

01;03

Смектик C^* во внешнем электрическом поле© В.П. Романов,¹ С.В. Ульянов,^{1,2} К.Г. Черняк¹¹ Санкт-Петербургский государственный университет,
198904 Санкт-Петербург, Россия² Санкт-Петербургский торгово-экономический институт,
194021 Санкт-Петербург, Россия
e-mail: v.romanov@pobox.spbu.ru

(Поступило в Редакцию 20 декабря 2006 г.)

В рамках вариационного подхода получены уравнения, описывающие ориентацию молекул в тонкой свободно подвешенной пленке сегнетоэлектрического смектика C^* , помещенной в постоянное электрическое поле, направленное вдоль поверхности пленки. В результате решения уравнения Эйлера–Лагранжа найдена равновесная конфигурация ориентаций директора. Показано, что внешнее поле переориентирует молекулы жидкокристаллической пленки, причем этот эффект носит беспороговый характер.

PACS: 77.84.Vs, 61.30.Gd, 61.30.Cz, E6

Введение

Интерес к жидким кристаллам (ЖК) проявляется на протяжении многих лет. Он особенно возрос в последние десятилетия в связи с разнообразными практическими применениями ЖК, в первую очередь в системах отображения и передачи информации. Жидкие кристаллы обладают целым рядом необычных физических свойств, поскольку занимают промежуточное положение между вязкими изотропными жидкостями и кристаллическими твердыми телами.

Рассмотрим смектические жидкие кристаллы (смектики). В этих системах имеется упорядоченность в ориентациях молекул, задаваемая единичным вектором директора \mathbf{n} , и порядок в расположении центров масс молекул, которые группируются в плоские слои. В зависимости от направления преимущественной ориентации молекул выделяют смектики A , в которых директор \mathbf{n} нормален к плоскости слоя, и смектики C , в которых директор наклонен под некоторым углом θ , зависящим от температуры. Если в смектиках C при переходе от слоя к слою директор поворачивается при сохранении угла θ , то образуется смектик C^* . При этом в смектиках A , C , C^* центры масс молекул в каждом слое не упорядочены, как в двумерной жидкости.

Смектические ЖК обладают способностью образовывать стабильные пленки макроскопических размеров, содержащих от двух слоев до нескольких тысяч. Большой интерес вызывают свободно подвешенные тонкие пленки ЖК, поскольку их ориентационные свойства легко изменяются под воздействием слабых внешних полей за очень короткое время. Особый интерес представляют сегнетоэлектрические ЖК, в которых ориентационные эффекты линейны по полю. К таким системам относится киральный смектик C^* .

Особенность поведения смектиков C^* во внешнем электрическом поле состоит в том, что в данной системе одновременно может меняться как ориентационная, так

и пространственная структура. При этом внешнее поле изменяет ориентационный порядок в ЖК, что может вызвать неоднородные смещения смектических слоев. В результате в этих жидких кристаллах наблюдается целый ряд интересных явлений, таких как линейный электромеханический [1,2], флексоэлектрический и электроклинный эффекты, которые и приводят к поляризации ЖК [3–7].

Для последовательного описания поведения сегнетоэлектрических пленок смектика C^* во внешних полях прежде всего необходимо исследовать воздействие поля на ориентацию жидкого кристалла с учетом влияния границ последнего. Эта проблема подробно изучалась в толстых образцах ЖК, где основное внимание уделялось процессу раскрутки ориентационной спирали [5–7]. В тонких пленках шаг спирали киральной структуры гораздо больше толщины пленки, поэтому эффект раскрутки несуществен, и воздействие поля сводится к переориентации ЖК в плоскости пленки.

В данной работе проведен последовательный анализ эффекта переориентации директора в тонкой пленке смектика C^* при жестких граничных условиях. Показано, что в отличие от эффекта Фредерикса рассматриваемый процесс переориентации является беспороговым.

Свободная энергия деформированной пленки

Рассмотрим пленку жидкого кристалла толщиной l , жестко закрепленную в рамке длины L_x — вдоль оси Ox и L_y — вдоль оси Oy . Ось Oz направим параллельно нормали к недеформированной пленке (рис. 1), причем плоскость $z = 0$ отнесена к нижней поверхности пленки.

Толщина пленки ограничена неравенством $l \ll p_0$, где p_0 — типичный шаг спирали, который составляет $p_0 = (5–10) \cdot 10^{-3}$ см вдоль оси Oz [4–7]. Температура пленки считается постоянной. В этом случае угол накло-

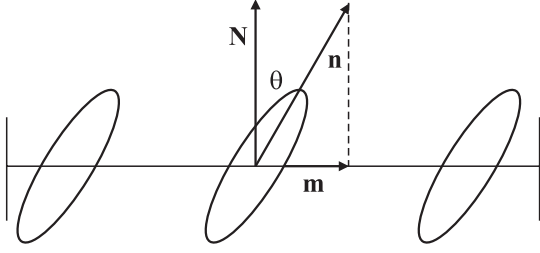


Рис. 1. Взаимное расположение вектора нормали к смектическим слоям \mathbf{N} , директора \mathbf{n} и составляющей директора в плоскости смектического слоя \mathbf{m} .

на директора относительно нормали к пленке θ остается неизменным.

Свободная энергия смектического ЖК может быть представлена в виде суммы трех слагаемых [4–7]:

$$F = F_{\text{Fr}} + F_u + F_E, \quad (1)$$

где F_{Fr} — энергия Франка, F_u — энергия, связанная с деформацией смектических слоев, F_E — слагаемое, учитывающее поляризационные эффекты.

Эти слагаемые имеют вид

$$F_{\text{Fr}} = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} [K_{11}(\text{div } \mathbf{n})^2 + K_{22}(\mathbf{n} \times \text{rot } \mathbf{n})^2 + K_{33}(\mathbf{n} \times \text{rot } \mathbf{n})^2], \quad (2)$$

где K_{ii} — модули Франка, $i = (1, 2, 3)$

$$F_u = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} \left[B \left(\frac{\partial u}{\partial z} \right)^2 + K(\Delta_{\perp} u)^2 \right] + \int dx dy \sigma (\nabla_{\perp} u)^2, \quad (3)$$

где $u(\mathbf{r})$ — локальное смещение слоев пленки, B и K — упругие модули, связанные со сжатием и изгибом слоев, σ — коэффициент поверхностного натяжения,

$$\nabla_{\perp} = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y} \right), \quad \Delta_{\perp} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2},$$

$$F_E = - \int d\mathbf{r} (\mathbf{P} \cdot \mathbf{E}) + \frac{1}{2} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \frac{\nabla \mathbf{P}(\mathbf{r}_1) \nabla \mathbf{P}(\mathbf{r}_2)}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}, \quad (4)$$

где \mathbf{P} — вектор спонтанной поляризации смектика C^* , \mathbf{E} — напряженность внешнего электрического поля. Второе слагаемое в формуле (4) учитывает электростатическое взаимодействие.

Представим вектор директора в виде

$$\mathbf{n} = \mathbf{N} \cos \theta + \mathbf{m}, \quad (5)$$

где \mathbf{N} — нормаль к поверхности смектического слоя, $\cos \theta = \mathbf{N} \cdot \mathbf{n}$, \mathbf{m} — проекция вектора директора на поверхность слоя.

Экспериментальные исследования часто проводятся в тонких пленках, имеющих форму вытянутого прямоугольника [1,2], поэтому будем полагать $L_y \gg L_x$ и считать, что в направлении оси y пленка однородна, т.е. $\frac{\partial}{\partial y} = 0$. В дальнейшем также будем считать, что

толщина пленки не изменяется при деформации, и пренебрежем изменением межслоевых расстояний, полагая $\frac{\partial u}{\partial z} = 0$. Кроме того, считая пленку тонкой, не будем учитывать изменения ориентации вдоль оси z . В рамках этих предположений вектор нормали выражается через смещение следующим образом:

$$\mathbf{N} = \frac{\nabla(z - u(\mathbf{r}))}{|\nabla(z - u(\mathbf{r}))|} \approx \left(-u', 0, 1 - \frac{1}{2}(u')^2 \right), \quad (6)$$

где $u' \equiv \frac{\partial u}{\partial x}$. Воспользовавшись тем, что векторы \mathbf{m} и \mathbf{N} ортогональны, получим связь между компонентами вектора \mathbf{m} и смещением u :

$$m_z = m_x u'. \quad (7)$$

Из условия нормировки директора $|\mathbf{m}|^2 = \sin^2 \theta$ и соотношения (7) получим уравнение связи

$$m_x^2 (1 + (u')^2) + m_y^2 = \sin^2 \theta. \quad (8)$$

Для энергии Франка смектика C^* в гауссовом приближении имеем

$$\begin{aligned} F_{\text{Fr}} = & L_y \\ & \times \int_0^{L_x} \left[\frac{1}{2} \left(K_{11}(m'_x)^2 + K_{22} \cos^2 \theta (m'_y)^2 + K_{33}(m_x^2 + m_y^2)(m'_y)^2 \right) \right. \\ & + \frac{1}{2} \left(K_{22}((m_y m'_x - m_x m'_y)^2 - (m'_y)^2 \cos^2 \theta) \right. \\ & + K_{33}(((m'_x)^2 + (m'_y)^2) \cos^2 \theta \\ & + m_x^2 (m'_x)^2 + 2m_x m_y m'_x m'_y)) (u')^2 \\ & + \left((K_{33} - K_{22}) \cos \theta (m_y m'_x - m_x m'_y) m'_y \right. \\ & + \left. (K_{22} \cos^2 \theta m_y m'_y + K_{33} \cos^2 \theta (m_x m'_x - m_y m'_y)) u'' \right) u' \\ & \left. + \frac{1}{2} (K_{11} \cos^2 \theta + K_{33} \cos^2 \theta m_x^2) (u'')^2 \right. \\ & \left. + \cos \theta ((K_{33} - K_{22}) m_x m_y m'_y - K_{11} m'_x) u'' \right] dx. \quad (9) \end{aligned}$$

Учитывая типичные значения параметров жидких кристаллов, $K \simeq 10^{-6}$ дин, $\sigma \simeq 30$ дин/см, и принимая для $L_x = 0.1$ см, приходим к выводу, что в тонких пленках при плавных деформациях в выражении (3) для вклада смещений в свободную энергию можно ограничиться лишь слагаемым, учитывающим поверхностное натяжение

$$F_u = L_y \int_0^{L_x} \sigma (u')^2 dx. \quad (10)$$

Вектор спонтанной поляризации имеет вид [7,8]:

$$\mathbf{P} = \frac{P_0}{|m|} [\mathbf{N} \times \mathbf{m}], \quad (11)$$

где P_0 — величина спонтанной поляризации. Будем считать, что внешнее электрическое поле направлено вдоль

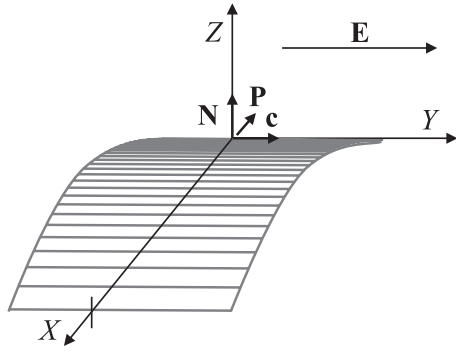


Рис. 2. Деформированная пленка во внешнем электрическом поле.

оси OY , т.е. $\mathbf{E} = (0, E, 0)$ (рис. 2). Считая поляризацию достаточно малой, не будем учитывать вклад в свободную энергию от электростатического взаимодействия. Тогда, согласно (4), (6), (7), (11), вклад в свободную энергию от внешнего поля в гауссовом приближении имеет вид

$$F_E = -lL_y \frac{P_0 E_y}{\sin \theta} \int_0^{L_x} m_x \left(1 + \frac{1}{2} (u')^2 \right) dx, \quad (12)$$

Таким образом, свободная энергия деформированной смектической пленки может быть представлена в виде суммы вкладов (9), (10) и (12).

Ориентационные эффекты во внешнем поле

В слабых внешних полях поверхностное натяжение препятствует деформированию пленки электрическим полем. В этом случае, положив $u(x) = 0$, найдем равновесную конфигурацию ориентаций директора в плоской пленке. Свободная энергия (1) с учетом соотношений (9), (10), (12) может быть представлена в виде

$$F = lL_y \int_0^{L_x} \left[\frac{1}{2} K_{11} \sin^2 \theta (c'_x)^2 + \frac{1}{2} K_b (c'_y)^2 - P_0 E c_x \right] dx, \quad (13)$$

где $\mathbf{c} = \frac{\mathbf{m}}{\sin(\theta)}$ — единичная проекция вектора директора на плоскость смектического слоя, или \mathbf{c} -директор,

$$K_b = K_{22} \sin^2 \theta \cos^2 \theta + K_{33} \sin^4 \theta.$$

Будем считать, что на границах пленки положение \mathbf{c} -директора зафиксировано вдоль оси OY , $\mathbf{c} = (0, 1, 0)$. В отсутствие внешнего поля однородная ориентация \mathbf{c} -директора сохраняется вдоль всей пленки, свободная энергия деформации в этом случае равна нулю.

Поместим системы в постоянное электрическое поле, направленное вдоль оси OY . Найдем равновесную конфигурацию ориентаций директора во внешнем поле, минимизируя функционал (13). Учитывая соотношение (7), для компонент \mathbf{c} -директора имеем

$$c_x^2 + c_y^2 = 1. \quad (14)$$

Положим

$$c_x = \sin \varphi(x), \quad c_y = \cos \varphi(x), \quad (15)$$

где $\varphi(x)$ — угол между \mathbf{c} -директором и осью OY . Свободная энергия с учетом (13), (15) приобретает вид

$$F = lL_y \int_0^{L_x} \left[\frac{1}{2} (K_b \sin^2 \varphi + K_s \cos^2 \varphi) (\varphi')^2 - P_0 E \sin \varphi \right] dx, \quad (16)$$

где $K_s = K_{11} \sin^2 \theta$.

Варьируя свободную энергию в выражении (16) по углу φ , получим уравнение Эйлера–Лагранжа, описывающее равновесную конфигурацию системы

$$(K_b \sin^2 \varphi + K_s \cos^2 \varphi) \varphi'' + \frac{1}{2} (K_b - K_s) \sin(2\varphi) (\varphi')^2 + EP_0 \cos \varphi = 0. \quad (17)$$

К этому уравнению добавляются граничные условия на \mathbf{c} -директор, учитывающие жесткую фиксацию молекул на границах пленки

$$c_x(0) = c_x(L_x) = 0$$

или для $\varphi(x)$:

$$\varphi(0) = \varphi(L_x) = 0. \quad (18)$$

После умножения на φ' уравнение (17) приводится к виду

$$\frac{d}{dx} \left[\frac{1}{2} (K_b \sin^2 \varphi + K_s \cos^2 \varphi) (\varphi')^2 + EP_0 \sin \varphi \right] = 0. \quad (19)$$

Проинтегрировав это уравнение, получим

$$\varphi' = \pm \sqrt{\frac{2EP_0}{K_s}} \sqrt{\frac{\sin \varphi_M - \sin \varphi}{1 + \delta \sin^2 \varphi}}, \quad (20)$$

где использованы обозначения $\delta = \frac{K_b}{K_s} - 1$, и φ_M для максимального угла, на который отклоняется \mathbf{c} -директор от своей первоначальной ориентации на границах. Выбор знака правой части выражения (20) определяется тем, что при отходе от границ угол φ будет увеличиваться, поэтому при условии $0 \leq x \leq \frac{L_x}{2}$ следует выбрать знак „+“, а после достижения максимума в середине пленки угол должен уменьшаться, поэтому при условии $\frac{L_x}{2} \leq x \leq L_x$ выбирается знак „–“. Величина

максимального угла поворота \mathbf{e} -директора внешним полем определяется из уравнения

$$\int_0^{\varphi_M} \sqrt{\frac{1 + \delta \sin^2 \chi}{\sin \varphi_M - \sin \chi}} d\chi = \sqrt{\frac{EP_0}{2K_s}} L_x, \quad (21)$$

которое в общем случае может быть решено численно. После этого зависимость угла φ от координаты x находится интегрированием

$$\int_0^{\varphi} \sqrt{\frac{1 + \delta \sin^2 \chi}{\sin \varphi_M - \sin \chi}} d\chi = \sqrt{\frac{EP_0}{2K_s}} x. \quad (22)$$

Здесь $0 \leq x \leq \frac{L_x}{2}$; $\varphi = \varphi(x) = \varphi(L_x - x)$.

В случае малых отклонений \mathbf{e} -директора от положения на границах ($\varphi_M \ll 1$) распределение направления преимущественной ориентации может быть найдено аналитически. В этом случае уравнение (21) упрощается и приобретает вид

$$\int_0^{\varphi_M} \frac{d\chi}{\sqrt{\varphi_M - \chi}} = \sqrt{\frac{EP_0}{2K_s}} L_x. \quad (23)$$

Вычислив интеграл, найдем максимальный угол поворота \mathbf{e} -директора

$$\varphi_M = \frac{EP_0 L_x^2}{8K_s}. \quad (24)$$

Уравнение (22) приобретает вид

$$\int_0^{\varphi} \frac{d\chi}{\sqrt{\varphi_M - \chi}} = \sqrt{\frac{EP_0}{2K_s}} x, \quad (25)$$

откуда с учетом граничных условий (18) находим

$$\varphi(x) = \frac{EP_0}{2K_s} x (L_x - x), \quad (26)$$

$$0 \leq x \leq L_x.$$

Это решение реализуется при слабых внешних полях

$$E \ll E^{\text{weak}} = \frac{8K_s}{P_0 L_x^2}. \quad (27)$$

Таким образом, в сегнетоэлектрических тонких пленках смектика C^* эффект переориентации директора внешним полем является беспороговым. Сколь угодно малое электрическое поле, направленное параллельно \mathbf{e} -директору, искажает первоначальную однородную ориентацию, причем в соответствии с формулой (26) угол отклонения \mathbf{e} -директора от первоначальной ориентации при слабых внешних полях параболически зависит от расстояния до ориентирующих границ пленки.

Используя типичные значения параметров ЖК и размеров пленки $K_{11} = 4 \cdot 10^{-6}$ дун, $\theta = 15^\circ$, $P_0 = 30 \frac{\text{дун}}{\text{есу} \cdot \text{см}^2}$, $L_x = 0.1$ см, найдем характерную

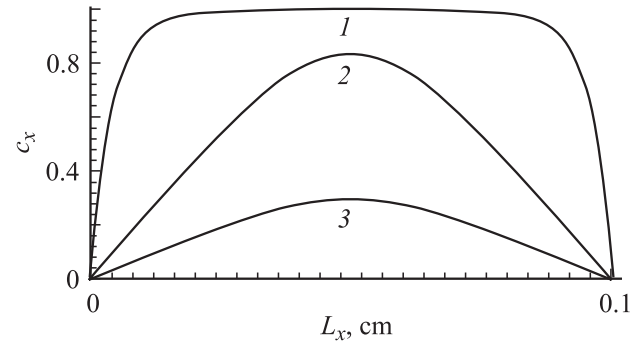


Рис. 3. Зависимость проекции \mathbf{e} -директора на ось OX от величины напряженности приложенного электрического поля: 1 — $E = 3 \cdot 10^{-4}$, 2 — $0.3 \cdot 10^{-4}$, 3 — $0.03 \cdot 10^{-4}$ дун/есу.

величину слабого внешнего поля: $E^{\text{weak}} \approx 7 \cdot 10^{-6}$ дун/есу. Расчеты показали, что аналитическое решение (26) применимо при полях $E < 10^{-6}$ дун/есу, когда отклонения директора от первоначальной ориентации невелики ($c_x^{\text{max}} \leq 0.12$).

Результаты численного решения уравнения (22) представлены на рис. 3, где показана зависимость ориентации \mathbf{e} -директора от координаты x при различных значениях внешнего электрического поля E . В расчетах кроме приведенных выше значений параметров пленки использовались следующие параметры: $K_b = 10^{-6}$ дун, $l = 10^{-3}$ см. Отметим, что ориентация директора в пленке существенно изменяется под действием очень слабых электрических полей. Например, внешнее поле с напряженностью $E \sim 10^{-5}$ дун/есу = 0.003 В/см полностью ориентирует \mathbf{e} -директор перпендикулярно полю.

Представляется интересным сравнить рассмотренный выше процесс переориентации директора внешним электрическим полем в сегнетоэлектрической смектической пленке с переориентацией директора в результате перехода Фредерикса. Для простоты рассмотрим переход Фредерикса в нематическом жидком кристалле, помещенном между двумя плоскопараллельными пластинами. Ориентация директора в отсутствие внешнего поля полагается однородной, планарной, с жестким зацеплением на пластинах. Внешнее поле имеет напряженность E и направление, перпендикулярное ориентирующим плоскостям. В этом случае свободная энергия деформации ЖК имеет вид

$$F = \frac{S}{2} \int_0^{L_x} \left[(K_{33} \sin^2 \varphi + K_{11} \cos^2 \varphi) (\varphi')^2 - \frac{\varepsilon_a}{4\pi} E^2 \sin^2 \varphi \right] dx. \quad (28)$$

Здесь S — площадь пластин, расположенных в плоскостях $x = 0$ и $x = L_x$, φ — угол между направлением директора и его ориентацией на границах. Разница между диэлектрическими проницаемостями в направлениях вдоль и поперек направлений директора ($\varepsilon_a = \varepsilon_{\parallel} - \varepsilon_{\perp}$)

полагается малой, что позволяет считать напряженность поля E не зависящей от координат. Приравняв нулю вариацию свободной энергии F по углу φ , получим уравнение Эйлера–Лагранжа [5,6]:

$$(1 + \nu \sin^2 \varphi) \varphi'' + \frac{1}{2} \nu \sin(2\varphi) (\varphi')^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{E}{E_F} \right)^2 \sin(2\varphi) = 0 \quad (29)$$

с граничными условиями (18). Здесь $\nu = \frac{K_{33} - K_{11}}{K_{11}}$, и введено следующее обозначение для критического поля:

$$E_F = \frac{\pi}{L_x} \sqrt{\frac{4\pi K_{11}}{\varepsilon_a}}. \quad (30)$$

Уравнение (29), описывающее переход Фредерикса, всегда имеет решение $\varphi = 0$, соответствующее сохранению однородной ориентации директора, однако оно не всегда может быть реализовано. При внешних полях, превышающих пороговое значение $E > E_F$, решение $\varphi = 0$ становится неустойчивым по отношению к малым возмущениям, поэтому минимуму свободной энергии (28) соответствует другое решение уравнения (29) с неоднородной ориентацией директора. Таким образом, при критическом значении поля E_F происходит переход Фредерикса от однородной ориентации директора к неоднородной.

Особенностью переориентации директора в сегнетоэлектрических пленках смектика C^* является отсутствие порога, т.е. неоднородное распределение директора в смектических слоях появляется даже в очень слабых полях. Интерес представляет сравнение критического поля E_F с найденным выше характерным значением $10^{-5} \text{ dyn/esu} = 0.003 \text{ V/cm}$, при котором происходит полная переориентация \mathbf{c} -директора в пленке сегнетоэлектрического смектика C^* . Для $\varepsilon_a = 0.1$ при тех же значениях параметров жидкого кристалла, что и выше получим следующую оценку для критического поля:

$$E_F \approx 0.1 \text{ dyn/esu} = 30 \text{ V/cm}.$$

Таким образом, электрическое поле, полностью переориентирующее \mathbf{c} -директор в пленках смектика C^* , в 10^4 раз слабее порогового поля в переходе Фредерикса.

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ № 06-02-16287-а и 06-08-01201-а.

Список литературы

- [1] Jakli A., Bata L., Vuka A., Eber N. // *Ferroelectrics*. 1986. Vol. 69. P. 153–164.
- [2] Яблонский С.В., Махайлов А.С., Накано К. и др. // *ЖЭТФ*. 2001. Т. 120. Вып. 1 (7), С. 109–118.
- [3] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. *Теоретическая физика*. Т. VII. Теория упругости. М.: Наука, 1987. 248 с.

- [4] Де Жен П.Ж. *Физика жидких кристаллов*. М.: Мир, 1977, 400 с.
- [5] Блинов Л.М. *Электро- и магнитооптика жидких кристаллов*. М.: Наука, 1978. 384 с.
- [6] Пикин С.А. *Структурные превращения в жидких кристаллах*. М.: Наука, 1981. 336 с.
- [7] Струков Б.А., Леванюк А.П. *Физические основы сегнетоэлектрических явлений в жидких кристаллах*. М.: Наука, 1995. 304 с.
- [8] Романов В.П., Ульянов С.В. // *УФН*. 2003. Т. 173. Вып. 9. С. 941–963.