

УДК 532.783

Ю. А. Еникеев, Н. Г. Мигранов

**РЕЛАКСАЦИОННЫЕ МЕХАНИЗМЫ ПРОСТРАНСТВЕННО-
ПЕРИОДИЧЕСКИХ СТРУКТУР В ГОМЕОТРОПНОМ НЕМАТИКЕ**

**RELAXATION MECHANISMS OF SPATIAL-PERIODIC STRUCTURES
IN HOMEOTROPIC NEMATIC**

Башкирский государственный педагогический университет им. М. Акмуллы,
кафедра общей и теоретической физики.
450000 Уфа, ул. Октябрьской революции, 3а, корпус 2

Предложена модель, описывающая искажение структуры директора, возникающего в трехмерной ячейке нематического жидкого кристалла (НЖК) во внешнем электрическом поле и релаксацию этого искажения при резком выключении внешнего электрического поля. Представленная математическая модель поведения НЖК учитывает как объемные, так и его поверхностные свойства.

Ключевые слова: нематический жидкий кристалл, искажающее поле, релаксация вызванной деформации, объемная вязкость, поверхностная вязкость.

The model describing the director structure distortion appearing in the three-dimensional cell of nematic liquid crystal (NLC) in the external electric field and the relaxation of this distortion at sharp switching off of the external electric field was suggested in this work. This mathematical model of NLC behavior takes into account both bulky and its surface properties.

Key words: nematic liquid crystal, distorting field, relaxation of an imposed deformation, bulk viscosity, surface viscosity.

Динамическое описание деформаций, вызванных внешним полем в нематическом образце, или иными словами, релаксации вызванной деформации, когда искажающее поле выключается – фундаментально важная задача для технологии ЖК-дисплеев [1]. Данная работа посвящена рассмотрению деформации поля директора во внешних электрических полях и процесса релаксации этой деформации при мгновенном выключении искажающего поля. Математическая модель включает объемные и граничные условия для НЖК.

Рассмотрим образец в виде ячейки длиной a шириной b , толщиной c . Для описания модели используется декартова система координат, ограничивающие поверхности, находящимся на $x = \pm a/2$, $y = \pm b/2$, $z = \pm c/2$. Как предполагается, в нематике возникают деформации только продольного и поперечного изгиба, и находятся в плоскости, обозначаемой (yz) [2]. Угол, между директором нематика и осью z , так называемый угол наклона, обозначен как φ . В данной постановке задачи $\varphi = \varphi(x, y, z)$. Искажение нематика минимизирует полную энергию на единицу поверхности, представленную в виде

$$F(\varphi(z)) = \int_{-a/2}^{a/2} \int_{-b/2}^{b/2} \int_{-c/2}^{c/2} f\left(\varphi, \frac{d\varphi}{dx}, \frac{d\varphi}{dy}, \frac{d\varphi}{dz}; x, y, z\right) dx dy dz + \sum_{i=1}^6 g_i(\varphi_i), \quad (1)$$

где $\varphi_1 = \varphi(-a/2)$, $\varphi_2 = \varphi(a/2)$, $\varphi_3 = \varphi(-b/2)$, $\varphi_4 = \varphi(b/2)$, $\varphi_5 = \varphi(-c/2)$, $\varphi_6 = \varphi(c/2)$. В уравнении (1) $f(\varphi, d\varphi/dx, d\varphi/dy, d\varphi/dz; x, y, z)$ – плотность объемной энергии, содержащая слагаемые, описывающие энергию взаимодействия НЖК с искажающим полем и упругую энергию Франка. Другие слагаемые, обозначенные $g_1(\varphi_1) \dots g_6(\varphi_6)$, описывают поверхностный вклад в полную энергию. В дальнейшем, ограничим рассуждения симметричным случаем: $g_1 = g_2$, $g_3 = g_4$, $g_5 = g_6$ и, следовательно, $\varphi(x, y, z) = \varphi(-x, -y, -z)$. Тогда достаточно рассмотреть задачу при $-a/2 \leq x \leq 0$, $-b/2 \leq y \leq 0$, $-c/2 \leq z \leq 0$.

Тогда условием минимума энергии будет

$$\frac{\partial f}{\partial \varphi} - \frac{d}{dx} \frac{\partial f}{\partial (d\varphi/dx)} - \frac{d}{dy} \frac{\partial f}{\partial (d\varphi/dy)} - \frac{d}{dz} \frac{\partial f}{\partial (d\varphi/dz)} = 0 \quad (2)$$

С граничными условиями [3]

$$\left(-\frac{\partial f}{\partial (d\varphi/dx)} + \frac{dg_1}{d\varphi_1} \right) \Big|_{x=-\frac{a}{2}} = 0 \quad (3a)$$

$$\left(-\frac{\partial f}{\partial (d\varphi/dy)} + \frac{dg_3}{d\varphi_3} \right) \Big|_{y=-\frac{b}{2}} = 0 \quad (3b)$$

$$\left(-\frac{\partial f}{\partial (d\varphi/dz)} + \frac{dg_5}{d\varphi_5} \right) \Big|_{z=-\frac{c}{2}} = 0 \quad (3c)$$

Так как стабильное состояние нематика минимизирует эту энергию, то угол наклона $\varphi = \varphi(x, y, z)$, описывающий установившуюся деформацию, находится из решения уравнения (2) с заданными граничными условиями вида (3a – 3c).

Таким образом, динамическая задача сводится к решению следующего уравнения НЖК, описывающего релаксацию деформации в объеме

$$\frac{\partial f}{\partial \varphi} - \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial f}{\partial (d\varphi/dx)} - \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial f}{\partial (d\varphi/dy)} - \frac{\partial}{\partial z} \frac{\partial f}{\partial (d\varphi/dz)} + \eta_b \frac{\partial \varphi}{\partial t} = 0 \quad (4)$$

с соответствующими граничными условиями [1]

$$\left(-\frac{\partial f}{\partial (d\varphi/dx)} + \frac{dg_1}{d\varphi_1} - \eta_{sx} \frac{\partial \varphi}{\partial t} \right) \Big|_{x=-\frac{a}{2}} = 0 \quad (5a)$$

$$\left(-\frac{\partial f}{\partial (d\varphi/dy)} + \frac{dg_3}{d\varphi_3} - \eta_{sy} \frac{\partial \varphi}{\partial t} \right) \Big|_{y=-\frac{b}{2}} = 0 \quad (5b)$$

$$\left(-\frac{\partial f}{\partial (d\varphi/dz)} + \frac{dg_5}{d\varphi_5} - \eta_{sz} \frac{\partial \varphi}{\partial t} \right) \Big|_{z=-\frac{c}{2}} = 0 \quad (5c)$$

Исследуем картину возникающих искажений, вызванную внешним электрическим полем, а также его релаксацию, когда это поле выключается.

Вид возникающей деформации

Рассмотрим случай, когда НЖК имеет гомеотропно ориентированные в пространстве молекулы в отсутствие внешнего поля. Диэлектрическая анизотропия ε_a' предполагается отрицательной, то есть электрическое поле, параллельное оси Oz может искажать первоначальную гомеотропную ориентацию. Далее рассмотрим случай доно-константного приближения, которое является общепринятым приближением для качественной оценки результатов и значительно упрощает решаемые уравнения. При наличии внешнего электрического поля объемная плотность энергии равна

$$f = \frac{1}{2}k\left(\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right)^2 + \frac{1}{2}k\left(\frac{\partial\varphi}{\partial y}\right)^2 + \frac{1}{2}k\left(\frac{\partial\varphi}{\partial z}\right)^2 - \frac{\varepsilon_a' E^2}{8\pi} \cos^2(\varphi), \quad (6)$$

А поверхностная энергия имеет вид потенциала Рапини [4]

$$g_1 = g_x = -\frac{w_x}{2} \cos^2(\varphi). \quad (7a)$$

$$g_3 = g_y = -\frac{w_y}{2} \cos^2(\varphi). \quad (7b)$$

$$g_5 = g_z = -\frac{w_z}{2} \cos^2(\varphi). \quad (7c)$$

Рассмотрим деформацию, вызванную постоянным электрическим полем. Обозначим угол наклона директора НЖК к нормали ячейки через $\varphi = \varphi_0$, который можно найти из следующего уравнения

$$k \frac{\partial^2 \varphi_0}{\partial x^2} + k \frac{\partial^2 \varphi_0}{\partial y^2} + k \frac{\partial^2 \varphi_0}{\partial z^2} + \frac{1}{8\pi} \varepsilon_a E^2 \sin(2\varphi_0) = 0, \quad (8)$$

где $\varepsilon_a = -\varepsilon_a' = |\varepsilon_a'|$, со следующими граничными условиями

$$\left(-k \frac{\partial \varphi_0}{\partial x} + \frac{1}{2} w_x \sin(2\varphi_0) \right) \Big|_{x=-\frac{a}{2}} = 0, \quad (9a)$$

$$\left(-k \frac{\partial \varphi_0}{\partial y} + \frac{1}{2} w_y \sin(2\varphi_0) \right) \Big|_{y=-\frac{b}{2}} = 0, \quad (9b)$$

$$\left(-k \frac{\partial \varphi_0}{\partial z} + \frac{1}{2} w_z \sin(2\varphi_0) \right) \Big|_{z=-\frac{c}{2}} = 0, \quad (9c)$$

Рассмотрим случай малой деформации, т. е. положим $\sin(\varphi_0) \approx \varphi_0$. Тогда уравнение (8) примет вид

$$k \frac{\partial^2 \varphi_0}{\partial x^2} + k \frac{\partial^2 \varphi_0}{\partial y^2} + k \frac{\partial^2 \varphi_0}{\partial z^2} + \frac{1}{4\pi} \varepsilon_a E^2 \varphi_0 = 0 \quad (10)$$

а граничные условия (9a-с) станут

$$\left(-k \frac{\partial \varphi_0}{\partial x} + w_x \varphi_0 \right) \Big|_{x=-\frac{a}{2}} = 0, \quad (11a)$$

$$\left(-k \frac{\partial \varphi_0}{\partial y} + w_y \varphi_0 \right) \Big|_{y=-\frac{b}{2}} = 0, \quad (11b)$$



$$\left(-k \frac{\partial \varphi_0}{\partial z} + w_z \varphi_0 \right)_{z=-\frac{c}{2}} = 0, \quad (11c)$$

Перепишем уравнения (10) и (11a-с) в безразмерных переменных. Примем $k = k'k_0$, $x = x'a$, $y = y'b$, $z = z'c$, $E = E'E_0$, $w_x = w'_x w_0$, $w_y = w'_y w_0$, $w_z = w'_z w_0$, тогда (10) примет вид

$$\frac{1}{a^2} \frac{d^2 \varphi_0}{dx'^2} + \frac{1}{b^2} \frac{d^2 \varphi_0}{dy'^2} + \frac{1}{c^2} \frac{d^2 \varphi_0}{dz'^2} + \frac{\varepsilon_a E_0^2 E'^2}{4\pi k' k_0} \varphi_0 = 0, \quad (10a)$$

Перейдем к новым координатам: $X' = x'a/c$, $Y' = y'b/c$, $Z' = z'$.

Тогда (10a) переписывается в виде

$$\frac{d^2 \varphi_0}{dX'^2} + \frac{d^2 \varphi_0}{dY'^2} + \frac{d^2 \varphi_0}{dZ'^2} + \frac{\varepsilon_a E_0^2 E'^2 c^2}{4\pi k' k_0} \varphi_0 = 0, \quad (10b)$$

Значения E_0 , k_0 и c подберем так, чтобы $\frac{E_0^2 c^2}{4\pi k_0} = 1$. Значение w_0 примем равным 10^{-4} Дж/м² = 0,1 эрг/см² [5]. В дальнейшем положим $c = 0,01$ см, а $k_0 = 10^{-6}$ дин, тогда $E_0 = \frac{\sqrt{4\pi k_0}}{a} = \frac{\sqrt{\pi}}{5} \approx 0,3545$ единиц СГС или $\approx 106,3$ В/см. Уравнение (10b) переписывается в этом случае и станет таким

$$\frac{d^2 \varphi_0}{dX'^2} + \frac{d^2 \varphi_0}{dY'^2} + \frac{d^2 \varphi_0}{dZ'^2} + \frac{\varepsilon_a E'^2}{k'} \varphi_0 = 0, \quad (10c)$$

Граничные условия (11a-с) перейдут в следующие

$$\left(-\frac{d\varphi_0}{dX'} + \frac{w'_x w_0 a}{k' k_0} \varphi_0 \right) \Big|_{X'=-\frac{1}{2}} = 0,$$

$$\left(-\frac{d\varphi_0}{dY'} + \frac{w'_y w_0 a}{k' k_0} \varphi_0 \right) \Big|_{Y'=-\frac{1}{2}} = 0,$$

$$\left(-\frac{d\varphi_0}{dZ'} + \frac{w'_z w_0 a}{k' k_0} \varphi_0 \right) \Big|_{Z'=-\frac{1}{2}} = 0,$$

Учитывая, что $\frac{w_0 c}{k_0} = 1000$, переписем последние выражения в виде

$$\left(-\frac{d\varphi_0}{dX'} + \frac{1000 w'_x}{k'} \varphi_0 \right) \Big|_{X'=-\frac{1}{2}} = 0, \quad (12a)$$

$$\left(-\frac{d\varphi_0}{dY'} + \frac{1000 w'_y}{k'} \varphi_0 \right) \Big|_{Y'=-\frac{1}{2}} = 0, \quad (12b)$$

$$\left(-\frac{d\varphi_0}{dZ'} + \frac{1000 w'_z}{k'} \varphi_0 \right) \Big|_{Z'=-\frac{1}{2}} = 0, \quad (12c)$$

Общее решение уравнения (10с) имеет вид

$$\varphi_0 = C_1 \exp(-\sqrt{C_2}|x|) \exp(-\sqrt{C_3}|y|) \cos\left(\sqrt{C_2 + C_3 + \frac{\varepsilon_a E'^2}{k'}}z + C_4\right) \quad (13)$$

Полученное решение должно удовлетворять следующим требованиям:

1. Решение должно быть четно по z и y , поэтому в (13) используется $|x|$, $|y|$ и $\cos(z)$.
2. Должно выполняться условие $\sin(\varphi_0) \approx \varphi_0$. Перепишем это условие в виде

$$\varphi_0 - \sin(\varphi_0) \leq \delta, \quad (14)$$

где δ – сколь угодно малая величина. Очевидно, что $C_1 = \varphi_{\max}(z)$, тогда условие (14) можно переписать в виде

$$C_1 - \sin(C_1) \leq \delta \quad (14a)$$

Отсюда можно определять постоянную C_1 с заданной наперед точностью. Если положить, что $\delta = 0,01$, тогда значение $C_1 = 0,392493389$. В дальнейшем примем $C_1 = 0,4$.

3. Из граничных условий, накладываемых на функцию φ_0 можно получить и остальные коэффициенты, входящие в (13).

$$C_2 = \frac{10^6 w_x'^2 c^2}{k'^2}$$

$$C_3 = \frac{10^6 w_y'^2 c^2}{k'^2}$$

$$C_4 = \arctan\left(\frac{k\xi \tan\left(\frac{1}{2}\xi\right) - 1000w_z'c}{k\xi + 1000w_z'c \tan\left(\frac{1}{2}\xi\right)}\right),$$

где мы обозначили $\xi = \sqrt{C_2 + C_3 + \frac{\varepsilon_a E'^2}{k}}$.

Рассмотрим вид возникающих деформаций при $w_x'=0,1$; $w_y'=0,1$; $w_z'=0,1$; $k'=1$; $\varepsilon_a=0,1$; $a=b=c=0,01$ см, и величине внешнего электрического поля $E'=1$ (указанные параметры заданы в безразмерных значениях) (рис. 1).

Теперь рассмотрим процесс релаксации возникших деформаций. Считая, что искажающее поле исчезает очень быстро, практически мгновенно, получаем, что релаксация деформаций удовлетворяет уравнению в частных производных

$$k \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + k \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} + k \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} = \eta_b \frac{\partial \varphi}{\partial t}, \quad (15)$$

Перейдем в этом уравнении также к безразмерным переменным

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial X'^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial Y'^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial Z'^2} = \frac{\eta_b c^2}{kt_0} \frac{\partial \varphi}{\partial t'}, \quad (15a)$$

Граничные условия (5а-с) к данному уравнению запишутся в виде

$$\left(-k \frac{\partial \varphi}{\partial x} + w_x \varphi - \eta_{sx} \frac{\partial \varphi}{\partial t}\right) \Big|_{x=-\frac{a}{2}} = 0, \quad (16a)$$

$$\left(-k \frac{\partial \varphi}{\partial y} + w_y \varphi - \eta_{sy} \frac{\partial \varphi}{\partial t} \right) \Big|_{y=-\frac{b}{2}} = 0, \quad (16b)$$

$$\left(-k \frac{\partial \varphi}{\partial z} + w_z \varphi - \eta_{sz} \frac{\partial \varphi}{\partial t} \right) \Big|_{z=-\frac{c}{2}} = 0, \quad (16c)$$

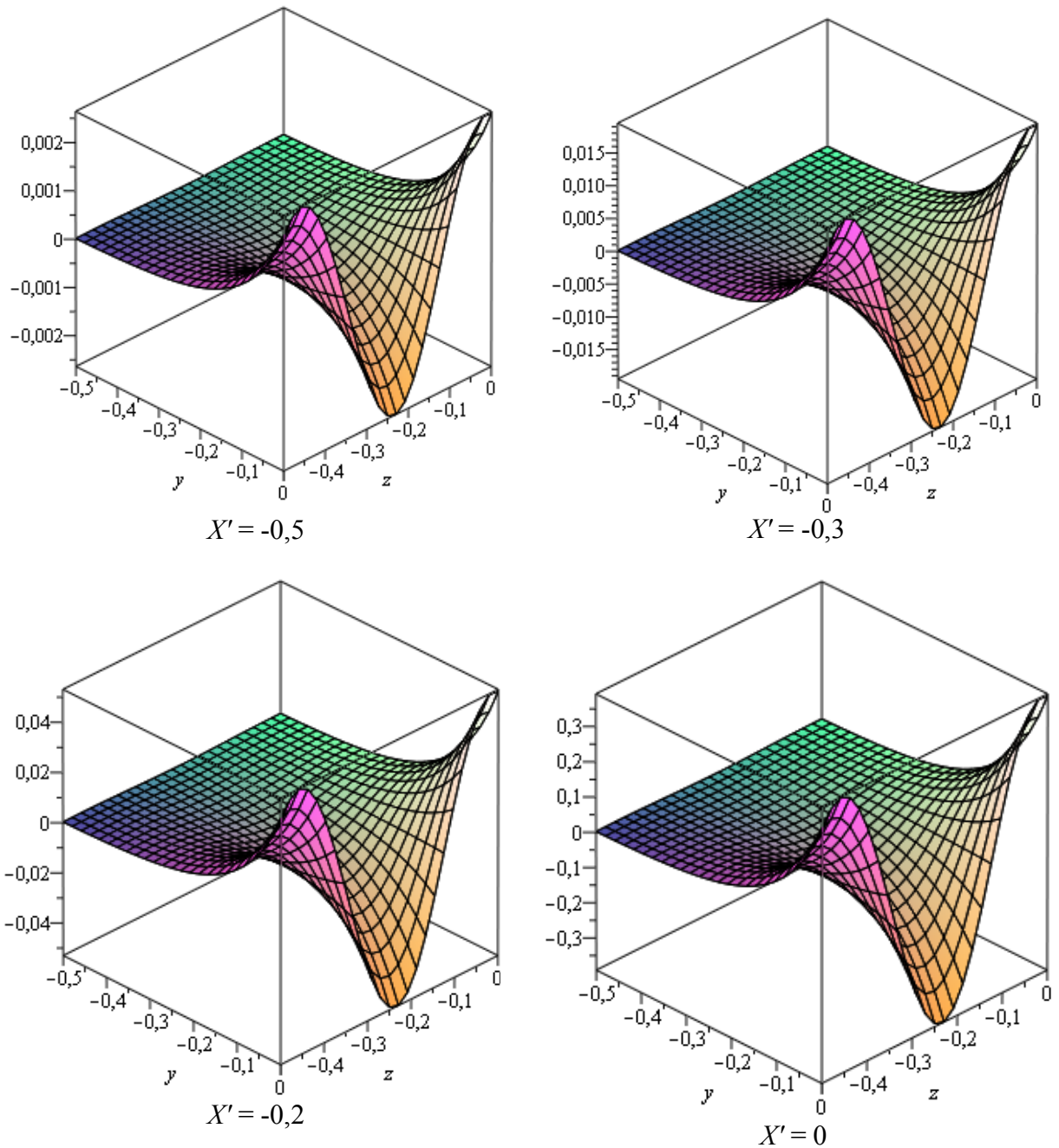


Рис. 1. Распределение угла поворота директора в ячейке при $w_x'=0,1$; $w_y'=0,1$; $w_z'=0,1$; $k'=1$, $\varepsilon_a=0,1$, $a=b=c=0,01$ см и $E'=1$

Перейдя в (16а-с) к безразмерным переменным получим:

$$\left(\frac{\partial \varphi}{\partial X'} - \frac{1000 w'_x \varphi}{k'} + \frac{\eta_{sx} a}{t_0 k' k_0} \frac{\partial \varphi}{\partial t'} \right) \Big|_{X'=-1/2} = 0, \quad (16a')$$

$$\left(\frac{\partial \varphi}{\partial Y'} - \frac{1000 w'_y \varphi}{k'} + \frac{\eta_{sy} a}{t_0 k' k_0} \frac{\partial \varphi}{\partial t'} \right) \Big|_{Y'=-1/2} = 0, \quad (16b')$$

$$\left(\frac{\partial \varphi}{\partial Z'} - \frac{1000 w'_z \varphi}{k'} + \frac{\eta_{sz} a}{t_0 k' k_0} \frac{\partial \varphi}{\partial t'} \right) \Big|_{Z'=-1/2} = 0, \quad (16c')$$

где $t_0 = \frac{\gamma_1 c^2}{k\pi^2}$ – характерное время релаксации директора [6].

Уравнение (15) принадлежит к типу уравнения теплопроводности (диффузии) и имеет общее решение вида

$$\varphi(X', Y', Z', t') = \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} C_{i,j,l} \cos(\alpha_i X') \cos(\beta_j Y') \cos(\chi_l Z') \exp(-\delta_{i,j,l} t'), \quad (17)$$

где $\delta_{i,j,l} = \frac{\alpha_i^2 + \beta_j^2 + \chi_l^2}{\eta_b} \frac{\gamma_1}{\pi^2}$.

Рассмотрим случай бесконечно сильного сцепления директора НЖК с поверхностями ячейки. Тогда граничные условия примут вид

$$\varphi \Big|_{X'=-\frac{1}{2}} = 0 \quad (18a)$$

$$\varphi \Big|_{Y'=-\frac{1}{2}} = 0 \quad (18b)$$

$$\varphi \Big|_{Z'=-\frac{1}{2}} = 0 \quad (18c)$$

Откуда

$$\alpha_n = 2\pi n - \pi, \quad n = 1, 2, \dots, \infty. \quad (19a)$$

$$\beta_n = 2\pi n - \pi, \quad n = 1, 2, \dots, \infty. \quad (19b)$$

$$\chi_n = 2\pi n - \pi, \quad n = 1, 2, \dots, \infty. \quad (19c)$$

Решение $\varphi(X', Y', Z', t')$ (как и решение $\varphi_0(X', Y', Z')$ для стационарной деформации) должно удовлетворять нескольким условиям, а именно:

1. Решение должно быть четным по X' , Y' и Z' , поэтому в выражении (17) используется четная функция, то есть косинус.
2. В начальный момент времени должно выполняться условие

$\varphi(X', Y', Z', t') \Big|_{t'=0} = \varphi_0(X', Y', Z')$, а отсюда следует, что

$$\varphi_0(X', Y', Z') = \sum_{i=0}^m \sum_{j=1}^n \sum_{l=0}^r C_{i,j,l} \cos(\alpha_i X') \cos(\beta_j Y') \cos(\chi_l Z'), \quad (18)$$

где коэффициенты $C_{i,j,l}$ можно представить в виде

$$C_{i,j,l} = 64 \int_{-\frac{1}{2}}^0 \int_{-\frac{1}{2}}^0 \int_{-\frac{1}{2}}^0 \varphi_0(X', Y', Z') \cos(\alpha_i X') \cos(\beta_j Y') \cos(\chi_l Z') dX' dY' dZ'. \quad (19)$$

3. Должно выполняться условие малости угла φ , то есть $\sin(\varphi(X', Y', Z', t')) \approx \varphi(X', Y', Z', t')$. Для значений φ в промежутке $0 \leq \varphi(X', Y', Z', t') \leq \varphi_{\max}$ с заданной точностью 0,01 оно выполняется, здесь φ_{\max} определяется точность, которую мы задаем.

4. Решение должно удовлетворять граничным условиям (18).

Рассмотрим процесс релаксации искажения поля директора во внешнем электрическом поле равном $E' = 10$, в образце НЖК длиной и толщиной 0,01 см со следующими материальными параметрами: $w_x'=1$; $w_y'=1$; $w_z'=0,01$; $k' = 1$; $\varepsilon_a = 0,1$; $\eta_b = 0,76$ пуаз, $\eta_s = 1$ пуаз. Для численного расчета и визуализации возникающей картины искажений ограничимся значениями величин $m = n = r = 50$.

Процесс релаксации поля директора нематической ячейки можно наблюдать на модельном эксперименте следующим образом. Можно представить распределение угла поворота в ячейке в различные моменты времени и построить серию полей директора для различных значений времени. Для простоты и наглядности рассматриваемой проблемы можно проследить релаксацию искажений в плоскости $X' = 0$ (рис. 2) .

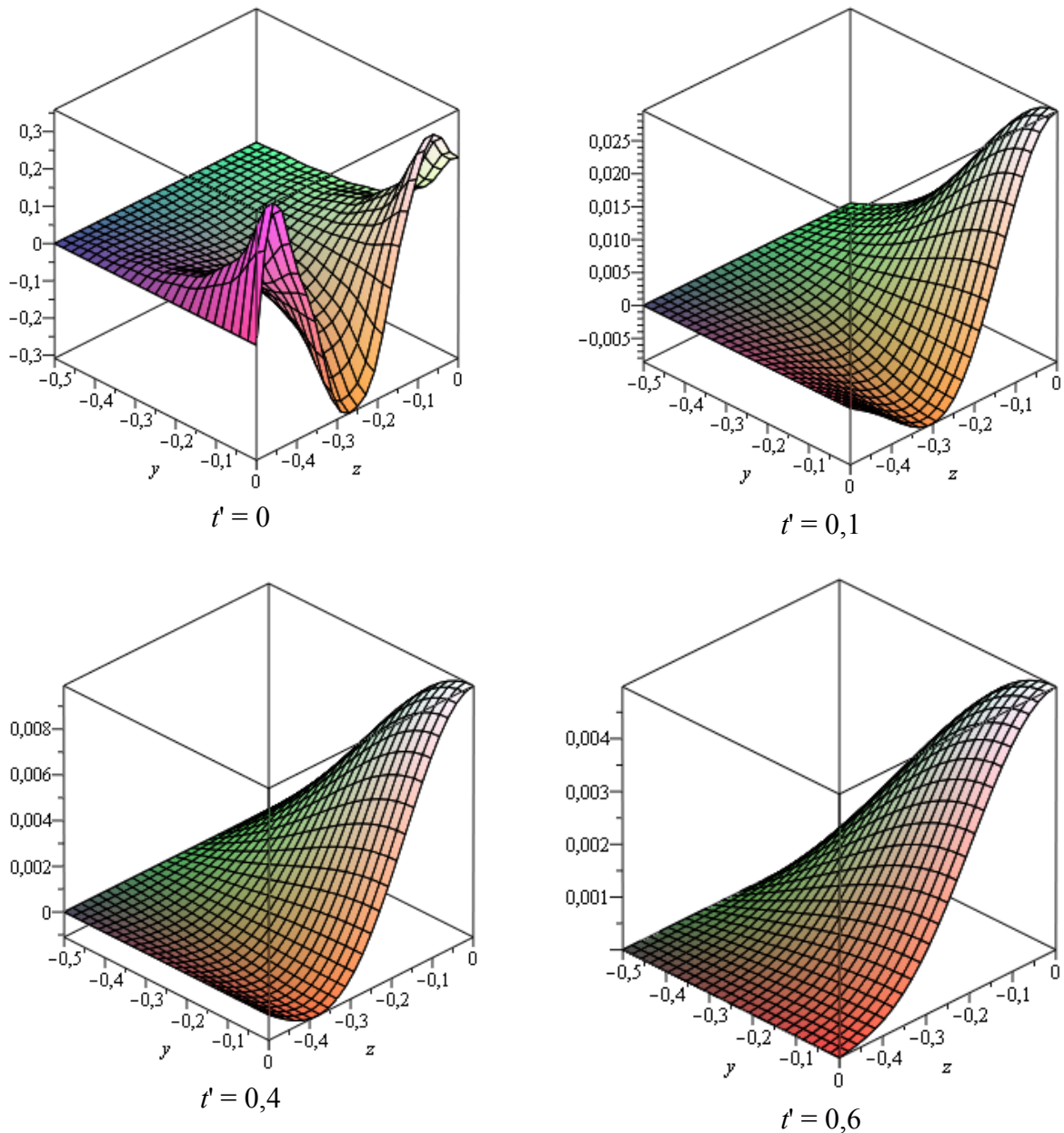


Рис. 2. Релаксация деформации при $w_x' = 0,1$; $w_y' = 0,1$; $w_z' = 0,1$; $k' = 1$; $\varepsilon_a = 0,1$; $\eta_b = 0,76$ пуаз, $\eta_s = 0,1$ пуаз, $E' = 10$ в плоскости $X' = 0$



Выводы

В данной работе предложена модель, описывающая деформацию в трехмерной ячейке гомеотропно ориентированного нематического жидкого кристалла с одинаковой по величине энергией сцепления молекул только на противоположных подложках. Их в рассматриваемой модели три пары – подобно граням куба. Указанная математическая модель описывает также релаксации искаженного состояния нематика при резком выключении искажающего поля. В отличие от предыдущих работ данная статья рассматривает более общий, трехмерный случай, $\varphi = \varphi(x,y,z)$. Полученные результаты могут быть обобщены на случай первоначальной планарной ориентации директора и положительной анизотропии диэлектрической проницаемости, и на случай первоначальной планарной ориентации директора и внешнего магнитного поля.

Список литературы

1. *Barbero, G. Pandolfi L.* // Physical Review E. 2009. Vol. 79. Issue 5. Id. 051701.
2. *П. де Жен.* Физика жидких кристаллов / под ред. А. С. Сониной. М. : Мир, 1977. Гл. 3. С. 81.
3. *Пикин С. А.* Структурные превращения в жидких кристаллах. М. : Наука, 1981. 336 с.
4. *Rapini A. and Papoular M.* // J. Phys. (Paris), Colloq. 1969. Vol. 30. C4-54.
5. *Кондратьев Д. В., Мигранов Н. Г.* // Вестник Поморского государственного университета. 2009. № 3.
6. *Hertrih A., Decker W., Pesch W. and Kramer L.* // J. Phys. II France. 1992. Vol. 2. № 11. P. 1915 – 1930.

Поступила в редакцию 15.03.2011 г.