

01;07

## Влияние структуры поля директора на оптические свойства нематической жидкокристаллической капли

© В.А. Лойко, В.И. Молочко

Институт физики им. Б.И. Степанова АН Белоруссии,  
220072 Минск, Белоруссия

(Поступило в Редакцию 19 мая 1998 г.)

На основе вычислений в приближении дискретных диполей (Discrete-Dipole Approximation — DDA) рассмотрены изменения оптических свойств сферической биполярной жидкокристаллической капли в результате изменения структуры поля директора капли под воздействием приложенного внешнего поля на основе модели вложенных эллипсоидов. Приведены графики для фактора эффективности ослабления и угловой структуры рассеяния для двух типичных случаев сильной и слабой зависимости оптических свойств капли от изменения структуры поля директора капли.

### Введение

Использование в оптических устройствах жидких кристаллов (ЖК) в виде отдельных капель, диспергированных в полимере (polymer-dispersed liquid crystal droplets — PDLC), привлекают к себе внимание как перспективный способ для создания на их основе ряда электрооптических элементов. Электрооптические параметры таких систем зависят от технологии их изготовления [1,2]. Они определяются размером, формой капли, концентрацией и ориентацией капель в слое, показателем преломления полимера и капель и т.д. Наиболее существенным фактором, определяющим свойства PDLC слоя, является, как правило, ориентация капель внутри образца, большая или меньшая упорядоченность директоров отдельных капель в PDLC слое. Степень этой упорядоченности изменяется при приложении внешнего электрического поля к образцу, следовательно, изменяются оптические свойства самого образца под воздействием электрического поля. В большинстве случаев этот эффект по величине значительно превосходит остальные и в расчетах принимается во внимание лишь он. В то же время известно, что под воздействием электрического поля в PDLC образце происходят и другие изменения [1–5], оказывающие влияние на его оптические свойства. Учет их, как правило, достаточно сложен, а вклад в оптические свойства образца не столь значителен, как вклад эффекта ориентации капель, что используется в большинстве работ для описания оптических свойств капель на основе упрощенных моделей [6–12].

Одним из таких эффектов является трансформация внутренней структуры поля директора PDLC капли при приложении внешнего напряжения. Для образца вне поля или в слабом электрическом поле, когда директоры частиц разупорядочены, влияние этого эффекта, очевидно, незначительно. Но в моде прозрачности, когда под воздействием поля директоры частиц в образце более или менее упорядочены, его влияние может быть существенным. Для PDLC слоев существует проблема

недостаточной прозрачности, или мутности, даже при приложенном внешнем поле [1,7]. В моде прозрачности влияние незначительного в других случаях эффекта может существенно увеличить или уменьшить мутность образца. В таком случае учет трансформации структуры поля директора PDLC капли под воздействием внешнего поля может быть необходим.

Рассмотрению и оценке влияния эффекта трансформации структуры поля директора на оптические свойства PDLC капли на примере наиболее распространенной биполярной структуры директора и посвящена настоящая работа. В качестве метода расчета нами выбрано приближение дискретных диполей (Discrete-Dipole Approximation — DDA), так как точность традиционных приближений (приближение Рэлея–Ганса и приближение аномальной дифракции) не всегда достаточна для описания рассеяния на ЖК капле.

### Основные соотношения

Рассмотрим ЖК каплю, помещенную в полимер, с показателем преломления  $n_m$  в поле световой волны  $\mathbf{E}^{inc} = \mathbf{e}_0 E_0 \exp(i\mathbf{k}_0 \mathbf{r})$ ,  $\mathbf{e}_0$  — единичный вектор поляризации. Обозначим через  $\mathbf{k}$  вектор в направлении рассеяния, направление оси  $x$  декартовой системы координат совпадает с направлением директора капли, угол между вектором  $\mathbf{k}$  и директором капли обозначим  $\alpha$  (рис. 1). Запишем рассеянное поле обычным образом

$$\begin{pmatrix} E_{\parallel} \\ E_{\perp} \end{pmatrix} = \frac{\exp(ikr)}{-ikr} \begin{pmatrix} S_2 & S_3 \\ S_4 & S_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{\parallel}^{inc} \\ E_{\perp}^{inc} \end{pmatrix}, \quad (1)$$

где  $E_{\perp}$ ,  $E_{\parallel}$  — соответственно перпендикулярная и параллельная плоскости рассеяния компонента вектора  $\mathbf{E}$ .

В дальнейшем будем пользоваться относительными показателями преломления, таким образом полагая  $n_m = 1$ . Обозначим волновое число  $k \equiv 2\pi/\lambda$ , где  $\lambda$  — длина волны в полимерной матрице. Положим жидкий кристалл одноосным. В этом случае его тензор диэлектрической проницаемости, приведенный к

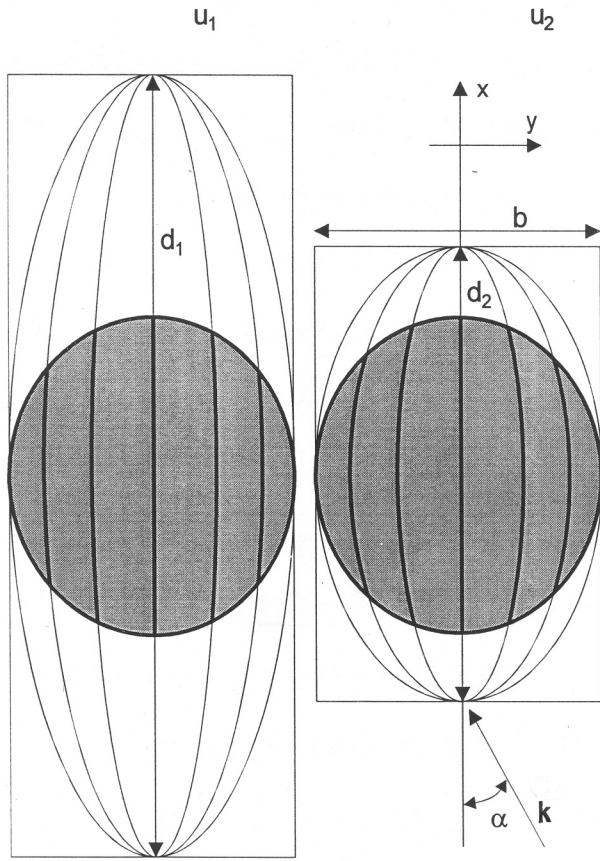


Рис. 1. Геометрия модели вложенных эллипсоидов для ЖК капли с биполярной структурой.

диагональной форме, имеет два совпадающих значения  $\hat{\epsilon} = \text{diag}(n_0^2, n_0^2, n_e^2)$  ( $n_0$  — показатель преломления обыкновенного луча,  $n_e$  — показатель преломления необыкновенного луча).

Для расчета оптических свойств ЖК капли используем приближение дискретных диполей (DDA), основанное на представлении рассеивателя в виде массива малых рассеивателей (диполей), обладающих поляризуемостью, находимой исходя из их размера и характеристик вещества капли. Каждый из них характеризуется своим расположением и поляризуемостью, выбор которой представляет собой нетривиальную задачу [13,14].

В соответствии с [13,14] задача нахождения поляризации каждого из элементарных диполей в поле внешней волны  $\mathbf{E}^{inc}$  сводится к решению следующей системы линейных уравнений

$$\mathbf{P}_j = \hat{\alpha}_j \left[ \mathbf{E}^{inc} + \sum_{k \neq j} \hat{\mathbf{A}}_{jk} \mathbf{P}_k \right]. \quad (2)$$

Здесь  $\hat{\alpha}_j$  — поляризуемость  $j$ -го диполя (см. в [13,14] выражения для  $\hat{\alpha}_j$ ); член  $\hat{\mathbf{A}}_{jk} \mathbf{P}_k$  представляет поле, индуцированное  $k$ -м диполем с поляризацией  $\mathbf{P}_k$  на  $j$ -м диполе.

Как правило, решение системы уравнений (2) сводится к итерациям, физический смысл которых состоит в учете все более высоких кратностей рассеяния на системе  $N$  элементарных диполей. Для поляризуемости  $j$ -го диполя имеем

$$\hat{\alpha}_j = \hat{\mathbf{M}}_j^{-1} \hat{\alpha} \hat{\mathbf{M}}_j, \quad (3)$$

где  $\hat{\alpha}$  — диагональный тензор поляризуемости, приведенный в [13,14];

$$\hat{\mathbf{M}}_j = \hat{\mathbf{R}}_x(\alpha_j) \hat{\mathbf{R}}_y(\beta_j) \hat{\mathbf{R}}_z(\gamma_j), \quad (4)$$

$\alpha_j, \beta_j, \gamma_j$  — углы поворота  $j$ -го диполя вокруг осей  $x, y, z$ ;  $\hat{\mathbf{R}}_x(\alpha)$ ,  $\hat{\mathbf{R}}_y(\beta)$ ,  $\hat{\mathbf{R}}_z(\gamma)$  — матрицы поворота вокруг этих осей соответственно.

Нами использована модель вложенных эллипсоидов для описания поля директора в частице. В этой параметризации молекулы жидкого кристалла в капле ориентированы по касательным, лежащим в одной плоскости с директором капли, к поверхностям системы вложенных концентрических эллипсоидов с общей осью (рис. 1).

В этом случае для сферической частицы тензор поляризуемости  $\hat{\alpha}_j$  получается в результате поворота тензора поляризуемости  $\hat{\alpha}$ , используемого в [13,14] на следующие углы:

$$\alpha_j = \arctan(z_j, y_j), \quad \beta_j = 0, \quad (5a), (5b)$$

$$\gamma_j = \frac{\pi}{2} - \arctan \left( x_j \sqrt{y_j^2 + z_j^2}, (b(1+u))^2 - x_j^2 \right), \quad (5b)$$

$$u \equiv \frac{d-b}{b}, \quad (5r)$$

$$-b/2 \leq x_j \leq b/2, \quad (5d)$$

$$-a/2 \leq y_j \leq a/2, \quad (5e)$$

$$-a/2 \leq z_j \leq a/2. \quad (5ж)$$

Здесь  $a, b$  — длины осей эллипсоидальной капли;  $d$  — общая ось системы вложенных эллипсоидов, моделирующих конфигурацию директора в капле (рис. 1), если  $s = \sin(t)$ ,  $c = \cos(t)$ , то  $\arctan(s, c) = t$ .

В дальнейшем для простоты будем полагать каплю сферической, т.е.  $a = b$ . Тензор  $\hat{\alpha}$  находился в соответствии с [13,14] для диэлектрической проницаемости  $\hat{\epsilon} = \text{diag}(\epsilon_0, \epsilon_e, \epsilon_0)$ .

Параметр  $u$  (формула 5r) равен нулю для биполярной эллипсоидальной капли при отсутствии внешнего поля. При стремлении  $u$  к бесконечности биполярная капля переходит в каплю с однородной ориентацией молекул. Параметр  $u$  нами рассматривается в дальнейшем как модельное внешнее напряжение, приложенное к биполярной эллипсоидальной капле. Модель вложенных эллипсоидов применялась также ранее в [1,15–17] для описания структуры биполярной капли.

Для фактора эффективности рассеяния, равном для непоглощающих частиц фактору эффективности ослабления, имеем [13]

$$Q_{sca} = \left( \frac{4}{xE_0} \right)^2 \sum_{j=1}^N \text{Im} (k^3 \mathbf{P}_j \mathbf{E}_j^{inc}), \quad (6)$$

где  $x \equiv \pi a / \lambda$  — параметр дифракции сферической капли.

В дальнейших расчетах в качестве функции, характеризующей угловую структуру рассеянного излучения, будем использовать величину  $I$

$$I \equiv \frac{1}{2} (|S_1|^2 + |S_2|^2). \quad (7)$$

Безразмерное значение  $I$  связано с дифференциальным сечением рассеяния  $d\sigma/d\Omega$  для естественного света соотношением

$$I = \frac{d\sigma}{d\Omega} k^2. \quad (8)$$

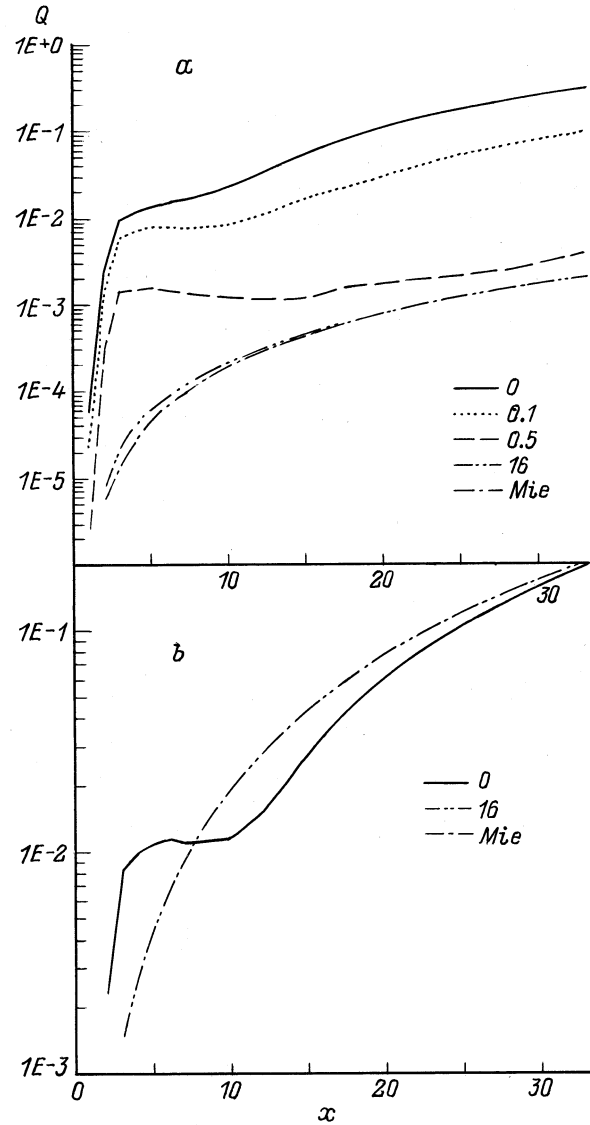
## Результаты расчетов

На рис. 2 приведены результаты расчета фактора эффективности ослабления биполярной сферической капли от модельного напряжения  $u$  для  $n_0 = 0.999$  (a), 0.99 (b) и  $n_e = 1.15$  при значениях  $u = 0, 0.1, 0.5, 16$  (a) и  $u = 0.16$  (b). Значение  $u = 0$  соответствует биполярному рассеивателю при отсутствии поля  $u = 16$ , практически соответствует гомеотропному кристаллу (оси молекул жидкого кристалла сонаправлены).

Выбор значения обыкновенного показателя преломления  $n_0 = 0.999$  приводит к значительной зависимости фактора эффективности ослабления от параметра  $u$ . Так, его величина для  $u = 0$  и 16 отличается более чем на два порядка. Это означает, что при таком весьма точном подборе параметров образца учет изменения структуры биполярного рассеивателя при приложении поля приводит к существенному изменению, в целом "мутности" PDLC образца.

На рис. 2, a приведена также зависимость фактора эффективности ослабления однородной частицы (расчет по Ми) с показателем преломления  $n$ , равным обыкновенному показателю преломления  $n_0$ . Эта кривая очень близка к кривой  $u = 16$ , что говорит о применимости модели однородной частицы с эффективным показателем преломления для описания фактора эффективности ослабления биполярной капли в сильном поле в нашем случае. На рис. 2, b ( $n_0 = 0.99$ ) существенной зависимости фактора эффективности ослабления от модельного напряжения  $u$ , наоборот, не наблюдается. Кривые для  $u = 0$  и 16 отличаются незначительно, расчет по Ми и кривая  $u = 16$  совпадают.

Различия в картинах поведения фактора эффективности ослабления от параметра  $u$  на рис. 2 можно объяснить различным соотношением вклада двух частей:

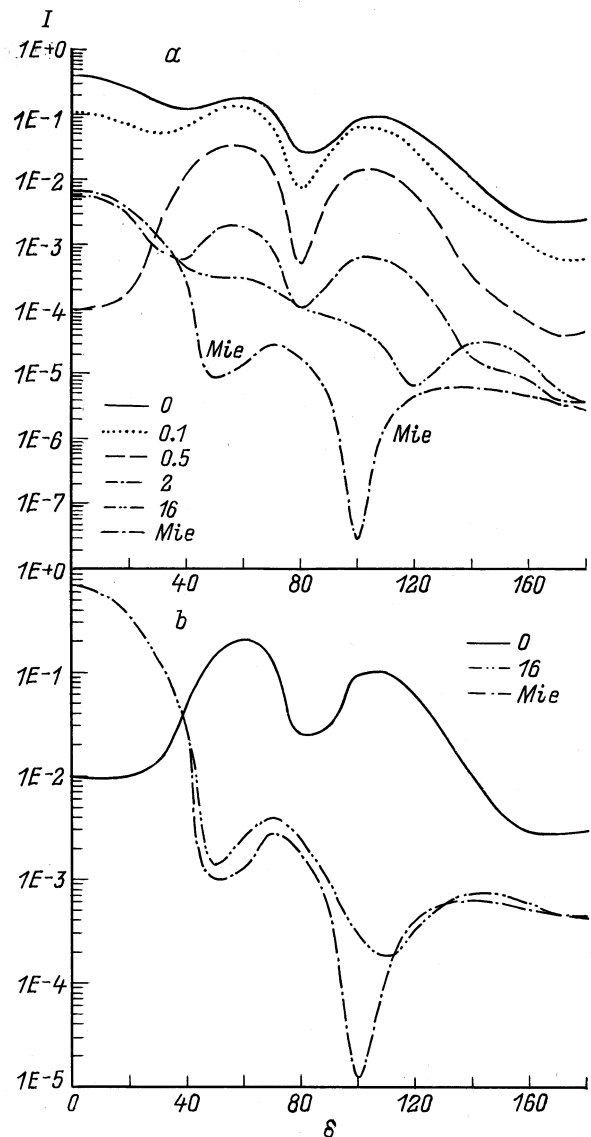


**Рис. 2.** Зависимость фактора эффективности ослабления  $Q$  сферической биполярной капли от размера ЖК капли  $x$  для  $n_0 = 0.999$  (a),  $n_0 = 0.99$  (b) и  $n_e = 1.15$  для значений параметра  $u = 0, 0.1, 0.5, 16$  (a) и  $0, 16$  (b) и направления падения света, совпадающего с директором капли  $\alpha = 0$ . Штрихпунктир — расчет по Ми для однородного рассеивателя с показателем преломления  $n = 0.999$  (a), 0.99 (b).

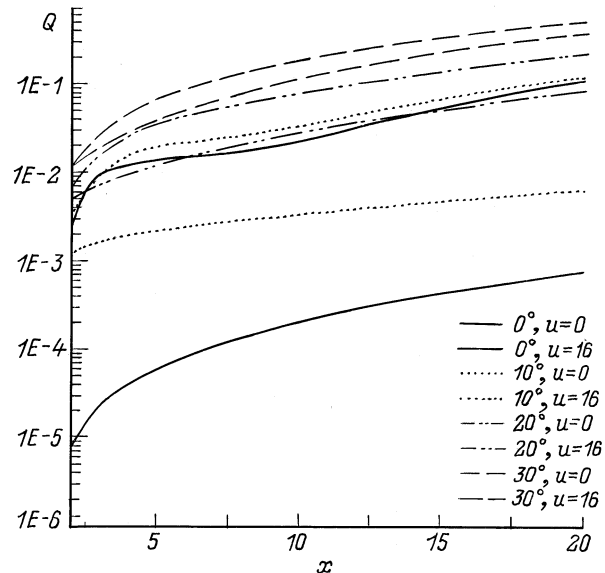
рассеяния на эффективном однородном рассеивателе и на неоднородностях показателя преломления (структуры) рассеивателя. На рис. 2, b ( $n_0 = 0.99$ ) величина фактора эффективности рассеяния по абсолютной величине значительно больше, чем на рис. 2, a ( $n_0 = 0.999$ ). В то же время вклад рассеяния на неоднородностях структуры капли в обоих случаях приблизительно равен (так как он определяется в основном значением необыкновенного показателя преломления  $n_e$  и структурой директора) и составляет на рис. 2 порядка  $10^{-2}$ . Если на фоне общей величины фактора эффективности ослабления порядка  $10^{-4} - 10^{-3}$  на рис. 2, a величина этого вклада существен-

на, то для величины фактора эффективности ослабления порядка  $10^{-2} - 10^{-1}$  на рис. 2, *b* ее влияние малю.

Приведенные на рис. 2 графики позволяют оценить влияние изменения структуры биполярной PDLC капли на ее оптические свойства. В большинстве случаев при описании PDLC образца в рассеивающей моде широко используемая модель гомеотропной капли (т.е. игнорирование влияния структуры капли) с достаточной точностью описывает ее оптические свойства. В то же время для образца в моде прозрачности, когда директора частиц ориентированы вдоль поля, вклад влияния изме-



**Рис. 3.** Угловая структура рассеянного излучения  $I = (|S_1|^2 + |S_2|^2)/2$  сферической биполярной капли  $x$  для  $n_0 = 0.999$  (a), 0.99 (b) и  $n_e = 1.15$  для значений параметра  $u = 0, 0.1, 0.5, 2, 16$  (a) и 0, 16 (b) при освещении естественным светом с направлением, совпадающим с директором капли ( $\alpha = 0$ ). Штрихпунктир — расчет по Ми для однородного рассеивателя с показателем преломления  $n = 0.999$  (a), 0.99 (b).



**Рис. 4.** Зависимость фактора эффективности ослабления  $Q$  сферической биполярной капли от размера ЖК капли  $x$  для  $n_0 = 0.999$  и  $n_e = 1.15$  для значений модельного напряжения  $u = 0, 16$  и направления падения света  $\alpha = 0, 10, 20, 30^\circ$ .

нения структуры поля директора капли под воздействием внешнего поля может быть существенным. Более того, для решения известной проблемы "мутности" PDLC слоев [1] в моде прозрачности учет рассмотренного эффекта может быть необходим.

На рис. 3, *a, b* приведены зависимости угловой структуры рассеянного излучения для PDLC капель с  $x = 5$  для тех же значений показателей преломления, что и на рис. 2, *a, b*, и значений  $u = 0, 0.1, 0.5, 2, 16$  (a) и 0, 16 (b). На рис. 3 также построены графики угловой зависимости рассеяния для однородной частицы с показателем преломления, равным обыкновенному показателю преломления жидкого кристалла (расчет по Ми). Сравнение с графиком зависимости для однородной частицы показывает, что для PDLC капли в сильном поле модель гомеотропной капли хорошо описывает не только общее ослабление светового потока, но и угловую структуру рассеяния. В то же время для биполярной структуры при небольших "напряжениях"  $u$  структура рассеянного излучения на большие углы определяется как в одном, так и в другом случае рассеянием на неоднородностях показателя преломления капли. Это означает, что для описания угловой структуры рассеянного излучения необходим учет конфигурации директора в капле даже в тех случаях, когда фактор эффективности ослабления удовлетворительно описывается гомеотропной моделью.

На рис. 4 приведен график зависимости фактора эффективности рассеяния от размера капли для двух значений модельного напряжения  $u$  и четырех значений угла  $\alpha$  между директором капли и направлением падения света. Параметры капли на рис. 4 соответствуют параметрам

капель на рис. 2, а и 3,  $n_0 = 0.999$ ,  $n_e = 1.15$ . Из рисунка видно, что если при угле  $\alpha = 0$  фактор эффективности ослабления для капли в сильном поле и вне поля в нашем случае отличаются более чем на два порядка, то при угле  $\alpha = 30^\circ$  различие составляет около двух раз. Это связано с тем, что при увеличении угла  $\alpha$  между направлением директора частицы и направлением распространения света для выбранного значения показателя преломления обыкновенного луча, практически совпадающего с показателем преломления среды, капля "в целом" становится более жесткой и на фоне достаточно сильного рассеяния влияние изменения структуры поля директора на оптические свойства капли уменьшается.

## Заключение

В настоящей работе сделана попытка оценить влияние изменения структуры поля директора PDLC капли под воздействием напряжения на ее оптические свойства. В качестве величины, моделирующей напряженность приложенного внешнего поля, нами использовалась величина  $u$ , равная отношению осей системы вложенных эллипсоидов, представляющих направление директора ЖК в капле. Связь этого модельного напряжения с реальным напряжением зависит от параметров PDLC слоя, но на основании нашего простого рассмотрения можно сделать некоторые выводы.

В целом простая гомеотропная модель достаточно хорошо описывает ослабление света PDLC каплей. В то же время при описании PDLC слоя в моде прозрачности, а также для описания угловой структуры рассеянного излучения учет конфигурации директора в капле, а также изменения конфигурации под воздействием внешнего напряжения могут быть существенными.

Данное исследование было частично поддержано фондом CRDF (фонд исследований и развития для независимых государств бывшего СССР (грант N BE1-113).

## Список литературы

- [1] *Drzaic P.S.* // Liquid Crystal Dispersions. Singapore: World Scientific, 1995. 430 p.
- [2] *Жаркова Г.М., Сонин А.С.* // Жидкокристаллические композиты. М.: Наука, 1994. 213 с.
- [3] *Ковальчук А.В., Курик М.В., Лаврентович О.Д., Серган В.В.* // ЖЭТФ. 1988. Т. 94. Вып. 5. С. 350–364.
- [4] *Erdman J.H., Zumer S., Doane J.W.* // Phys. Rev. Lett. 1990. Vol. 64. P. 1907–1910.
- [5] *Ondris-Crawford R. et al.* // J. Appl. Phys. 1991. Vol. 69. N 5. P. 6380–6386.
- [6] *Drzaic P.S.* // SPIE. Vol. 1911. Liquid Crystals Chemistry. Physics and Applications. 1993. P. 153–159.
- [7] *Drzaic P.S.* // SPIE. Vol. 2175. Liquid Crystals Chemistry. Physics and Applications. 1994.
- [8] *Wu B.-G., West J.L., Doane J.W.* // J. Appl. Phys. 1987. Vol. 62. P. 3925–3931.
- [9] *Aphonin O.A., Panina Yu.V., Pravdin A.B., Yakovlev D.A.* // Liquid Crystals. 1993. Vol. 15. N 3. P. 395–407.
- [10] *Drzaic P.S.* // Mol. Cryst. Liq. Cryst. 1995. Vol. 261. P. 383–392.
- [11] *Kelly J.R., Palffy-Muhoray P.* // Mol. Cryst. Liq. Cryst. 1994. Vol. 243. P. 11–29.
- [12] *Bloisi F., Terrecuso P., Vicari L., Simoni F.* // Mol. Cryst. Liq. Cryst. 1995. Vol. 266. P. 229–239.
- [13] *Draine B.T., Flatau P.J.* // JOSA. 1994. Vol. 11. P. 1491–1499.
- [14] *Draine B.T.* // Astrophys. J. 1988. Vol. 333. P. 848–872.
- [15] *Williams R.D.* // J. Phys. A. 1986. Vol. 19. P. 3211–3222.
- [16] *Xu F., Kitzerow H.S., Crooker P.P.* // Phys. Rev. E. 1994. Vol. 49. P. 3061–3068.
- [17] *Ding J., Yang Y.* // Jap. J. Appl. Phys. 1992. Vol. 31. P. 2837–2845.