

Бистабильность „шевронного“ смектика C^* во внешнем электрическом поле

© В.П. Романов¹, С.В. Ульянов^{1,2}, К.Г. Черняк¹

¹ Санкт-Петербургский государственный университет,
Санкт-Петербург, Петергоф, Россия

² Санкт-Петербургский торгово-экономический институт,
Санкт-Петербург, Россия

E-mail: vpromanov@mail.ru

(Поступила в Редакцию 4 декабря 2009 г.)

В рамках континуальной модели описания жидких кристаллов численными методами исследована система нелинейных уравнений, описывающая поверхностно-стабилизированный сегнетоэлектрический смектик C^* в геометрии „шеврона“. Исследованы устойчивые ориентационные и структурные конфигурации и проведено сравнение с результатами, полученными из упрощенных моделей. Найдена высота потенциального барьера, разделяющего две устойчивые конфигурации, исследован переход между ними под действием внешнего электрического поля. Показано, что эффект носит пороговый характер. Исследована зависимость порогового поля от толщины пленки.

1. Введение

В последние годы наблюдается устойчивый интерес к исследованию смектических жидких кристаллов. Он обусловлен тем, что эти системы обладают целым рядом структурных и ориентационных особенностей, которые позволяют использовать их в разнообразных устройствах отображения и хранения информации. Среди смектических жидких кристаллов особое место занимают геликоидальные смектики C^* , обладающие сегнетоэлектрическими свойствами. В ограниченных ячейках эти системы могут образовывать различные структуры в зависимости от условий на ориентирующих поверхностях. В частности, спираль геликоида поляризации, возникающего в объемной фазе в ограниченных системах, может оказаться полностью раскрученной под действием ориентирующих поверхностей. Структуры такого типа получили название поверхностно-стабилизированных сегнетоэлектрических жидких кристаллов. Экспериментально было обнаружено, что взаимодействие с ориентирующими плоскостями в этих системах приводит к появлению двух устойчивых равновесных ориентационных конфигураций [1]. Этот эффект получил название бистабильности Кларка–Лагерволла [2].

Большой интерес представляют смектики C^* , полученные путем охлаждения смектиков A , заключенных между двумя плоскопараллельными пластинами в геометрии „книжной полки“. При переходе в смектическую C^* -фазу молекулы наклоняются относительно нормали к поверхности слоя, что при наличии ограничивающих плоскостей и условия сохранения объема может приводить к характерному изгибу слоев, имеющему форму „шеврона“ [3]. В экспериментах по рассеянию рентгеновского излучения было показано, что в объеме ячейки слоевая структура смектика C^* действительно имеет подобного вида деформации, которые получили название „зигзаг“-дефектов [4]. При этом слои могут

быть выгнуты в двух противоположных направлениях. Именно этот факт послужил основанием для введения термина „зигзаг“-дефект.

Настоящая работа посвящена описанию стабильных конфигураций шевронного смектика C^* , определению величины потенциального барьера, разделяющего ориентационные конфигурации, и выяснению возможности перехода из одной устойчивой конфигурации в другую под действием внешнего электрического поля.

2. Основные уравнения

В геометрии „шеврона“ в свободной энергии системы необходимо учитывать вклады, связанные с изменением ориентации молекул и деформацией слоевой структуры. Для этого введем единичный вектор директора \mathbf{n} , который будет характеризовать направление преимущественной ориентации молекул и смещение слоев u относительно положения смектических слоев в исходной фазе смектика A .

Тогда плотность свободной энергии в одноконстантном приближении будет иметь вид [5,6]

$$f = \frac{K}{2} [(\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + (\nabla \times \mathbf{n})^2] + \frac{K_u}{2} (\Delta u)^2 + \frac{B}{8} ((\nabla u)^2 - (\mu\theta)^2)^2, \quad (1)$$

где K — модуль Франка, K_u — модуль упругости, B — модуль сжатия слоев, θ — угол наклона директора \mathbf{n} относительно нормали к слою \mathbf{N} , μ — коэффициент, учитывающий отличие угла наклона слоя δ от угла θ . Обычно его значение порядка 0.85 [7].

Первые два слагаемых в выражении (1) отвечают за ориентационные эффекты и представляют собой энергию Франка, связанную с искажением поля директора, а остальные вклады возникают из-за деформации слоевой структуры [5].

удобнее равновесную конфигурацию системы найти с помощью численной минимизации функционала свободной энергии (5). Одним из наиболее эффективных способов решения задачи минимизации является метод сеток, который и был применен для данной системы.

По аргументу x на промежутке $-L/2 \leq x \leq L/2$ была введена равномерная сетка с шагом $h = L/N$, где N — число узлов. Производные $\varphi'(x)$ и $\delta'(x)$ заменялись на разностные выражения, а в качестве узловых значений брались средние

$$\begin{aligned} \varphi_i &= \varphi(x_i) = \frac{\varphi_{i+1} + \varphi_i}{2}, \\ d\varphi_i &= \varphi'(x_i) = \frac{\varphi_{i+1} - \varphi_i}{h}, \\ \delta_i &= \delta(x_i) = \frac{\delta_{i+1} + \delta_i}{2}, \\ d\delta_i &= \delta'(x_i) = \frac{\delta_{i+1} - \delta_i}{h}. \end{aligned} \quad (10)$$

Интегрирование свободной энергии методом трапеций сводит задачу к поиску минимума функции от $(2N - 4)$ переменных

$$\begin{aligned} H(\varphi_2, \dots, \varphi_{N-1}, \delta_2, \dots, \delta_{N-1}) \\ = \sum_{i=1}^N \left[\frac{K}{2} (\theta^2 (d\varphi_i)^2 - 2\theta \cos(\varphi_i) d\delta_i d\varphi_i + 2(d\delta_i)^2) \right. \\ \left. + \frac{B}{8} (\delta_i^2 - (\mu\theta)^2)^2 \right] \end{aligned} \quad (11)$$

с граничными условиями

$$\begin{aligned} \varphi_1 &= -\frac{\pi}{2}, \quad \varphi_N = \frac{\pi}{2}, \\ \delta_1 &= -\mu\theta, \quad \delta_N = \mu\theta. \end{aligned} \quad (12)$$

Для нахождения минимума функции $H(\varphi_2, \dots, \varphi_{N-1}, \delta_2, \dots, \delta_{N-1})$ был применен метод Бroyдена-Флетчера-Гольдфарба-Шанно [11].

В работе [3] минимизировалась свободная энергия (5), предполагалось, что угол наклона слоя $\delta = -\theta$ при $x < 0$ и $\delta = \theta$ при $x > 0$. При этом из условия непрерывности поля директора следовало, что в середине ячейки вектор директора \mathbf{n} должен лежать в плоскости YZ , т.е. $n_x(0) = 0$. Угол φ при этом может принимать только два значения:

$$\varphi(x \rightarrow \pm 0) = \pm\varphi_0, \quad (13)$$

$$\varphi(x \rightarrow \pm 0) = \pm(\pi - \varphi_0), \quad (14)$$

где $\varphi_0 = \arcsin(\operatorname{tg} \delta / \operatorname{tg} \theta)$.

В рамках этой модели система уравнений (9) совместна, если угол φ мал. При этом он удовлетворяет уравнению $\varphi'' = 0$, т.е. φ является линейной функцией x :

$$\varphi = \frac{2}{L} \left(\frac{\pi}{2} - \varphi_0 \right) x \pm \varphi_0, \quad (15)$$

где верхний знак дает решение при $x > 0$, а нижний знак — при $x < 0$.

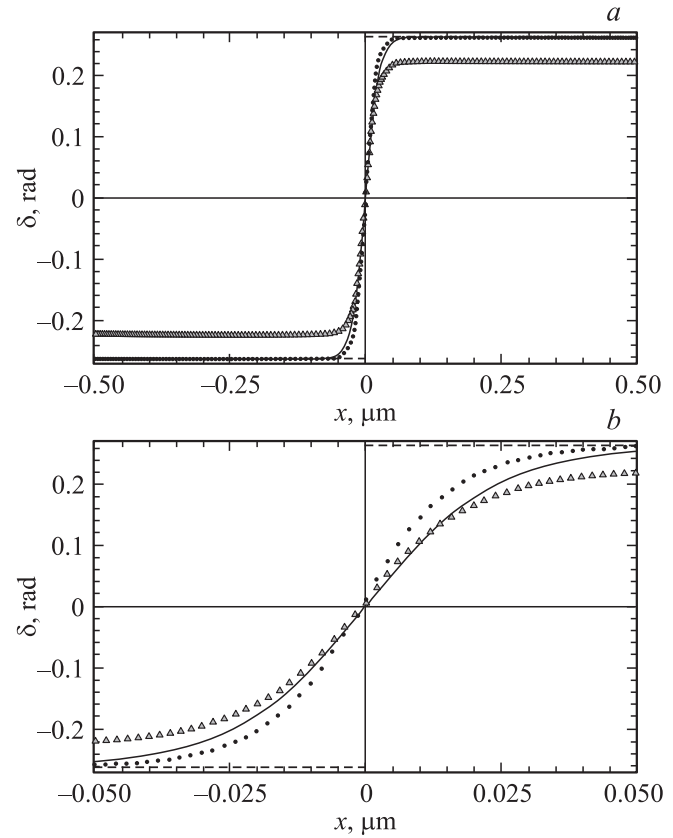


Рис. 2. Пространственная зависимость угла наклона шеврона δ . *a* — зависимость во всей ячейке, *b* — в ее середине. Сплошной линией обозначена зависимость, соответствующая решению в модели Накагавы [5], штриховой — в модели Кларка и Райкера [3,4], точками и треугольниками — результаты проведенных нами расчетов при $\mu = 1$ и 0.85 соответственно.

Вторая модель, предложенная в работе [5], предполагала гладкое изменение угла наклона δ во всей ячейке, в том числе и в середине. Угол φ предполагался малым и считалось, что $|\delta| = \theta$ и $d\delta/dx = 0$ на достаточном расстоянии от середины шеврона. В этом случае решение для δ имеет вид

$$\delta(x) = \theta \operatorname{th} \left(\frac{\theta}{2l} x \right), \quad (16)$$

где $l = \sqrt{K/B}$ — параметр, имеющий размерность длины и по порядку величины совпадающий с расстоянием между смектическими слоями.

Для ограниченной ячейки решение (16) позволяет найти угол $\varphi(x)$, который оказывается равным

$$\varphi = \operatorname{th} \left(\frac{\theta}{2l} x \right) + \frac{2x}{L} \left(\frac{\pi}{2} - \operatorname{th} \left(\frac{\theta L}{4l} \right) \right). \quad (17)$$

В расчетах были использованы следующие значения параметров исследуемой системы: $\theta = 15^\circ$, $K = 4 \cdot 10^{-6}$ dyn, $K_u = 4 \cdot 10^{-6}$ dyn, $L = 10^{-4}$ cm, $B = 4 \cdot 10^7$ dyn/cm², $\mu = 0.85$.

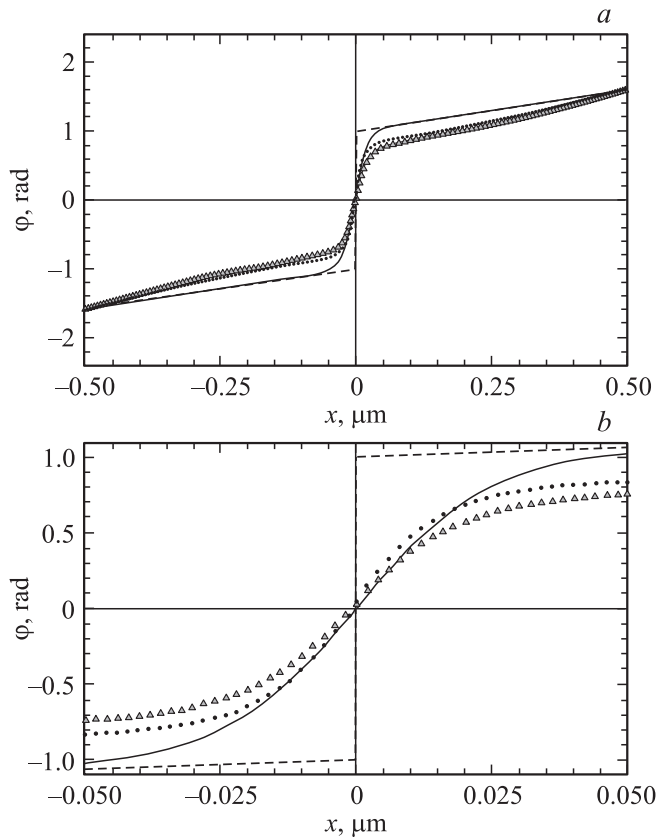


Рис. 3. Пространственная зависимость азимутального угла поворота директора φ . *a* — зависимость во всей ячейке, *b* — в ее середине. Обозначения те же, что на рис. 2.

На рис. 2 приведена зависимость угла наклона слоев δ от расстояния до середины ячейки, рассчитанная численно минимизацией выражения (11) с граничными условиями (12), а также результаты работ [3,5]. Видно, что кривые, полученные в результате проведенных нами численных расчетов, располагаются между кривыми, полученными в [3,5].

Из рис. 2 и 3 видно, что гладкое изменение угла наклона слоев δ в середине ячейки приводит к гладкому изменению азимутального угла φ .

4. Переключение во внешнем электрическом поле

Характерной особенностью кирального смектика C^* является наличие спонтанной поляризации. При помещении ячейки во внешнее электрическое поле \mathbf{E} молекулы ориентируются таким образом, чтобы проекция вектора поляризации \mathbf{P} на внешнее поле увеличивалась. При этом директор \mathbf{n} переориентируется в направлении, ортогональном приложенному внешнему полю. Если направить поле по оси Ox , то под его воздействием возможен переход из U - в D -состояние и обратно при смене направления поля на противоположное.

В слабых внешних электрических полях можно пренебречь квадратичным по полю вкладом в свободную энергию, тогда плотность энергии взаимодействия с внешним электрическим полем можно записать в виде [9]

$$f_E = -(\mathbf{P} \cdot \mathbf{E}), \quad (18)$$

где

$$\mathbf{P} = \frac{P_0}{|\mathbf{n} \times \mathbf{N}|} [\mathbf{N} \times \mathbf{n}], \quad (19)$$

P_0 — спонтанная поляризация.

Нормаль к плоскости слоя удобно выразить через угол δ

$$\mathbf{N} = (\sin \delta, 0, \cos \delta). \quad (20)$$

Внешнее поле \mathbf{E} направлено по оси X , т.е. $\mathbf{E} = E(1, 0, 0)$. Тогда вклад в свободную энергию жидкого кристалла за счет взаимодействия с электрическим полем примет вид

$$F_E = -S \int_{-\frac{l}{2}}^{\frac{l}{2}} P_0 E \cos \delta \cos \varphi dx. \quad (21)$$

Изменение направления электрического поля \mathbf{E} позволяет осуществлять переходы между U - и D -состояниями. Это требует преодоления потенциального барьера, высоту которого необходимо оценить для определения значения порогового поля E_{th} .

Предположим, что изначально система находится в D -состоянии. При переходе в состояние U значение угла φ в середине ячейки изменится на 180° . При этом директор в вершине шеврона будет поворачиваться по конусу, проходя через энергетически менее выгодные состояния по сравнению с U и D . Среди этих состояний будет самое невыгодное, которое и определит высоту потенциального барьера W .

Для того чтобы вычислить величину W , найдем зависимость полной энергии системы F от положения азимутального угла в середине ячейки $\varphi(0)$. Задачу минимизации функционала (5) с фиксированной ориентацией азимутального угла поворота директора не только на краях, но и в середине ячейки можно решить отдельно для каждой из областей $x \leq 0$ и $x \geq 0$. Для этого полную энергию системы удобно представить в виде суммы вкладов от половин ячейки с $x \leq 0$ и $x \geq 0$

$$F = S \int_{-\frac{l}{2}}^0 f(\varphi_-, \delta_-) dx + S \int_0^{\frac{l}{2}} f(\varphi_+, \delta_+) dx, \quad (22)$$

где φ_+ , δ_+ соответствуют пространственным распределениям азимутального угла поворота директора и угла наклона смектического слоя в области $x \geq 0$, а φ_- и δ_- — распределения тех же углов в области $x \leq 0$.

В результате численной минимизации функционала свободной энергии (22), которая проводилась по изложенной выше схеме, были найдены равновесные

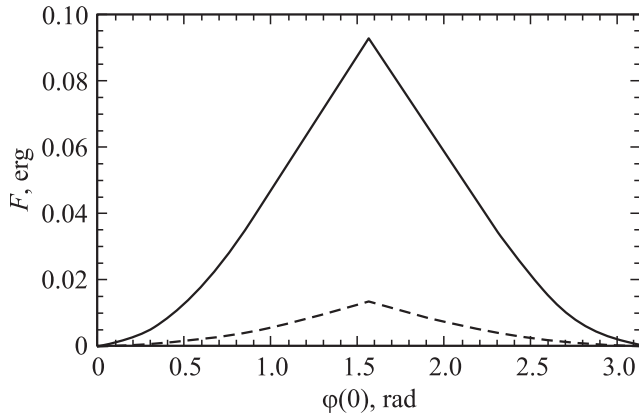


Рис. 4. Зависимость свободной энергии жидкого кристалла F от значения азимутального угла поворота директора в середине шеврона $\varphi(0)$ для ячейки площадью 1 cm^2 . Сплошная линия — результаты проведенных нами расчетов, штриховая — результаты расчетов в рамках линеаризованной модели Накагавы [5].

конфигурации φ_+, δ_+ и φ_-, δ_- для разных значений азимутального угла в середине ячейки.

На рис. 4 представлена вычисленная зависимость свободной энергии F от значения азимутального угла в середине шеврона для ячейки площадью 1 cm^2 . Для удобства значения F отсчитываются от величины свободной энергии в D -конфигурации, т.е. при $\varphi(0) = 0$. Приведенная кривая имеет вид потенциального барьера, который нужно преодолеть системе при переходе из D - в U -состояние или наоборот. Очевидно, что высота потенциального барьера определяется из соотношения

$$W = F_{\pi/2} - F_0, \quad (23)$$

где $F_{\pi/2}$ соответствует свободной энергии системы с азимутальным углом в середине ячейки $\varphi(0) = \pi/2$, F_0 — свободная энергия начального состояния (U или D).

Отметим, что барьер не может быть преодолен за счет тепловых флуктуаций, вследствие которых директор способен отклониться на углы порядка $5-6^\circ$ [9].

На рис. 4 изображен также вид потенциального барьера, рассчитанный в приближении малых азимутальных углов φ , применявшемся для описания пространственной и ориентационной структуры „шеврона“ [5]. Видно, что результаты проведенных нами расчетов, которые не требовали предположения о малости азимутального угла φ , дают существенно другую высоту потенциального барьера. Это связано с тем, что в задаче определения высоты и формы барьера угол φ никак не может считаться малым.

Пороговое поле E_{th} может быть оценено из условия равенства полной энергии взаимодействия с электрическим полем (21) энергетическому барьеру W , найденному выше (23). При этом с учетом общей формулы для определения свободной энергии (22) очевидно, что высота барьера есть функция толщины ячейки, т.е.

$W = W(L)$. Оценив интеграл в полевом вкладе в свободную энергию максимальным значением, получим

$$E_{th} = \frac{W(L)}{LP_0 \cos \theta}. \quad (24)$$

Очевидно, что пороговое значение поля зависит как от параметров жидкого кристалла, так и от толщины пленки L . Для определения зависимости $E_{th}(L)$ задачу минимизации свободной энергии (22) необходимо решить для разных толщин пленки и фиксированных значений азимутального угла φ не только на ограничивающих поверхностях, но и в середине пленки:

$$\begin{aligned} \varphi_{-, \pi/2} \left(-\frac{L}{2} \right) &= -\frac{\pi}{2}, & \varphi_{-, \pi/2} (0) &= -\frac{\pi}{2}, \\ \varphi_{+, \pi/2} (0) &= -\frac{\pi}{2}, & \varphi_{+, \pi/2} \left(\frac{L}{2} \right) &= \frac{\pi}{2}, \\ \varphi_{-, 0} \left(-\frac{L}{2} \right) &= -\frac{\pi}{2}, & \varphi_{-, 0} (0) &= 0, \\ \varphi_{+, 0} (0) &= 0, & \varphi_{+, 0} \left(\frac{L}{2} \right) &= \frac{\pi}{2}, \end{aligned} \quad (25)$$

где индексы $+$ и $-$ соответствуют левой и правой половинам пленки, индекс 0 — начальной (U или D) конфигурации, а индекс $\pi/2$ соответствует конфигурации с наименее выгодным значением азимутального угла поворота директора в середине пленки. Для угла δ , как и прежде, использовались граничные условия (8). В результате решения задачи минимизации функционала свободной энергии (22) было обнаружено, что форма шеврона, т.е. распределение угла δ , не зависит от значения азимутального угла φ в середине ячейки. Поэтому выражение для высоты потенциального барьера (23) можно представить в следующем виде:

$$\begin{aligned} W(L) &= \frac{SK}{2} \left\{ \int_{-\frac{L}{2}}^0 \left[\theta^2 ((\varphi'_{-, \pi/2})^2 - (\varphi'_{-, 0})^2) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - 2\theta (\delta'_{-, \pi/2} \varphi'_{-, \pi/2} \cos \varphi_{-, \pi/2} - \delta'_{-, 0} \varphi'_{-, 0} \cos \varphi_{-, 0}) \right] dx \right. \\ &\quad \left. + \int_0^{\frac{L}{2}} \left[\theta^2 ((\varphi'_{+, \pi/2})^2 - (\varphi'_{+, 0})^2) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - 2\theta (\delta'_{+, \pi/2} \varphi'_{+, \pi/2} \cos \varphi_{+, \pi/2} - \delta'_{+, 0} \varphi'_{+, 0} \cos \varphi_{+, 0}) \right] dx \right\}. \quad (26) \end{aligned}$$

Рассчитанная по формуле (26) высота потенциального барьера позволила найти зависимость порогового поля E_{th} от толщины пленки. Результаты расчетов представлены на рис. 5. Видно, что пороговое поле быстро убывает с ростом L и при использованных в расчетах типичных значениях параметров жидкого кристалла поле E_{th} практически обращается в нуль в пленках толщиной порядка $100 \mu\text{m}$ и больше, $E_{th} \leq 7.7 \cdot 10^{-4} \text{ V}/\mu\text{m}$.

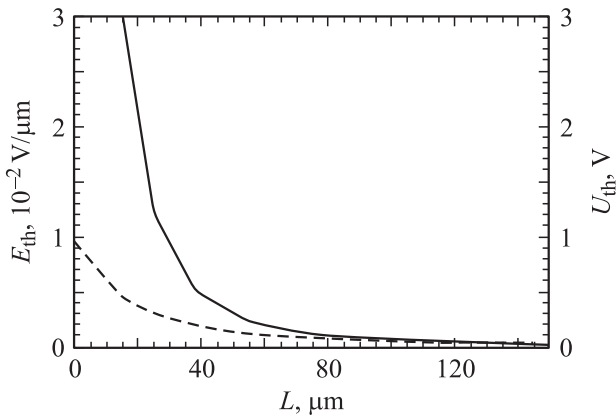


Рис. 5. Зависимость порогового поля E_{th} (сплошная кривая) и порогового напряжения U_{th} (штриховая кривая) от толщины пленки L .

Прежде всего следует отметить, что поле E_{th} намного быстрее убывает с ростом L , чем в эффекте Фредерикса, где $E_{th} \sim 1/L$. Особенно ясно это видно из зависимости порогового напряжения U_{th} от толщины пленки. В отличие от эффекта Фредерикса, где $U_{th} = \text{const}$, здесь явно видно монотонное убывание порогового напряжения с ростом толщины пленки. Отметим, что, согласно формуле (24), такой тип зависимости от толщины пленки имеет и высота потенциального барьера $W(L)$. Убывание W с ростом L обусловлено уменьшением относительного вклада области излома шеврона в середине ячейки в свободную энергию.

5. Заключение

Пространственная и ориентационная структура шеврона в плоской ячейке описывается сложной системой нелинейных уравнений (9), точное решение которой неизвестно. Мы провели численные расчеты с целью выяснения возможности использования упрощенных моделей [3–5] для описания шевронной структуры и переключения между двумя устойчивыми конфигурациями под действием внешнего электрического поля. Проведенные нами численные расчеты показали, что предложенные ранее модели, в которых система уравнений (9) была фактически линеаризована по азимутальному углу φ , дают достаточно хорошее описание ориентационной структуры везде, за исключением близкой окрестности вершины шеврона. Относительно хорошее согласие и в этой области с результатами расчетов в модели [5] объясняется тем, что в середине шеврона азимутальный угол поворота директора мал, и поэтому здесь допустима линеаризация системы (9) по углу φ .

Что касается перехода из одного стабильного состояния в другое под действием внешнего электрического поля, то для описания потенциального барьера, который необходимо преодолеть при таком переключении, упрощенные модели [3–5] оказались непригодными. Это

связано с тем, что при переходе из одного стабильного состояния в другое азимутальный угол поворота директора φ меняется на π в середине шеврона. В процессе такого поворота директора система преодолевает потенциальный барьер, вершина которого соответствует азимутальному углу $\pi/2$ в середине ячейки. Ориентационная структура при этом не может быть описана в рамках линеаризованной по углу φ модели. Это было подтверждено проведенными нами численными расчетами.

Было обнаружено, что переключение внешним полем из одного состояния в другое имеет пороговый характер, причем убывание величины порогового поля E_{th} с ростом толщины пленки L более быстрое, чем по закону $E_{th} \sim 1/L$, типичному для перехода Фредерикса. Найденная зависимость величины порогового поля от толщины пленки может оказаться полезной в технических применениях сегнетоэлектрических ячеек жидких кристаллов.

Список литературы

- [1] Г.С. Чилая, В.Г. Чигринов. УФН **163**, 1 (1993).
- [2] N.A. Clark, S.T. Lagerwall. Appl. Phys. Lett. **36**, 899 (1980).
- [3] N.A. Clark, T.P. Rieker. Phys. Rev. A **37**, 1053 (1988).
- [4] T.P. Rieker, N.A. Clark, G.S. Smith, D.S. Parmar, E.B. Sirota, C.R. Safinya. Phys. Rev. Lett. **59**, 2658 (1987).
- [5] M. Nakagawa. Mol. Cryst. Liq. Cryst. **174**, 65 (1989).
- [6] L. Limat. J. Phys. II **5**, 803 (1995).
- [7] A. Diaz, G. McKay, J. Mottram. Phys. Rev. E **76**, 041 705 (2007).
- [8] S.M. Beldon, N.J. Mottram, S.J. Elston. Mol. Cryst. Liq. Cryst. **365**, 729 (2001).
- [9] P.G. de Gennes, J. Prost. The physics of liquid crystals. Clarendon Press, Oxford (1993). 597 p.
- [10] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Теория упругости. Наука, М. (2003). 257 с.
- [11] C.G. Broyden. J. Inst. Math. Appl. **6**, 76 (1970).