ГОДИШНИК НА УНИВЕРСИТЕТА ПО АРХИТЕКТУРА, СТРОИТЕЛСТВО И ГЕОДЕЗИЯ СОФИЯ

Том Volume 50 2017 Брой Issue 2

ANNUAL OF THE UNIVERSITY OF ARCHITECTURE, CIVIL ENGINEERING AND GEODESY SOFIA

*Получена: 03.04.2017 г.*
*Приета: 10.05.2017 г.*

# МЕТОД НА ФУНКЦИИТЕ НА ГРИЙН ЗА 1-СПИН НЕМАТИЧНА МЕЗОФАЗА

**А. Апостолов[1], И. Апостолова[2]**

***Ключови думи:*** *течни кристали, 1-спин нематична мезофаза, параметри на подреждане*

**РЕЗЮМЕ**

Теоретично е изследвана възможността за описание на фазов преход в 1-спин нематична мезофаза с помощта на функциите на Грийн, като е използван методът на Церковников. Изследвана е връзката между нематичния параметър на подреждане и намагнитеността, самосъгласуваното влияние между тях, както и температурната им зависимост.

## 1. Въведение

Течните кристали са специфично състояние на материята, при което веществото проявява свойства на кристално твърдо тяло и изотропна течност. Подобно на кристалите те имат анизотропни оптични, електрични, магнитни и други свойства. От друга страна, притежават много от механичните свойства на течностите: висока подвижност, липса на собствена форма, повърхностно напрежение и др. Течните кристали са молекулни кристали със следните структурни особености на градивните им единици [1]:

а) обикновено молекулите са удължени и несиметрични със средна „неогъваема“ част и подвижни краища;

б) по дължината на всяка молекула се образуват двойни връзки, определящи твърдия скелет на молекулата;

[1] Ангел Апостолов, доц. д-р, кат. „Физика“, УАСГ, бул. „Хр. Смирненски“ № 1, 1046 София, e-mail: angelapos@abv.bg

[2] Илиана Апостолова, доц. д-р, кат. „Математика и физика“, ЛТУ, бул. „Кл. Охридски“ № 10, 1756 София, e-mail: inaapos@abv.bg

в) те имат голям диамагнитен момент и са лесно поляризуеми.

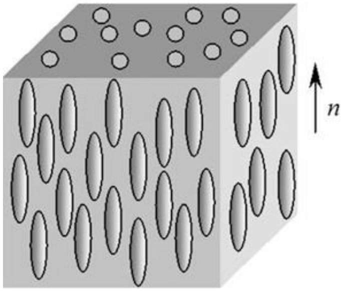
Твърдата и удължена част на молекулата е фактор за ориентационното им подреждане, докато подвижните краища правят самите молекули подвижни вътре в течния кристал, като се наблюдава хлъзгане по слоеве като в обикновена течност. Поради слабите вандерваалсови връзки енергията на ориентация в течните кристали е малка, което определя големите флуктуации в ориентирането на молекулите. Именно тези флуктуации правят средата оптично нехомогенна и причиняват силно разсейване на светлината, което води до помътняване на течните кристали (дифузно разсейване на светлината).

По отношение на физичните параметри, които определят условията за съществуване на течно-кристална фаза (мезофаза), течните кристали се делят на: термотропни (фазовият преход в мезофаза става при изменение на температурата и съществува в точно определен температурен интервал) и лиотропни (преходът в мезофазата се извършва под влияние на разтворител) [2].

Термотропните течни кристали са най-широко изучавани поради техните многобройни приложения в електрониката, оптоелектрониката и спинтрониката [3]. В зависимост от ориентационната и транслационната си подреденост те се делят на нематици (притежават само ориентационно подреждане), смектици (притежават ориентационно и транслационно подреждане по слоеве) и холестерици (имат нематична локална структура, но в по-големи мащаби молекулите им образуват спирала с определена стъпка). Доколкото обект на нашето изследване са нематичните мезофази, ще характеризираме тях по-подробно.

Нематичната фаза е най-простата и моделната представа за нея са нишки (тънки пръчици), ориентирани еднакво в течност. При тях съществува подреждане по направление, но отсъства позиционно подреждане (фиг. 1), т.е. далечен порядък [4]. Ориентирането на молекулите в нематиците лесно може да се манипулира посредством външни полета (магнитни и електрични) [5]. Това изисква изследване на влиянието на параметъра на магнитно и поляризационно подреждане върху параметъра на подреждане, описващ фазовия преход в нематичен кристал от течна хомогенна фаза.

Описанието на фазовите преходи в течни кристали от теоретична гледна точка е трудно поради това, че в повечето случаи не е известен точният вид на взаимодействията в системата. Това обикновено са класически и феноменологични модели. Onsager [6] разглежда разтвор от твърди макромолекули, които са много дълги и не могат да проникват една в друга, като предполага, че между тях съществуват само сили на отблъскване. При това предположение той доказва, че при преход от нематик към течност обемът търпи скок, т.е. имаме фазов преход от първи род. De-Gennes [7, 8] прилага феноменологичен подход, използван при описание на свойствата на феромагнетици от Ландау. Използва се моделът на твърди нишковидни молекули, които имат цилиндрична симетрия. Така функцията им на разпределение зависи само от ъгъла на „директора“ и оста на молекулата. Meier and Saupe [9] в приближение на средното (молекулярно) поле приемат, че всяка молекула се намира в поле с енергия, пропорционална на квадрата на параметъра на подреждане, характеризиращ нематичната фаза. Широко използвани са т.нар. решетъчни модели [10 – 15], в които непрекъснатото пространство се заменя с решетка от клетки. В модела, въведен от Shih and Alben [10 – 12] за описание на двуосни течни кристали се предполага че молекула заема няколко клетки като връзките между молекулите са твърди. Така се получава фазова диаграма, която съдържа две нематични едноосни фази и една двуосна фаза в допълнение към изотропна фаза. В решетъчния модел на Chen and Deutch [13] се анализира фазовата диаграма на нематичните състояния при предположение, че всяка клетка е заета само с една молекула, имаща само три възможни пространствени ориентации. Предполага се, че взаимодействието между молекулите е дългодействащо.




**Фиг. 1. Модел на нематичен течен кристал**

Физиците дискутират възможността магнитно вещество от квантово механична гледна точка да има поведение на нематичен течен кристал с оглед на приложение в спинтрониката. Това е едно забележително теоретично предположение, което дава възможност да се обяснят магнитните свойства на $LiCuVO_4$, $NiGa_2S_4$, тънки филми от $^3He$ и др. [16]. Това определя възможността да се изследва нематична мезофаза като се използва спин-вълнова теория за спин $S = 1$ като се трансформира междумолекулният потенциал на взаимодействие до този на феромагнитно вещество [17]. Спин-вълновата теория дава възможност да се определят статичните и динамични свойства на силно магнитните вещества при ниски температури, като се използва приближено представяне на спиновите оператори (например представяне на Холщайн-Примаков). Решаването на квантово-механичната проблематика в целия температурен интервал, излизайки извън метода на случайните фази (RFA), дава методът на Функциите на Грийн. Формализмът е много удобен, защото при него не се разглеждат оператори, а комплексни функции, които притежават прости аналитични свойства. Те позволяват единно решение на цялата квантово-статистическа проблематика на многочастичните системи, без да е необходимо да се развиват отделни методи. Изразите, които се получават, са в аналитичен вид и са удобни за числено програмиране [18].

Целта на настоящата статия е да се изгради самосъгласуван теоретичен модел на 1-спин нематична мезофаза с помощта на функциите на Грийн.

## 2. Модел

Разглеждаме спин-1 нематичен течен кристал, съставен от нишковидни молекули с цилиндрична симетрия. Ориентационната подреденост в този случай се характеризира с „директор“ $\vec{n}_i$ – единичен вектор, който съвпада с оста на *i*-тата молекула. Тъй като течният кристал има център на симетрия, усредняването на „директора“ по ансамбъла от всички молекули е нула ($<\vec{n}_i>=0$). Параметър на подреждане не може да бъде вектор, както при феромагнитните вещества. Той трябва да бъде от по-висок порядък – тензор от втори порядък. Това означава, че като параметър на подреждане за нематичните състояния също не може да се използва векторът на спина, който описва феромагнитното поведение на нематика. Векторът на спина $\vec{S}_i$ на *i*-тата молекула може да се въведе като „директор“. От съображения за симетрия големината на спина не може да е $S = 1/2$

при реализиране на феромагнитно подреждане в нематика [16]. Ако имаме $S = 1$ в направление $z$, компонентата на спина в това направление $S^z$ ще е равна на нула (т.е. в направление $\pm z$ спинът няма да флуктуира). Подреждането в това направление е резултат от квантово спин-нематично състояние. Така дефинираме магнитен аналог на течен кристал. Това означава, че при $S = 1$ спиновият магнитен момент може да се трансформира в нематичен „директор“ по направление на оста $z$. Параметърът на подреждане в спин-1 нематична мезофаза ще има вида:

$$Q_i^{\alpha\beta} = \frac{1}{2}\left(S_i^{\alpha} S_i^{\beta} + S_i^{\beta} S_i^{\alpha}\right) - \frac{1}{3}\delta^{\alpha\beta}\left(\vec{S}_i\right)^2, \tag{1}$$

където $\alpha, \beta = x, y, z$ и $\delta^{\alpha\beta}$ – делта функцията на Дирак.

Така дефинираният параметър на подреждане е инвариантен относно смяна на посоката на времето, т.е. $Q_i^{\alpha\beta}(t) = Q_i^{\alpha\beta}(-t)$.

Комутационните правила за спиновите оператори са:

$$\left[S_i^{\alpha}, S_j^{\beta}\right] = i\hbar\delta_{ij}\epsilon^{\alpha\beta\gamma}S_i^{\gamma}, \tag{2}$$

където $\epsilon^{\alpha\beta\gamma}$ е символът на Леви-Чевита.

Спин-нематичното състояние от теоретична гледна точка се описва с модифициран Хайзенбергов Хамилтониан с добавяне на допълнителен биквадратичен член [19 – 20]:

$$H = -\frac{1}{2}\sum\nolimits_{<i,j>} J_{ij}\vec{S}_i\vec{S}_j - \frac{1}{2}\sum\nolimits_{<i,j>} K_{ij}\left(\vec{S}_i\vec{S}_j\right)^2. \tag{3}$$

Използвайки израза за нематичния параметър на подреждане (1), Хамилтонианът придобива вида:

$$\begin{gathered} H = -zKS^2\left(S+1\right)^2 - \frac{1}{2}\sum_{<i,j>}\left(J_{ij} - \frac{\hbar^2}{2}K_{ij}\right)\vec{S}_i\vec{S}_j - \\ -\frac{1}{2}\sum\nolimits_{<i,j>} K_{ij}Q_i^{\alpha\beta}Q_j^{\alpha\beta} - \sum\nolimits_{<i,j>}\Omega_{ij}^{\alpha\beta\gamma}S_i^{\alpha}Q_j^{\gamma\beta}. \end{gathered} \tag{4}$$

Обменното взаимодействие, описващо корелацията между спиновете, е $J_{ij} > 0$, докато нематичното взаимодействие $K_{ij}$ е отрицателно и като стойност е с един порядък по-малко от $J_{ij}$. В рамките на нашите изследвания първият член на Хамилтониана (4) ще го пропускаме, защото не дава принос в динамиката на системата. Последният член в (4) определя взаимодействието между двата параметъра на подреждане, което в рамките на това изследване няма да отчитаме. Ще смятаме, че взаимодействието между $\vec{S}$ и $Q^{\alpha\beta}$ ще се отчете в комутационните съотношения.

Използвайки (1) и (2), след обемисти пресмятания получаваме следните комутационни съотношения:

$$\left[Q_i^{\alpha\beta}, S_j^{\gamma}\right] = i\hbar\delta_{ij}\Gamma^{\alpha\beta\gamma\mu\nu}Q_i^{\mu\nu}, \tag{5}$$

където $\Gamma^{\alpha\beta\gamma\mu\nu} = \epsilon^{\alpha\gamma\nu}\delta^{\beta\mu} + \epsilon^{\beta\gamma\nu}\delta^{\alpha\mu}$;

$$\left[Q_i^{\alpha\beta}, Q_j^{\mu\nu}\right] = i\hbar^3\delta_{ij}\Lambda^{\alpha\beta\mu\nu\gamma}S_i^{\gamma}, \qquad (6)$$

където $\Lambda^{\alpha\beta\mu\nu\gamma} = \frac{1}{4}\left(\epsilon^{\alpha\mu\gamma}\delta^{\beta\nu} + \epsilon^{\alpha\nu\gamma}\delta^{\beta\mu} + \epsilon^{\beta\mu\gamma}\delta^{\alpha\nu} + \epsilon^{\beta\nu\gamma}\delta^{\alpha\mu}\right)$.

## 3. Метод и пресмятания

За теоретичните пресмятания използваме метода на двувременните температурни функции на Грийн. Този метод намира широко приложение в изследване на много-частичните комплексни системи, чиито обособени подсистеми интензивно си влияят. Това води до възникване на нелинейни взаимодействия, в които липсва малък параметър.

Дефинираме ретардиращи функции на Грийн за спиновата и нематичната под-системи:

$$G_{ij}^{\alpha\beta}(t-t') = \ll S_i^{\alpha}(t); S_j^{\beta}(t') \gg; \quad D_{ij}^{\alpha\beta\mu\nu}(t-t') = \ll Q_i^{\alpha\beta}(t); Q_j^{\mu\nu}(t') \gg. \qquad (7)$$

За да пресметнем функциите на Грийн, трябва да пресметнем уравнението за движение $i\hbar\frac{\partial A}{\partial t} = [A; H]$ за операторите $S_i^{\alpha}$ и $Q_i^{\alpha\beta}$. Използвайки комутационните равен-ства за магнитните и нематичните параметри на подреждане (2), (5) и (6), получаваме:

$$i\hbar\frac{\partial Q_r^{\alpha\beta}}{\partial t} = -i\hbar\sum_{j(r)}\left(J_{rj} - \frac{\hbar^2}{2}K_{rj}\right)\Gamma^{\alpha\beta\gamma\mu\nu}Q_r^{\mu\nu}S_j^{\gamma} - i\hbar^3\sum_{j(r)}K_{rj}\Lambda^{\alpha\beta\mu\nu\gamma}S_i^{\gamma}Q_j^{\mu\nu}, \qquad (8)$$

$$i\hbar\frac{\partial S_r^{\alpha}}{\partial t} = -i\hbar\sum_{j(r)}\left(J_{rj} - \frac{\hbar^2}{2}K_{rj}\right)\epsilon^{\alpha\beta\gamma}S_r^{\beta}S_j^{\gamma} - i\hbar^3\sum_{j(r)}K_{rj}\Gamma^{\mu\nu\alpha\gamma\rho}Q_i^{\gamma\rho}Q_j^{\mu\nu}. \qquad (9)$$

Както споменахме по-горе, от последните две уравнения се вижда в експлицитен вид, че магнитният и нематичният параметър на подреждане за сдвоени. От уравненията за движения (8) и (9) е ясно, че за получаване на дефинираните функциите на Грийн (7) и динамичните характеристики на 1-спин нематичната мезофаза е необходимо да се пресметнат следните корелационни функции: $< Q_r^{\mu\nu}S_j^{\gamma} >$; $< S_i^{\gamma}Q_j^{\mu\nu} >$; $< S_r^{\beta}S_j^{\gamma} >$ и $< Q_i^{\gamma\rho}Q_j^{\mu\nu} >$. Това налага да дефинираме матрична Грийнова функция както следва:

$$\begin{pmatrix} \ll S_r^{\alpha}(t); S_s^{\beta}(t') \gg & \ll S_r^{\alpha}(t); Q_s^{\mu\nu}(t') \gg \\ \ll Q_r^{\alpha\beta}(t); S_s^{\gamma}(t') \gg & \ll Q_r^{\alpha\beta}(t); Q_s^{\mu\nu}(t') \gg \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} G_{sr}^{\alpha\beta}(t-t') & A_{sr}^{\alpha\mu\nu}(t-t') \\ B_{sr}^{\alpha\beta\gamma}(t-t') & D_{sr}^{\alpha\beta\mu\nu}(t-t') \end{pmatrix}. \qquad (10)$$

Използвайки стандартната процедура за разцепване на висшите функции на Грийн получаваме система от уравнения за пресмятане на функциите на Грийн:

$$\begin{aligned}
&R_1^{\alpha\gamma}(q,\omega)G^{\gamma\beta}(q,\omega)+P_1^{\alpha\gamma\rho}(q,\omega)B^{\gamma\rho\beta}(q,\omega)=\epsilon^{\alpha\beta\gamma}<S^{\gamma}>;\\
&P_2^{\alpha\beta\gamma\rho}(q,\omega)B^{\rho\gamma\beta}(q,\omega)+R_2^{\alpha\beta\gamma}(q,\omega)G^{\gamma\beta}(q,\omega)=\Gamma^{\alpha\beta\gamma\mu\nu}<Q^{\mu\nu}>,
\end{aligned}\tag{11}$$

където:

$$R_1^{\alpha\gamma}(q,\omega)=-i\omega\delta^{\alpha\gamma}+\epsilon^{\alpha\beta\gamma}<S^{\gamma}>\left[\tilde{J}(q)-\tilde{J}(0)\right];$$

$$P_1^{\alpha\gamma\rho}(q,\omega)=-<Q^{\mu\nu}>\left[\Gamma^{\alpha\gamma\rho\mu\nu}K(q)+\Gamma^{\mu\nu\alpha\gamma\rho}K(0)\right];$$

$$P_2^{\alpha\beta\gamma\rho}(q,\omega)=-i\omega\delta^{\alpha\gamma}\delta^{\beta\rho}+<S^{\mu}>\left[\Gamma^{\alpha\beta\mu\gamma\rho}\tilde{J}(0)+\hbar^2K(q)\Lambda^{\alpha\beta\gamma\rho\mu}\right];$$

$$R_2^{\alpha\beta\gamma}(q,\omega)=<Q^{\mu\nu}>\left[\Gamma^{\alpha\beta\gamma\mu\nu}\tilde{J}(q)+\hbar^2K(0)\Lambda^{\alpha\beta\mu\nu\gamma}\right];\tag{12}$$

$$\text{с}\quad \tilde{j}(q)=J(q)-\hbar^2K(q).$$

Аналогично за функциите на Грийн $A_{sr}^{\alpha\mu\nu}(q,\omega)$ и $D_{sr}^{\alpha\beta\mu\nu}(q,\omega)$ получаваме следната система от уравнения:

$$\begin{aligned}
&R_4^{\alpha\gamma}(q,\omega)A^{\gamma\mu\nu}(q,\omega)+P_4^{\alpha\gamma\rho}(q,\omega)D^{\gamma\rho\mu\nu}(q,\omega)=-\Gamma^{\alpha\beta\gamma\mu\nu}<Q^{\mu\nu}>;\\
&R_3^{\alpha\beta\gamma\rho}(q,\omega)D^{\rho\gamma\mu\nu}(q,\omega)+P_3^{\alpha\beta\gamma}(q,\omega)A^{\gamma\mu\nu}(q,\omega)=\hbar^2\Lambda^{\alpha\beta\gamma\mu\nu}<S^{\gamma}>,
\end{aligned}\tag{13}$$

където

$$\begin{aligned}
&R_3^{\alpha\beta\gamma\rho}(q,\omega)=P_2^{\alpha\beta\gamma\rho}(q,\omega);\quad P_3^{\alpha\beta\gamma}(q,\omega)=R_2^{\alpha\beta\gamma}(q,\omega);\\
&R_4^{\alpha\gamma}(q,\omega)=R_1^{\alpha\gamma}(q,\omega)\ \text{ и }\ P_4^{\alpha\gamma\rho}(q,\omega)=P_1^{\alpha\gamma\rho}(q,\omega).
\end{aligned}\tag{14}$$

Ако нематичната константа на взаимодействие $K=0$, би трябвало да се реализира чиста магнитна фаза. При $K=0$ уравнението за движение на Функцията на Грийн се опростява и придобива вида:

$$R_1^{\alpha\gamma}(q,\omega)G^{\gamma\beta}(q,\omega)=\epsilon^{\alpha\beta\gamma}<S^{\gamma}>.\tag{15}$$

Ако предположим магнитно подреждане по оста $z$, т.е. $<S^z>\neq 0$, то за Грийновата функция имаме

$$G(q,\omega)=\frac{<S^z>}{\omega-\varepsilon(q)}\begin{pmatrix}\varepsilon(q) & i\omega & 0\\ i\omega & \varepsilon(q) & 0\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}.\tag{16}$$

С известния израз за спин-вълновата енергия $\varepsilon(q)=<S^z>\left[J(0)-J(q)\right]$ и ако въведем спиновите оператори: $S^{\pm}=S^x\pm iS^y$, получаваме добре позната функция на Грийн [18]:

$$\ll S^{+};S^{-} \gg_{q,\omega} = \frac{2 < S^{z} >}{\omega - \varepsilon(q)}. \tag{17}$$

В по нататъшните наши пресмятания ние ще смятаме, че за 1-спин нематичната фаза отлични от нула са само диагоналните части на нематичния параметър на подреждане (от съображения за симетрия за всички точкови групи на симетрия от $C_2$ нагоре това е вярно). В матричен вид диагоналният нематичен параметър на подреждане може да се запише както следва:

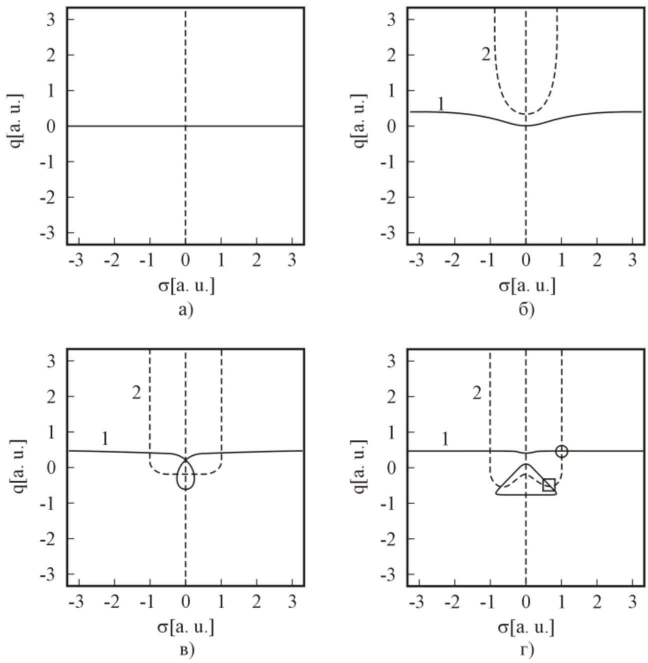
$$< Q^{\alpha\beta} > = \begin{pmatrix} -\frac{q}{2} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{q}{2} & 0 \\ 0 & 0 & q \end{pmatrix}, \tag{18}$$

където $q = < Q^{zz} > = -2 < Q^{xx} > = -2 < Q^{yy} >$ е неизвестният нематичен параметър на подреждане. Нека въведем следните означения: $\sigma = < S^{z} >$ и $z$ – брой на най-близките съседи (координационното число).

Процедурата за пресмятане на параметрите на подреждане $q$ и $\sigma$ поради взаимното им влияние става самосъгласувано в следната последователност:

1. От (11) и (13) пресмятаме следните функции на Грийн $G^{\gamma\beta}(q,\omega)$ и $D^{\gamma\rho\mu\nu}(q,\omega)$.
2. От полюсите на така пресметнатите функции на Грийн определяме енергията на елементарните спин-нематични възбуждания.
3. Използвайки спектралната теорема [18], определяме корелационните функции, които ни дават възможност за пресмятане на $q$ и $\sigma$.
4. Пресмятанията се извършват числено при вземане под внимание на смесените корелационни функции $< S^{\gamma} Q^{\mu\nu} >$ и $< Q^{\mu\nu} S^{\gamma} >$.

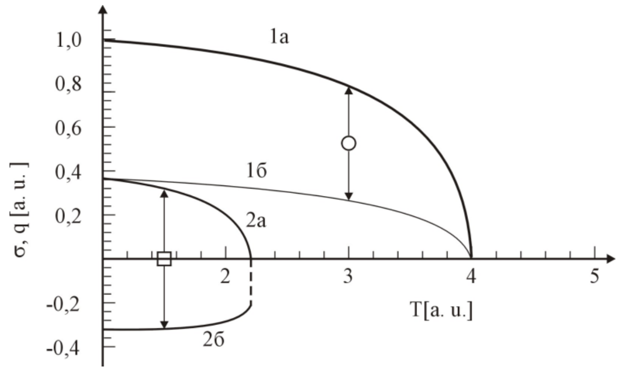
Ако работим в приближение на средното поле за $q$ и $\sigma$, получаваме следните аналитични изрази: $\sigma = -\hbar \dfrac{2Sinh(\beta a)}{2Cosh(\beta a) + e^{-\frac{3\beta b}{2}}}$; $= \dfrac{\hbar^2}{3} \dfrac{2Cosh(\beta a) - 2e^{-\frac{3\beta b}{2}}}{2Cosh(\beta a) + e^{-\frac{3\beta b}{2}}}$, където $\beta = \dfrac{1}{k_B T}$, като $k_B$ – константата на Болцман и $T$ – температурата на Келвин. Изразите за $q$ и $\sigma$ съвпадат с намерените изрази при използване на метода на статистическите суми (матрицата на плътността) [16].




**Фиг. 2. Зависимостта на $q = q(\sigma)$ – пунктираните криви и $\sigma = \sigma(q)$ – непрекъснати криви за различни стойности на $\beta$ :**
**а) $\beta = 0$ ; б) $\beta = 0,2$ ; в) $\beta = 0,5$ и г) $\beta = 1,0$**

Използвайки гореописаната процедура за самосъгласувано пресмятане на параметрите на подреждане, са пресметнати числено зависимостта на нематичния параметър на подреждане като функция на магнитния и обратно, за фиксирани стойности на $\beta$. Пресмятанията са извършени при следните моделни параметри на ($\tilde{j} = 1$; $K = -0,1$; $z = 6$). Получените резултати са представени на фиг. 2. С увеличаване на стойността на $\beta$, т.е. с намаляване на температурата, взаимното влияние на двата параметъра на подреждане нараства. Намагнитеността, като вътрешно молекулярно поле, влияе върху подреждането на молекулите в течния кристал и обратно (фиг. 2). При много високи температури $\beta \to 0$ (фиг. 2а) топлинните флуктуации възпрепятстват каквато и да била корелация между двата параметъра на подреждане: фазов преход от изотропна течност към течен кристал не се наблюдава. С понижаване на температурата подсистемите започват да „чувстват" своето взаимно влияние, както е видно подреждането на нишковидните молекули е по-чувствително към поява на спинова корелация (фиг. 2б). Все още топлинните флуктуации възпрепятстват появата както на нематична фаза, така и на намагнитеност (минимумите на кривите са при $q = 0$ и $\sigma = 0$). Във фиг. 2в и фиг. 2г се проявяват състояния в едновременно отлични от нула параметри на подреждане. Поява на геб в зависимостта на $q = q(\sigma)$ определя фазов преход от първи род (фиг. 1г – пунктираната крива). Появата на двуямен потенциал в зависимостта на $\sigma = \sigma(q)$ при достатъчно ниски температури определя поява на спонтанна намагнитеност (фиг. 2г – непрекъсната линия). Това именно дава възможност да се описват мултифероични състояния от II род.

За две фиксирани състояния за стойностите на параметрите на подреждане, обозначени с кръг (○) и квадрат (□) на фиг. 2г числено е пресметната температурната зависимост на $q$ и $\sigma$ и е представена на фиг. 3. В нематичната фаза предложената процедура за пресмятане може да описва фазови преходи както от първи род, така и от втори род. Доколкото ние не разглеждаме определена система, всички стойности на променливите са дадени в относителни единици.




**Фиг. 3. Температурна зависимост на $q$ криви 1б и 2б и $\sigma$ криви 1а и 2а, съответстващи на параметри на подреждане от фиг. 1г. За означените с кръг (○) съответстват кривите 1а и 1б и за означения с квадрат (□) 2а и 2б**

## 4. Заключение

Използвайки метода на функциите на Грийн, сме разработили самосъгласувана процедура за определяне на статичните и динамичните свойства на 1-спин нематична мезофаза. На базата на уравненията за движение на операторите на параметрите на подреждане в нематичния течен кристал дефинираме матрична Грийнова функция. Получените резултати са извън метода на случайните фази (RPA) с отчитане на корелационните функции $< Q_r^{\mu\nu} S_j^{\gamma} >$; $< S_i^{\gamma} Q_j^{\mu\nu} >$. Привеждайки получените резултати към приближението на средното (молекулярното) поле (MFA) установяваме, че получените теоретични резултати съвпадат с резултатите, получени в [16]. Пренебрегвайки нематичното взаимодействие $K = 0$ виждаме, че получените резултати се свеждат до спин-вълновия модел за феромагнитно състояние. Анализът на числените пресмятания показва възможност за описание на спин-нематични състояния. На базата на достъпната за авторите литература, методът на функциите на Грийн за описание на тази система се прилага за първи път.

**ЛИТЕРАТУРА**

1. *Лалов, И., Дечева, В.* Физика на кондензираната материя. Университетско издателство „Св. Климент Охридски“, София (2005).

2. *Апостолов, А.* Физика на кондензираната материя. Университетско издателство „Св. Климент Охридски“, София (2000).

3. *Khoo, I.* Liquid Crystals. 2th edition, Hoboken : John Wiley & Sons, Inc. (2007).

4. *Warner, M., Terentjev, E.* Liquid Crystal Elastomers. Oxford : Clarendon Press, (2003).
5. *Skaĉej, G., Zannoni, C.* Eur. Phys. Jour. E., **20**, 289 (2006).
6. *Onsager, L.* Ann. NY Acad. Sci. **51**, 627 (1949).
7. *De Gennes, P. G.* Mol. Cryst. Liq. Cryst. **12**, 193 (1971).
8. *De Gennes, P. G.* Phys. Lett. A **30**, 453 (1969).
9. *Meier, G., Saupe, A.* Mol. Cryst. Liq. Cryst. **1**, 515(1966).
10. *Shih, C. S., Alben, R.* J. Chem. Phys. **57**, 3055 (1972).
11. *Alben, R.* Phys. Rev. Lett. **30**, 778 (1973).
12. *Alben, R.* J. Chem. Phys. **59**, 4299 (1973).
13. *Chen, Z.-Y., Deutch, J. M.* J. Chem. Phys. **80**, 2151 (1984).
14. *Caflisch, R. G., Chen, Z.-Y., Berker, N., Deutch, J. M.* Phys. Rev. A **30**, 2562 (1984).
15. *Biscarini, F., Chiccoli, C., Pasini, P., Semeria, F., Zannoni, C.* Phys. Rev. Lett. **75**, 1803 (1995).
16. *Smereld, A.* Doctoral Thesis. University of Bristol, UK, DOI: 10.1007/978-3-319-00434-1 (2013).
17. *LIU Jian-Jun, LIU Xiao-Jing, SHEN Man, YANG Guo-Chen*. Commun. Theor. Phys. **42**, 453–458 (2004).
18. *Tyiablikov, S. V.* Methods in thr Quantum Theory of Magnetism. ISBN: 978-1-4899-2091-6 Springer (1967).
19. *Blume, N., Hsieh, Y.* J. Appl. Phys**. 40,** 1249 (1969).
20. *Chen, H., Levy, P.* Phys. Rev. Lett. **27,** 1383 (1971).

# GREEN'S FUNCTIONS TECHNIQUE FOR 1-SPIN NEMATIC METAPHASE

**A. Apostolov[1], I. Apostolova[2]**

***Keywords:*** *liquid crystals, 1-spin nematic metaphase, parameters of arrangement*

## ABSTRACT

This short document can be considered an example of an article that will help authors in preparing their manuscripts. The possibility to describe the phase transition for the 1-spin nematic liquid crystal by means of the Green's functions on the basis of the method proposed by Tserkovnikov is theoretically investigated. The relationship between the nematic order parameter and magnetization, as well as the self-consistent influence between them and their temperature dependence is studied.

[1] Angel Apostolov, Assoc. Prof. Dr., Dept. "Physics", UACEG, 1 H. Smirnenski Blvd., Sofia 1046, e-mail: angelapos@abv.bg
[2] Iliana Apostolova, Assoc. Prof. Dr., Dept. "Mathematics and Physics", University of Forestry, 10 Kl. Ohridsky Blvd., Sofia 1756, e-mail: inaapos@abv.bg