

文章编号:1007-2780(2018)01-0001-13

向列相液晶畴壁中挠曲电效应和自发扭曲效应的理论研究

张 晶¹, 周 璇¹, 陈思博¹, 刘 凯², 张志东^{1*}

(1. 河北工业大学 理学院, 天津 300401;

2. 河北冀雅电子有限公司, 河北 石家庄 050071)

摘要:基于 Landau-de Gennes 理论, 利用松弛迭代法, 研究了电场诱导平行排列向列相液晶系统中的 3 种畴壁, 以及畴壁中的挠曲电效应和自发扭曲效应。结果表明, 畴壁存在的电压范围为 $0.2 \leq E/E_0 \leq 1.2$ ($E_0 = 1.45 \text{ V}/\mu\text{m}$)。单一常数近似下, 相反方向外电场的挠曲电效应对扭曲壁中扭曲角的影响关于 90° 对称; 对混合壁中扭曲角的影响是非对称的; 对展-弯壁无影响。弹性各向异性时, 外电场会诱导自发扭曲效应。该效应会使展-弯壁与混合壁中指向矢均由原角度变为 90° , 即沿壁切线方向排列; 对扭曲壁结构无影响。挠曲电效应会在自发扭曲的基础上, 对畴壁中指向矢扭曲角产生叠加影响。

关 键 词: Landau-Gennes 理论; 畴壁; 弹性各向异性; 挠曲电效应; 自发扭曲效应

中图分类号: O753.2 **文献标识码:** A **doi:** 10.3788/JYXS20183301.0001

Theoretical study of flexoelectric effect and spontaneous distortion in domain walls within nematic liquid crystal system

ZHANG Jing¹, ZHOU Xuan¹, CHEN Si-bo¹, LIU Kai², ZHANG Zhi-dong^{1*}

(1. School of Science, Hebei University of Technology, Tianjin 300401, China;

2. Hebei Jiya Electronics Co. Ltd., Shijiazhuang 050071, China)

Abstract: Based on Landau-de Gennes theory, we investigated the flexoelectric effect and spontaneous distortion effect within three different domain walls in parallel aligned nematic liquid crystal system influenced by electric field, using the relaxation iterative method. Our results show that, the domain walls in our system exist in the range of $0.2 \leq E/E_0 \leq 1.2$ ($E_0 = 1.45 \text{ V}/\mu\text{m}$). With one elastic constant approximation, flexoelectric effect with opposite direction of electric field will influence the twist angle of domain walls, which has 90° symmetry effect on twist wall, asymmetric effect on mixed wall, and no influence on splay-bend wall. Under the elastic anisotropy, external field will induce spontaneous distortion effect, which will change the twist angle from original angle to 90° both in splay-bend wall and mixed wall, namely the director will reorient along the tangential direction of

收稿日期: 2017-07-24; 修订日期: 2017-08-12.

基金项目: 国家自然科学基金 (No.11374087)

Supported by the Natural Science Foundation of China (No.11374087)

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

wall, but have no effect on twist wall. Beyond that, flexoelectric effect will have superposition impact on the director orientation in the domain wall.

Key words: Landau-de Gennes theory; domain walls; elastic anisotropy; flexoelectric effect; spontaneous distortion effect

1 引言

基板预倾角为零的平行排列向列相液晶盒中,外场作用会使系统发生两种不同方向的 Freedericksz 转变,进而在两种转变区域的交界形成畴壁^[1]。实验中在偏光显微镜下可观察到畴壁,且畴壁通常以闭合圆环的形式出现^[2-3]。向列相液晶的弹性常数对畴壁系统有重要影响^[4-5]。当材料的展曲(k_{11})、扭曲(k_{22})、弯曲(k_{33})三个弹性常数在数值上近似相等时,可以做单一弹性常数近似,(即 $k_{11} = k_{22} = k_{33}$),外电场作用使得指向矢在摩擦方向与基板法线所确定的平面内变化^[3]。根据 Jeong^[6] 和 Atherton^[7] 等人的研究,当扭曲弹性常数(k_{22})分别小于展曲弹性常数(k_{11})和弯曲弹性常数(k_{33})时,弹性各向异性(elastic anisotropy)作用诱导电场作用下指向矢发生非平面变化^[8]。

早期研究表明球形液滴在沿面锚泊作用下,会形成两极结构^[9]。对于某些非手性液晶材料,指向矢发生自发扭曲形变,出现数目相同的左手形变液滴和右手形变液滴^[10-11]。发生自发扭曲形变的必要条件是 $k_{22} < k_{11} \approx k_{33}$ 。目前,自发扭曲形变仍然是研究热点^[6,12],并影响器件的显示特性^[13]。

1969 年 Meyer^[14] 首次对挠曲电效应进行了理论解释,具有永久偶极矩的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,同样地,极化与电场相互作用又会对液晶分子的形变产生影响。类似于固体中压电效应使分子形变于电场之间并产生线性耦合,在液晶中表现为挠曲电效应^[15-16]。挠曲电效应是液晶分子场和诱导偶极子的直接耦合。畴壁中挠曲电效应的研究一直是一个热点问题^[1,17-18],挠曲电效应对实际显示模式 IPS (in-plan switching) 的影响也十分引人注目^[19]。

基于 Elston^[1] 和 Alberto^[5] 等人的研究基础,本文以平行排列液晶盒作为基本研究对象,探究

外电场作用下,展-弯壁(splay-bend wall)、扭曲壁(twist wall)及混合壁(mixed wall)的形成^[16],并分别在单一弹性常数近似($k_{11} = k_{22} = k_{33}$)和弹性各向异性($k_{22} < k_{11} \approx k_{33}$)两种情况下,对畴壁中的挠曲效应及自发扭曲效应进行研究。

2 几何模型

以 Leger^[3] 等人的实验为基础,选取平行排列向列相液晶盒。图 1(a)为偏光显微镜下观测到的透过 $\pm 45^\circ$ 偏振片的畴壁环图像。图 1(b)为畴壁环的指向矢示意图,外电场垂直于纸面向里,黑色双箭头方向为摩擦方向。由于预倾角为零,加电压后液晶分子指向矢会发生两种不同方向的 Freedericksz 转变,交界处形成畴壁。环形畴壁中包括展-弯壁,扭曲壁及不同扭曲角的混合壁。取畴壁各处的截面进行观察,图 1(b)中红色实线代表截面方向。当畴壁方向与液晶分子指向矢垂直时,截面处观察到的为展-弯壁;当畴壁与液晶分子指向矢平行时,截面处观察到的为扭曲壁;当畴壁与液晶分子指向矢既不平行也不垂直时,截面处观察到的为不同角度的混合壁^[4-5]。

在模拟中,将不同类型的畴壁用同一直角坐标系表示,规定液晶基板沿 x - y 面, z 轴方向为盒厚 d 的方向, y 轴方向为截面[图 1(b)中畴壁环的法线]方向,其长度用 l 表示,液晶分子指向矢与 x - y 面的夹角为倾角,用 θ 表示,液晶分子与 y 轴的夹角为扭曲角,用 φ 表示。图 1(c)(d)(e)为三种不同类型畴壁的液晶分子在基板(x - y 面内)排布的示意图。初始条件下规定液晶分子指向矢在 x - y 面内排列,且在左半盒的预倾角为正,右半盒的预倾角为负,电场沿 z 方向。由于预倾角的不同,电场作用下液晶分子指向矢会发生不同方向的 Freedericksz 转变,从而形成畴壁,壁的方向[图 1(b)中畴壁环的切线方向]沿 x 轴。畴壁环上壁的类型由扭曲角 φ 区分。当 $\varphi = 0^\circ$ 时加电压后形成展-弯壁,当 $\varphi = 90^\circ$ 时加电压后形成扭曲壁,当 φ 为其他角度时,加电压后形成不同角度的

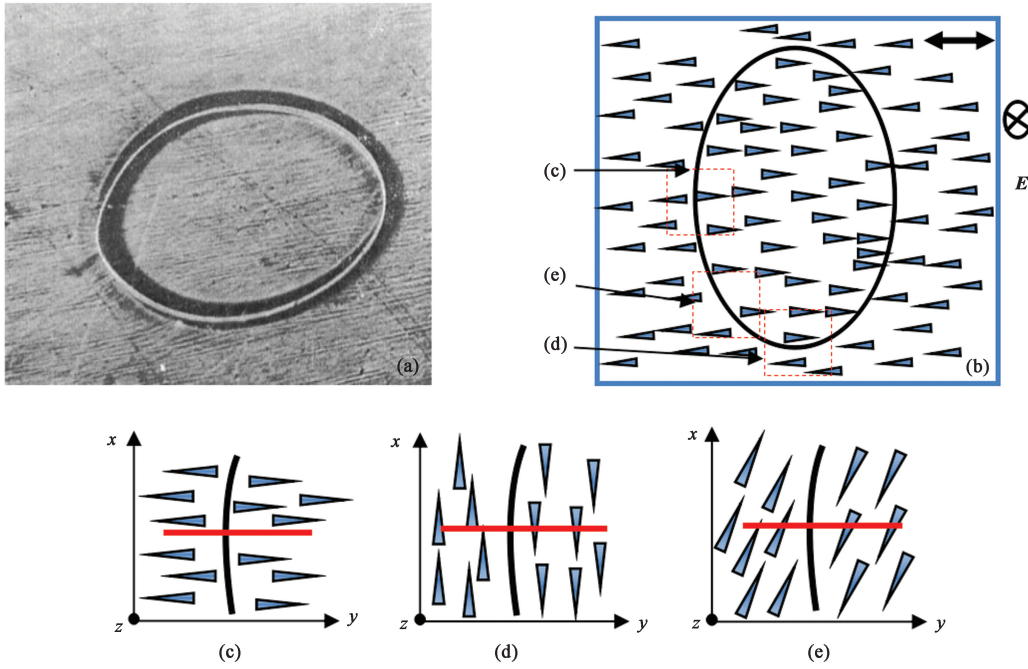


图 1 平行排列向列相液晶系统中的畴壁。(a)偏光显微镜下观测到的畴壁图像^[3]; (b)畴壁示意图; (c)展-弯壁 x - y 面示意图; (d)扭曲壁 x - y 面示意图; (e)混合壁 x - y 面示意图。

Fig.1 Image of domain wall in a parallel aligned nematic liquid crystal device. (a)Polarizing microscope image of domain wall; (b)A model of the domain wall; (c)A model of the splay-bend wall in x - y plan; (d)A model of the twist wall in x - y plan; (e)A model of the mixed wall in x - y plan.

混合壁。

3 理论方法

3.1 理论计算

基于 Landau-de Gennes 理论,采取与周璇^[20]等人相同的理论计算方法,通过二阶对称无迹的序参数张量 $\mathbf{Q} = \sum_{i=1}^3 \lambda_i \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_i$ 来描述液晶系统中指向矢的取向有序性,其中, $\mathbf{e}_i$ 为正交单位基矢量,它代表着序参数张量 $\mathbf{Q}$ 的特征矢量; λ_i 为其本征值。序参数张量 $\mathbf{Q}$ 同时描述单轴态与双轴态,由双轴性参数 β^2 确定系统的双轴性大小^[21],

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

其值在 $[0, 1]$ 之间变化。

外电场作用下, Landau-de Gennes 理论自由能密度表示为: $f = f_{\text{bulk}} + f_{\text{elastic}} + f_{\text{dielectric}}$, 其中:

$$f_{\text{bulk}} = A \text{tr} \mathbf{Q}^2 + \frac{2}{3} B \text{tr} \mathbf{Q}^3 + \frac{1}{2} C (\text{tr} \mathbf{Q}^2)^2, \quad (2)$$

为本体自由能密度,

$$f_{\text{elas}} = L_1 \frac{\partial Q_{ij}}{\partial x_k} \frac{\partial Q_{ij}}{\partial x_k} + L_2 \frac{\partial Q_{ij}}{\partial x_j} \frac{\partial Q_{ik}}{\partial x_k} + L_3 \frac{\partial Q_{ij}}{\partial x_k} \frac{\partial Q_{ik}}{\partial x_j}, \quad (3)$$

为系统的弹性自由能密度,

$$f_{\text{dielectric}} = -\frac{\epsilon_0}{2} \mathbf{E} \cdot \boldsymbol{\epsilon} \mathbf{E}, \quad (4)$$

为介电强度,

$$f_{\text{flexo}} = -\zeta_1 E_i Q_{ij,j} - \zeta_2 E_i Q_{ij} Q_{jk,k}, \quad (5)$$

为挠曲电效应引起的自由能密度。

在本体能中, B 与 C 均为常数, A 随温度变化,表达式为: $A = A_0 (T - T^*)$, 其中, A_0 是大于零的常数项, T^* 为向列相液晶的最低过冷温度。 f_{elastic} 中 L_1, L_2, L_3 由弹性常数 k_{11}, k_{22}, k_{33} 决定, 其中, $L_1 = \frac{1}{18 S_{\text{eq}}^2} [k_{33} - k_{11} + 3k_{22}]$, $L_2 =$

$$\frac{1}{3 S_{\text{eq}}^2} [k_{11} - k_{22}], L_3 = \frac{1}{6 S_{\text{eq}}^2} [k_{33} - k_{11}] \circ f_{\text{dielectric}}$$

中, ϵ_0 为真空介电常数, $\boldsymbol{\epsilon}$ 是描述向列相液晶由于电场强度 E 而引起的局部各向异性的介电常数张量。在 z 轴方向电场 E 作用下,介电能引起的

自由能密度为:

$$f_{\text{dielectric}} = -\frac{\epsilon_0}{2} [\epsilon_i E^2 + \epsilon_a Q_{33} E^2], \quad (5)$$

其中: $\epsilon_i = \frac{(\epsilon_{//} + \epsilon_{\perp})}{3}$ 与 $\epsilon_a = \frac{(\epsilon_{//} - \epsilon_{\perp})}{3S_{\text{eq}}}$ 分别为各向同性与各向异性介质的极化率。我们选用正性液晶材料进行模拟计算, 即 $\epsilon_a > 0$, 在这种情况下, 正性液晶分子趋向于平行于电场 E 的方向有序排列。 f_{flexo} 中, ζ_1 和 ζ_2 与展曲挠曲电系数 e_{11} 及弯曲挠曲电系数 e_{33} 有关。其中 $\zeta_1 = \frac{2(e_{11} + 2e_{33})}{9S_{\text{eq}}}$, $\zeta_2 = \frac{4(e_{11} - e_{33})}{9S_{\text{eq}}^2}$ 。

根据 Samojlik^[22] 等人的工作, 我们引入下列无量纲化参数:

$$\tilde{f} = \frac{f}{B^4 / (12C)^3}, \tilde{Q}_{ij} = \frac{Q_{ij}}{q_0}, \tilde{x} = \frac{x}{\xi_0},$$

$$\tilde{y} = \frac{y}{\xi_0}, \tilde{z} = \frac{z}{\xi_0}, \tilde{d} = \frac{d}{\xi_0},$$

$$\tilde{\epsilon}_a = \frac{\epsilon_a q_0}{\epsilon_i}, \tilde{E}_0 = \frac{q_0}{\xi_0} \sqrt{\frac{2L_1}{t\epsilon_i \epsilon_0}}, \tilde{E} = \frac{E}{E_0}, \tilde{t} = \frac{S_{\text{eq}}}{q_0}$$

$$\tilde{\zeta}_1 = \zeta_1 \sqrt{\frac{2}{tL_1 \epsilon_i \epsilon_0}}, \tilde{\zeta}_2 = \zeta_2 \sqrt{\frac{2q_0^2}{tL_1 \epsilon_i \epsilon_0}}$$

其中, $q_0 := S_{\text{eq}}(T^*) = -\frac{B}{12C}$ 是向列相液晶在过

冷温度下的序参数, $\xi_0 = \sqrt{\frac{L_1}{-Bq_0}}$ 是向列相相干长度, 用来约化长度变量。约化之后的自由能,

$$\tilde{f} = \tilde{f}_{\text{bulk}} + \tilde{f}_{\text{elastic}} + \tilde{f}_{\text{dielectric}} + \tilde{f}_{\text{flexo}},$$

具体表达式为:

$$\tilde{f}_{\text{bulk}} = \tilde{A} \text{tr} \tilde{Q}^2 - \frac{2}{3} \text{tr} \tilde{Q}^3 + \frac{1}{36} (\text{tr} \tilde{Q}^2)^2, \quad (6)$$

$$\tilde{f}_{\text{elas}} = \frac{\partial \tilde{Q}_{ij}}{\partial \tilde{x}_k} \frac{\partial \tilde{Q}_{ij}}{\partial \tilde{x}_k} + \frac{L_2}{L_1} \frac{\partial \tilde{Q}_{ij}}{\partial \tilde{x}_j} \frac{\partial \tilde{Q}_{ik}}{\partial \tilde{x}_k} + \frac{L_3}{L_1} \frac{\partial \tilde{Q}_{ij}}{\partial \tilde{x}_k} \frac{\partial \tilde{Q}_{ik}}{\partial \tilde{x}_j}, \quad (7)$$

$$\tilde{f}_{\text{dielectric}} = -\frac{1}{S_{\text{eq}}} [\tilde{E}_z^2 + \tilde{\epsilon}_a \tilde{Q}_{33} \tilde{E}_z^2], \quad (8)$$

$$\tilde{f}_{\text{flexo}} = \tilde{\zeta}_1 \tilde{E} \tilde{Q}_{ij,j} + \tilde{\zeta}_2 \tilde{E} \tilde{Q}_{ij} \tilde{Q}_{jk,k}, \quad (9)$$

其中: $\tilde{A} = \frac{9AC}{B^2}$ 代表约化温度,

$$\tilde{S}_{\text{eq}} = \frac{S_{\text{eq}}}{q_0} = \frac{3}{4} (1 + \sqrt{1 - (8\tilde{A})/3}),$$

为平衡态下的单轴标量序参数。

对系统的序参数张量 $\tilde{Q}(r, t)$ 进行迭代计

算。标量序参数 S 以及指向矢 $\mathbf{n}$, 可以分别通过序参数张量 $\mathbf{Q}$ 的最大本征值和最大本征值对应的本征矢得到。基于之前的研究^[23], 序参数张量 $\mathbf{Q}$ 的动力学方程为:

$$\frac{\partial \tilde{Q}}{\partial t} = \tilde{\mathbf{r}} \left[-\frac{\delta \tilde{f}}{\delta \tilde{Q}} + \frac{1}{3} \text{tr} \left(\frac{\delta \tilde{f}}{\delta \tilde{Q}} \right) \mathbf{I} \right], \quad (10)$$

其中: $\tilde{\mathbf{r}} = \mathbf{r} \times (-Bq_0)$, 其系数 $\mathbf{r}$ 由 $\mathbf{r} = \frac{6D^*}{[1 - 3\text{tr}(\mathbf{Q}^2)]^2}$ 给出。 D^* 是向列相液晶的转动扩散系数^[20]。我们利用二维有限元迭代法对方程(9)进行进一步处理,

$$\frac{[\tilde{Q}(t + \Delta t) - \tilde{Q}(t)]}{\Delta t} = -\tilde{\mathbf{r}} \left[-\frac{\delta \tilde{f}}{\delta \tilde{Q}} + \frac{1}{3} \text{tr} \left(\frac{\delta \tilde{f}}{\delta \tilde{Q}} \right) \mathbf{I} \right]. \quad (11)$$

3.2 参数选取

本文中, 设定液晶材料各项系数为: $A_0 = 0.043 \times 10^6 \text{ J/m}^3 \text{K}$, $B = -1.06 \times 10^6 \text{ J/m}^3$, $C = 0.87 \times 10^6 \text{ J/m}^3$, $e_{11} = 6.2 \times 10^{-12} \text{ C/m}$, $e_{33} = 1.8 \times 10^{-12} \text{ C/m}$, $D^* = 0.35 \text{ m}^2/\text{N} \cdot \text{s}$, 单一常数近似时选取: $k_{11} = k_{22} = k_{33} = 10.2 \times 10^{-12} \text{ J/m}$; 弹性各向异性时选取: $k_{11} = k_{33} = 10.2 \times 10^{-12} \text{ J/m}$, $k_{22} = 5.8 \times 10^{-12} \text{ J/m}$, 约化温度设定为 $\tilde{A} = 1/4$ 。同时, 介电各向异性为 $\tilde{\epsilon}_a = 0.223$ ($\epsilon_{\perp} = 10.8$)。计算可得约化参量: $\xi_0 = 10.9 \times 10^{-9} \text{ m}$ 以及 $E_0 = 1.45 \text{ V}/\mu\text{m}$ 。模拟中选取盒厚 $z = 214\xi_0 \approx 2.3 \mu\text{m}$, 盒宽 $y = 428\xi_0 \approx 4.7 \mu\text{m}$ 。

4 模拟结果分析

4.1 单一弹性常数近似

假设系统左右两部分的液晶分子具有相反方向的预倾角, 外场作用下, 系统倾角变化导致畴壁环的出现。该畴壁环中同时存在 3 种不同类型的壁, 壁的类型取决于分子扭曲角; 且 3 种壁所需电压范围一致, 倾角变化相同。

图 2 为不同约化电压 E/E_0 作用下 $z = d/2$ 处的倾角变化。 $E/E_0 = 0.2$ 时液晶分子倾角开始发生变化, 此时倾角由 90° 经过 0° 变化到 -90° , 系统中首次出现畴壁结构, 且该结构出现在 $\theta \neq \pm 90^\circ$ 的区域内, 即 $y = l/2$ 附近; $E/E_0 \geq 1.2$ 时, 倾角发生突变, 由 90° 瞬变为 -90° , 即液晶分子均

沿着电场方向排列,此时系统中畴壁结构消失。综上可知:畴壁出现的电压范围为 $0.2 \leq E/E_0 < 1.2$ 。为了进一步阐述外场对畴壁结构的影响,选取 $E/E_0 = 0.8$ 进行详细研究,由图 2 可得,此时畴壁出现的范围为 $180\xi_0 \leq y \leq 248\xi_0$ 。

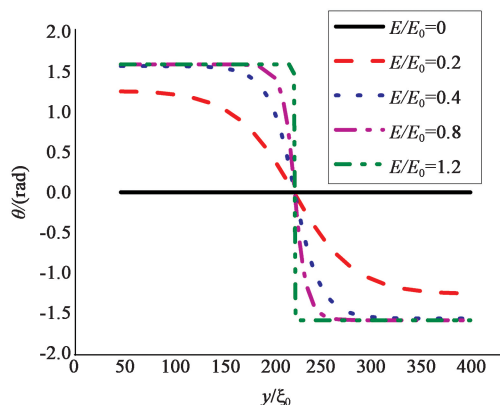


图 2 不同约化电压下, $z = d/2$ 处的液晶分子倾角变化曲线。

Fig. 2 Tilt angle curves along $z = d/2$ under different values of E/E_0 .

4.1.1 展-弯壁

当液晶分子的扭曲角 $\varphi = 0^\circ$ 时,在电场作用下会形成展-弯壁。图 3 给出 $E/E_0 = 0.8$ 时展-弯壁系统中 $114\xi_0 \leq y \leq 314\xi_0$ 处的指向矢分布 [3(a)] 以及相应的倾角图 [3(b)]。左半盒的倾角由 0° 逐渐变化到 90° , 右半盒的倾角由 0° 逐渐变化到 -90° 。其扭曲角始终保持 $\varphi = 0^\circ$ 不变。在考虑挠曲电效应后发现,挠曲电效应对展-弯壁无影响。

4.1.2 扭曲壁

当液晶分子的扭曲角 $\varphi = 90^\circ$ 时,在电场作用下会形成扭曲壁。图 4(a) 给出 $E/E_0 = 0.8$ 时形成的扭曲壁中 $114\xi_0 \leq y \leq 314\xi_0$ 处的指向矢图,

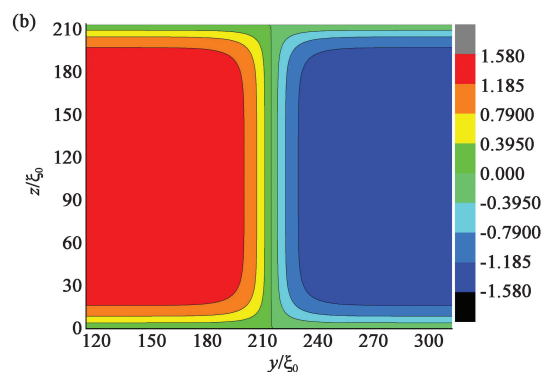
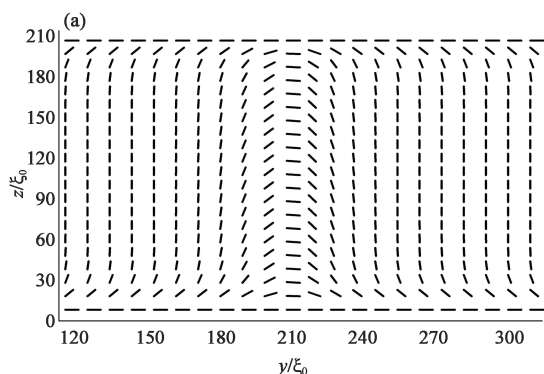


图 3 $E/E_0 = 0.8$ 时形成的展-弯壁。(a) 指向矢图; (b) 倾角图。

Fig. 3 Structure of a splay-bend wall under $E/E_0 = 0.8$. (a) Director profile; (b) Tilt angle.

其液晶分子指向矢的倾角的变化与展-弯壁相同 [见图 3(b)], 图 4(b) 为扭曲角图, 在外加电场的作用下扭曲角 $\varphi = 90^\circ$ 始终保持不变。

挠曲电效应会使扭曲壁中心处液晶分子的扭曲角发生改变, 且电场方向不同, 挠曲电效应对扭曲角的影响也不同。图 5 和图 6 分别给出 $E/E_0 =$

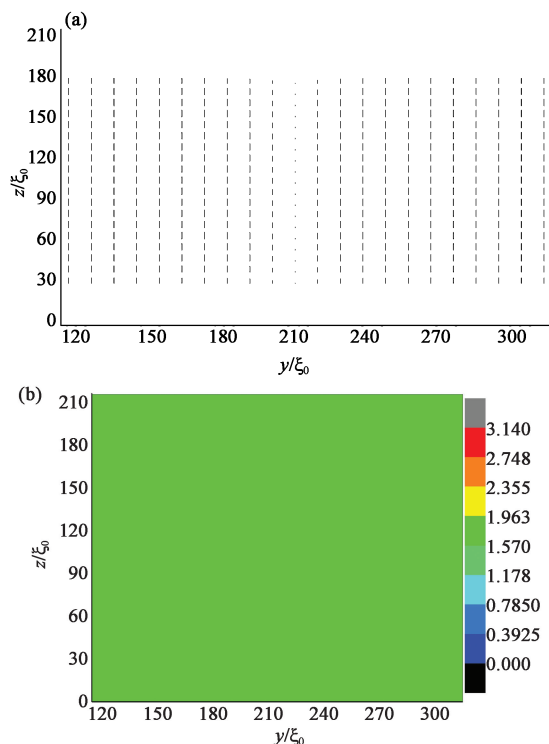


图 4 $E/E_0 = 0.8$ 时形成的扭曲壁。(a) 指向矢图; (b) 扭曲角图

Fig. 4 Structure of a twist wall under $E/E_0 = 0.8$. (a) Director profile; (b) Twist angle.

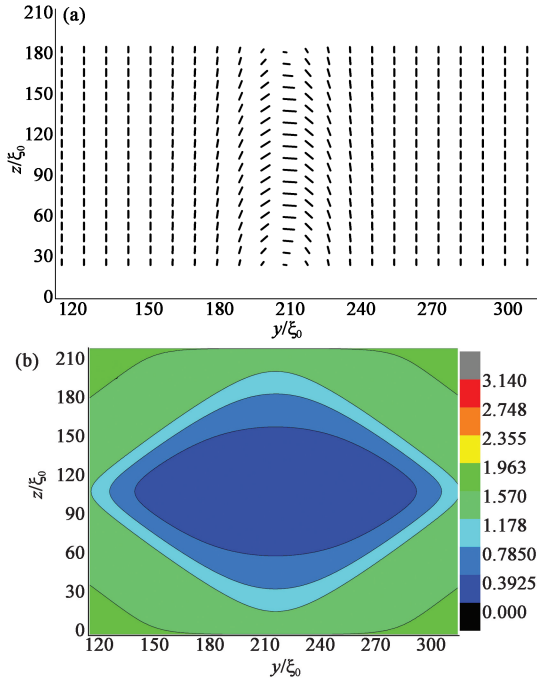


图 5 $E/E_0 = 0.8$ 时挠曲电效应下的扭曲壁。(a)指向矢图;(b)扭曲角图

Fig.5 Structure of a twist wall under $E/E_0 = 0.8$ with flexoelectricity. (a) Director profile; (b) Twist angle.

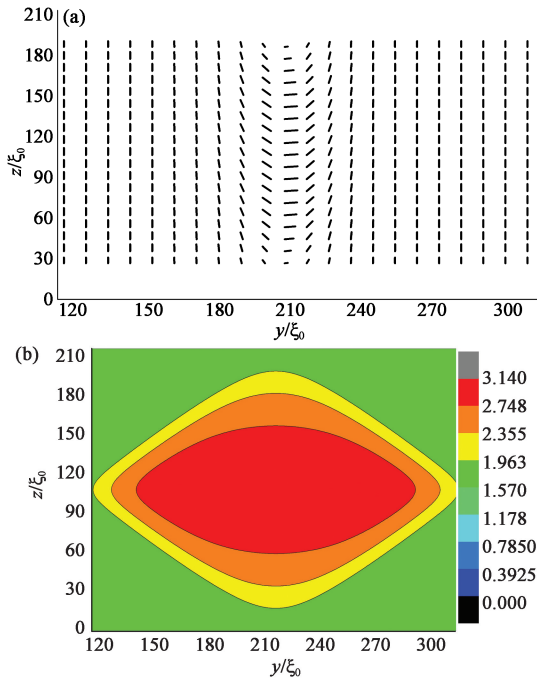


图 6. $E/E_0 = -0.8$ 时挠曲电效应下的扭曲壁。(a)指向矢图;(b)扭曲角图

Fig.6 Structure of a twist wall under $E/E_0 = -0.8$ with flexoelectricity. (a) Director profile; (b) Twist angle.

0.8 以及 $E/E_0 = -0.8$ 时挠曲电作用下 $114\xi_0 \leq y \leq 314\xi_0$ 处的扭曲壁图。对比可知, $E/E_0 = 0.8$ 时, 扭曲壁中心附近的扭曲角由 90° 逐渐变化到 0° ; $E/E_0 = -0.8$ 时, 扭曲壁中心附近扭曲角由 90° 逐渐变化到 180° 。挠曲电效应对扭曲壁指向矢的倾角变化无影响。

图 7 给出在挠曲电效应下, 扭曲壁中心即 $y = l/2$ 处扭曲角的变化曲线。我们发现, 正电压下, 壁中心处的扭曲角逐渐由 90° 变化到 0° , 负电压下, 壁中心处的扭曲角逐渐由 90° 变化到 180° 。所以正负电压下, 挠曲电效应对扭曲壁指向矢扭曲角的影响是对称的^[24]。

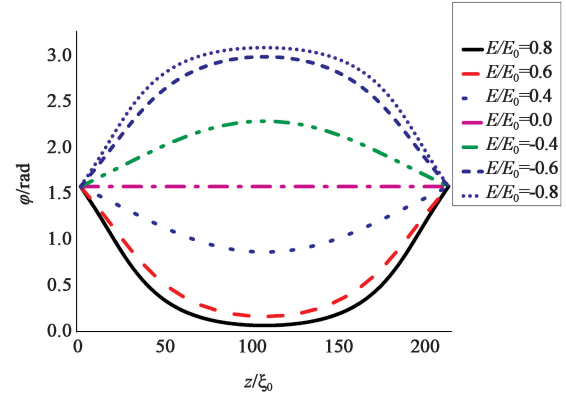


图 7 考虑挠曲电作用, 不同约化电压下, 扭曲壁中心即 $y = l/2$ 处扭曲角的变化曲线。

Fig.7 Twist angle curves in twist walls along $y = l/2$ under different values of E/E_0 with flexoelectricity.

4.1.3 混合壁

当液晶分子指向矢的扭曲角 $\varphi \neq 0^\circ$ (或 90°) 时, 电场作用下, 系统内形成不同角度的混合壁。以 45° 混合壁为例进行说明。图 8 给出 $E/E_0 = 0.8$ 时 $114\xi_0 \leq y \leq 314\xi_0$ 处形成的 45° 混合壁图。图 8(a) 为指向矢 y - z 平面图, 45° 混合壁的指向矢为三维结构, 为方便观察图 8(c) 给出其指向矢的三维示意图。液晶分子指向矢的倾角变化与展-弯壁相同[见图 3(b)]。图 8(b) 为扭曲角图, 在外加电场的作用下扭曲角 $\varphi = 45^\circ$ 始终保持不变。

挠曲电效应会使 45° 混合壁中心处指向矢的扭曲角发生改变, 且施加外电场方向不同挠曲电效应对指向矢扭曲角的影响也不同。图 9 为 $E/E_0 = 0.8$ 时挠曲电作用下的 45° 混合壁图。图 10 为 $E/E_0 = -0.8$ 时挠曲电作用下的 45° 混合壁图。

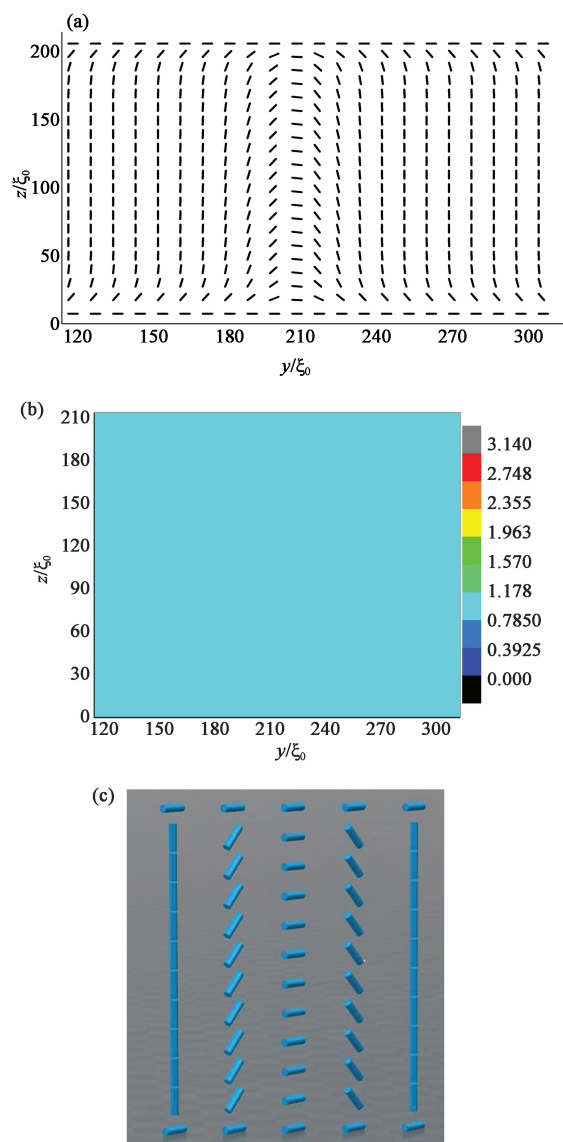


图 8 $E/E_0 = 0.8$ 时形成的 45° 混合壁。(a) 指向矢图; (b) 扭曲角图; (c) 三维指向矢示意图。

Fig.8 Structure of a 45° mixed wall under $E/E_0 = 0.8$. (a) Director profile; (b) Twist angle; (c) Three dimensional diagram of director.

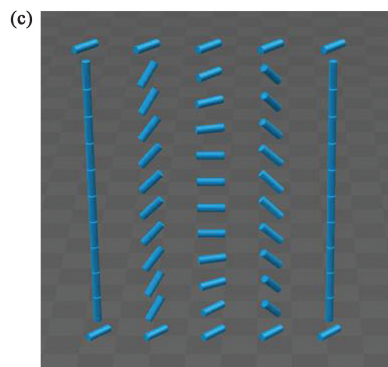
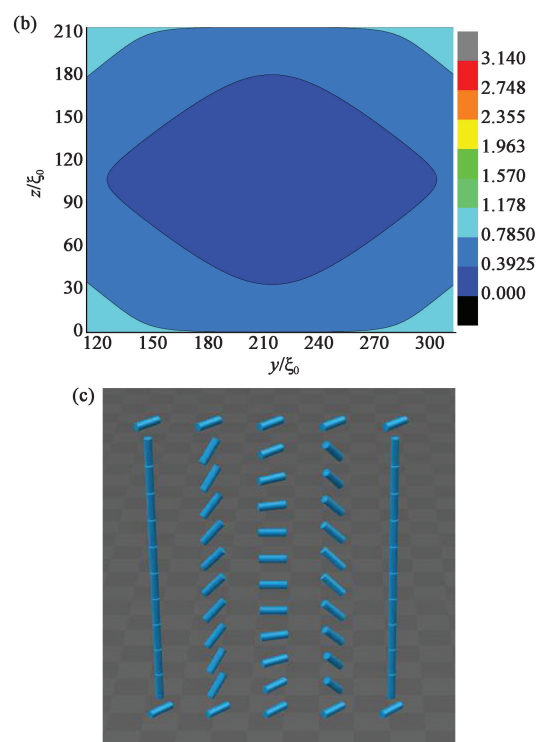
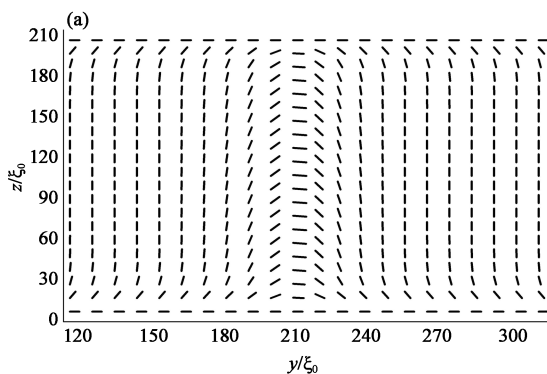
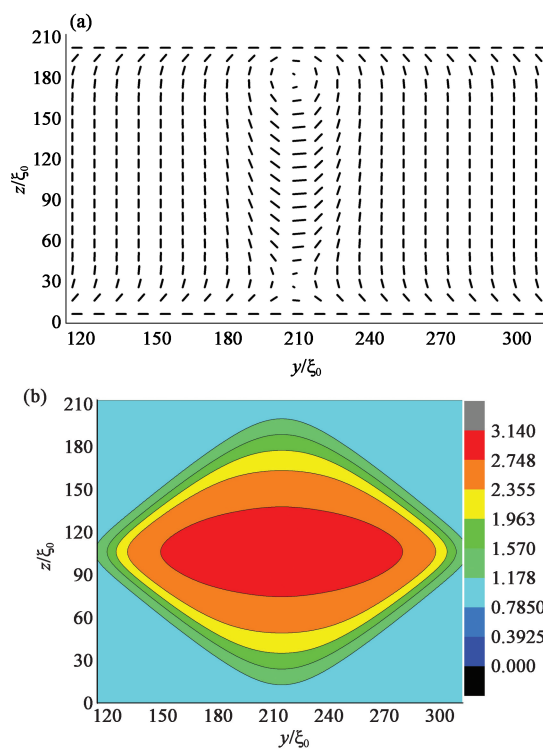


图 9 $E/E_0 = 0.8$ 时挠曲电效应下的 45° 混合壁。(a) 指向矢图; (b) 扭曲角图; (c) 三维指向矢示意图。

Fig.9 Structure of a 45° mixed wall under $E/E_0 = 0.8$ with flexoelectricity. (a) Director profile; (b) Twist angle; (c) Three dimensional diagram of director.



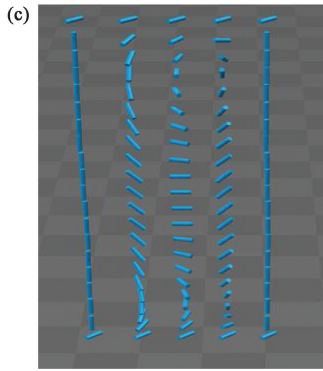


图 10 $E/E_0 = -0.8$ 时挠曲电效应下的 45° 混合壁。(a)指向矢图, (b)扭曲角图, (c)三维指向矢示意图。

Fig.10 Structure of a 45° mixed wall under $E/E_0 = -0.8$ with flexoelectricity. (a) Director profile; (b) Twist angle; (c) Three dimensional diagram of director.

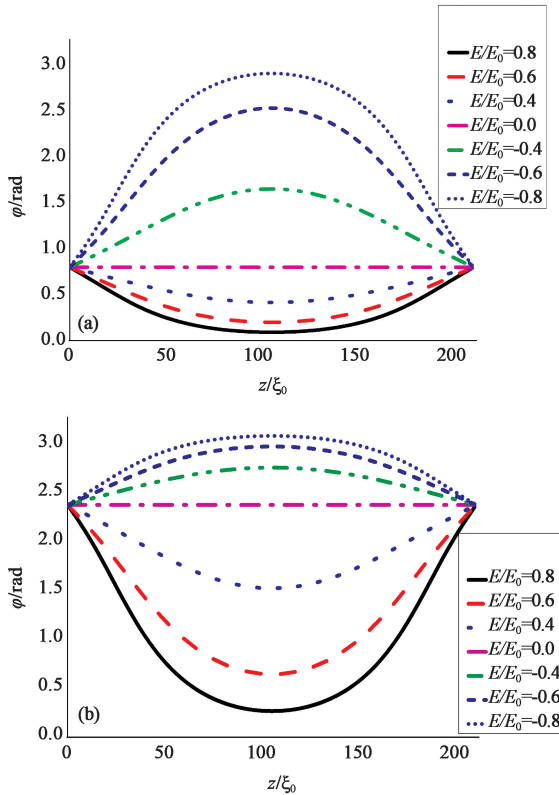


图 11 $y = l/2$ 处, 考虑挠曲电效应时不同电压下扭曲角的变化曲线。(a) 45° 混合壁; (b) 135° 混合壁。

Fig.11 Twist angle in mixed walls curves along $y = l/2$ under different values of E/E_0 with flexoelectricity. (a) The original twist angle $\phi = 45^\circ$; (b) The original twist angle $\phi = 135^\circ$.

对比图 9 和图 10 可知, 当 $E/E_0 = 0.8$ 时, 45° 混合壁中心附近的扭曲角会由 45° 逐渐变化到 0° ; 当 $E/E_0 = -0.8$ 时 45° 混合壁中心附近扭曲角会由 45° 经过 90° 逐渐变化到 180° 。挠曲电效应对 45° 混合壁的指向矢的倾角变化无影响。

图 11 给出 45° 混合壁以及 135° 混合壁中心 $y = l/2$ 处的指向矢的扭曲角在挠曲电效应下的变化的曲线。结合图 11(a) 和 (b) 可知, 在挠曲电作用下, 正电压时, 混合壁中心处的液晶分子扭曲角会逐渐由原来的角度变化到 0° , 负电压时, 混合壁中心处的液晶分子扭曲角会逐渐由原来的角度变化到 180° 。在挠曲电效应下, 液晶分子指向矢的扭曲角的变化量不是对称的。

综合研究外加电场及挠曲电效应对畴壁上不同种类壁的影响。不考虑挠曲电效应时, 外加电场对系统指向矢的扭曲角无影响。图 12 为 $z = d/2$ 处不同类型畴壁的指向矢扭曲角图, 可以看出所形成的畴壁的种类与指向矢的倾角的变化无关, 只与扭曲角有关。

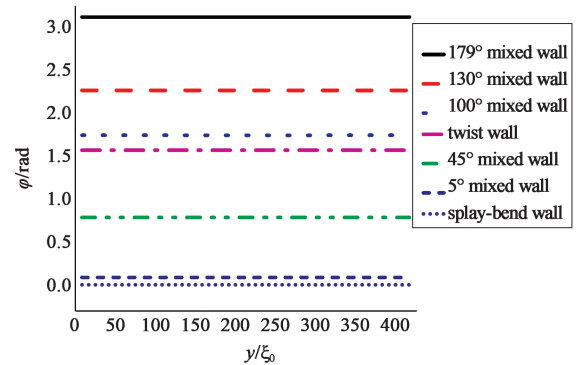


图 12 $z = d/2$ 处, 不同类型的畴壁的液晶分子指向矢的扭曲角。

Fig.12 Twist angle in different walls curves along $z = d/2$.

考虑挠曲电效应后发现, 挠曲电效应对指向矢的倾角变化无影响, 只对扭曲角产生影响, 且外加电场的方向不同, 挠曲电效应对扭曲角的影响也不同。图 13 为考虑挠曲电效应时, $E/E_0 = 0.8$ 和 $E/E_0 = -0.8$ 两种约化电压下, $z = d/2$ 处的指向矢的扭曲角图。结合图 12 和图 13 可知, 外场方向不同, 受挠曲电效应影响的指向矢扭曲角的变化方向不同; 对于混合壁, 指向矢扭曲角的变化量是不对称的。

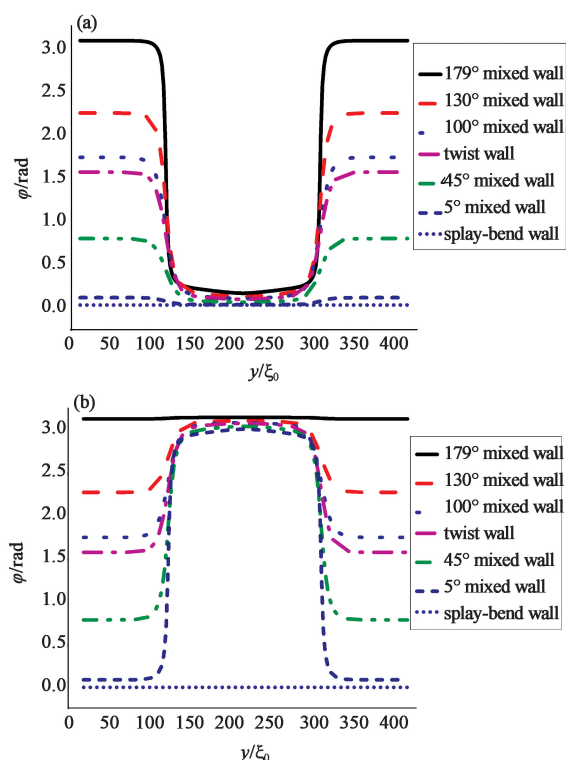


图 13 在外加电场和挠曲电共同作用下, $z = d/2$ 处,不同类型的畴壁的扭曲角的变化曲线。(a) $E/E_0 = 0.8$; (b) $E/E_0 = -0.8$ 。

Fig.13 Twist angle in different walls curves along $z = d/2$ under different values of E/E_0 with flexoelectricity. (a) $E/E_0 = 0.8$; (b) $E/E_0 = -0.8$ 。

4.2 弹性各向异性时

弹性各向异性条件下,液晶系统形成畴壁的电场范围与单一弹性常数近似下相同,也就是说,外加电场对倾角的影响与单一常数近似下相同,液晶分子指向矢倾角随约化电压的变化见图 2。

4.2.1 展-弯壁

扭曲角 $\varphi = 0^\circ$ 即形成展-弯壁条件下,如图 14 为 $E/E_0 = 0.3$ 时所形成的展-弯壁图,图 14(a)和

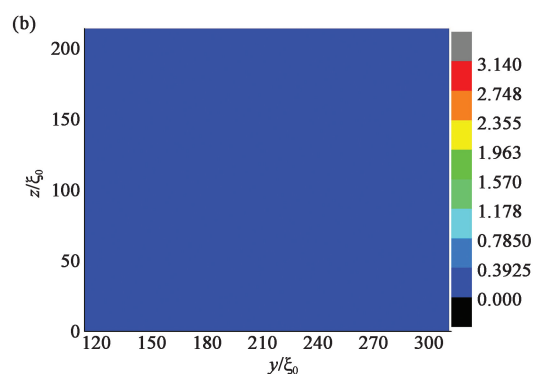
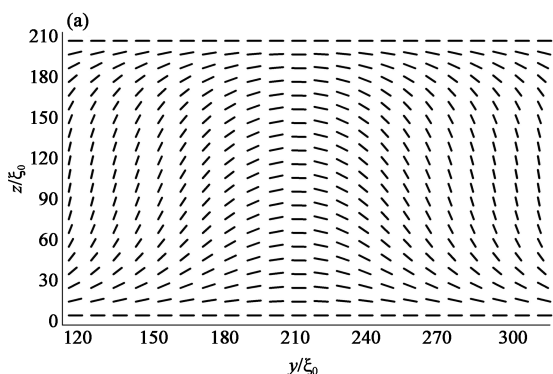


图 14 $E/E_0 = 0.3$ 时形成的展-弯壁图。(a) 指向矢图; (b) 扭曲角图。

Fig.14 Structure of a splay-bend wall under $E/E_0 = 0.3$. (a) Director profile; (b) Tilt angle.

(b) 分别为 $114\xi_0 \leq y \leq 314\xi_0$ 处的液晶分子指向矢与扭曲角图。此时只有倾角变化,扭曲角 $\varphi = 0^\circ$ 保持不变。如图 15 为 $E/E_0 = 0.8$ 时的展-弯壁图,此时壁中心处扭曲角逐渐由 0° 变化到 90° ,展-弯壁中心处发生了弹性各向异性的诱导的自发扭曲效应。

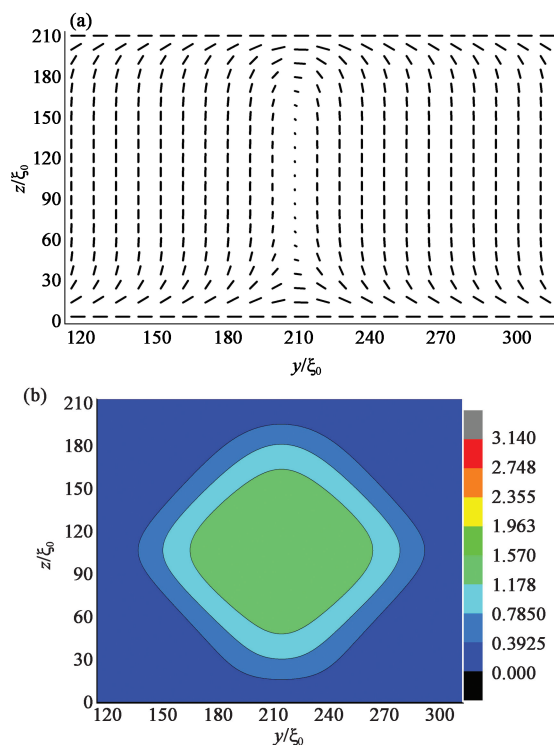


图 15 $E/E_0 = 0.8$ 时,发生自发扭曲的展-弯壁图。(a) 指向矢图; (b) 扭曲角图。

Fig.15 Spontaneous distortion structure of a splay-bend wall under $E/E_0 = 0.8$. (a) Director profile; (b) Tilt angle.

图 16 给出不同约化电压 $z = d/2$ 处在扭曲角变化曲线。当 $0.2 \leq E \leq 0.3$ 时,形成展-弯壁,此时只有倾角的变化,扭曲角 $\varphi = 0^\circ$ 保持不变; $0.4 \leq E < 1.5$ 时,展-弯壁处的液晶分子指向矢在弹性各向异性诱导下发生自发扭曲效应,且约化电压的数值越大,展-弯壁中心处扭曲角越接近 90° 。

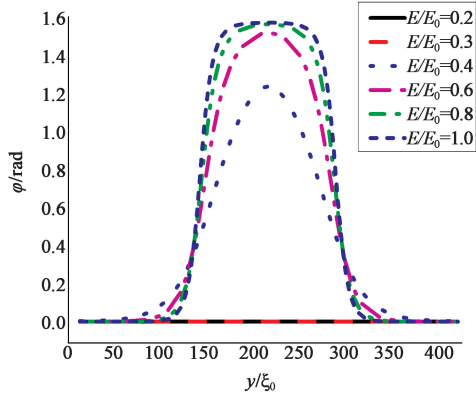


图 16 展-弯壁 $z = d/2$ 处,液晶分子指向矢的扭曲角随约化电压的变化曲线

Fig.16 Twist angle in splay-bend wall curves along $z = d/2$ under different values of E/E_0 .

4.2.2 扭曲壁

扭曲角 $\varphi = 90^\circ$ 即形成扭曲壁条件下,扭曲壁中心处受弹性各向异性诱导的扭曲角的变化量非常小,基本不影响壁的结构。

4.2.3 混合壁

扭曲角 $\varphi = 45^\circ$ 即形成 45° 混合壁的条件下,图 17 给出 $E/E_0 = 0.8$ 时的混合壁图。由图可知,在外电场作用下 45° 混合壁中心处扭曲角由 45° 逐渐变化到 90° ,发生自发扭曲效应。

图 18 给出混合壁在不同约化电压下, $z = d/2$ 处的扭曲角变化曲线。由此可知,在外电场作用下,混合壁中心处扭曲角都由原角度变化到 90° ,约化电压越大,壁中心处扭曲角越接近 90° 。

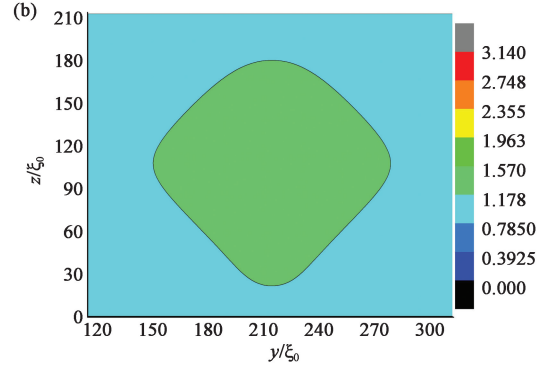
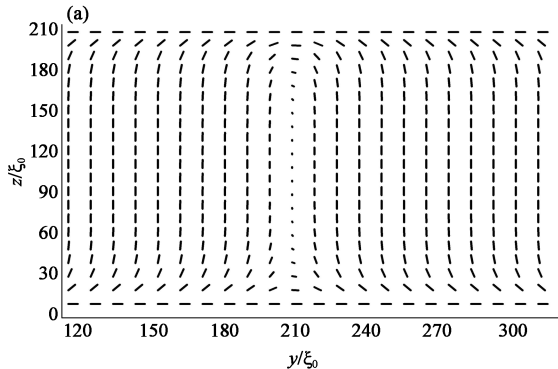


图 17 约化电压 $E/E_0 = 0.8$ 时,发生自发扭曲效应后 45° 混合壁图。(a)指向矢图;(b)扭曲角图。

Fig.17 Spontaneous distortion structure of a 45° mixed wall under $E/E_0 = 0.8$. (a) Director profile; (b) Tilt angle.

在外电场作用下,混合壁出现了弹性各向异性诱导的发生自发扭曲效应。

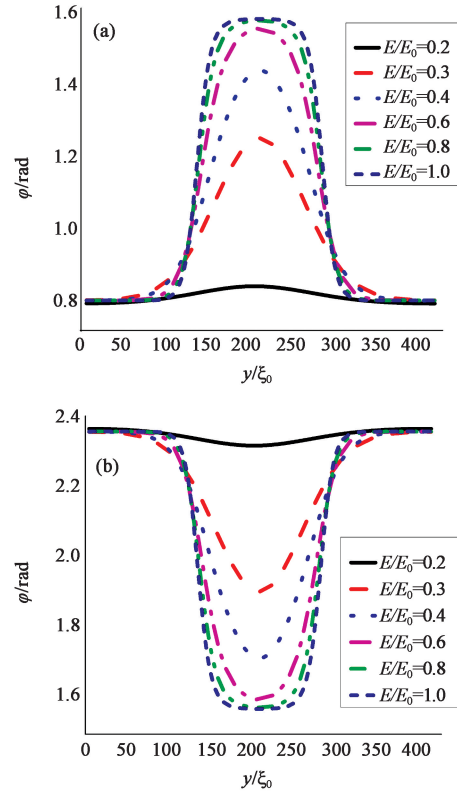


图 18 混合壁 $z = d/2$ 处,液晶分子指向矢的扭曲角随约化电压的变化曲线。(a) 45° 混合壁; (b) 135° 混合壁。

Fig.18 Twist angle in mixed walls curves along $z = d/2$ under different values of E/E_0 with flexoelectricity. (a) The original twist angle $\varphi = 45^\circ$; (b) The original twist angle $\varphi = 135^\circ$.

图 19 给出不同角度的壁在 $E/E_0 = 0.3$ 和 $E/E_0 = 0.8$ 两种约化电压下, $z = d/2$ 处扭曲角的变化曲线。由此可知,在外电场作用下畴壁的扭曲角向 $\varphi = 90^\circ$ (图 1 中畴壁环的切线方向) 靠拢,且外加电场越大,畴壁中心处的扭曲角越接近 90° 。在外电场作用下弹性的各向异性会诱导液晶分子发生自发扭曲效应。

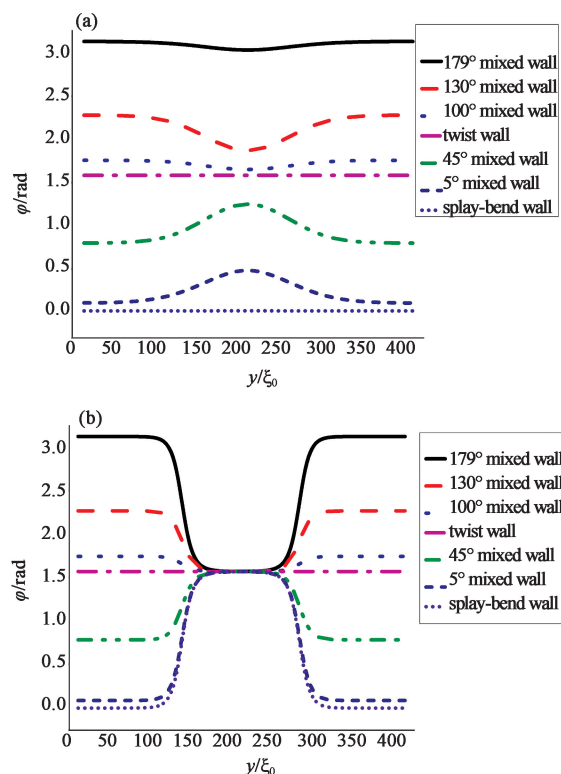


图 19 电场作用下, $z = d/2$ 处不同类型畴壁的扭曲角的变化曲线。(a) $E/E_0 = 0.3$; (b) $E/E_0 = 0.8$

Fig.19 Twist angle in different walls curves along $z = d/2$ under different values of E/E_0 . (a) $E/E_0 = 0.3$; (b) $E/E_0 = 0.8$

挠曲电效应同样对发生自发扭曲的畴壁有影响。图 20 给出在 $E/E_0 = 0.8$ 和 $E/E_0 = -0.8$ 两种约化电压下, $z = d/2$ 处的不同类型畴壁的扭曲角变化曲线。由此可知,所加电场方向不同,挠曲电效应对扭曲角变化的影响不同。正电场下,畴壁中心处扭曲角转到小于 90° ,负电场下,畴壁中心处扭曲角转到大于 90° 。弹性各向异性时,挠曲电效应会在发生自发扭曲效应的基础上对畴壁的扭曲角产生叠加影响。

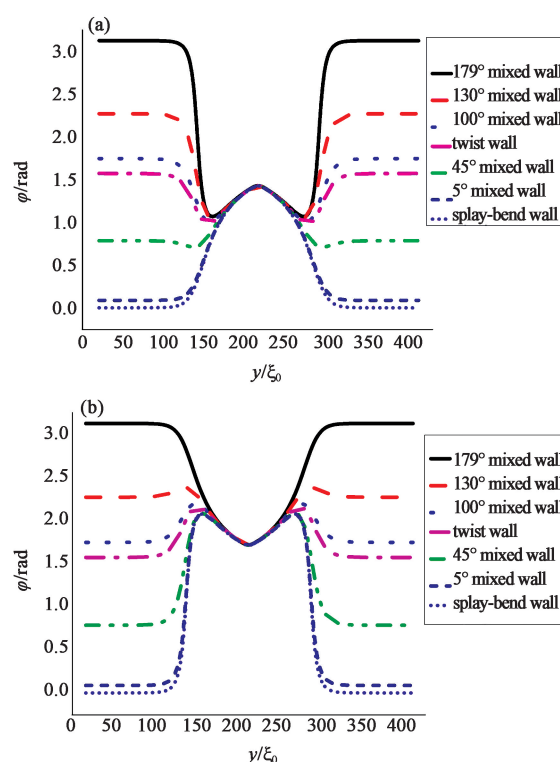


图 20 在外加电场和挠曲电共同作用下, $z = d/2$ 处,不同类型的畴壁的扭曲角的变化曲线。(a) $E/E_0 = 0.8$; (b) $E/E_0 = -0.8$.

Fig.20 Twist angle in different walls curves along $z = d/2$ under different values of E/E_0 with flexoelectricity. (a) $E/E_0 = 0.8$; (b) $E/E_0 = -0.8$.

5 结 论

本文研究了平行排列向列相液晶系统中畴壁的形成及分类,分别在单一常数近似和弹性各向异性两种不同情况下,研究了畴壁中的挠曲效应及自发扭曲效应。研究结果表明,外电场作用会使液晶分子指向矢倾角发生变化。给左右两半盒规定不同方向的预倾角,外电场作用下指向矢会发生不同方向的 Freedericksz 转变,当 $0.2 \leq E/E_0 \leq 1.2$ 时在系统中心附近出现畴壁。畴壁的类型由液晶分子指向矢的扭曲角 φ 决定。 $\varphi = 0^\circ$ 时,形成展-弯壁; $\varphi = 90^\circ$ 时,形成扭曲壁;当 $\varphi \neq 0^\circ$ (或 90°) 时,形成不同角度的混合壁。

在单一常数近似下,外电场作用只影响指向矢的倾角变化,对扭曲角无影响。挠曲电效应会

影响指向矢扭曲角,而对倾角无影响。外电场方向不同,挠曲电效应对扭曲角的影响也不同。正电场时,畴壁中心附近指向矢的扭曲角由原来的角度逐渐变化到 0° ; 负电场下,扭曲角由原来的角度逐渐变化到 180° 。本文首次提出,电场方向不同,挠曲电效应会引起混合壁中指向矢扭曲角

的非对称变化,并给出这一非对称变化的详细结果。同时,文中首次发现在一定弹性各向异性条件下,外电场作用会诱导畴壁发生自发扭曲效应,使扭曲角由原来的角度逐渐变化到 90° 。挠曲电效应会在自发扭曲的基础上,对扭曲角产生叠加影响。这些现象有待实验验证。

参 考 文 献:

- [1] ELSTON S J. Flexoelectricity in nematic domain walls [J]. *Physical Review E*, 2008, 78(1): 011701.
- [2] DE GENNES P G, PROST J. *The Physics of Liquid Crystals* [M]. Oxford: Oxford University Press, 1993: 189-191.
- [3] LÉGER L. Walls in nematics[J]. *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, 1973, 24(1/2): 33-44.
- [4] NETO A M F, MARTINOT-LAGARDE P, DURAND G. Anisotropy induced director refraction inside inversion walls in nematic liquid crystals [J]. *J. Physique Lett.*, 1984, 45(16): 793-798.
- [5] De LÓZAR A, SCHÖPF W, REHBERG I. Transformation from walls to disclination lines: statics and dynamics of the pincement transition [J]. *Physical Review E*, 2005, 72(5): 051713.
- [6] JEONG J, DAVIDSON Z S, COLLINGS P J, *et al.* Chiral symmetry breaking and surface faceting in chromonic liquid crystal droplets with giant elastic anisotropy [J]. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 2014, 111(5): 1742-1747.
- [7] ATHERTON T J, SAMBLES J R. Orientational transition in a nematic liquid crystal at a patterned surface [J]. *Physical Review E*, 2006, 74(2): 022701.
- [8] 王永超,张志东,周旋,向列相液晶弹性各向异性诱导液晶盒产生漏光的研究[J].液晶与显示,2015,30(6):949-959.
WANG Y C, ZHANG Z D, ZHOU X. Study of light leakage induced by the elastic anisotropy of the nematic liquid crystal [J]. *Chin. J. Liq. Cryst. Disp.*, 2015, 30(6): 949-959. (in Chinese)
- [9] LAVRENTOVICH O D, SERGAN V V. Parity-breaking phase transition in tangentially anchored nematic drops [J]. *Il Nuovo Cimento D*, 1990, 12(9): 1219-1222.
- [10] XU F, KITZEROW H S, CROOKER P P. Director configurations of nematic-liquid-crystal droplets: negative dielectric anisotropy and parallel surface anchoring [J]. *Physical Review E*, 1994, 49(4): 3061-3068.
- [11] DRZAIC P S. A case of mistaken identity: spontaneous formation of twisted bipolar droplets from achiral nematic materials [J]. *Liquid Crystals*, 1999, 26(5): 623-627.
- [12] JAMES R, FUKUDA J I. Twist transition of nematic hyperbolic hedgehogs [J]. *Physical Review E*, 2014, 89(4): 042501.
- [13] WANG Y C, ZHANG Z D, ZHOU X. Light leakage induced by spontaneous distortion of the nematic director in bulk defect structures [J]. *Journal of Display Technology*, 2016, 12(4): 402-411.
- [14] MEYER R B. Piezoelectric effects in liquid crystals [J]. *Physical Review Letters*, 1969, 22(18): 918-921.
- [15] 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)
- [16] CHANDRASHEKAR S. *Liquid Crystals* [M]. 2nd ed. Cambridge: Cambridge University Press, 1992: 205-207.
- [17] KUMAR P, KRISHNAMURTHY K S. Flexoelectric response at defect sites in nematic inversion walls [J]. *Liquid Crystals*, 2006, 33(2): 131-138.
- [18] TIAN Y, ZHANG Z D. Interaction between a $+1$ defect in a nematic thin film and the surface wall and flexoelectric response at the defect site [J]. *Liquid Crystals*, 2015, 42(3): 288-297.
- [19] KIM M S, BOS P J, KIM S W, *et al.* Flexoelectric effect in an in-plane switching (IPS) liquid crystal cell for low-power consumption display devices [J]. *Scientific Reports*, 2016, 6: 35254.
- [20] WANG Y C, ZHOU X, YE W J, *et al.* New surface order reconstruction induced by electric field application in a

- nanoconfined HAN cell with a topological defect [J]. *AIP Adv.*, 2015, 5(10): 107127.
- [21] KAISER P, WIESE W, HESS S. Stability and instability of an uniaxial alignment against biaxial distortions in the isotropic and nematic phases of liquid crystals[J]. *J. Non-Equilib Thermodyn.*, 1992, 17(2): 153-169.
- [22] KRALJ S, ROSSO R, VIRGA E G. Finite-size effects on order reconstruction around nematic defects[J]. *Physical Review E*, 2010, 81(2): 021702.
- [23] GUZMAN O, ABBOTT L, DE PABLO J J. Quenched disorder in a liquid-crystal biosensor: adsorbed nanoparticles at confining walls [J]. *J. Chem. Phys.*, 2005, 122(18): 184711.
- [24] 张辉,郑桂丽,田毅,等.对向列相液晶反转壁中+1 缺陷处挠曲电效应的理论分析[J].液晶与显示,2016,31(8): 740-747.
- ZHANG H, ZHENG G L, TIAN Y, *et al.* Theoretical analysis of the influence of flexoelectric effect on the +1 defect site in nematic inversion walls [J]. *Chin. J. Liq. Cryst. Disp.*, 2016, 31(8): 740-747. (in Chinese)

作者简介:张晶(1992—),女,河北保定人,硕士研究生,从事液晶物理方面的学习和研究。E-mail: 617758346@qq.com