

文章编号:1007-2780(2015)02-0213-11

扭曲向列相薄盒中线缺陷的研究

余 洋,周 璇,张志东*

(河北工业大学 理学院,天津 300401)

摘要:在扭曲向列相中,基于 Landau-de Gennes 理论,利用二维松弛迭代方法,研究了 $s = \pm 1/2$ 扭曲向错的有序重构,给出了随着盒厚减小缺陷核的双轴结构。在临界值 $d_c^* \approx 9\xi$ (ξ 是序参数变化的相干长度),有序重构结构是稳定态,而带缺陷结构是亚稳态,此时系统缺陷结构和双轴性开始沿基板方向扩散。相对于没有初始向错的情况,本征值交换为稳定解对应的盒厚较大。在临界盒厚 $d_c \approx 7\xi$,系统发生双轴性转变,双轴性结构扩散到整个液晶盒,形成双轴壁。在盒厚 $d \approx 9\xi$ 时力达到极大值,而 $d \approx 7\xi$ 时力达到极小值。对于非对称弱锚泊边界条件,随着锚泊强度的降低,弱锚泊边界将向错逐渐驱出边界。

关 键 词:有序重构;扭曲向错线;双轴性参数;Landau-de Gennes 理论

中图分类号:O753.2 **文献标识码:**A **doi:**10.3788/YJYXS20153002.0213

Study of line defects in a thin twisted nematic cell

YU Yang, ZHOU Xuan, ZHANG Zhi-dong*

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

Abstract: Within the Landau-de Gennes theory, the order reconstruction of $s = \pm 1/2$ twist disclinations in a twisted nematic cell is investigated, using the two-dimensional relaxation iterative method. The biaxial structure of the defect core as the cell gap decreasing is explored. At a critical value of $d_c^* \approx 9\xi$ (here ξ is the characteristic length for order-parameter changes), the exchange solution is stable, while the defect core solution becomes metastable, where the system starts to stretch the defect structure and the biaxiality starts to propagate inside of the cell. Comparing to the case with no initial disclination, the value at which the exchange solution becomes stable increases relatively. At a critical separation of $d_c \approx 7\xi$, the system undergoes a biaxial transition, and the defect core merges into a biaxial wall with large biaxiality. The force reaches a maximum at $d \approx 9\xi$, and a local minimum at $d \approx 7\xi$. For weak anchoring boundary conditions, because of the weakened frustration, the asymmetric boundary conditions repel the defect to the weak anchoring boundary as the anchoring strength coefficient decreasing.

Key words: order reconstruction; twist disclination line; biaxial parameter; Landau-de Gennes theory

收稿日期:2014-09-01;修订日期:2014-09-18.

基金项目:国家自然科学基金(No. 11374087, No. 11447179)

* 通信联系人, zhidong_zhang1961@163.com

1 引言

有序重构(order reconstruction)描写液晶中指向矢不连续变化^[1]。液晶中有序重构最早在 π 盒中使用电学方法得到实验检验^[2-3],随后使用双光子共聚焦实验得到进一步证实^[4]。原子力显微镜(AFM)实验表明,有序重构可以在液晶薄盒中实现(盒厚为~10 nm),并伴随有缺陷产生^[5]。在单轴向列相中,通常观察到的缺陷是典型的强度 $s=1$ 的点缺陷以及 $s=\pm 1/2$ 的线缺陷^[6]。根据转动轴的方向,缺陷又可以分为两种类型^[7]:一种为转动轴平行于向错线的楔形向错,另一种为转动轴垂直于向错线的扭曲向错。

有序重构又称本征值交换,即在向列序的张量描述中,两个具有正交指向矢的单轴态互相交换,中间不存在本征矢的转动,但本征值随位置变化,中间层附近存在很强的双轴结构^[1,8]。Schopohl 和 Sluckin 首次在 $s=\pm 1/2$ 的楔形向错中研究了本征值交换(有序重构)^[1],证实了向错核内双轴性的存在。随后激起了不同边界条件下向列相向错核结构的一系列理论和实验研究^[9-12]。

我们首次通过 Landau-de Gennes 理论研究向列相薄盒中强度为 $(-1/2)$ 的扭曲向错。研究中液晶盒左右设为自由边界条件,上基板为强锚泊,下基板分别为强锚泊和弱锚泊。针对强锚泊液晶薄盒,研究三种平衡态解。第一种是带有线缺陷结构的形变解,第二种是纯扭曲结构解,第三是本征值交换结构解。针对单侧弱锚泊液晶薄盒,研究带有线缺陷结构的形变解,给出缺陷中心位置随约化锚泊强度系数的变化。

2 理论方法

2.1 自由能密度

在 Landau-de Gennes 理论中^[13],我们用二阶对称无迹的序参数张量 Q 来描述液晶的取向序。在主轴系中,序参数张量可以表示为^[14]:

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

其中 λ_i 和 e_i 分别为 Q 的第 i 个本征值和本征矢。在各向同性相中, 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

$$Q = S(3n \otimes n - I), \quad (2)$$

其中: S 为单轴向列相序参数, n 为指向矢, I 为单位张量。当 Q 的所有本征值都不相等时,系统处于双轴态。双轴性的大小通过双轴性参数 β^2 确定^[15]:

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

β^2 在 $[0,1]$ 之间取值,用该参数方便说明 Q 空间的不均匀性。在单轴态中, $\beta^2=0$,而系统具有最大双轴性时, $\beta^2=1$ 。

液晶系统的 Landau-de Gennes 自由能密度可以表示为

$$f = f_{\text{bulk}}\{Q_{q\beta}\} + f_e\{Q_{q\beta}, Q_{q\beta,\gamma}\},$$

其中:

$$f_{\text{bulk}} = AtrQ^2 + \frac{2}{3}BtrQ^3 + \frac{1}{2}C(trQ^2)^2. \quad (4)$$

为本体自由能密度,只依赖于序参数张量 Q 自身。在式(4)中, A 随温度 T 变化, $A=a(T-T^*)$, a 、 B 和 C 是常数, T^* 为最低过冷温度。式(4)给出了平衡态序参数 $S=-\frac{B}{12C}\left(1+\sqrt{1-\frac{24AC}{B^2}}\right)$, S 与温度有关。

弹性自由能密度 f_e 用序参数梯度形式来表示:

$$f_e = L_1 \frac{\partial Q_{ij}}{\partial x_k} \frac{\partial Q_{ij}}{\partial x_k} + L_2 \frac{\partial Q_{ij}}{\partial x_j} \frac{\partial Q_{ik}}{\partial x_k} + L_3 \frac{\partial Q_{ij}}{\partial x_k} \frac{\partial Q_{ik}}{\partial x_j}. \quad (5)$$

系数 L_i 与展曲、弯曲和扭曲弹性常数有关。为了简化,我们使用单一弹性常数近似,展曲、扭曲和弯曲弹性常数用 K 表示, K 取决于标量序参量 S 的二次方,即 $K=2S^2L_1$ 。弹性自由能密度简化为:

$$f_e = L_1 \frac{\partial Q_{ij}}{\partial x_k} \frac{\partial Q_{ij}}{\partial x_k}. \quad (6)$$

关于液晶基板引起的边界条件,用 f_s 表示表面自由能密度,它描述接近基板的液晶层与基板之间的相互作用:

$$f_s = \frac{W_s}{2} tr(Q - Q_s)^2. \quad (7)$$

这里锚泊强度 $W_s=W/S$,而 W 是 Frank 弹性理论中的锚泊强度, Q_s 为基板上易取向方向的序参数张量^[16]。弱锚泊边界条件表示如下:

$$\frac{\partial f_s}{\partial Q_{ij}} + \nu_k \frac{\partial f}{\partial Q_{ij,k}} = 0, \quad (8)$$

其中: ν_k 是垂直于基板的外法线方向的第 k 个分量。对于强锚泊边界条件,在边界处直接取

$$Q=Q_s. \tag{9}$$

为了简化计算过程,我们引入一系列约化变量。在这里,我们使用 Schopohl 和 Sluckin 的约化方法^[1],其中相变点的序参数为 $S_c=-B/9C$,定义 $q_0=S_c=-B/9C$,将 f, Q_{ij}, d 和 W_s 分别约化为 $\widetilde{f}=f/[B^4/(9C)^3]$, $\widetilde{Q}_{ij}=Q_{ij}/q_0$, $\widetilde{d}=d/\xi$, 和 $\widetilde{W}_s=-W_s/q_0B\xi$, 并引入相干长度 $\xi=\sqrt{-L_1/Bq_0}=\sqrt{9CL_1/B^2}$ 。这样,等式(4)和(6)分别约化为

$$\widetilde{f}_{\text{bulk}}=\widetilde{A}tr\widetilde{Q}^2-\frac{2}{3}tr\widetilde{Q}^3+\frac{1}{18}(tr\widetilde{Q}^2)^2, \tag{10}$$

$$\widetilde{f}_e=\frac{\partial \widetilde{Q}_{ij}}{\partial x_k}\frac{\partial \widetilde{Q}_{ij}}{\partial x_k}. \tag{11}$$

在式(10)中,我们引入了约化温度 $\widetilde{A}=9AC/B^2$,而相变点的约化温度为 $\widetilde{A}_0=1/3$ 。对以上参量进行约化后,在单轴态,序参数张量的约化形式可以表示为

$$\widetilde{Q}_{ij}=\widetilde{S}(3n\otimes n-\delta_{ij}), \tag{12}$$

其中标量序参数约化为 $\widetilde{S}=\frac{S_q}{q_0}=\frac{3}{4}\left(1+\sqrt{1-\frac{8\widetilde{A}}{3}}\right)$ 。

2.2 几何模型

我们选择扭曲向列相(TN)液晶盒,如图 1 所示,上、下基板上的易取向方向平行于基板表面并相互垂直。这个液晶模型具有两个稳定的简并构型,分别为左旋和右旋,对应于体内的 $\pm\pi/2$ 扭曲^[17]。液晶盒基板位于笛卡尔坐标系的 $y=\pm d/2$ 。沿 x 和 z 方向的长度 d_x 和 d_z 远远大于 d ($d_x\geq d, d_z\geq d$)。

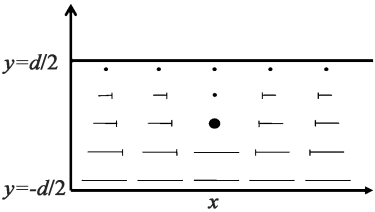


图 1 几何模型

Fig. 1 Geometry of the problem

我们研究 $s=\pm 1/2$ 的扭曲向错,向错线平行于 z 轴。在上下基板 $y=\pm d/2$ 处,扭曲角为 $\varphi_{d/2}=0$ 和 $\varphi_{+d/2}=\pi/2$ 。这里 φ 是指向矢与 x 轴的夹角。在下基板,

$$\widetilde{Q}_s=\widetilde{Q}_{-d/2}=\widetilde{S}\begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \tag{13}$$

而在上基板

$$\widetilde{Q}_s=\widetilde{Q}_{+d/2}=\widetilde{S}\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}. \tag{14}$$

在左、右侧边界 $x=\pm d_x/2$,我们设置为自由边界条件,对应的总扭曲角分别为 $-\pi/2$ ($x=d_x/2$)和 $+\pi/2$ ($x=-d_x/2$),这些边界条件可以产生强度 $s=-1/2$ 的扭曲向错线。

2.3 数值方法

我们使用松弛方法进行数值计算,即利用动力学方程,让序参数张量 $Q(r,t)$ 在一定初始状态下随时间演化,得到其平衡态结果。标量序参数 S 和指向矢 n 的值分别从 Q 中最大本征值和最大本征值对应的本征矢得到。序参数张量 Q 的动力学方程可以写为^[18-19]

$$\frac{\partial Q}{\partial t}=\Gamma\left[-\frac{\delta f}{\delta Q}+\frac{1}{3}tr\left(\frac{\delta f}{\delta Q}\right)I\right]. \tag{15}$$

其系数 $\Gamma=6D^*/[1-3tr(Q^2)]^2$, D^* 是向列相的转动扩散系数,在方程式中,假设 $\frac{\delta f}{\delta Q}$ 已为对称张量。

完成方程(15)右边的计算,并进行约化,可以获得 $\widetilde{Q}$ 的偏微分方程:

$$\frac{\partial \widetilde{Q}}{\partial t}=-\widetilde{\Gamma}\left\{2\widetilde{A}\widetilde{Q}-2\widetilde{Q}^2+\frac{2}{9}tr(\widetilde{Q}^2)(\widetilde{Q}+3I)-2\widetilde{\nabla}^2\widetilde{Q}\right\}, \tag{16}$$

其中: $\widetilde{\Gamma}=\Gamma\times(-Bq_0)$, 满足边界方程(13)和(14),方程(16)有以下 3 种解。第一是带有线缺陷结构的形变解;第二个是纯 TN 结构,序参数张量 Q 中的指向矢沿着 y 轴扭曲,即无缺陷形变解;第三是一双轴层结构,其本征向量有很小或没有扭曲,即本征值交换结构。为了将方程(16)离

散化,我们使用有限差分迭代方法^[19],得到

$$\begin{aligned} & [\widetilde{Q}(t+\Delta t)-\widetilde{Q}(t)]/\Delta t= \\ & -\widetilde{\Gamma}\left\{2\widetilde{A}\widetilde{Q}(t)-2\widetilde{Q}^2(t)+\frac{2}{9}tr\widetilde{Q}^2(t)\right. \\ & \left.(\widetilde{Q}(t)+3I)-2\widetilde{\nabla}^2\widetilde{Q}(t)\right\}. \end{aligned} \tag{17}$$

在数值计算中,我们发现给出 4×10^{-10} s 的时间步长足以保证数值过程的稳定性。此外,运行 2×10^6 步,系统足以达到平衡态。

3 数值结果

在这一部分,我们给出数值计算的结果。根据文献[20]给定的材料参数,我们有 $A=0.108\times10^5$ J/m³K, $B=-1.325\times10^5$ J/m³, $C=0.544\times10^5$ J/m³ 和 $L_1=0.563\times10^{-12}$ J/m。在模拟中,

我们令约化温度为 $\widetilde{A}=1/4$,相应的约化标量序参数取值为 $\widetilde{S}=3/4(1+\sqrt{1/3})$,转动扩散系数 D^* 设定为 0.35,等于文献[18]用过的值。在数值计算中,我们设定 d_x 的值足以描述 $d_x\rightarrow\infty$ 时的平衡态构型^[21-22]。

3.1 强锚泊边界条件

图 2 通过 $\cos^2\varphi$ 给出指向矢取向分布,而图 3 为双轴性参数 β^z 的分布。我们发现,在盒厚相对较大时,缺陷核结构受到 d 的影响较小(参见图 2a 和 b),除了在缺陷核周围的一个小区域内(图 3a 和 b),系统都是单轴的($\beta^z=0$)。当盒厚 d 变成 ξ 的合适倍数时,缺陷明显沿着 x 方向扩散,液晶盒内双轴性区域明显增加(图 3c)。继续减小盒厚,当达到临界值 $d_c\approx7\xi$ 时,导致双轴层产生,双轴层连接边界上的两正交单轴态(图 2d 和 3d);这时,从盒的一侧到另外一侧,发生有序重构。

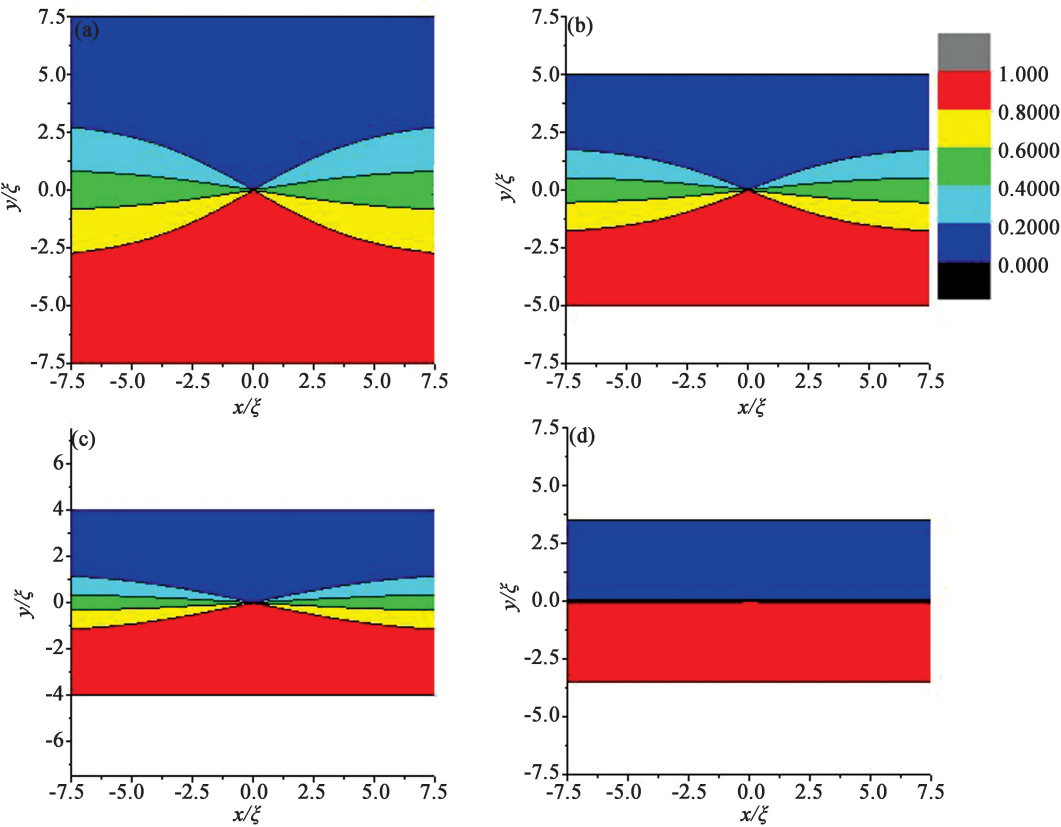


图 2 对于不同盒厚的薄 TN 层通过 $\cos^2\varphi$ 描述平均分子取向. φ 是长轴平均分子取向(即指向矢)与 x 轴的夹角. (a) $d=15\xi$; (b) $d=10\xi$; (c) $d=8\xi$ 和 (d) $d=7\xi$.

Fig. 2 Average molecular orientation described by $\cos^2\varphi$ in a thin TN layer with different cell gaps d . φ is the angle between the average orientation of molecular long axis (i. e. the director) and the x axis. (a) $d=15\xi$; (b) $d=10\xi$; (c) $d=8\xi$ and (d) $d=7\xi$.

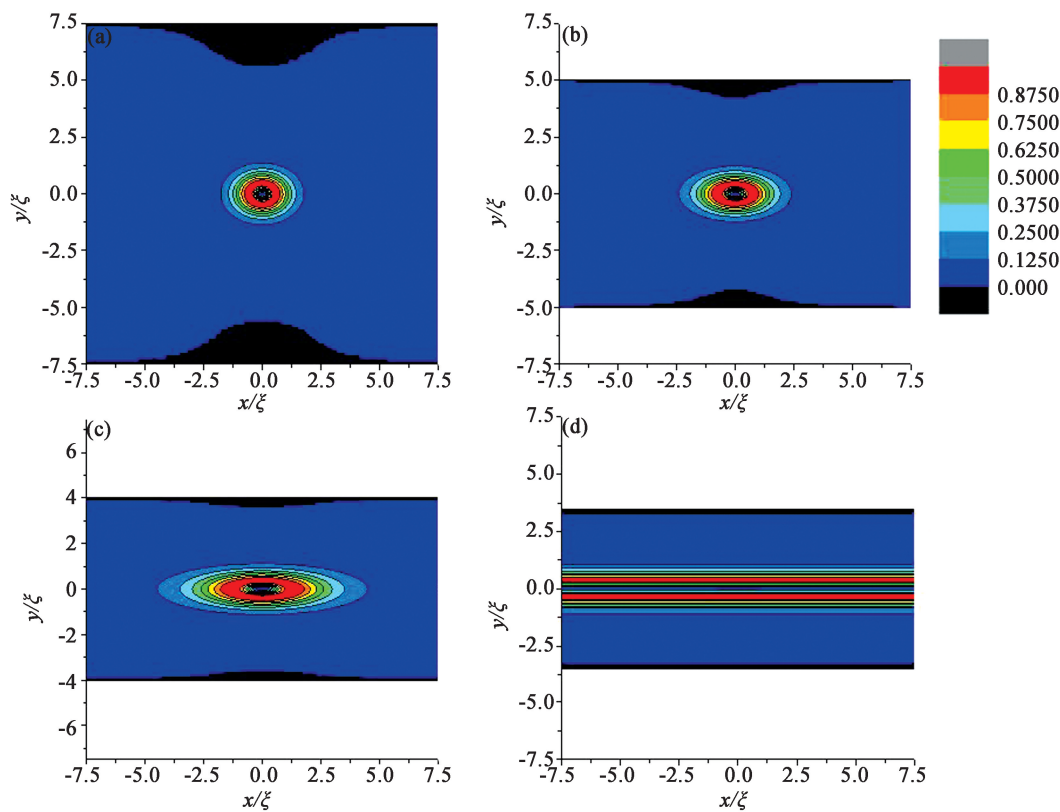


图 3 含有初始线缺陷的扭曲向列相薄盒中不同盒厚 d 的双轴性 β^2 . (a) $d = 15\xi$; (b) $d = 10\xi$; (c) $d = 8\xi$ 和 (d) $d = 7\xi$.

Fig. 3 Biaxiality β^2 for different cell gaps d in a thin TN nematic layer with an initial line defect. (a) $d = 15\xi$; (b) $d = 10\xi$; (c) $d = 8\xi$ and (d) $d = 7\xi$.

在上述物理图像中,向有序重构态的转变起源于强度为 $-1/2$ 的缺陷。但是,在没有缺陷存在时也会产生有序重构态^[8,23]。在基板上,两个具有正交指向矢的单轴态(HAN 盒和 TN 盒)彼此互相联系,从上基板到下基板,可以通过指向矢转动或者有序重构。当盒厚大于临界值($d > d_{c0}$)时,指向矢转动是稳定的,而有序重构不是稳定的。当 $d < d_{c0}$,仅有有序重构存在稳定结构。

图 4 给出了在液晶盒内 3 种结构的自由能变化(有缺陷的形变结构、有序重构结构和无缺陷的 TN 形变结构),自由能通过 $F = \int (f_{\text{bulk}} + f_e) dV$ 数值模拟计算得到。在这里,TN 结构起做对比的参照作用。

图 4 表明,当盒厚减少到临界值 $d_c^* \approx 9\xi$ 时,有序重构是稳定的,而缺陷形变处于亚稳态。相

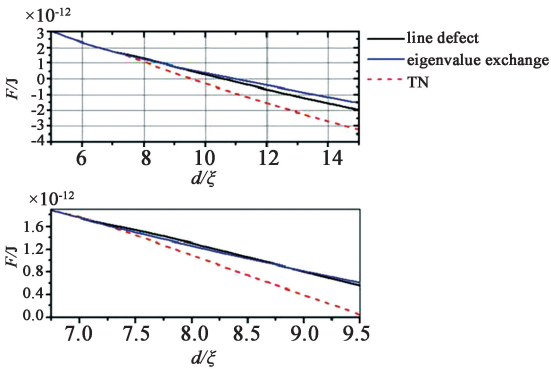


图 4 对于 3 种不同的结构自由能作为 d/ξ 的函数。(b)是(a)的局部放大。

Fig. 4 Free energy as a function of d/ξ for three different structures. (b) is a partial enlargement of (a).

对于纯的 TN 结构,缺陷结构具有更大的能量。直到盒厚减小到临界值 $d_c \approx 7\xi$,缺陷完全扩散,

缺陷中心消失;即小于 d_c ,仅有有序重构态存在。

3.2 力

对达到不同盒厚的平衡状态,我们通过 $F=$

$\int (f_{\text{bulk}} + f_e) dV$ 计算与之对应的自由能 F 的

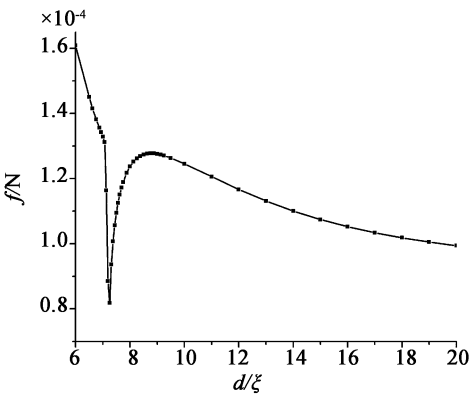


图 5 存在缺陷的 TN 层通过 Landau-de Gennes 理论计算出力.

Fig. 5 Force calculated by the Landau-de Gennes theory for a TN cell with a defect

数值,力 f 由 F 对盒厚 d 的负导数计算。力曲线由图 5 给出。对于盒厚 $d > 9\xi$,随着 d 的减小,力是排斥力,并随着盒厚减小逐渐增大,除了缺陷附近的小区域内,系统都是单轴态(参见图 3a 和 b)。当盒厚减小到 $d \approx 9\xi$ 以下,力仍然为排斥的,却突然明显减小,这清楚的表明盒内向列相结构已改变。对于 $d < 9\xi$,系统中的缺陷结构沿着 x 扩散,非零双轴性在系统内部传播(图 3c)。在 $d \approx 7\xi$,力达到局部最小,此时完全形成双轴层(图 3d)。

4 弱锚泊边界条件

本文仅限研究单侧(下基板)弱锚泊的情况,并研究带有线缺陷的形变结构,因此选取盒厚 $d = 10\xi$,见图 4。在 x - y 平面内,约化空间的范围表示为 $\tilde{x} \in [-22.5, 22.5]$, $\tilde{y} \in [-5, 5]$ 。利用松弛方法进行迭代运算,得到平衡态各点的序参数张量。通过对角化得到各点的 3 个本征值、指向矢以及双轴性参数 β^2 。

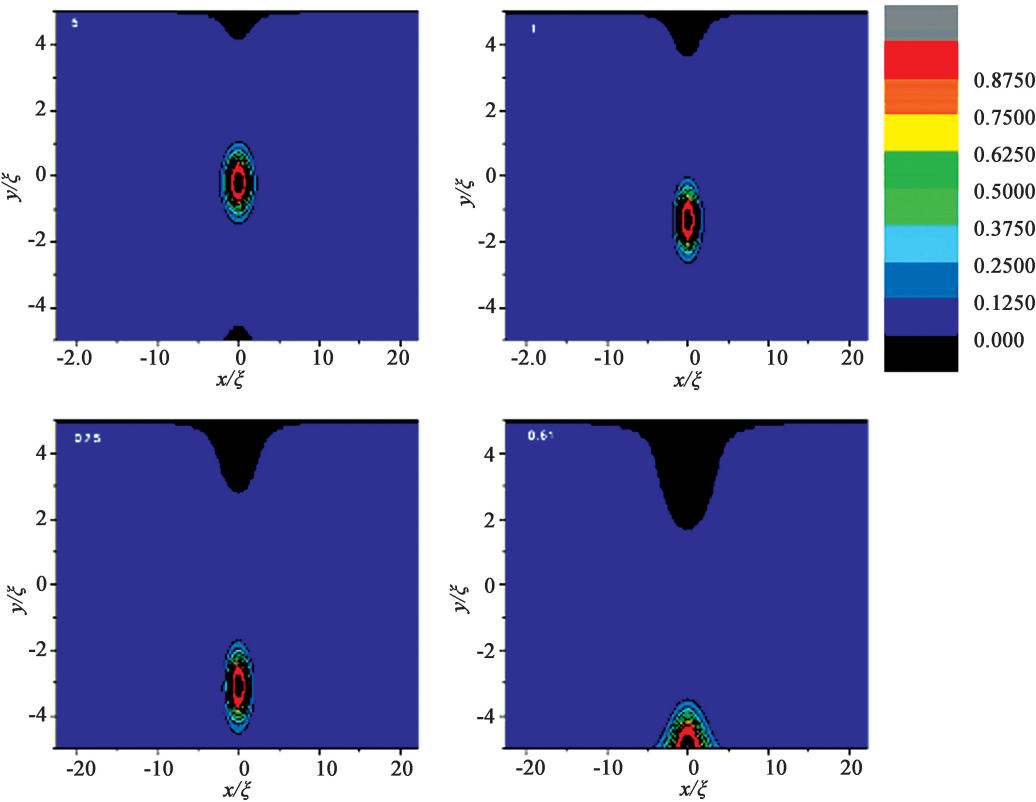


图 6 TN 盒 x - y 平面内 $s = -1/2$ 向错的双轴性等高图(约化锚泊强度系数 $\tilde{W}_s$ 分别为 5、1、0.75、0.61)

Fig. 6 Biaxiality contours of $s = -1/2$ disclination in the x - y plane of a TN cell. (The reduced anchoring strength coefficient $\tilde{W}_s$ were 5, 1, 0.75, 0.61)

图 6 和图 7 给出了垂直于向错线的平面(即 x - y 平面)内 $s=-1/2$ 向错的双轴性参数图和指向矢取向分布图。可以看出,随着下基板约化锚泊强度系数的减小,向错中心沿着 $\tilde{x}=0$ 这条直线

向下移动。在临界值 $\tilde{W}_c=0.61$ 时,缺陷中心移至下基板中心 $(0,-5)$ 处。图 8 给出缺陷中心移出下基板之前,缺陷中心位置随约化锚泊强度系数 $\tilde{W}_s$ 的变化曲线。

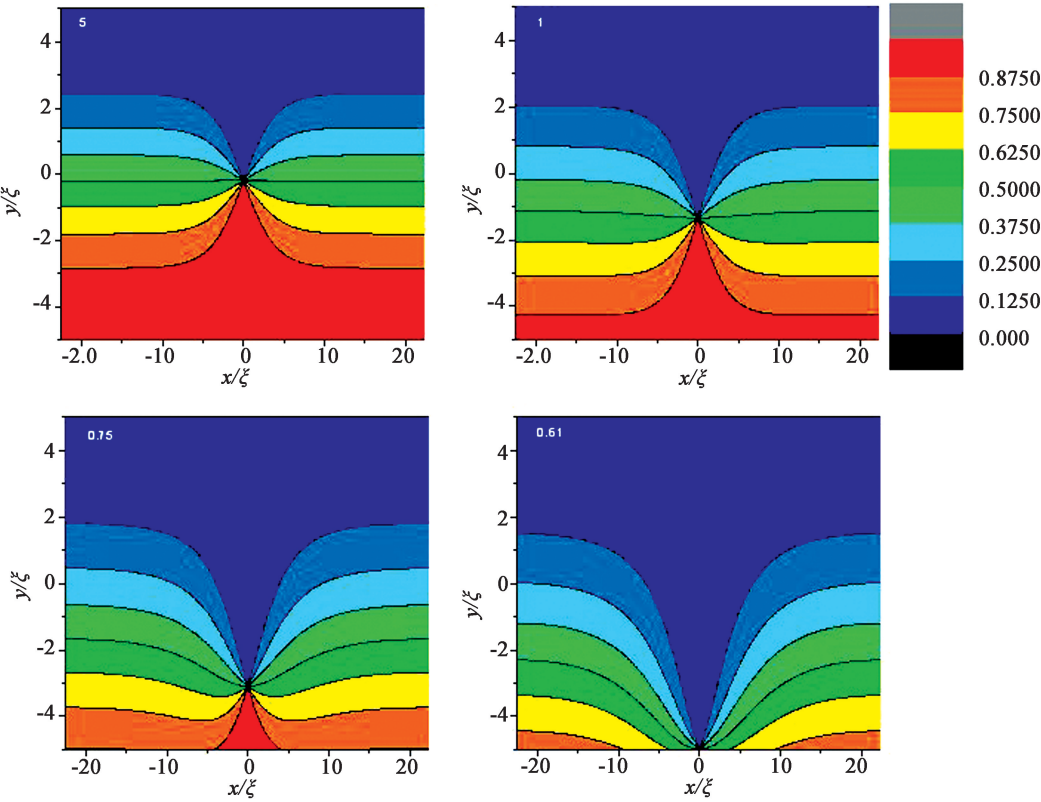


图 7 TN 盒 x - y 平面内 $s=-1/2$ 向错的指向矢取向等高图(约化锚泊强度系数 $\tilde{W}_s$ 分别为 5、1、0.75、0.61)
Fig. 7 Director orientation contours of $s=-1/2$ disclination in the x - y plane of a TN cell. (The reduced anchoring strength coefficient $\tilde{W}_s$ were 5, 1, 0.75, 0.61)

当约化锚泊强度系数 $\tilde{W}<0.61$ 时,缺陷中心

移出下基板,但盒内仍然留有缺陷,其性质为表面缺陷。约化锚泊强度系数取值为 0.6、0.5、0.4、0.3,图 9 和图 10 分别给出双轴性参数图和指向矢取向分布图。从图 9 可以看出,约化锚泊强度系数 $\tilde{W}_s<0.3$ 时,缺陷完全消失,系统处于单轴态。从图 10 可以观察到,此时液晶盒内所有分子指向矢取向都是 90° 。

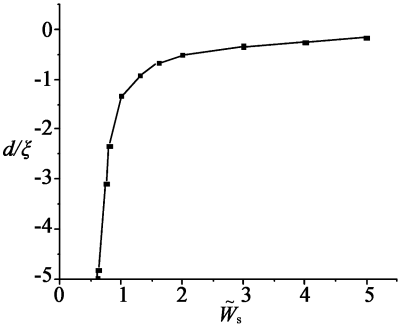


图 8 约化锚泊强度系数 $\tilde{W}_s$ 和缺陷中心位置 d/ξ 之间的关系
Fig. 8 Relationship between the reduced anchoring strength coefficient $\tilde{W}_s$ and the defect center d/ξ

当约化锚泊强度系数取临界值 $\tilde{W}_c=0.61$,我们从它的双轴性参数的等高图(图 6)可以看出,下基板处双轴性的范围为 $(-4.25,4.25)$,对应的两端点分别为 $(-4.25,-5)$ 和 $(4.25,-5)$ 。我们固定此点 $(-4.25,-5)$,计算指向矢的取向角 φ 。如图 11 所示,约化锚泊强度系数 $\tilde{W}_s$ 与角度 φ 呈线性关系。

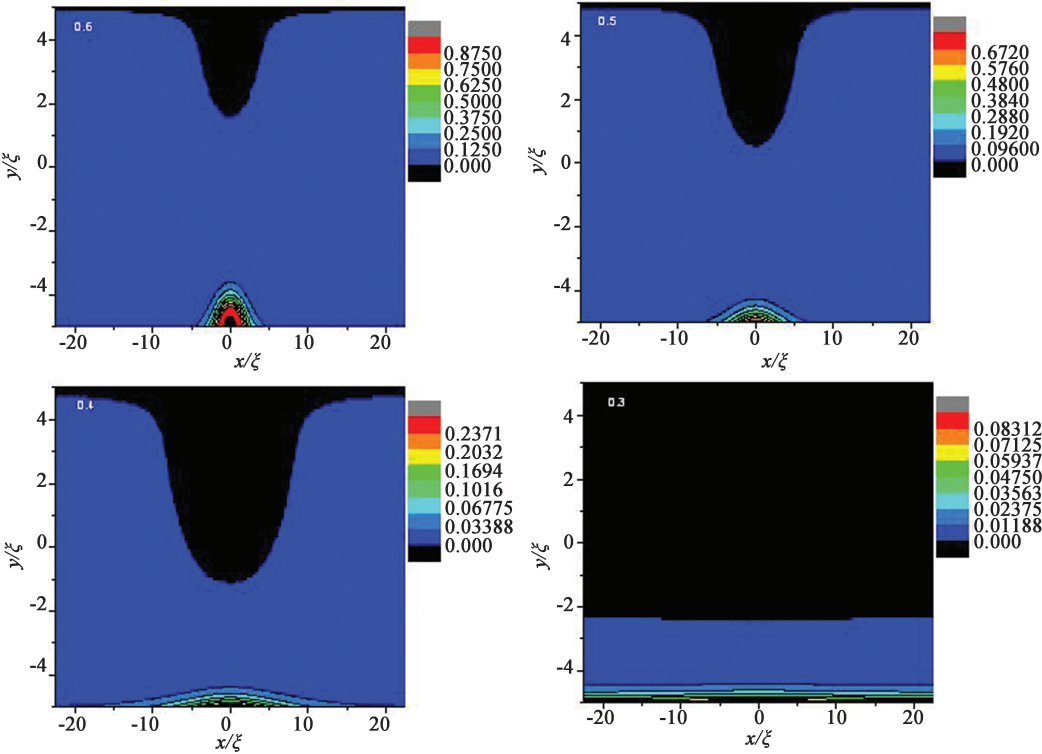


图 9 TN 盒 x - y 平面内 $s = -1/2$ 向错的双轴性等高图(约化锚泊强度系数 $\widehat{W}_s$ 分别为 0.6、0.5、0.4、0.3)

Fig. 9 Biaxiality contours of $s = -1/2$ disclination in the x - y plane of a TN cell. (The reduced anchoring strength coefficient $\widehat{W}_s$ were 0.6, 0.5, 0.4, 0.3)

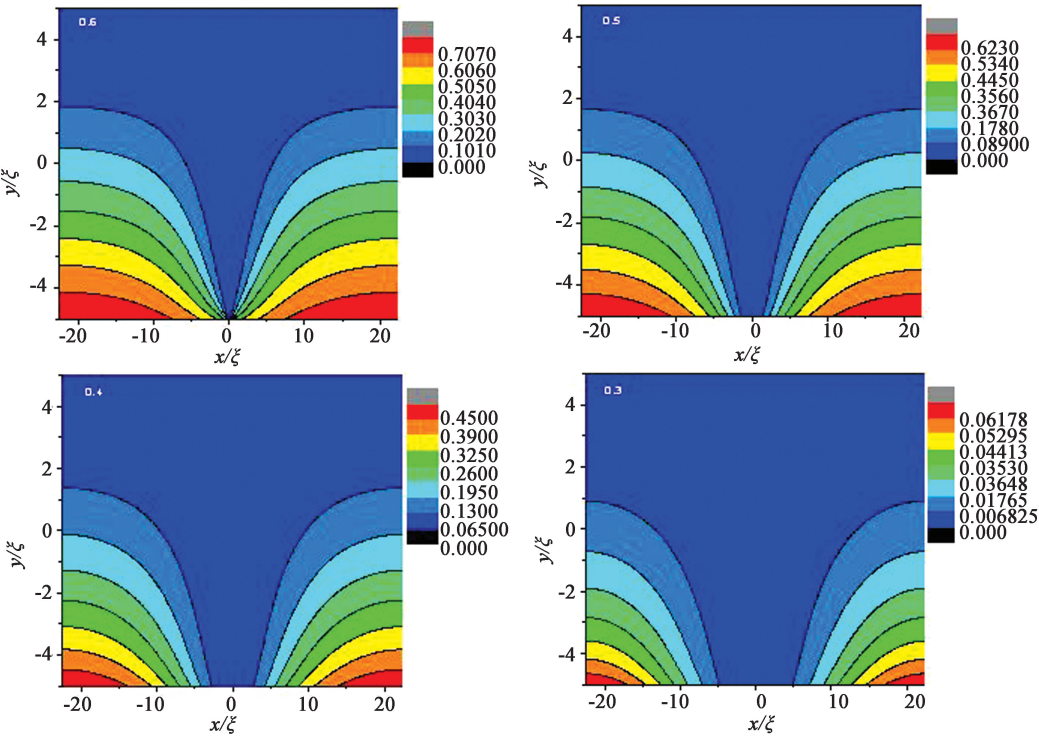


图 10 TN 盒 x - y 平面内 $s = -1/2$ 向错的指向矢取向等高图(约化锚泊强度系数 $\widehat{W}_s$ 分别为 0.6、0.5、0.4、0.3)

Fig. 10 Director orientation contours of $s = -1/2$ disclination in the x - y plane of a TN cell. (The reduced anchoring strength coefficient $\widehat{W}_s$ were 0.6, 0.5, 0.4, 0.3)

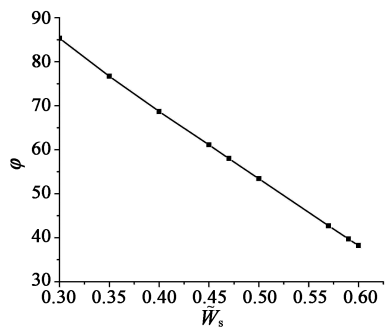


图 11 约化锚泊强度系数 $\tilde{W}_s$ 与角度 φ 之间的关系
Fig. 11 Relationship between the reduced anchoring strength coefficient $\tilde{W}_s$ and the angle φ

5 讨 论

设定约化温度 $\tilde{A} = 1/4$, 可得 $A = A_0 (T - T^*) = B^2/36C$, 平衡态序参数 $S = -B/12C(1 + \sqrt{1 - 24AC/B^2}) = -B/12C(1 + \sqrt{1/3})$ 。根据 [20] 给定的参数, 容易得到相变点的序参数 $S_c = -B/9C \approx 0.27$, 相干长度 $\xi = \sqrt{-L_1/Bq_0} \approx \sqrt{15.7} \times 10^{-9} \text{ m} \approx 3.96 \text{ nm}$, 临界盒厚 $d_c \approx 7\xi \approx 28 \text{ nm}$ 。由 $W_s = W/S$ 和 $\tilde{W}_s = -W_s/q_0 B\xi$, 可知 Landau-de Gennes 理论里的约化锚泊强度系数 $\tilde{W}_s$ 和 Frank 弹性理论里的锚泊强度 W 之间的关系式 $W = -q_0 B\xi S \tilde{W}_s$, 在 Landau-de Gennes 理论里约化锚泊强度系数为 5、0.61、0.3, 分别对应 Frank 弹性理论里的锚泊强度 $2.27 \times 10^{-4} \text{ J/m}^2$ 、 $2.77 \times 10^{-5} \text{ J/m}^2$ 、 $1.36 \times 10^{-5} \text{ J/m}^2$, 实验上测量得到的方位锚泊强度通常为 $\sim 10^{-5} \text{ J/m}^2$ [24-26], 这表明我们研究选择的参数与实验结果是一致的。

温度变化会改变平衡态序参数, 由此我们预测液晶系统的有序重构行为将受到温度的影响; 另外我们模拟的 TN 系统中不含手性剂, 对于含手性剂的扭曲手性向列相 (TCN) 液晶系统, 其有

序重构行为将受到系统手性大小 (即手性添加剂的浓度) 的影响, 这些是我们以后工作的研究方向。对于液晶分子的取向排列, 使用倾斜蒸镀法可以实现平行沿面排列, 它是将金属、氧化物、氟化物等无机物材料在与基板的法线方向成某个角度的方向上进行蒸镀的工艺, 目的是形成一种倾斜排列的取向层, 此取向层与液晶层有明显的分界面。倾斜蒸镀法取向层具有优异的光热稳定性, 并且可以避免摩擦取向技术的缺陷。

当系统发生双轴性转变, 液晶盒形成双轴壁时, 液晶系统将呈现双轴向列相的特性 [27], 相对于常规 TN 液晶盒显示, 双轴系统具有高品质、快反应、能耗低等特性。缺陷的相关研究对向列相液晶中亚微米胶体粒子的调节作用具有一定的理论指导意义, 可以为胶体微组装提供有序模板, 并为新型双稳液晶器件 [28] 以及蓝相液晶器件的研究 [29] 与开发提供可靠的理论依据。

6 结 论

通过 Landau-de Gennes 理论, 我们对液晶薄层中强度 $s = -1/2$ 的扭曲向错线的结构进行了研究。通过松弛方法, 解出平衡态的序参数张量, 并由此给出双轴性参数分布和指向矢取向分布。对于强锚泊液晶盒, 我们的研究表明: 存在临界厚度 $d_c^* \approx 9\xi$, 当液晶盒厚度小于 d_c^* 时, 发生带有线缺陷的形变态到有序重构态的结构转变。进一步减小盒厚至另一个临界厚度 $d_c \approx 7\xi$, 有序重构态成为唯一的平衡态。对于单侧弱锚泊液晶盒, 随着约化锚泊强度系数 $\tilde{W}_s$ 的减小, 在层内缺陷中心开始沿着 $\tilde{x} = 0$ 直线逐渐向下移动。低于临界约化锚泊强度系数 $\tilde{W}_c \approx 0.61$, 缺陷中心移出基板。继续减小约化锚泊强度系数 $\tilde{W}_s$, 全部缺陷移出液晶盒, 此时整个系统处于单轴态。

参 考 文 献:

[1] Schopohl N, Sluckin T J. Defect core structure in nematic liquid crystals [J]. *Phys. Rev. Lett*, 1987, 59(22): 2582-2584.

[2] Martinot-Lagarde P, Dreyfus-Lambez H, Dozov I. Biaxial melting of the nematic order under a strong electric field [J]. *Phys. Rev. E*, 2003, 67(5): 051710(1-4).

- [3] Barberi R, Ciuchi F, Durand G E, *et al.* Electric field induced order reconstruction in a nematic cell [J]. *Eur. Phys. J. E*, 2004, 13(1): 61-71.
- [4] Salter P S, Carbone G, Botcherby E J, *et al.* Liquid crystal director dynamics imaged using two-photon fluorescence microscopy with remote focusing [J]. *Phys. Rev. Lett*, 2009, 103(25): 257803(1-4).
- [5] Carbone G, Lombardo G, Barberi R. Mechanically induced biaxial transition in a nanoconfined nematic liquid crystal with a topological defect [J]. *Phys. Rev. Lett*, 2009, 103: 167801(1-4).
- [6] Kléman M. *Points, Lines and Walls; in Liquid Crystals, Magnetic Systems and Various Disordered Media* [M]. New York(NY): Wiley, 1983.
- [7] Kurik M V, Lavrentovich O D. Defects in liquid crystals: homotopy theory and experimental studies [J]. *Sov. Phys. Usp.*, 1988, 31(196): 196-224.
- [8] Palffy-Muhoray P, Gartland E C, Kelly J R. A new configurational transition in inhomogeneous nematics [J]. *Liq. Cryst.*, 1994, 16(4): 713-718.
- [9] Rosso R, Virga E G. Metastable nematic hedgehogs [J]. *J. Phys. A*, 1996, 29(14): 4247-4264.
- [10] Kralj S, Virga E G, Žumer S. Biaxial torus around nematic point defects [J]. *Phys. Rev. E*, 1999, 60(2): 1858-1866.
- [11] Ambroži M, Kralj S, Virga E G. Defect-enhanced nematic surface order reconstruction [J]. *Phys. Rev. E*, 2000, 75(3): 031708(1-9).
- [12] Kralj S, Rosso R, Virga E G. Finite-size effects on order reconstruction around nematic defects [J]. *Phys. Rev. E*, 2010, 81(2): 021702(1-15).
- [13] De Gennes P G, Prost J. *The Physics of Liquid Crystals* [M]. Oxford: Oxford University Press, 1993.
- [14] Virga E G. *Variational Theories for Liquid Crystals* [M]. London: Chapman Hall, 1994.
- [15] 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.
- [16] Lombardo G, Ayeb H, Barberi R. Dynamical numerical model for nematic order reconstruction [J]. *Phys. Rev. E*, 2008, 77(5): 051708(1-10).
- [17] Pires D, Galerne Y. Recording of virtual disclination lines by means of surface polymerization in a nematic liquid crystal [J]. *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, 2005, 438(1): 1681-1686.
- [18] Guzmán O, Abbott N 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(1-10).
- [19] Zhou X, Zhang Z D. Dynamics of order reconstruction in a nanoconfined nematic liquid crystal with a topological defect [J]. *Int. J. Mol. Sci.*, 2013, 14(12): 24135-24153.
- [20] Qian T Z, Sheng P. Orientational states and phase transitions induced by microtextured substrates [J]. *Phys. Rev. E*, 1997, 55(6): 7111-7120.
- [21] 路丽霞, 张志东, 周璇. 混合排列向列相液晶薄盒中-1/2 向错引起的有序重构的扩散 [J]. *物理学报*, 2013, 62(22): 226101(1-7).
Lu L X, Zhang Z D, Zhou X. Diffusion of order reconstruction induced by -1/2 wedge disclination in a thin hybrid nematic liquid-crystal cell [J]. *Acta. phys. sin*, 2013, 62(22): 226101(1-7). (in Chinese)
- [22] Zhou X, Zhang Z D. Dynamics of order reconstruction in nanoconfined twisted nematic cells with a topological defect [J]. *Liq. Cryst.*, 2014, 41(9): 1219-1228.
- [23] Bisi F, Gartland E C, Rosso R, *et al.* Order reconstruction in frustrated nematic twisted cells [J]. *Phys. Rev. E*, 2003, 68(2): 021707(1-11).
- [24] Yang F, Sambles J R, Bradberry G W. Half-leaky guided wave determination of azimuthal anchoring energy and twist elastic constant of a homogeneously aligned nematic liquid crystal [J]. *J. Appl. Phys.*, 1999, 85(2): 728-733.
- [25] Li X T, Pei D H, Kobayashi S, *et al.* Measurement of azimuthal anchoring energy at liquid crystal/photopolymer interface [J]. *Jpn. J. Appl. Phys.*, 1997, 36: L432-L434.
- [26] Hallam B T, Yang F, Sambles J R. Quantification of the azimuthal anchoring of a homogeneously aligned nematic

liquid crystal using fully-leaky guided modes [J]. *Liq. Cryst.* , 1999, 26(5):657-662.

[27] Lee G S, Cho J S, Kim J C, *et al.* Direct confirmation of biaxiality in a bent-core mesogen through the measurement of electro-optic characteristics [J]. *J. Appl. Phys.* , 2009, 105(9): 094509(1-7).

[28] 范志新,刘洋,杨磊,等. 聚合物分散液晶的电场诱导定向聚合实验研究 [J]. 液晶与显示,2012,27(4): 434-438. Fan Z X,Liu Y,Yang L, *et al.* Experiment research on electric field induced stereo regular polymerization of polymer dispersed liquid crystal [J]. *Chinese Journal of Liquid Crystals and Displays* , 2012,27(4): 434-438. (in Chinese)

[29] 倪水彬,朱吉亮,钟恩伟,等. 蓝相液晶光电特性研究 [J]. 液晶与显示, 2012,27(6):719-723. Ni S B, Zhu J L, Zhong E W, *et al.* Electro-optic property research of blue phase liquid crystals [J]. *Chinese Journal of Liquid Crystals and Displays* , 2012, 27(6):719-723. (in Chinese)

作者简介:余洋(1988—),男,内蒙古呼伦贝尔人,硕士研究生,从事液晶物理方面的学习和研究。E-mail: 276515208@qq.com