

双轴向列相液晶中畴壁的研究

李 健¹, 周 璇¹, 王晓燕², 徐洪亮², 张志东^{1*}

(1. 河北工业大学 理学院, 天津 300401, E-mail: jian_muzai@yahoo. cn;

2. 河北冀雅电子有限公司, 河北 石家庄)

摘 要: 利用双轴向列相液晶的连续体弹性理论研究畴壁, 在双轴相中发现了 9 种不同的畴壁。这些畴壁的形状与单轴向列相中的畴壁相似。忽略展曲形变和弯曲形变之间的弹性各向异性, 发现双轴相中的展-弯曲壁与扭曲壁有相似的解析解。通过对展-弯曲壁进行数值计算, 发现弹性常数的比值会影响畴壁的宽度。

关 键 词: 轴; 畴壁; 解析解; 数值计算

中图分类号: O753⁺. 2

文献标识码: A

DOI: 10. 3788/YJYXS20132803. 0301

Domain Walls in Bixial Nematic Liquid Crystals

LI Jian¹, ZHOU Xuan¹, WANG Xiao-yan², XU Hong-liang², ZHANG Zhi-dong^{1*}

(1. School of Science, Hebei University of Technology, Tianjin 300401, China, E-mail: jian_muzai@yahoo. cn;

2. Hebei Jiya Electronics Co., Ltd. Shijiazhuang 050071, China)

Abstract: Within the framework of the continuum elastic theory of biaxial nematic liquid crystals, domain walls were studied. Nine different domain walls in biaxial nematics were found. The shapes of these walls are similar to those in uniaxial nematics. By neglecting the elastic anisotropy concerned with splay and bend distortions, it is found that the analytic solutions of splay-bend walls are similar to that of twist walls. The numerical solutions of splay-bend walls show that the ratio of the elastic constants affects the width of the walls.

Key words: bixial; domain wall; analytical solution; numerical calculation

1 引 言

双轴向列相液晶具有新的特点: 不仅可以降低液晶显示的响应时间, 同时极大地降低能耗。这是因为使分子的主轴重新取向所需的能量远大于使分子次轴重新取向所需的能量。因此对双轴向列相液晶的研究显得尤为重要。正因为如此, 人们十分关注新型双轴材料的化学合成^[1-3]和各种物理性质的研究^[4-5]。双轴向列相在基板上锚泊是研究者最关心的物理问题之一^[6-7]。当锚泊强度不够, 液晶在外场作用下的变化并不是单畴

的, 这时就产生了畴壁。

本文选取双轴向列相液晶中的畴壁为研究对象, 将双轴液晶的连续体理论^[8]应用于双轴向列相液晶畴壁的研究。向列相液晶中畴壁的出现是由于液晶分子取向排列的不连续性引起的, 指向矢取向的改变有展曲形变、弯曲形变和扭曲形变三种基本形式^[9], 因此畴壁可以分为展曲、弯曲和扭曲畴壁。

展曲、弯曲和扭曲形变的特征是依据分子的旋转矢量与畴壁平面法线的夹角来区分的, 若旋转矢量与畴壁平面法线方向平行, 则畴壁具有扭

收稿日期: 2013-01-14; 修订日期: 2013-02-19

基金项目: 国家自然科学基金(No. 60878047); 河北省自然科学基金(No. A2010000004); 河北省重点学科资助项目

作者简介: 李健(1987-), 男, 河北辛集人, 硕士研究生, 从事液晶物理方面的学习和研究。

* 通信联系人, E-mail: zhidong_zhang@yahoo. cn

曲形变的特征;若旋转矢量与畴壁平面法线方向垂直,则具有展、弯曲形变的特征^[10]。

由于双轴向列液晶分子的 3 个轴磁化率各不相等,通过改变磁场的方向来使液晶分子发生不同的形变^[11],从而形成不同的畴壁类型,并对之加以理论处理。

2 理 论

单轴向列液晶中畴壁的类型:扭曲壁、展曲壁和弯曲壁,如图 1~3 所示。

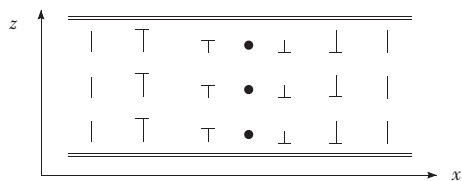


图 1 扭曲壁:指向矢 n, m 或 l 示意图

Fig. 1 Twist wall: Schematic view of the director n, m or l .

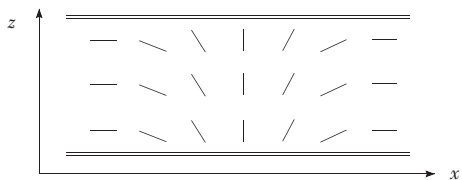


图 2 展曲壁:指向矢 n, m 或 l 示意图

Fig. 2 Splay wall: Schematic view of the director n, m or l .

对于双轴向列相,根据液晶磁化率的相对大小可以分为 3 种排列方式,即 $\chi_n > \chi_m > \chi_l$, $\chi_n > \chi_l > \chi_m$ 和 $\chi_m > \chi_l > \chi_n$ 。我们可以分别对其进行研究。假设指向矢 n 与 z 轴的夹角为 θ ,在研究

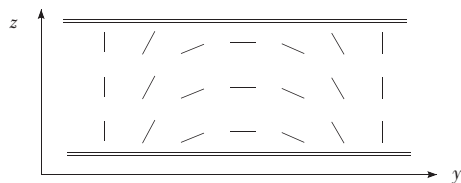


图 3 弯曲壁:指向矢 n, m 或 l 示意图。

Fig. 3 Bend wall: Schematic view of the director n, m or l .

每一种排列方式时考虑 θ 分别是 x, y 或 z 坐标的函数。在每一种排列下,同时还要考虑外加磁场沿不同的坐标轴方向时的情况。

下面以第一种排列方式为例,讨论双轴中畴壁的存在情况。假设 $\chi_n > \chi_m > \chi_l$,初始坐标为

$$l = (1, 0, 0)$$

$$m = (0, \cos\theta, \sin\theta) \quad (1)$$

$$n = (0, -\sin\theta, \cos\theta)$$

双轴向列相的主指向矢 n 与 z 轴夹角为 θ ,次指向矢 l 沿 x 轴,如图 4 所示。

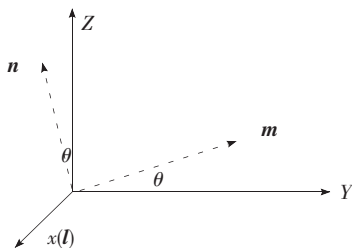


图 4 指向矢简图

Fig. 4 Sketch of the director

我们理论研究的出发点是双轴弹性自由能密度公式^[9]:

$$F_{\text{elas}} = \sum_{a,b,c} \frac{1}{2} [K_{aa} (a \cdot \nabla b \cdot c)^2 + K_{ab} (a \cdot \nabla a \cdot b)^2 + K_{ac} (a \cdot \nabla a \cdot c)^2] + C_{ab} (a \cdot \nabla a) \cdot (b \cdot \nabla b) + k_{0,a} \nabla \cdot (a \cdot \nabla a - a \nabla \cdot a) \quad (2)$$

以及磁场引起的自由能密度:

$$F_H = -\frac{1}{2} \mathbf{B} \cdot \mathbf{H} = -\frac{1}{2} [\chi_l (\mathbf{H}_x \cdot \mathbf{l}_x + \mathbf{H}_y \cdot \mathbf{l}_y + \mathbf{H}_z \cdot \mathbf{l}_z)^2 + \chi_m (\mathbf{H}_x \cdot \mathbf{m}_x + \mathbf{H}_y \cdot \mathbf{m}_y + \mathbf{H}_z \cdot \mathbf{m}_z)^2 + \chi_n (\mathbf{H}_x \cdot \mathbf{n}_x + \mathbf{H}_y \cdot \mathbf{n}_y + \mathbf{H}_z \cdot \mathbf{n}_z)^2] \quad (3)$$

当 θ 分别为 x, y 或 z 的函数时,将指向矢式(1),分别代入式(2)和(3),得到平衡态方程,并结合畴壁的边界条件,得到指向矢分布的解析解。

经理论处理,双轴向列相在第一种排列方式

中共存在 3 种畴壁:

(1)扭曲壁: θ 是 x 的函数(θ 由 0 向 π 变化),沿 z 轴方向施加磁场,指向矢在 $y-z$ 平面内变化,形成扭曲壁(如图 1 所示)。此时夹角 θ 的解析

解为

$$x = \frac{1}{H_z \sqrt{\chi_n - \chi_m}} \sqrt{\frac{K_{LL}}{2}} \operatorname{Intan} \frac{\theta}{2} \quad (4)$$

其中弹性常数 K_{LL} 的意义为, l 指向矢不动, m 和 n 指向矢发生扭曲形变的弹性常数。

(2) 第一种展-弯曲壁: θ 是 y 的函数 (θ 由 $-\pi/2$ 向 $\pi/2$ 变化), 沿 y 轴方向施加磁场, 指向矢在 $y-z$ 平面内变化, 描写展-弯曲壁。忽略展曲形变和弯曲相变之间的弹性各向异性, 即假设 $K_{MN} = K_{NM}$, 展-弯曲壁主指向矢 n 与 z 轴夹角 θ 的解析解为

$$y = \frac{1}{H_y \sqrt{\chi_n - \chi_m}} \ln \left| \tan \left(\frac{\pi}{4} + \frac{\theta}{2} \right) \right| = \frac{1}{H_y \sqrt{\chi_n - \chi_m}} \ln \left| \tan \left(\frac{\pi}{4} + \frac{\theta}{2} \right) \right| \quad (5)$$

弹性常数 K_{MN} 的意义为, l 指向矢不动, n 指向矢发生展曲形变, m 指向矢发生弯曲形变的弹性常数; 弹性常数 K_{NM} 的意义为, l 指向矢不动, n 指向矢发生弯曲形变, m 指向矢发生展曲形变的弹性常数。在式(5)的第一个等式下, n 指向矢的变化形成展曲壁(如图 2 所示), 同时, m 指向矢的变化形成弯曲壁(如图 3 所示); 在式(5)的第二个等式下, m 指向矢的变化形成展曲壁(如图 2 所示), 同时, n 指向矢的变化形成弯曲壁(如图 3 所示)。

(3) 第二种展-弯曲壁: θ 是 y 的函数 (θ 由 0 向 π 变化), 沿 z 轴方向施加磁场, 指向矢在 $y-z$ 平面内变化, 描写展-弯曲壁。采用与上面相同的近似方法, 假设 $K_{NM} = K_{MN}$, 展-弯曲壁夹角 θ 的解析解为

$$y = \frac{1}{H_z \sqrt{\chi_n - \chi_m}} \sqrt{\frac{K_{NM}}{2}} \operatorname{Intan} \frac{\theta}{2} = \frac{1}{H_z \sqrt{\chi_n - \chi_m}} \sqrt{\frac{K_{MN}}{2}} \operatorname{Intan} \frac{\theta}{2} \quad (6)$$

得到畴壁的意义与式(5)是相同的, 只是 θ 角的变化范围不同。

将畴壁边界定义为指向矢与外场夹角为 5° 的平面^[10], 式(4), (5)和(6)可以给出形式相似的壁宽 W , 即

$$W_I \approx \frac{6}{H_z \sqrt{\chi_n - \chi_m}} \sqrt{\frac{K_{LL}}{2}} \quad (7)$$

$$W_{II} \approx \frac{6}{H_y \sqrt{\chi_n - \chi_m}} \sqrt{\frac{K_{MN}}{2}} \quad (8)$$

$$W_{III} \approx \frac{6}{H_y \sqrt{\chi_n - \chi_m}} \sqrt{\frac{K_{NM}}{2}} \quad (9)$$

另外两种排列方式与第一种排列方式的处理过程和结论相似, 这里不再赘述。在这三种排列方式中我们共发现了 9 种畴壁, 3 种扭曲壁和 6 种展-弯曲壁。

下表为畴壁和与之对应的弹性常数:

表 1 畴壁和与之对应的弹性常数

Table 1 Domain walls and the corresponding elastic constants

	K_{LL}	K_{MN}	K_{NM}
$\chi_n > \chi_m > \chi_l$	图 1	m 图 2	n 图 3
		n 图 2	m 图 3
$\chi_n > \chi_l > \chi_m$	K_{MM}	K_{LN}	K_{NL}
	图 1	l 图 2	n 图 3
		n 图 2	l 图 3
$\chi_m > \chi_l > \chi_n$	K_{NN}	K_{LM}	K_{ML}
	图 1	l 图 2	m 图 3
		m 图 2	l 图 3

值得一提的是我们在处理展-弯曲壁的过程中对弹性常数做了近似, 得到与扭曲壁类似的解析解, 下面我们在不考虑近似的情况下求指向矢分布的数值解。

3 数值解

以上述第一种情况 ($\chi_n > \chi_m > \chi_l$) 中第 2 种畴壁为例, 在不考虑弹性常数近似情况下, 即考虑展曲形变和弯曲形变之间的弹性各向异性, 给出夹角 θ 的数值解^[12-13]。

定义参数

$$r = \frac{K_{MN}}{K_{NM}} \quad (10)$$

并将坐标约化

$$\tilde{y} = y H_y \sqrt{\frac{\chi_n - \chi_m}{K_{NM}}} \quad (11)$$

得到平衡态方程为

$$(1-r) \sin\theta \cos\theta \left(\frac{d\theta}{d\tilde{y}} \right)^2 + (r \cos^2\theta + \sin^2\theta) \frac{d^2\theta}{d\tilde{y}^2} + \sin\theta \cos\theta = 0 \quad (12)$$

采用差分迭代方法对 θ 进行数值计算, 其迭代形式为:

$$\theta_i^{(n+1)} = \frac{(1-r) \sin 2\theta_i^{(n)} \left(\frac{\theta_{i+1}^{(n)} - \theta_{i-1}^{(n)}}{2} \right)^2 + h^2 \sin 2\theta_i^{(n)}}{4(r \cos^2 \theta_i^{(n)} + \sin^2 \theta_i^{(n)})} + \frac{\theta_{i-1}^{(n)} + \theta_{i+1}^{(n)}}{2} \quad (13)$$

经过计算得出夹角 θ 的变化曲线如图 5 所示。

图 5 表明:从壁中心向无穷远处,夹角 θ 从 $0 \sim \pi/2$ 变化。图中绿、红、黑三线依次为比值 $r =$

0.5、1、1.5 时的变化曲线,黑线变化最快,夹角 θ 最先达到 $\pi/2$,由此可以推断:比值 r 越大,畴壁越窄。

4 结 论

将双轴向列相液晶的连续体理论应用于双轴畴壁的研究,在双轴向列相中发现了 9 种不同的畴壁,包含 3 种扭曲壁和 6 种展-弯曲壁。忽略展-弯曲形变和弯曲相变之间的弹性各向异性对展-弯曲壁进行理论计算,得到与扭曲壁相似的解析解;通过对展-弯曲壁进行数值计算,发现 K_{MN}/K_{NM} 取值越大,畴壁越窄。

由于双轴向列相液晶具有响应快、能耗低等特点,本文的研究结果对深入研究双轴向列相液晶及其畴壁有一定的科学指导意义。

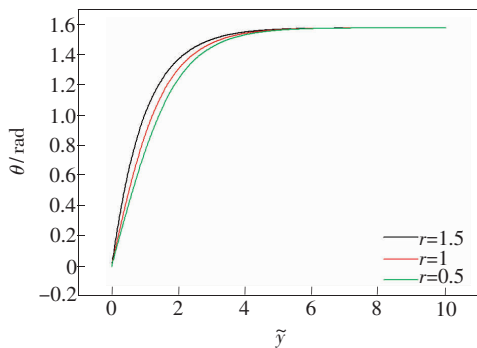


图 5 夹角 θ 的变化曲线

Fig. 5 Curve of the angle θ

参 考 文 献:

- [1] 朱斌,黄佩,胡兰萍,等.一些含希夫碱基团的不对称弯曲型液晶分子的合成和相变研究[J].液晶与显示,2010,25(3):305-310.
- [2] 李增俊,沈冬.含偶氮基团的不对称弯曲型液晶分子的合成及其光谱特性[J].液晶与显示,2011,26(3):274-280.
- [3] 李双全,沈冬.噻二唑类弯曲型液晶分子的合成和性能研究[J].液晶与显示,2011,26(4):421-426.
- [4] 刘红,王慧.双轴性向列相液晶的相变理论[J].物理学报,2005,54(03):1306-1312.
- [5] Xiang Y, Goodby J W, Görtz V, et al. Revealing the uniaxial to biaxial nematic liquid crystal phase transition via distinctive electroconvection[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2009, 94(19):193507(1-3).
- [6] 董寅,沈冬,郑致刚.含偶氮基团的弯曲型分子的光谱特性研究[J].液晶与显示,2012,27(1):14-20.
- [7] 张志东,叶文江,张鹭.表面沟槽诱导双轴向列相液晶的弹性畸变[J].液晶与显示,2010,25(1):1-4.
- [8] Saupé A. Elastic and flow properties of biaxial nematics[J]. *J. Chem. Phys.*, 1981, 75(10):5118-5124.
- [9] De Gennes P G, Prost J. *The Physics of Liquid Crystals* [M]. 2nd edn. Oxford: Oxford University Press, 1993.
- [10] Assender H E, Windle A H. Domain structures in magnetically orientated liquid crystalline polymers[J]. *Polymer*, 1997, 38(3):677-688.
- [11] 王英涛,周璇,张志东.双轴向列相 Fréedericksz 转变的 Monte Carlo 模拟[J].液晶与显示,2010,27(2):144-152.
- [12] hiccoli C, Pasini P, Feruli I, et al. Biaxial nematic droplets and their optical texture. A lattice model computer simulation study[J]. *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, 2005, 441(1):319-328.
- [13] Berardi R, Muccioli L, Orlandi S, et al. Computer simulations of biaxial nematics[J]. *J. Phys. Condens. Matter*, 2008, 20(46):1-16.