

文章编号:1007-2780(2010)01-0001-04

表面沟槽诱导双轴向列相液晶的弹性畸变

张志东, 叶文江, 张 鹭

(河北工业大学 理学院, 天津 300401, E-mail: zhidong_zhang@yahoo. cn)

摘 要: 双轴向列相液晶在表面沟槽上锚定, 3 个指向矢之一平行于沟槽均匀排列。使用 Berreman 在研究单轴向列相时提出的弹性形变产生表面能的理论方法对双轴向列相液晶进行研究, 得到了一个公式, 在 Berreman 模型中它描写弹性畸变对表面锚定的贡献, 但在双轴向列相中, 这一公式描写当 n 指向矢沿着沟槽锚定时, m 指向矢受到沟槽表面的作用而产生的畸变能量。研究了双轴向列相液晶在表面沟槽上锚定的稳定性问题; 稳定性条件在双轴向列相单一弹性常数近似下为 n 指向矢的弹性常数最大。

关 键 词: 双轴向列相液晶; 表面沟槽; 弹性畸变; 稳定性条件

中图分类号: O753⁺. 2 **文献标识码:** A

Elastic Distortion of Biaxial Nematic Liquid Crystal Induced by Surface Grooves

ZHANG Zhi-dong, YE Wen-jiang, ZHANG Lu

(School of Sciences, Hebei University of Technology, Tianjin 300401, China, E-mail: zhidong_zhang@yahoo. cn)

Abstract: Biaxial nematic liquid crystal is anchored by the grooves of a surface, so that one of the three directors is homogeneously fixed in direction of the grooves. This paper used a theoretical method proposed by Berreman, which the contribution of elastic origin to the surface energy of an uniaxial nematic liquid crystal. A formula was obtained which attributed the surface anchoring to the elastic distortion in the Berreman model, but in the biaxial nematics, it describes the distortion energy of the m director induced by the grooves of a surface, when the n director is anchored along the grooves. The stability of the n director around the grooves was studied. In one-constant model for each director, the rude condition is that the elastic constant of the n director is the maximum.

Key words: biaxial nematic liquid crystal; surface groove; elastic distortion; stability condition

1 引 言

早在 1972 年, Berreman^[1] 就针对普通单轴向列相液晶提出, 平面上的沟槽几何结构会产生畸变弹性能, 该弹性能又将产生能效的方位锚定能。Berreman 假定沟槽表面的横截面曲线, 在一级近似为正弦曲线。假设正弦曲线的空间周期为

λ , 幅度为 A 。对液晶做单一常数近似, 即 $K_1 = K_3 = K$, 并假定 $qA \ll 1$, 等效的表面能为:

$$\omega_B = \frac{1}{2} K (qA)^2 q \tag{1}$$

Berreman 认为式(1)给出了 $\sin^2 \Phi$ 的系数(Φ 是方位角)。随着基板上定向沟槽的宽度和深度向纳米级靠近^[2-4], 人们对 Berreman 理论重新产

生了极大的兴趣。最近, Fukuda 等人^[5]证明, 沟槽表面产生的畸变弹性能为 $\sin^4\Phi$ 的系数, 与 $\sin^2\Phi$ 形式的方位锚定能没有关系。

2004 年国际上成功合成了热致双轴向列液晶^[6-8]。为了使双轴向列液晶得到应用, 首要的问题就是使它在基板表面定向排列。本文指出, 双轴向列液晶在平面上的沟槽内定向排列时, 将产生式(1)形式的畸变弹性能, 但它的意义不是产生方位锚定能, 而是伴随定向产生的畸变基态能量。

2 双轴向列液晶畸变基态能量

在弹性体理论中, 使用 3 个单位矢量, 即 $\mathbf{l}$, $\mathbf{m}$ 和 $\mathbf{n}$, 描写双轴向列液晶的宏观状态。由于 $\mathbf{l}$, $\mathbf{m}$ 和 $\mathbf{n}$ 满足如下正交归一条件:

$$l_i l_j + m_i m_j + n_i n_j = S_{ij} \quad (2)$$

所以独立变化的变量只有 2 个。当用 $\mathbf{m}$ 和 $\mathbf{n}$ 来描写双轴向列液晶的宏观状态时, 弹性自由能密度由式(3)给出^[9]:

$$\begin{aligned} F(\mathbf{r}) = & \frac{1}{2} \{ K_1 (\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + K_2 (\mathbf{n} \cdot \nabla \times \mathbf{n})^2 + \\ & K_3 (\mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n})^2 + K_4 (\nabla \cdot \mathbf{m})^2 + \\ & K_5 (\mathbf{m} \cdot \nabla \times \mathbf{m})^2 + K_6 (\mathbf{m} \times \nabla \times \mathbf{m})^2 + \\ & K_7 [\mathbf{n} \cdot (\mathbf{m} \times \nabla \times \mathbf{m})]^2 + K_8 [\mathbf{m} \cdot (\mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n})]^2 + \\ & K_9 [\mathbf{m} \cdot \{\nabla \times (\mathbf{n} \times \mathbf{m})\}]^2 + K_{10} [\mathbf{n} \cdot \{\nabla \times (\mathbf{m} \times \mathbf{n})\}]^2 + \\ & K_{11} [\nabla \times (\mathbf{n} \times \mathbf{m})]^2 + K_{12} [\nabla \cdot (\mathbf{n} \times \mathbf{m})]^2 \} \end{aligned} \quad (3)$$

其中 $K_i (i=1, 2, \dots, 12)$ 是双轴向列液晶的 12 个弹性常数。

考虑平面上的沟槽结构, 建立直角坐标系, 让 z 轴沿着沟槽。首先让双轴向列液晶的 $\mathbf{l}$ 沿着沟槽锚定, 即有 $\mathbf{l} = (0, 0, 1)$ 。这时 $\mathbf{m}$ 和 $\mathbf{n}$ 被限定在 x - y 平面内, 并有:

$$\mathbf{n} = (\cos\theta, \sin\theta, 0) \quad (4a)$$

$$\mathbf{m} = (-\sin\theta, \cos\theta, 0) \quad (4b)$$

式中 θ 是主指向矢 $\mathbf{n}$ 与 x 轴间的夹角, θ 依赖于坐标 x 和 y 。将 (4a) 和 (4b) 代入方程 (3) 得到:

$$\begin{aligned} f_1[\theta(x, y)] = & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial\theta}{\partial x} \right)^2 [(K_1 + K_6 + K_7) \sin^2\theta + \\ & (K_3 + K_4 + K_8) \cos^2\theta] + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial\theta}{\partial y} \right)^2 \times \\ & [(K_1 + K_6 + K_7) \cos^2\theta + (K_3 + K_4 + K_8) \sin^2\theta] + \\ & [(K_3 + K_4 + K_8) - (K_1 + K_6 + K_7)] \times \\ & \frac{\partial\theta}{\partial x} \frac{\partial\theta}{\partial y} \sin\theta \cos\theta \end{aligned} \quad (5)$$

如果做近似:

$$\tilde{K}_l := K_1 + K_6 + K_7 = K_3 + K_4 + K_8 \quad (6)$$

就得到简化的弹性自由能密度:

$$f_l[\theta(x, y)] = \frac{1}{4} \tilde{K}_l \left[\left(\frac{\partial\theta}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial\theta}{\partial y} \right)^2 \right] \quad (7)$$

式(7)与 Berreman 理论^[1]的结果在形式上完全相同。显然式(6)与单轴向列相单一弹性常数近似($K_1 = K_3$)是完全对应的。参见式(3), 在双轴向列相的情况下, 除了对描写 $\mathbf{m}$ 和 $\mathbf{n}$ 的弹性常数做出假定以外, 对耦合弹性常数(K_7 和 K_8)也要做出假定。

下面按照 Berreman 的理论方法继续进行研究。假定液晶占据 $y > 0$ 的半个平面, 与沟槽相截的平面正弦曲线沿着 x 轴, 而主指向矢 $\mathbf{n}$ 在沟槽内沿着正弦曲线的切向排列。在 1 个周期内的畸变弹性能量为:

$$F = \int_0^\lambda \int_0^\infty f[\theta(x, y)] dx dy \quad (8)$$

Berreman 理论^[1]直接给出:

$$F = \frac{1}{4} \tilde{K}_l (qA)^2 q \quad (9)$$

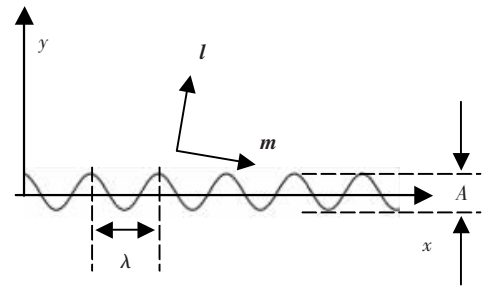


图 1 主指向矢沿表面沟槽方向(z 轴)排列, 次指向矢受到沟槽的扰动。

Fig. 1 Main director is aligned along the surface grooves (z axis) and the minor director is distorted by the grooves

目前实验上是想办法固定主指向矢 $\mathbf{n}$, 再驱动次指向矢 $\mathbf{m}$ ^[10, 11], 见图 1。在这种条件下, 对应 $\mathbf{n} = (0, 0, 1)$, $\mathbf{m} = (\cos\theta, \sin\theta, 0)$ 。这时, 方程(3)给出:

$$\begin{aligned} f_n[\theta(x, y)] = & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial\theta}{\partial x} \right)^2 [(K_4 + K_{10} + K_{11}) \sin^2\theta + \\ & (K_6 + K_{12}) \cos^2\theta] + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial\theta}{\partial y} \right)^2 \times \\ & [(K_4 + K_{10} + K_{11}) \cos^2\theta + (K_6 + K_{12}) \sin^2\theta] + \end{aligned}$$

$$[(K_6 + K_{12}) - (K_4 + K_{10} + K_{11})] \frac{\partial \theta}{\partial x} \frac{\partial \theta}{\partial y} \sin \theta \cos \theta \quad (10)$$

对应于单轴向列相单一弹性常数近似,要求:

$$\tilde{K}_n := K_6 + K_{12} = K_4 + K_{10} + K_{11} \quad (11)$$

由于式(3)是用 2 个指向矢 $\mathbf{m}$ 和 $\mathbf{n}$ 写出的,式(11)的对称性质不像式(6)那样明显。这时,与式(9)对应,有:

$$F = \frac{1}{4} \tilde{K}_n (qA)^2 q \quad (12)$$

3 稳定性条件

本节在双轴向列相单一弹性常数近似下,讨论液晶在平面沟槽上排列的稳定性条件。对应于单轴向列相单一常数近似($K_1 = K_2 + K_3$),并忽略不同指向矢($\mathbf{l}$, $\mathbf{m}$ 和 $\mathbf{n}$)的耦合项,双轴向列相单一弹性常数近似下的弹性自由能密度为^[12]:

$$f_b \approx \frac{1}{2} \{ K_n [(\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + (\nabla \times \mathbf{n})^2] + K_m [(\nabla \cdot \mathbf{m})^2 + (\nabla \times \mathbf{m})^2] + K_l [(\nabla \cdot \mathbf{l})^2 + (\nabla \times \mathbf{l})^2] \} \quad (13)$$

现在,假定主指向矢 $\mathbf{n}$ 并没有严格沿着 $\mathbf{n} = (0, 0, 1)$ 方向,而是有一个小角度 $\delta\varphi$ 扰动,即:

$$\mathbf{n} = (-\sin(\delta\varphi)\sin\theta, \sin(\delta\varphi)\cos\theta, \cos(\delta\varphi)) \quad (14)$$

次指向矢仍由式(15)给出:

$$\mathbf{m} = (\cos\theta, \sin\theta, 0) \quad (15)$$

通过 $\mathbf{l} = \mathbf{m} \times \mathbf{n}$ 确定 $\mathbf{l}$, 式(16)给出:

$$f_b = \frac{1}{2} (K_m + K_l) \left[\left(\frac{\partial \theta}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \theta}{\partial y} \right)^2 \right] + \frac{1}{2} (K_n - K_l) \sin^2(\delta\varphi) \left[\left(\frac{\partial \theta}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \theta}{\partial y} \right)^2 \right] \quad (16)$$

因此,如果形成 $\mathbf{n} = (0, 0, 1)$ 的稳定排列,弹性自由能对小扰动产生稳定响应的条件为 $K_n > K_l$ 。

如果式(14)保持不变,假设:

$$\mathbf{l} = (\cos\theta, \sin\theta, 0) \quad (17)$$

而次指向矢由 $\mathbf{m} = \mathbf{n} \times \mathbf{l}$ 给出,我们得到如果形成 $\mathbf{n} = (0, 0, 1)$ 的稳定排列,弹性自由能对小扰动产生稳定响应的条件为 $K_n > K_m$ 。

4 结 论

当双轴向列相液晶在平面沟槽上排列时,与单轴向列相有着显著的不同,表现在将出现基态畸变弹性能。在一定近似条件下,该畸变弹性能在形式上与 Berreman 理论描写单轴向列相的结果相同。但是,这一畸变弹性能并不具有等效方位锚定能的物理意义。另外,将双轴向列相液晶的主指向矢在平面沟槽上沿面锚定时,对于小的扰动还必须满足稳定性条件。在双轴向列相单一弹性常数近似下,该条件为主指向矢的弹性常数最大。

参 考 文 献:

- [1] Berreman D W. Solid surface shape and alignment of an adjacent nematic liquid crystal [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1972, 28(26):1683-1686.
- [2] Gwag J S, Oh-e M, Yoneya M, *et al.* Advanced nanoimprint lithography using a grade functional imprinting material tailored for liquid crystal alignment [J]. *J. Appl. Phys.*, 2007, 102(6):063501(1-5).
- [3] Kawata Y, Takatoch K, Hasegawa M, *et al.* The alignment of nematic liquid crystals on photolithographic microgroove patterns [J]. *Liq. Cryst.*, 1994, 16(6):1027-1036.
- [4] Park M J, Park O O. Alignment of liquid crystals on a topographically nano-patterned polymer surface prepared by a soft-imprint technique [J]. *Microelectronic Engineering*, 2008, 85:2261-2265.
- [5] Fukuda J I, Yoneya M, Yokoyama H. Surface-groove-induced azimuthal anchoring of a nematic liquid crystal: Berreman's model reexamined [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2007, 98(18):187803(1-4).
- [6] Madsen L A, Dingemans T J, Nakata M, *et al.* Thermotropic biaxial nematic liquid crystals [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2004, 92(14):145505(1-4).
- [7] Acharya B R, Primak A, Kumar S. Biaxial nematic phase in bent-core thermotropic mesogens [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2004, 92(14):145506(1-4).
- [8] Merkel K, Kocot A, Vij J K, *et al.* Thermotropic biaxial nematic phase in liquid crystalline organo-siloxane tetrapodes [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2004, 93(23): 237801(1-4).

- [9] Govers E, Vertogen G. Elastic continuum theory of biaxial nematics [J]. *Phys. Rev. A*, 1984, 30(4):1998-2000.
- [10] Lee J H, Lim T K, Kim W T, *et al.* Dynamics of electro-optical switching processes in surface stabilized biaxial nematic phase found in bent-core liquid crystal [J]. *J. Appl. Phys.*, 2007, 101(3):034105(1-9).
- [11] Stannarius R. Comment on “Dynamics of electro-optical switching processes in surface stabilized biaxial nematic phase found in bent-core liquid crystal” [J]. *J. Appl. Phys.*, 2008, 104(3):036104(1-3).
- [12] Longa L, Stelzer J, Dunmur D. Density functional approach to study the elastic constants of biaxial nematic liquid crystals [J]. *J. Chem. Phys.*, 1998, 109:1555-1566.

科技参考文献著录的规则

根据中华人民共和国国家标准“文后参考文献著录规则”(GB/T7714-2005),《液晶与显示》编辑部希望广大作者在向本刊投稿时注意参考文献的著录。

1. 文后参考文献书写格式

期刊:[序号]作者. 文献题名[文献类型标志]. 连续出版物题名:其他题名信息, 年份, 卷号(期号):起止页码[引用日期]. 获取和访问路径.

例:[1]凌志华. STN-LCD 技术的发展[J]. 液晶与显示, 2002, 17(4):233-242.

例:[2]李晓东, 张庆红, 叶瑾琳. 气候学研究的若干理论问题[J]. 北京大学学报:自然科学版, 1999, 35(1):101-106.

例:[3]邵喜斌, 王丽娟, 李梅. a-Si:H TFT 亚阈值区 SPICE 模型的研究[J/OL]. 液晶与显示, 2005, 20(4):267-272. [2005-10-18]. http://www.wanfangdata.com.cn/src/szhqk/wf_szhqk_browser.Asp.

专著:[序号]作者. 题名[文献类型标志]. 析出文献其他责任者//专著主要责任者. 专著题名:其他题名信息. 版本项(第 1 版略). 出版地:出版者, 出版年:析出文献的页码[引用日期]. 获取和访问路径.

例:[4]周其凤, 王新久. 液晶高分子[M]. 北京:科学出版社, 1994:27-38.

例:[5]日本学术振兴会第 142 委员会. 液晶器件手册[M]. 黄锡珉, 黄辉光, 李之熔, 译. 北京:航空工业出版社, 1992.

例:[6]母国光. 白光光学信息处理及期彩色摄影术[M]//陈星旦. 光学与光学工程, 北京:科学出版社, 2005:62-72.

例:[7]赵耀东. 新时代的工业工程师[M/OL]. 台北:天下文化出版社, 1998[1998-09-26]. [http://www.ie.nthu.edu.tw/inf/ie.newie.htm\(Big5\)](http://www.ie.nthu.edu.tw/inf/ie.newie.htm(Big5)).

例:[8]陈兵, 徐寿颐. 新型烷基环己基炔类液晶的合成与性质[C]//2002 年中国平板显示会议论文集. 深圳:深圳天马微电子股份有限公司, 2002:167-168.

例:[9]闫石. 液晶光控取向膜材料的研究[D]. 长春:中国科学院长春光学精密机械与物理研究所, 2001.

例:[10]全国文献工作标准化技术委员会第七分委员会. GB/T5795-1986 中国标准书号[S]. 北京:中国标准出版社, 1986.

专利:[序号]专利所有者. 专利题名:专利国别, 专利号[文献类型标志]. 公告日期或公开日期[引用日期]. 获取和访问路径.

例:[11]吕永积, 王群伟, 邵佑军, 等. 平板真空摄像器件:中国, ZL95241185.7[P]. 1997-08-09.

(下转 P48)