

文章编号:1007-2780(2016)08-0740-08

对向列相液晶反转壁中+1 缺陷处挠曲电效应的理论分析

张 辉^{1, 2}, 郑桂丽³, 田 毅³, 张志东^{3 *}

- (1. 河北工业大学 电子信息工程学院, 天津 300401;
2. 天津市电子材料与器件重点实验室, 天津 300401;
3. 河北工业大学 理学院, 天津 300401)

摘要:基于 Pramoda Kumar 等人文章中关于向列相液晶反转壁中+1 缺陷处挠曲电效应的实验现象,我们利用 Landau-de Gennes 理论给出相应的理论分析。当对弱锚定的平行排列向列相液晶盒施加垂直基板的直流电压,在反转壁中的±1缺陷会发生旋转。对于其中的+1 缺陷,我们给出了外加电场作用下液晶分子的自由能表达式并通过模拟描述指向矢的方位角和极角的变化情况给出相应的缺陷处电场驱动的结构变化。模拟结果给出的挠曲电效应引起的方位角的变化角度与 Pramoda Kumar 等人的实验得到的在+1 缺陷处消光刷的变化情况是一致的。

关 键 词:液晶;挠曲电效应;+1 缺陷;Landau-de Gennes 理论

中图分类号:O753+.2 **文献标识码:**A **doi:**10.3788/YJYXS20163108.0740

Theoretical analysis of the influence of flexoelectric effect on the +1 defect site in nematic inversion walls

ZHANG Hui^{1,2}, ZHENG Gui-li³, TIAN Yi³, ZHANG Zhi-dong^{3*}

- (1. *School of Electronical and Information Engineering, Hebei University of Technology, Tianjin 300401, China;*
2. *Tianjin Key Laboratory of Electronic Materials and Devices, Tianjin 300401, China;*
3. *School of Sciences, Hebei University of Technology, Tianjin 300401, China)*

Abstract: Based on the experimental phenomena of flexoelectric response at defect sites in nematic inversion walls conducted by Pramoda Kumar *et al.*, we gave the theoretical analysis using the Landau-de Gennes theory. When a direct-current electric field normal to the plane of substrate is applied to the

收稿日期:2016-03-25;**修订日期:**2016-05-11.

基金项目:国家自然科学基金(No. 11374087, No. 11304074);河北省自然科学基金(No. A2014202123, No. A2016202282);河北省教育厅项目(No. QN2014130, No. QN2015260);河北省高校重点学科资助
Supported by National Natural Science Foundation of China (No.11374087, No.11304074); Natural Science Foundation of Hebei Province (No. A2014202123, No. A2016202282); Research Project of Hebei Education Department (No. QN2014130, No. QN2015260); Key Subject Construction Project of Hebei Province University

* 通信联系人, E-mail: zhidong_zhang1961@163.com

parallel aligned nematic liquid crystal cell with weak anchoring, the rotation of ± 1 defects in the narrow inversion walls can be exhibited. The free energy of liquid crystal molecules around the $+1$ defect site was formulated and the electric field driven structural changes at the defect site characterized by polar and azimuthal angles of the local director were simulated. The results reveal that the deviation of azimuthal angle induced by flexoelectric effect are consistent with the switching of extinction brushes at the $+1$ defect obtained in the experiment conducted by Pramoda Kumar *et al.*

Key words: liquid crystal; flexoelectric effect; ± 1 defect; Frank theory

1 引 言

具有永久偶极矩的楔形或香蕉形向列相液晶分子在发生展曲或弯曲形变时会产生极化现象,反过来这种极化与电场相互作用对液晶分子形变亦产生影响。这是一种类似于固体中的压电效应的分子形变与电场之间的线性耦合,在液晶中称为挠曲电效应^[1-2]。1969 年, Meyer R B^[3]首次对挠曲电效应进行了理论解释。在液晶领域,对于挠曲电效应的研究一直是一个热点方向。最近在这一方面的研究主要集中在该效应对手性向列相液晶材料介电常数的贡献^[4-5],挠曲电系数的研究^[6-8],在手性液晶中稳定蓝相^[9]以及对向列相液晶反转壁中缺陷的挠曲电响应^[10]。特别是 Pramoda Kumar 等人研究了直流电场对弱锚定平行液晶盒反转壁中+1 和-1缺陷的诱导结构变形^[10]。

对于凝聚态物质,连续对称性的破坏就会在物质内部产生拓扑缺陷。所以说,液晶中的缺陷也是一种拓扑缺陷。通常情况下,单轴向列相液晶中观测到的缺陷为强度 $S = \pm 1$ 的点向错以及 $S = \pm 1/2$ 的线向错^[11-12]。在弱锚定边界条件的平行排列液晶盒中会出现一些窄的反转壁,反转壁中会包含一些垂直于液晶盒基板的线性缺陷^[13]。2006 年, Pramoda Kumar 等人^[10]将向列相液晶 BEPC 灌注于弱锚定边界条件平行排列液晶盒中。将这种液晶盒放到正交偏振的偏光显微镜下观察发现在反转壁中存在强度为 ± 1 缺陷。当对液晶盒的上下基板加直流电场作用时,+1 缺陷的消光刷会出现顺时针方向或逆时针方向的旋转,这个旋转方向依赖于外加电场的方向,并且旋转的程度与外加电场的大小呈线性关系。这一现象体现了液晶中

的挠曲电效应。

本文基于 Pramoda Kumar 等人关于向列相液晶反转壁中+1 缺陷处挠曲电效应的实验现象,利用 Landau-de Gennes 理论给出相应的理论分析。针对实验中的+1 缺陷,我们给出了外加电场作用下液晶分子的自由能表达式并通过模拟描述指向矢的方位角和极角的变化情况给出相应缺陷处电场驱动的结构变化。模拟结果给出的挠曲电效应引起的方位角的变化角度与 Pramoda Kumar 等人的实验得到的在+1 缺陷处消光刷的变化情况基本是一致的。

2 理论模型

如图 1 所示,液晶盒的两个基板和反转壁的缺陷之间构成了圆柱状的区域,圆柱的 z 轴方向垂直于液晶盒的基板,其中 R 是缺陷区域的半径, h 是液晶层的厚度。对于+1 缺陷,实验上沿 z 轴施加直流电压时圆柱区域绕 z 轴旋转任意角度+1 缺陷核周围的指向矢都不会发生变化^[10],所以可以认为该指向矢分布只是 r 的函数,指向矢具有轴对称性。对液晶盒施加垂直于液晶盒基板方向的直流电场,即 $E = E_z$ 。根据 Ryschenkow G 等人的研究描述^[14],当样品满足

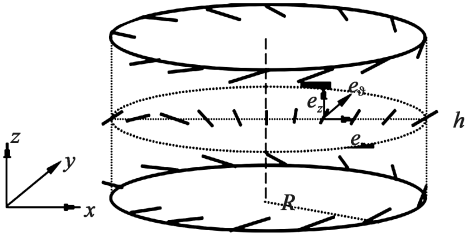


图 1 向列相薄层缺陷点中指向矢的分布示意图
Fig.1 Profile of the director of defect site in a nematic thin film

条件 $h < b$ (b 是外推长度) 时典型的缺陷才容易出现, 所以液晶层样品很薄。这样 +1 缺陷周围的指向矢在 z 轴方向的波动很小, 可以进行 $\partial/\partial z \approx 0$ 的近似。

对于柱坐标系 (r, ϑ, z) , 坐标系的基矢为 $(\mathbf{e}_r, \mathbf{e}_\vartheta, \mathbf{e}_z)$ 。在沿 z 轴正向的外加电场的作用下, 圆环形的缺陷核周围的指向矢在 r - ϑ 平面内的投影旋转了一个角度, 记为 θ_1 角, 指向矢与 z 轴的夹角记为 ϕ , 在柱坐标系下指向矢可以写成 $\mathbf{n} = -\sin\phi\sin\theta_1\mathbf{e}_r + \sin\phi\cos\theta_1\mathbf{e}_\vartheta + \cos\phi\mathbf{e}_z$ 。上下表面壁处易取向的极角为 $\phi_s(r) := \phi_0(r)$ 。

根据 Landau-de Gennes 理论, 三维空间中液晶分子的有序程度可用序参数张量 Q 来表示。在主系中, 序参数张量可以写为:

$$Q = \sum_{i=1}^3 \lambda_i \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_i, \quad (1)$$

其中: λ_i 和 $\mathbf{e}_i$ 分别为 Q 的第 i 个本征值和本征矢。 Q 是对称无迹张量, 满足 $\text{tr}(Q) = 0$ 。各向同性相中, Q 为零张量。当系统处于单轴态时, Q 的两个本征值相等, 可以表示为

$$Q = S \left(\mathbf{n} \otimes \mathbf{n} - \frac{1}{3} \mathbf{I} \right), \quad (2)$$

其中: S 为单轴向列相序参数, $\mathbf{I}$ 是单位张量。当 Q 的所有本征值都不相等时, 系统处于双轴状态。双轴性大小通过双轴性参数 β^2 确定

$$\beta^2 = 1 - \frac{6 [\text{tr}(Q^3)]^2}{[\text{tr}(Q^2)]^3}, \quad (3)$$

β^2 取值在 $[0, 1]$ 之间。当 $\beta^2 = 0$ 时, 系统处于单轴态, 当 $\beta^2 = 1$ 时, 系统的双轴性最大。

有外加电场时, 体积为 V 边界为 s 的液晶体系的 Landau-de Gennes 总自由能表示为

$$F[Q] = \int_V (f_{\text{bulk}} + f_{\text{elastic}} + f_{\text{electric}} + f_{\text{flexo}}) dV + \int_s f_{\text{surface}} ds, \quad (4)$$

其中: f_{bulk} 为本体自由能密度, 只依赖于序参数张量, 不依赖于其空间变化率, 其具体表达式为

$$f_{\text{bulk}} = \frac{A}{2} \text{tr}(Q^2) - \frac{B}{3} \text{tr}(Q^3) + \frac{C}{4} (\text{tr}(Q^2))^2, \quad (5)$$

其中: $A = A_0(T - T^*)$, B, C 为正的常数, A_0 为正的常数, T^* 为最低过冷温度。 f_{elastic} 为液

晶取向序的不均匀引起的弹性自由能密度, 依赖于序参数张量 Q 的空间变化率, 若只考虑到 Q 及导数的二次项, 弹性自由能密度可以表示为^[15]

$$f_{\text{elastic}} = \frac{1}{2} L_1 Q_{ij,k} Q_{ij,k} + \frac{1}{2} L_2 Q_{ij,j} Q_{ik,k} + \frac{1}{2} L_3 Q_{lk} Q_{ij,i} Q_{ij,k}, \quad (6)$$

其中: $Q_{ij,k} = \frac{\partial Q_{ij}}{\partial x_k}$, L_i 与展曲 K_{11} , 扭曲 K_{22} 和弯曲 K_{33} 弹性常数之间存在联系。在单一弹性常数近似下, 即 $K_{11} = K_{22} = K_{33}$, 有 $L = L_1 = K/2S^2$, $L_2 = L_3 = 0$, 因此

$$f_{\text{elastic}} = \frac{1}{2} L |\nabla Q|^2 = \frac{1}{2} L Q_{ij,k} Q_{ij,k}. \quad (7)$$

电场引起的自由能密度^[15]

$$f_{\text{electric}} = -\frac{\epsilon_0}{2} [\epsilon_i |\nabla U|^2 + \epsilon_a \nabla U \cdot Q \nabla U], \quad (8)$$

这里的 ϵ_i 和 ϵ_a 为各向同性和各向异性的介电常数, U 为电势; 挠曲电引起的极化能密度^[16]

$$f_{\text{flexo}} = -\xi_1 E_i Q_{ij,j} - \xi_2 E_i Q_{ij} Q_{jk,k}, \quad (9)$$

这里的 $\xi_1 = (e_1 + 2e_3)/3S_{\text{eq}}$, $\xi_2 = (e_1 - e_3)/S_{\text{eq}}^2$, 其中 e_1 和 e_3 分别表示展曲形变和弯曲形变的挠曲电系数, 且 $S_{\text{eq}} = B[1 + (1 - 24AC/B^2)^{1/2}]$, E_i 为电场分量; 表面自由能密度^[17]

$$f_{\text{surface}} = \frac{W}{2} \text{tr}(Q - Q_s)^2, \quad (10)$$

这里的 W 为锚泊强度系数, Q_s 为基板处的单轴相序参数张量。

对于圆环形 +1 缺陷, 缺陷核周围的指向矢绕着 z 轴旋转任意角度而不变, 即与 ϑ 无关, 因此 $Q_{ij} = (i, j = 1, 2, 3)$ 只是 r 的函数。令

$$\tilde{f} \equiv f/[B^4/(4C)^3], \quad \tilde{Q}_{ij} \equiv Q_{ij}/q_0,$$

$$\tilde{r} \equiv r/\xi_0, \quad \tilde{z} \equiv z/\xi_0, \quad \tilde{h} \equiv h/\xi_0, \quad \tilde{r} \equiv R/\xi_0.$$

对体系进行无量纲约化处理, 其中 $q_0 = B/4C$ 为最高过热温度时的序参数, $\xi_0 = (L_1/Bq_0)^{1/2} = (4CL_1/B^2)^{1/2}$ 为相干长度, 则约化了的式(5)、(7)、(9)及(10)写为

$$\tilde{f}_{\text{bulk}} = \frac{\tilde{A}}{12} \text{tr} \tilde{Q}^2 - \frac{1}{3} \text{tr} \tilde{Q}^3 + \frac{1}{16} (\text{tr} \tilde{Q}^2)^2, \quad (11)$$

$$\tilde{f}_{\text{elastic}} = \frac{1}{2} \left[\tilde{Q}_{11, \tilde{r}}^2 + \tilde{Q}_{22, \tilde{r}}^2 + \tilde{Q}_{33, \tilde{r}}^2 + 2\tilde{Q}_{12, \tilde{r}}^2 + 2\tilde{Q}_{13, \tilde{r}}^2 + 2\tilde{Q}_{23, \tilde{r}}^2 + \frac{2}{\tilde{r}^2} (\tilde{Q}_{11}^2 + \tilde{Q}_{22}^2 + 4\tilde{Q}_{12}^2 + \tilde{Q}_{13}^2 + \tilde{Q}_{23}^2 - 2\tilde{Q}_{11}\tilde{Q}_{22}) \right], \quad (12)$$

$$\tilde{f}_{\text{flexo}} = -\tilde{\xi}_1 \tilde{E}_z \left(\frac{\partial \tilde{Q}_{13}}{\partial \tilde{r}} + \frac{\tilde{Q}_{13}}{\tilde{r}} \right) - \tilde{\xi}_2 \tilde{E}_z \left(\tilde{Q}_{13} \frac{\partial \tilde{Q}_{11}}{\partial \tilde{r}} + \tilde{Q}_{13} \frac{\tilde{Q}_{11}}{\tilde{r}} - \tilde{Q}_{13} \frac{\tilde{Q}_{22}}{\tilde{r}} + \tilde{Q}_{23} \frac{\partial \tilde{Q}_{12}}{\partial \tilde{r}} + 2\tilde{Q}_{23} \frac{\tilde{Q}_{12}}{\tilde{r}} + \tilde{Q}_{33} \frac{\partial \tilde{Q}_{13}}{\partial \tilde{r}} + \tilde{Q}_{33} \frac{\tilde{Q}_{13}}{\tilde{r}} \right), \quad (13)$$

$$\tilde{f}_{\text{surface}}^{(e)} = \frac{1}{2} \tilde{W}^{(e)} \tilde{\xi}_0 \text{tr} (\tilde{Q} - \tilde{Q}_s)^2, \quad (14)$$

其中: $\tilde{A} = 24AC/B^2$, $\tilde{\xi}_1 = \xi_1 E_0 / B q_0^2 \xi_0$, $\tilde{\xi}_2 = \xi_2 E_0 / B q_0 \xi_0$, $\tilde{E}_z = E_z / E_0 = E / E_0$, $\tilde{W}^{(e)} = W^{(e)} / q_0 B \xi_0$ 都为约化量。因为上下表面处易取向相同,有 $\tilde{W}^{(e)} = (\tilde{W}^{(l)} + \tilde{W}^{(u)}) / 2$, 其中上标 $z = l, u$ 分别代表下表面和上表面。

所以,约化后的总自由能为

$$\tilde{F}[\tilde{Q}_{ij}, \tilde{Q}_{ij, \tilde{r}}, \tilde{Q}_{sij}] =$$

$$\int_0^R \left[\tilde{f}_{\text{bulk}} + \tilde{f}_{\text{elastic}} + \tilde{f}_{\text{flexo}} + \frac{2}{\tilde{\xi}_0 h} \tilde{f}_{\text{surface}}^{(e)} \right] 2\pi \tilde{h} \tilde{r} d\tilde{r}, \quad (15)$$

令 $\tilde{f} = \tilde{f}_{\text{bulk}} + \tilde{f}_{\text{elastic}} + \tilde{f}_{\text{flexo}} + \frac{2}{\tilde{\xi}_0 h} \tilde{f}_{\text{surface}}^{(e)}$, 利用泛函

的约束变分得到该体系约化后的平衡态方程

$$\frac{\partial \tilde{f}}{\partial \tilde{Q}_{ij}} - \frac{\partial}{\partial \tilde{r}} \left[\frac{\partial \tilde{f}}{\partial \tilde{Q}_{ij, \tilde{r}}} \right] - \frac{1}{\tilde{r}} \frac{\partial \tilde{f}}{\partial \tilde{Q}_{ij, \tilde{r}}} + \frac{1}{3} \text{tr} \tilde{Q}^2 \delta_{ij} = 0, \quad (16)$$

进而可以写出约化平衡态方程的具体形式。

3 模拟结果

根据^[18-19],平衡态方程的演化可由如下的动力学方程来描述

$$\frac{\partial \tilde{Q}}{\partial t} = \Gamma \left[-\frac{\delta \tilde{f}}{\delta \tilde{Q}} + \frac{1}{3} \text{tr} \left(\frac{\delta \tilde{f}}{\delta \tilde{Q}} \right) \mathbf{I} \right], \quad (17)$$

这里的参数 $\Gamma = 6D^* / [1 - 3\text{tr}(\tilde{Q}^2)]^2$ 。约化了的动力学方程为

$$\frac{\partial \tilde{Q}}{\partial t} = \tilde{\Gamma} \left[-\frac{\delta \tilde{f}}{\delta \tilde{Q}} + \frac{1}{3} \text{tr} \left(\frac{\delta \tilde{f}}{\delta \tilde{Q}} \right) \mathbf{I} \right], \quad (18)$$

这里有 $\tilde{\Gamma} = \Gamma \times (B q_0)$ 。使用一维的有限差分迭代法,则上式表示为

$$[\tilde{Q}(t + \Delta t) - \tilde{Q}(t)] / \Delta t = -\tilde{\Gamma} \left[\frac{\delta \tilde{f}}{\delta \tilde{Q}} - \frac{1}{3} \text{tr} \left(\frac{\delta \tilde{f}}{\delta \tilde{Q}} \right) \mathbf{I} \right], \quad (19)$$

在 r 轴上取模拟空间 $\tilde{r} \in [0, \tilde{R}]$ 。

在本文的模拟过程中我们选取的液晶材料为 5CB^[20-21],各个参数为: $A_0 = 0.195 \times 10^6 \text{ J/m}^3 \cdot \text{K}$, $B = 7.155 \times 10^6 \text{ J/m}^3$, $C = 8.82 \times 10^6 \text{ J/m}^3$, $L = 10.125 \times 10^{-12} \text{ J/m}^3$, $D^* = 0.35$, 则相干长度 ξ_0 约为 $2.64 \times 10^{-9} \text{ m}$; 我们首先设置温度为 $T - T^* = 0.5^\circ \text{C}$, 则约化温度为 $\tilde{A} = 0.403$, 约化的序参数为 $\tilde{S} = 1 + \sqrt{1 - \tilde{A}} \approx 1.772$; 薄层厚度取 $h = 5\xi_0$, 锚泊强度系数 $W_s \in 10^{-7} \sim 10^{-4} \text{ J/m}^2$, 以满足 $h < b$, 则等效的锚泊强度系数 $W_s^{(e)} = (W_s^{(l)} + W_s^{(u)}) / 2 \in 10^{-7} \sim 10^{-4} \text{ J/m}^2$; 设表面壁处的易取向的极角为 $\phi_s(r) := \phi_0(r) = \pi/4$ ^[14], 缺陷中心设置为固定值 $\phi(0) = 0$, 边缘采用自由边界条件。

3.1 锚泊强度系数对缺陷核周围指向矢的影响

选取模拟半径 $R = 10h$, $W_s^{(e)} = 0, 10^{-7}, 5 \times 10^{-7}, 10^{-6}, 5 \times 10^{-6}, 10^{-5}, 10^{-4} \text{ J/m}^2$, 约化后为 $W_s^{(e)} = 0, 4.05 \times 10^{-4}, 2.025 \times 10^{-3}, 4.05 \times 10^{-3}, 2.025 \times 10^{-2}, 4.05 \times 10^{-2}, 4.05 \times 10^{-1}$ 。模拟得到 $h = 5\xi_0, R = 10h$ 时, 不同等效锚泊强度系数下极角 ϕ 的变化及该缺陷处的双轴性, 如图 2 和图 3 所示。

由图 2, 我们可以得出这样的结论: 靠近缺陷核中心的指向矢趋向于沿 z 轴方向。当有表面壁的作用时, 缺陷核周围的指向矢在各自所在的 $\vartheta - z$ 平面内绕着 r 轴顺时针旋转。锚泊强度系数越

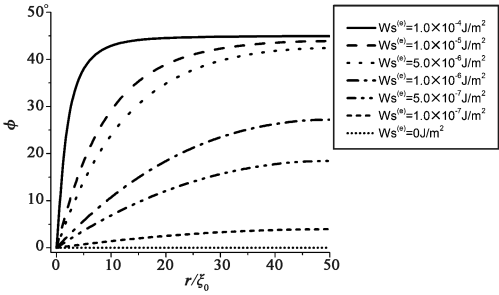


图 2 $h = 5\xi_0$, $R = 10h$ 时,不同等效锚泊强度系数下 ϕ 角的变化

Fig.2 Variation of ϕ for different equivalent anchoring strength $W_s^{(e)}$ for $h = 5\xi_0$, $R = 10h$.

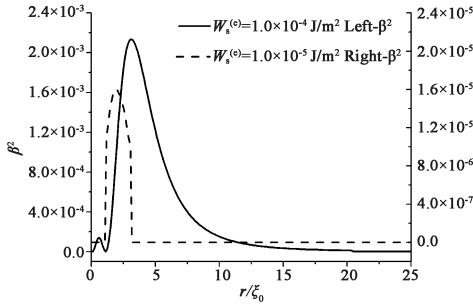


图 3 $h = 5\xi_0$, $R = 10h$ 时,不同等效锚泊强度系数下缺陷处的双轴性

Fig.3 Biaxiality β^2 for different equivalent anchoring strength $W_s^{(e)}$ for $h = 5\xi_0$, $R = 10h$.

大,表面壁的作用越强,因而指向矢旋转过的角度越多,极角 ϕ 角越接近表面壁处易取向的极角 $\phi_s(r) = \phi_0(r) = \pi/4$ 。图 3 显示,即使等效的锚泊强度系数取到 $W_s^{(e)} = 10^{-4} \text{ J/m}^2$ 或 $W_s^{(e)} = 10^{-5} \text{ J/m}^2$ 时,该缺陷处的双轴性也是非常的小。当等效的锚泊强度系数更小时,缺陷处的双轴性几乎为零($\beta^2 < 10^{-6}$)。

3.2 对样品施加沿 z 轴正向的匀强电场

以模拟空间 $R = 10h$,约化的等效锚泊强度系数 $\tilde{W}^{(e)} = 4.05 \times 10^{-3}$ 为例。电场强度记为 $E = Ee_z$ 。当对样品施加的匀强电场沿 z 轴正向时,电场强度大小 E 为正值。取挠曲电系数 $e_1 = 69 \times 10^{-12} \text{ C/m}$, $e_3 = 45 \times 10^{-12} \text{ C/m}^{[22]}$ 。模拟不同的电场强度大小 $E = 0, 0.25, 1.0, 2.5, 5.0, 7.5, 10.0 \text{ V/}\mu\text{m}$ 下的指向矢的极角和方位角的变化,如图 4 和图 5 所示,这里的 $E_0 = 10^6 \text{ V/m} = 1 \text{ V/}\mu\text{m}$ 。

由图 4 可知,随着电场强度的增大, ϕ 角是逐

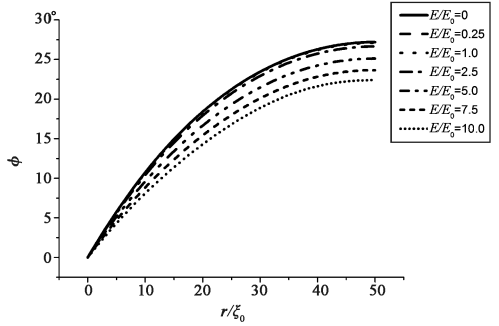


图 4 沿 z 轴正向施加不同强度的匀强电场,极角 ϕ 的变化

Fig.4 Variation of ϕ for different values of the electric field intensity with E/E_0 for $E > 0$

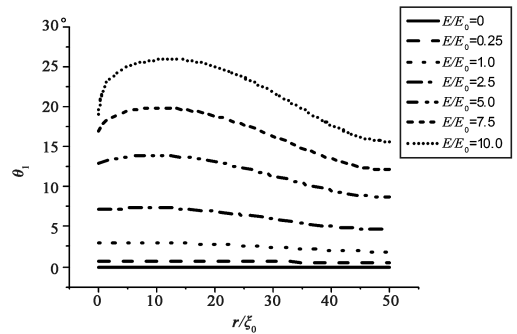


图 5 沿 z 轴正向施加不同强度的匀强电场,角 θ_1 的变化

Fig.5 Variation of θ_1 for different values of the electric field intensity with E/E_0 for $E > 0$

渐减小的,说明该电场的作用使指向矢趋向于沿 z 轴方向。图 5 表明,随着施加的匀强电场强度的增大,缺陷核心附近的指向矢的方位角逐渐增大,而边缘处的指向矢并没有像更靠近缺陷核处的指向矢那样具有较大的 θ_1 角,这是因为表面壁的作用导致的,因为表面处的 $\theta_{1s} = 0$,同时也可以说明表面壁的作用效果会随着半径的增大而增强。因为缺陷核心处指向矢的极角为 0 度,所以,我们略去了中心位置处的方位角的变化角 θ_1 的输出。

我们取出了在不同的电场强度下半径的 $1/4, 1/2, 3/4$ 处及边缘,即 $r = R/4, R/2, R/4$ 和 $r = R$ 处的 θ_1 角的值,绘出了 θ_1 与电场强度大小 E 的关系,如图 6 所示。 θ_1 角与电场强度大小 E 基本呈线性关系,这与 Pramoda Kumar 等人的实验结果一致。

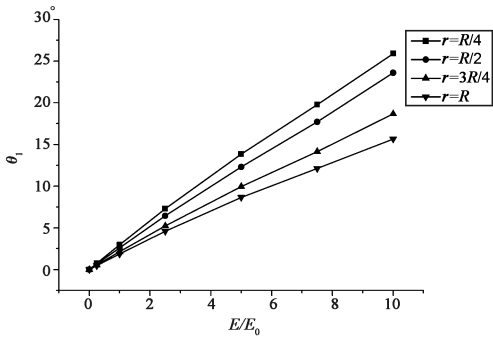


图 6 当 $E>0$ 时, θ_1 角与电场强度大小 E 的关系
Fig.6 Relationship between θ_1 and the electric field intensity for $E>0$

3.3 对样品施加沿 Z 轴负向的匀强电场

模拟不同的电场强度大小 $E=0,-0.25,-1.0,-2.5,-5.0,-7.5,-10.0\text{ V}/\mu\text{m}$ 的指向矢的极角和方位角的变化,如图 7 和图 8 所示。

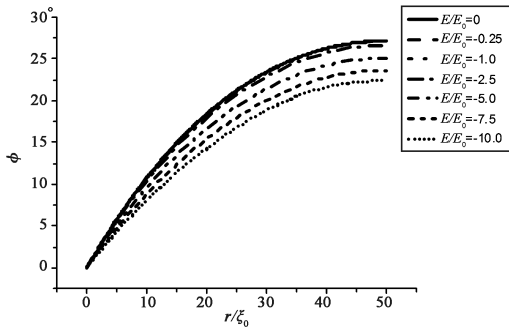


图 7 沿 z 轴负向施加不同强度的匀强电场,极角 ϕ 的变化
Fig.7 Variation of ϕ for different values of the electric field intensity with E/E_0 for $E<0$

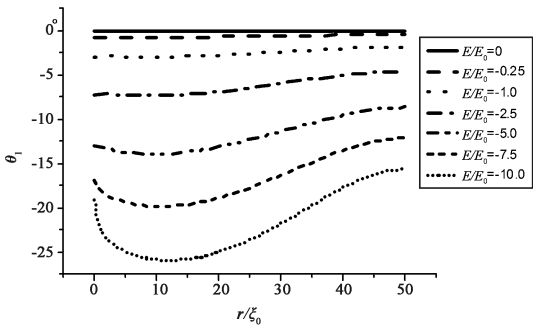


图 8 沿 z 轴负向施加不同强度的匀强电场,角 θ_1 的变化
Fig.8 Variation of θ_1 for different values of the electric field intensity with E/E_0 for $E<0$

由图 7 可知,沿 z 轴负向施加不同强度的匀强电场,随着电场强度的增强, ϕ 角同样也是逐渐减小的,说明该电场的作用使指向矢趋向于沿 z 轴方向。图 8 表明,随着施加的沿 z 轴负向匀强电场强度的增大,缺陷核心附近的指向矢的方位角减小,此时 θ_1 角为负值。以正向电场一样,边缘处的指向矢并没有更靠近缺陷核处的指向矢的方位角变化的多,这是由于表面壁的作用导致的。

同样,我们取出了在不同的电场强度下 $r=R/4, R/2, R/4$ 和 $r=R$ 处的 θ_1 角的值,绘出了 θ_1 与电场强度大小 E 的关系,如图 9 所示。 θ_1 角与电场强度大小 E 基本呈线性关系。这与 Pramoda Kumar 等人的实验结果一致。

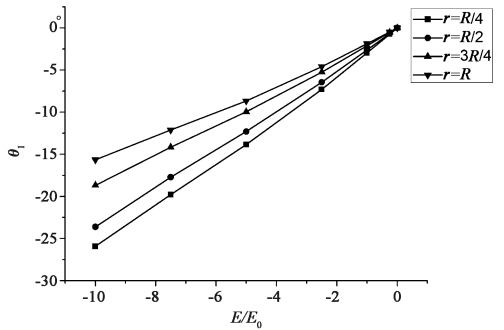


图 9 当 $E<0$ 时, θ_1 角与电场强度大小 E 的关系
Fig.9 Relationship between θ_1 and the electric field intensity for $E<0$

3.4 挠曲电效应的体现

以 $R=10h, \tilde{W}^{(e)} = 4.05 \times 10^{-3}$ 为例,无外加电场、电场强度大小为 $E=\pm 10\text{ V}/\mu\text{m}$ 时,缺陷核周围的指向矢分布的局部俯视图如图 10~12 所示。

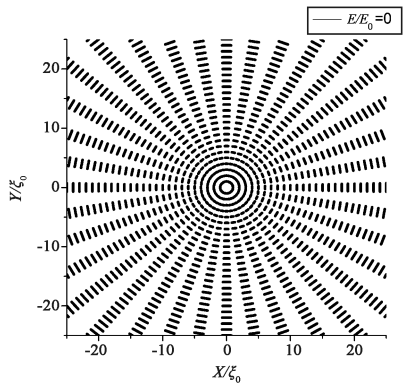


图 10 $R=10h, \tilde{W}^{(e)} = 4.05 \times 10^{-3}, E=0$ 时,缺陷核周围的指向矢分布的局部俯视图
Fig.10 Planform of the director around the defect for $R=10h, \tilde{W}^{(e)} = 4.05 \times 10^{-3}$ and $E=0$

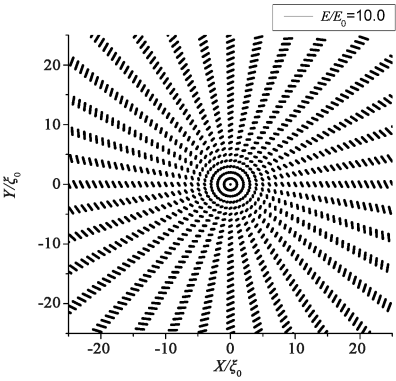


图 11 $R=10h$, $\tilde{W}^{(c)} = 4.05 \times 10^{-3}$, $E=10\text{ V}/\mu\text{m}$ 时,缺陷核周围的指向矢的局部俯视图

Fig.11 Planform of the director around the defect

for $R=10h$, $\tilde{W}^{(c)} = 4.05 \times 10^{-3}$ and $E=10\text{ V}/\mu\text{m}$

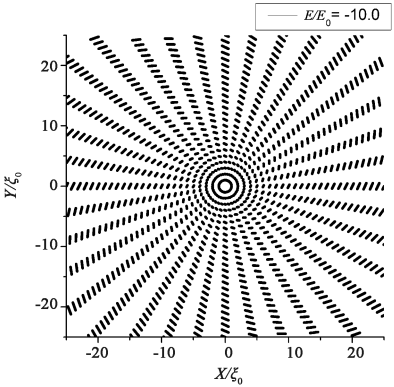


图 12 $R=10h$, $\tilde{W}^{(c)} = 4.05 \times 10^{-3}$, $E=-10\text{ V}/\mu\text{m}$ 时,缺陷核周围的指向矢的局部俯视图

Fig.12 Planform of the director at the defect site for

$R=10h$, $\tilde{W}^{(c)} = 4.05 \times 10^{-3}$ and $E=-10\text{ V}/\mu\text{m}$

由图 10 可知,无外加电场时,+1 线缺陷核周围的指向矢在各自所在的 ϑ - z 的平面内旋转过某个角度。图 11 和 12 表明,对样品施加沿 z 轴正向的匀强电场,缺陷核心周围的指向矢绕各自的 z 轴发生逆时针方向旋转,也就是说指向矢场具有右手螺旋结构。沿 z 轴负向施加匀强电场,缺陷核心周围的指向矢绕各自的 z 轴发生顺时针旋转,指向矢场具有左手螺旋结构。解释了当对液晶盒的上下基本外加直流电场作用时,Pramoda Kumar 等人的实验中+1 缺陷的消光刷会出现顺时针方向或逆时针方向旋转的现象。

4 结 论

基于液晶的 Landau-de Gennes 理论,我们给出弱锚定的平行排列向列相液晶盒中反转壁内的+1 缺陷在外加直流电场作用下液晶分子的自由能表达式并模拟了缺陷点在电场作用下指向矢的变化情况,这些理论结果充分描述了+1 缺陷处指向矢的旋转方向依赖于外加电场的方向,并且旋转的程度与外加电场的大小呈线性关系。这些理论结果和 Pramoda Kumar 等人实验得到的+1 缺陷处消光刷的旋转情况是一致的。

参 考 文 献:

[1] 谢毓章.液晶物理学[M].北京:科学出版社,1998:108-113.
XIE Y Z, *Physics of Liquid Crystal* [M]. Beijing: Science Press, 1998:108-113. (in Chinese)
[2] CHANDRASEKHAR S. *Liquid Crystals* [M]. 2nd ed. Cambridge: Cambridge University Press, 1992: 205-207.
[3] MEYER R B. Piezoelectric effects in liquid crystals [J]. *Physical Review Letters*, 1969, 22(18): 918-921.
[4] OUTRAM B I, ELSTON S J. Alignment of cholesteric liquid crystals using the macroscopic flexoelectric polarization contribution to dielectric properties [J]. *Applied Physics Letters*, 2013, 103(14): 141111.
[5] OUTRAM B I, ELSTON S J. Frequency-dependent dielectric contribution of flexoelectricity allowing control of state switching in helicoidal liquid crystals [J]. *Physical Review E*, 2013, 88(1): 012506.
[6] HARDEN J, MBANGA B, ÉBER N, et al. Giant flexoelectricity of bent-core nematic liquid Crystals [J]. *Physical Review Letters*, 2006, 97(15): 157802.
[7] YE W J, XING H Y, CUI W J, et al. Determining the sum of flexoelectric coefficients in nematic liquid crystals by the capacitance method [J]. *Chinese Physics B*, 2014, 23(11): 116101.
[8] 郑桂丽,张辉,叶文江,等.全漏光导波技术确定液晶材料的挠曲电系数[J].光子学报,2014,43(12):1231003.
ZHENG G L, ZHANG H, YE W J, et al. Determination of the flexoelectric coefficient in liquid crystal using fully-

- leaky optical guided wave technique [J]. *Acta Photonica Sinica*, 2014, 43(12): 1231003. (in Chinese)
- [9] CASTLES F, MORRIS S M, THERENTJEV E M, *et al.* Thermodynamically stable blue phases [J]. *Physical Review Letters*, 2010, 104(15): 157801.
- [10] KUMAR P, KRISHNAMURTHY K S. Flexoelectric response at defect sites in nematic inversion walls [J]. *Liquid Crystals*, 2006, 33(2): 131-138.
- [11] CHAIKIN P M, LUBENSKY T C. *Principles of Condensed Matter Physics* [M]. Cambridge: Cambridge University Press, 1995.
- [12] KLÉMAN M. *Points, Lines and Walls in Liquid Crystals, Magnetic Systems and Various Disordered Media* [M]. New York: Wiley, 1983.
- [13] NEHRING J, SAUPE A. On the schlieren texture in nematic and smectic liquid crystals [J]. *Journal of the Chemical Society, Faraday Transactions 2: Molecular and Chemical Physics*, 1972, 68: 1-15.
- [14] RYSCHENKOW G, KLEMAN M. Surface defects and structural transitions in very low anchoring energy nematic thin films [J]. *The Journal of Chemical Physics*, 1976, 64(1): 404-412.
- [15] AMODDEO A, BARBERI R, LOMBARDO G. Electric field-induced fast nematic order dynamics [J]. *Liquid Crystals*, 2011, 38(1): 93-103.
- [16] SPENCER T J, CARE C M. Lattice Boltzmann scheme for modeling liquid-crystal dynamics: zenithal bistable device in the presence of defect motion [J]. *Physical Review E*, 2006, 74(6): 061708.
- [17] NOBILI M, DURAND G. Disorientation-induced disordering at a nematic-liquid-crystal-solid interface [J]. *Physical Review A*, 1992, 46(10): R6174-R6177.
- [18] ZHOU X, ZHANG Z D. Dynamics of order reconstruction in a nanoconfined nematic liquid crystal with a topological defect [J]. *International Journal of Molecular Sciences*, 2013, 14(12): 24135-24153.
- [19] GUZMÁN O, ABBOTT N L, DE PABLO J J. Quenched disorder in a liquid-crystal biosensor: adsorbed nanoparticles at confining walls [J]. *The Journal of Chemical Physics*, 2005, 122(18): 184711.
- [20] BARBERI R, CIUCHI F, DURAND G E, *et al.* Electric field induced order reconstruction in a nematic cell [J]. *The European Physical Journal E*, 2004, 13(1): 61-71.
- [21] QIAN T Z, SHENG P. Orientational states and phase transitions induced by microtextured substrates [J]. *Physical Review E*, 1997, 55(6): 7111-7120.
- [22] SPENCER T J, CARE C M, AMOS R M, *et al.* Zenithal bistable device: comparison of modeling and experiment [J]. *Physical Review E*, 2010, 82(2): 021702.

作者简介:张辉(1981—),男,河北石家庄人,硕士,实验师,2007年于河北工业大学获得硕士学位,现为河北工业大学理学院应用物理系实验师,河北工业大学电子信息与工程学院在读博士研究生。主要从事液晶及液晶器件的理论及相关方面的研究。E-mail: cmh_lj@163.com.

张志东(1961—),男,山东蓬莱人,教授,主要研究方向为液晶物理及液晶器件物理。E-mail: zhidong_zhang1961@163.com