

亚微米级向列相球形液滴中分裂核结构稳定性的探究

刘宏恩, 吴金兵, 刘猛飞, 周璇, 张志东

引用本文:

刘宏恩, 吴金兵, 刘猛飞, 等. 亚微米级向列相球形液滴中分裂核结构稳定性的探究[J]. 液晶与显示, 2021, 36(3): 343–354.

LIU Hong-en, WU Jin-bing, LIU Meng-fei, et al. Stability of split-core configuration confined in nematic liquid crystal droplets under submicron scale[J]. *Chinese Journal of Liquid Crystals and Displays*, 2021, 36(3): 343–354.

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.37188/CJLCD.2020-0246>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

同轴结构球形液滴的尺寸效应和电场动力学

Size effect and electric field dynamics of spherical droplets in concentric configurations

液晶与显示. 2020, 35(4): 293–305 <https://doi.org/10.3788/YJYXS20203504.0293>

基于向列相液晶弹性各向异性偏振光栅结构方位锚定能的理论研究

Theoretical study of azimuthal anchoring energy in polarization grating configuration based on elastic anisotropy of nematic liquid crystals

液晶与显示. 2016, 31(8): 768–772 <https://doi.org/10.3788/YJYXS20163108.0768>

向列相液晶弹性各向异性诱导液晶盒产生漏光的研究

Study of light leakage induced by the elastic anisotropy of the nematic liquid crystal

液晶与显示. 2015(6): 949–959 <https://doi.org/10.3788/YJYXS20153006.0949>

混合排列柱状薄层中的向列相液晶指向矢分布的研究

Director distributions of nematic liquid crystals in hybrid arrangement cylindrical cells

液晶与显示. 2017, 32(1): 13–18 <https://doi.org/10.3788/YJYXS20173201.0013>

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

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

液晶与显示. 2018, 33(1): 1–13 <https://doi.org/10.3788/YJYXS20183301.0001>

文章编号:1007-2780(2021)03-0343-12

亚微米级向列相球形液滴中分裂核结构 稳定性的探究

刘宏恩, 吴金兵, 刘猛飞, 周 璇, 张志东*

(河北工业大学 应用物理系, 天津 300401)

摘要:基于 Landau-de Gennes 理论,探究了具有垂面边界锚定情况下亚微米级球形向列相液滴中分裂核结构的稳定性。结果表明:在边界条件为强锚定且单一弹性常数近似下,球形液滴内会同时存在径向结构和环结构。根据半径的不同,两种结构会分别成为稳态,即半径较大时环结构为稳态,反之径向结构为稳态。当考虑弹性各向异性时,会出现稳态的环结构和亚稳态的分裂核结构。进一步研究表明:若考虑 k_{24} 弹性项对液滴内部结构的影响,当边界锚定条件由强锚定变为弱锚定(以锚定强度 $w=10^{-4}\text{J/m}^2$ 为例),在单一弹性常数近似情况下,会出现径向、环和均匀 3 种结构,其中径向结构为稳态,且结构之间的稳定性不受 k_{24} 作用的影响;在弹性各向异性情况下,径向结构会转变为分裂核结构。另外,若不考虑 k_{24} 作用时,分裂核结构仍为亚稳态;若考虑 k_{24} 作用,当尺寸和弹性各向异性在一定范围内时,分裂核结构可以成为稳态。在我们的模拟计算中首次发现 k_{24} 作用可以使分裂核结构成为稳态。

关键词:Landau-de Gennes 理论;分裂核结构;弹性各向异性;边界条件; k_{24} 作用

中图分类号:O753+.2 **文献标识码:**A **doi:**10.37188/CJLCD.2020-0246

Stability of split-core configuration confined in nematic liquid crystal droplets under submicron scale

LIU Hong-en, WU Jin-bing, LIU Meng-fei, ZHOU Xuan, ZHANG Zhi-dong*

(Department of Applied Physics, Hebei University of Technology, Tianjin 300401, China)

Abstract: Based on Landau-de Gennes theory, the stability of split-core configuration confined in nematic liquid crystal droplets with submicron scale under homeotropic anchoring boundary condition is investigated. Results show that there are radial and ring structures under the strong anchoring boundary condition and single constant approximation. According to the difference of the radius, the two structures will become stable respectively, i.e., the ring structure is stable when the radius is larger, and the radial structure is stable when the radius is smaller. Under the condition of elastic anisotropy, a stable ring structure and a metastable split-core structure will appear. Furthermore, the results show that if the effect of k_{24} on the internal structure of the droplet is considered, when the boundary anchoring condition is changed from strong anchoring to weak anchoring (take anchoring strength $w=10^{-4}\text{J/m}^2$ as an example) and under the single constant approximation, it is found that there

收稿日期:2020-09-23;修订日期:2020-10-16.

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

Supported by Natural Science Foundation of China(No.11374087, No.11447179)

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

would be three structures, i.e., radial structure, ring structure and uniform state structure, and the radial structure is stable state, in addition, the stability among structures is not affected by the effect of k_{24} ; under the condition of elastic anisotropy, the radial structure is transformed into the split-core structure. And it is still metastable when the effect of k_{24} is not considered; if the effect of k_{24} is considered, the split-core structure can be stable when the size and elastic anisotropy are within a certain range. In our simulation, it is found that the effect of k_{24} can make the split-core structure become stable for the first time.

Key words: Landau-de Gennes theory; split-core configuration; elastic anisotropy; boundary condition; effect of k_{24}

1 引言

很多技术都依赖于液晶微滴内部的分子取向^[1-2]。例如在聚合物分散液晶(PDLC)系统中,液晶微滴均匀分布在聚合物网络中,无外场作用时,系统存在很高的灰度^[3];当施加外场作用时,液晶微滴的对称轴和内部液晶分子会沿着外加场作用的方向排列,此时系统呈现透明状态,由此可以制作性能良好的光控膜等光学器件。一般来说,液晶微滴内部的分子排列方式是由微滴的表面能与本体能相互作用导致的。对于向列相液晶微滴,早期大量的实验和理论研究主要针对于微米级大尺寸情况^[4-7],而近年来对于更小尺寸的研究已经逐渐成为热点问题。对于亚微米级尺寸的研究,一些团队也给出了相关介绍^[8-11]。研究发现,双极结构(bipolar structure)、径向结构(radial structure)是液晶微滴中最为常见的两种结构,其中,双极结构在几微米甚至几十微米情况下都可以稳定存在。对于径向结构,早期 Schopohl 和 Sluckin 等人^[12]解释为在球中心处有一个各向同性点;Penzenstadler 等人^[13]通过研究提出各向同性点实质上应该是分裂后的小的 $+1/2$ 缺陷环(ring);随后 Sonnet 等人^[14]通过模拟计算验证了 Penzenstadler 等人的猜想。近年来,随着科学技术不断发展,人们的研究重点逐渐趋于更小尺寸。Gupta 等人在实验上能够制备出直径从 700 nm 到 8 μm 的液晶微滴^[15-16];Bacchiocchi 等人进一步在一系列不同的实验中制备出直径从 50 nm 到 300 nm 的液晶微滴^[17]。

Prishchepa 等人通过改变边界条件(由沿面锚定条件转变为垂面锚定条件),发现液滴中的双极结构会变为径向结构^[18]。Gupta 等人发现当

液晶微滴直径由 3 μm 减小到 1 μm 时,双极结构会转变为预径向结构(pre-radial structure),继续减小直径,当其约为 700 nm 时,变为径向结构。该现象的出现是由于随着直径减小,表面能作用相对增强,鞍形弹性常数 k_{24} (saddle-splay)项在与表面能、本体能和弹性能的相互竞争中逐渐发挥着不可或缺的作用。研究还发现,当不考虑 k_{24} 项作用时,随着尺寸的逐渐减小,双极结构会转变为均匀结构^[15]。对于圆柱中双扭曲结构(double-twist structure),Davidson 等人发现由于 k_{24} 弹性项作用,使得边界附近指向矢更易沿曲率最大的方向排列^[19]。Zumer 等人^[20]的研究结果表明,在球形液滴中,由于 k_{24} 弹性项作用于表面上,因此很难区分 k_{24} 作用和边界锚定作用,在此情况下,即使无边界锚定作用, k_{24} 也可以稳定球形液滴内部的指向矢结构,因此,此时 k_{24} 作用可以部分代替边界锚定作用。

Mkaddem 等人^[21]在垂面强锚定条件下发现 3 种结构:径向结构、环结构和分裂核结构,而对于分裂核结构(split-core structure),其总是以亚稳态的方式存在。An 等人^[8]分别在垂面强锚定边界条件和镜像-垂面(mirror-homeotropic)边界条件下研究了分裂核结构和 -1 分裂核结构。对于上述有关分裂核结构的研究结果,发现其总是以亚稳态形式存在,而这也是本文的重点研究问题。基于 Landau-de Gennes 理论,本文主要从弱锚定边界条件出发,通过考虑 k_{24} 弹性项的作用,研究亚微米级尺寸下分裂核结构成为稳态的存在范围。

2 几何模型

研究约束在球形结构中的向列相液滴,建立

如图1所示的球形模型。由于液晶微滴既具有球对称性,又具有良好的轴对称性,我们利用柱坐标系进行模拟分析。图中 $(\vec{e}_\rho, \vec{e}_\varphi, \vec{e}_z)$ 分别为柱坐标系中的3个基矢量。其中 $\vec{e}_\rho$ 为沿径向方向的基矢量, $\vec{e}_z$ 为沿轴向方向的基矢量,且 $\vec{e}_\varphi = \vec{e}_z \times \vec{e}_\rho$ 。极角 θ 定义为液晶分子指向矢 $\vec{n}$ 与 $\vec{e}_z$ 方向的夹角,扭曲角 α 定义为指向矢在 ρ - φ 平面的投影与 $\vec{e}_\rho$ 方向的夹角。柱坐标系中,指向矢 $\vec{n}$ 表示为: $\vec{n} = \sin\theta \cos\alpha \vec{e}_\rho + \sin\theta \sin\alpha \vec{e}_\varphi + \cos\theta \vec{e}_z$ 。在球形液滴中,由于液晶分子具有良好的轴对称性,角度 θ 和 α 均与 φ 无关,所以我们采用过直径的半球截面作为研究对象来描述整个球体内部的液晶分子排列方式,此时过球心的中心对称轴与坐标系的 z 轴重合。

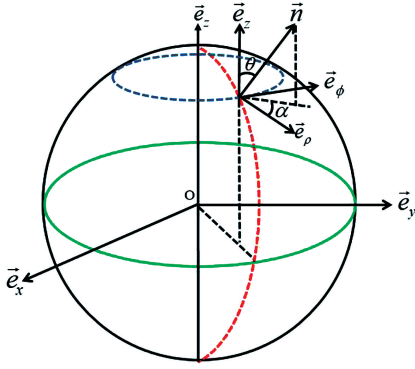


图1 球状结构示意图

Fig.1 Schematic diagram of spherical structure

3 理论方法

3.1 序参数张量 Q 与双轴性参数 β^2

液晶的研究理论方法一般为 Frank 理论与 Landau-de Gennes 理论。Frank 弹性理论对于描述液晶连续体更有优势;而对于存在缺陷的液晶系统, Landau-de Gennes 理论既保持了棒状液晶分子的首尾不变性又能够利用双轴性来具体描述缺陷的状态,所以本文选取 Landau-de Gennes 理论进行研究。在主轴系中,序参数张量 Q 可以表示为^[22]:

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

其中: λ_i 和 $\vec{e}_i$ 分别代表序参数张量 Q 的第 i 个本征值和本征矢,其中 λ_i 的取值范围为 $(-1/3,$

$2/3)$ 。一般情况将3个本征值中最大的本征值对应的本征矢定义为指向矢,此时本征矢的方向即为液晶指向矢的方向。

序参数张量 Q 为对称无迹张量,它满足 $Q_{ij} = Q_{ji}$, $\text{tr}Q = 0$ 。液晶系统处于各向同性相时, $Q=0$,此时3个本征值都为0,液晶分子处于完全无序状态。当液晶系统中有两个本征值相等且不等于0时,此时系统为单轴态。单轴序参数张量 Q 表示为:

$$Q = S \left(\vec{n} \otimes \vec{n} - \frac{1}{3} \mathbf{I} \right), \quad (2)$$

其中: S 表示向列相单轴序参数, $\vec{n}$ 为液晶指向矢, $\mathbf{I}$ 代表单位张量。柱坐标系中,式(2)的矩阵形式表示为:

$$Q = \begin{pmatrix} Q_{\rho\rho} & Q_{\rho\varphi} & Q_{\rho z} \\ Q_{\varphi\rho} & Q_{\varphi\varphi} & Q_{\varphi z} \\ Q_{z\rho} & Q_{z\varphi} & Q_{zz} \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} n_\rho n_\rho - \frac{1}{3} & n_\rho n_\varphi & n_\rho n_z \\ n_\varphi n_\rho & n_\varphi n_\varphi - \frac{1}{3} & n_\varphi n_z \\ n_z n_\rho & n_z n_\varphi & n_z n_z - \frac{1}{3} \end{pmatrix}. \quad (3)$$

由于序参数张量 Q 为对称无迹张量,所以存在关系 $Q_{\rho\varphi} = Q_{\varphi\rho}$, $Q_{\rho z} = Q_{z\rho}$, $Q_{\varphi z} = Q_{z\varphi}$, $Q_{\rho\rho} + Q_{\varphi\varphi} + Q_{zz} = 0$ 。当序参数张量 Q 的3个本征值互不相等时,此时液晶系统处于双轴态。利用双轴性参数 β^2 定义双轴性:

$$\beta^2 = 1 - \frac{6 [\text{tr}(Q^3)]^2}{[\text{tr}(Q^2)]^3}. \quad (4)$$

双轴性参数 β^2 的取值范围为 $[0,1]$ 。当 $\beta^2 = 0$ 时,系统处于单轴态,当 $\beta^2 = 1$ 时,系统具有最大的双轴性。由于存在 $\text{tr}(Q^3) = 3\det Q$,当 $\beta^2 = 1$ 时,对应的 $\det Q = 0$,这表明液晶系统拥有最大双轴性时,序参数张量 Q 的3个本征值至少有一个为0。

3.2 柱坐标系下的 Landau-de Gennes 理论

无外加场作用下,液晶系统中 Landau-de Gennes 理论的总自由能密度表示为:

$$F(Q) = F_{\text{bulk}} + F_{\text{elastic}}. \quad (5)$$

其中: F_{bulk} 为本体自由能密度, F_{elastic} 为弹性自由能密度。对于本体自由能密度 F_{bulk} ,其只依赖序参数张量 Q 并不依赖坐标系的位置选取,具体形式表示为:

$$F_{\text{bulk}} = \frac{1}{2} A \text{tr} \mathbf{Q}^2 - \frac{1}{3} B \text{tr} \mathbf{Q}^3 + \frac{1}{4} C (\text{tr} \mathbf{Q}^2)^2, \quad (6)$$

其中: $A = A_0(T - T^*)$, A_0, B, C 均为液晶材料参数, 且均为常数, T^* 为最低过冷温度。 S_{eq} 与温度 T 有关。在液晶系统中, 向列相与各向同性相的转变温度称为相变温度, 定义为 T_{IN} , 当温度 $T > T_{\text{IN}}$ 时, 平衡态时的标量序参数 $S = 0$, 此时液晶系统处于各向同性相; 当系统温度 $T < T_{\text{IN}}$, 结合式(2)和式(6)可以得到平衡态下的单轴标量序参数 $S_{\text{eq}} = \frac{B}{4C} \left(1 + \sqrt{1 - \frac{24AC}{B^2}} \right)$ 。此时系统处于向列相, 且 S_{eq} 与温度相关。

F_{elastic} 为液晶取向序的不均匀引起的弹性自由能密度, 依赖于序参数张量 $\mathbf{Q}$ 的空间变化率, 只考虑 $\mathbf{Q}$ 及其导数的二次项, F_{elastic} 具体表示为:

$$F_{\text{elastic}} = \frac{1}{2} L_1 (\nabla \mathbf{Q} : \nabla \mathbf{Q}) + \frac{1}{2} L_2 (\nabla \cdot \mathbf{Q}) \cdot (\nabla \cdot \mathbf{Q}) + \frac{1}{2} L_{24} \nabla \cdot [(\nabla \mathbf{Q}) \mathbf{Q} - \mathbf{Q} \text{div} \mathbf{Q}], \quad (7)$$

L_i 与 Frank 理论中的展曲弹性常数 k_{11} 、扭曲弹性常数 k_{22} 、弯曲弹性常数 k_{33} 之间存在关系为^[23]:

$$\begin{cases} L_1 = \frac{3k_{22} - k_{11} + k_{33}}{6S_{\text{eq}}^2} \\ L_2 = \frac{k_{11} - k_{22}}{S_{\text{eq}}^2} \\ L_{24} = \frac{k_{24}}{S_{\text{eq}}^2} \end{cases}. \quad (8)$$

其中: k_{24} 是鞍形弹性常数, 根据 Ericksen^[24]、Beris 和 Edwards^[25] 等人得出的关于 Frank 理论的弹性常数 $k_{11}, k_{22}, k_{33}, k_{24}$ 满足的不等式:

$$k_{11} \geq 0, k_{22} \geq 0, k_{33} \geq 0, \quad (9)$$

$$-k_{22} \leq k_{24} \leq \min(2k_{11} - k_{22}, k_{22}). \quad (10)$$

Kralj 等人对液晶系统进行无量纲化处理^[26], 定义为 $q_0 = S_{\text{eq}}(T^{**}) = B/4C$ (最高过热温度 T^{**} 下的序参数)。以 q_0 对序参数张量进行约化, 即 $\tilde{Q}_{ij} = Q_{ij}/q_0 (i, j = \rho, \phi, z)$; 定义 $f_0 = B^4/(4C)^3$, 使用 f_0 首先对本体能密度 F_{bulk} 进行约化, 有 $\tilde{F}_{\text{bulk}} = F_{\text{bulk}}/f_0$, 约化后的本体自由能密度表示为:

$$\begin{aligned} \tilde{F}_{\text{bulk}} &= \frac{\tilde{A}}{12} \text{tr} \tilde{\mathbf{Q}}^2 - \frac{1}{3} \text{tr} \tilde{\mathbf{Q}}^3 + \frac{1}{16} (\text{tr} \tilde{\mathbf{Q}}^2)^2 = \\ &= \frac{\tilde{A}}{12} (\tilde{Q}_{\rho\rho}^2 + \tilde{Q}_{\phi\phi}^2 + \tilde{Q}_{zz}^2 + 2\tilde{Q}_{\rho\phi}^2 + 2\tilde{Q}_{\rho z}^2 + 2\tilde{Q}_{\phi z}^2) - \\ &= \frac{1}{3} [(\tilde{\mathbf{Q}}^2)_{\rho\rho} \tilde{Q}_{\rho\rho} + (\tilde{\mathbf{Q}}^2)_{\phi\phi} \tilde{Q}_{\phi\phi} + (\tilde{\mathbf{Q}}^2)_{zz} \tilde{Q}_{zz} + \\ &= 2(\tilde{\mathbf{Q}}^2)_{\rho\phi} \tilde{Q}_{\rho\phi} + 2(\tilde{\mathbf{Q}}^2)_{\rho z} \tilde{Q}_{\rho z} + 2(\tilde{\mathbf{Q}}^2)_{\phi z} \tilde{Q}_{\phi z}] + \\ &= \frac{1}{16} (\tilde{Q}_{\rho\rho}^2 + \tilde{Q}_{\phi\phi}^2 + \tilde{Q}_{zz}^2 + 2\tilde{Q}_{\rho\phi}^2 + 2\tilde{Q}_{\rho z}^2 + 2\tilde{Q}_{\phi z}^2)^2. \end{aligned} \quad (11)$$

引入相干长度 $\xi = \sqrt{\frac{L_1}{Bq_0}}$ 来约化长度量, 即

$\tilde{z} = z/\xi, \tilde{\rho} = \rho/\xi$ 。约化后的弹性自由能密度为:

$$\begin{aligned} \tilde{F}_{\text{elastic}} &= \frac{1}{2} \left\{ \left(\frac{\partial \tilde{Q}_{\rho\rho}}{\partial \tilde{\rho}} \right)^2 + \left(\frac{\partial \tilde{Q}_{\rho\rho}}{\partial \tilde{z}} \right)^2 + \left(\frac{\partial \tilde{Q}_{\phi\phi}}{\partial \tilde{\rho}} \right)^2 + \left(\frac{\partial \tilde{Q}_{\phi\phi}}{\partial \tilde{z}} \right)^2 + \left(\frac{\partial \tilde{Q}_{zz}}{\partial \tilde{\rho}} \right)^2 + \left(\frac{\partial \tilde{Q}_{zz}}{\partial \tilde{z}} \right)^2 + 2 \left[\left(\frac{\partial \tilde{Q}_{\rho\phi}}{\partial \tilde{\rho}} \right)^2 + \left(\frac{\partial \tilde{Q}_{\rho\phi}}{\partial \tilde{z}} \right)^2 \right] + \right. \\ &= 2 \left[\left(\frac{\partial \tilde{Q}_{\rho z}}{\partial \tilde{\rho}} \right)^2 + \left(\frac{\partial \tilde{Q}_{\rho z}}{\partial \tilde{z}} \right)^2 \right] + 2 \left[\left(\frac{\partial \tilde{Q}_{\phi z}}{\partial \tilde{\rho}} \right)^2 + \left(\frac{\partial \tilde{Q}_{\phi z}}{\partial \tilde{z}} \right)^2 \right] + \frac{2}{\tilde{\rho}^2} (\tilde{Q}_{\rho\rho}^2 + \tilde{Q}_{\phi\phi}^2 + 4\tilde{Q}_{\rho\phi}^2 + \tilde{Q}_{\rho z}^2 + \tilde{Q}_{\phi z}^2 - 2\tilde{Q}_{\rho\phi} \tilde{Q}_{\phi\phi}) \left. \right\} + \\ &= \frac{1}{2} \frac{L_2}{L_1} \left\{ \left(\frac{\partial \tilde{Q}_{\rho\rho}}{\partial \tilde{\rho}} + \frac{\partial \tilde{Q}_{\rho\rho}}{\partial \tilde{z}} + \frac{\tilde{Q}_{\rho\rho} - \tilde{Q}_{\phi\phi}}{\tilde{\rho}} \right)^2 + \left(\frac{\partial \tilde{Q}_{\rho\phi}}{\partial \tilde{\rho}} + \frac{\partial \tilde{Q}_{\rho\phi}}{\partial \tilde{z}} + \frac{\tilde{Q}_{\rho\phi}}{\tilde{\rho}} + \frac{\tilde{Q}_{\phi\rho}}{\tilde{\rho}} \right)^2 + \left(\frac{\partial \tilde{Q}_{\rho z}}{\partial \tilde{\rho}} + \frac{\partial \tilde{Q}_{\rho z}}{\partial \tilde{z}} + \frac{\tilde{Q}_{\rho z}}{\tilde{\rho}} \right)^2 \right\} + \\ &= \frac{1}{2} \frac{L_{24}}{L_1} \left\{ \frac{2}{\tilde{\rho}} \left(\tilde{Q}_{\phi\phi} \frac{\partial \tilde{Q}_{\rho\rho}}{\partial \tilde{\rho}} + \tilde{Q}_{\rho\rho} \frac{\partial \tilde{Q}_{\phi\phi}}{\partial \tilde{\rho}} - \tilde{Q}_{\rho\phi} \frac{\partial \tilde{Q}_{\rho\rho}}{\partial \tilde{\rho}} - 4\tilde{Q}_{\rho\phi} \frac{\partial \tilde{Q}_{\rho\phi}}{\partial \tilde{\rho}} - \tilde{Q}_{\phi\phi} \frac{\partial \tilde{Q}_{\phi\phi}}{\partial \tilde{\rho}} - \tilde{Q}_{\phi z} \frac{\partial \tilde{Q}_{\rho z}}{\partial \tilde{\rho}} - \tilde{Q}_{\rho z} \frac{\partial \tilde{Q}_{\phi z}}{\partial \tilde{\rho}} + \right. \right. \\ &= \frac{\partial \tilde{Q}_{\rho\phi}}{\partial \tilde{\rho}} + \frac{\partial \tilde{Q}_{\phi\phi}}{\partial \tilde{\rho}} + \frac{\partial \tilde{Q}_{\phi z}}{\partial \tilde{\rho}} - \frac{\partial \tilde{Q}_{\rho\rho}}{\partial \tilde{\rho}} - \frac{\partial \tilde{Q}_{\rho\phi}}{\partial \tilde{\rho}} - \frac{\partial \tilde{Q}_{\rho z}}{\partial \tilde{\rho}} + \frac{\partial \tilde{Q}_{\rho\phi}}{\partial \tilde{z}} + \frac{\partial \tilde{Q}_{\phi\phi}}{\partial \tilde{z}} + \frac{\partial \tilde{Q}_{\phi z}}{\partial \tilde{z}} - \frac{\partial \tilde{Q}_{\rho z}}{\partial \tilde{z}} - \frac{\partial \tilde{Q}_{\phi z}}{\partial \tilde{z}} - \frac{\partial \tilde{Q}_{zz}}{\partial \tilde{z}} + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \left(\tilde{Q}_{\varphi\varphi} \frac{\partial \tilde{Q}_{\rho z}}{\partial \tilde{z}} + \tilde{Q}_{\rho z} \frac{\partial \tilde{Q}_{\varphi\varphi}}{\partial \tilde{z}} - \tilde{Q}_{\varphi z} \frac{\partial \tilde{Q}_{\rho\varphi}}{\partial \tilde{z}} - \tilde{Q}_{\rho z} \frac{\partial \tilde{Q}_{zz}}{\partial \tilde{z}} - 2\tilde{Q}_{\rho\varphi} \frac{\partial \tilde{Q}_{\varphi z}}{\partial \tilde{z}} - \tilde{Q}_{\rho\rho} \frac{\partial \tilde{Q}_{\rho z}}{\partial \tilde{z}} \right) + \\ & 2 \left(\frac{\partial \tilde{Q}_{\rho z}}{\partial \tilde{\rho}} \frac{\partial \tilde{Q}_{\rho\rho}}{\partial \tilde{z}} + \frac{\partial \tilde{Q}_{\varphi z}}{\partial \tilde{\rho}} \frac{\partial \tilde{Q}_{\rho\varphi}}{\partial \tilde{z}} + \frac{\partial \tilde{Q}_{zz}}{\partial \tilde{\rho}} \frac{\partial \tilde{Q}_{\rho z}}{\partial \tilde{z}} - \frac{\partial \tilde{Q}_{\rho\rho}}{\partial \tilde{\rho}} \frac{\partial \tilde{Q}_{\rho z}}{\partial \tilde{z}} - \frac{\partial \tilde{Q}_{\rho\varphi}}{\partial \tilde{\rho}} \frac{\partial \tilde{Q}_{\varphi z}}{\partial \tilde{z}} - \frac{\partial \tilde{Q}_{\rho z}}{\partial \tilde{\rho}} \frac{\partial \tilde{Q}_{zz}}{\partial \tilde{z}} \right) \Bigg\}. \quad (12) \end{aligned}$$

利用张量 $\mathbf{Q}$ 无迹处理和泛函的约束变分得到平衡态的欧拉方程^[20]。在柱坐标系下为:

$$\frac{\partial \tilde{F}}{\partial \tilde{Q}_{ij}} - \frac{\partial}{\partial \tilde{\rho}} \frac{\partial \tilde{F}}{\partial \tilde{Q}_{ij,\tilde{\rho}}} - \frac{1}{\tilde{\rho}} \frac{\partial \tilde{F}}{\partial \tilde{Q}_{ij,\tilde{\varphi}}} - \frac{\partial}{\partial \tilde{z}} \frac{\partial \tilde{F}}{\partial \tilde{Q}_{ij,\tilde{z}}} = 0. \quad (13)$$

本文使用松弛迭代方法对液晶系统进行数值模拟,在此动力学方程中,序参数张量 $\mathbf{Q}$ 是时间 t 的函数,给定初始条件后将得到其随时间演化的平衡态结果。动力学方程如下:

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} = \Gamma \left(-\frac{\delta F}{\delta \mathbf{Q}} \right), \quad (14)$$

其中: $\Gamma = 6D^* / [1 - 3\text{tr}(\mathbf{Q}^2)]^2$, D^* 为系统的转动扩散系数。约化后的动力学方程为:

$$\frac{\partial \tilde{\mathbf{Q}}}{\partial t} = -\tilde{\Gamma} \left(\frac{\partial \tilde{F}}{\partial \tilde{\mathbf{Q}}_{ij}} - \frac{\partial}{\partial \tilde{\rho}} \frac{\partial \tilde{F}}{\partial \tilde{\mathbf{Q}}_{ij,\tilde{\rho}}} - \frac{1}{\tilde{\rho}} \frac{\partial \tilde{F}}{\partial \tilde{\mathbf{Q}}_{ij,\tilde{\varphi}}} - \frac{\partial}{\partial \tilde{z}} \frac{\partial \tilde{F}}{\partial \tilde{\mathbf{Q}}_{ij,\tilde{z}}} \right), \quad (15)$$

其中: $\tilde{\Gamma} = \Gamma \times (Bq_0)$, 得到 5 个具体的动力学

方程。

3.3 边界条件及参数选取

当系统不存在外场的作用下,液晶系统的边界条件会对内部液晶分子的排列方式产生重要影响。本文需要考虑液晶微滴的弱锚定边界情况,所以给出表面能密度的具体表达形式:

$$F_s = \frac{1}{2} \omega_s \text{tr}(\mathbf{Q} - \mathbf{Q}_s)^2, \quad (16)$$

其中 $\mathbf{Q}_s$ 为表面易取向的序参数张量,仅描述边界指向矢的空间变化,具体可表示为:

$$\mathbf{Q}_s = \begin{pmatrix} Q_{s\rho\rho} & Q_{s\rho\varphi} & Q_{s\rho z} \\ Q_{s\varphi\rho} & Q_{s\varphi\varphi} & Q_{s\varphi z} \\ Q_{sz\rho} & Q_{sz\varphi} & Q_{sz z} \end{pmatrix}, \quad (17)$$

同样 $\mathbf{Q}_s$ 满足对称无迹条件。 ω_s 为 Landau-de Gennes 理论的锚定强度,与 Frank 理论中的锚定强度 w 存在关系: $\omega_s = w/S_{\text{eq}}$ 。引入约化量: $\tilde{\omega}_s = \frac{\omega_s}{Bq_0\xi_0}$ 以及 $\tilde{F}_s = \frac{F_s}{q_0^3 B}$ 。所以 F_s 约化后为:

$$\begin{aligned} \tilde{F}_s = \frac{1}{2} \tilde{\omega}_s \xi \{ & 2\tilde{Q}_{\rho\rho}^2 + 2\tilde{Q}_{\varphi\varphi}^2 + 2\tilde{Q}_{\rho\rho}\tilde{Q}_{\varphi\varphi} + 2\tilde{Q}_{\rho\varphi}^2 + 2\tilde{Q}_{\rho z}^2 + 2\tilde{Q}_{\varphi z}^2 + 2\tilde{Q}_{s\rho\rho}^2 + 2\tilde{Q}_{s\varphi\varphi}^2 + 2\tilde{Q}_{s\rho\rho}\tilde{Q}_{s\varphi\varphi} + 2\tilde{Q}_{s\rho\varphi}^2 + \\ & 2\tilde{Q}_{s\rho z}^2 + 2\tilde{Q}_{s\varphi z}^2 - 2(2\tilde{Q}_{\rho\rho}\tilde{Q}_{s\rho\rho} + 2\tilde{Q}_{\varphi\varphi}\tilde{Q}_{s\varphi\varphi} + \tilde{Q}_{\rho\rho}\tilde{Q}_{s\varphi\varphi} + \tilde{Q}_{\varphi\varphi}\tilde{Q}_{s\rho\rho} + 2\tilde{Q}_{\rho\varphi}\tilde{Q}_{s\rho\varphi} + 2\tilde{Q}_{\rho z}\tilde{Q}_{s\rho z} + 2\tilde{Q}_{\varphi z}\tilde{Q}_{s\varphi z}) \}, \quad (18) \end{aligned}$$

弱锚泊的边界条件方程为:

$$\frac{\partial \tilde{F}_s}{\partial \tilde{\mathbf{Q}}_{ij}} + \frac{\partial \tilde{F}}{\partial \left(\frac{\partial \tilde{\mathbf{Q}}_{ij}}{\partial x_k} \right)} \nu_k = 0, \quad (19)$$

上式约化得到的方程为:

$$\frac{\partial \tilde{F}_s}{\partial \tilde{\mathbf{Q}}_{ij}} + \xi \frac{\partial \tilde{F}}{\partial \left(\frac{\partial \tilde{\mathbf{Q}}_{ij}}{\partial x_k} \right)} \nu_k = 0, \quad (20)$$

对于球形液滴可以表示为:

$$\frac{\partial \tilde{F}_s}{\partial \tilde{\mathbf{Q}}_{ij}} + \xi \frac{\partial \tilde{F}}{\partial \left(\frac{\partial \tilde{\mathbf{Q}}_{ij}}{\partial \tilde{\rho}} \right)} \nu_\rho + \xi \frac{\partial \tilde{F}}{\partial \left(\frac{\partial \tilde{\mathbf{Q}}_{ij}}{\partial \tilde{z}} \right)} \nu_z = 0, \quad (21)$$

其中:式(21)是在柱坐标系下写出的表达形式, ν_ρ 和 ν_z 分别是沿外法线的 ρ 分量和 z 分量。

本文模拟过程中选取了液晶材料 5CB^[22] 的各项系数: $A_0 = 0.195 \times 10^6 \text{ J/m}^3 \text{ K}$, $B = 7.155 \times 10^6 \text{ J/m}^3$, $C = 8.82 \times 10^6 \text{ J/m}^3$, $D^* = 0.35 \text{ m}^2 \cdot \text{N}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$, 引入的相干长度 ξ 为 2.64 nm, 约化温

度设定为 $\tilde{A} = 2/3$, 则序参数约化后为:

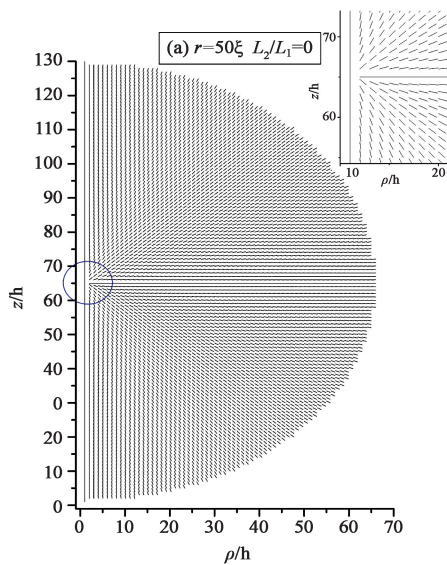
$\tilde{S} = \tilde{t} = S_{eq}/q_0 = 1 + \sqrt{1 - \tilde{A}} \approx 1.577$ 。设定锚定强度系数 $w = 10^{-4} \text{ J/m}^2$, 约化后的锚定强度为 $\tilde{w}_s = 0.082$ 。

4 结果与讨论

在本文的数值模拟过程中, 将半球截面离散成格点网络, 每两个格点之间长宽相等且为 h 。设定沿 ρ 方向离散为 65 个格点 (半径长度为 $64h$), 沿 z 方向离散为 129 个格点, 格点间距与模拟的液滴半径实际长度存在关系为: $h = r/64$, r 为液滴的半径大小。模拟过程中, 固定温度不变 (约化温度为 $\tilde{A} = 2/3$)。

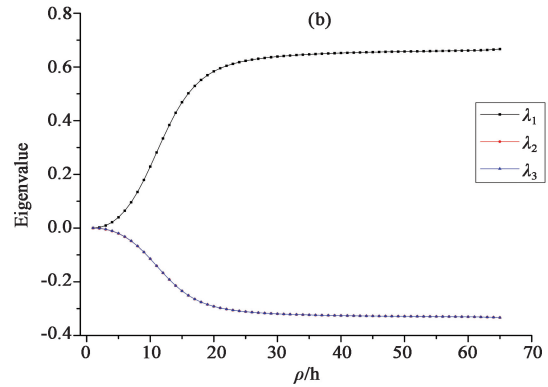
4.1 强锚定下径向、环和分裂核结构

锚定条件的变化、弹性各向异性、尺寸效应、温度都会对液晶微滴内部指向矢结构的稳定性产生影响。首先我们研究当边界条件强锚定时, 单一常数近似与弹性各向异性两种情况下尺寸效应对径向、环和分裂核结构的影响。根据 Mkaddem 等人对于径向结构内部缺陷的精细研究^[21], 在强锚定、单一常数近似且温度相对较高时, 存在两种结构: 径向结构和环结构, 并给出在尺寸很小时, 只存在径向结构的相图。分别选取 $r = 50\xi$ 、 $r =$

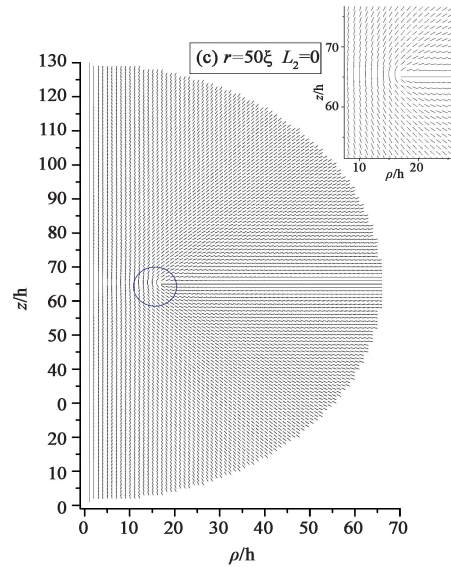


(a) 径向结构指向矢图

(a) Profiles of the director of the radial configuration

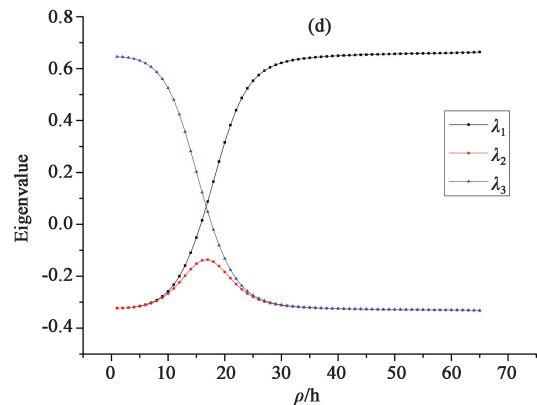


(b) 中间部分沿 ρ 轴的本征值, 其中 $\lambda_2 = \lambda_3$ 。
(b) Eigenvalues at the center along ρ axis, $\lambda_2 = \lambda_3$.



(c) 环结构指向矢图

(c) Profiles of the director of the ring configuration



(d) 中间部分沿 ρ 轴的本征值

(d) Eigenvalues at the center along ρ axis

图 2 半径为 50ξ 时径向结构与环结构指向矢图

Fig.2 Profiles of the director of the radial configuration and the ring configuration when the radius is equal to 50ξ

150 ξ 的液滴进行研究。在强锚定、单一常数近似下,发现液滴内部存在两种结构:径向结构和环结构。如图 2 和表 1 所示,当半径 $r=50\xi$ 时,对比能量,发现径向结构为能量最低态。

表 1 强锚定下径向结构与环结构的能量对比

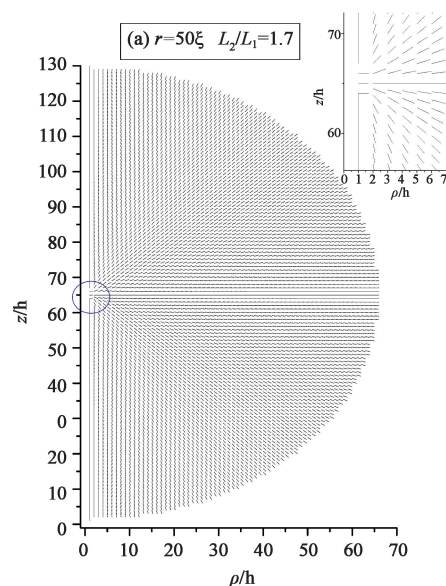
Tab.1 Difference of energy between the radial structure and the ring structure under strong anchoring

强锚定 $r = 50\xi$ $L_2/L_1 = 0$	
径向结构	$-1.921\ 187\ 2 \times 10^{-18}\text{ J}$
环结构	$-1.920\ 585\ 2 \times 10^{-18}\text{ J}$

图 2(a)、(c)为球半截面的指向矢示意图,蓝色圆圈代表缺陷的位置分布,可以看出径向结构的缺陷位于球中心处。图 2(b)是中间部分沿 ρ 轴的本征值图,中心处为各向同性点,此时 3 个本征值相同且为 0。环结构最先被 Penzenstadler 和 Trebin 等人预测^[4],图 2(d)是中间部分沿 ρ 轴的本征值图,此时环缺陷位置距中心约为 16 ξ 。当半径 $r=150\xi$ 时,对比能量,环结构为能量最低态。通过模拟发现,当 $r \leq 100\xi$ 时,径向结构为稳态, $r \geq 100\xi$ 时,环结构为稳态。当半径足够小时,只存在径向结构,而环结构不再稳定,此结论与 Mkaddem 等人的结论一致。

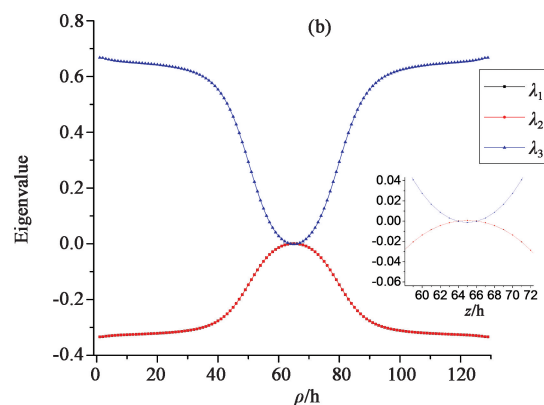
接着,我们探究了在强锚定、弹性各向异性下径向结构和环结构的结构变化。选取小半径的尺寸 $r=50\xi$ (132 nm)、 $r=60\xi$ (158 nm)、 $r=70\xi$ (185 nm) 进行研究。当半径为 $r=50\xi$ 、 $L_2/L_1=1.7$, 对应 $k_{11}/k_{22}=1.85$ 时,径向结构不再稳定存在,而是转变为分裂核结构,因此随着 k_{11} 的增大,液晶系统更难发生展曲形变,而在径向结构中展曲形变占主导作用,所以此时径向结构不再稳定存在。在弹性各向异性下会出现分裂核结构,下文将不再详细论述。根据 An 等人以及 Mkaddem 等人的研究:在强锚定、单一常数近似且温度较低的情况下,分裂核结构可以存在,但总为亚稳态^[8,21]。通过计算我们发现在强锚定、弹性各向异性时分裂核结构可以存在,并在相同条件下也发现了环结构,对比能量环结构为能量最低态。图 3(a)、(b)为半径 $r=50\xi$ 、 $L_2/L_1=1.7$ 的分裂核结构指向矢图和沿 z 轴的本征值图。根据 Mkaddem 等人对分裂核结构的特征描述,其内部存在一条较短的沿对称轴分

布的向错线且两端端点为各向同性点,而中间部分为负序参数单轴态。如图 3(b)所示,在 $z=64\xi$ 和 $z=66\xi$ 处,3 个本征值相同且为 0,因此在我们模拟得到的分裂核结构中,其内部的向错线长度为 2ξ 。



(a) 分裂核结构指向矢图

(a) Profiles of the director of the split-core configuration



(b) 中心轴的本征值, 其中 $\lambda_2 = \lambda_3$ 。

(b) Eigenvalues at the center axis, $\lambda_2 = \lambda_3$.

图 3 半径为 50 ξ 时分裂核结构图

Fig.3 Profiles of the director of the split-core configuration when the radius is equal to 50 ξ

当半径 $r=60\xi$ 、 $L_2/L_1=2.2$ 时,出现分裂核和环结构。对比能量发现环结构为稳态;而当半径 $r=70\xi$ 、 $L_2/L_1=2.9$ 时,出现分裂核和环结构,且分裂核结构始终为亚稳态。表 2 给出了分裂核和环结构的能量对比。

表 2 强锚定不同半径下分裂核结构与环结构的能量对比

Tab.2 Difference of energy between the split-core structure and the ring structure at different radius under strong anchoring

	强锚定		
	$r=50\xi$ $L_2/L_1=1.7$	$r=60\xi$ $L_2/L_1=2.2$	$r=70\xi$ $L_2/L_1=2.9$
分裂核结构	-1.188×10^{-18}	-2.368×10^{-18}	-4.006×10^{-18}
环结构	-1.229×10^{-18}	-2.436×10^{-18}	-4.115×10^{-18}

对于选取的小尺寸情况下的球形液滴,在强锚定边界条件下,当弹性常数 L_2/L_1 达到某个临界值时,径向结构不再稳定,而是转变为分裂核结构,但分裂核结构始终为亚稳态。

4.2 弱锚定下分裂核的稳定性——不考虑 K_{24} 作用

上文研究了在强锚定边界条件下的径向结构、环结构与分裂核结构,下面从弱锚定边界条件的角度出发,固定边界锚定强度为 $w=10^{-4}$ J/m² 进行分析。

首先选取液晶微滴的半径为 $r=50\xi$,在单一常数近似下,出现 3 种结构:径向结构、环结构和均匀结构。图 4 为均匀结构的指向矢图。如表 3 所示,径向结构仍然为能量最低态,根据 Tomar 等人的研究^[9],我们对此现象解释为此时的锚定强度较大,边界的指向矢仍然沿法线排列,更易形成径向结构,这里不再给出径向结构和环结构的指向矢图,只给出均匀结构的指向矢图。

在弹性各向同性条件下,弱锚定边界条件机制使得小半径的球形液滴出现均匀结构,对于弹性各向异性,我们也做出了相应的模拟计算。

对于相同半径 $r=50\xi$,当 L_2/L_1 增加时,会发现一些有趣的现象。如表 4 所示,当 L_2/L_1 的值等于 0.5 时,我们发现 4 种结构同时存在:径向结构、环结构、均匀结构和 -1 分裂核结构^[8]。通过对比能量,发现均匀结构的能量最低,为稳态,其他 3 种结构均为亚稳态。当 L_2/L_1 的值等于 0.7 时,发现缺陷环的半径逐渐变大,径向结构不

再稳定,而是转变为分裂核结构。当 $L_2/L_1=0.9$ 时,环结构不再稳定存在而是转变为均匀结构。当 $L_2/L_1>2$ 时,分裂核结构不再稳定存在,所以在 $0.7\leq L_2/L_1\leq 2$ 范围内,分裂核结构可以稳定存在,但总是为亚稳态,均匀结构能量最低,为稳态。

固定锚定强度为 $w=10^{-4}$ J/m²,选取弹性常数 $L_2/L_1=1.5$ 、 $L_{24}/L_1=0$,改变半径,发现分裂核结构在 $r=40\xi\sim 100\xi$ 范围内存在分裂核结构且为亚稳态,均匀结构为稳态。

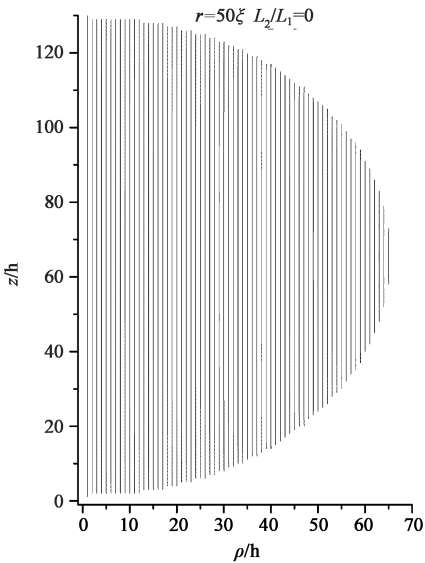


图 4 半径为 50ξ 时均匀结构指向矢图

Fig.4 Profiles of the director of the uniform configuration when the radius is equal to 50ξ

表 3 弱锚定且弹性各向同性下 3 种结构的能量对比

Tab.3 Difference of energy among three configurations under the isotropic elastic and weak anchoring mechanism

$w_s=10^{-4}$ J/m ² $L_{24}/L_1=0$ $r=50\xi$			
$L_2/L_1=0$	radial(稳态)	ring	uniform
	$-2.448\ 213\ 5\times 10^{-18}$	$-2.447\ 391\ 7\times 10^{-18}$	$-1.947\ 553\ 3\times 10^{-18}$

表4 弱锚定且弹性各向异性下不同结构的能量对比,其中 $L_{24}/L_1=0$

Tab.4 Difference of energy among different configurations under the elastic anisotropy and weak anchoring mechanism, $L_{24}/L_1=0$

$w_s=10^{-4} \text{ J/m}^2 \quad L_{24}/L_1=0 \quad r=50\xi$				
$L_2/L_1=0.5$	radial	ring	uniform(稳态)	-1split-core
	$-1.695\ 950\ 0 \times 10^{-18}$	$-1.703\ 867\ 9 \times 10^{-18}$	$-1.736\ 149\ 3 \times 10^{-18}$	$-1.319\ 644\ 2 \times 10^{-18}$
$L_2/L_1=0.7$	radial→split-core	ring	uniform(稳态)	-1split-core
	$-1.606\ 222\ 4 \times 10^{-18}$	$-1.618\ 880\ 8 \times 10^{-18}$	$-1.689\ 920\ 1 \times 10^{-18}$	$-1.254\ 809\ 6 \times 10^{-18}$
$L_2/L_1=0.9$	split-core	ring	uniform(稳态)	-1split-core
	$-1.516\ 480\ 6 \times 10^{-18}$	不存在	$-1.633\ 858\ 5 \times 10^{-18}$	$-1.196\ 528\ 6 \times 10^{-18}$
$L_2/L_1=2$	split-core	ring	uniform(稳态)	-1split-core
	$-1.022\ 787\ 8 \times 10^{-18}$	不存在	$-1.072\ 893\ 5 \times 10^{-18}$	$-8.904\ 654\ 1 \times 10^{-19}$

4.3 弱锚定下分裂核的稳定性——考虑 K_{24} 作用

首先选取半径 $r=50\xi$ 进行研究,在单一常数近似下且不考虑 k_{24} 作用即 $k_{24}=0$ 时,发现径向结构为稳态。根据前文研究,发现 k_{24} 项可以作为

表面项起作用^[20]。如表5所示,当 L_{24}/L_1 达到 Ericksen 不等式最大值即 $L_{24}/L_1=2$ 时,径向结构仍然为稳态。

在弹性各向异性下,我们对半径 $r=50\xi$ 的液

表5 弱锚定且弹性各向异性下3种结构的能量对比,其中 $L_{24}/L_1=2$

Tab.5 Difference of energy among three configurations under the elastic anisotropy and weak anchoring mechanism, $L_{24}/L_1=2$

$w_s=10^{-4} \text{ J/m}^2 \quad L_{24}/L_1=2 \quad r=50\xi$			
$L_2/L_1=2$	radial(稳态)	ring	uniform
	$-2.448\ 213\ 5 \times 10^{-18}$	$-2.447\ 391\ 7 \times 10^{-18}$	$-1.947\ 553\ 3 \times 10^{-18}$

晶微滴做出了一系列模拟计算。对于分裂核结构,当 $0.7 \leq L_2/L_1 \leq 2$ 时(此时 L_{24}/L_1 的取值限制在 Ericksen 不等式理论最大值范围内,即 $L_{24}/L_1 \leq 2$),发现当 $0.7 \leq L_2/L_1 < 0.9$,无论 L_{24}/L_1 取何值,环结构能量总是低于分裂核结构能量,即分裂核结构始终为亚稳态;当 $0.9 \leq L_2/L_1 \leq 2$ 时,环结构将不再稳定,而是转变为均匀结构;当 L_{24}/L_1 达到某个临界值时,分裂核结构成为能量最低态,而均匀结构成为亚稳态,这是在之前的研究中都未曾发现的。另外,对于-1分裂核结构,无论是否考虑 k_{24} 作用,其始终为能量最高的态,因此不再详细论述。

图5给出在 Frank 弹性常数中 k_{22}/k_{11} 与 k_{24}/k_{11} 之间的关系。蓝色区域内是分裂核结构可以存在的范围,而红色区域内是分裂核结构成为稳态的范围。黑色线为 Ericksen 不等式最大值时 k_{22}/k_{11} 与 k_{24}/k_{11} 之间的关系。

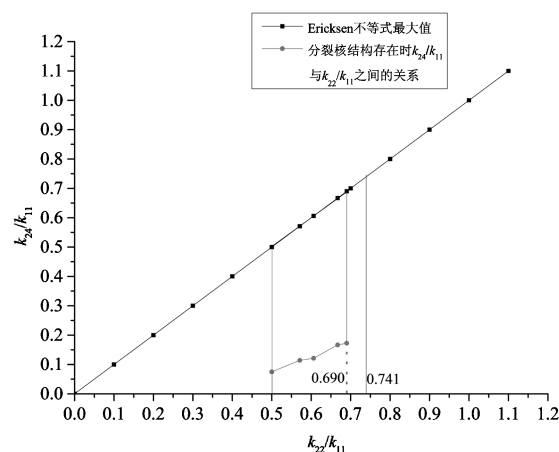
图5 分裂核结构存在时 k_{22}/k_{11} 与 k_{24}/k_{11} 的关系

Fig. 5 Relationship between k_{22}/k_{11} and k_{24}/k_{11} when the split-core configuration exists

其次,固定锚定强度 $w=10^{-4} \text{ J/m}^2$,选取弹性常数 $L_2/L_1=1.5$ 、 $L_{24}/L_1=2$ (Ericksen 不等式

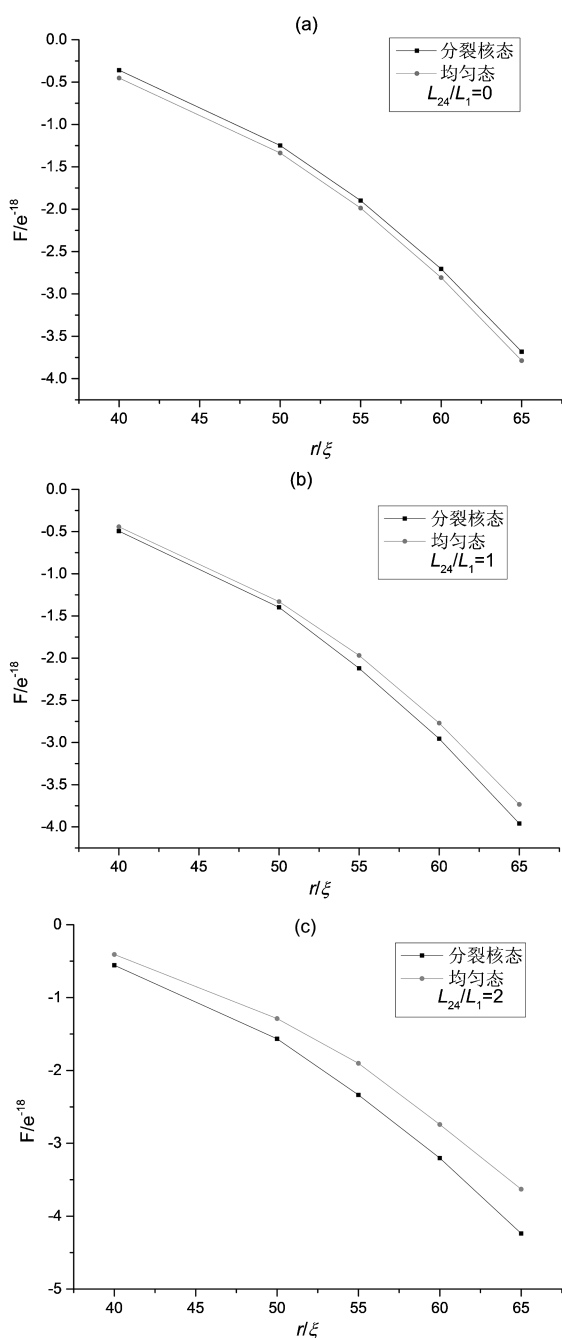


图 6 分裂核结构与均匀结构的能量对比。(a) $L_{24}/L_1 = 0$; (b) $L_{24}/L_1 = 1$; (c) $L_{24}/L_1 = 2$ 。

Fig. 6 Difference of energy between the split-core structure and the ring structure; (a) $L_{24}/L_1 = 0$; (b) $L_{24}/L_1 = 1$; (c) $L_{24}/L_1 = 2$ 。

最大值), 改变半径, 发现在 $r = 40\xi \sim 65\xi$ 范围内分裂核结构成为能量最低态, 均匀结构为亚稳态。此基础上又模拟计算了在 $w = 10^{-4} \text{ J/m}^2$, $r = 40\xi \sim 65\xi$ 条件下, 改变 L_{24}/L_1 , 得到了分裂核结构和均匀结构的半径与能量相图, 如图 6 所示。通过

相图可以发现对于 $L_{24}/L_1 = 0$, 当 $r = 40\xi \sim 65\xi$ 时, 分裂核结构为亚稳态, 均匀结构为稳态。对于 $L_{24}/L_1 = 0.5$, 当 $40\xi \leq r \leq 46\xi$ 时, 均匀结构为能量最低态; 当 $46\xi \leq r \leq 65\xi$ 时, 分裂核结构为稳态。而对于 $L_{24}/L_1 = 1, L_{24}/L_1 = 2$ 这两种情况, 当 $r = 40\xi \sim 65\xi$ 时, 分裂核结构为稳态, 均匀结构为亚稳态。

5 结 论

基于 Landau-de Gennes 理论, 本文分别在强锚定和弱锚定边界条件下研究了径向、环、分裂核以及均匀结构的稳定性。首先在强锚定、温度一定且单一常数近似下, 对于半径 $r = 50\xi$ (132 nm), 同时存在径向和环结构, 径向结构为稳态; 对于半径 $r = 150\xi$ (396 nm), 环结构为稳态, 径向结构为亚稳态; 并发现在 $r \geq 100\xi$ 时, 环结构为稳态, 且当半径足够小时, 只存在径向结构。其次在强锚定下, 弹性各向异性使得径向结构内部结构发生了改变。选取 $r = 50\xi, r = 60\xi, r = 70\xi$ 的小尺寸液晶微滴进行研究, 发现当 L_2/L_1 的值分别为 1.7、2.2、2.9 时, 径向结构转变为分裂核结构, 但分裂核结构总是为亚稳态, 环结构为稳态。

对于弱锚定边界条件下, 固定边界锚定强度为 $w = 10^{-4} \text{ J/m}^2$, 首先选取半径为 $r = 50\xi$ 进行研究, 在不考虑 k_{24} 作用即本文中 Landau-de Gennes 理论弹性常数取值为 $L_{24}/L_1 = 0$ 时, 单一常数近似下出现径向、环和均匀结构, 此时径向结构仍为稳态; 在弹性各向异性下, 当 $L_2/L_1 = 0.5$ 时, 径向结构、环结构、均匀结构和 -1 分裂核结构同时存在, 此时均匀结构为稳态; 随着 L_2/L_1 的取值增大, 环结构中的缺陷逐渐向赤道表面靠近, 当 $L_2/L_1 = 0.7$ 时, 径向结构转变为分裂核结构, 此时 Frank 理论的弹性常数 k_{11}/k_{22} 的比值大于 1, 即展曲弹性常数 k_{11} 的值变大, 使得系统中更难形成展曲形变, 由于径向结构具有良好的展曲形变, 所以此时径向结构不再稳定存在。当 $L_2/L_1 = 0.9$ 时, 环结构不在稳定存在, 而是转变为均匀结构。当 $L_2/L_1 = 2$ 时, 继续增加取值分裂核结构不再稳定, 因此分裂核结构稳定存在的范围为 $0.7 \leq L_2/L_1 \leq 2$, 此条件下对比能量发现分裂核结构始终为亚稳态, 均匀结构为稳态, 对于出现的 -1 分裂核结构, 由于其能量始终最高并

伴随其他态共存,这里不再详细介绍。对于固定 $L_2/L_1=1.5$, 改变不同半径, 发现当 $r=40\xi\sim 100\xi$ 时分裂核结构可以存在且为亚稳态。

本文首次探究并给出了在弱锚定边界条件且考虑 k_{24} 项作用(即 $L_{24}/L_1\neq 0$)时, 分裂核结构可以成为能量最低态。首先选取半径 $r=50\xi$ 进行研究, 对于单一常数近似, L_{24}/L_1 的取值达到 Ericksen 不等式理论最大值时($L_{24}/L_1=2$), 径向结构为稳态; 对于弹性各向异性, 当 $0.7\leq$

$L_2/L_1<0.9$ 时, 无论 L_{24}/L_1 取何值, 分裂核结构始终为亚稳态, 均匀结构成为稳态; 对于 $0.9\leq L_2/L_1\leq 2$, 当 L_{24}/L_1 达到某个临界值时, 分裂核结构成为能量最低态, 均匀结构成为亚稳态。固定 $L_2/L_1=1.5$ 、 $L_{24}/L_1=2$, 改变不同半径, 发现当 $r=40\xi\sim 65\xi$ 时, 分裂核结构成为能量最低态, 均匀结构为亚稳态, 并通过改变 L_{24}/L_1 , 得到了分裂核结构成为能量最低态的范围。

参 考 文 献:

- [1] DAN A, AERY S, ZHANG S N, *et al.* Protein microgel-stabilized Pickering liquid crystal emulsions undergo anolyte-triggered configurational transition [J]. *Langmuir*, 2020, 36(34): 10091-10102.
- [2] ORTIZ B J, BOURSIER M E, BARRETT K L, *et al.* Liquid crystal emulsions that intercept and report on bacterial quorum sensing [J]. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 2020, 12(26): 29056-29065.
- [3] COATES D. Polymer-dispersed liquid crystals [J]. *Journal of Materials Chemistry*, 1995, 5(12): 2063-2067.
- [4] LAVRETOVICH O D. Topological defects in dispersed words and worlds around liquid crystals, or liquid crystal drops [J]. *Liquid Crystals*, 1998, 24(1): 117-126.
- [5] KLEMAN M, LAVRETOVICH O D. *Soft Matter Physics: An Introduction* [M]. Berlin: Springer, 2003: 20-35.
- [6] KRALJ S, VIRGA E G. Universal fine structure of nematic hedgehogs [J]. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 2001, 34(4): 829-838.
- [7] 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.
- [8] AN D, WANG W, ZHANG P W. On equilibrium configurations of nematic liquid crystals droplet with anisotropic elastic energy [J]. *Research in the Mathematical Sciences*, 2017, 4(1): 7.
- [9] TOMAR V, HERNÁNDEZ S I, ABBOTT N L, *et al.* Morphological transitions in liquid crystal nanodroplets [J]. *Soft Matter*, 2012, 8(33): 8679-8689.
- [10] SONG P, GAO Y Z, WANG F F, *et al.* Studies on the electro-optical and the light-scattering properties of PDLC films with the size gradient of the LC droplets [J]. *Liquid Crystals*, 2015, 42(3): 390-396.
- [11] GENG Y, JANG J H, NOH K G, *et al.* Through the spherical looking-glass: asymmetry enables multicolored internal reflection in cholesteric liquid crystal shells [J]. *Advanced Optical Materials*, 2018, 6(1): 1700923.
- [12] SCHOPHOHL N, SLUCKIN T J. Hedgehog structure in nematic and magnetic systems [J]. *Journal de Physique*, 1988, 49(7): 1097-1101.
- [13] 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.
- [14] 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.
- [15] GUPTA J K, SIVAKUMAR S, CARUSO F, *et al.* Size-dependent ordering of liquid crystals observed in polymeric capsules with micrometer and smaller diameters [J]. *Angewandte Chemie International Edition*, 2009, 48(9): 1652-1655.
- [16] SIVAKUMAR S, GUPTA J K, ABBOTT N L, *et al.* Monodisperse emulsions through templating polyelectrolyte multilayer capsules [J]. *Chemistry of Materials*, 2008, 20(6): 2063-2065.
- [17] BACCHIOCCHI C, MIGLIOLI I, ARCIONI A, *et al.* Order and dynamics inside H-PDLC nanodroplets: an ESR spin probe study [J]. *Journal of Physical Chemistry B*, 2009, 113(16): 5391-5402.

- [18] PRISHCHEPA O O, SHABANOV A V, ZYRYANOV V Y. Director configurations in nematic droplets with inhomogeneous boundary conditions [J]. *Physical Review E*, 2005, 72(3): 031712.
- [19] DAVIDSON Z S, KANG L, JEONG J, *et al.* Chiral structures and defects of lyotropic chromonic liquid crystals induced by saddle-splay elasticity [J]. *Physical Review E*, 2015, 91(5): 050501(R).
- [20] ŽUMER S, KRALJ S. Influence of K_{24} on the structure of nematic liquid crystal droplets [J]. *Liquid Crystals*, 1992, 12(4): 613-624.
- [21] MKADDEM S, GARTLAND JR E C. Fine structure of defects in radial nematic droplets [J]. *Physical Review E*, 2000, 62(5): 6694-6705.
- [22] 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*, 2017, 23(3): 414-432.
- [23] ZHOU X, ZHANG Z D, ZHANG Q, *et al.* Order reconstruction in a nanoconfined nematic liquid crystal between two coaxial cylinders [J]. *Materials*, 2015, 8(12): 8072-8086.
- [24] ERICKSEN J L. Inequalities in liquid crystal theory [J]. *Physics of Fluids*, 1966, 9(6): 1205-1207.
- [25] BERIS A N, EDWARDS B J. *Thermodynamics of Flowing Systems: With Internal Microstructure* [M]. Oxford: Oxford University Press, 1994.
- [26] KRALJ S, ROSSO R, VIRGA E G. Finite-size effects on order reconstruction around nematic defects [J]. *Physical Review E*, 2010, 81(2): 021702.

作者简介:



刘宏恩 (1995—), 男, 河北邯郸人, 硕士, 2021 年于河北工业大学获得硕士学位, 主要从事液晶器件方面的研究。
E-mail: liuhongen1995@163.com



张志东 (1961—), 男, 山东蓬莱人, 博士, 教授, 1998 年于中国科学院长春物理研究所获得博士学位, 主要从事液晶器件方面的研究。E-mail: zhidong_zhang1961@163.com