

# Связь между микроскопическим и макроскопическим описанием влияния поверхности твердой подложки на гомеотропно-ориентированный нематический жидкий кристалл

© Л.В. Миранцев

Институт проблем машиноведения Российской академии наук,  
199178 Санкт-Петербург, Россия

E-mail: miran@microm.ipme.ru

(Поступила в Редакцию 13 февраля 2006 г.  
В окончательной редакции 25 апреля 2006 г.)

Предлагается простая микроскопическая среднеполевая модель плоского образца гомеотропно-ориентированного нематического жидкого кристалла (НЖК), находящегося в контакте с поверхностью твердой подложки. Взаимодействие между молекулами НЖК моделируется с помощью анизотропного модельного потенциала Мак Миллана, а ориентирующее действие поверхности подложки на молекулы НЖК описывается с помощью внешнего поля, непосредственно действующего только на молекулы первого приповерхностного слоя образца. С помощью этой модели описывается деформация поля директора в образце, вызванная внешним воздействием, и определяется величина коэффициента энергии сцепления  $W$ , используемого в макроскопическом описании ориентирующего действия твердой подложки на НЖК. Получена зависимость этой величины от силы короткодействующего ориентирующего поля поверхности подложки, используемого в предлагаемой микроскопической модели, а также установлена однозначная связь между величиной  $W$  и профилем параметра ориентационного порядка у поверхности подложки. Также получена температурная зависимость коэффициента энергии сцепления, хорошо согласующаяся с экспериментальными данными для НЖК МББА.

PACS: 61.30.-v, 68.08.-p

## 1. Введение

Взаимодействие поверхности твердой подложки с молекулами жидкого кристалла (ЖК) представляет большой интерес как с точки зрения фундаментальных исследований конденсированного состояния вещества, так и для практических целей [1–3]. Из всех ЖК фаз наиболее чувствительной к действию ограничивающих поверхностей является нематическая ЖК (НЖК) фаза. Во-первых, взаимодействие молекул НЖК с поверхностью твердой подложки меняет структуру и свойства приповерхностного слоя нематика. Степень ориентационного порядка в этом приповерхностном слое, а следовательно, и его электрооптические и вязко-упругие свойства отличаются от аналогичных характеристик объема НЖК [4–12]. Благодаря этому взаимодействию вблизи поверхности твердой подложки также возникают смектические слоистые структуры [13–17], обладающие одномерным трансляционным порядком, который отсутствует в объемной нематической фазе. Кроме того, поверхность твердой подложки определяет граничные условия для всего макроскопического образца НЖК, включая и его объем, и в зависимости от способа обработки этой поверхности задается та или иная (гомеотропная, планарная, наклонная) ориентация нематика [1–3, 18–25], от которой в значительной степени зависит его поведение во внешних полях различной природы. Условия на поверхности полностью определяют оптическую однородность НЖК слоев, используемых в различных электрооптических устройствах отображения

и обработки информации, а также пороговые поля и быстроедействие этих устройств [26–28].

Ориентирующее действие поверхности твердой подложки на НЖК (так называемое явление anchoring'a [1–3]) описывается на макроскопическом уровне в рамках континуальной теории деформаций в НЖК с помощью двух понятий, а именно направления оси легкой ориентации  $\gamma$  и анизотропной составляющей поверхностной энергии НЖК  $f_s$ . Направлением оси легкой ориентации  $\gamma$  называется такое направление директора  $\mathbf{n}$ , характеризующего преимущественное направление ориентации молекул ЖК [29,30], при котором анизотропная часть энергии взаимодействия  $f_s$  минимальна. В отсутствие внешних воздействий именно это направление принимает директор  $\mathbf{n}$ . Если же в слое ЖК, находящемся в контакте с твердой подложкой, под действием того или иного внешнего поля (электрического, магнитного или поля деформаций, налагаемых другой ограничивающей поверхностью образца) директор отклоняется от направления оси легкой ориентации, то это отклонение приводит к увеличению анизотропной части поверхностной энергии  $\Delta f_s(\theta_s)$ , где  $\theta_s$  — полярный угол, образованный директором  $\mathbf{n}$  и направлением оси легкой ориентации  $\gamma$  непосредственно у поверхности твердой подложки. В работе [31] предложена наиболее простая и наиболее часто используемая в практических расчетах форма зависимости  $\Delta f_s(\theta_s)$ , которая записывается как

$$\Delta f_s(\theta_s) = \frac{1}{2} W \sin^2 \theta_s \quad (1)$$

или в случае малых углов  $\theta_s$ ,

$$\Delta f_s(\theta_s) \approx \frac{1}{2} W \theta_s^2. \quad (2)$$

Коэффициент  $W$  в (1) и (2) называется силой сцепления (или коэффициентом энергии сцепления) ЖК с подложкой, и его экспериментальное и теоретическое определение (обычно в реальных экспериментах определяется так называемая экстраполяционная длина  $L_0 = K/W$  [1–3], где  $K$  — один из упругих модулей НЖК) — одна из важнейших задач физики ЖК. Величина коэффициента  $W$ , также как и направление оси легкой ориентации, зависит от типа подложки, от вида поверхностно активного вещества (ПАВ), нанесенного на ее поверхность, от способа обработки поверхности подложки (механическое натирание, косое напыление окислов кремния, травление кислотными и перекисными растворами, отжиг при повышенной температуре), а также от типа ЖК, находящегося в контакте с ней, от строения его молекул [2,3,18,19] и варьируется от  $\sim 10^{-3}$  erg/cm<sup>2</sup> ( $10^{-6}$  J/m<sup>2</sup>) (слабое сцепление) до  $\sim 1$  erg/cm<sup>2</sup> ( $10^{-3}$  J/m<sup>2</sup>) (сильное сцепление). Очевидно, что этот феноменологический коэффициент определяется прямым взаимодействием молекул ЖК с поверхностью подложки [32] и должна существовать связь между его величиной и микроскопической структурой приповерхностного слоя ЖК. Хотя изучению этой связи посвящено довольно много теоретических работ [33–38], эта проблема все еще далека от полного решения. В частности, до сих пор не установлена однозначная связь между силой прямого взаимодействия молекул ЖК с подложкой, профилем параметра ориентационного порядка вблизи поверхности подложки и величиной коэффициента энергии сцепления  $W$ .

Определение такой связи является целью настоящей работы. В ней предлагается простая микроскопическая среднеполевая модель плоского гомеотропно-ориентированного образца НЖК, находящегося в контакте с поверхностью твердой подложки (схожая модель была ранее предложена в [39,40] для описания поведения свободно подвешенной ЖК пленки при ее нагревании). Образец считается состоящим из  $N$  плоских слоев, параллельных поверхности подложки и имеющих толщину порядка длины молекулы  $l_0$ . Взаимодействие между молекулами ЖК моделируется с помощью анизотропного модельного парного потенциала Мак Миллана [41], а ориентирующее действие поверхности подложки на ЖК моделируется с помощью внешнего поля, непосредственно действующего только на молекулы первого слоя образца, находящегося в контакте с поверхностью подложки. В случае отсутствия деформаций во всем образце (направления локальных директоров для всех слоев образца считаются одинаковыми и совпадающими с задаваемым подложкой направлением оси легкой ориентации) в рамках приближения среднего поля выводятся выражения для одночастичных псевдопотенциалов, действующих на молекулы каждого

слоя, определяются локальные параметры ориентационного порядка, характеризующие степень ориентационного упорядочения в каждом слое образца, выводятся самосогласованные уравнения для этих параметров, а также выражения для свободной энергии каждого слоя и всего образца. Численное решение самосогласованных уравнений дают профили локальных параметров ориентационного порядка в зависимости от силы взаимодействия молекул ЖК с поверхностью подложки, а также от температуры. Затем рассматривается деформация образца, вызванная внешним воздействием (локальный директор, определяющий среднюю ориентацию молекул в его последнем  $N$ -м слое, считается повернутым на угол  $\theta_N = \pi/2$  относительно первоначального направления равновесной ориентации образца, которая для определенности считается гомеотропной), и определяется избыточная свободная энергия  $\Delta F$ , связанная с такой деформацией, как функция от углов  $\theta_i$ , определяющих отклонение локального директора каждого  $i$ -го слоя от первоначального равновесного направления. Минимизация избыточной свободной энергии  $\Delta F$  по углам  $\theta_i$ , которые считаются внешними параметрами, приводит к системе уравнений, определяющих профиль углов  $\theta_i$  во всем ЖК образце, включая приповерхностную область. Из этого профиля определяется экстраполяционная длина  $L_0$  и, если известна величина упругого модуля  $K$  (в случае гомеотропной ориентации — модуля продольного изгиба  $K_{33}$ ), с помощью приведенного выше соотношения между  $L_0$ ,  $K$  и  $W$ , полученного в рамках макроскопического описания явления anchoring'a [1–3], величина коэффициента энергии сцепления  $W$ .

Таким образом, была исследована зависимость коэффициента  $W$  от силы короткодействующего анизотропного поля, действующего на молекулы ЖК, находящиеся в пределах первого слоя образца, непосредственно контактирующего с поверхностью подложки (как указывалось выше, это поле моделирует прямое ориентирующее действие поверхности подложки на ЖК образец). Оказалось, что для создания условий „сильного“ сцепления сила этого ориентирующего действия совсем не обязательно должна превосходить силу анизотропного межмолекулярного взаимодействия в ЖК или быть сравнимой с ней. Так, было найдено, что, даже если величина константы  $W_0$ , определяющей силу ориентирующего поля, действующего со стороны подложки на молекулы первого слоя НЖК, составляет лишь 10% от величины константы  $V_0$ , определяющей силу анизотропного межмолекулярного взаимодействия в ЖК, величина коэффициента энергии сцепления  $W$  оказывается равной  $\sim 1$  erg/cm<sup>2</sup> ( $10^{-3}$  J/m<sup>2</sup>), что соответствует случаю „сильного“ сцепления. В то же время величина  $W$  имеет значение  $\sim 10^{-2}$  erg/cm<sup>2</sup> ( $10^{-5}$  J/m<sup>2</sup>) в случае „слабого“ сцепления, который соответствует значению  $W_0/V_0 \sim 0.01$ . Также была получена простая и однозначная связь между профилем параметров ориентационного порядка у поверхности подложки и величиной  $W$ . В случае когда величина параметра ориентационного порядка

значительно превосходит аналогичную величину в объеме НЖК, имеет место „жесткое“ сцепление нематика с поверхностью подложки (деформация вообще не проникает в первый приповерхностный слой нематика). Если этот профиль такой, что величина параметра ориентационного порядка у поверхности подложки сопоставима с величиной этого параметра в объеме НЖК, имеет место случай „сильного“ сцепления ( $W \sim 1 \text{ erg/cm}^2$ ). Если же величина параметра ориентационного порядка у поверхности подложки значительно меньше, чем в объеме НЖК, то мы имеем дело со „слабым“ сцеплением ( $W \sim 10^{-2} \text{ erg/cm}^2$ ). Наконец, нами была исследована зависимость экстраполяционной длины  $L_0$  от температуры при „сильном“ и „слабом“ сцеплении НЖК с подложкой. Оказалось, что при понижении температуры значительное уменьшение  $L_0$  имеет место в случае „слабого“ сцепления НЖК с подложкой, а в случае „сильного“ сцепления экстраполяционная длина почти не зависит от температуры. Результаты численного расчета температурной зависимости коэффициента энергии сцепления  $W$  для НЖК МББА находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными.

## 2. Микроскопическая модель плоского гомеотропно-ориентированного слоя НЖК, контактирующего с поверхностью твердой подложки

2.1. Неискаженный образец. Рассмотрим плоский образец НЖК, состоящий из  $N$  дискретных слоев, имеющих толщину порядка длины молекулы  $l_0$ . Первый слой образца находится в контакте с поверхностью твердой подложки, а последний  $N$ -й слой обладает свойствами, идентичными свойствам объемной фазы НЖК при заданной температуре. Образец считается недеформированным и гомеотропно-ориентированным, т.е. локальный директор  $\mathbf{n}_i$  для каждого его слоя направлен параллельно нормали  $\mathbf{v}$  к поверхности подложки. Как и в работах [39,40], будем моделировать анизотропное межмолекулярное взаимодействие в нашем образце с помощью модельного парного потенциала Мак Миллана [41]

$$V_{12}(r_{12}, \vartheta_{12}) = -(V_0/n_0 r_0^3 \pi^{3/2}) \left( \frac{3}{2} \cos^2 \vartheta_{12} - \frac{1}{2} \right) \times \exp(-r_{12}^2/r_0^2), \quad (3)$$

где  $V_0$  — константа взаимодействия,  $\vartheta_{12}$  — угол между длинными осями молекул,  $r_{12}$  — расстояние между их центрами,  $r_0$  — характерный радиус взаимодействия,  $n_0$  — плотность числа молекул в образце. Поскольку в рамках теории Мак Миллана предполагается, что  $r_0 \ll l_0$ , это взаимодействие почти полностью затухает на расстоянии порядка длины молекулы  $l_0$  и можно считать, что молекулы внутри каждого слоя образца НЖК взаимодействуют только с молекулами этого же

слоя и двух соседних с ним слоев. Как и в [39,40], анизотропное взаимодействие между молекулами НЖК и поверхностью подложки считается короткодействующим и моделируется некоторым ориентирующим полем, непосредственно действующим только на молекулы первого слоя образца, прилегающего к поверхности подложки. Энергия такого взаимодействия может быть записана в виде [39,40]

$$W_1(\vartheta_1) = -W_0 \left( \frac{3}{2} \cos^2 \vartheta_1 - \frac{1}{2} \right), \quad (4)$$

где  $\vartheta_1$  — угол между длинными осями молекул, находящихся внутри первого слоя образца, и нормалью  $\mathbf{v}$  к поверхности подложки, а  $W_0$  — константа взаимодействия. С учетом этих предположений по аналогии с теорией Мак Миллана [41] в приближении среднего поля из потенциалов (3) и (4) можно вывести одночастичные псевдопотенциалы  $V_i(\vartheta_i)$  [39,40] для молекул, находящихся внутри каждого  $i$ -го слоя. Здесь  $\vartheta_i$  — угол между длинной осью молекул  $i$ -го слоя и локальным директором  $\mathbf{n}_i$ . Если предположить, что в рассматриваемом образце отсутствует какое-либо трансляционное смектическое упорядочение, то одночастичные псевдопотенциалы  $V_i(\vartheta_i)$  имеют вид

$$V_1(\vartheta_1) = -\frac{1}{3} V_0 \left( \frac{3}{2} \cos^2 \vartheta_1 - \frac{1}{2} \right) (s_1 + s_2 + 3W_0/V_0), \quad (5)$$

$$V_{2 \leq i \leq N}(\vartheta_i) = -\frac{1}{3} V_0 \left( \frac{3}{2} \cos^2 \vartheta_i - \frac{1}{2} \right) \sum_{j=i-1}^{i+1} s_j, \quad (6)$$

где  $s_i$  — локальные параметры ориентационного порядка для каждого  $i$ -го слоя, которые определяются следующими самосогласованными уравнениями:

$$s_i = \left\langle \left( \frac{3}{2} \cos^2 \vartheta_i - \frac{1}{2} \right) \right\rangle = \int_{-1}^{+1} \left( \frac{3}{2} \cos^2 \vartheta_i - \frac{1}{2} \right) f_i(\vartheta_i) d \cos \vartheta_i \left( \int_{-1}^{+1} f_i(\vartheta_i) d \cos \vartheta_i \right)^{-1}, \quad (7)$$

где  $f_i(\vartheta_i)$  — одночастичная функция распределения для молекул  $i$ -го слоя, определяемая уравнением

$$f_i(\vartheta_i) = A_i^{-1} \exp[-V_i(\vartheta_i)/K_B T], \quad (8)$$

где  $A_i$  — нормировочная константа для  $i$ -го слоя,  $T$  — абсолютная температура системы и  $K_B$  — постоянная Больцмана.

Свободная энергия дискретных слоев образца НЖК определяется следующими уравнениями:

$$F_1 = N_i V_0 \left[ \frac{1}{6} s_1 (s_1 + s_2) - \frac{K_B T}{V_0} \times \ln \left( \int_0^1 \exp[-V_1(\vartheta_1)/K_B T] d \cos \vartheta_1 \right) \right], \quad (9)$$

$$F_{2 \leq i \leq N} = N_i V_0 \left[ \frac{1}{6} s_i \sum_{j=i-1}^{i+1} s_j - \frac{K_B T}{V_0} \times \ln \left( \int_0^1 \exp[-V_i(\vartheta_i)/K_B T], d \cos \vartheta_i \right) \right], \quad (10)$$

где  $N_i$  — число молекул в пределах одного слоя. Полная свободная энергия  $F$  образца равна

$$F = \sum_{i=1}^N F_i. \quad (11)$$

Если учесть, что вдали от поверхности подложки рассматриваемый образец НЖК должен быть пространственно однородным, то в уравнениях (6) и (10) значение локального параметра порядка  $S_{N+1}$  для  $N+1$ -го слоя надо положить равным величине локального параметра порядка для  $N$ -го слоя, т.е.  $s_N$ . Численное решение системы самосогласованных уравнений (7) позволяет определить локальные параметры ориентационного порядка  $s_i$  при заданных числе слоев  $N$ , приведенной температуре  $T^* = K_B T/V_0$  и величине отношения  $W_0/V_0$ , а уравнения (9)–(11) позволяют при найденных значениях  $s_i$  вычислить свободную энергию  $F_i$  каждого из слоев образца НЖК и его полную свободную энергию  $F$ .

2.2 Микроскопическое описание деформации в образце. Теперь рассмотрим деформации в образце гомеотропно-ориентированного НЖК, находящегося в контакте с поверхностью твердой подложки. Деформации могут быть созданы либо внешними полями, либо другой подложкой, поверхность которой индуцирует ориентацию, отличную от гомеотропной, например планарную. Не конкретизируя способ создания деформации в образце, положим, что направление локального директора  $\mathbf{n}_N$  его последнего  $N$ -слоя составляет угол  $\theta_N = \pi/2$  с первоначальным направлением ориентации  $\mathbf{v}$  локальных директоров всех слоев недеформированного образца. В результате локальный директор  $\mathbf{n}_i$ ,  $i$ -го слоя образца отклоняется от своего первоначального направления и образует угол  $\theta_i$  с первоначальным направлением ориентации  $\mathbf{v}$  и углы  $\theta_{i,i-1}$  и  $\theta_{i,i+1}$  с локальными директорами  $\mathbf{n}_{i-1}$  и  $\mathbf{n}_{i+1}$  соответственно двух соседних с ним слоев. Если рассматриваемый образец НЖК является достаточно толстым ( $N \gg 1$ ), то изменение углов ориентации  $\theta_i$  локальных директоров с расстоянием до поверхности подложки должно быть достаточно плавным, а углы  $\theta_{i,i-1}$  и  $\theta_{i,i+1}$  — малыми. Тогда можно предположить, что в результате деформации образца степень ориентационного упорядочения внутри каждого его слоя не меняется (не меняются значения локальных параметров ориентационного порядка  $s_i$ ), а изменения его свободной энергии вызваны лишь небольшими изменениями  $\Delta V_i$  одночастичных псевдопотенциалов (5), (6), связанными с малыми поворотами локального директора  $\mathbf{n}_i$  относительно локальных директоров  $\mathbf{n}_{i-1}$  и  $\mathbf{n}_{i+1}$  двух соседних

с ним слоев (для первого слоя также за счет поворота его локального директора  $\mathbf{n}_1$  относительно нормали  $\mathbf{v}$  к поверхности подложки). Если также предположить, что внутри каждого  $i$ -го слоя образца сохраняется аксиальная симметрия ориентации длинных осей молекул относительно направления локального директора  $\mathbf{n}_i$ , то нетрудно показать, что вызванные деформацией изменения одночастичных псевдопотенциалов  $\Delta V_i$  с точностью до членов второго порядка по углам  $\theta_1$ ,  $\theta_{i,i-1}$  и  $\theta_{i,i+1}$  описываются выражениями

$$\Delta V_1 = \frac{1}{2} V_0 \left( \frac{3}{2} \cos^2 \vartheta_1 - \frac{1}{2} \right) [s_2 \theta_{1,2}^2 + 3(W_0/V_0) \theta_1^2], \quad (12)$$

$$\Delta V_{2 \leq i \leq N} = \frac{1}{2} V_0 \left( \frac{3}{2} \cos^2 \vartheta_i - \frac{1}{2} \right) [s_{i-1} \theta_{i,i-1}^2 + s_{i+1} \theta_{i,i+1}^2], \quad (13)$$

$$\Delta V_N = \frac{1}{2} V_0 \left( \frac{3}{2} \cos^2 \vartheta_N - \frac{1}{2} \right) s_{N-1} \theta_{N,N-1}^2, \quad (14)$$

а соответствующие изменения свободных энергий слоев образца равны

$$\Delta F_1 = \frac{1}{4} N_i V_0 [s_1 s_2 \theta_{1,2}^2 + 6(W_0/V_0) s_1 \theta_1^2], \quad (15)$$

$$\Delta F_{2 \leq i \leq N} = \frac{1}{4} N_i V_0 (s_i s_{i-1} \theta_{i,i-1}^2 + s_i s_{i+1} \theta_{i,i+1}^2), \quad (16)$$

$$\Delta F_N = \frac{1}{4} N_i V_0 s_N s_{N-1} \theta_{N,N-1}^2. \quad (17)$$

Сделав допущение, что локальные директора всех слоев деформированного образца лежат в одной плоскости, уравнения (15)–(17) можно записать в виде

$$\Delta F_1 = \frac{1}{4} N_i V_0 [s_1 s_2 (\theta_2 - \theta_1)^2 + 6(W_0/V_0) s_1 \theta_1^2], \quad (18)$$

$$\Delta F_{2 \leq i \leq N} = \frac{1}{4} N_i V_0 \times [s_i s_{i-1} (\theta_i - \theta_{i-1})^2 + s_i s_{i+1} (\theta_{i+1} - \theta_i)^2], \quad (19)$$

$$\Delta F_N = \frac{1}{4} N_i V_0 s_N s_{N-1} (\theta_N - \theta_{N-1})^2. \quad (20)$$

Если считать углы  $\theta_i$  ( $i = 1, N-1$ ) внешними параметрами, то их значения при заданной величине угла  $\theta_N$  могут быть определены минимизацией полного изменения свободной энергии образца  $\Delta F = \sum_{i=1}^N \Delta F_i$  по каждому из них. В результате получается система уравнений

$$3(W_0/V_0) s_1 \theta_1 - s_1 s_2 (\theta_2 - \theta_1) = 0,$$

$$s_i s_{i-1} (\theta_i - \theta_{i-1}) - s_i s_{i+1} (\theta_{i+1} - \theta_i) = 0,$$

$$2 \leq i \leq N-1,$$

$$s_{N-2} s_{N-1} (\theta_{N-1} - \theta_{N-2}) - s_{N-1} s_N (\theta_N - \theta_{N-1}) = 0 \quad (21)$$

решение которой имеет вид

$$\theta_1 = \theta_N / (1 + K^*), \quad (22)$$

$$\theta_{2 \leq k \leq N-1} = \theta_1 \left( 1 + \sum_{i=1}^{k-1} K_i^* \right), \quad (23)$$

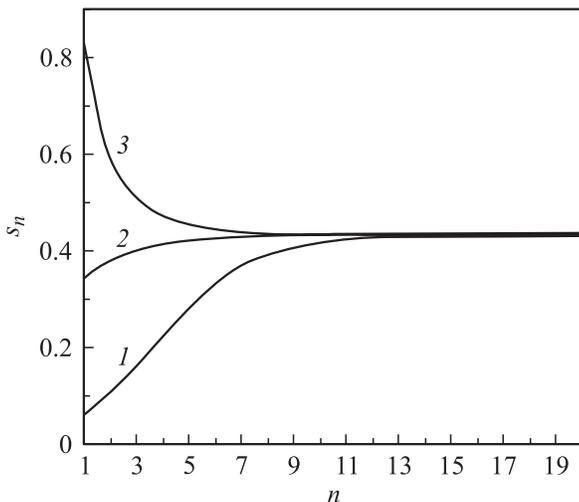
$$K_i^* = 3(W_0/V_0)s_1/(s_i s_{i+1}), \quad (24)$$

$$K^* = \sum_{i=1}^{N-1} K_i^*. \quad (25)$$

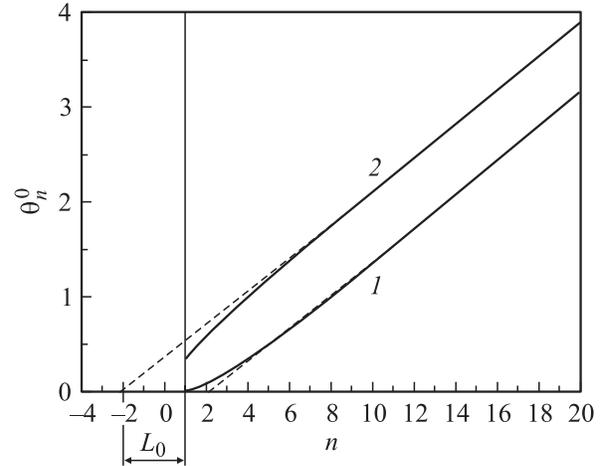
При этом используются значения локальных параметров ориентационного порядка  $s_i$ , найденные из самосогласованных уравнений (7) для недеформированного образца.

### 3. Результаты численных расчетов и их обсуждение

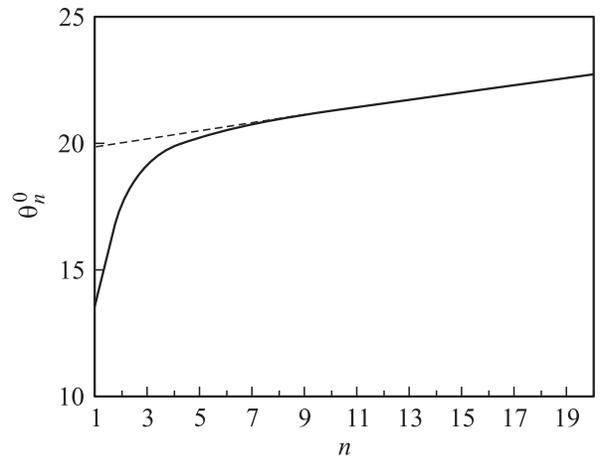
Прежде всего были рассчитаны профили локальных параметров ориентационного порядка  $s_i$  в недеформированном образце НЖК, состоящем из  $N = 500$  слоев. На рис. 1 показаны результаты расчетов, проведенных при значении приведенной температуры  $T^* = 0.22$ , близком к температуре  $T_{IN}^*$  фазового перехода первого рода изотропная фаза–НЖК (согласно теории Мак Миллана [41], а также Майера–Заупе [42,43],  $T_{IN}^* = 0.2202$ ), для случаев „сильного“ ( $W_0/V_0 = 1$ ), „слабого“ ( $W_0/V_0 = 0.1$ ), и „очень слабого“ ( $W_0/V_0 = 0.01$ ) анизотропного взаимодействия молекул НЖК с поверхностью подложки. Из этого рисунка видно, что в случае „очень слабого“ анизотропного взаимодействия молекул НЖК с поверхностью подложки величина локальных параметров ориентационного порядка у поверхности подложки значительно меньше, чем в объеме НЖК, в случае „слабого“ анизотропного



**Рис. 1.** Зависимости величины локального параметра ориентационного порядка  $s_n$  от расстояния до поверхности подложки (номера слоя  $n$ ).  $T^* = 0.22$ . 1 —  $W_0/V_0 = 0.01$ , 2 — 0.1, 3 — 1.



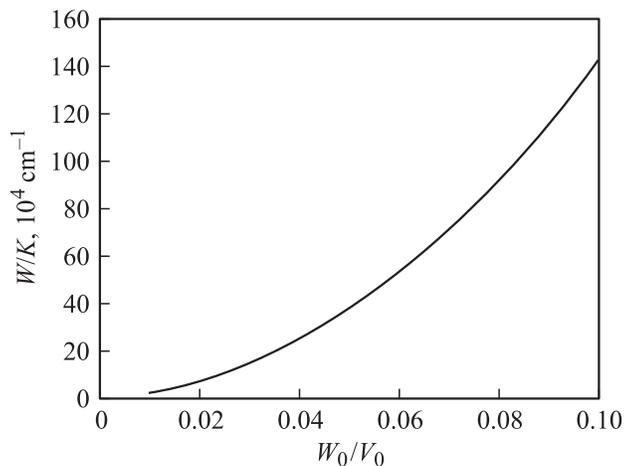
**Рис. 2.** Профили угла наклона  $\theta_n^0$  локального директора в НЖК образце, контактирующим с поверхностью подложки.  $T^* = 0.22$ . 1 —  $W_0/V_0 = 1$ , 2 — 0.1.



**Рис. 3.** Профиль угла наклона  $\theta_n^0$  локального директора при  $W_0/V_0 = 0.01$ .

взаимодействия степень ориентационного упорядочения у поверхности подложки лишь незначительно меньше, чем в объеме образца, а в случае „сильного“ анизотропного взаимодействия величина локального параметра ориентационного порядка у поверхности подложки почти в 2 раза превышает аналогичную величину для объема НЖК.

Затем полученные значения локальных параметров ориентационного порядка  $s_i$  использовались для расчета углов  $\theta_i$ , определяющих отклонение локальных директоров  $\mathbf{n}_i$  в деформированном образце от их первоначальной гомеотропной ориентации. На рис. 2 показаны профили этих углов, соответствующие случаям „сильного“ и „слабого“ анизотропного взаимодействия молекул НЖК с поверхностью подложки (т.е. кривым 3 и 2 на рис. 1), а на рис. 3 показан аналогичный профиль, соответствующий случаю „очень слабого“ анизотропного взаимодействия молекул НЖК с поверхностью



**Рис. 4.** Зависимость величины отношения  $W/K$  от величины отношения  $W_0/V_0$ .  $T^* = 0.22$ ,  $l_0 = 2.5$  nm.

подложки (т.е. кривой 1 на рис. 1). Из рис. 2 следует, что в случае „сильного“ анизотропного взаимодействия молекул НЖК с поверхностью подложки (кривая 1) угол  $\theta_1$  отклонения локального директора  $\mathbf{n}_1$  в первом слое образца от направления оси легкой ориентации практически равен 0, т.е. мы имеем дело с жестким сцеплением молекул НЖК с поверхностью твердой подложки [1–3], когда индуцированные внешним воздействием деформации образца не затрагивают молекулы НЖК, непосредственно контактирующие с подложкой. В случае „слабого“ анизотропного взаимодействия молекул НЖК с поверхностью подложки (кривая 2 на рис. 2) угол  $\theta_1$  отличен от нуля, но очень мал ( $\sim 0.5^\circ$ ), а соответствующая экстраполяционная длина  $L_0$  равна всего трем длинам молекул, т.е.  $\sim 7$  nm. Если в выражение  $L_0 = K/W$  (в случае гомеотропной ориентации  $K = K_{33}$ ) положить  $K \sim 10^{-6}$  dyn ( $10^{-11}$  N) (типичное значение модуля  $K_{33}$  для НЖК [29,30]), нетрудно видеть, что такому значению экстраполяционной длины  $L_0$  соответствует величина  $W \sim 1.4$  erg/cm<sup>2</sup> ( $1.4 \cdot 10^{-3}$  J/cm<sup>2</sup>). Таким образом, даже когда константа анизотропного взаимодействия молекул НЖК с поверхностью подложки  $W_0$  составляет всего 10 процентов от константы  $V_0$  анизотропного межмолекулярного взаимодействия в НЖК, мы получаем величину коэффициента энергии сцепления  $W$ , соответствующую случаю „сильного“ сцепления. Этот результат полностью согласуется с приведенным в [32] утверждением, что большая величина коэффициента  $W$  не обязательно подразумевает существование сильного ориентирующего воздействия подложки на НЖК на микроскопическом уровне. И только в случае „очень слабого“ анизотропного взаимодействия молекул НЖК с поверхностью подложки (рис. 3) мы имеем заметную величину ( $\sim 14^\circ$ ) угла  $\theta_1$  отклонения локального директора  $\mathbf{n}_1$  в первом слое образца от направления оси легкой ориентации в макроскопическую длину  $L_0 \sim 350$  nm (на рис. 3 она не показана).

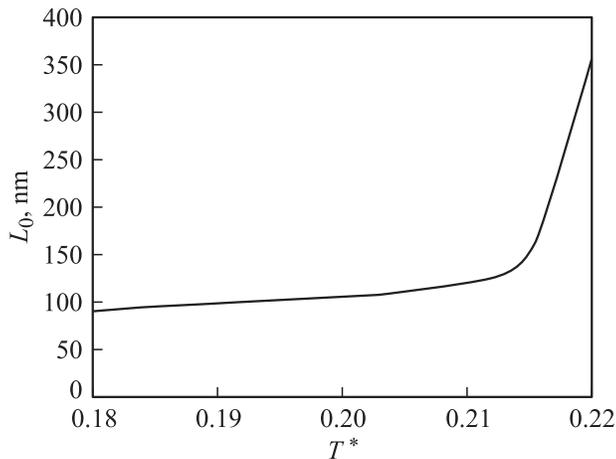
Чтобы исследовать связь между величиной отношения  $W_0/V_0$ , которое в рамках предложенной модели характеризует анизотропное взаимодействие между молекулами НЖК и поверхностью подложки на микроскопическом уровне, и величиной коэффициента  $W$ , который характеризует ориентирующее действие подложки на НЖК на макроскопическом уровне, были рассчитаны профили углов  $\theta_i$  при различных значениях отношения  $W_0/V_0$  (при постоянной температуре  $T^* = 0.22$ ) в интервале от  $W_0/V_0 = 0.01$  до 0.1. Для каждого профиля определялась экстраполяционная длина  $L_0$  (при этом длина молекулы  $l_0$  считалась равной 2.5 nm, что является величиной, типичной для ЖК [29,30]), а следовательно, и величина отношения  $W/K$ . Результаты эти расчетов представлены на рис. 4. Зная величину  $K$  ( $\sim 10^{-6}$  dyn), с помощью зависимости, изображенной на этом рисунке, каждому значению отношения  $W_0/V_0$ , определяющего профиль углов  $\theta_i$  в нашем микроскопическом описании деформированного ЖК образца, контактирующего с поверхностью подложки, можно сопоставить величину коэффициента  $W$ , используемого при макроскопическом описании ориентирующего действия поверхности подложки на НЖК. Так, из этой зависимости следует, что величине коэффициента энергии сцепления  $W \sim 10^{-2}$  erg/cm<sup>2</sup> ( $\sim 10^{-5}$  J/m<sup>2</sup>) соответствует величина отношения  $W_0/V_0 \sim 0.01$ ,  $W \sim 10^{-1}$  erg/cm<sup>2</sup> ( $\sim 10^{-4}$  J/m<sup>2</sup>) соответствует  $W_0/V_0 \sim 0.03$ , а  $W \sim 1$  erg/cm<sup>2</sup> ( $\sim 10^{-3}$  J/m<sup>2</sup>) соответствует  $W_0/V_0 \sim 0.08$ .

Полученные результаты также позволяют установить связь между профилями локальных параметров ориентационного порядка в приповерхностном слое НЖК и величиной коэффициента  $W$ . Сопоставляя результаты расчетов, приведенные на рис. 1–4, легко видеть, что случай „слабого“ сцепления ( $W \sim 10^{-2}$  erg/cm<sup>2</sup>) соответствует такому профилю локальных параметров ориентационного порядка, когда значение этих параметров у поверхности подложки значительно меньше, чем в объеме НЖК, а случай „сильного“ сцепления ( $W \sim 1$  erg/cm<sup>2</sup>) соответствует такому профилю локальных параметров ориентационного порядка, когда степень ориентационного упорядочения у поверхности подложки сопоставима со степенью ориентационного упорядочения в объеме НЖК. Наконец, профиль локальных параметров ориентационного порядка, при котором ориентационное упорядочение у поверхности подложки значительно сильнее, чем вдали от нее, соответствует случаю жесткого сцепления.

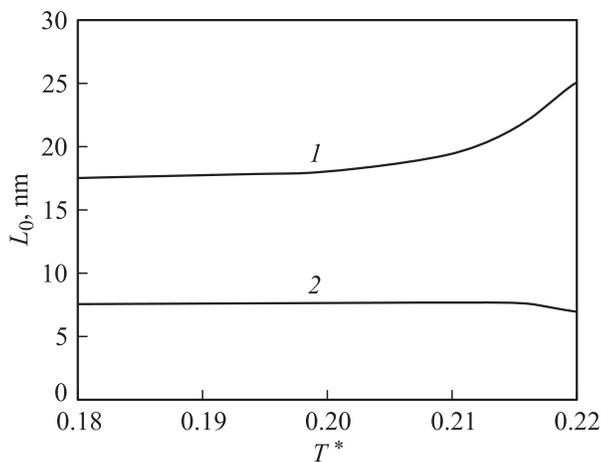
Также были рассчитаны температурные зависимости экстраполяционной длины  $L_0$  при различных значениях отношения  $W_0/V_0$ . Результаты этих расчетов при  $W_0/V_0 = 0.01$ , 0.05 и 0.1 приведены на рис. 5 и 6. Из рис. 5 следует, что в случае „слабого“ сцепления ( $W_0/V_0 = 0.01$ ,  $W \sim 10^{-2}$  erg/cm<sup>2</sup>) понижение температуры образца НЖК ведет к значительному (более чем в 3 раза) уменьшению экстраполяционной длины  $L_0$  по сравнению с ее величиной вблизи температуры  $T_{IN}^*$  фазового перехода изотропная фаза–НЖК, причем это

уменьшение сперва происходит очень быстро, а затем при дальнейшем понижении температуры величина  $L_0$  уменьшается довольно незначительно. Согласно рис. 6 (кривая 1), при  $W_0/V_0 = 0.05$  ( $W \sim 3 \cdot 10^{-1} \text{ erg/cm}^2$ ) понижение температуры НЖК образца приводит к гораздо менее существенному уменьшению экстраполяционной длины  $L_0$  (от  $L_0 \sim 25 \text{ nm}$  вблизи  $T_{\text{IN}}^*$  до  $L_0 \sim 18 \text{ nm}$  при  $T^* = 0.18$ ). При этом значительная часть этого спада опять приходится на область температур вблизи температуры фазового перехода изотропная фаза–НЖК, а последующее понижение температуры не приводит к сколько-нибудь заметному уменьшению экстраполяционной длины  $L_0$ . Этот результат, как по величине  $L_0$ , так и по ее поведению при понижении температуры, очень хорошо согласуется с экспериментальными данными [44]. Наконец, при  $W_0/V_0 = 0.1$  ( $W \sim 1 \text{ erg/cm}^2$ ) величина экстраполяционной длины  $L_0$  составляет около  $7 \text{ nm}$  и практически не зависит от температуры.

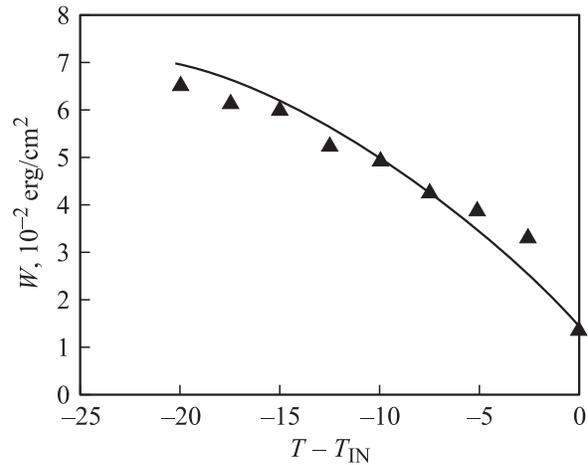
В заключение была рассчитана температурная зависимость коэффициента энергии сцепления  $W$  для



**Рис. 5.** Температурная зависимость экстраполяционной длины  $L_0$  при  $W_0/V_0 = 0.01$ ,  $l_0 = 2.5 \text{ nm}$ .



**Рис. 6.** Температурные зависимости экстраполяционной длины  $L_0$  при  $W_0/V_0 = 0.05$  (1) и  $0.1$  (2),  $l_0 = 2.5 \text{ nm}$ .



**Рис. 7.** Температурная зависимость коэффициента энергии сцепления  $W$  для НЖК МББА. Экспериментальные точки взяты из работы [45].

конкретного НЖК МББА, находящегося в контакте с подложкой, покрытой ориентантом, индуцирующим в образце гомеотропную ориентацию, и было проведено сравнение результатов расчета с соответствующими экспериментальными данными, приведенными в работе [45]. Для этого были использованы экспериментальное значение  $W = 1.3 \cdot 10^{-2} \text{ erg/cm}^2$ , найденное в этой работе вблизи температуры  $T_{\text{IN}}$  фазового перехода изотропная жидкость–НЖК (для МББА  $T_{\text{IN}} = 318 \text{ K}$  ( $45^\circ\text{C}$ )), а также величина упругого модуля  $K = K_{33} \sim 4.5 \cdot 10^{-7} \text{ dyn}$  [29] для МББА при этой же температуре. Оказалось, что соответствующему значению отношения  $K/W$  соответствует значение  $W_0/V_0 \approx 0.01$ . При этом значении отношения  $W_0/V_0$  была рассчитана температурная зависимость отношения  $K/W$ , а затем с учетом того, что модуль упругости  $K$  пропорционален  $s_b^2$ , где  $s_b$  — параметр ориентационного порядка в объеме НЖК, и температурная зависимость коэффициента  $W$ , показанная на рис. 7. На этом же рисунке приведены экспериментальные точки, взятые из [45]. Нетрудно убедиться, что имеет место довольно хорошее согласие теории с экспериментом.

## Список литературы

- [1] Л.М. Блинов, Е.И. Кац, А.А. Сонин. УФН **152**, 449 (1987).
- [2] В.Н. Матвеевко, Е.А. Кирсанов. Поверхностные явления в жидких кристаллах. МГУ, М. (1991). 272 с.
- [3] В. Jerome. Rep. Prog. Phys. **54**, 391 (1991).
- [4] К. Miyano. Phys. Rev. Lett. **43**, 51 (1979).
- [5] К. Miyano. J. Chem. Phys. **71**, 4108 (1979).
- [6] Н. Mada, S. Kobayashi. Appl. Phys. Lett. **35**, 4 (1979).
- [7] Z. Salamon, A. Skibinski. Mol. Cryst. Liq. Cryst. **65**, 51 (1981).
- [8] Н. Yokoyama, S. Kobayashi, Н. Kamei. Appl. Phys. Lett. **41**, 438 (1982).
- [9] H.A. Van Sprang. J. Phys. (France) **44**, 421 (1983).

- [10] J.P. Nicholson. *J. Phys. (France)* **48**, 131 (1987).
- [11] J.P. Nicholson. *J. Phys. (France)* **49**, 2111 (1988).
- [12] L.J. Martinez-Miranda, H. Hsiung, Y.R. Shen. *Phys. Rev. Lett.* **62**, 1860 (1989).
- [13] R.G. Horn, J.N. Israelachvili, E. Perez. *J. Phys. (France)* **42**, 39 (1981).
- [14] Rosenblatt. *Phys. Rev. Lett.* **53**, 791 (1984).
- [15] G.P. Sinha, C. Rosenblatt, L.V. Mirantsev. *Phys. Rev. E* **65**, 041 718 (2002).
- [16] T. Shinoda, B. Wen, C. Rosenblatt. *Phys. Rev. E* **67**, 041 706 (2003).
- [17] Z. Huang, G. Cargone, C. Xia, G.P. Sinba, C. Rosenblatt. *Phys. Rev. E* **72**, 021 708 (2005).
- [18] Е.С. Лукьянченко, В.А. Корзунов, В.И. Григос. *Успехи химии* **54**, 204 (1985).
- [19] Ж. Коньяр. *Ориентация нематических жидких кристаллов и их смесей*. Минск (1986).
- [20] D. Seo, S. Kobayashi. *Liq. Cryst.* **27**, 883 (2000).
- [21] J.C. Jung, K.H. Lee, B.S. Sohn, S.W. Lee, M. Ree. *Macromol. Symp.* **164**, 227 (2001).
- [22] G.P. Sinba, B. Wen, C. Rosenblatt. *Appl. Phys. Lett.* **79**, 2543 (2001).
- [23] I.M. Syed, C. Rosenblatt. *Phys. Rev. E* **68**, 031 701 (2003).
- [24] B. Zhang, F.K. Lee, O.K. Tsui, P. Sheng. *Phys. Rev. Lett.* **91**, 21 501 (2003).
- [25] G. Garbone, C. Rosenblatt. *Phys. Rev. Lett.* **94**, 057 802 (2005).
- [26] Л.М. Блинов. *Электро- и магнитооптика жидких кристаллов*. Наука, М. (1978).
- [27] С.В. Беляев. *Изв. АН СССР. Сер. физ.* **53**, 2004 (1989).
- [28] M. Schadt, J. Funfschilling. *Jap. J. Appl Phys.* **29**, 1974 (1990).
- [29] П. Де Жен. *Физика жидких кристаллов*. Мир, М. (1977). 400 с.
- [30] С. Чандрасекар. *Жидкие кристаллы*. Мир, М. (1980). 344 с.
- [31] A. Rapini, M. Papoular. *J. Phys. (France) Coll.* **30**, 54 (1969).
- [32] H. Yokoyama. *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **165**, 265 (1988).
- [33] L.R. Evangelista, G. Barbero. *Phys. Rev. E* **48**, 1163 (1993).
- [34] A.L. Alexe-Ionescu, G. Barbero, Z. Gabbasova, G. Sayko, A.K. Zvezdin. *Phys. Rev. E* **49**, 5354 (1994).
- [35] L.R. Evangelista, S. Ponti. *Phys. Lett. A* **197**, 55 (1995).
- [36] P. Galatola, C. Oldano, M. Rajteri, G. Barbero. *Phys. Lett. A* **210**, 101 (1996).
- [37] S. Ponti, L.R. Evangelista. *Liq. Cryst.* **20**, 105 (1996).
- [38] M. Rajteri, G. Barbero, P. Galatola, C. Oldano. *Phys. Rev. E* **53**, 6093 (1996).
- [39] L.V. Mirantsev. *Phys. Lett. A* **205**, 412 (1995).
- [40] L.V. Mirantsev. *Liq. Cryst.* **20**, 417 (1996).
- [41] W.L. McMillan. *Phys. Rev. A* **4**, 1238 (1971).
- [42] W. Maier, A. Saupe. *Z. Naturf. A* **14**, 882 (1959).
- [43] W. Maier, A. Saupe. *Z. Naturf. A* **15**, 287 (1960).
- [44] J.C. Fonseca, Y. Galerne. *Phys. Rev. E* **61**, 1550 (2000).
- [45] C. Rosenblatt. *J. Phys. (France)* **45**, 1087 (1984).