

文章编号:1007-2780(2022)08-1032-20

液晶静态模型及应用进展

张馨元^{1,2}, 崔慧林^{1,2}, 王 钰^{1,2}, 陈宏一^{1,2}, 张心正^{1,2*}

- (1. 南开大学 物理科学学院/泰达应用物理研究院 弱光非线性光子学教育部重点实验室,
天津 300071;
2. 南开大学 液晶光子学中心斯联合研究中心, 天津 300071)

摘要:液晶是物理、化学和材料科学领域长期的研究热点之一。向列相液晶中分子倾向于沿某个方向优先取向的排列使其具有类似于晶体的电磁特性和光学特性,在显示、光场调控等方面发挥着重要作用。液晶的特殊光学纹理反映了其中包含的缺陷,构建液晶理论模型对研究液晶和此类缺陷具有重要的意义。本文综述了几种常用的液晶静态理论模型及其适用条件,分析了界面效应下锚定能引起的自由能变化。针对当前应用最广泛的 Landau-de Gennes Q 张量模型,本文重点介绍了近年来该模型在弹性常数 $L \rightarrow 0$ 和低温极限问题中的研究动态,最后列举了液晶理论模型在实际应用方面的研究进展。

关键词:序参量;Oseen-Frank 模型;Landau-de Gennes 模型;拓扑缺陷

中图分类号:O753⁺.2;O141.4;O77 **文献标识码:**A **doi:**10.37188/CJLCD.2022-0189

Static models of liquid crystals and their application progress

ZHANG Xin-yuan^{1,2}, CUI Hui-lin^{1,2}, WANG Yu^{1,2}, CHEN Hong-yi^{1,2}, ZHANG Xin-zheng^{1,2*}

- (1. *The MOE Key Laboratory of Weak-Light Nonlinear Photonics, TEDA Institute of Applied Physics and School of Physics, Nankai University, Tianjin 300071, China;*
2. *International Sino-Slovenian Joint Research Center on Liquid Crystal Photonics at Nankai University, Tianjin 300071, China*)

Abstract: Liquid crystals (LCs) have been one of the hot topics in physics, chemistry and material science for decades. Nematic liquid crystals (NLCs) are composed of molecules tending to align in a preferred direction and thus have orientational order. Hence, NLCs possess electromagnetic and optical properties similar to crystals, and play an important role in applications ranging from display to light field regulation, etc. LCs usually contain defects and therein exhibit special optical textures. In order to study these defects, a prevailing method is to build proper theoretical models for the LCs. In this review article, several static models of LCs and their applicable conditions are reviewed. The variation of free energy caused by anchoring energy under the interface effect is also analyzed in detail. Moreover, this article introduces the recent

收稿日期:2022-06-07;修订日期:2022-06-26.

基金项目:国家自然科学基金(No. 12074201, No. 12104335);教育部长江学者和创新团队发展计划(No. IRT_13R29)
Supported by National Natural Science Foundation of China (No. 12074201, No. 12104335); Program for Changjiang Scholars and Innovative (No. IRT_13R29)

*通信联系人, E-mail: zxz@nankai.edu.cn

advances of the most widely used Landau-de Gennes Q -tensor model in case of elastic constant $L \rightarrow 0$ and low temperature limit. Finally, the progress of these theoretical models in practical applications is also discussed.

Key words: order parameter; Oseen-Frank model; Landau-de Gennes model; topological defect

1 引言

液晶相作为一种中间相,其取向有序程度介于结晶相和各向同性液体之间。由长棒状分子组成的化合物经常表现出多态性,在加热这些化合物时,随着温度的升高,化合物会逐次经历一个或多个有序程度不同的液晶相。根据分子排布方式的不同,液晶相可分为向列相、胆甾相、近晶相等。其中向列相是最简单的液晶相,也是应用最广泛的液晶相。

对凝聚态物质的研究发现,材料的许多性质往往并不决定于分子、原子的规则排布,而决定于材料中不规则排列的缺陷,因此利用缺陷可以设计具有特定性能的材料。要理解材料如何从一个相转变到另一个相,也需要了解相变期间产生的缺陷。液晶中的拓扑缺陷是液晶研究中的核心问题之一,为了研究液晶中的缺陷、相变、分子分布规律及其动力学行为,需要引入数学模型进行描述^[1-2]。根据描述液晶分子状态所选取的序参量不同,经典的静态液晶模型可分为基于位致相互作用的微观 Onsager 分子理论模型^[3-4]、宏观唯象的 Oseen-Frank^[5-6]和 Ericksen 连续弹性体向量模型^[7-8]以及介观的 Landau-de Gennes 连续弹性体张量模型^[9]。本文将主要围绕向列相液晶的静态理论模型讨论不同模型的适用范围,分析界面效应下锚定能引起的自由能变化,并介绍近年来有关模型极限问题的研究和模型在拓扑缺陷研究以及诸如液晶胶体、双稳态显示等实际应用领域的研究进展。

2 液晶静态模型理论

向列相液晶分子取向具有长程有序性,可以是只在一个方向上有明显易取向性的单轴向列相,也可以是在两个不同方向上都有明显易取向性的双轴向列相。单轴向列相是最简单的向列相,具有单一的局域优先取向方向,称作指向矢 $\mathbf{n}$ 。

由于分子取向没有正反方向的区别,指向矢 $\mathbf{n}$ 与 $-\mathbf{n}$ 所描述的两种分子取向状态在物理上等价。分子相对于指向矢的取向有序度由一个标量序参量表示,其物理意义表示为分子取向与指向矢的一致程度。对于单轴向列相液晶,标量序参量为

$$s = \frac{1}{2} \langle 3 \cos^2 \theta - 1 \rangle = \frac{1}{2} \int_0^\pi (3 \cos^2 \theta - 1) f(\theta) d\theta, \quad (1)$$

式中 θ 是分子长轴与指向矢之间的夹角, $\langle \rangle$ 表示热力学平均或统计平均, $f(\theta)$ 是分子长轴取向的概率分布函数。在双轴向列相液晶中,由于分子具有两个方向的易取向性,还需引入另一单位向量 $\mathbf{m}$, 与 $\mathbf{n}$ 和 $\mathbf{m}$ 相对应的描述取向排列有序度的标量序参量通常表示为 s 和 r 。

向列相液晶中向错缺陷的出现打破了各向同性液体的旋转对称性,产生的各向异性特性使液晶在诸多物理应用及数学建模领域广受关注。对于静态和动态的向列相液晶,分别存在多种建模方法。本文将介绍几种经典的静态理论模型: Onsager 分子模型、Oseen-Frank 和 Ericksen 向量模型以及 Landau-de Gennes 张量模型。其中, Oseen-Frank 向量模型和 Landau-de Gennes 张量模型被广泛用于实际问题的数值计算和分析。

2.1 Onsager 模型

Onsager^[3]最先研究了液晶分子中各向异性的位致相互作用对系统整体统计性质的影响,将液晶分子取向的概率密度作为序参量描述整个系统的能量。Onsager 以排斥体积势作为势函数,认为存在的位致排斥相互作用必然对向列相的存在起作用。然而在利用 Onsager 方程确定方位分布函数时发现,仅考虑排斥相互作用所作出的预测与实际观察不符。Maier 和 Saupe^[4]提出的吸引相互作用理论给出了更普遍的分子间相互作用势。基于统计力学和平均场近似计算系统的自由能,将位致相互作用和吸引相互作用结

合考虑,可描述向列相到各向同性相的相变性质。Onsager模型描述的系统能量^[2]如下:

$$A(f) = \iint_{S^2} \left\{ f(x, m) (\ln f(x, m) - 1) + \frac{1}{2} f(x, m) \mathcal{U}f(m, x) \right\} dm dx, \quad (2)$$

$$\mathcal{U}f = \iint_{S^2} B(x, m; x', m') f(x', m') dx' dm', \quad (3)$$

其中 $f(x, m)$ 为位置 x 处指向方向 m 的液晶分子的概率密度; $\mathcal{U}f$ 中 $\mathcal{U}$ 为对函数进行所述操作而定义的算符,直接作用于函数 f 。式(2)中第一项代表熵,第二项代表系统中分子相互作用的总势能。 $B(x, m; x', m')$ 为分子间相互作用势,表示 x 处指向方向 m 的分子与 x' 处指向 m' 的分子之间的相互作用势大小。

2.2 Oseen-Frank 模型

Oseen-Frank(OF)模型是向列相液晶最简单的连续体理论,由Oseen提出^[5],Frank进一步将其发展^[6]。OF理论局限于取向有序度恒定的单轴向列相液晶材料,液晶的状态由指向矢 $\mathbf{n}$ 描述。OF能量是指向矢 $\mathbf{n}$ 在域中偏离均匀排列形成畸变所产生的自由能,能量密度是对弹性亥姆霍兹自由能中的 $\nabla \mathbf{n}$ 项的泰勒展开,要求能量密度是 $\mathbf{n}$ 和 $\nabla \mathbf{n}$ 的偶函数,且满足要求所保留的最小项是 $(\nabla \mathbf{n})^2$ 。考虑 $(\nabla \mathbf{n})^2$ 的所有项,同时受均匀性和局域不变性条件限制,OF能量定义为泛函^[10]:

$$E(\mathbf{n}) = \iiint_{\Omega} \frac{1}{2} \left(K_1 (\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + K_2 (\mathbf{n} \cdot \nabla \times \mathbf{n})^2 + K_3 (\mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n})^2 \right) + \frac{1}{2} (K_2 + K_4) \cdot (\nabla \cdot [(\mathbf{n} \cdot \nabla) \mathbf{n} - (\nabla \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n}]) d\Omega, \quad (4)$$

式中的前3项分别对应于指向矢的展曲、扭曲和弯曲畸变所产生的能量,与系数 K_1 、 K_2 和 K_3 相关的畸变如图1所示。 K_4 为鞍展(Saddle-splay)项,通过散度定理可以转化为只与边界有关的表面项。指向矢受 $|\mathbf{n}|=1$ 的约束,通过拉格朗日乘子法可由方位角和极角表示:

$$\mathbf{n}(\theta, \phi) = (\cos\theta \sin\phi, \sin\theta \sin\phi, \cos\phi), \quad (5)$$

对于 z 轴上极角 ϕ 不变的系统,式(4)中第二项和第四项为零,能量表达式大幅简化。物理上可观察到的平衡态对应于OF能量的极小值(受施加的边界条件影响),Hardt等人给出了这些极小值存在性和部分正则性的证明^[11]。一些液晶材料

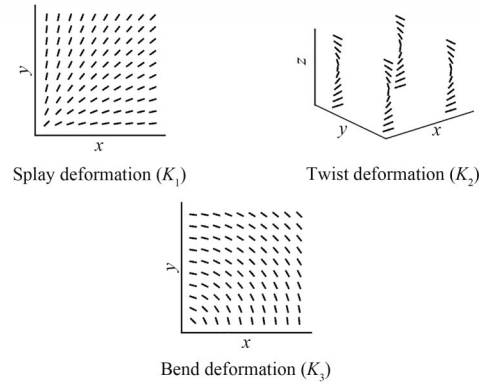


图1 指向矢畸变的3种类型^[10]

Fig. 1 Three types of deformation to the director^[10]

的弹性常数已经被实验测量,大多具有相同的数量级,可采用常数近似。当 $K_1=K_2=K_3=K$, $K_4=0$ 时,OF能量简化为狄利克雷能^[12]:

$$E(\mathbf{n}) = \frac{K}{2} \iiint_{\Omega} |\nabla \mathbf{n}|^2 d\Omega. \quad (6)$$

上述讨论是基于没有外部场和表面效应的一般情况。然而在液晶物理学中,表面效应十分重要。表面对液晶分子有锚定作用,使表面附近的液晶分子的排列更加有序,其指向矢会倾向于一个固定的平均方向——易取向方向。在域表面的处理中,液晶分子施加易取向方向的锚定方法包括指向矢沿平面法线方向的垂直锚定和指向矢与平面相切的平面锚定两种。为了表征锚定程度强弱,引入界面自由能的概念,也称锚定能^[13-14]。

当作用在液晶分子上的表面力足够强时,迫使指向矢在表面有确定的方向,这种情况被称为强锚定。张方辉等人^[13]指出,在任何情况下,强锚定的表面能都可以忽略,表面的作用只须简单地归结为固定界面附近的 $\mathbf{n}$ 与表面的易取向方向。强锚定时,分子沿易取向方向以满足OF能量极小化, $\mathbf{n}$ 服从狄利克雷边界条件 $\mathbf{n} = \mathbf{n}_B$,单位向量 $\mathbf{n}_B$ 为易取向方向。

如果作用在界面上的表面力很弱,那么指向矢可能不会理想地沿着施加的易取向方向排布,这种情况被称为弱锚定。弱锚定时,表面能不能被忽略,体系自由能为表面能和体积能两部分之和。弱锚定时表面能有多种形式,最简单的表面势是Rapini-Papoular能^[15]:

$$E_s = \oint_{\partial\Omega} \frac{W}{2} (\mathbf{n} \cdot \mathbf{v})^2 d\Omega, \quad (7)$$

其中 W 为锚定强度, v 为表面的外法向。

界面对液晶分子锚定作用的强弱可由外推长度 $\xi = K/W$ 描述^[16], 其大小主要取决于分子的平均线度、表面能的各向异性部分以及液晶分子之间的相互作用能。常数近似下外推长度是决定表面锚定还是弹性特性中哪一个占主导的重要参数。

2.3 Ericksen 模型

OF 理论的局限性在于它相当于假设液晶在各空间位置具有恒定的分子取向序参量, 这导致在使用其分析实际中存在的液晶缺陷时, 由于缺陷附近指向矢的不连续变化, 根据其能量表达式, 相应的自由能密度将趋于无穷大。为了建立更全面的连续理论来描述液晶这种特殊液体的性质, 人们做了许多尝试。Ericksen 对 OF 模型进行了重新阐述, 发展出了 Ericksen 静态理论^[7-8]。

Ericksen 理论也仅限于单轴液晶材料, 但可以解释空间上变化的取向有序度, 通过指向矢 $\mathbf{n}$ 和标量序参量 s 描述液晶的状态^[8]。单弹性常数近似下, 其自由能的最简单形式为

$$E(s, \mathbf{n}) = \iiint_{\Omega} \left(K |\nabla s|^2 + s^2 |\nabla \mathbf{n}|^2 \right) + f_B(s) d\Omega, \quad (8)$$

其中 K 为与材料有关的弹性常数, $f_B(s)$ 是一个温度相关的体积势 (s 为首选的序参量)。其边界条件情况类似于 OF 模型, 既可以对 $\mathbf{n}$ 和 s 施加限制, 也可以引入表面势。Ericksen 模型的前提是只要 $\mathbf{n}$ 存在奇点, s 就会消失, 可以解释所有物理上可观察到的缺陷。Ericksen 连续体模型可连接 OF 模型和 Landau-de Gennes (LdG) 模型, 用以描述各向同性到单轴向列相的相变, 但不能描述双轴向列相。

2.4 Landau-de Gennes 模型

LdG 模型是描述向列相液晶较精确的连续体理论, 可以描述各向同性相、单轴和双轴向列相以及它们之间的相变^[9,17]。液晶的状态由一个对称的无迹矩阵 $\mathbf{Q}$ 张量表示, $\mathbf{Q}$ 的特征向量提供了取向序的方向信息, 而特征值提供了分子取向的有序度, 决定液晶的相。任意一个 3×3 矩阵可以用特征值 λ_i 和特征向量 $\mathbf{e}_i$ 表示^[10]

$$\mathbf{Q} = \lambda_1 \mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1 + \lambda_2 \mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_2 + \lambda_3 \mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_3, \quad (9)$$

由于 $\mathbf{Q}$ 是无迹的, 要求同时满足 $\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 = 0$ 和 $\sum_{i=1}^3 \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_i = \mathbf{I}$, $\mathbf{I}$ 为 3×3 单位矩阵, 有

$$\mathbf{Q} = (2\lambda_1 + \lambda_2) \mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1 +$$

$$(2\lambda_2 + \lambda_1) \mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_2 - (\lambda_1 + \lambda_2) \mathbf{I}, \quad (10)$$

令 $s = (2\lambda_1 + \lambda_2)$, $r = (2\lambda_2 + \lambda_1)$, $\mathbf{n} = \mathbf{e}_1$, $\mathbf{m} = \mathbf{e}_2$, 当 $\mathbf{Q}$ 的 3 个特征值完全不同时描述双轴相, 存在两个指向矢 $\mathbf{n}$ 、 $\mathbf{m}$, 以及两个对应的序参量 s 、 r , $\mathbf{Q}$ 可以写为如下形式:

$$\mathbf{Q} = s \left(\mathbf{n} \otimes \mathbf{n} - \frac{\mathbf{I}}{3} \right) + r \left(\mathbf{m} \otimes \mathbf{m} - \frac{\mathbf{I}}{3} \right), \quad (11)$$

当 $\mathbf{Q}$ 有两个不同的特征值时描述单轴相, 只存在一个指向矢 $\mathbf{n}$ 和一个序参量 s , 式 (11) 简化为

$$\mathbf{Q} = s \left(\mathbf{n} \otimes \mathbf{n} - \frac{\mathbf{I}}{3} \right), \quad (12)$$

如果 $\mathbf{Q}$ 只有一个特征值, 根据无迹条件, $\mathbf{Q} = 0$, 此时对应各向同性相。

LdG 能量泛函是关于 $\mathbf{Q}$ 及其空间导数的非线性积分泛函:

$$E(\mathbf{Q}) = \iiint_{\Omega} f_E(\mathbf{Q}) + f_B(\mathbf{Q}) d\Omega, \quad (13)$$

式中 $f_E(\mathbf{Q})$ 是弹性能密度, 描述液晶指向的空间变化带来的能量, $f_B(\mathbf{Q})$ 是体积能。弹性能密度 $f_E(\mathbf{Q})$ 的一般形式为^[10]

$$f_E(\mathbf{Q}) = \sum_{i,j,k=1}^3 \left(\frac{L_1}{2} \left(\frac{\partial Q_{ij}}{\partial x_k} \right)^2 + \frac{L_2}{2} \frac{\partial Q_{ij}}{\partial x_j} \frac{\partial Q_{ik}}{\partial x_k} + \frac{L_3}{2} \frac{\partial Q_{ij}}{\partial x_k} \frac{\partial Q_{ik}}{\partial x_j} \right), \quad (14)$$

(x_1, x_2, x_3) 表示笛卡尔坐标系的 3 个轴。弹性系数 L 与 OF 弹性常数 K 存在如下关系^[18]:

$$\begin{cases} L_1 = \frac{K_3 - K_1 + 3K_2}{6S_{\text{exp}}^2}, \\ L_2 = \frac{K_1 - K_2 - K_4}{S_{\text{exp}}^2}, \\ L_3 = \frac{K_4}{S_{\text{exp}}^2}, \end{cases} \quad (15)$$

其中 S_{exp} 表示实验测量的序参量。单弹性常数近似下的弹性能密度为

$$f_E(\mathbf{Q}) = \sum_{i,j,k=1}^3 \frac{L}{2} \left(\frac{\partial Q_{ij}}{\partial x_k} \right)^2 \equiv \frac{L}{2} |\nabla \mathbf{Q}|^2. \quad (16)$$

体积能 $f_B(\mathbf{Q})$ 允许各向同性相到向列相转变, 决定优先相。在高温下, 液晶在能量上更容易得到各向同性态, $\mathbf{Q} = 0$ 为全局极小值。而在低温下更容易得到单轴或双轴向列态。体积能表示为对各向同性态 $\mathbf{Q} = 0$ 的泰勒级数展开, 允许各向

同性到单轴相变的最小展开是四阶展开^[16]:

$$f_B(\mathbf{Q}) = F_0 + \frac{A}{2} \text{tr} \mathbf{Q}^2 + \frac{B}{3} \text{tr} \mathbf{Q}^3 + \frac{C}{4} (\text{tr} \mathbf{Q}^2)^2, \quad (17)$$

其中 F_0 是一个常数项, 满足 $f_B(\mathbf{Q}) > 0$ 。二阶系数 A 与温度 T 存在线性关系 $A = \alpha(T - T^*)$, $\alpha > 0$, T^* 是各向同性态失去稳定性的临界温度。为满足全局极小值有限, 四阶系数 C 必须为正值, 四阶体积势的临界点是单轴向列态 $\mathbf{Q}$ 张量^[17], 不允许双轴临界点存在^[16,19]。允许双轴临界点、单轴临界点和各向同性临界点均存在的最小级数展开是六阶展开。

与 OF 理论相似, 接下来讨论表面效应下的自由能。考虑表面效应下的锚定强度, LdG 能量中包含了控制表面行为的条件。在强锚定情况下, n 服从狄利克雷边界条件沿易取向方向。弱锚定下狄利克雷边界条件用表面锚定能代替。锚定能有多种形式, 包括 Rapini-Papoular 表面能^[15]、Durand-Nobili 表面能^[20]等, 可根据实际需求和适用条件选择。例如 Tsakonas 等人^[21]选用了 Rapini-Papoular 表面能的推广式。Luo 等人^[22]讨论了 LdG 框架下, 强锚定和弱锚定情况的建模问题。他们研究了弱锚定情况下 3 种不同的表面锚定能, 通过分析序参量的有界性、弱锚定收敛情况, 对比了不同形式表面锚定能的性质, 选取出具有诸多优势、最为合适的 Durand-Nobili 表面能。

综上所述, LdG 模型可以较为全面地描述液晶中的物理现象, Ericksen 和 OF 模型可以被看作是 LdG 模型的简化。LdG 模型允许空间上变化的取向有序度和双轴性, 用张量场表示。而 OF 模型假定了一个统一的取向有序度, 以及一个单轴的有序状态, 以向量场形式表示。通过限制 $\mathbf{Q}$ 只允许其解对应于单轴向列相指向矢和单轴序参量, LdG 自由能退化为静态的 Ericksen 变序参量形式的自由能。当序参量为常数时, 又进一步退化为 OF 能量。模型的一般形式包括弹性常数、体积常数、与手性相关的项及挠曲电效应, 而更现实的模型可以包含更多的附加项, 如上述的表面锚定项、与电场或磁场耦合相关的项、铁电效应等。张辉等人^[23]基于 LdG 理论计算了外加电场作用下液晶分子的自由能表达式, 并通过模拟描述指向矢的方位角和极角的变化情况给出相应的缺陷处电场驱动的结构变化, 模拟结果

给出的挠曲电效应引起的方位角的变化角度与实验一致。

液晶的理论模型主要应用于对液晶分子指向场的分析, 而液晶中存在的缺陷作为一种特殊的光学纹理具有极大的研究价值。一般来说, 液晶中的缺陷由弹性形变、边界条件、外加电场或磁场等引起, 不同的理论模型对缺陷的描述存在一定差异。LdG 模型是一种介观模型, 包含了与点缺陷和向错线的核尺寸等特征相关的分子内在长度尺度。缺陷核尺寸有限, 且相关的张量场在缺陷域内保持平滑。OF 模型是一个宏观模型, 不包含这种内在长度尺度, 其平衡指向场的缺陷对应奇异点、线。因此在选用模型研究实际问题时还应考虑对尺度的分析, 当研究问题域的几何长度与内在长度(如缺陷核尺寸)相比不算太大时, 用 LdG 模型; 而当几何长度尺度远大于缺陷核(且缺陷核的精细结构不重要)时, 则使用 OF 模型^[24]。

3 模型的极限问题

LdG 模型和 OF 模型是表征向列相液晶中平衡取向特性时使用最广泛的连续介质模型。模型包含了大量的物理参数, 而对参数依赖效应(解的状态变化、分岔、结构相变、参数极值范围内的行为)的研究具有重要意义。

3.1 弹性常数 $L \rightarrow 0$ 极限问题

近年来, LdG 模型在数学分析界引起了广泛关注, 人们严格探索了在弹性常数的某些极端范围内该模型的限制行为^[17,25-26]。

Majumdar 等人^[17]在工作中使用式(18)的自由能形式研究了弹性常数 $L \rightarrow 0$ 的消失极限。极限 $L \rightarrow 0$ 是一个物理上相关的极限, 因为弹性常数 L 通常非常小, 量级为 10^{-11} J/m。Bauman 等人^[25]使用了式(19)、(20)中的模型形式, 人为地引入无量纲参数 ϵ 来驱动弹性常数 L_1, L_2, L_3 同时归 0, 其中 $Q_{ij,k} = \partial Q_{ij} / \partial x_k, i, j, k = 1, 2, 3$ 。Bauman 等人分析了泛函极小值以及在弹性能消失极限 $\epsilon \rightarrow 0$ 时的行为。上述工作都对模型进行了全量纲形式的分析。

$$\mathcal{F}(\mathbf{Q}) = \int_{\Omega} [L |\nabla \mathbf{Q}|^2 / 2 + f_B(\mathbf{Q})] dV, \quad (18)$$

$$\mathcal{F}_{\epsilon}(\mathbf{Q}) = \int_{\Omega} [f_E(\nabla \mathbf{Q}) + \epsilon^{-2} f_B(\mathbf{Q})] dV, \quad (19)$$

$$f_E(\nabla Q) = \frac{L_1}{2} Q_{ij,k} Q_{ij,k} + \frac{L_2}{2} Q_{ij,j} Q_{ik,k} + \frac{L_3}{2} Q_{ij,k} Q_{ik,j}, \quad (20)$$

Golovaty 等人^[26]研究了一种无量纲模型式(21)、(22),将其表示为二阶张量 $u = \langle I \otimes I \rangle$ (而不是 Q)。在完全有序单轴态 $u = \langle n \otimes n \rangle$ ($\text{tr}(u) = 1$) 中,体积势能具有最小值, ϵ 被称为“无量纲弹性常数”,同样分析了极限 $\epsilon \rightarrow 0$ 时的行为。

$$E_\epsilon(u) = \int_\Omega \left[\frac{1}{2} |\nabla u|^2 + \frac{1}{\epsilon^2} W(u) \right] dV, \quad (21)$$

$$W(u) = \frac{1}{2} \text{tr}((u - u^2)^2). \quad (22)$$

上述3项工作都得到了形式为 $Q = s(n \otimes n - I/3)$ 的远离奇异集的极限单轴极小值,其中指向场 n 对应于 OF 模型中极小值。Gartland 等人^[24]给出了极限 $L \rightarrow 0$ 的解释,通过无量纲化处理和尺度分析表明 $L \rightarrow 0$ 不是弹性消失极限,而是内在长度(与缺陷核尺度等相关)与几何长度(与问题域尺度相关)相比近乎为0的极限。缺陷核尺寸逐渐减小,有限尺寸缺陷在极限处成为点或线奇异,由介观 LdG 模型过渡到宏观 OF 模型。

3.2 低温极限

Gartland 等人^[24]通过合适的尺度变换得到了低温极限下的自由能泛函表达式,分析表明这种“低温”极限对应于上述弹性常数 $L \rightarrow 0$ 的极限问题,表现出缺陷核相对域尺寸近乎为零的尺度极限。两个极限模型有许多共同特征,在一定的条件下可以相互转换。Contreras 等人^[27]分析了 LdG 模型在低温极限下的行为,随后 Majumdar 等人对这一工作进行推广,研究了具有拓扑非平凡和狄里克雷边界条件的任意三维单连通几何上向列相液晶的 LdG 能量泛函极小化,着重讨论了 $L \rightarrow 0$ 极限问题^[28]。

LdG 模型及其自由能极小化解在低温状态会显示出一些效应,包括取向有序度的增加、缺陷核尺寸的减小,尤其是能够接触到双轴性问题。Gartland 等人证明了在足够低温情况下,可通过局域的双轴跃迁平衡张量场以避免各向同性缺陷核所产生的巨大自由能。双轴缺陷核尺寸由与温度相关的双轴相干长度定义^[29-30],双轴相干长度可以从双轴缺陷核内部解满足的平衡态下 Q 的拉格朗日方程得到。

3.3 极限调和映射

Majumdar 等人^[17]研究了泛函 $\mathcal{F}_{LG}(Q)$ 的全局极小值 $Q^{(L)}$ 在弹性常数 $L \rightarrow 0$ 的极限,并对 $Q^{(L)}$ 的性质、收敛结果进行了说明,定义了极限调和映射 $Q^{(0)}$:

$$Q^{(0)} = s_+ \left(n^{(0)} \otimes n^{(0)} - \frac{1}{3} I \right), \quad (23)$$

其中 s_+ 为常数序参量, $n^{(0)}$ 满足固定边界条件下的 OF 能量极小值,主要结果如下:

(1) 在 Sobolev 空间 $W^{1,2}$ 存在一个全局极小化集合 $\{Q^{(L_k)}\}$, 使 $Q^{(L_k)} \xrightarrow{L_k \rightarrow 0^+} Q^{(0)}$ 。

(2) 上述集合 $\{Q^{(L_k)}\}$ 在远离 $Q^{(0)}$ 奇点的内部位置,随着 $L_k \rightarrow 0$,一致收敛于 $Q^{(0)}$ 。

(3) 体积能密度 $f_B(Q^{(L_k)})$ 在远离 $Q^{(0)}$ 奇点位置,均匀收敛到其极小值,且在内部和边界处保持一致收敛。

结果表明,在远离 $Q^{(0)}$ 奇点位置处,由极限映射 $Q^{(0)}$ 描述的 OF 理论和 LdG 理论的预测一致。全局极小化 $Q^{(L)}$ 是真实解析的并且没有奇点。纹影中出现的“光学缺陷”,从物理角度看是向列相液晶构型性质快速变化的区域。Majumdar 等人推测了在 $Q^{(L_k)}$ 中某些类型的光学缺陷(对于小 L_k),可能局限于极限映射 $Q^{(0)}$ 的解析奇点附近。因为 $Q^{(L_k)}$ 只能在 $Q^{(0)}$ 的奇点附近有强的梯度变化,在含有奇点 $Q^{(0)}$ 的集合上不能独立于 L_k 有界。Almgren 等人^[31]介绍了关于调和映射中奇点位置的研究,这使人们可以在全局 LdG 最小化中预测光学缺陷的位置。

此外,对收敛结果的分析表明,对于 $L \rightarrow 0$ 的极限,极限调和映射 $Q^{(0)}$ 只提供了 $Q^{(L)}$ 的一个“粗略”描述。 $Q^{(L)}$ 可以被认为是具有主要的单轴部分加上一个小的双轴微扰动,而双轴性在全局极小化的 $Q^{(L)}$ 中的作用也是 $Q^{(L)}$ 与极限近似 $Q^{(0)}$ 的主要区别之一。这种极限类似于 Ginzburg-Landau 模型的“London”极限以及 Landau-Lifshitz 铁磁理论中的“Large body”极限^[32],并且在适当解释下可被认为是 Oseen-Frank 极限^[17]。向列相液晶中缺陷核的一个显著特征是会发生双轴性和序参量的大小变化,不能用指向场表示。因此,双轴性在缺陷精细结构的研究中极为重要,已有很多文献对其进行了探讨^[33-39]。在液滴半径较大和

温度较低的情况下,径向 Hedgehog 缺陷核不稳定,形成一个 $+1/2$ 强度的向错环,环线内向列相是具有负的序参量的单轴态,周围是一个双轴环面域^[40]。在线缺陷中同样具有单轴性的核心,其周围是双轴性环, Q 张量发生变化以匹配液晶整体取向,如图 2 所示^[39]。

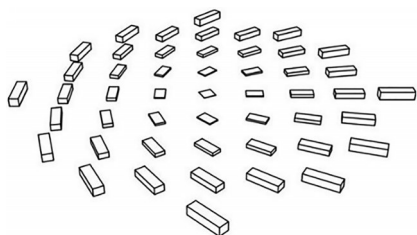


图 2 $s = 1/2$ 的核^[39]。中心为单轴,序参量为负,通过一个双轴环转换成具有正 s 的单轴形式。

Fig. 2 Core of an $s = 1/2$ disclination^[39]. The center is uniaxial with negative order parameter. It transforms via a biaxial ring into a uniaxial form with a positive s .

综上所述,对模型相关参数在某些极限下的行为的研究使我们加深了对模型的物理解,在一些极限中不同模型之间可能存在相互联系。对于 LdG 模型,未来的研究方向包括随着对全局极小化中双轴性的出现和作用的深入理解,更好地理解 L 很小但不消失的全局极小值的定性性质,以及更好地描述极限调和映射的奇点附近的 $Q^{(L)}$ 。

4 液晶静态模型的应用进展

液晶理论模型的研究始于 20 世纪 80 年代,到目前为止主要是对自由能泛函极小值的研究。在向列相液晶的研究中,利用理论模型可以对液晶相和缺陷、液晶分子内部的应力分布、缺陷形成的机制和行为等进行深入研究。近年来,大量科研工作者致力于应用液晶理论模型解决实际问题,并在相关领域取得大量成果。

4.1 液晶静态模型在拓扑缺陷中的应用

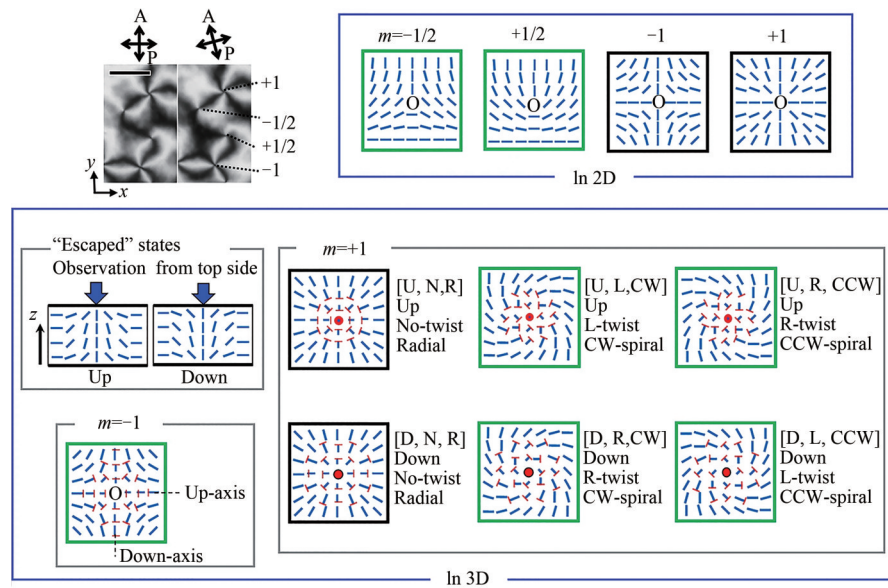
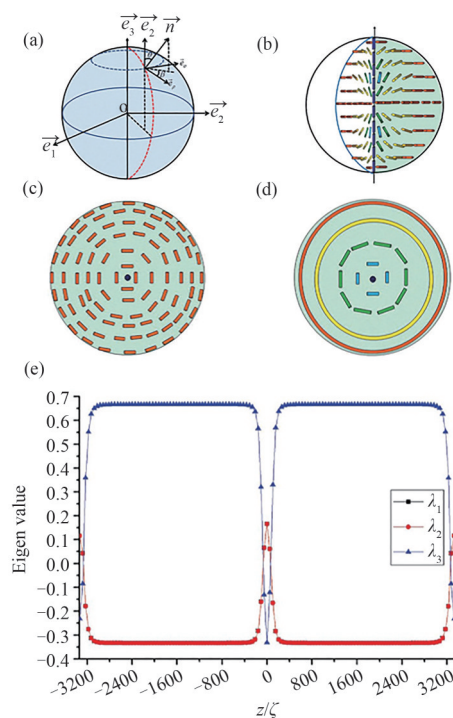
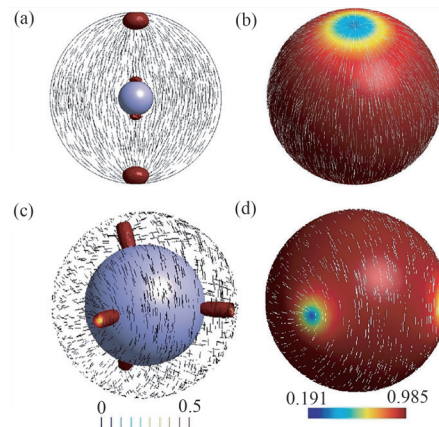
拓扑缺陷在自然界中以各种尺度出现^[41],其存在的必要条件是相关物理场中自发的对称破缺。液晶因为具有独特的液体特性、光学各向异性、柔软性、实验可处理的时间和空间响应特征尺度以及它们的构型(即相和结构)的多样性,可

作为拓扑缺陷可控分析的理想测试平台。液晶中的缺陷由指向矢的局域不连续产生,并且影响周围液晶分子取向。在单轴向列相的平衡态中,其指向矢 n 在空间上均匀地沿着对称破缺方向排列,液晶中的缺陷在取向序中受拓扑保护,其总拓扑荷为固定边界条件下拓扑不变的守恒量。

液晶中的拓扑缺陷研究是液晶研究中的核心问题之一。理论模型可以对液晶中的缺陷、相变、分子分布规律进行描述,其在拓扑缺陷相关领域中的应用已经得到了学术界的广泛关注^[42-44]。从空间维度上对拓扑缺陷的研究主要集中于二维平面和三维球体。Ohzono 等人^[45]通过偏光显微镜和荧光显微镜观察,利用 LdG 模型对取向序和产生的畸变图像进行数值计算,表面能采用平面简并锚定的常用形式。然后通过引入手性扰动,得到了三维向列相液晶薄胞(二维平面)中强度为 $m = \pm 1$ 的拓扑缺陷。其中 $m = +1$ 的缺陷表现出手性对称破缺和上下对称破缺引起的 4 种不同结构态,如图 3 所示。

在三维球形有限几何限定条件下,液晶分子排布存在多种构型。马鹤等人^[46]基于 LdG 理论,研究向列相同轴结构球形液滴的尺寸效应,观察不同半径诱导的结构变化,得到的同轴结构的指向矢排列情况如图 4 所示。

Seyednejad 等人^[47]使用数值方法计算了向列相液晶的对称和非对称球壳的极小化 LdG 自由能,考虑了由 Fournier 和 Galatola^[48]引入的双参数表面简并平行锚定条件和各向同性的向列相弹性,数值分析了壳体内液滴在不同空间排列方式下产生的缺陷的行为,得到了三维向列相液晶球壳的各种拓扑缺陷结构,如图 5 所示。Pandey 等人^[49]研究了手性向列相液晶盒中具有垂直表面锚定条件的微球诱导的缺陷——胶体超结构,通过极小化 LdG 自由能模拟计算得到的场和缺陷构型与实验结果一致。Alama 等人^[50]利用 LdG 理论推导出了悬浮在向列相液晶中的小胶体粒子周围的土星环缺陷结构的解析式,在颗粒表面施加由径向单轴张量描述的垂直取向锚定,得到了环半径及其与锚定能关系的显式表达式,提供了与以往工作只依赖于数值计算不同的对缺陷的另一种描述。这种对球形壳层中的缺陷结构的研究在胶体的光电应用领域具有重要

图 3 向列相液晶平面薄胞中纹影织构中的拓扑缺陷类型^[45]Fig. 3 Types of topological defects in schlieren textures on a thin planar cell of NLCs^[45]图 4 (a)球状结构示意图;(b)三维同轴结构示意图;(c)赤道面截面图;(d)距离两极 1/4 位置截面图;(e)中心轴处本征值^[46]。Fig. 4 (a) Schematic diagram of a spherical structure; (b) Concentric configuration in 3D representation; (c) Cross section diagram of the equatorial plane; (d) Cross section diagram of the position 1/4 away from the two poles; (e) Eigenvalues at the center axis^[46]。图 5 向列相液晶壳体和外表面标量序参量的分布。(a, b)具有 Boojum 缺陷的构型;(c, d)具有四面体缺陷的构型^[47]。Fig. 5 Profiles of the scalar order parameter in the bulk and on the outer surface of nematic liquid crystal shells. (a, b) Configurations with Boojum defects; (c, d) Configurations containing tetrahedral defects^[47]。

意义。

利用理论模型对拓扑缺陷的研究不仅限于向列相液晶。Shamid 等人^[51]基于 LdG 模型将液晶的手性与极性进行类比,证明了手性液晶的自发扭曲通常会导致胆甾相或蓝相的出现,极性液晶的自发弯曲会导致扭曲-弯曲相和极性蓝相出现。Carenza 等人^[52]利用 LdG 模型对球壳表面的

胆甾相液晶壳的缺陷图案进行了分析,通过对自由能极小化,发现不同球壳半径及手性强度情况下球壳表面会出现不同的多边形组合的缺陷模式,如图 6 所示。

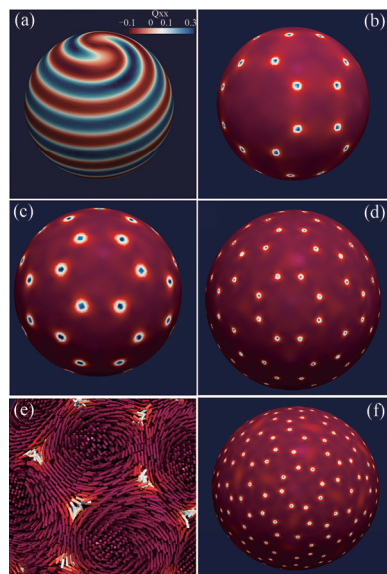


图 6 胆甾相液晶壳配置情况。(a)低手性强度时液晶排列为缠绕于外壳周围的螺旋模式;(b, c, d)不同半径下 3 种有限准晶体的结构:(b)OHS(八边形/六边形/正方形),(c)PH(五边形/六边形),(d)OHP(八边形/六边形/五边形);(e)对应于(c)中相邻的五边形和六边形产生的两个半斯格明子和 9 个 $-1/2$ 缺陷;(f)非晶构型^[52]。

Fig. 6 Cholesteric shell configurations. (a) LC spiral mode around the shell at low chiral strength; (b, c, d) Three finite quasicrystals configurations: (b) OHS(octagonal/hexagon/square), (c) PH (pentagonal/hexagon) and (d) OHP (octagonal/hexagon/pentagonal); (e) Director field pattern of two half-skyrmions and nine $-1/2$ defects defining a pentagon and a hexagon in (c); (f) Amorphous configuration^[52].

液晶的相平衡极易被激发,具有由拓扑缺陷构成的多种不同的结构。正如 Kralj 等人^[53]所描述的,这些拓扑缺陷类似于简单的音符,使用一种单一的音符,就可以通过不同的排列方式制造出数种性质上不同的旋律。液晶中这种丰富的拓扑缺陷结构具有广泛的应用价值,理论模型为拓扑缺陷的研究提供了有力手段。

4.2 液晶静态模型在液晶胶体中的应用

当胶体粒子浸没在液晶材料中时,会引起液晶分子取向的弹性变形,从而产生拓扑缺陷和各

向异性相互作用。这些效应具有潜在的应用价值,引起了人们的广泛关注^[54-59]。向列相液晶和胶体混合物中的胶体粒子影响液晶分子的均一取向,使其发生畸变。这些指向矢畸变的影响范围远超出了粒子本身的物理范围。在不同尺度中,液晶中胶体问题的研究应选用不同的理论模型。在宏观尺度上,利用 OF 弹性能可以计算胶粒间的长程力,而在非线性效应非常重要的介观尺度上,则要选用更适合的 LdG 模型进行描述。

胶体问题中对拓扑缺陷的研究是准确理解液晶胶体相互作用的基础^[49-50, 60-61]。Vilfan 等人^[60]研究了具有球形颗粒的向列相液晶胶体中,诱导平行锚定条件的粒子间相互作用力的约束效应,实验结果与 LdG 自由能极小化结论一致。Wang 等人^[61]基于 LdG 理论对向列相液晶中单个和一对球形胶体粒子诱导的拓扑缺陷结构进行了数值计算,球形表面采用垂直取向锚定条件,对胶体二聚体对(两粒子问题)周围液晶缺陷的稳定性进行了分析。首先给出相对简单的单粒子问题的相图,为分析两粒子问题提供了基础。单粒子周围会出现两种类型的缺陷构型,包括四极态缺陷结构(土星环结构)和偶极态缺陷结构,如图 7 所示。偶极-偶极构型二聚体周围的稳定区域与单粒子构型的稳定区域大小非常相似。此外,研究人员^[58-59]还研究了向列相液晶中胶体粒子间的相互作用,并由基于 OF 理论的模拟计算证实。

液晶胶体中的颗粒受到各向异性弹性力的作用,而这些相互作用又容易通过外加电场、磁场、光、温度或边界约束来调节,为更好地控制胶体组装提供了新的方式。同时,缺陷位点是分子和纳米材料组装的关键,理论模型也为理解其物理化学行为提供了一个有力的工具。Poulin 等人^[62]首次描述了自组装产生的各种结构,Silvestre、Wang 等人^[63-64]分别报道了基于 LdG 模型的液晶中胶体粒子自组装的相关工作,显示出其具有良好的光学应用前景,如图 8 所示。

Sahu 等人^[65]介绍了一种向列相液晶中的花生状赤铁矿胶体体系,通过 LdG 模型模拟证实,垂直液晶指向矢取向的胶体由于向外倾斜呈现的纹理表现出弹性畸变的偶极和四极对称,并受外磁场影响。这种具有各向异性形状的磁性胶

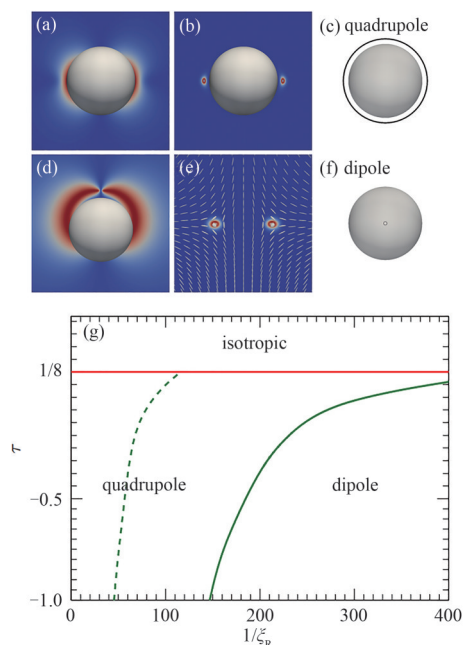


图7 围绕球形粒子的向列相液晶的缺陷构。(a~c)四极(土星环)态;(d~f)偶极态;(g)相图中这些态具有最低自由能的相应区域^[61]。

Fig.7 Defect configurations in a nematic liquid crystal surrounding a spherical particle. (a~c) Quadrupolar (Saturn-ring) state; (d~f) Dipolar state; (g) Corresponding regimes in the phase diagram where these states have the lowest free energies^[61].

体在制备具有磁场响应的复杂自组装胶体方面具有广阔的应用前景,如图9所示。Yuan等人^[66]描述了一种介观结构“介花”(Mesoflowers)组成的能诱导不同阶弹性多极的向列相胶体系统,如图10所示。通过对LdG自由能的数值极小化,且假定粒子表面为有限垂直锚定,对指向矢排布和弹性相互作用进行模拟,计算出“介花”在指向场中产生的弹性单极子和高阶多极子。通过改变这些粒子的基本组成部分,可以有效地控制它们的胶体行为。而这些介观结构可以作为设计工具,用于工程胶体相互作用和自组装。通过化学合成获得大量的介观结构,可促进胶体自组装新复合材料的发展。液晶胶体具有巨大的潜力,不仅可以自组装的长度范围从原子扩展到胶体尺度,而且还可以通过超越原子系统所能达到的形式,使胶体组织形式多样化,而液晶的理论模型是这一工作中极为重要的工具。Roel P. A. Dullens团队^[67]开发了一种利用聚合物和紫外线改变弯曲分子曲率的方法,利用该方法可以诱

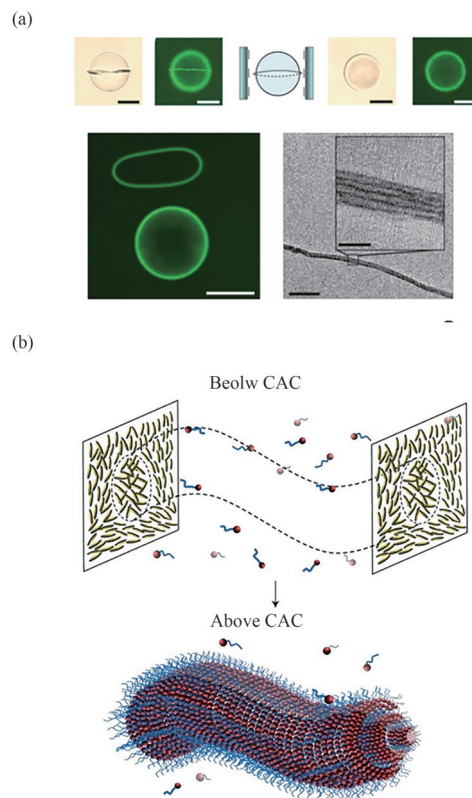


图8 (a)分子组装的可逆形成和原位交联;(b) LC缺陷中两亲分子的自组装^[64]。

Fig.8 (a) Reversible formation and in situ crosslinking of molecular assemblies; (b) Self-assembly of amphiphiles in LC defects^[64].

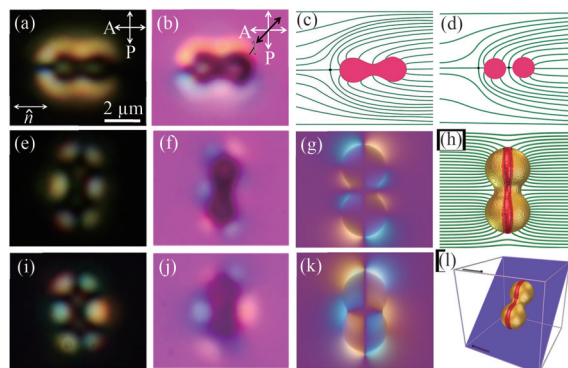
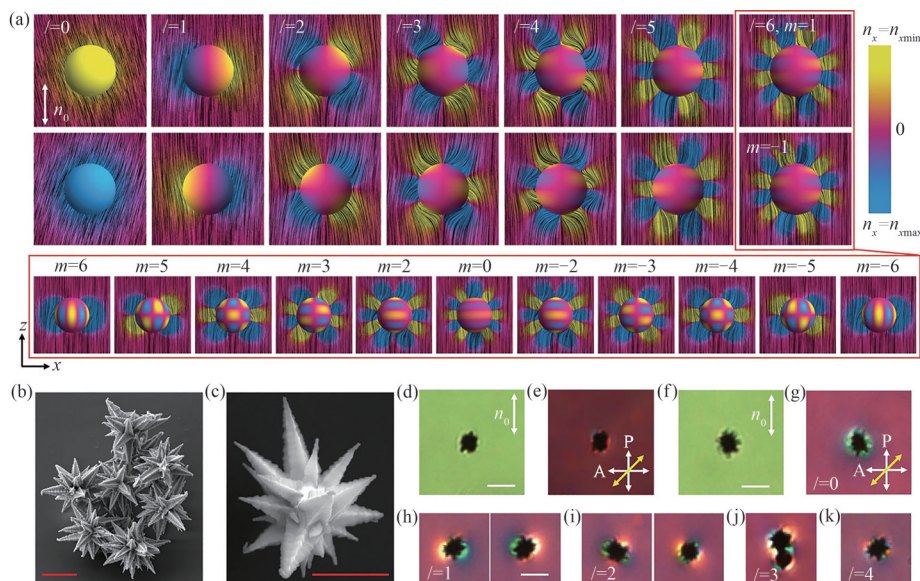


图9 (a~l)向列相液晶中的花生状赤铁矿胶体体系^[65]

Fig.9 (a~l) Nematic colloidal system made of peanut-shaped hematite particles^[65]

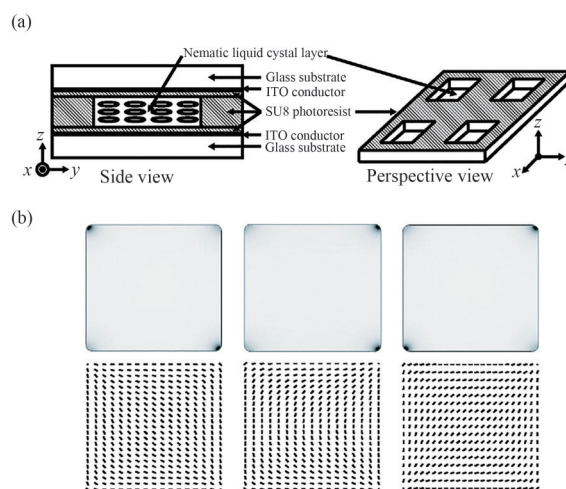
导棒状物展现出种类丰富的相行为,例如近晶相(极性和反极性)以及双轴向列相。该工作为生产一系列新型向列相胶体液晶打开了大门,同时这些液晶在电子设备的各种显示器应用中具有巨大潜力。

图 10 (a~k)金的介观结构组成的能诱导弹性多极子的向列相胶体系统^[66]Fig. 10 (a~k)Nematic colloidal system consisting of mesostructures of gold capable of inducing elastic multipoles of different order^[66]

4.3 液晶静态模型在液晶双稳态显示上的应用

近年来,平面双稳态器件在液晶界受到广泛关注。双稳态和多稳态器件是液晶取向理论研究中的一个重要且具有实际应用前景的方向, Majumdar^[68]和 Spencer^[69]最早分别基于 OF 理论和 LdG 理论提出了三维后对准双稳向列相(PABN)器件和二维顶点双稳器件(ZBD)。模型通常包括充满向列相液晶材料的浅方形或矩形阱的周期性阵列,其具有几何结构简单和结构图像丰富的优点。

LdG 模型从统计物理角度出发,针对向列型液晶提出了能全面描述液晶物理现象的 Q 张量模型。Tsakonas 等人^[21]将研究聚焦于底部为方形或矩形的阱截面上的平面向列相平衡态。阱面被诱导处理为切向边界条件,在向列相液晶的 LdG 理论中建模(没有任何外场),计算了二维 LdG 能量在正方形或矩形阱上具有切向边界条件的局部极小值,并得到两类明显的稳定平衡态:对角解和旋转解(图 11)。Luo 等人^[22]在此基础上,将分析进一步扩展到表面能和一定程度的弱锚定,仔细研究了对角解和旋转解对表面锚定强度的依赖关系,并提出了基于介电效应的切换机制的动态模型,认为对角解与旋转解间的切换由外加电场和顶部边缘锚定之间的竞争引起。通过施加足以打破边缘锚定的外部电场或不施

图 11 (a)向列相液晶器件原理图;(b)两种稳定平衡解^[21]。Fig. 11 (a) Schematic diagram of the nematic liquid crystal device; (b) Two stable equilibrium solutions^[21].

加电场,数值演示了对角解和旋转解之间的切换过程。在 LdG 理论的框架内, Kusumaatmaja 和 Majumdar^[70]对表面能势建模,计算可变表面锚定强度的稳定平衡态之间的最小能量路径,提供了在 LdG 理论模型中如何连接各平衡态的新信息。

在 OF 框架下, Walton 等人^[71]提出了液晶被限制在矩形阱中的静态模型,其指向矢在 xy 平面内。平面内的分子指向矢由系统总自由能的极小值决定,推导出指向矢的解析表达式,写成一个包

含超越方程根的无穷级数,并确定了临界锚定强度。在该强度下,均匀的指向矢取向发生扭曲,得到与上述一致的两类平衡解。使用指向矢取向的解析形式可以计算系统在接近临界锚定强度和无限强锚定极限时的渐近行为。后一种分析可以与该领域前期工作的结果进行比较,最终结果表明渐近展开式与数值计算结果完全一致。Lewis^[10]的工作同样基于OF理论模型,讨论了内部缺陷的平衡态以及内部缺陷在不同态之间的能量最小化路径,并计算了稳定平衡之间的能垒。此外,Tiribocchi^[72]基于LdG理论研究了蓝相液晶的双稳态缺陷结构,从理论上确定了两种受限的蓝相I系统,并可以通过外加电场对其选择。其中文献[22,69,72]涉及到液晶在外电场的作用下在稳态之间的切换,因此自由能中包括电场能项。文献[22,72]还包含 Q 张量的动力学方程。

多稳态显示器在无外场时可以支持两种或更多种稳定的光学对比明显的液晶态,能够在断电时持续显示,只需要在改变显示图像和文字时加电脉冲驱动,具有超低功耗的优点,在未来新一代更经济、更高分辨率的显示器领域有着广泛的应用前景。

4.4 液晶静态模型在手性液晶外场响应研究中的应用

胆甾相(手性向列相)液晶通常由在向列相液晶中加入手性剂制成,其分子长轴在空间中螺旋旋转。在垂直于螺旋轴的平面内,分子长轴取向沿该平面内的指向矢方向。胆甾相液晶具有很多特殊的性质^[16],如旋光性、圆二色性、选择性反射等,此外它还是一种非常优良的非线性光学材料,具有明显的热光效应^[73]、电光效应^[74]、磁光效应^[75]、压光效应^[76]等,使得光在其中传播时表现出一些特殊的性质。Oseen最早提出了一种广泛使用的胆甾液晶模型^[5],将液晶视为一种各向异性介质,其介电张量与位置有关,可以采用两种坐标系描述,即固定坐标系($Oxyz$)和旋转坐标系($Oabc$)。其中 z 轴和 c 轴相同且平行于螺旋轴方向,在第二个坐标系中介电张量用一个“螺旋椭圆球”表示,两个主轴 Oa 和 Ob 绕 z 轴旋转,沿 z 方向单位长度的变化对应的两主轴扭转角为 $2\pi/p$, p 表示胆甾相液晶的螺距,如图12所示,其中 q 为螺旋结构的周期波矢,大小等于 $2\pi/p$ 。这一模型

已经被广泛应用在胆甾相液晶光学性质及手性材料的计算中^[77-80]。

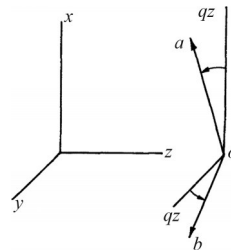


图12 Oseen模型中的双坐标系^[79]

Fig. 12 Coordinate systems in the Oseen model^[79]

对于胆甾相液晶而言,外部电场和磁场会使系统的能量面和能量面上极小值的位置发生变化,进而导致液晶相的状态转换,被称为Fréedericksz效应。这种相变既可以连续,也可以不连续,取决于能量面的液晶参数。在一定条件下,胆甾相液晶可以具有多个不同光学性质的稳定态。液晶稳定态间转换的理论描述是液晶基础研究中的一个重要问题,在光学液晶显示器的设计中具有重要意义。在胆甾相液晶的外场响应问题中,一个长螺距的胆甾相液晶被夹在两个水平平行玻璃板之间,假设采用垂直定向,即靠近表面的分子垂直于平板,当两个平行玻璃板间的距离 d 足够小时,表面锚定迫使胆甾相液晶中所有分子都垂直于平板。当施加平行方向磁场或垂直方向的高频电场,且达到临界阈值以上时,胆甾相液晶的螺旋结构将逐渐解旋,显示了一系列丰富的热力学相图,诸如垂直取向向列相、指纹模式等。当胆甾相的液晶分子周期性螺旋排列时,液晶材料呈现Bragg反射特性;而当胆甾相液晶分子取向受到外场影响而出现变化时,液晶材料的光传输性质也将发生显著变化^[81-83]。

胆甾相液晶的解螺旋问题可以通过自由能密度函数 F 来分析,该函数依赖于单位矢量 $\mathbf{n}(r)$ 的局部变化,它给出了在每个位点 r 上的分子优先取向方向。胆甾相液晶自由能密度最简单的形式是Frank提出的^[6],Frank理论同样假设胆甾相液晶在小尺度上可以视作向列相材料。Meyer^[84]通过OF理论,提出了一种计算由电场或磁场导致胆甾相液晶分子结构变化的通用方法,其一般步骤是找到以单位矢量 $\mathbf{n}(r)$ 为特征的结构,使总自由能最小化。同时,举例讨论了胆

甾相液晶螺旋结构随外加电场的变化。当电场作用于填充了胆甾相液晶的液晶盒时,胆甾相液晶分子结构的变化还取决于许多因素,诸如液晶盒厚度、外加电压强度、锚定条件、胆甾相液晶介电特性等。李青等人^[85]通过胆甾相液晶的 OF 弹性连续体理论,分析了多畴胆甾相液晶在静电场下各状态的物理变化过程,以单畴为研究对象建立了静电场中单畴从平面织构态(P 态)到焦锥织构态(FC 态)以及从 FC 态到场致向列相态(H 态)的状态转化的物理方程,为进一步研究多畴胆甾相液晶相变的动力学变化规律打下了基础。Ivanov 等人^[86]通过分析 OF 模型定义的系统多维能量面,研究了胆甾相液晶中多种稳定态之间的转变,通过能量面的极小值对应稳定状态,以极小值间的最短能量路径定义了转变的机制。Tenshchev 等人利用 OF 模型自由能,推导了胆甾相液晶盒中不同亚稳态之间螺旋结构转换的最短能量路径与电场强度的关系,研究了在电场作用下胆甾相液晶的场致畸变^[87-88],如图 13 所示。

此外,使用 LdG 自由能表达式可以更好地处理各种平衡和非平衡状态的液晶分子取向。Frisch 等人^[89]利用 LdG 模型描述了胆甾相液晶解螺旋的过程,与实验现象和热力学相图理论都有较好的一致性。Gil^[90]利用 LdG 模型数值解析得到胆甾相液晶解螺旋过程中的一些平衡构型,并对研究结果进行了展示和讨论,如图 14 所示。Belyakov^[91]通过最小化 LdG 自由能,从理论上研究与讨论了胆甾相液晶薄层螺旋结构在温度或外场作用下的解螺旋过程与层边界处分子黏附力的关系。Oswald^[92]利用 LdG 模型分别分析了具有正、负介电各向异性的胆甾相液晶在施加垂直和平行螺旋轴方向电场时,不同电压强度下的液晶相变化。此外,他还利用该模型分析了手性剂作用下近晶 A 相-胆甾相的相变过程的物理机制,并且描述了将样品置于温度梯度中时,胆甾相液晶的解螺旋过程。Hare 等人^[93]通过最小化 LdG 自由能计算了近晶相液晶和胆甾相液晶的分子排列和液晶中的缺陷,展示了利用掺杂少量手性剂的近晶相液晶创建可调、可重构的微透镜,以及它如何在相变时从一种缺陷转变成另一种类型的缺陷,如图 15 所示。研究发现,近晶相液晶的焦锥畴与温度无关,而胆甾相的圆环形焦

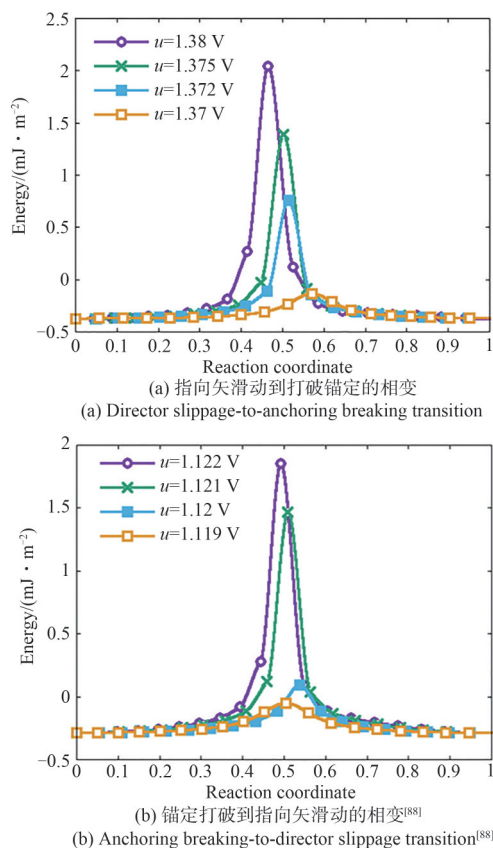


图 13 不同电压下沿最小能量路径计算的不同指向矢构型的单位面积能量

Fig. 13 Energy per unit area of different director configurations along the minimum energy paths at different voltages

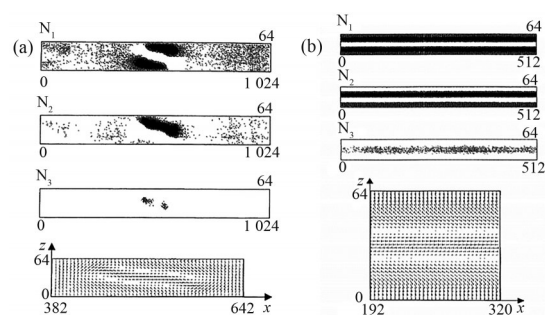


图 14 胆甾相液晶的指纹构型(a)和平移不变构型(b)的数值计算^[90]

Fig. 14 Numerical simulations of the cholesteric finger pattern (a) and translationally invariant cholesteric configuration (b)^[90]

锥畴则对螺距和温度十分敏感,因而可以构建对温度敏感和不敏感的两微透镜,且前者的焦距可以由温度或手性剂掺杂量灵活调节。

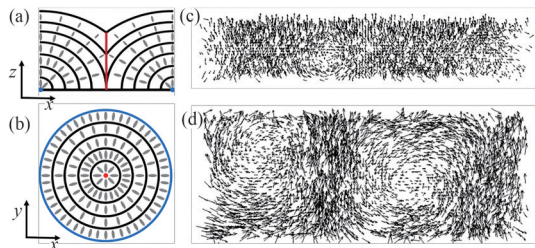


图 15 近晶相液晶(a, b)和胆甾相液晶(c, d)中的圆环畴^[93]

Fig. 15 Circular domains in smectic (a, b) and cholesteric (c, d) liquid crystals^[93]

由此可见,液晶的理论模型对于描述和分析胆甾相液晶在温度和外场作用下的解螺旋与相变过程具有重要意义,进而可以为胆甾相液晶在光场调控、光学传感与检测、光通信等领域的广泛应用奠定基础。

除了本文提到的几个领域外,液晶的静态理论模型还在很多领域被广泛应用。Tai 等人^[94]通过数值模拟和实验证明了垂直表面边界条件的强度可以用于控制孤子和其他局域场构型的结构和拓扑,数值模拟使用了 OF 和 LdG 两种模型的自由能泛函极小化。该工作的结果揭示了在改变边界条件时扭曲壁 (Twisted walls)、Fingers、Torons、斯格明子 (Skyrmions) 和其晶体组织之间的相互转换,并为可控地实现斯格明子、Torons 和同时拥有二者特征的杂化孤子结构提供了方法。Bisht 等人^[95]聚焦于向列相液晶填充的微米级浅阱中均匀分布的磁性纳米粒子的稀释悬浮液,考虑平行锚定边界条件,系统内的两个序参量相互耦合在没有外加磁场的情况下可以表现出自发磁化,系统的总自由能由 LdG 自由能、Ginzburg-Landau 自由能和磁化与向列相液晶之间的耦合能 3 部分组成。通过数值计算得到了由几何形状、边界条件和磁性纳米粒子与宿主向列相介质之间的耦合所诱导的稳定向列相状态及相关的磁化形态,并发现可以通过耦合和材料性质来控制磁化分布中畴壁的位置,通过耦合也可调整内部和边界处液晶缺陷的位置和多样性。Mur 等人^[96]最近设计的 3 个不同功能的可调谐双折射向列相层展示了一种有效的液晶光束控制装置(图 16),并通过 LdG 模型计算了指向矢分布。在外电场下操控光束移动、偏转和扩展(或聚焦),可以精确控制出射光的轮廓和传播方向,

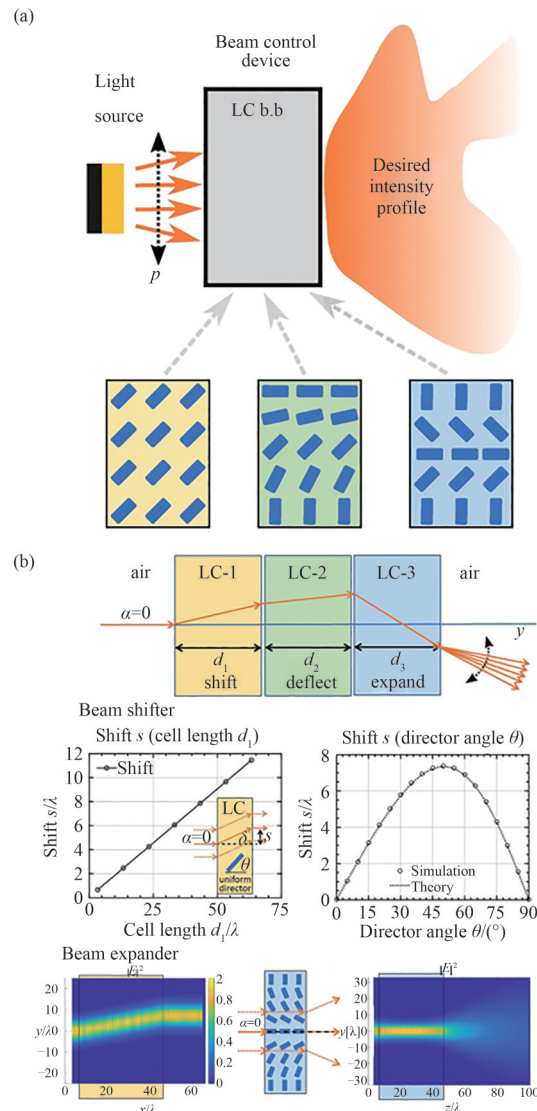


图 16 (a)液晶光束控制装置示意图;(b)控制输出光束分 3 步骤进行:偏移、偏转、扩展^[96]。

Fig. 16 (a) Schematic view of a liquid crystal beam control device; (b) Control of the output beam is carried out in three steps: the incident beam is shifted, deflected and expanded^[96].

出射光调节角度可达 25° 。据此可制造出高精度、易操作的光束控制装置,广泛应用于投影仪、汽车前照灯等领域。

5 总结与展望

自 20 世纪末液晶被发现以来,引起了众多科研工作者的兴趣。为了描述这种特殊液体的性质,人们尝试建立了多种理论模型。除本文讨论

的静态理论模型外,描述液晶行为的动力学理论也被广泛研究。包括著名的 Erickson-Leslie (LE)理论(向量模型)^[97]、Doi动力学理论(分子模型)^[98]和各种基于张量模型的理论,如均相液晶的 Hand 理论^[99]、Tsuji 和 Rey 对非均质流体的现象学理论^[100]。液晶动力学的研究是复杂流体中的重要问题,如 Yu 等人^[101]采用流体动力学耦合模型研究了液晶聚合物在平面剪切流中的微观结构形成和缺陷动力学。Zhang 等人^[102]将向列相液晶的 LdG 模型与流体力学框架耦合,探讨球壳约束对流动向列相(Active nematic)液晶的影响。由于篇幅关系,这里不过多论述。

本文主要综述了描述液晶的静态理论模型、不同模型的适用条件以及模型之间的联系。处理实际问题时需根据不同模型的适用范围、边界

条件选择合适的序参量进行表述。对模型相关参数在极限下的行为的研究有利于更深入地了解模型描述的物理实质。而更高维空间的数学复杂性及基于全局极小值的奇点附近的性质研究是未来的一大挑战。液晶在拓扑缺陷方面的研究主要集中在平衡和非平衡现象中材料性质、几何形状、温度、边界效应和外场之间的复杂相互关系,理论模型的提出为很多现代应用的发展提供了方向。

近年来,机器学习,尤其是深度学习被广泛应用于光学领域,如在计算全息图产生与成像、光谱共振曲线预测和超表面的结构设计、光学传感等方面^[103-106]显示出巨大的潜力。因此,突破常规经验设计,利用深度学习算法对液晶中拓扑缺陷的预测也是值得期待的。

参 考 文 献:

- [1] 沈平. 向列型液晶理论评述[J]. 物理学进展, 1981, 1(1): 154.
SHEN P. Theories of nematic liquid crystals-a review [J]. *Progress in Physics*, 1981, 1(1): 154. (in Chinese)
- [2] 王伟, 张平文, 章志飞. 液晶理论研究中的若干数学问题[J]. 中国科学: 数学, 2016, 46(7): 895-914.
WANG W, ZHANG P W, ZHANG Z F. Some mathematical problems in liquid crystal theories [J]. *Scientia Sinica: Mathematica*, 2016, 46(7): 895-914. (in Chinese)
- [3] ONSAGER L. The effects of shape on the interaction of colloidal particles [J]. *Annals of the New York Academy of Sciences*, 1949, 51(4): 627-659.
- [4] MAIER W, SAUPE A. Eine einfache molekulare theorie des nematischen kristallinflüssigen zustandes [J]. *Zeitschrift für Naturforschung A*, 1958, 13(7): 564-566.
- [5] OSEEN C W. The theory of liquid crystals [J]. *Transactions of the Faraday Society*, 1933, 29(29): 883-899.
- [6] FRANK F C. On the theory of liquid crystals [J]. *Discussions of the Faraday Society*, 1958, 25(25): 19-28.
- [7] ERICKSEN J L. Hydrostatic theory of liquid crystals [J]. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 1962, 9(1): 371-378.
- [8] ERICKSEN J L. Liquid crystals with variable degree of orientation [J]. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 1991, 113(2): 97-120.
- [9] MOTTRAM N J, NEWTON C J P. Introduction to Q-tensor theory [J]. *arXiv*, 2014: 1409.3542.
- [10] LEWIS A. Defects in liquid crystals: mathematical and experimental studies [D]. Oxford: University of Oxford, 2015.
- [11] HARDT R, KINDERLEHRER D, LIN F H. Existence and partial regularity of static liquid crystal configurations [J]. *Communications in Mathematical Physics*, 1986, 105(4): 547-570.
- [12] STEWART I W. *The Static and Dynamic Continuum Theory of Liquid Crystals: A Mathematical Introduction* [M]. London: Taylor & Francis, 2004.
- [13] 张方辉, 袁桃利, 牟强, 等. 界面对液晶分子锚定作用的探讨[J]. 陕西科技大学学报, 2003, 21(3): 47-50.
ZHANG F H, YUAN T L, MU Q, *et al.* Study of the surface anchoring for liquid crystals [J]. *Journal of Shanxi University of Science & Technology*, 2003, 21(3): 47-50. (in Chinese)
- [14] 孙睿鹏, 黄锡珉. 向列液晶的表面锚定能[J]. 液晶通讯, 1993, 1(2): 1-13.
SUN R P, HUANG X M. Surface anchoring energy of nematic liquid crystals [J]. *Chinese Letter of Liquid Crystal*,

- 1993, 1(2): 1-13. (in Chinese)
- [15] RAPINI A, PAPOULAR M. Distorsion d'une lamelle nématique sous champ magnétique conditions d'ancrage aux parois [J]. *Journal de Physique Colloques*, 1969, 30(C4): 54-56.
- [16] DE GENNES P G, PROST J. *The Physics of Liquid Crystals* [M]. 2nd ed. New York: Oxford University Press, 1995.
- [17] MAJUMDAR A, ZARNESCU A. Landau-de Gennes theory of nematic liquid crystals: the Oseen-Frank limit and beyond [J]. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 2010, 196(1): 227-280.
- [18] MORI H, GARTLAND JR E C, KELLY J R, *et al.* Multidimensional director modeling using the Q tensor representation in a liquid crystal cell and its application to the π cell with patterned electrodes [J]. *Japanese Journal of Applied Physics*, 1999, 38(1R): 135-146.
- [19] ALLENDER D, LONGA L. Landau-de Gennes theory of biaxial nematics reexamined [J]. *Physical Review E*, 2008, 78(1): 011704.
- [20] NOBILI M, DURAND G. Disorientation-induced disordering at a nematic-liquid-crystal-solid interface [J]. *Physical Review A*, 1992, 46(10): R6174-R6177.
- [21] TSAKONAS C, DAVIDSON A J, BROWN C V, *et al.* Multistable alignment states in nematic liquid crystal filled wells [J]. *Applied Physics Letters*, 2007, 90(11): 111913.
- [22] LUO C, MAJUMDAR A, ERBAN R. Multistability in planar liquid crystal wells [J]. *Physical Review E*, 2012, 85(6): 061702.
- [23] 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]. *Chinese Journal of Liquid Crystals and Displays*, 2016, 31(8): 740-747. (in Chinese)
- [24] GARTLAND JR E C. Scalings and limits of Landau-de Gennes models for liquid crystals: a comment on some recent analytical papers [J]. *Mathematical Modelling and Analysis*, 2018, 23(3): 414-432.
- [25] BAUMAN P, PARK J, PHILLIPS D. Analysis of nematic liquid crystals with disclination lines [J]. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 2012, 205(3): 795-826.
- [26] GOLOVATY D, MONTERO J A. On minimizers of a Landau-de Gennes energy functional on planar domains [J]. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 2014, 213(2): 447-490.
- [27] CONTRERAS A, LAMY X. Biaxial escape in nematics at low temperature [J]. *Journal of Functional Analysis*, 2017, 272(10): 3987-3997.
- [28] HENAO D, MAJUMDAR A, PISANTE A. Uniaxial versus biaxial character of nematic equilibria in three dimensions [J]. *Calculus of Variations and Partial Differential Equations*, 2017, 56(2): 55.
- [29] KRALJ S, VIRGA E G, ŽUMER S. Biaxial torus around nematic point defects [J]. *Physical Review E*, 1999, 60(2): 1858-1866.
- [30] PENZENSTADLER E, TREBIN H R. Fine structure of point defects and soliton decay in nematic liquid crystals [J]. *Journal de Physique*, 1989, 50(9): 1027-1040.
- [31] ALMGREN JR F J, LIEB E H. Singularities of energy minimizing maps from the ball to the sphere: examples, counterexamples, and bounds [J]. *Annals of Mathematics*, 1988, 128(3): 483-530.
- [32] DE SIMONE A. Energy minimizers for large ferromagnetic bodies [J]. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 1993, 125(2): 99-143.
- [33] DE LUCA G, REY A D. Ringlike cores of cylindrically confined nematic point defects [J]. *Journal of Chemical Physics*, 2007, 126(9): 094907.
- [34] GARTLAND JR E C, MKADDEM S. Instability of radial hedgehog configurations in nematic liquid crystals under Landau-de Gennes free-energy models [J]. *Physical Review E*, 1999, 59(1): 563-567.
- [35] 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]. *Journal of Non-Equilibrium Thermodynamics*, 1992, 17(2):

- 153-170.
- [36] CANEVARI G. Biaxiality in the asymptotic analysis of a 2D Landau-de Gennes model for liquid crystals [J]. *ESAIM: Control, Optimisation and Calculus of Variations*, 2015, 21(1): 101-137.
 - [37] SCHOPHOL N, SLUCKIN T J. Defect core structure in nematic liquid crystals [J]. *Physical Review Letters*, 1987, 59(22): 2582-2584.
 - [38] LAMY X. Uniaxial symmetry in nematic liquid crystals [J]. *Annales de l'Institut Henri Poincaré C, Analyse Non Linéaire*, 2015, 32(5): 1125-1144.
 - [39] SONNET A, KILIAN A, HESS S. Alignment tensor versus director: description of defects in nematic liquid crystals [J]. *Physical Review E*, 1995, 52(1): 718-722.
 - [40] MKADDEM S, GARTLAND JR E C. Fine structure of defects in radial nematic droplets [J]. *Physical Review E*, 2000, 62(5): 6694-6705.
 - [41] MERMIN N D. The topological theory of defects in ordered media [J]. *Reviews of Modern Physics*, 1979, 51(3): 591-648.
 - [42] GUDIMALLA A, LAVRIČ M, TRČEK M, *et al.* Nanoparticle-stabilized lattices of topological defects in liquid crystals [J]. *International Journal of Thermophysics*, 2020, 41(4): 51.
 - [43] BARBOZA R, BORTOLOZZO U, ASSANTO G, *et al.* Harnessing optical vortex lattices in nematic liquid crystals [J]. *Physical Review Letters*, 2013, 111(9): 093902.
 - [44] 余洋, 周璇, 张志东. 扭曲向列相薄盒中线缺陷的研究 [J]. *液晶与显示*, 2015, 30(2): 213-223.
YU Y, ZHOU X, ZHANG Z D. Study of line defects in a thin twisted nematic cell [J]. *Chinese Journal of Liquid Crystals and Displays*, 2015, 30(2): 213-223. (in Chinese)
 - [45] OHZONO T, KATOH K, WANG C G, *et al.* Uncovering different states of topological defects in schlieren textures of a nematic liquid crystal [J]. *Scientific Reports*, 2017, 7(1): 16814.
 - [46] 马鹤, 陈思博, 吴金兵, 等. 同轴结构球形液滴的尺寸效应和电场动力学 [J]. *液晶与显示*, 2020, 35(4): 293-305.
MA H, CHEN S B, WU J B, *et al.* Size effect and electric field dynamics of spherical droplets in concentric configurations [J]. *Chinese Journal of Liquid Crystals and Displays*, 2020, 35(4): 293-305. (in Chinese)
 - [47] SEYEDNEJAD S R, MOZAFFARI M R, EJTEHADI M R. Confined nematic liquid crystal between two spherical boundaries with planar anchoring [J]. *Physical Review E*, 2013, 88(1): 012508.
 - [48] FOURNIER J B, GALATOLA P. Modeling planar degenerate wetting and anchoring in nematic liquid crystals [J]. *Europhysics Letters*, 2005, 72(3): 403-409.
 - [49] PANDEY M B, ACKERMAN P J, BURKART A, *et al.* Topology and self-assembly of defect-colloidal superstructure in confined chiral nematic liquid crystals [J]. *Physical Review E*, 2015, 91(1): 012501.
 - [50] ALAMA S, BRONSARD L, LAMY X. Analytical description of the Saturn-ring defect in nematic colloids [J]. *Physical Review E*, 2016, 93(1): 012705.
 - [51] SHAMID S M, ALLENDER D W, SELINGER J V. Predicting a polar analog of chiral blue phases in liquid crystals [J]. *Physical Review Letters*, 2014, 113(23): 237801.
 - [52] CARENZA L N, GONNELLA G, MARENDUZZO D, *et al.* Cholesteric shells: two-dimensional blue fog and finite quasicrystals [J]. *Physical Review Letters*, 2022, 128(2): 027801.
 - [53] KRALJ M, KRALJ M, KRALJ S. Topological defects in nematic liquid crystals: laboratory of fundamental physics [J]. *Physica Status Solidi (a): Applications and Materials Science*, 2021, 218(17): 2000752.
 - [54] HASHEMI S M, JAGODIČ U, MOZAFFARI M R, *et al.* Fractal nematic colloids [J]. *Nature Communications*, 2017, 8(1): 14026.
 - [55] YUAN Y, MARTINEZ A, SENYUK B, *et al.* Chiral liquid crystal colloids [J]. *Nature Materials*, 2018, 17(1): 71-79.
 - [56] ZHOU Y, SENYUK B, ZHANG R, *et al.* Degenerate conic anchoring and colloidal elastic dipole-hexadecapole transformations [J]. *Nature Communications*, 2019, 10(1): 1000.
 - [57] SOLODKOV N V, SHIM J U, JONES J C. Self-assembly of fractal liquid crystal colloids [J]. *Nature Communications*, 2019, 10(1): 198.

- [58] LEE B K, KIM S J, KIM J H, *et al.* Coulomb-like elastic interaction induced by symmetry breaking in nematic liquid crystal colloids [J]. *Scientific Reports*, 2017, 7(1): 15916.
- [59] MÜLLER D, KAMPMANN T A, KIERFELD J. Chaining of hard disks in nematic needles: particle-based simulation of colloidal interactions in liquid crystals [J]. *Scientific Reports*, 2020, 10(1): 12718.
- [60] VILFAN M, OSTERMAN N, ČOPIČ M, *et al.* Confinement effect on interparticle potential in nematic colloids [J]. *Physical Review Letters*, 2008, 101(23): 237801.
- [61] WANG Y W, ZHANG P W, CHEN J Z Y. Topological defects in an unconfined nematic fluid induced by single and double spherical colloidal particles [J]. *Physical Review E*, 2017, 96(4): 042702.
- [62] POULIN P, STARK H, LUBENSKY T C, *et al.* Novel colloidal interactions in anisotropic fluids [J]. *Science*, 1997, 275(5307): 1770-1773.
- [63] SILVESTRE N M, LIU Q K, SENYUK B, *et al.* Towards template-assisted assembly of nematic colloids [J]. *Physical Review Letters*, 2014, 112(22): 225501.
- [64] WANG X G, MILLER D S, BUKUSOGLU E, *et al.* Topological defects in liquid crystals as templates for molecular self-assembly [J]. *Nature Materials*, 2016, 15(1): 106-112.
- [65] SAHU D K, ANJALI T G, BASAVARAJ M G, *et al.* Orientation, elastic interaction and magnetic response of asymmetric colloids in a nematic liquid crystal [J]. *Scientific Reports*, 2019, 9(1): 81.
- [66] YUAN Y, TASINKEVYCH M, SMALYUKH I I. Colloidal interactions and unusual crystallization versus de-mixing of elastic multipoles formed by gold mesoflowers [J]. *Nature Communications*, 2020, 11(1): 188.
- [67] FERNÁNDEZ-RICO C, CHIAPPINI M, YANAGISHIMA T, *et al.* Shaping colloidal bananas to reveal biaxial, splay-bend nematic and smectic phases [J]. *Science*, 2020, 369(6506): 950-955.
- [68] MAJUMDAR A, NEWTON C J P, ROBBINS J M, *et al.* Topology and bistability in liquid crystal devices [J]. *Physical Review E*, 2007, 75(5): 051703.
- [69] SPENCER T J, CARE C M, AMOS R M, *et al.* Zenithal bistable device: comparison of modeling and experiment [J]. *Physical Review E*, 2010, 82(2): 021702.
- [70] KUSUMAATMAJA H, MAJUMDAR A. Free energy pathways of a multistable liquid crystal device [J]. *Soft Matter*, 2015, 11(24): 4809-4817.
- [71] WALTON J, MOTTRAM N J, MCKAY G. Nematic liquid crystal director structures in rectangular regions [J]. *Physical Review E*, 2018, 97(2): 022702.
- [72] TIRIBOCCHI A, GONNELLA G, MARENDUZZO D, *et al.* Bistable defect structures in blue phase devices [J]. *Physical Review Letters*, 2011, 107(23): 237803.
- [73] ZHANG Y, CAI C L, NIU X L, *et al.* Study of infrared imaging system based on liquid-crystal thermo-optic effect [J]. *Solid State Phenomena*, 2011, 181-182: 106-109.
- [74] RUDQUIST P, KOMITOV L, LAGERWALL S T. Linear electro-optic effect in a cholesteric liquid crystal [J]. *Physical Review E*, 1994, 50(6): 4735-4743.
- [75] PARSONS J D, HAYES C F. Fluctuations of a cholesteric liquid crystal in a static magnetic field [J]. *Physical Review A*, 1974, 9(6): 2652-2656.
- [76] BARTOLINO R, UMETON C, YE F, *et al.* Optical modulation induced by stressed cholesteric liquid crystals [J]. *Molecular Crystals and Liquid Crystals*, 1987, 143(1): 61-65.
- [77] CHANDRASEKHAR S, RAO K N S. Optical rotatory power of liquid crystals [J]. *Acta Crystallographica Section A*, 1968, A24(4): 445-451.
- [78] BERREMAN D W, SCHEFFER T J. Bragg reflection of light from single-domain cholesteric liquid-crystal films [J]. *Physical Review Letters*, 1970, 25(9): 902.
- [79] NITYANANDA R. On the theory of light propagation in cholesteric liquid crystals [J]. *Molecular Crystals and Liquid Crystals*, 1973, 21(3/4): 315-331.
- [80] WANG Y, GAO S H, ZHANG X Z, *et al.* Transfer matrix method for light propagation in variable complex chiral media [J]. *Physical Review E*, 2021, 104(6): 064702.
- [81] CONNERS G H. Electromagnetic wave propagation in cholesteric materials [J]. *Journal of the Optical Society of*

- America*, 1968, 58(7): 875-879.
- [82] GEVORGYAN A H. Photonic band gaps from a stack of right- and left-hand chiral photonic crystal layers [J]. *Physical Review E*, 2012, 85(2): 021704.
- [83] ORTEGA J, FOLCIA C L, ETXEBARRIA J. Laser emission at the second-order photonic band gap in an electric-field-distorted cholesteric liquid crystal [J]. *Liquid Crystals*, 2019, 46(15): 2159-2166.
- [84] MEYER R B. Effects of electric and magnetic fields on the structure of cholesteric liquid crystals [J]. *Applied Physics Letters*, 1968, 12(9): 281-282.
- [85] 李青, 张旭苹, 张健, 等. 静电场中多畴结构胆甾相液晶的物理变化过程[J]. 东南大学学报(自然科学版), 2000, 30(1): 58-61.
- LI Q, ZHANG X P, ZHANG J, *et al.* Phase transformation processes of cholesteric liquid crystal with domain structure in static electronic field [J]. *Journal of Southeast University (Natural Science Edition)*, 2000, 30(1): 58-61. (in Chinese)
- [86] IVANOV A V, BESSARAB P F, AKSENOVA E V, *et al.* Energy surface and minimum energy paths for Fréedericksz transitions in bistable cholesteric liquid crystals [J]. *Physical Review E*, 2016, 93(4): 042708.
- [87] TENISHCHEV S S, KISELEV A D, IVANOV A V, *et al.* Multiple minimum-energy paths and scenarios of unwinding transitions in chiral nematic liquid crystals [J]. *Physical Review E*, 2019, 100(6): 062704.
- [88] TENISHCHEV S S, TAMBOVTCEV I M, KISELEV A D, *et al.* Hysteresis and Fréedericksz thresholds for twisted states in chiral nematic liquid crystals: Minimum-energy path approach [J]. *Journal of Molecular Liquids*, 2021, 325: 115242.
- [89] FRISCH T, GIL L, GILLI J M. Two-dimensional Landau-de Gennes dynamical model for the unwinding transition of a cholesteric liquid crystal [J]. *Physical Review E*, 1993, 48(6): R4199-R4202s.
- [90] GIL L. Numerical resolution of the cholesteric unwinding transition problem [J]. *Journal de Physique II*, 1995, 5(12): 1819-1833.
- [91] BELYAKOV V A. Untwisting of the helical structure in a plane layer of chiral liquid crystal [J]. *Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters*, 2002, 76(2): 88-92.
- [92] OSWALD P. Phase transitions and unwinding of cholesteric liquid crystals [M]. //POPA-NITA V. *Phase Transitions. Applications to Liquid Crystals, Organic Electronic and Optoelectronic Fields*, Kerala, India: Research Signpost, 2006: 47-78.
- [93] HARE S M, LUNSFORD-POE B, KIM M S, *et al.* Chiral liquid crystal lenses confined in microchannels [J]. *Materials*, 2020, 13(17): 3761.
- [94] TAI J S B, SMALYUKH I I. Surface anchoring as a control parameter for stabilizing torons, skyrmions, twisted walls, fingers, and their hybrids in chiral nematics [J]. *Physical Review E*, 2020, 101(4): 042702.
- [95] BISHT K, WANG Y W, BANERJEE V, *et al.* Tailored morphologies in two-dimensional ferronematic wells [J]. *Physical Review E*, 2020, 101(2): 022706.
- [96] MUR U, RAVNIK M, SEČ D. Controllable shifting, steering, and expanding of light beam based on multi-layer liquid-crystal cells [J]. *Scientific Reports*, 2022, 12(1): 352.
- [97] LESLIE F M. Theory of flow phenomena in liquid crystals [J]. *Advances in Liquid Crystals*, 1979, 4: 1-81.
- [98] DOI M, EDWARDS S F. *The Theory of Polymer Dynamics* [M]. New York: Oxford University Press, 1988.
- [99] HAND G L. A theory of anisotropic fluids [J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 1962, 13(1): 33-46.
- [100] TSUIJ T, REY T A D. Orientation mode selection mechanisms for sheared nematic liquid crystalline materials [J]. *Physical Review E*, 1998, 57(5): 5609-5625.
- [101] YU H J, ZHANG P W. A kinetic-hydrodynamic simulation of microstructure of liquid crystal polymers in plane shear flow [J]. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 2007, 141(2/3): 116-127.
- [102] ZHANG R, ZHOU Y, RAHIMI M, *et al.* Dynamic structure of active nematic shells [J]. *Nature Communications*, 2016, 7(1): 13483.
- [103] RIVENSON Y, ZHANG Y B, GÜNAYDIN H, *et al.* Phase recovery and holographic image reconstruction using deep learning in neural networks [J]. *Light: Science & Applications*, 2018, 7(2): 17141.

- [104] LI G X, CHEN S M, PHOLCHAI N, *et al.* Continuous control of the nonlinearity phase for harmonic generations [J]. *Nature Materials*, 2015, 14(6): 607-612.
- [105] MALKIEL I, MREJEN M, NAGLER A, *et al.* Plasmonic nanostructure design and characterization *via* deep learning [J]. *Light: Science & Applications*, 2018, 7(1): 60.
- [106] MA W, LIU Z C, KUDYSHEV Z A, *et al.* Deep learning for the design of photonic structures [J]. *Nature Photonics*, 2021, 15(2): 77-90.

作者简介:



张馨元(1999—),女,辽宁铁岭人,硕士研究生,2020年于西北大学获得学士学位,主要从事液晶光子学方面的研究。E-mail: 2120200224@mail.nankai.edu.cn



张心正(1973—),男,河南温县人,博士,教授,2001年于南开大学获得博士学位,主要从事微纳光子学、液晶光子学等方面的研究。E-mail: zxz@nankai.edu.cn