

文章编号:1007-2780(2017)01-0013-06

混合排列柱状薄层中的向列相液晶指向矢分布的研究

刘红红, 张艳君*

(河北工业大学 理学院, 天津 300401)

摘要:利用向列相液晶弹性理论,研究了混合排列柱状薄层中的向列相液晶指向矢的分布。向列相液晶被限定在两个同心圆柱构成的薄层中,在内外表面施加强锚定及弱锚定边界条件,锚定易取向方向取径向和轴向(垂直柱轴及平行柱轴)的边界条件,得到了四种混合排列柱状薄层模型 RsZw、ZwRs、RwZs、ZsRw。基于 Frank 弹性自由能和 Rapini-Papoular 近似的表面能,研究了不同锚定强度、不同内半径及不同弹性常数值的指向矢分布,计算机模拟得出指向矢取向的曲线图。由于柱对称性、锚定强度、薄层厚度以及弹性各向异性共同竞争的影响,这四种模型的指向矢分布有着很大的不同。

关键词:向列相液晶;弹性理论;柱状薄层;指向矢

中图分类号:O753.2 **文献标识码:**A **doi:**10.3788/YJYXS20173201.0013

Director distributions of nematic liquid crystals in hybrid arrangement cylindrical cells

LIU Hong-hong, ZHANG Yan-jun*

(School of Science, Hebei University of Technology, Tianjin 300401, China)

Abstract: By using nematic liquid crystal elastic theory, we study the director distributions of nematic liquid crystal in hybrid arrangement cylindrical cells. Nematic liquid crystal is restricted in two concentric cylindrical layers, inside and outside surface application strong anchoring and weak anchoring boundary condition, anchor set to boundary conditions of the radial and axial direction (vertical and parallel axis), obtaining four models ZsRw, ZwRs, RsZw and RwZs. Based on the Frank elastic free energy and the Rapini Papoular approximation to the surface anchoring strength, we obtain the director distributions with antagonistic anchoring conditions, different radius and different elastic constants. We calculate and simulate the director orientation graph. Because of the influence of column

收稿日期:2016-08-26;修订日期:2016-09-19.

基金项目:国家自然科学基金(No.11374087, No.11304074);河北省高等学校科学技术研究青年基金(No.QN2015260)

Supported by National Natural Science Foundation of China (No. 11374087 ; No.11304074); Research Project of Hebei Education Department, China (No.QN2015260)

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

symmetry, anchoring strength, layer thickness and elastic anisotropy, the director distributions of these four models are very different.

Key words: nematic liquid crystals; elastic theory; cylindrical cells; director

1 引言

被限制在不同的几何体中的向列相液晶,无论是理论研究还是实验研究都引起了人们极大的兴趣^[1],常用的几何模型有液晶薄层、液晶微滴、柱状系统。柱状向列相液晶系统的指向矢平衡分布早在 40 年前就已经被研究。早前的研究是假设强锚定径向(垂直于柱轴)边界条件下对柱状腔向列相液晶指向矢分布进行计算^[2-4],随后人们考虑不同锚定强度径向边界下弹性能与锚定能的竞争对指向矢分布的影响^[5-7],以及低频电场对柱状液晶系统指向矢分布的影响^[8-9]。对柱状液晶系统的研究方法多为液晶弹性理论^[2-10],也有其它方法的研究,如 Monte Carlo 模拟方法^[10-11]及 de Gennes-Landau 理论^[12-13]。液晶弹性理论对于研究柱状液晶系统是一种非常有用的方法,其中考虑展曲、扭曲、弯曲三种弹性形变各向异性在指向矢分布研究中是必不可少的。文献[10]利用弹性理论在单一常数近似下计算了弱锚定边界下混合排列柱状薄层的指向矢分布,文献[14]研究了弹性各向异性的影响,但是由于计算边界条件时存在问题,其结果有待进一步计算讨论。

本文基于向列相液晶的弹性理论研究被限制在柱状同心筒中的向列相液晶,重点研究在内外表面上施加强弱锚定边界条件,锚定易取向方向取径向和轴向,构成混合排列向列相液晶薄层的指向矢的分布。我们首先给出混合排列柱状向列相液晶薄层模型;其次考虑在弹性各向异性下计算混合排列柱状向列相液晶薄层的指向矢分布的数值解;然后给出计算机模拟数值计算结果;最后给出结论。

2 模型

向列相液晶被限制在两个同心圆柱构成的薄层中,半径分别为 r_1 和 r_2 ,且 $r_2 > r_1$, ($r_2 = 20$ 取 20 个单位长度),圆柱的长度 L 远大于 r_2 ,即假定

柱长是无限大的,如图 1。根据内外表面上施加的强弱锚定边界条件和易取向方向取轴向和径向的影响,得到了 4 种不同的模型 RsZw、ZwRs、RwZs、ZsRw。大写字母代表柱筒表面上指向矢的易取向方向沿轴向(z)和径向(r),小写字母代表弱(w)和强(s)锚定条件,前两个字母指柱筒外表面上施加的边界条件,后两个字母指内表面上施加的边界条件。

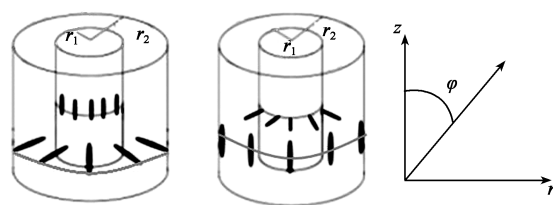


图 1 柱状薄层图和 $rz\varphi$ 坐标图

Fig.1 A schematic representation of the cylindrical cells and a sketch of the coordinates $rz\varphi$.

3 弹性理论推导

向列相液晶在薄层中的指向矢 $\mathbf{n} = \sin\varphi(r)\mathbf{r} + \cos\varphi(r)\mathbf{z}$, φ 是指向矢和 z 轴的夹角。根据 Frank 弹性自由能公式^[15]:

$$f_{el} = \frac{1}{2} [K_{11} (\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + K_{22} (\mathbf{n} \cdot \nabla \times \mathbf{n})^2 + K_{33} (\mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n})^2], \quad (1)$$

其中: K_{ii} ($i=1,2,3$) 分别是展曲、扭曲、弯曲弹性常数。得到柱状薄层单位面积的 Frank 弹性自由能

$$F_F = 2\pi K_{11} \int_{r_1}^{r_2} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\sin\varphi}{r} \right)^2 + \frac{1}{2} \cos^2\varphi \left(\frac{d\varphi}{dr} \right)^2 + \frac{1}{2} \frac{\sin 2\varphi}{r} \frac{d\varphi}{dr} + \frac{1}{2} k \sin^2\varphi \left(\frac{d\varphi}{dr} \right)^2 \right] r dr, \quad (2)$$

其中: $k = K_{33}/K_{11}$ 表示为弹性各向异性参数。

近似于 Rapini-Papoular^[16] 的表面能

$$W_s = -\frac{W_i}{2} (\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_i)^2, i=1,2, \quad (3)$$

$$F_s = -\frac{1}{2} W_{1,2} \cos^2(\varphi_{1,2} - \varphi_{s1,2}), \quad (4)$$

W_i 为内外表面上的锚定强度, $\mathbf{n}$ 和 $\varphi_{1,2}$ 为实际的指向矢方向, $\mathbf{e}$ 和 $\varphi_{s1,2}$ 为内外表面上的易取向方向。

令 $r = r_1 e^x$, 则 $dr = dr_1 e^x = r_1 e^x dx$, $x = \ln \frac{r}{r_1} = \ln \rho$, 方程(2)(4)相加得柱筒内液晶系统的自由能:

$$\frac{F}{\pi K_{11}} = \int_0^{\ln \rho} \left\{ \sin^2 \varphi + (\cos^2 \varphi + k \sin^2 \varphi) \left(\frac{d\varphi}{dx} \right)^2 \right\} dx - \frac{1}{2} \cos 2\varphi_2 + \frac{1}{2} \cos 2\varphi_1 - \frac{r_1}{L_1} \cos^2 (\varphi_1 - \varphi_{s1}) - \frac{r_2}{L_2} \cos^2 (\varphi_2 - \varphi_{s2}) \quad (5)$$

其中: $L_i = K_{11}/W_i$ 定义为外推长度。由式(5)可以看出, 假定系统表面为自由表面 ($L_i \rightarrow \infty$), 对于内表面易于促成径向排列, 而外表面更易于促成轴向排列。

把方程(5)代入到欧拉方程得到平衡态方程:

$$\sin 2\varphi + (\sin 2\varphi - k \sin 2\varphi) \left(\frac{d\varphi}{dx} \right)^2 - (2\cos^2 \varphi + 2k \sin^2 \varphi) \frac{d^2 \varphi}{dx^2} = 0, \quad (6)$$

文献[14]的平衡态方程与方程(6)对比确实存在差别。

我们得到的边界条件为:

$$(2\cos^2 \varphi_1 + 2k \sin^2 \varphi_1) \frac{d\varphi}{dx} \Big|_{x=0} + \sin 2\varphi_1 - \frac{r_1}{L_1} \sin 2(\varphi_1 - \varphi_{s1}) = 0, \quad (7)$$

$$(2\cos^2 \varphi_2 + 2k \sin^2 \varphi_2) \frac{d\varphi}{dx} \Big|_{x=\ln \rho} + \sin 2\varphi_2 + \frac{r_2}{L_2} \sin 2(\varphi_2 - \varphi_{s2}) = 0, \quad (8)$$

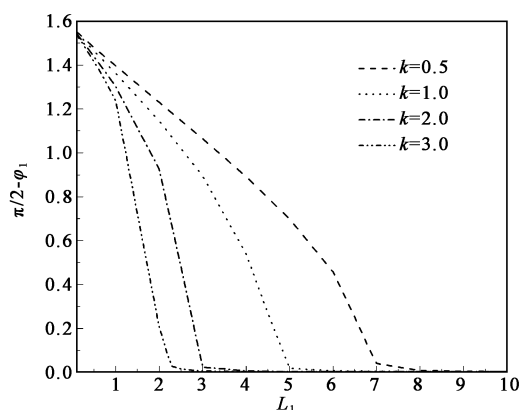
其边界条件与文献[14]也有不同。

根据平衡态方程(6)和边界条件(7)(8), 利用数学上的差分法计算模拟得出表面上的指向矢分布。

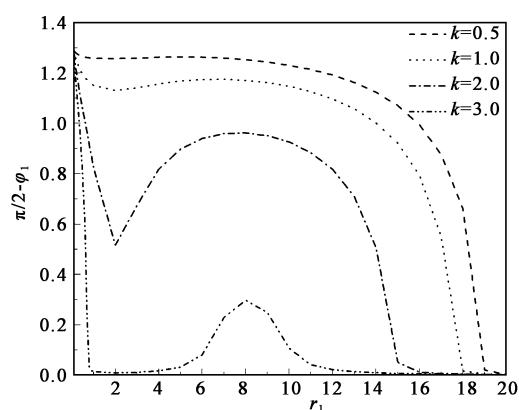
4 数值模拟结果

我们通过差分方法, 在数值上计算了 4 种排列的指向矢分布受到锚定作用、弹性各向异性作用以及尺寸效应的影响。图 2~图 5 给出了 4 种排列下弱锚定表面的指向矢随外推长度 L_i 及内半径 r_i 的变化曲线。定义外推长度临界值 L_c 及 r_c , 当达到此值时, 系统指向矢分布趋于均匀排列, 即指向矢完全按照表面为强锚定的易取向排列。

RsZw: 内表面为弱锚定轴向排列, 外表面为强锚定径向排列。图 2 给出了 RsZw 情况下内表面指向矢取向 ($\pi/2 - \varphi_1$) 随外推长度 L_1 及内半径 r_1 变化的曲线。从图 2(a)可知, 当内半径取固



(a)



(b)

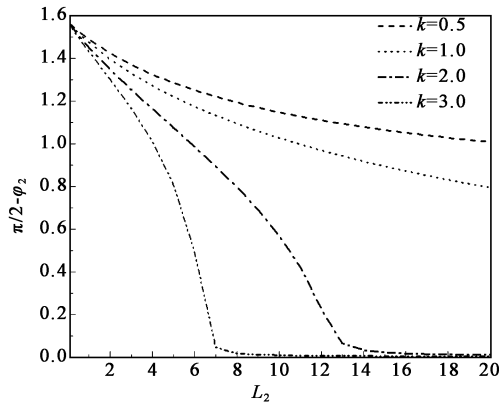
图 2 RsZw 模型: (a) 当 $r_1 = 10$ 时, 角度 $\pi/2 - \varphi_1$ 随外推长度 L_1 的变化曲线, (b) 当 $L_1 = 2$ 时, 角度 $\pi/2 - \varphi_1$ 随内半径 r_1 的变化曲线。

Fig.2 RsZw case. Profile of $\pi/2 - \varphi_1$ as function of L_1 , for $r_1 = 10$ and a few values of the elastic parameters (a), $\pi/2 - \varphi_1$ versus r_1 for $L_1 = 2$ and a few values of the elastic parameters(b).

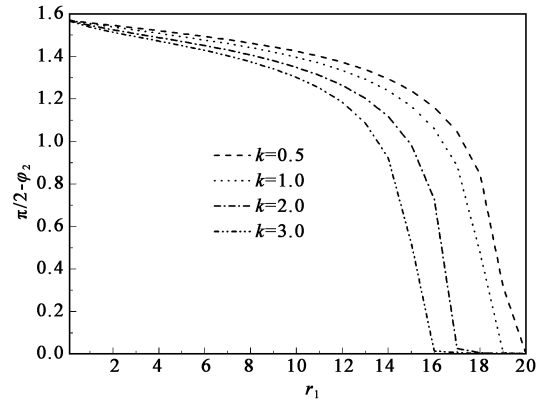
定值 $r_1 = 10$ 时, 外推长度的临界值 L_c 随着弹性各向异性参数 k (K_{33}/K_{11}) 的减小在增大; 同样的锚定强度, 弹性各向异性参数 k 越小, $\pi/2 - \varphi_1$ 越大。说明, 弹性各向异性参数 k 的大小会影响内表面弱锚定作用的强弱, k 数值越小, 锚定作用越强。图 2(b) 表明, 当锚定强度取固定值 $L_1 = 2$ 时, 当 $k \leq 1$, 即 $K_{33} \leq K_{11}$ 时, 指向矢与径向夹角 $\pi/2 - \varphi_1$ 随薄层厚度减小 (即内半径 r_1 增大) 而减小; 当 $k > 1$, 即 $K_{33} > K_{11}$ 时, 指向矢角度随薄层厚度减小出现非单调变化; 薄层厚度一定时, k 数值越小, $\pi/2 - \varphi_1$ 越大。说明同样的锚定强度, 薄层越薄, 系统越是受到外表面强锚定的影响越大, 其内表面的锚定作用越弱; 然而随着薄层厚度的减小, 内表面面积变大, 内表面弱锚定作用又增强; 同样的薄层厚度, 弹性各向异性参数 k 越小, 其锚定作用越强。3 个因素的共同作用使得指向矢分布随内半径的变化出现图 2(b) 曲线变化。

ZwRs: 内表面为强锚定径向排列, 外表面为弱锚定轴向排列。图 3 给出了 ZwRs 模型外表面指向矢分布随外推长度 L_2 及内半径 r_1 的变化曲线。从图 3(a) 可知, 当内半径取固定值 $r_1 = 10$

时, 外推长度的临界值 L_c 随着弹性各向异性参数 k 的减小在增大, 与 RsZw 具有相似变化, 但 ZwRs 模型的 L_c 大于 RsZw 模型; 同样的锚定强度, 弹性各向异性参数 k 越小, $\pi/2 - \varphi_2$ 越大, 外表面 $\pi/2 - \varphi_2$ 的值比 RsZw 模型内表面 $\pi/2 - \varphi_1$ 更大。说明, 外表面更易于促成轴向排列, 内表面更易于促成径向排列, 与由方程 (5) 式理论得到的结果一样, 且外表面作用面积远大于内表面, 使得同样的锚定参数, 外表面的锚定比内表面的锚定作用更强。图 3(b) 表明, 随着内半径 r_1 的增加, $\pi/2 - \varphi_2$ 减小; 当锚定强度取固定值 $L_1 = 2$ 时, $\pi/2 - \varphi_2$ 随薄层厚度减小 (即内半径 r_1 增大) 而减小; 弹性各向异性参数 k 数值越大, 则阈值 r_c 越小; 薄层厚度一定时, k 数值越小, $\pi/2 - \varphi_2$ 越大。与 RsZw 模型不同的是, 内半径的变化, 不会影响外表面弱锚定表面的面积, 薄层厚度减小使得系统受到内表面强锚定的影响增大, 外表面的弱锚定作用减弱; 同样的薄层厚度, 弹性各向异性参数 k 越小, 其锚定作用越强。两种因素决定了指向矢分布随内半径的变化出现图 3(b) 单调曲线变化。



(a)



(b)

图 3 ZwRs 模型: (a) 当 $r_1 = 10$ 时, 角度 $\pi/2 - \varphi_2$ 随外推长度 L_2 的变化曲线, (b) 当 $L_2 = 2$ 时, 角度 $\pi/2 - \varphi_2$ 随内半径 r_1 的变化曲线。

Fig.3 ZwRs case. Profile of $\pi/2 - \varphi_2$ as function of L_2 , for $r_1 = 10$ and a few values of the elastic parameters (a), $\pi/2 - \varphi_2$ versus r_1 for $L_2 = 2$ and a few values of the elastic parameters(b).

RwZs: 内表面为强锚定轴向排列, 外表面为弱锚定径向排列。RwZs 计算结果如图 4 所示。图 4(a) 曲线表明, 当内半径取固定值 $r_1 = 10$ 时, 弹性各向异性参数 k 取不同值时, 外推长度的临界值 L_c 不变; 相同的锚定强度, 当 k 减小时, φ_2 增

加。说明, 弹性各向异性参数 k 不会影响系统达到均匀排列的阈值 L_c , 但 k 越小, 锚定作用越强。从图 4(b) 可以看出, 随着薄层厚度的减小, φ_2 减小; 但不同的 k 值系统达到均匀排列的内半径阈值 r_c 大小一致; 薄层厚度一定时, k 数值越小, φ_2 越大。

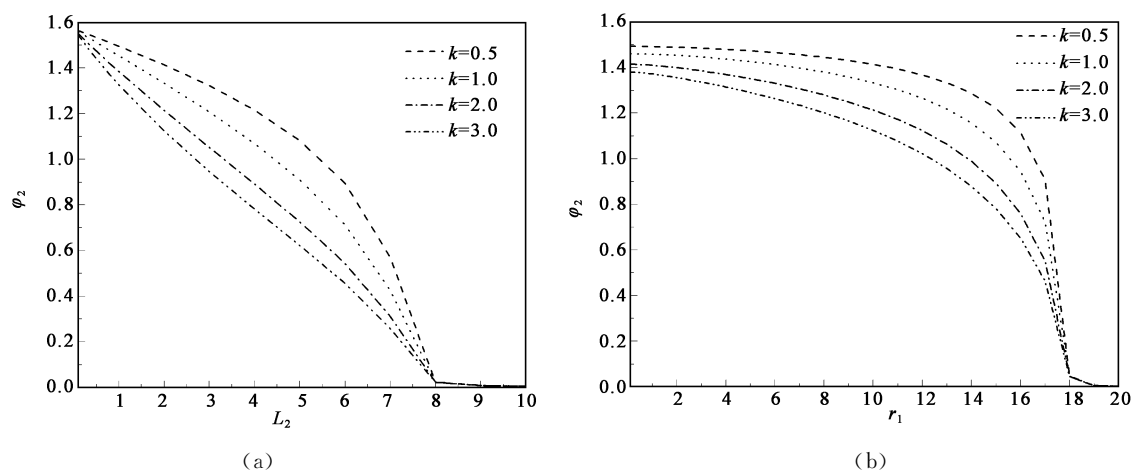


图4 RwZs模型:(a)当 $r_1=10$ 时,角度 φ_2 随外推长度 L_2 的变化曲线,(b)当 $L_2=2$ 时,角度 φ_2 随内半径 r_1 的变化曲线.

Fig.4 RwZs case. Profile of φ_2 as function of L_2 , for $r_1=10$ and a few values of the elastic parameters(a), φ_2 versus r_1 for $L_2=2$ and a few values of the elastic parameters(b).

说明,弹性各向异性参数 k 不会影响系统达到均匀排列的阈值 r_c ,但 k 越小,其锚定作用越强。

ZsRw:内表面为弱锚定径向排列,外表面为强锚定轴向排列。ZsRw数值计算结果如图5所示。图5(a)曲线和RwZs模型图4(a)类似,只是 L_c 大得多,说明同样的锚定强度ZsRw比RwZs锚定作用更强,这是由于内表面更易于促成径向排列有关。图5(b)曲线与RwZs模型图4(b)不同,指向矢角度 φ_1 随着内半径 r_1 的变化呈现先增加又减小的

的非单调变化,这是由于随着内半径的增加,内表面的面积增大,其锚定作用增强,但是随着内半径继续增加,薄层变得很薄以后外表面的强锚定对系统的影响又加大,减弱了弱锚定作用,两个因素决定了曲线的非单调变化;各向异性参数 k 越小,锚定作用越强,与前面结论一致。对于RwZs和ZsRw,弹性各向异性参数的变化都不会影响达到均匀排列的阈值,我们认为这是由于在径向弱锚定情况下,弹性各向异性对系统的影响不起主要作用。

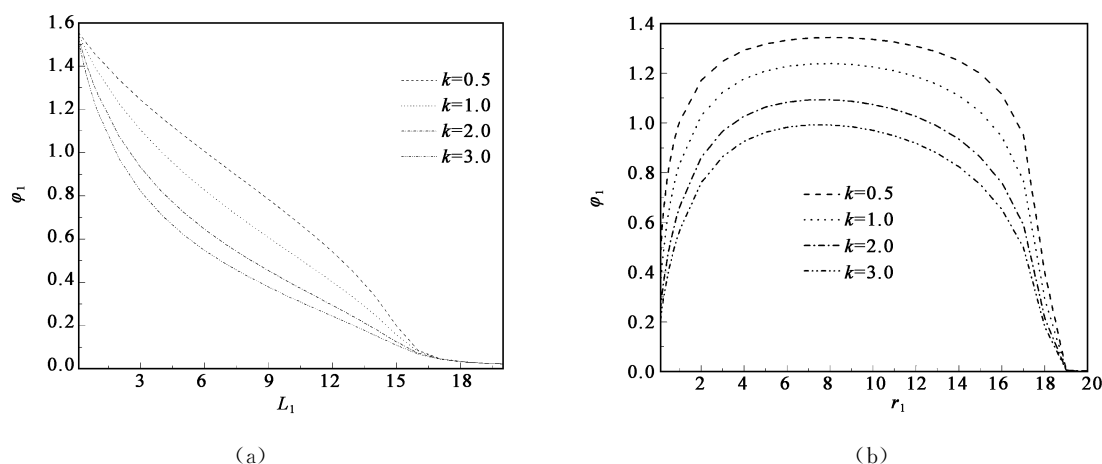


图5 ZsRw模型:(a)当 $r_1=10$ 时,角度 φ_1 随外推长度 L_1 的变化曲线,(b)当 $L_1=2$ 时,角度 φ_1 随内半径 r_1 的变化曲线.

Fig.5 ZsRw case. Profile of φ_1 as function of L_1 , for $r_1=10$ and a few values of the elastic parameters (a), φ_1 versus r_1 for $L_1=2$ and a few values of the elastic parameters(b).

5 结 论

对柱状薄层内外表面分别取强——弱锚定,使其形成混合排列,根据弹性理论并结合计算机数值计算,结果表明:(1)弹性空间各向异性参数 k 影响系统指向矢分布,在 R_sZ_w 及 Z_wR_s 模型影响较大,会影响系统达到均匀排列的外推长度阈值及内半径阈值,对 R_wZ_s 和 Z_sR_w 影响较小。

(2)系统柱对称性的影响,使得外表面指向矢易于轴向排列,而内表面指向矢易于径向排列。(3)薄层厚度的减小对系统指向矢分布有两种影响:厚度越薄,弱锚定一侧的锚定作用越弱;若外半径取固定值且弱锚定在内表面(Z_sR_w 及 R_sZ_w),薄层越薄,内表面面积越大,其锚定作用越强。所以混合排列柱状薄层向列相液晶指向矢分布主要是柱对称性、锚定强度、薄层厚度以及弹性各向异性几种因素共同竞争的结果。

参 考 文 献:

- [1] CRAWFORD G P, ŽUMER S. *Liquid Crystals in Complex Geometries: Formed by Polymer and Porous Networks* [M]. London: Taylor & Francis, 1996.
- [2] DZYALOSHINSKIĬ I E. Theory of disclinations in liquid crystals [J]. *Soviet Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 1970, 31: 773.
- [3] CLADIS P E, KLÉMAN M. Non-singular disclinations of strength $S = +1$ in nematic [J]. *Journal de Physique*, 1972, 33(5/6): 591-598.
- [4] LANDAU L D, LIFSHITZ E M, PITAEVSKII P L, et al. *Theory of Elasticity: Course of Theoretical Physics* [M]. Oxford: Pergamon Press, 1986: 1385.
- [5] ALLENDER D W, CRAWFORD G P, DOANE J W. Determination of the liquid-crystal surface elastic constant K_{24} [J]. *Physical Review Letters*, 1991, 67(11): 1442-1445.
- [6] CRAWFORD G P, ALLENDER D W, DOANE J W. Surface elastic and molecular-anchoring properties of nematic liquid crystals confined to cylindrical cavities [J]. *Physical Review A*, 1992, 45(12): 8693-8708.
- [7] KRALJ S, ŽUMER S. Saddle-splay elasticity of nematic structures confined to a cylindrical capillary [J]. *Physical Review E*, 1995, 51(1): 366-379.
- [8] CORELLA-MADUEÑO A, REYES J A. Electrically controlled liquid crystal fiber [J]. *Optics Communications*, 2006, 264(1): 148-155.
- [9] CORELLA-MADUEÑO A, CASTELLANOS-MORENO A, GUTIÉRREZ-LÓPEZ S, et al. Threshold field for a nematic liquid crystal confined between two coaxial cylinders [J]. *Physical Review E*, 2008, 78(2): 022701.
- [10] CHICCOLI C, PASINI P, EVANGELISTA L R, et al. Nematics in hybrid cylindrical cells [J]. *Molecular Crystals and Liquid Crystals*, 2013, 576(1): 42-52.
- [11] CHICCOLI C, PASINI P, SOUZA R T D, et al. Computer simulations of the ordering in a hybrid cylindrical film of nematic liquid crystals [J]. *Physical Review E*, 2011, 84(4): 041705.
- [12] KISELEV A D, RESHETNYAK V Y. Anchoring energy effects: configuration and phase transitions in a nematic liquid crystal confined to a small cylindrical cavity [C]//Proceedings of SPIE 1815, Display Technologies. Hsin-chu: SPIE, 1993: 206-217.
- [13] NAPOLI G, VERGORI L. Curvature-induced ordering in cylindrical nematic shells [J]. *International Journal of Non-Linear Mechanics*, 2013, 49: 66-71.
- [14] TEIXEIRA-SOUZA R T, CHICCOLI C, PASINI P, et al. Nematic liquid crystals in planar and cylindrical hybrid cells: role of elastic anisotropy on the director deformations [J]. *Physical Review E*, 2015, 92(1): 012501.
- [15] FRANK F C. On the theory of liquid crystals [J]. *Discussions of the Faraday Society*, 1958, 25: 19-28.
- [16] RAPINI A, PAPOULAR M. Distorsion d'une lamelle nématique sous champ magnétique conditions d'ancrage aux parois [J]. *Le Journal de Physique Colloques*, 1969, 30(C4): C4-54-C4-56.

作者简介: 刘红红(1991—),女,河北沧州人,硕士研究生,主要从事液晶物理方面的研究。E-mail: 943377247@qq.com