

文章编号:1007-2780(2018)12-1002-06

同心柱筒中混合排列向列相液晶中的 挠曲电效应

常雨珂,张艳君*,叶文江

(河北工业大学 理学院,天津 300401)

摘要: 本文研究径向电场作用下同心柱筒中混合排列向列相液晶的指向矢分布,重点研究挠曲电效应对指向矢分布的影响。向列相液晶处于同心圆柱构成的薄层间,内表面径向锚定、外表面轴向锚定以及内表面轴向锚定、外表面径向锚定构成两种同心柱筒混合排列模型。基于向列相液晶 Frank 弹性理论,通过差分迭代方法,分别在强锚定及弱锚定边界条件下,研究了两种模型中挠曲电效应对指向矢分布的影响。研究表明:挠曲电效应在薄层内边界、外边界以及薄层内部对指向矢分布有着不同的影响;同心柱筒中指向矢分布由柱对称性、边界锚定作用、介电耦合作用、挠曲电效应的综合作用所决定。

关键词: 向列相液晶;柱状薄层;混合排列;锚定能;挠曲电

中图分类号: O753.2 **文献标识码:** A **doi:** 10.3788/YJYXS20183312.1002

Flexoelectric effect of hybrid aligned nematic liquid crystals in concentric cylinders

CHANG Yu-ke, ZHANG Yan-jun*, YE Wen-jiang

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

Abstract: The director distribution of the hybrid aligned nematic liquid crystal in concentric cylinders under a radial electric field is studied. The influence of the flexoelectric effect on director distribution is mainly studied. The nematic liquid crystals are in the thin layer of concentric cylinders, in which the radial anchoring of the inner surface and the axial anchoring of the external surface, or the axial anchoring of the inner surface and the radial anchoring of the external surface constitute two hybrid aligned nematic liquid crystals models. Based on the Frank elastic theory of nematic liquid crystal, the influence of the flexoelectric effect on the director distribution in the two models is studied under the

收稿日期: 2018-08-01; **修订日期:** 2018-09-03.

基金项目: 河北省高等学校科学技术研究青年基金(No. QN2015260);河北省高等教育教学改革研究与实践项目(No. 2017GJJG018);河北工业大学本科教育教学改革研究项目(No.201802003);河北工业大学大学生创新创业训练计划项目(No.201710080204, No. 201810080175, No.201810080251)

Supported by the Research Project of Hebei Education Department, China (No. QN2015260); Research and Practice Project of Hebei Province Higher Education and Teaching Reform (No. 2017GJJG018); Research Projects of Undergraduate Education and Teaching Reform in Hebei University of Technology(No. 201802003); Undergraduate Innovation and Entrepreneurship Training Program of Hebei University of Technology (No.201710080204, No. 201810080175, No.201810080251)

* 通信联系人, E-mail: zyj513@hebut.edu.cn

strong anchoring and weak anchoring boundary conditions by the finite-difference iterative method. The study shows that the influence of the flexoelectric effect on the director distribution is different in the inner boundary, the outer boundary and the thin layer, and that the director distribution in the thin layer is determined by the comprehensive effect of cylindrical symmetry, boundary anchoring strength, dielectric effect and flexoelectric effect.

Key words: nematic liquid crystal; cylindrical cell; hybrid arrangement; anchoring energy; flexoelectric effect

1 引 言

随着液晶材料在显示领域得到广泛的应用,也越来越多地被应用到了非显示领域,囊括了从生物、化学到物理、材料甚至工程等多个学科的诸多领域^[1]。常见的液晶系统主要有平面薄层液晶系统、柱状液晶系统、球状液晶系统。柱状向列相液晶系统的指向矢平衡分布问题早在 40 年前就已经被研究。早期的研究主要是在强锚定垂直边界条件下,柱状系统内向列相液晶指向矢的分布情况^[2-4]。后来的研究,也分析了弱锚定边界条件下,内部弹性能和边界锚定能的竞争对指向矢分布的影响^[5-9]。还有一些研究是对柱状系统附加低频电场作用时的 Fréedericksz 转变阈值问题以及电场对液晶指向矢分布的影响^[10-12]。

1969 年, R. B. Meyer 首次对挠曲电效应进行了理论解释^[13],液晶系统在外加电场作用下,除了具有介电效应之外,还需要考虑挠曲电极化与电场的耦合作用。文献中大多数是平面液晶盒中的挠曲电效应的研究^[13-15],也有对柱状液晶系统中挠曲电效应引起的系统稳定性进行分析^[16],挠曲电效应会引起指向矢形变。此外,对同心圆柱薄层中轴向分布向列相液晶的研究表明,挠曲电效应影响强锚定作用时 Fréedericksz 转变阈值和弱锚定指向矢取向分布。

本文基于向列相液晶弹性理论,研究了不同外加电场作用下同心柱筒中混合排列向列相液晶指向矢的分布规律,重点研究挠曲电效应对指向矢取向分布的影响。我们首先给出同心柱筒中向列相液晶混合排列模型,然后根据向列相液晶弹性理论计算同心柱筒中混合排列向列相液晶指向矢分布的平衡态方程及边界条件,最后给出计算机数值模拟结果。

2 模 型

液晶分子被限制在两个同心圆柱构成的薄层之间,内半径为 r_1 ,外半径为 r_2 。假定柱长无限长,根据内外表面易取向的不同,有 R-Z 和 Z-R 两种模型, R 表示易取向方向沿径向, Z 表示易取向方向沿轴向,前一个字母表示柱筒内表面施加的边界条件,后一个字母表示柱筒外表面施加的边界条件,如图 1 所示。

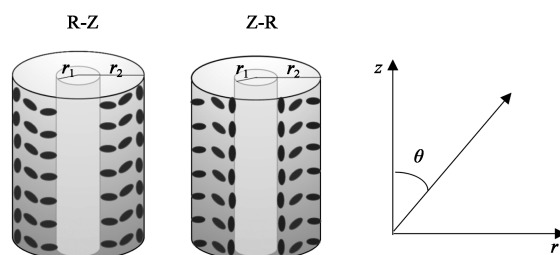


图 1 同心圆柱薄层模型和 r - z 平面坐标图

Fig.1 Concentric cylindrical thin layer models and r - z coordinate

3 理论分析

假定同心圆柱筒中液晶为正性液晶,薄层间施加径向电场: $E = \frac{V}{r \ln \rho} \mathbf{e}_r$ ^[10-12],此时柱筒中混合排列柱状向列相液晶指向矢可以表示为 $\mathbf{n} = \sin \theta \mathbf{e}_r + \cos \theta \mathbf{e}_z$,其中 θ 是指向矢与 z 轴的夹角。

根据 Frank 理论,弹性自由能密度为^[17]

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

其中 K_{11} 、 K_{22} 和 K_{33} 分别为展曲、扭曲和弯曲弹性常数。

在径向电场作用下,电场引起的自由能有两

部分,一部分为介电耦合作用,另一部分为挠曲电作用。Meyer 描述了挠曲电极化强度矢量 $\mathbf{P}$ 为^[13]

$$\mathbf{P} = e_1(\nabla \cdot \mathbf{n})\mathbf{n} + e_3(\nabla \times \mathbf{n}) \times \mathbf{n}, \quad (2)$$

其中 e_1 和 e_3 分别为液晶的展曲和弯曲挠曲电系数,挠曲电引起的自由能密度为

$$f_{\text{flexo}} = -E \cdot \mathbf{P}, \quad (3)$$

介电自由能密度公式为

$$f_{\text{diel}} = -\frac{1}{2}\epsilon_0 \Delta\epsilon (\mathbf{E} \cdot \mathbf{n})^2, \quad (4)$$

其中, ϵ_0 为真空中介电常数,液晶的介电各向异性为 $\Delta\epsilon = \epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}$ 。

柱筒内外表面对液晶指向矢分布的影响用表面自由能来描述,采用 Rapini-Papoular 锚定能

公式^[18]:

$$f_{\text{si}} = -\frac{W_i}{2} (\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}_{\text{ei}})^2, (i=1,2), \quad (5)$$

其中: W_1, W_2 分别表示内、外表面锚定强度系数, $\mathbf{n}_{e1}, \mathbf{n}_{e2}$ 分别表示指向矢在柱筒内、外表面的易取向方向单位矢量。

单位长度同心圆柱薄层向列相液晶的总自由能为

$$F = 2\pi \int_{r_1}^{r_2} (f_{\text{elas}} + f_{\text{diel}} + f_{\text{flexo}}) r dr + 2\pi r_1 f_{s1} + 2\pi r_2 f_{s2}, \quad (6)$$

理论处理中,令 $r = r_1 e^x, x = \ln \frac{r}{r_1} = \ln \rho$, 得

到单位长度总自由能为:

$$F = \pi K_{11} \int_0^{\ln \rho} \left\{ \left[\left(1 - \delta^2 - \frac{2e_1 V}{K_{11} \ln \rho} + k \left(\frac{d\theta}{dx} \right)^2 \right) \sin^2 \theta + \left(\frac{d\theta}{dx} \right)^2 \right] + \left[\frac{1}{2} \cos 2\theta - \frac{V(e_1 + e_3)}{2K_{11} \ln \rho} \cos 2\theta - \frac{W_1 r_1}{K_{11}} \cos^2(\theta - \varphi_1) \right] \delta(x) + \left[-\frac{1}{2} \cos 2\theta + \frac{V(e_1 + e_3)}{2K_{11} \ln \rho} \cos 2\theta - \frac{W_2 r_2}{K_{11}} \cos^2(\theta - \varphi_2) \right] \delta(x - \ln \rho) \right\} dx, \quad (7)$$

其中: $\delta^2 = \frac{\epsilon_0 \Delta\epsilon V^2}{K_{11} (\ln \rho)^2}$, $k = \frac{K_{33}}{K_{11}} - 1$, φ_1, φ_2 分别为内外表面易取向方向与 z 轴的夹角。R-Z 模型, $\varphi_1 = \pi/2, \varphi_2 = 0$; Z-R 模型, $\varphi_1 = 0, \varphi_2 = \pi/2$ 。

根据变分理论可以得到平衡态方程为

$$\frac{1}{2} \sin 2\theta \left[\delta^2 + k \left(\frac{d\theta}{dx} \right)^2 + \frac{2e_1 V}{K_{11} \ln \rho} - 1 \right] + (1 + k \sin^2 \theta) \frac{d^2 \theta}{dx^2} = 0, \quad (8)$$

R-Z 模型对应的边界条件为

$$\left[\frac{V(e_1 + e_3)}{K_{11} \ln \rho} - \frac{r_1}{L_1} - 1 \right] \sin 2\theta_1 - 2(1 + k \sin^2 \theta) \frac{d\theta}{dx} \Big|_{x=0} = 0, \quad (9a)$$

$$\left[\frac{V(e_1 + e_3)}{K_{11} \ln \rho} - \frac{r_2}{L_2} - 1 \right] \sin 2\theta_2 - 2(1 + k \sin^2 \theta) \frac{d\theta}{dx} \Big|_{x=\ln \rho} = 0, \quad (9b)$$

Z-R 模型对应的边界条件为

$$\left[\frac{V(e_1 + e_3)}{K_{11} \ln \rho} + \frac{r_1}{L_1} - 1 \right] \sin 2\theta_1 - 2(1 + k \sin^2 \theta) \frac{d\theta}{dx} \Big|_{x=0} = 0, \quad (10a)$$

$$\left[\frac{V(e_1 + e_3)}{K_{11} \ln \rho} + \frac{r_2}{L_2} - 1 \right] \sin 2\theta_2 - 2(1 + k \sin^2 \theta) \frac{d\theta}{dx} \Big|_{x=\ln \rho} = 0, \quad (10b)$$

其中: $L_i = K_{11}/W_i (i=1,2)$ 定义为外推长度。

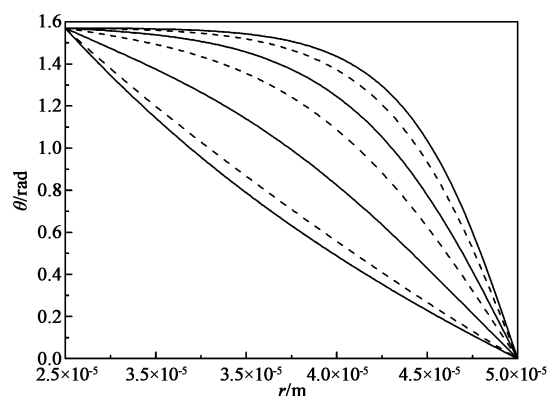
下面的数值计算我们采用差分迭代方法,根据平衡态方程(8)和边界条件(9)(10)模拟得出柱筒中向列相液晶的指向矢分布。

4 数值模拟结果

同心圆柱筒中液晶采用正性液晶,其参数为^[19]: $K_{11} = 1.2 \times 10^{-11} \text{ N}$, $K_{33} = 1.5792 \times 10^{-11} \text{ N}$, $e_1 = -6.9 \times 10^{-11} \text{ C/m}$, $e_3 = -4.5 \times 10^{-11} \text{ C/m}$, $\Delta\epsilon = 13.3$, $\epsilon_0 = 8.854 \times 10^{-12} \text{ C}^2/(\text{N} \cdot \text{m}^2)$ 。内外半径取为 $r_1 = 2.5 \times 10^{-5} \text{ m}$, $r_2 = 5.0 \times 10^{-5} \text{ m}$ 。基于差分迭代方法,下面给出了 R-Z 模型和 Z-R 模型的指向矢分布的数值模拟结果图。

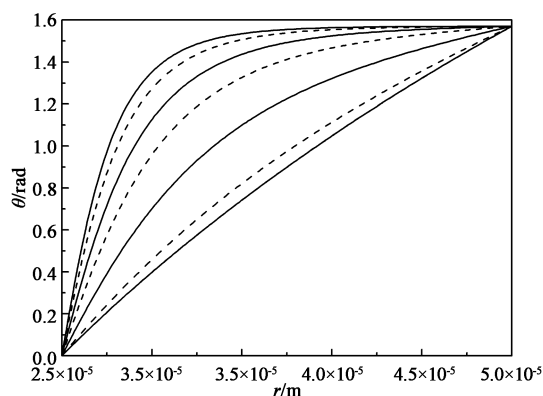
首先,强锚定边界条件时, R-Z 模型在边界上给出 $\theta(r_1) = \pi/2, \theta(r_2) = 0$, 而 Z-R 模型在边界上给出 $\theta(r_1) = 0, \theta(r_2) = \pi/2$, 此时根据平衡态

方程(8)可以得到数值解。如图 2 所示,给出了强锚定边界条件下,当电压是 0,1,2,3 V 时,忽略挠曲电效应和考虑挠曲电效应时的指向矢分布情况。由图 2 可知, R-Z 模型和 Z-R 模型随着径向电压的增大,液晶分子逐渐趋于径向排列;忽略和考虑挠曲电效应的对比表明,考虑挠曲电效应时,



(a) R-Z 模型

(a) R-Z model



(b) Z-R 模型

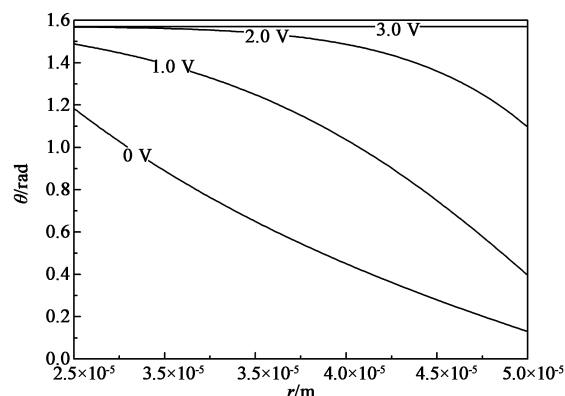
(b) Z-R model

图 2 强锚定边界条件下,不同电压下角度 θ 随半径 r 的变化曲线。实线为忽略挠曲电效应结果,曲线由下而上电压依次为 0,1,2,3 V;虚线为考虑挠曲电效应结果,曲线由下而上电压依次为 1,2,3 V。

Fig.2 Under strong anchoring boundary conditions, director angle of θ versus radius of r in the different voltages. The solid lines from the bottom to the top correspond to the voltages of 0,1,2,3 V in turn, and the flexoelectric effects are neglected. The dashed lines from the bottom to the top correspond to the voltages of 1,2,3 V in turn, and the flexoelectric effects are considered.

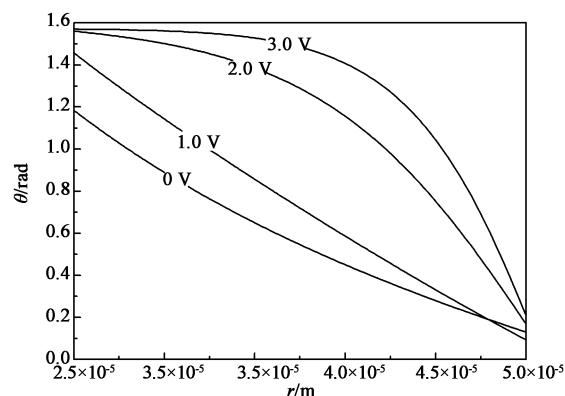
指向矢角度 θ 比忽略挠曲电作用时候相比相应减小,说明挠曲电作用在内部是与介电耦合作用相反的轴向作用;随着电压的增加,两种曲线越来越接近,介电耦合作用增强,挠曲电作用随着电压的增加可以忽略。

图 3 给出了弱锚定边界条件下 R-Z 模型在忽略挠曲电效应和考虑挠曲电效应的数值结果。由图 3(a)可知,弱锚定边界条件下,R-Z 模型电压为 0 V 时,指向矢是由内边界径向到外边界轴向的均匀混合排列,但由于柱状边界的影响,同样的锚定强度其锚定作用效果在外表面更为明显,是一个非对称混合排列;不考虑挠曲电效应时,R-Z 模型介电耦合作用下,随着电压的增加,指向



(a) 不考虑挠曲电效应

(a) Neglecting flexoelectric effect



(b) 考虑挠曲电效应

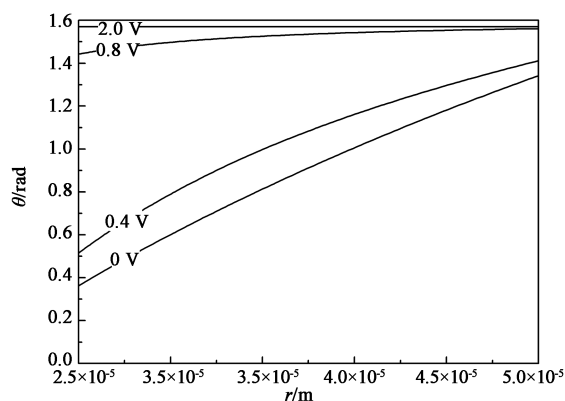
(b) Considering flexoelectric effect

图 3 R-Z 模型: $L_1 = L_2 = 5.0 \times 10^{-6}$ m 的弱锚定边界条件下,不同电压 $V=0,1,2,3.0$ V 时 θ 随 r 的变化曲线。

Fig.3 R-Z model: Director configurations θ versus radius of r with $L_1 = L_2 = 5.0 \times 10^{-6}$ m, and the voltage $V=0,1,2,3.0$ V.

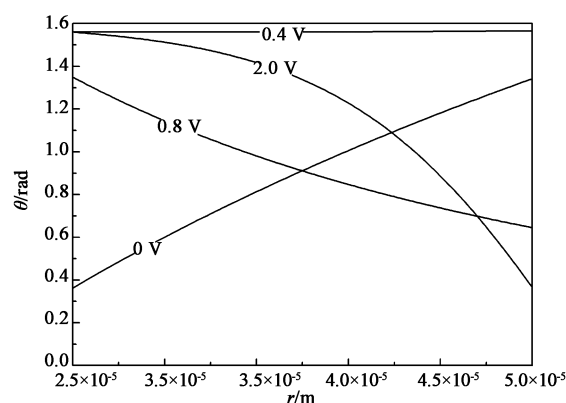
矢逐渐趋于完全径向排列,即存在一个临界电压,约为 3.0 V,可以定义为饱和电压。由图 3(b)可知,弱锚定边界条件下,考虑挠曲电效应时,R-Z 模型在表面锚定能、介电耦合、挠曲电效应的共同作用下,随着电压的增大,外表面液晶分子始终近似轴向排列,内表面液晶分子越来越趋于径向,最终形成内表面径向,外表面轴向的混合排列,而且在大的电压下,薄层内液晶指向矢分布与强锚定 R-Z 模型指向矢分布一致。

图 4 给出了弱锚定边界条件下 Z-R 模型在忽略挠曲电效应和考虑挠曲电效应的数值结果。由 4(a)图可知,弱锚定边界条件下,当径向电压为 0 V 时,指向矢是由内边界轴向到外边界径向的均匀混合排列,但由于柱状边界的影响,同样的锚定强度其锚定作用效果在外表面更为明显,是一个非对称混合排列;不考虑挠曲电效应时,Z-R 模型介电耦合作用下,随着电压的增加,指向矢趋于完全径向排列,与 R-Z 模型类似,也存在饱和电压。由 4(b)图可知,弱锚定边界条件下,考虑挠曲电效应时,Z-R 模型在表面锚定能,介电耦合,挠曲电效应的共同作用下,随着电压的增大,先形成完全的径向的均匀排列(0.4 V 时),当电压继续增大,形成内表面径向外表面轴向的混合排列。



(a) 不考虑挠曲电效应

(a) Neglecting flexoelectric effect



(b) 考虑挠曲电效应

(b) Considering flexoelectric effect

图 4 Z-R 模型: $L_1 = L_2 = 5.0 \times 10^{-6}$ m, 的弱锚定边界条件下,不同的电压 $V = 0, 0.4, 0.8, 2.0$ V 时 θ 随 r 的变化曲线。

Fig. 4 Z-R model: Director configurations θ versus radius of r with $L_1 = L_2 = 5.0 \times 10^{-6}$ m, and the voltage $V = 0, 0.4, 0.8, 2.0$ V.

由此可知,弱锚定边界条件下,不考虑挠曲电效应,电场介电耦合径向作用对液晶指向矢分布发挥主要作用;挠曲电效应加强了内表面的径向作用和外表面的轴向作用,加上挠曲电效应对内部指向矢轴向作用的影响和介电耦合对内部径向作用的影响,几个因素的综合作用使得柱筒内液晶形成内表面径向、外表面轴向的混合排列。

5 结 论

通过弹性理论对同心柱筒中混合排列向列相液晶进行研究,结果表明:挠曲电作用在液晶薄层内部是与介电耦合作用相反的轴向作用,而且随着电压的增加,挠曲电作用效果减弱;弱锚定条件下,由于柱对称性的影响,表面锚定效果存在差异;挠曲电作用加强内表面的径向作用和外表面的轴向作用。柱对称性、边界锚定作用、介电耦合作用、挠曲电效应的综合作用影响同心柱筒中指向矢分布。

参 考 文 献:

- [1] 杨傅子. 近期液晶研究中的几个新方向——液晶非显示应用基础研究的进展[J]. 物理学进展, 2008, 28(2): 107-129. YANG F Z. New directions in recent liquid crystal studies——the progress in foundational research of non-display application of liquid crystals [J]. *Progress in Physics*, 2008, 28(2): 107-129. (in Chinese)

- [2] DZYALOSHINSKI I E. Theory of disclinations in liquid crystals [J]. *Soviet Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 1970, 31: 773-780.
- [3] CLADIS P E, KLÉMAN M. Non-singular disclinations of strength $S = +1$ in nematics [J]. *Journal de Physique*, 1972, 33(5/6): 591-598.
- [4] LANDAU L D, LIFSHITZ E M. *Theory of Elasticity: Course of Theoretical Physics* [M]. 3rd ed. New York: 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] BURYLOV S V. Equilibrium configuration of a nematic liquid crystal confined to a cylindrical cavity [J]. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 1997, 85(5): 873-886.
- [9] 刘红红,张艳君.混合排列柱状薄层中的向列相液晶指向矢分布的研究[J].液晶与显示,2017,32(1):13-18.
LIU H H, ZHANG Y J. Director distributions of nematic liquid crystals in hybrid arrangement cylindrical cells [J]. *Chinese Journal of Liquid Crystals and Displays*, 2017, 32(1): 13-18. (in Chinese)
- [10] CORELLA-MADUENO A, REYES J A. Electrically controlled liquid crystal fiber [J]. *Optics Communications*, 2006, 264(1): 148-155.
- [11] CORELLA-MADUENO 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.
- [12] DESOUSA R T, DIAS J C, MENDES R S, *et al.* Critical exponents for Fréedericksz transition in nematics between concentric cylinders [J]. *Physica A: Statistical Mechanics and Its Applications*, 2010, 389(5): 945-950.
- [13] MEYER R B. Piezoelectric effects in liquid crystals [J]. *Physical Review Letters*, 1969, 22(18): 918-921.
- [14] 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):51-55.
ZHEND G L, ZHANG H, YE W J, *et al.* Determination of the flexoelectric coefficient in liquid crystal using full-y-leaky optical guided wave technique [J]. *Acta Photonica Sinica*, 2014, 43(12): 51-55. (in Chinese)
- [15] 张晶,周璇,陈思博,等.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[J].液晶与显示,2018,33(1): 1-13.
ZHANG J, ZHOU X, CHEN S B, *et al.* Theoretical study of flexoelectric effect and spontaneous distortion in domain walls within nematic liquid crystal system [J]. *Chinese Journal of Liquid Crystals & Displays*, 2018, 33(1): 1-13. (in Chinese)
- [16] KOTOV I V, KHAZIMULLIN M V, KREKHOV A P. Flexoelectric instability in nematic liquid crystal between coaxial cylinders [J]. *Molecular Crystals and Liquid Crystals Science and Technology. Section A. Molecular Crystals and Liquid Crystals*, 2001, 366(1): 885-892.
- [17] FRANK F C. I. Liquid crystals. On the theory of liquid crystals [J]. *Discussions of the Faraday Society*, 1958, 25(25): 19-28.
- [18] RAPINI A, PAPOULAR M. Distortion d'une lamelle nématique sous champ magnétique conditions d'ancrage aux parois [J]. *Journal de Physique Colloques*, 1969, 30(C4): 54-56.
- [19] LIU H H, ZHANG Y J, YUE H R, *et al.* Influence of flexoelectric effect on director alignment of nematic liquid crystals in axial arrangement cylindrical cells [J]. *Chinese Physics Letters*, 2018, 35(2): 026103.

作者简介:常雨珂(1997—)女,河北邯郸人,主要从事液晶物理和液晶器件的研究。E-mail:Changyuke0810@163.com.
张艳君(1977—),河北清河人,博士,副教授,主要从事液晶物理方面的研究。E-mail:zyj513@hebut.edu.cn.