

# ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ НА ОРИЕНТАЦИЮ ЖИДКОГО КРИСТАЛЛА В ЯЧЕЙКАХ С НЕОДНОРОДНЫМ РАСПРЕДЕЛЕНИЕМ ДИРЕКТОРА

*Е. В. Аксенова\**, *А. А. Каретников*, *Н. А. Каретников*, *А. П. Ковшик*,

*Е. И. Рюмцев*, *А. С. Сахацкий*, *А. В. Сванидзе*

*Санкт-Петербургский государственный университет  
199034, Санкт-Петербург, Россия*

Поступила в редакцию 6 ноября 2015 г.

Теоретически и экспериментально исследована переориентация нематического жидкого кристалла под действием электрического поля в ячейках с планарной геликоидальной и гомеопланарной структурой поля директора. Экспериментально получены зависимости электрической емкости таких систем от напряжения во внешнем электрическом поле ниже и выше порога Фредерикса. Эти же зависимости рассчитывались численно. При расчетах использовалось распределение директора в объеме при различных значениях напряжения, полученное путем прямой минимизации свободной энергии. Учтена неоднородность электрического поля внутри ячейки. Показано, что результаты расчетов согласуются с экспериментальными данными.

DOI: 10.7868/S0044451016050175

## 1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время продолжается поиск и создание новых типов устройств отображения информации на основе жидких кристаллов (ЖК). Важную роль для функционирования таких устройств играет переход Фредерикса — переориентация преимущественного направления молекул (директора) ЖК в ячейке под действием внешнего магнитного или электрического поля [1]. В зависимости от первоначального распределения директора в ячейке эффект может иметь пороговый или беспороговый характер [2,3]. Этот эффект изучался как в нематических жидких кристаллах (НЖК), так и в киральных жидких кристаллах [4]. Для последних конфигурация директора становится сложнее в связи с геликоидальной структурой вещества. Неоднородное распределение директора внутри ЖК приводит к неоднородности электрического поля [5], поэтому изучение распределения директора внутри ячеек существенно при описании перехода Фредерикса.

Переориентация директора под действием внешних полей сопровождается изменением электриче-

ской емкости исследуемых ячеек. Измерение электрической емкости жидкокристаллических ячеек при различных напряжениях позволяет регистрировать результаты воздействия электрического поля на распределение директора в исследуемом образце. Емкостной метод для изучения перехода Фредерикса в НЖК впервые был применен в работе [6]. В работе [7] этот метод был адаптирован для определения угла наклона молекул НЖК с однородной наклонной ориентацией во всем объеме. Емкостной метод на сегодняшний день активно используется для экспериментального исследования диэлектрических и магнитных свойств НЖК, допированных магнитными наночастицами [8–10].

Целью настоящей работы является теоретическое и экспериментальное исследование влияния электрического поля на структуру ЖК с неоднородным распределением тензора диэлектрической проницаемости. В работе при различных значениях электрического напряжения рассчитаны распределения директора в планарной  $90^\circ$  твист-ячейке и в гомеопланарной ЖК-ячейке, а также численно рассчитаны и экспериментально определены электрические емкости исследованных ячеек.

Работа построена следующим образом. В разд. 2 приведены основополагающие уравнения теории

\* E-mail: e.aksenova@spbu.ru

упругости ЖК. Раздел 3 посвящен рассмотрению различных геометрий ячейки и нахождению конфигураций директора в них. Приводятся результаты вычислений для планарной киральной и гомеопланарной НЖК-ячеек. В разд. 4 описывается конструкция ячеек, приведены экспериментально полученные зависимости электрической емкости от напряжения и их сравнение с численными расчетами. В последнем разделе обсуждаются результаты.

## 2. ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Нематический жидкий кристалл представляет собой одноосную жидкость. Макроскопическое состояние НЖК описывают с помощью задания в каждой точке единичного вектора  $\mathbf{n}(\mathbf{r})$ , называемого директором. В равновесном состоянии НЖК является однородным, неоднородные же распределения директора возникают в случае различных упругих деформаций жидкого кристалла.

Более сложным объектом является холестерический жидкий кристалл (ХЖК), который в равновесном состоянии обладает геликоидальной структурой. ХЖК легко представить как результат равномерной закрутки вокруг оси  $z$  нематика, у которого вектор директора  $\mathbf{n}$  ориентирован в одном направлении в плоскости  $(x, y)$ . Геликоидальная структура также образуется при помещении киральной добавки в нематическую матрицу. Описание киральных НЖК аналогично описанию ХЖК.

Рассмотрим ячейку ХЖК, которая представляет собой две плоскопараллельные пластины площадью  $S_{\perp}$  на расстоянии  $L$ ,  $\sqrt{S_{\perp}} \gg L$ . Пространство между пластинами заполнено жидким кристаллом. ЖК ориентирован таким образом, что ось спирали перпендикулярна плоскостям пластин. Ячейка помещается во внешнее электрическое поле  $\mathbf{E}$ , направленное вдоль оси спирали.

Введем декартову систему координат так, чтобы ось  $z$  также была направлена вдоль оси спирали. Будем считать, что жидкий кристалл заключен между плоскостями  $z = 0$  и  $z = L$ . В равновесном состоянии ХЖК директор  $\mathbf{n}(\mathbf{r})$  направлен перпендикулярно оси спирали (т.е. в нашей системе координат  $\mathbf{n} \perp z$ ). В каждой плоскости  $z = \text{const}$  система предполагается однородной, тогда  $\mathbf{n}(\mathbf{r}) = \mathbf{n}(z)$ .

Полная свободная энергия  $F_{tot}$  такой системы представляет собой сумму из трех слагаемых:

$$F_{tot} = F_e + F_f + F_{sf}. \quad (1)$$

Первый член является свободной энергией Франка, описывающей объемные деформации:

$$F_e = \frac{S_{\perp}}{2} \int_0^L [K_{11}(\text{div } \mathbf{n})^2 + K_{22}(\mathbf{n} \cdot \text{rot } \mathbf{n} + q_0)^2 + K_{33}(\mathbf{n} \times \text{rot } \mathbf{n})^2] dz, \quad (2)$$

где  $K_{11}, K_{22}, K_{33}$  — модули Франка,  $p_0 = 2\pi/q_0$  — шаг спирали (если  $a$  — характерный молекулярный размер системы, то  $p_0 \gg a$ ).

Второе слагаемое показывает вклад внешнего электрического поля:

$$F_f = - \int \frac{\mathbf{D} \cdot \mathbf{E}}{8\pi} dV, \quad (3)$$

где  $\mathbf{D} = \hat{\epsilon} \mathbf{E}$  — вектор электрической индукции,  $\epsilon_{\alpha\beta} = \epsilon_{\perp} \delta_{\alpha\beta} + \epsilon_a n_{\alpha} n_{\beta}$  — тензор диэлектрической проницаемости среды,  $\epsilon_a = \epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}$  — анизотропия диэлектрической проницаемости,  $\epsilon_{\perp}, \epsilon_{\parallel}$  — проницаемости соответственно вдоль и перпендикулярно направлению директора,  $\delta_{\alpha\beta}$  — символ Кронекера,  $\alpha, \beta = x, y, z$ ,  $V = S_{\perp} L$  — объем системы. Связь между  $z$ -компонентами векторов  $\mathbf{D}$  и  $\mathbf{E}$  для такой системы известна [11]:

$$E_z = \frac{D_z}{\epsilon_{zz}} = \frac{D_z}{\epsilon_{\perp} + \epsilon_a n_z^2(z)}. \quad (4)$$

Таким образом, неоднородность распределения ориентации директора содержится также в полевом члене суммы (1).

Третье слагаемое в уравнении (1) — это поверхностная энергия сцепления жидкого кристалла с подложками:

$$F_{sf} = \frac{S_{\perp}}{2} \sum_{j=1,2} w_j (\mathbf{n}(z_j), \mathbf{n}^{0(j)}), \quad (5)$$

где  $\mathbf{n}(z_j)$  ( $j = 1, 2$ , величины с индексами «1» и «2» относятся соответственно к нижней и верхней границам ячейки) — векторы директора на границах, векторы  $\mathbf{n}^{0(j)}$  описывают оси легкого ориентирования, а  $w_j$  — скалярные функции от двух единичных векторов. Эти функции принимают минимальное значение при  $\mathbf{n}(z_j) = \mathbf{n}^{0(j)}$ .

Для дальнейших вычислений удобно записать вектор  $\mathbf{n}$  в сферических координатах:

$$\mathbf{n}(z) = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta), \quad (6)$$

где полярный угол  $\theta$  и азимутальный угол  $\phi$  являются функциями  $z$ ,  $\theta = \theta(z)$  и  $\phi = \phi(z)$ . Угол  $\theta$  отсчитывается от оси  $z$ , угол  $\phi$  — от оси  $x$ .

Тогда выражение (2) принимает вид

$$F_e = \frac{V}{2} K_{22} q_0^2 + \frac{S_{\perp}}{2} \int_0^L \tilde{F}_e(\theta, \theta', \phi') dz = \\ = \frac{V}{2} K_{22} q_0^2 + \frac{S_{\perp}}{2} \times \\ \times \int_0^L [A(\theta)(\theta')^2 + B(\theta)(\phi')^2 - 2C(\theta)\phi'] dz, \quad (7)$$

где

$$A(\theta) = K_{11} \sin^2 \theta + K_{33} \cos^2 \theta, \quad (8)$$

$$B(\theta) = \sin^2 \theta (K_{22} \sin^2 \theta + K_{33} \cos^2 \theta), \quad (9)$$

$$C(\theta) = q_0 K_{22} \sin^2 \theta. \quad (10)$$

Вклад внешнего поля (3) примет вид

$$F_f = \frac{S_{\perp}}{2} \int_0^L \tilde{F}_f(\theta) dz = \\ = -\frac{S_{\perp}}{2} \int_0^L \frac{D_z^2}{4\pi(\varepsilon_{\perp} + \varepsilon_a \cos^2 \theta)} dz. \quad (11)$$

Для дальнейших расчетов и сравнения с экспериментальными данными удобно выразить вклад  $F_f$  через напряжение  $U$ , приложенное к верхней и нижней поверхностям жидкого кристалла:

$$U = \int_0^L E_z(z) dz = D_z \int_0^L (\varepsilon_{\perp} + \varepsilon_a \cos^2 \theta)^{-1} dz. \quad (12)$$

Поскольку  $\operatorname{div} \mathbf{D}(z) = 0$ , в этом уравнении  $z$ -компонента вектора  $\mathbf{D}$  не зависит от  $z$  и может быть вынесена за знак интеграла. Таким образом, полевой вклад записывается в виде [5]

$$F_f = -\frac{S_{\perp} U^2}{8\pi \int_0^L (\varepsilon_{\perp} + \varepsilon_a \cos^2 \theta)^{-1} dz}. \quad (13)$$

Минимизируя свободную энергию (1), можно получить конфигурацию директора для различных по конструкции ячеек.

Зная конфигурацию директора в объеме, несложно рассчитать емкость конденсатора. Пусть  $\sigma$  — поверхностная плотность заряда на положительной обкладке, тогда заряд на ней  $q = \sigma S_{\perp}$ . Напряженность поля внутри конденсатора  $E_z(z) = 4\pi\sigma/\varepsilon_{zz}(z)$  (это справедливо, так как  $\sqrt{S_{\perp}} \gg L$

и краевыми эффектами можно пренебречь). Для напряжения с учетом (12) и выражения для тензора диэлектрической проницаемости имеем

$$U = 4\pi\sigma \int_0^L \frac{dz}{\varepsilon_{zz}} = \frac{4\pi q}{S_{\perp}} \int_0^L \frac{dz}{\varepsilon_{\perp} + \varepsilon_a \cos^2 \theta}. \quad (14)$$

В результате электрическая емкость конденсатора равна

$$C = \frac{q}{U} = \frac{S_{\perp}}{4\pi \int_0^L (\varepsilon_{\perp} + \varepsilon_a \cos^2 \theta)^{-1} dz}. \quad (15)$$

### 3. КОНФИГУРАЦИЯ ДИРЕКТОРА

Как правило, конфигурацию вектора директора  $\mathbf{n}$  определяют, решая систему уравнений Эйлера – Лагранжа [3]. Сложности в решении уравнений Эйлера – Лагранжа возникают, если в системе имеется фазовый переход первого рода. В этом случае в уравнениях Эйлера – Лагранжа присутствуют точки бифуркаций. В нашей системе переход является непрерывным (второго рода), однако учет неоднородности электрического поля приводит к тому, что эти уравнения становятся интегродифференциальными. Поэтому вместо численного решения уравнений Эйлера – Лагранжа воспользуемся широко применяемым подходом, основанным на прямой минимизации функционала свободной энергии [12]. Обратим внимание, что решая уравнения Эйлера – Лагранжа, мы получаем экстремумы, и требуется дополнительный анализ для определения минимумов энергии, а в случае прямой минимизации этого не требуется.

Далее мы будем рассматривать два типа ячеек:  $90^\circ$ -твист-ячейку с киральным ЖК с планарной ориентацией директора на поверхностях и ячейку с нематическим ЖК с гомеопланарной ориентацией. Выше приведены формулы для расчета свободной энергии кирального жидкого кристалла, заключенного между двумя проводящими плоскостями, на которые подается различное напряжение, но они также верны и для обычного нематического кристалла (необходимо лишь в уравнениях (1), (7), (10) положить  $q_0 = 0$ ).

#### 3.1. Планарная твист-ячейка

В планарной твист-ячейке при отсутствии внешних воздействий директор направлен параллель-

но поверхности подложки (вектор  $\mathbf{n}$  перпендикулярен направлению оси  $z$ ). Для ячейки, исследуемой в настоящей работе, сцепление на границе можно считать жестким. Это означает, что поверхностная энергия велика по сравнению с объемной упругой энергией искажения жидкого кристалла (7) и вкладом от внешнего электрического поля (13). Заметим, что применяемый нами метод прямой минимизации позволяет учитывать конечную энергию сцепления с подложками. Влияние поверхностного сцепления с подложками на распределение директора изучено в работе [12]. Предложенный в этой работе подход позволяет учитывать разные формы потенциала поверхностного сцепления.

В случае жесткого сцепления направление директора на границе строго совпадает с направлением оси легкого ориентирования:  $\mathbf{n}(z_j) = \mathbf{n}^{0(j)}$ ,  $j = 1, 2$ . Поскольку внутри твист-ячейки директор поворачивается на  $90^\circ$ , шаг спирали равен  $4L$ .

Удобный метод минимизации свободной энергии такой системы подробно описан в работе [12]. Здесь мы изложим идею этого метода и приведем используемые уравнения.

Из первой вариации полной энергии

$$\delta F_{tot} = \frac{S_{\perp}}{2} \int_0^L \left( \frac{\partial \tilde{F}_e}{\partial \theta} \delta \theta + \frac{\partial \tilde{F}_e}{\partial \theta'} \delta \theta' + \frac{\partial \tilde{F}_e}{\partial \phi'} \delta \phi' + \frac{\partial \tilde{F}_f}{\partial \theta} \delta \theta \right) \quad (16)$$

после интегрирования по частям получаем уравнение Эйлера – Лагранжа:

$$A'(\theta) (\theta')^2 + 2A(\theta) \theta'' = B(\theta) (\phi')^2 - 2C'(\theta) \phi' + \tilde{F}'_f(\theta), \quad (17)$$

$$\frac{d}{dz} (B(\theta) \phi' - C(\theta)) = 0. \quad (18)$$

Используя уравнение (18), можно выразить угол закрутки  $\phi(z)$  через  $\theta(z)$ :

$$\phi(z) = -\frac{1}{2} \phi_{tot} + \int_0^z \frac{C(\theta)}{B(\theta)} dz + \frac{\phi_{tot} - I_2}{I_1} \int_0^z \frac{dz}{B(\theta)}, \quad (19)$$

где  $\phi_{tot} = \phi(L) - \phi(0)$ ,

$$I_1 = \int_0^L B^{-1}(\theta) dz, \quad I_2 = \int_0^L C(\theta) B^{-1}(\theta) dz.$$

Здесь граничные условия выбраны следующим образом:  $\phi(0) = -\phi_{tot}/2$ ,  $\phi(L) = \phi_{tot}/2$ .

Для полной энергии, описывающей состояние кирального ЖК в ячейке, получаем

$$F_{tot} = \frac{V}{2} K_{22} q_0^2 + \frac{S_{\perp}}{2} \times \int_0^L \left( A(\theta) (\theta')^2 - \frac{C^2(\theta)}{B(\theta)} + \tilde{F}_f(\theta) \right) dz + \frac{S_{\perp}}{2} \frac{(\phi_{tot} - I_2)^2}{I_1}. \quad (20)$$

Для нахождения минимума свободной энергии (20) разложим угол  $\theta(z)$  в ряд Фурье. С учетом граничных условий разложение будет представлено в виде ряда по синусам:

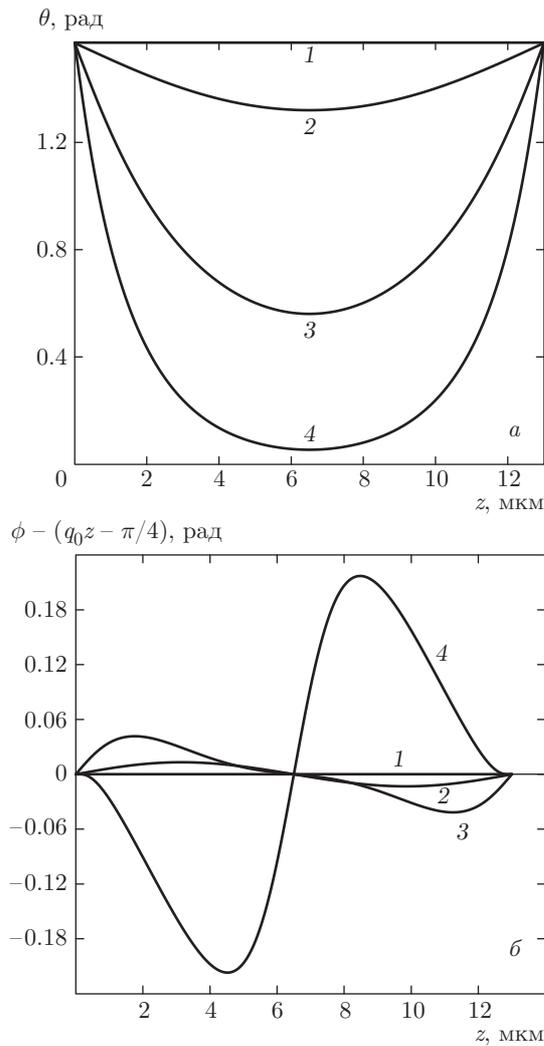
$$\theta(z) = \frac{\pi}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \sin \frac{\pi z}{L} (2n - 1). \quad (21)$$

Задача минимизации состоит в поиске коэффициентов этого ряда  $a_n$ .

Для поиска конфигурации директора использовался метод сопряженных градиентов. При расчетах мы учитывали первые 40 членов ряда (21). Коэффициенты ряда  $a_n$  достаточно быстро убывают с ростом  $n$ :  $a_1/a_5 \approx 10^4$ ,  $a_5/a_{10} \approx 10^3$ ,  $a_{10}/a_{15} \approx 10^3$ . В этом случае можно было бы рассматривать и меньшее количество членов ряда.

На рис. 1 приведены профили углов  $\theta(z)$  и  $\phi(z)$  при различных величинах внешнего электрического поля. Значение напряжения  $U = 1$  В не превышает  $U_c$  перехода Фредерикса и конфигурация директора соответствует конфигурации в отсутствие поля. При  $U = 1.15$  В уже наблюдается отличие от недеформированного состояния. Значение  $U = 1.6$  В соответствует напряжению значительно выше порога Фредерикса. Ориентация директора существенно отличается от недеформированной.  $U = 3$  В показывает сильную переориентацию, которая с дальнейшим увеличением поля заметно не меняется. При значениях напряжения, больших 6 В, предложенный метод расчета не позволял определить конфигурацию директора. Это связано с тем, что угол  $\theta$  становится близким к нулю во всей ячейке (кроме границ) и возникает неопределенность в значении угла  $\phi$ .

Используемая для расчетов ячейка кирального ЖК представляла собой ячейку, у которой на нижней грани  $\phi(0) = -\pi/4$ , а на верхней —  $\phi(L) = \pi/4$ . Равновесному состоянию в отсутствие поля тогда отвечает значение  $\phi = q_0 z - \pi/4$ . Отклонение  $\phi$  от этого значения невелико и для наглядности на рис. 1б построено именно отклонение.



**Рис. 1.** Зависимости углов  $\theta(z)$  (а) и  $\phi(z) - (q_0z - \pi/4)$  (б) для  $90^\circ$ -твист-ячейки кирального ЖК с жесткой планарной ориентацией директора на границах:  $\theta(0) = \theta(L) = \pi/2$ ,  $\phi(0) = -\pi/4$ ,  $\phi(L) = \pi/4$ . Кривые построены для различных напряжений  $U = 1$  (1), 1.15 (2), 1.6 (3), 3 (4) В. Толщина ячейки  $L = 13$  мкм; площадь поверхности подложки  $S_\perp = 11$  см<sup>2</sup>; диэлектрические проницаемости  $\epsilon_\perp = 6.95$ ,  $\epsilon_\parallel = 19.23$ ; значения модулей Франка для ЖК-1466:  $K_{11} = 1.1 \cdot 10^{-6}$  дин,  $K_{22} = 0.38 \cdot 10^{-6}$  дин,  $K_{33} = 0.99K_{11}$

### 3.2. Гомеопланарная ячейка НЖК

Направим ось  $z$ , как и ранее, а ось  $x$  — вдоль большей стороны прямоугольника, образованного нижней поверхностью ячейки. В гомеопланарной ячейке будем считать, что на нижней грани ( $z = 0$ ) директор ориентирован поверхностным веществом по нормали к ней. Это сцепление в общем случае является нежестким. На верхней грани ( $z = L$ ) сцепле-

ние жесткое, директор расположен в плоскости поверхности и параллелен оси  $x$ . В рассматриваемом жидком кристалле не присутствует никаких киральных добавок, т. е. будем считать, что постепенный переход конфигурации вектора директора из ориентации на нижней грани в ориентацию на верхней грани происходит в плоскостях, параллельных  $xz$ -плоскости. Для такой ячейки угол  $\phi$  фиксирован ( $\phi = 0$ ) и представление директора в сферических координатах принимает вид

$$\mathbf{n} = (\sin \theta(z), 0, \cos \theta(z)). \quad (22)$$

Для начала рассмотрим случай жесткого сцепления на обеих гранях, тогда для угла  $\theta$  на границах строго выполняются равенства

$$\theta(0) = 0, \quad \theta(L) = \frac{\pi}{2}. \quad (23)$$

Свободная энергия ЖК для этой системы в отсутствие внешнего поля переписывается следующим образом:

$$F_{tot} = \frac{S_\perp}{2} \int_0^L A(\theta)(\theta')^2 dz. \quad (24)$$

Соответствующее уравнение Эйлера – Лагранжа имеет вид

$$A'(\theta)(\theta')^2 + 2A(\theta)\theta'' = 0. \quad (25)$$

Домножая на  $\theta' \neq 0$ , можно выделить полную производную

$$\begin{aligned} \frac{d}{dz} (A(\theta)(\theta')^2) &= \\ &= \frac{d}{dz} (K_{11} \sin^2 \theta + K_{33} \cos^2 \theta) (\theta')^2 = 0. \end{aligned} \quad (26)$$

Отсюда можно получить выражение для угла  $\theta$  в следующем виде:

$$\int \sqrt{K_{11} \sin^2 \theta + K_{33} \cos^2 \theta} d\theta = C_1 z + C_2. \quad (27)$$

Константы  $C_1$  и  $C_2$  определяются из граничных условий (23):

$$\begin{aligned} C_2 &= 0, \\ C_1 &= \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi/2} \sqrt{K_{11} \sin^2 \theta + K_{33} \cos^2 \theta} d\theta. \end{aligned} \quad (28)$$

Выражение (27) представляет собой зависимость  $z(\theta)$  и неудобно для определения конфигурации директора  $\theta(z)$ .

В случае одноконстантного приближения выражение (27) упрощается и позволяет определить зависимость  $\theta(z)$  в явном виде. В этом приближении  $K_{11} = K_{33} = \bar{K}$ , и с учетом граничных условий (23) для угла  $\theta$  легко находится решение  $\theta(z) = \pi z/2L$ .

Далее будем считать, что на верхней поверхности сцепление остается жестким, а на нижней — нежестким. Перепишем поверхностную энергию сцепления, используя аналог потенциала Рапини–Популара, выраженного через угол  $\theta$ . Простейшее приближение в гауссовой форме для поверхностной энергии на нижней грани имеет вид

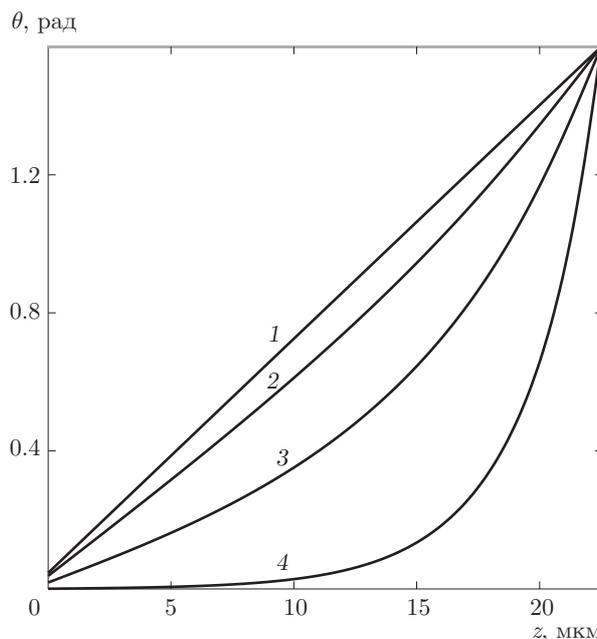
$$w_1(\mathbf{n}(0), \mathbf{n}^{0(1)}) = W_\theta^{(1)}(\theta - \theta_0^{(1)})^2, \quad (29)$$

где  $W_\theta^{(1)}$  — энергия сцепления; верхний индекс, как и ранее, показывает отношение этой константы к нижней грани ячейки;  $\theta_0^{(1)}$  задает направление оси легкого ориентирования на нижней поверхности,  $\theta_0^{(1)} = 0$ .

Заметим, что существуют различные представления для потенциала поверхностного сцепления. Кроме широко используемого представления Рапини–Популара, также применяется  $B$ -потенциал [13]. Показано, что  $B$ -потенциал лучше описывает поверхностное сцепление в первых зонах клина Гранжана–Кано [14]. Обратим внимание, что эти потенциалы ведут себя по-разному при больших отклонениях от оси легкого ориентирования. В нашей же работе отклонение от вертикальной оси мало и с ростом внешнего поля лишь уменьшается. Тогда выбор вида потенциала в гауссовой форме Рапини–Популара или  $B$ -потенциала не играет важной роли. В случае использования  $B$ -потенциала значение электрической емкости будет отличаться от значения, рассчитанного с помощью потенциала Рапини–Популара, в пределах одного процента. Это отличие связано с незначительной разницей влияния вида потенциала на распределение директора вблизи поверхности.

При включении внешнего поля конфигурация директора изменяется и таким простым аналитическим способом ее не найти. Для определения нового распределения вектора директора в зависимости от  $z$ -координаты путем минимизации полной энергии ЖК во внешнем поле использовался метод конечных разностей. Полная энергия для этой системы выражается следующим образом:

$$F_{tot} = \frac{S_\perp}{2} \int_0^L \left[ A(\theta(z))(\theta'(z))^2 + \tilde{F}_f(\theta(z)) \right] dz + \frac{S_\perp}{2} W_\theta^{(1)} \theta^2(0). \quad (30)$$



**Рис. 2.** Зависимости угла  $\theta(z)$  для ячейки НЖК с го-меопланарной ориентацией на границах. На нижней грани ячейки ( $z = 0$ ) директор ориентирован по нормали к поверхности, сцепление считается нежестким, энергия сцепления  $W_\theta^{(1)} = 1.6 \cdot 10^{-2}$  эрг/см<sup>2</sup>. На верхней грани ( $z = L$ ) ориентация директора планарная, сцепление считается жестким. Кривые построены для различных напряжений  $U = 0$  (1), 0.5 (2), 1 (3), 2.5 (4) В. Толщина ячейки  $L = 22.5$  мкм; диэлектрические проницаемости и значения модулей Франка такие же, как на рис. 1

Строилась сетка величин  $\theta_i = \theta(iL/2N)$ ,  $i = 0, 1, \dots, 2N - 1$ , где  $N$  — целое число,  $\theta_{2N} = \pi/2$ . Тогда задача сводится к поиску  $\theta_i$ . Минимизация полной энергии проводилась методом сопряженных градиентов с  $N = 50$ . Полученная зависимость  $\theta(z)$  для различных по величине полей приведена на рис. 2. Заметим, что в отсутствие внешнего поля зависимость  $\theta(z)$  практически линейная. Отклонение  $\theta(0)$  от нулевого значения связано с наличием конечной энергии сцепления с поверхностью.

## 4. РЕЗУЛЬТАТЫ ЭКСПЕРИМЕНТА

### 4.1. Конструкция жидкокристаллических ячеек

Экспериментальные ячейки состояли из двух стеклянных пластин площадью 10.2 см<sup>2</sup> для го-меопланарной ячейки и 10.1 см<sup>2</sup> для планарной твист-ячейки с нанесенными на них прозрачными токопроводящими электродами. Для создания пла-

нарной ориентации ЖК на поверхность электродов наносилось полиимидное покрытие, которое затем натиралось хлопковой тканью. В этом случае сцепление ЖК с поверхностью можно считать жестким [15,16]. В конце этого раздела мы приведем оценки для величины энергии сцепления. Гомеотропная ориентация создавалась с использованием раствора стеарилхлорида хрома в изопропиловом спирте. По литературным данным энергия сцепления ЖК с таким ориентантом составляет  $W_\theta^{(1)} = 1.6 \cdot 10^{-2}$  эрг/см<sup>2</sup> [17].

Толщина слоя ЖК в ячейках задавалась с помощью тефлоновых спейсеров. Для твист-ячейки толщина слоя ЖК составляла 13.0 мкм. Ячейка заполнялась киральной жидкокристаллической смесью, состоящей из ЖК-1466 (НИОПИК) и активной добавки ВИХ-3 (Вильнюсский госуниверситет, Литва). Естественный шаг спирали смеси составлял  $p_0 = 56$  мкм. При заданной толщине слоя директор жидкого кристалла совершал поворот на 90° при переходе от одной подложки к другой. Обратим внимание, что условия для изменения ориентации директора на такой угол не оптимальны, шаг спирали директора отличается от естественного шага спирали. Это приводит к тому, что в свободной энергии Франка (2) появляется дополнительное постоянное слагаемое, что никак не повлияет на результат минимизации энергии. Толщина слоя ЖК в гомеопланарной ячейке составляла 22.5 мкм. Модули упругости ЖК-1466 равны  $K_{11} = 1.1 \cdot 10^{-6}$  дин,  $K_{22} = 0.38 \cdot 10^{-6}$  дин,  $K_{33} = 0.99K_{11}$ .

Диэлектрические проницаемости  $\epsilon_\perp$  и  $\epsilon_\parallel$  измерялись в плоском титановом конденсаторе (расстояние между электродами 250 мкм) в диапазоне частот 500 Гц–1 МГц с использованием измерителя полного импеданса Hioki 3532 при температуре 20 °С. Необходимая макроскопическая однородная ориентация жидкого кристалла создавалась магнитным полем напряженностью 5000 Э. Были получены значения  $\epsilon_\perp = 7.12$ ,  $\epsilon_\parallel = 19.41$  на частоте 1 кГц и  $\epsilon_\perp = 6.95$ ,  $\epsilon_\parallel = 19.23$  на частоте 10 кГц.

#### 4.2. Сравнение экспериментальной зависимости емкости от напряжения с результатами численного расчета

Экспериментальные ячейки представляют собой плоский конденсатор, заполненный слоем ЖК. Зависимость электрической емкости ячеек от напряжения была получена с помощью измерителя полного импеданса Hioki 3532, а также диэлектрического спектрометра Novocontrol Vds 80 на частотах 1 кГц и 10 кГц.

Таблица

$W_\theta^{(2)}$ , эрг/см <sup>2</sup>	$10^{-2}$	$5 \cdot 10^{-2}$	$10^{-1}$	$5 \cdot 10^{-1}$	$\infty$
$\Delta$ , %	9.78	4.46	3.70	3.12	2.97

При включении внешнего электрического поля происходит искажение ориентации директора. Вследствие этого электрическое поле внутри ЖК становится неоднородным. Как показано в разд. 3, в случае планарной твист-ячейки ЖК для изменения конфигурации  $\mathbf{n}$  необходимо напряжение  $U > U_c$ , в случае же гомеопланарной ячейки ЖК это изменение происходит беспороговым образом.

Теоретические и экспериментальные зависимости емкости ячеек от приложенного электрического напряжения приведены на рис. 3, 4.

Для 90°-твист-ячейки (рис. 3) наблюдается хорошее совпадение результатов расчетов и экспериментальных данных. Совпадают значения емкостей ниже порога Фредерикса, значение порога Фредерикса  $U_c \approx 1.1$  В и зависимость емкости ячейки от напряжения выше порога Фредерикса. Заметим, что ниже порога Фредерикса выражение для емкости имеет простой вид:

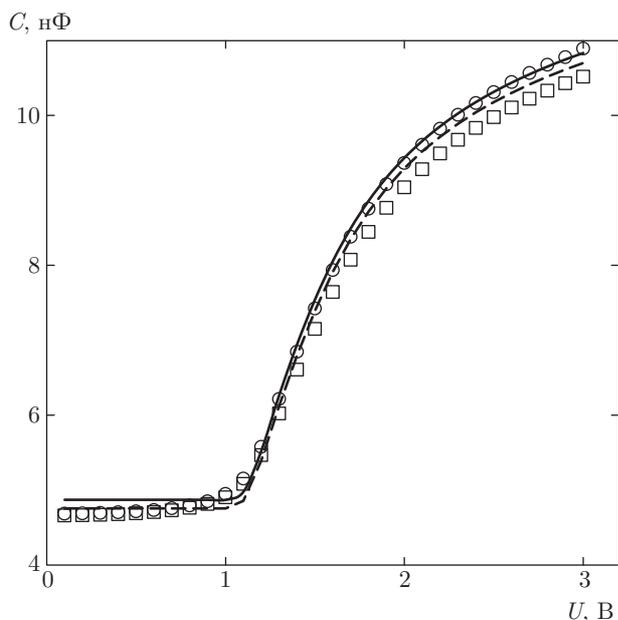
$$C_0 = \frac{\epsilon_\perp S_\perp}{4\pi L}. \quad (31)$$

Эта емкость на частоте поля 10 кГц в системе СИ равна  $C_0 = 4.76 \cdot 10^{-9}$  Ф. Полученное значение согласуется с экспериментальными данными  $C_0 = 4.7 \times 10^{-9}$  Ф (рис. 3).

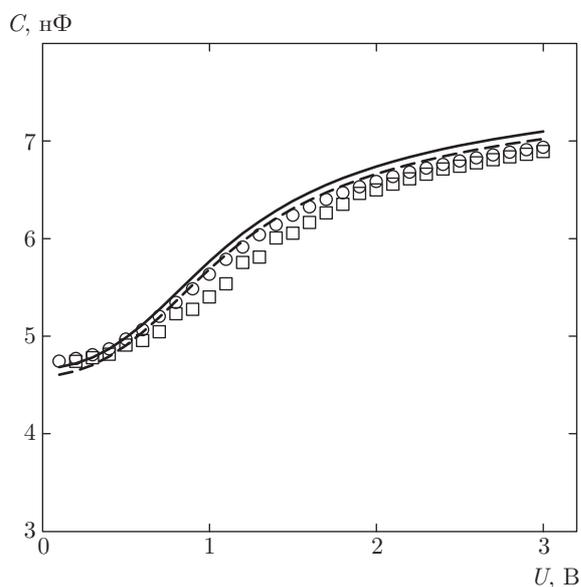
Для гомеопланарной ячейки видно хорошее совпадение экспериментальных данных и результатов численных расчетов (рис. 4). Заметим, что переход носит беспороговый характер.

Предложенный метод расчета может быть также использован для определения одной из характеристик ЖК-ячейки, таких как модуль Франка, диэлектрическая проницаемость, энергия сцепления с подложкой. Если один из этих параметров неизвестен, то, варьируя его, можно добиться наилучшего совпадения результатов расчета с экспериментальными данными. Поскольку обычно модули Франка и диэлектрические проницаемости известны, предложенный метод стоит применять для оценки энергии сцепления с подложкой.

В литературе можно найти разные значения энергии сцепления в зависимости от типов полиимидов и жидких кристаллов [18,19]. Сцепление с подложкой считается жестким при значениях энергии



**Рис. 3.** Зависимости электрической емкости  $90^\circ$ -твист-ячейки кирального ЖК с жесткой планарной ориентацией от приложенного напряжения. Экспериментальные данные на частоте измерений 1 кГц ( $\circ$ ), 10 кГц ( $\square$ ). Результаты численных расчетов емкости для 1 кГц (сплошная линия), 10 кГц (штриховая линия). Площадь поверхности подложки  $S_{\perp} = 10.1 \text{ см}^2$ . Все остальные константы совпадают с используемыми для рис. 1



**Рис. 4.** Зависимости электрической емкости гомеопланарной ячейки НЖК от приложенного напряжения. Экспериментальные данные на частоте измерений 1 кГц ( $\circ$ ), 10 кГц ( $\square$ ). Результаты численных расчетов емкости для 1 кГц (сплошная линия), 10 кГц (штриховая линия). Площадь поверхности подложки  $S_{\perp} = 10.2 \text{ см}^2$ . Все остальные константы совпадают с используемыми для рис. 2

сцепления больше  $10^{-2}$  эрг/см<sup>2</sup>. Мы провели расчеты для различных значений энергии сцепления для планарной ориентации  $W_{\theta}^{(2)}$  в гомеопланарной ячейке, используя гауссову форму для потенциала Раппини – Популара (29). В таблице приведено относительное среднеквадратичное отклонение  $\Delta$  результатов расчетов электрической емкости от результатов эксперимента для различных значений энергии сцепления.

Из таблицы видно, что наилучшее совпадение с экспериментальными данными получено для жесткого сцепления. Таким образом, для планарной ориентации в рассматриваемых ячейках сцепление действительно можно считать жестким. Заметное отличие относительного среднеквадратичного отклонения наступает при величине сцепления менее  $5 \cdot 10^{-2}$  эрг/см<sup>2</sup>. Если величина энергии сцепления меньше этого значения, то при расчетах следует учитывать вклад энергии сцепления.

### 5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе исследовалось поведение жидкокристаллических систем во внешнем электрическом поле. Путем прямой минимизации свободной энергии ЖК численно рассчитаны зависимости  $\theta(z)$  и  $\phi(z)$ , определяющие ориентацию директора, при различных значениях напряжения для гомеопланарной ячейки и планарной  $90^\circ$ -твист-ячейки НЖК. Экспериментально и теоретически получены зависимости емкости различных ячеек от приложенного напряжения. В настоящей работе был применен метод минимизации энергии, предложенный в [12]. Видно, что результаты расчетов хорошо согласуются с данными экспериментов.

Используя данный метод, мы оценили энергию сцепления на грани с планарной ориентацией директора. Однако рассчитанная нами электрическая емкость является интегральной характеристикой ячейки. Данный метод не позволяет определять локальные характеристики системы. Например, нельзя подтвердить рассчитанное распределение директора в объеме. Согласие теории и эксперимента для электрической емкости лишь косвенно подтверждает распределение директора.

Заметим, что предложенный метод может применяться практически для любых других ЖК-ячеек, поскольку для определения конфигурации необходима лишь свободная энергия. Этот метод является удобным для изучения перехода Фредерикса, причем в присутствии как электричес-

кого поля, так и магнитного. Например, его можно адаптировать для изучения системы термотропного НЖК, допированного ферромагнитными сферическими наночастицами и нанотрубками [8], путем добавления к энергии членов, связанных с взаимодействием поверхности наночастиц и молекул ЖК.

Работа поддержана грантами СПбГУ 11.37.145.2014, 11.37.161.2014 и частично РФФИ (грант № 15-03-09316 А).

## ЛИТЕРАТУРА

1. S.-T. Wu and D.-K. Yang, *Fundamentals of Liquid Crystal Devices*, Wiley Series in Display Technology, John Wiley & Sons, Chichester (2006).
2. P.-G. de Gennes and J. Prost, *The Physics of Liquid Crystals*, Int. Series of Monographs on Physics, Clarendon Press, Oxford (1993).
3. I. W. Stewart, *The Static and Dynamic Continuum Theory of Liquid Crystals: A Mathematical Introduction*, Liquid Crystals Book Ser., Taylor & Francis, London (2004).
4. Л. М. Блинов, *Жидкие кристаллы: структура и свойства*, URSS, Москва (2015) [L. M. Blinov, *Structure and Properties of Liquid Crystals*, Springer, Dordrecht (2011)].
5. H. J. Deluling, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **19**, 123 (1972).
6. D. Meyerhofer, *Phys. Lett. A* **51**, 407 (1975).
7. D. Meyerhofer, *Appl. Phys. Lett.* **29**, 691 (1976).
8. T. Tóth-Katona, P. Salamon, N. Éber et al., *J. Magn. Magn. Mater.* **372**, 117 (2014).
9. N. Tomašovičová, Z. Mitróová, M. Koneracká et al., *Phys. Rev. E* **87**, 014501 (2013).
10. P. Korčanský, N. Tomašovičová, M. Koneracká et al., *J. Magn. Magn. Mater.* **322**, 3696 (2010).
11. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Электродинамика сплошных сред*, Физматлит, Москва (2003).
12. A. Yu. Val'kov, E. V. Aksenova, and V. P. Romanov, *Phys. Rev. E* **87**, 022508 (2013).
13. В. А. Беляков, Е. И. Кац, *ЖЭТФ* **118**, 560 (2000) [V. A. Belyakov and E. I. Kats, *JETP* **91**, 488 (2000)].
14. K. Nowicka, D. Dardas, W. Kuczyński, V. A. Belyakov, and D. V. Shmeliova, *Liq. Cryst.* **41**, 1448 (2014).
15. Y. Choi, H. Yokoyama, and J. S. Gwag, *Opt. Express* **21**, 121135 (2013).
16. D.-S. Seo, Ya. Limura, and S. Kobayashi, *Appl. Phys. Lett.* **61**, 234 (1992).
17. Л. М. Блинов, Д. З. Раджабов, Д. Б. Собачюс, С. В. Яблонский, *ЖЭТФ* **53**, 223 (1991).
18. D. Subacius, V. M. Pergamenschik, and O. D. Lavrentovich, *Appl. Phys. Lett.* **67**, 214 (1995).
19. Sh.-J. Hwang, Sh.-Ch. Jeng, and I.-M. Hsieh, *Opt. Express* **18**, 16507 (2010).