыдущем разделе, учитывая ортогональность D -функций. Представим корреляционную функцию в виде ряда:

$$g(\vec{R}, \vec{\Psi}_1, \vec{\Psi}_2) = \sum_{\ell, m, k} \sum_{\ell', m', k'} \frac{(2\ell+1)(2\ell'+1)}{64\pi^2} D_{m k}^{\ell*}(\vec{\Psi}_1) D_{m' k'}^{\ell'}(\vec{\Psi}_2) \cdot \langle \ell' m' k' | g(\vec{R}) | \ell m k \rangle, \quad (9)$$

где

$$\langle \ell' m' k' | g(\vec{R}) | \ell m k \rangle = \int g(\vec{R}, \vec{\Psi}_1, \vec{\Psi}_2) D_{m k}^{\ell}(\vec{\Psi}_1) D_{m' k'}^{\ell'*}(\vec{\Psi}_2) d\vec{\Psi}_1 d\vec{\Psi}_2, \quad (10)$$

Используя формулы (5) и (10), выразим $\frac{d\delta_z}{d\Omega}$ через фурье-образы коэффициентов разложения парной корреляционной функции:

$$\frac{d\delta_z}{d\Omega} = n V \sum_{\ell, m, k} \sum_{\ell', m', k'} \frac{4\pi}{\sqrt{(2\ell+1)(2\ell'+1)}} B_{\ell k}(\vec{Q}) B_{\ell' k'}^*(\vec{Q}) \cdot Y_{\ell m}(\vec{Q}) Y_{\ell' m'}(\vec{Q}) \langle \ell' m' k' | \vec{q}(\vec{Q}) | \ell m k \rangle \quad (11)$$

$$\text{где } \langle \ell' m' k' | \vec{q}(\vec{Q}) | \ell m k \rangle = \int \langle \ell' m' k' | g(\vec{R}) | \ell m k \rangle e^{i\vec{Q}\vec{R}} d\vec{R} \quad (12)$$

$$B_{\ell k}(\vec{Q}) = i^{\ell} \sqrt{4\pi(2\ell+1)} \sum_j b_j J_{\ell}(Q u_j) \vec{Y}_{\ell k}^*(\vec{u}_j) \quad (13)$$

Выделим в фурье-образах зависимость от направления вектора рассеяния, учитывая симметрию нематической фазы:

$$\langle \ell' m' k' | \vec{q}(\vec{Q}) | \ell m k \rangle = \sum_L \sqrt{\frac{4\pi}{2L+1}} \langle \ell' m' k' | \vec{q}_L(Q) | \ell m k \rangle Y_{L m-m'}(\vec{Q}) \quad (14)$$

Можно показать, что

$$\langle \ell' m' k' | \vec{q}_L(Q) | \ell m k \rangle = i^L \sqrt{\frac{4\pi(2L+1)}{2\ell+1}} \int \langle \ell' m' k' | g(\vec{R}) | \ell m k \rangle J_L(QR) Y_{L m-m'}(\vec{R}) d\vec{R}, \quad (15)$$

и выполняются условия:

$$\begin{aligned} \text{а) } \langle \ell' m' k' | \vec{q}_L(Q) | \ell m k \rangle &= (-1)^{L+\ell-\ell'} \langle \ell' -m' k' | \vec{q}_L(Q) | \ell m k \rangle \\ \text{б) } \langle \ell' m' k' | \vec{q}_L(Q) | \ell m k \rangle &= (-1)^{L+\ell-\ell'} \langle \ell' -m' -k' | \vec{q}_L(Q) | \ell m -k \rangle \\ \text{в) } \langle \ell' m' k' | \vec{q}_L(Q) | \ell m k \rangle &= [\langle \ell m k | \vec{q}_L(Q) | \ell' m' k' \rangle]^* \end{aligned} \quad (16)$$

В результате выражение для интерференционного члена имеет вид:

$$\frac{d\delta_z}{d\Omega} = n V \sum_{\ell, m, k} \sum_{\ell', m', k'} \sum_{L, M, K} C_{\ell' m' k'}^{M 0} C_{\ell m k}^{K 0} C_{\ell' -m' -k'}^{M m-m'} C_{L m-m}^{K 0} \cdot (-1)^{m'} B_{\ell k}(\vec{Q}) B_{\ell' k'}^*(\vec{Q}) \langle \ell' m' k' | \vec{q}_L(Q) | \ell m k \rangle P_K(\cos \theta). \quad (17)$$

Из свойства (A.8) коэффициентов Клебша-Гордена и условия (16.а) следует, что в формуле (17) будут члены только с четны-

ми K .

Таким образом, получено точное выражение для сечения когерентного квазиупругого рассеяния медленных нейтронов нематическими жидкими кристаллами (формулы (6) и (17)). Однако, поскольку парная корреляционная функция нам неизвестна, а полученные формулы слишком сложны для непосредственного сравнения с экспериментальными данными, проанализируем более простой случай малоуглового рассеяния.

МАЛОУГЛОВОЕ РАССЕЯНИЕ.

Для анализа сечения когерентного рассеяния при малых значениях Q можно использовать полученные формулы (6) и (17), однако, чтобы выяснить физическую природу отдельных членов, вернемся к исходному выражению (1), подставив в него формулу (5):

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \sum_{l,m,k} \sum_{l',m',k'} \frac{4\pi}{\sqrt{(2l+1)(2l'+1)}} B_{lk}(Q) B_{l'k'}^*(Q) \cdot \langle \chi_{em}(\vec{Q}) \chi_{e'm'}^*(\vec{Q}) \langle \tilde{D}_{mk}^e(\vec{Q}) [\tilde{D}_{m'k'}^{e'}(\vec{Q})]^* \rangle \rangle, \quad (18)$$

$$\text{где } \tilde{D}_{mk}^e(\vec{Q}) = \sum_j D_{mk}^e(\vec{\Psi}_j) e^{i\vec{Q}\vec{R}_j}. \quad (19)$$

Из формулы (19) видно, что $\tilde{D}_{mk}^e(\vec{Q})$ связаны с флуктуациями: $\tilde{D}_{00}^e(\vec{Q})$ - с флуктуациями плотности, $\tilde{D}_{mk}^1(\vec{Q})$ - удельного дипольного момента, $\tilde{D}_{mk}^2(\vec{Q})$ - параметров порядка S_{2k} и т.д. Таким образом, когерентное рассеяние нейтронов происходит на флуктуациях, причем амплитуды определяются коэффициентами мультипольного разложения $B_{lk}(Q)$, зависящими от структуры молекул и быстро убывающими с ростом l при $Qa, < 1$ (формула (13)). Поэтому ряд оказывается быстро сходящимся и можно ограничиться несколькими первыми членами.

Легко показать, что средние значения флуктуаций выражаются через фурье-образы коэффициентов разложения парной корреляционной функции:

$$\langle \tilde{D}_{mk}^{\ell}(\vec{Q}) [\tilde{D}_{m'k'}^{\ell'}(\vec{Q})]^* \rangle_{\tau} = \bar{n} V \{ \langle \ell' m' k' | \tilde{q}(\vec{Q}) | \ell m k \rangle + \delta_{mm'} (-1)^{m'+k'} \sum_{L} C_{\ell m \ell' m'}^{L k k'} C_{\ell k \ell' k'}^{L k k'} S_{L k k'} \} \quad (20)$$

Поскольку ориентационные корреляции между короткими осями молекул значительно слабее, чем между длинными, а при малых Q $|B_{\ell k}(Q)| \ll |B_{\ell 0}(Q)|$ в выражении (18) можно ограничиться членами с $k = k' = 0$.

В полностью дейтерированных образцах, а именно такие образцы используются для исследования когерентного рассеяния, все атомы имеют положительную длину рассеяния, в результате чего $B_{\ell 0}(Q)$ с нечетными ℓ оказываются малыми. (При наличии плоскости симметрии перпендикулярной длинной оси молекулы эти коэффициенты равны нулю тождественно.) Поэтому выражение (18) может быть записано в виде:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = [B_{00}(Q)]^2 F_{00}(\vec{Q}) + 2B_{20}(Q)B_{00}(Q)F_{20}(\vec{Q}) + [B_{20}(Q)]^2 F_{22}(\vec{Q}), \quad (21)$$

где

$$F_{\ell\ell}(\vec{Q}) = \frac{4\pi}{\sqrt{(2\ell+1)(2\ell'+1)}} \sum_{m,m'} y_{\ell m}(\vec{Q}) y_{\ell' m'}^*(\vec{Q}) \langle \tilde{D}_{m0}^{\ell}(\vec{Q}) [\tilde{D}_{m'0}^{\ell'}(\vec{Q})]^* \rangle_{\tau}. \quad (22)$$

Рассмотрим вид каждого из слагаемых, разлагая их в ряд по степеням Q . Коэффициенты $B_{00}(Q)$ и $B_{20}(Q)$ можно представить в виде:

$$B_{00}(Q) = B(1 - a_0^2 Q^2) \quad B_{20}(Q) = -B a_2^2 Q^2 \quad B = \sum_{\nu} b_{\nu}, \quad (23)$$

где a_0 и a_2 — величины порядка размеров молекулы, которые легко могут быть вычислены для конкретного вещества:

$$a_0^2 = \frac{1}{6B} \sum_{\nu} b_{\nu} u_{\nu}^2 \quad a_2^2 = \frac{\sqrt{20\pi}}{15B} \sum_{\nu} b_{\nu} u_{\nu}^2 \bar{y}_{20}(\vec{u}_{\nu}). \quad (24)$$

Величина $\bar{y}_{00}(\vec{Q})$ является средним квадратом флуктуации плотности и при малых Q выражается через изотермическую сжимаемость χ_T [10]:

$$F_{00}(\vec{Q} \rightarrow 0) = \bar{n}^2 V k_B T \chi_T. \quad (25)$$

Из формул (15) и (20) следует, что

$$F_{00}(\vec{Q}) = \bar{n}^2 V k_B T \chi_T [1 - z_0^2 Q^2 - z_1^2 Q^2 P_2(\cos \theta)], \quad (26)$$

где z_0 и z_1 - радиусы корреляции плотности

$$z_0^2 = \frac{1}{6H} \int g(\vec{R}, \Psi_1, \Psi_2) R^2 d\vec{R} d\Psi_1 d\Psi_2 \quad (27)$$

$$z_1^2 = \frac{\sqrt{20\pi}}{15H} \int g(\vec{R}, \Psi_1, \Psi_2) R^2 Y_{20}(\vec{R}) d\vec{R} d\Psi_1 d\Psi_2 \quad (28)$$

$$H = \bar{n} k_B T \chi_T = 1 + \int g(\vec{R}, \Psi_1, \Psi_2) d\vec{R} d\Psi_1 d\Psi_2. \quad (29)$$

Поскольку $B_{20}(Q) \sim Q^2 z_1^2$, в $F_{20}(\vec{Q})$ можно оставить только нулевой по Q член, который выражается через среднее произведение флуктуирующей плотности и параметра порядка S_{20} и связан с зависимостью S_{20} от давления p :

$$F_{20}(\vec{Q} \rightarrow 0) = \bar{n} V k_B T \left(\frac{\partial(\bar{n} S_{20})}{\partial p} \right)_T P_2(\cos \theta). \quad (30)$$

Хотя последний член в формуле (21) содержит малый множитель $[B_{20}(Q)]^2 \sim Q^4 a^4$, его вклад оказывается значительным благодаря резкому возрастанию флуктуирующей параметра порядка S_{20} при малых значениях Q . Такое поведение характерно для всех систем с вырожденным параметром порядка [11] и может быть исследовано макроскопически. С учетом флуктуирующей матрица параметра порядка имеет вид [12]:

$$\hat{S} = \begin{pmatrix} \frac{S_{20} + \sigma}{3} + \xi_4 & \xi_3 & \xi_2 \\ \xi_3 & -\frac{S_{20} + \sigma}{3} - \xi_4 & \xi_1 \\ \xi_2 & \xi_1 & \frac{2(S_{20} + \sigma)}{3} \end{pmatrix}, \quad (31)$$

где ξ_1, ξ_2 - поперечные флуктуации, обусловленные поворотом директора;

ξ_3, ξ_4 - дуосные флуктуации;

σ - продольная флуктуация.

Легко показать, что $\bar{D}_{m0}^2(\vec{Q})$ выражается через фурье-образы этих флуктуаций:

$$\begin{aligned} \bar{D}_{00}^2(\vec{Q}) &= \bar{n} \bar{\sigma}(\vec{Q}) \quad \bar{D}_{10}^2(\vec{Q}) = -[\bar{D}_{20}^2(\vec{Q})] = \sqrt{\frac{3}{2}} \bar{n} [\xi_2(\vec{Q}) + i \xi_1(\vec{Q})] \\ \bar{D}_{20}^2(\vec{Q}) &= [\bar{D}_{10}^2(\vec{Q})] = \sqrt{\frac{3}{2}} \bar{n} [\xi_4(\vec{Q}) + i \xi_3(\vec{Q})]. \end{aligned} \quad (32)$$

Подставляя формулы (32) в (22), получим:

$$\begin{aligned} F_{22}(\vec{Q}) &= \bar{n} \left\{ \bar{\sigma}(\vec{Q}) P_2(\cos \theta) + 3 \xi_2(\vec{Q}) \cos \theta \sin \theta + \right. \\ &\quad \left. + \frac{3}{2} \xi_4(\vec{Q}) \sin^2 \theta \right\}. \end{aligned} \quad (33)$$

Для усреднения используем разложение термодинамического потенциала, которое в приближении равных упругих констант для энергии бранка имеет вид:

$$\begin{aligned} \Delta \Phi &= \frac{1}{2V} \sum_{\vec{q}} \left\{ \frac{\Phi_k + \bar{K} q^2}{3} |\bar{\sigma}(\vec{q})|^2 + \bar{K} q^2 [|\xi_1(\vec{q})|^2 + |\xi_2(\vec{q})|^2] + \right. \\ &\quad \left. + (\Phi_s + \bar{K} q^2) [|\xi_3(\vec{q})|^2 + |\xi_4(\vec{q})|^2] \right\}. \end{aligned} \quad (34)$$

Поскольку в одноконстантном приближении флуктуации разных $\xi_i(\vec{q})$ и $\bar{\sigma}(\vec{q})$ оказываются независимыми, выражение $F_{22}(\vec{Q})$ преобразуется к :

$$F_{22}(\vec{Q}) = \bar{n}^2 \left\{ 9 \cos^2 \theta \sin^2 \theta \langle |\tilde{\xi}_2(\vec{Q})|^2 \rangle_T + \frac{9}{16} \sin^4 \theta \langle |\tilde{\xi}_4(\vec{Q})|^2 \rangle_T + [P_2(\cos \theta)]^2 \langle |\tilde{\sigma}(\vec{Q})|^2 \rangle_T \right\}, \quad (35)$$

где средние квадраты флуктуаций находятся из теоремы равномерного распределения:

$$\begin{aligned} \langle |\tilde{\xi}_2(\vec{Q})|^2 \rangle_T &= \frac{V k_B T}{K Q^2} \\ \langle |\tilde{\xi}_4(\vec{Q})|^2 \rangle_T &= \frac{V k_B T}{\Phi_4 + K Q^2} \\ \langle |\tilde{\sigma}(\vec{Q})|^2 \rangle_T &= \frac{3V k_B T}{\Phi_\sigma + K Q^2}. \end{aligned} \quad (36)$$

Наибольший вклад в рассеяние дает флуктуация директора ξ_2 , для которой можно записать более точную формулу, отказавшись от одноконстантного приближения и учитывая влияние сил Ван-дер-Ваальса [13]:

$$\langle |\tilde{\xi}_2(\vec{Q})|^2 \rangle_T = \frac{V k_B T S_{10}^2}{(K_{33} \cos^2 \theta + K_{11} \sin^2 \theta - 8L) Q^2 + 12M Q^3 \cos \theta \sin^2 \theta}. \quad (37)$$

Оценки по формулам, приведенным в работе [13], показывают, что параметры взаимодействия Ван-дер-Ваальса L и M малы.

Величины Φ_σ и Φ_ξ определяют изменение термодинамического потенциала при, соответственно, однородном изменении модуля параметра порядка и нарушении одноосности. Из условия $\Phi_{\sigma, \xi} = K Q_{\sigma, \xi}^2$ можно найти минимальные значения для волнового вектора рассеяния, при которых продольные (двуосные) флуктуации начинают вносить заметный вклад в рассеяние по сравнению с вкладом поперечных флуктуаций ($Q_{\sigma, \xi} \approx 10^2 \div 10^4 \text{ \AA}^{-1}$).

АНАЛИЗ ПОЛУЧЕННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ И ВОЗМОЖНОСТИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ ПРОВЕРКИ

Хотя в результате проделанных вычислений найдено точное выражение для сечения когерентного упругого рассеяния медленных нейтронов (формулы (6), (17)), простые формулы, пригодные для сравнения с экспериментом, получаются только для малых и больших Q .

Чтобы такое сравнение дало новую информацию о микроструктуре жидкого кристалла, необходимо знать структуру отдельных молекул и макроскопические характеристики: плотность, изотермическая сжимаемость, зависимость параметра порядка S_{20} от давления, константы упругости K_{ii} .

Для больших Q можно пренебречь вкладом интерференционного члена, и сечение рассеяния описывается формулой (6). Измеряя угловую зависимость сечения, можно найти коэффициенты при разных $P_e(\cos\theta)$, а повторные измерения при других значениях Q позволяют определить, благодаря зависимости $A_{ek}(Q)$, важные макроскопические характеристики нематического жидкого кристалла S_{ek} .

Для малых Q сечение рассеяния описывается формулой (21) и может быть представлено в виде ряда по степеням Q . Нулевой член содержится в первом слагаемом и обусловлен рассеянием на макроскопических флуктуациях плотности. Он может использоваться при измерениях для нормировки интенсивности, так как легко вычисляется по формулам (24) и (25).

В квадратичный по Q член дают вклад все три слагаемые. Суммарный вклад первых двух слагаемых может быть выделен, так как содержит только два полинома Лежандра $P_0(\cos\theta)$ и $P_2(\cos\theta)$, а при $\theta=0$ и $\theta=\frac{\pi}{2}$ вклад третьего слагаемого равен нулю. Предполагая, что χ_T и $\left(\frac{\partial(\bar{n}S_{20})}{\partial P}\right)_T$ известны, можно найти радиусы корреляции ζ_0 и ζ_2 (формулы (27) и (28)), которые являются важными

характеристиками ближнего порядка жидкого кристалла. Исключив из угловой зависимости квадратичного члена вклад первых двух слагаемых, получим вклад флуктуаций директора, который при заданных упругих константах K_{ii} не содержит неизвестных параметров.

Заметный вклад в рассеяние может внести также член $\sim Q^2$, в котором проявляются помимо указанных выше флуктуаций еще продольные и двусосные флуктуации параметра порядка. Полностью разделить вклады разных флуктуаций не удается. Поэтому сделаем некоторые оценки. Для оценок можно использовать формулу (21), так как вклад членов с $B_{20}(Q)$ пренебрежимо мал. Поскольку корреляционные функции плотности быстро убывает с расстоянием, следующий член в $F_{20}(\vec{Q})$ будет порядка $\tau_0^2 Q^2$ или $\tau_1^2 Q^2$. Можно предположить, что в $F_{20}(\vec{Q})$ квадратичный член будет порядка $\tau_0^2 Q^2$, так как $F_{20}(\vec{Q})$ также связано с корреляцией плотности. Вклад продольных и двусосных флуктуаций определяется по формулам (35), (36), в которых величины ϕ_σ и ϕ_ξ могут быть приближенно получены по теории Ландау-де Жена. Сложнее обстоит дело со вкладом флуктуаций директора, обусловленного наличием членов $\sim q^2$ в разложении термодинамического потенциала (формула (34)). Однако этот вклад можно выделить благодаря специфической угловой зависимости, содержащей полиномы Лежандра $P_\ell(\cos\theta)$ с большими ℓ .

Из всего вышесказанного следует, что экспериментальные исследования сечения когерентного рассеяния медленных нейтронов при различных температурах позволят выяснить особенности внутренней структуры нематических жидких кристаллов.

ПРИЛОЖЕНИЕ А

В этом приложении содержатся некоторые сведения о \mathcal{D} -функциях и коэффициентах Клебша-Гордана, используемых в данной работе. Обозначения взяты из книги Варшавовича и др. [15].

\mathcal{D} -функции с целыми ℓ являются полной ортогональной системой функций углов Эйлера $\bar{\Psi} = (\alpha, \beta, \gamma)$ перехода от одной системы координат к другой.

Условие ортогональности:

$$\int \mathcal{D}_{mk}^{\ell}(\bar{\Psi}) \mathcal{D}_{m'k'}^{\ell'*}(\bar{\Psi}) d\bar{\Psi} = \frac{8\pi^2}{2\ell+1} \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'} \delta_{kk'} \quad (\text{A.1})$$

Явный вид:

$$\mathcal{D}_{mk}^{\ell}(\bar{\Psi}) = e^{im\alpha} d_{mk}^{\ell}(\beta) e^{iky} \quad (\text{A.2})$$

$$\mathcal{D}_{0k}^{\ell}(\bar{\Psi}) = \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell+1}} Y_{\ell-k}(\beta, \gamma) \quad (\text{A.3})$$

$$\mathcal{D}_{00}^{\ell}(\bar{\Psi}) = P_{\ell}(\cos \beta) \quad (\text{A.4})$$

Преобразование сферических функций при повороте системы координат:

$$Y_{\ell m}(\bar{z}) = \sum_k \mathcal{D}_{mk}^{\ell'*}(\bar{\Psi}) \tilde{Y}_{\ell k}(\bar{z}) \quad (\text{A.5})$$

Разложение произведения сферических функций:

$$Y_{\ell m}(\bar{z}) Y_{\ell' m'}(\bar{z}) = \sum_L \sqrt{\frac{(2\ell+1)(2\ell'+1)}{4\pi(2L+1)}} C_{\ell 0 \ell' 0}^{L 0} C_{\ell m \ell' m'}^{L m} Y_{L m}(\bar{z}) \quad (\text{A.6})$$

Свойства коэффициентов Клебша-Гордана:

$$C_{m e' m'}^{LM} = \delta_{m m'} C_{m e' m'}^{L m+m'} \quad (\text{A.7})$$

$$C_{m e' m'}^{L m+m'} = (-1)^{l+l'-L} C_{e-m e'-m}^{L -m -m'} \quad (\text{A.8})$$

Прикнижный список использованной литературы

1. Гуревич И.И., Тарасов Л.В. Физика нейтронов низких энергий.-
М:Наука, 1966, 324 с.
2. Динамические свойства твердых тел и жидкостей. Исследования ме-
тодом рассеяния нейтронов. Под редакцией Лавси С. и Шпрингера Т.
-- М: Мир, 1980, 491 с.
3. Niumura N. Neutron Diffraction from Nematic Liquid Crystalline
Phase and Isotropic Liquid Phase of Para-Azoxyanisole.-Mol.
Cryst. and Liquid Cryst., 1975, v.31, N 1-2, pp.123-130.
4. Kohli M., Otnes K., Pynn R., Riste P. Investigation of nematic
order by coherent neutron scattering.-Z.Phys., 1976, v.B24,
N 2, pp.147-152.
5. Rustichelli F. Neutron studies of liquid crystals. Annales
de Physique, 1978, v.3, N 2-3-4, pp.163-176.
6. De Gennes P.G. Remarques sur la diffusion des rayons X par les
fluides nématiques.-C.r.Acad.sci., 1972, v.274, N 2, pp.B142-
B144.
7. Pynn R. Calculations of neutron diffraction patterns obtained
with a nematic liquid crystal.-J.Phys.Chem.Solids, 1973, v.34,
N 4, pp.735-747.
8. Freizer M.J. Successive Transitions in a Nematic Liquid.-Mol.
Cryst. and Liquid Cryst., 1971, v.14, N 142, pp.165-182.
9. Matsushita M. On the Possibility of a Biaxial Smectic A Phase.
-Mol.Cryst. and Liquid Cryst., 1981, v.68, N 1-4, pp.1-9.

10. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. Часть I. - М: Наука, 1976, 584 с.
11. Паташинский А.З., Покровский В.Л. Флуктуационная теория фазовых переходов. - М: Наука, 1975, 256 с.
12. Покровский В.Л., Кац Е.И. К вопросу о рассеянии света нематическими жидкими кристаллами. - ЖЭТФ, 1977, т.73, вып.2(8), с.774-784.
13. Дзялошинский И.Б., Дмитриев С.Г., Кац Е.И. Силы Ван-дер-Ваальса и рассеяние света в жидких кристаллах. - ЖЭТФ, 1976, т.68, вып. 6, с.2335-2340.
14. Krigbaum W.R., Chatani Y., Barber P.G. The Crystal Structure of p-Azoxyanisole. - Acta Cryst., 1970, v.B26, N 2, pp.97-102.
15. Варшалович Д.А., Москалев А.И., Херсонский В.К. Квантовая теория углового момента. - Л: Наука, 1976, 439 с.

Рукопись поступила в ОНТИ ИГиИ
1.03.82 г.

Владимир Исифович Сугаков,
Сергей Владиславович Шияновский
(препринт КИЯИ-82-10)

Редакторы: Л.П.Малашкина,
Н.А.Солдатенко

БД 24087 ОНТИ ИЯИ Бумага офсетная Усл.-печ.л. 1.25
Изд.№ КИЯИ-82-10 Печать офсетная Уч.-изд.л. 0,8
Тип.заказ № 171 Формат бумаги 60x90/16
Подписано к печати 19.05.1982 Тираж 180 экз. Цена 6 коп.

Институт ядерных исследований АН УССР, ОНТИ
252650, ГСП, Киев-28, проспект Науки, 119

СКТБ и ЭП Института ядерных исследований АН УССР
252650, ГСП, Киев-28, проспект Науки, 119
