

Зависящий от температуры и внешнего поля микрорельеф на свободной поверхности смектического *A*-жидкого кристалла

© Л.В. Миранцев

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

E-mail: miran@microm.ipme.ru, miran@mail.ru

(Поступила в Редакцию 19 ноября 2007 г.)

Рассматривается пленка гомеотропно ориентированной смектической *A*-фазы на поверхности твердой подложки с периодическим микрорельефом. Получены выражения, определяющие зависимость деформации свободной поверхности пленки, индуцированной таким микрорельефом, от ее толщины, температуры и напряженности внешнего магнитного (электрического) поля. Показано, что при определенном выборе формы микрорельефа на поверхности подложки, меняя температуру образца и напряженность внешнего магнитного (электрического) поля, можно управлять не только глубиной, но и формой микрорельефа, возникающего на свободной поверхности смектической *A*-пленки.

PACS: 61.30.-v, 61.30.Hn

1. Введение

Как известно, нематическая (*N*) жидкокристаллическая (ЖК) фаза обладает лишь дальним ориентационным порядком и в ней отсутствует какой-либо дальний позиционный порядок [1,2]. Так же как и в обычной изотропной жидкости (*I*), в этой фазе центры масс молекул, имеющие, как правило, продолговатую форму, расположены в пространстве случайным образом, а их длинные оси параллельны некоторому направлению преимущественной ориентации, характеризующемуся единичным вектором \mathbf{n} , называемым директором. В нематической фазе поле директора сравнительно легко деформируется, и эти упругие деформации могут описываться в виде комбинации трех основных типов ориентационных деформаций, а именно: деформации поперечного изгиба (spray), деформация кручения (twist) и деформация продольного изгиба (bend). Упругие модули K_i ($i = 1, 2, 3$), соответствующие этим деформациям, сравнительно малы ($\sim 10^{-11}$ N), и благодаря этой малости удается довольно легко создавать однородную ориентацию в нематических ЖК- (НЖК) образцах с помощью специально обработанных твердых ограничивающих поверхностей (подложек) [3] и изменять эту начальную ориентацию под действием сравнительно слабых внешних магнитных или электрических полей [4]. Такая „податливость“ НЖК внешним воздействиям лежит в основе их широкого применения в многочисленных дисплеях, световых клапанах, датчиках и других электро- (магнито-) оптических приборах.

Смектическая *A*- (*SmA*) ЖК-фаза отличается от нематической фазы наличием в ней не только ориентационного порядка, но и одномерного позиционного упорядочения [1,2]. Этому упорядочению соответствует одномерная слоистая структура, в каждом слое которой молекулы ориентированы параллельно его нормали $\mathbf{v} \parallel \mathbf{n}$, а их центры масс образуют так называемую волну плотности вдоль оси $z \parallel \mathbf{n}$ с периодом, приблизительно

равным длине молекулы l . При этом в двух других направлениях (x и y), перпендикулярных оси z , центры масс молекул внутри каждого слоя расположены также беспорядочно, как и в изотропной жидкости. При повышении температуры *SmA*-фаза переходит либо в нематическую фазу (т.е. имеет место фазовый переход *SmA*–*N*), либо в изотропную жидкую фазу (переход *SmA*–*I*). Наличие одномерного позиционного порядка в *SmA*-фазе приводит к тому, что в этой ЖК-фазе ориентационные деформации поля директора \mathbf{n} могут вызывать деформации сжатия или расширения смектических слоев, причем упругий модуль B , соответствующий таким деформациям, довольно велик ($\sim 10^7$ N/m²) [1,2]. Благодаря таким большим величинам упругого модуля B смектические слои практически несжимаемы в области энергий, достаточных для создания ориентационных деформаций в нематической фазе, и в *SmA*-фазе возможны только такие деформации поля директора, при которых не меняется толщина смектических слоев, а именно деформации поперечного изгиба. Таким образом, смектические ЖК являются гораздо более „жесткими“ материалами по отношению к внешним воздействиям (ориентирующее действие подложек, внешние поля), чем НЖК. Кроме того, из-за малой сжимаемости смектических слоев любой дефект, индуцированный шероховатостью ограничивающей подложки или неоднородностью ее ориентирующего действия, может распространяться на довольно большие расстояния (~ 100 – 1000 μm) в глубь образца [1] и, если отсутствует вторая ограничивающая подложка, даже выходить на его свободную поверхность [5]. Отсюда следует, что для создания *SmA*-образцов с достаточно однородным полем директора необходимо использовать ячейки с чрезвычайно гладкими подложками. Из-за указанной особенности *SmA*-фазы, а также ее „жесткости“ к действию внешних полей эта мезофаза до сих пор не используется в электро- (магнито-) оптических приборах.

В настоящей работе предлагается использовать упомянутую выше способность *SmA*-фазы передавать на большие расстояния деформации, индуцированные рельефом на ее ограничивающей твердой поверхности, для создания управляемого температурой и внешними магнитными (электрическими) полями микрорельефа на свободной поверхности гомеотропно ориентированного *SmA*-образца.

2. Основные соотношения

Рассмотрим пленку *SmA*-ЖК толщиной h , нанесенную на плоскую твердую подложку, создающую гомеотропную ориентацию в объеме пленки (директор \mathbf{n} параллелен оси z , перпендикулярной поверхности подложки). На поверхности подложки создан одномерный периодический микрорельеф с периодом d вдоль оси x , направленной параллельно поверхности, который можно описать следующим разложением:

$$U_0(x) = \sum_{k=1}^N U_k^0 \cos[(2\pi k/d)x], \quad (1)$$

где N — полное число гармоник, необходимых для описания микрорельефа. Если бы поверхность подложки была идеально гладкой, то молекулы внутри смектических слоев были бы ориентированы строго перпендикулярно этой поверхности, а сами слои — параллельно ей. Если допустить, что молекулы в первом приповерхностном слое жестко сцеплены с твердой поверхностью, то этот слой должен искажаться в такт нанесенному на нее микрорельефу, и эта деформация за счет малой сжимаемости смектических слоев передается по цепочке соседним слоям, постепенно затухая в глубь образца. Поскольку, как уже отмечалось во Введении, глубина такого затухания может достигать $\sim 100\text{--}1000\ \mu\text{m}$ [1], при достаточно малой толщине h смектической пленки такая деформация также может приводить к искажению ее свободной поверхности. Чтобы определить глубину и форму возникающего таким образом микрорельефа на свободной поверхности смектической пленки, необходимо описать распространение в глубь пленки деформации смещения смектических слоев $U(x, z)$, порожденной заданным микрорельефом $U_0(x)$ на поверхности подложки. Для решения этой задачи необходимо прежде всего найти выражение для свободной энергии *SmA*-пленки, деформированной таким микрорельефом. Эта свободная энергия F_d , приходящаяся на единицу площади поверхности пленки, может быть записана в следующем виде:

$$F_d = \frac{1}{d} \int_0^h dz \int_0^d f_b(U(x, z)) dx + \frac{1}{d} \int_0^d f_s(U(x, h)) dx. \quad (2)$$

Здесь $f_b(U(x, z))$ — объемная плотность свободной энергии деформированной *SmA*-фазы, а $f_s(U(x, h))$ —

поверхностная плотность свободной энергии деформированной свободной поверхности *SmA*-пленки. Если предположить, что деформация поверхности подложки $U_0(x)$ является достаточно слабой ($U_k^{(0)}(k/d) \ll 1$), то компоненты директора \mathbf{n} связаны с деформацией смещения смектических слоев $U(x, z)$ соотношениями [1]

$$n_x \approx -\partial U/\partial x, \quad n_y = 0, \quad n_z \approx 1, \quad (3)$$

а объемная плотность свободной энергии деформированной *SmA*-фазы равна

$$f_b(U(x, z)) = (1/2)B(\partial U/\partial z)^2 + (1/2)K_1(\partial^2 U/\partial x^2)^2. \quad (4)$$

Если рассматриваемая система находится во внешнем магнитном поле H , направленном вдоль оси z , то к выражению (4) надо добавить член

$$(1/2)\chi_a H^2 n_x^2 = (1/2)\chi_a H^2 (\partial U/\partial x)^2, \quad (5)$$

где χ_a — анизотропия магнитной восприимчивости ЖК. Эта добавка к плотности свободной энергии (4) положительна, так как ЖК являются диамагнетиками [1,2]. Что касается поверхностной плотности свободной энергии $f_s(U(x, h))$, то ее можно представить в виде

$$f_s(U(x, h)) = (1/2)\gamma (\partial U(x, h)/\partial x)^2, \quad (6)$$

где γ — коэффициент поверхностного натяжения для свободной поверхности гомеотропно ориентированной *SmA*-фазы.

Если мы будем искать зависимость деформации смещения смектических слоев $U(x, z)$ от координат в виде разложения

$$U(x, z) = \sum_{k=1}^N U_k(z) \cos[(2\pi k/d)x], \quad (7)$$

то после подстановки (7) в (2) с учетом (4)–(6), получим следующее выражение для свободной энергии деформированной *SmA*-пленки:

$$F_d = (1/4) \sum_{k=1}^N \left\{ \int_0^h [B(dU_k(z)/dz)^2 + [K_1(4\pi^2 k^2/d^2)^2 + \chi_a H^2 (2\pi k/d)^2] U_k^2(z)] dz + \gamma (2\pi k/d)^2 U_k^2(h) \right\}. \quad (8)$$

Минимизация свободной энергии (8) по переменным $U_k(z)$ и $U_k(h)$ приводит к уравнениям Эйлера–Лагранжа

$$B d^2 U_k(z)/dz^2 - [K_1(4\pi^2 k^2/d^2)^2 + \chi_a H^2 (2\pi k/d)^2] U_k(z) = 0, \quad (k = 1, N) \quad (9)$$

и граничным условиям

$$U_k(z=0) = U_k^{(0)}, \quad (k = 1, N), \quad (10)$$

$$B(dU_k(z)/dz)|_{z=h} + \gamma(2\pi k/d)^2 U_k(h) = 0, \quad (k = 1, N). \quad (11)$$

Решения уравнений (9) можно искать в виде

$$U_k(z) = U_k^{(1)} \exp(-z/l_k^*) + U_k^{(2)} \exp(z/l_k^*), \quad (12)$$

где

$$l_k^* = (B/K_1)^{1/2} (d^2/4\pi^2 k^2) [1 + (\chi_a H^2 d^2)/(4\pi^2 k^2 K_1)]^{-1/2}. \quad (13)$$

Подстановка решения (12) в граничные условия (10) и (11) приводит к следующим выражениям для коэффициентов $U_k^{(1)}$ и $U_k^{(2)}$:

$$U_k^{(1)} = U_k^{(0)} \times \frac{B/l_k^* + \gamma(2\pi k/d)^2}{(B/l_k^*)(1 + \exp(-2h/l_k^*)) + \gamma(2\pi k/d)^2(1 - \exp(-2h/l_k^*))}, \quad (14)$$

$$U_k^{(2)} = U_k^{(0)} \times \frac{[B/l_k^* - \gamma(2\pi k/d)^2] \exp(-2h/l_k^*)}{(B/l_k^*)(1 + \exp(-2h/l_k^*)) + \gamma(2\pi k/d)^2(1 - \exp(-2h/l_k^*))}. \quad (15)$$

Выражения (12)–(15) позволяют определить коэффициенты $U_k(z)$ в разложении (7) и, следовательно, решить поставленную задачу описания распространения деформацией, индуцированных микрорельефом на поверхности подложки, в глубь гомеотропно ориентированной *SmA*-пленки со свободной поверхностью. В частности, для самой свободной поверхности ($z = h$) получаем следующее выражение для коэффициентов $U_k(h)$:

$$U_k(h) = \frac{2U_k^{(0)}(B/l_k^*) \exp(-h/l_k^*)}{(B/l_k^*)(1 + \exp(-2h/l_k^*)) + \gamma(2\pi k/d)^2(1 - \exp(-2h/l_k^*))}. \quad (16)$$

Подставляя коэффициенты (16) в разложение (7), находим форму микрорельефа на свободной поверхности *SmA*-пленки при заданном микрорельефе на поверхности подложки. Мы также можем учесть влияние внешнего поля H на деформацию свободной поверхности пленки.

3. Результаты численных расчетов и их обсуждение

С помощью соотношений, полученных в разделе 2, мы прежде всего исследовали влияние температуры и внешних полей на деформацию свободной поверхности гомеотропно ориентированной *SmA*-пленки, созданную простейшим одномерным периодическим микрорельефом на поверхности твердой подложки, который описывается разложением (1), содержащим только одну гармонику, т. е.

$$U_0(x) = U^0 \cos[(2\pi/d)x]. \quad (17)$$

В качестве конкретного ЖК-материала рассматривался 4-*n*-octyl-4'-cyanobiphenyl (8CB), демонстрирующий фазовый переход второго рода *SmA*–*N* при температуре $T_{AN} = 33^\circ\text{C}$ [5]. Величина модуля поперечного изгиба K_1 считалась равной типичному для ЖК значению $K_1 \approx 10^{-11}$ Н, а модуль B сжатия (расширения) смектических слоев, как и в работе [5], считался равным $B \approx 10^7$ Н/м² при температуре $T_1 = T_{AN} - 12^\circ\text{C}$. Поскольку модуль $B \sim \sigma^2$, где σ — параметр смектического порядка [1,2], а переход *SmA*–*N* является переходом второго рода, то, согласно простейшему описанию такого перехода с помощью разложения Ландау–Де Жена, $B(T) \sim \sigma^2 \sim (T_{AN} - T)$, где T — температура системы. Тогда зависимость модуля B от температуры можно представить в виде

$$B(T) = B(T_1)[(T_{AN} - T)/(T_{AN} - T_1)]. \quad (18)$$

Поскольку эксперименты [6] показывают, что коэффициенты поверхностного натяжения смектических ЖК очень слабо зависят от температуры, коэффициент γ для 8CB считался постоянным и равным $\gamma = 2 \cdot 10^{-2}$ Н/м. Величина анизотропии магнитной восприимчивости χ_a принималась равной типичному для ЖК значению $\chi_a \approx 10^{-7}$. Что касается периода d , амплитуды (глубины) U^0 микрорельефа (17) на поверхности подложки и толщины смектической пленки h , то они брались равными $d = 2 \mu\text{m}$, $U^{(0)} = 200$ нм и $h = 50 \mu\text{m}$ соответственно. Из рис. 1 и 2 видно, что глубина микрорельефа на поверхности пленки U_h уменьшается как с ростом температуры системы, вызывающим уменьшения модуля B , так и с увеличением магнитного поля H . При этом уменьшение U_h , например, в 2 раза (по сравнению с глубиной микрорельефа при температуре T_1 в отсутствие внешнего поля) достигается при нагревании системы до приблизительно 29°C (без внешнего поля), или без нагревания во внешнем магнитном поле напряженностью $H \approx 3 \cdot 10^5$ Г. Конечно, можно использовать

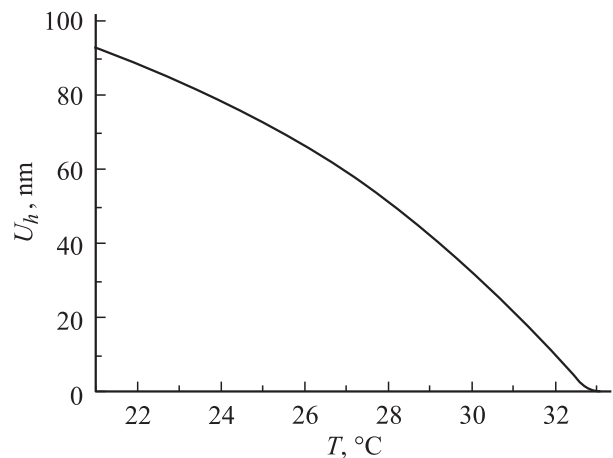


Рис. 1. Зависимость глубины U_h простейшего периодического микрорельефа на поверхности гомеотропно ориентированной *SmA*-пленки ЖК 8CB от температуры T . $d = 2 \mu\text{m}$, $U^{(0)} = 200$ нм, $h = 50 \mu\text{m}$, $K_1 = 10^{-11}$ Н, $B(T_1) = 10^7$ Н/м², $\gamma = 2 \cdot 10^{-2}$ Н/м.

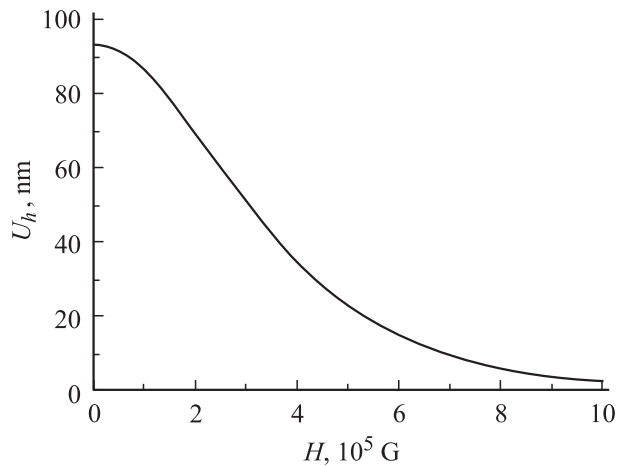


Рис. 2. Зависимость глубины U_0 того же микрорельефа, что и на рис. 1, от напряженности H внешнего магнитного поля. $T = T_1 = 21^\circ\text{C}$, $\chi_a = 10^{-7}$.

и комбинированный вариант воздействия на систему с одновременным нагреванием и приложением внешнего поля. Следует отметить, что получить на практике магнитное поле напряженностью $H \approx 3 \cdot 10^5 \text{ G}$ довольно сложно. Поскольку ЖК 8СВ является сильно полярным соединением с достаточно большой анизотропией диэлектрической проницаемости $\varepsilon_a \approx 15$, гораздо легче управлять глубиной микрорельефа U_h на свободной поверхности смектической пленки с помощью внешнего электрического поля. Согласно [1,4], напряженность электрического поля $E(\text{V/cm})$, оказывающего на ЖК ориентирующее воздействие, эквивалентное действию магнитного поля напряженностью H , равна

$$E = 300(4\pi\chi_a/\varepsilon_a)H. \quad (19)$$

Отсюда нетрудно найти, что двукратное уменьшение глубины микрорельефа U_h может быть достигнуто при помещении системы в электрическое поле с вполне достижимой напряженностью $E \approx 2.6 \cdot 10^4 \text{ V/cm}$. Итак, было установлено, что на свободной поверхности гомеотропно ориентированной SmA-пленки вполне возможно с помощью изменения температуры и внешнего поля управление глубиной микрорельефа, индуцированного простейшим периодическим микрорельефом (17) на поверхности твердой подложки. При этом, однако, невозможно управлять его формой. Можно менять высоту (глубину) максимумов и минимумов такого микрорельефа, но невозможно изменить их число, приходящееся на один период d . Тем не менее полученные в предыдущем разделе соотношения (13) и (16) показывают, что такое управление можно осуществить, если микрорельеф на поверхности подложки является более сложным и описывается не простой гармонической функцией (17), а разложением (1), содержащим несколько гармоник с различными амплитудами $U_k^{(0)}$ и периодами $d_k = d/k$. Из (13) и (16) видно, что эти гармоники, во-первых, имеют различные характерные глубины затухания l_k^* ,

а во-вторых, величины этих характерных глубин по-разному реагируют на изменение температуры и на внешние поля. Чтобы продемонстрировать такую возможность, мы провели численный расчет микрорельефа на свободной поверхности гомеотропно ориентированной SmA-пленки для случая, когда микрорельеф на поверхности твердой подложки описывается суммой всего двух гармоник, а именно

$$U_0(x) = U_1^{(0)} \cos[(2\pi/d_1)x] + U_2^{(0)} \cos[(2\pi/d_2)x], \quad (20)$$

где $U_1^{(0)} = 50 \text{ nm}$, $U_2^{(0)} = 200 \text{ nm}$, $d_1 = 2 \mu\text{m}$, $d_2 = d_1/2 = 1 \mu\text{m}$. Кривая 1 на рис. 3 демонстрирует этот микрорельеф, а кривая 2 на этом же рисунке показывает, как

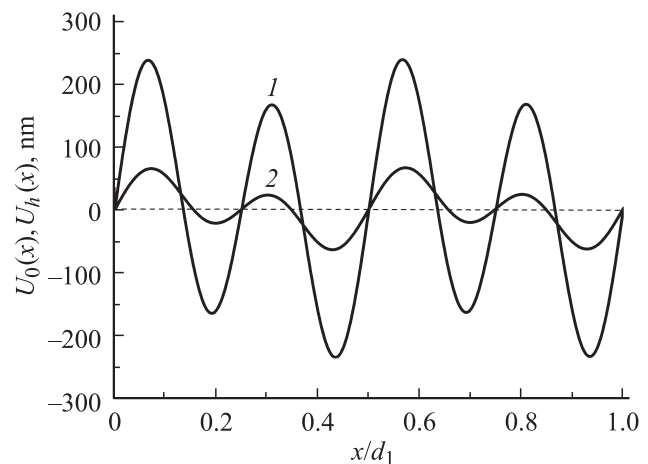


Рис. 3. Периодический микрорельеф на поверхности твердой подложки (1) и индуцированный им микрорельеф на свободной поверхности SmA-пленки ЖК 8 СВ (2). $U_1^{(0)} = 50 \text{ nm}$, $U_2^{(0)} = 200 \text{ nm}$, $d_1 = 2 \mu\text{m}$, $d_2 = 1 \mu\text{m}$, $h = 30 \mu\text{m}$, $T = T_1 = 21^\circ\text{C}$, $H, E = 0$.

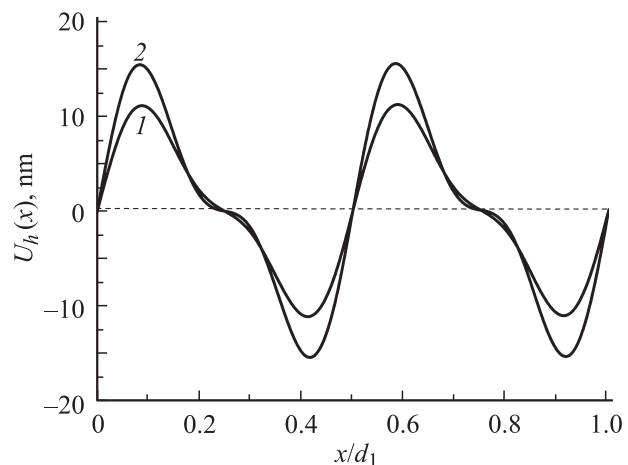


Рис. 4. Периодический микрорельеф на свободной поверхности SmA-пленки ЖК 8 СВ при температуре $T = 31^\circ\text{C}$ ($H, E = 0$) (1) и аналогичный микрорельеф (2) во внешнем магнитном поле напряженностью $H \approx 6 \cdot 10^5 \text{ G}$ или в электрическом поле напряженностью $E \approx 5.2 \cdot 10^4 \text{ V/cm}$ ($T = T_1 = 21^\circ\text{C}$). Остальные параметры те же, что на рис. 3.

выглядит индуцированный им микрорельеф на свободной поверхности гомеотропно ориентированной SmA -пленки толщиной $h = 30 \mu\text{m}$ при температуре $T_1 = 21^\circ\text{C}$ в отсутствие внешнего поля. Видно, что на период $d_1 = 2 \mu\text{m}$ приходится четыре максимума и четыре минимума этого микрорельефа, высоты (глубины) которых различаются примерно в три раза (~ 60 и $\sim 20 \text{nm}$ соответственно). На рис. 4 показано, как выглядит аналогичный микрорельеф на свободной поверхности этой же пленки при нагревании системы (без внешнего поля) до 31°C (кривая 1) и при помещении этой же системы при температуре $T_1 = 21^\circ\text{C}$ в магнитное поле напряженностью $H \approx 6 \cdot 10^5 \text{G}$ или в электрическое поле напряженностью $E \approx 5.2 \cdot 10^4 \text{V/cm}$ (кривая 2). Видно, что при этом не только уменьшается высота (глубина) максимумов и минимумов этого микрорельефа (до $\sim 11 \text{nm}$ в первом случае и до $\sim 16 \text{nm}$ во втором), но и само их число, приходящееся на период d_1 , уменьшается до двух. Таким образом, создавая на поверхности твердой подложки периодический микрорельеф (20), мы получаем возможность управлять не только глубиной, но и формой микрорельефа, индуцированного им на свободной поверхности SmA -пленки. Такая возможность представляется довольно интересной и полезной с практической точки зрения, поскольку описанный выше микрорельеф на свободной поверхности гомеотропно ориентированной SmA -пленки может быть использован в качестве управляемой дифракционной решетки.

Список литературы

- [1] П. Де Жен. Физика жидких кристаллов. Мир, М. (1977). 400 с.
- [2] С. Чандрасекар. Жидкие кристаллы. Мир, М. (1980). 344 с.
- [3] В.Н. Матвеев, Е.А. Кирсанов. Поверхностные явления в жидких кристаллах. МГУ, М. (1991). 272 с.
- [4] Л.М. Блинов. Электро- и магнитооптика жидких кристаллов. Наука, М. (1978). 384 с.
- [5] V. Designolle, S. Herminghaus, T. Pfohl, Ch. Bahr. *Langmuir* **22**, 363 (2006).
- [6] P. Mach, S. Grantz, D.A. Debe, T. Stoebe, C.C. Huang. *J. Phys. II (France)* **5**, 217 (1995).