

Ю. А. Еникеев, Н. Г. Мигранов

## МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МАЛЫХ ДЕФОРМАЦИЙ ПОЛЯ ДИРЕКТОРА НЕМАТИКА В ДВУМЕРНЫХ ЯЧЕЙКАХ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОЛЕЙ

Получена математическая модель, позволяющая исследовать переориентацию директора нематического жидкого кристалла (НЖК) в двумерной ячейке под действием внешнего электрического поля и процесс релаксации структуры директора при резком выключении искажающего поля. Показана зависимость вида возникающей деформации от таких параметров модели, как величина приложенного поля  $E$  и энергия сцепления директора НЖК с поверхностью ячейки  $w_y, w_z$ . Представлен процесс релаксации искажения при  $w_y, w_z \rightarrow \infty$ . Нематический жидкий кристалл; переориентация директора; геометропная ориентация; объемная вязкость; поверхностная вязкость; релаксация искажения

### ВВЕДЕНИЕ

Динамическое описание деформаций, вызванных внешним полем в нематическом образце, или иными словами, релаксации вызванной деформации, когда искажающее поле выключается – фундаментально важная задача для технологии ЖК дисплеев [1]. Данная работа посвящена рассмотрению деформации поля директора во внешних электрических полях и процесса релаксации этой деформации при мгновенном выключении искажающего поля. Математическое описание предложенной модели включает как объемные, так и поверхностные свойства ЖК.

### ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Для начала рассмотрим образец в виде ячейки МБА длиной  $a$  толщиной  $b$  (рис. 1). Для описания модели используется декартова система координат, где ось  $Oz$  перпендикулярна ограничивающим поверхностям, находящимся на  $z = \pm a/2$ , а ось  $Oy$  направлена вдоль них.

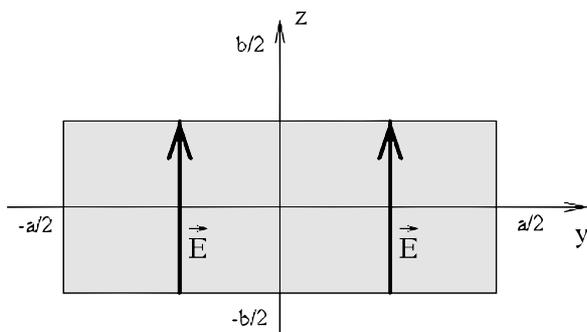


Рис. 1. Модель рассматриваемой ячейки НЖК

Как предполагается, в нематике возникают деформации только продольного и поперечного изгиба и находятся в плоскости, обозначаемой  $(xz)$  [2]. Угол между директором нематика и осью  $z$ , так называемый угол наклона, обозначен как  $\varphi$ . В двумерной постановке задачи  $\varphi = \varphi(y, z)$ . Искажение нематика минимизирует полную энергию на единицу поверхности, представленную в виде

$$F(\varphi(z)) = \int_{-a/2}^{a/2} \int_{-b/2}^{b/2} f(\varphi, d\varphi/dy, d\varphi/dz; y, z) dz + g_1(\varphi_1) + g_2(\varphi_2) + g_3(\varphi_3) + g_4(\varphi_4), \quad (1)$$

где  $\varphi_1 = \varphi(-a/2)$ ,  $\varphi_2 = \varphi(a/2)$ ,  $\varphi_3 = \varphi(-b/2)$ ,  $\varphi_4 = \varphi(b/2)$ . В уравнении (1)  $f(\varphi, d\varphi/dz, d\varphi/dy; y, z)$  – плотность объемной энергии, содержащая слагаемые, описывающие энергию взаимодействия НЖК с искажающим полем и упругую энергию Франка. Другие слагаемые, обозначенные  $g_1(\varphi_1) \dots g_4(\varphi_4)$ , описывают поверхностный вклад в полную энергию. В дальнейшем ограничим рассуждения симметричным случаем:  $g_1 = g_2$ ,  $g_3 = g_4$ , и, следовательно,  $\varphi(y, z) = \varphi(-y, -z)$ . Тогда достаточно рассмотреть задачу при  $-a/2 \leq y \leq 0$ ,  $-b/2 \leq z \leq 0$ .

В этом случае условием минимума энергии будет [3]

$$\frac{\partial f}{\partial \varphi} - \frac{d}{dz} \frac{\partial f}{\partial (d\varphi/dz)} - \frac{d}{dy} \frac{\partial f}{\partial (d\varphi/dy)} = 0, \quad (2)$$

с граничными условиями [4]

$$\left( -\frac{\partial f}{\partial (d\varphi/dy)} + \frac{dg_1}{d\varphi_1} \right) \Big|_{y=-\frac{a}{2}} = 0, \quad (3a)$$

$$\left( -\frac{\partial f}{\partial (d\varphi/dz)} + \frac{dg_3}{d\varphi_3} \right) \Big|_{z=-\frac{b}{2}} = 0. \quad (3b)$$

Так как стабильное состояние нематика минимизирует эту энергию, то угол наклона  $\varphi = \varphi(y, z)$ , описывающий установившуюся деформацию, является решением уравнения (2) с граничными условиями (3).

Основное уравнение для объема НЖК, описывающее релаксацию деформации

$$\frac{\partial f}{\partial \varphi} - \frac{\partial}{\partial z} \frac{\partial f}{\partial (\partial \varphi / \partial z)} - \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial f}{\partial (\partial \varphi / \partial y)} + \eta_b \frac{\partial \varphi}{\partial t} = 0, \quad (4)$$

которое должно быть решено с граничными условиями [1]

$$\left( -\frac{\partial f}{\partial (\partial \varphi / \partial y)} + \frac{dg_1}{d\varphi_1} - \eta_{sy} \frac{\partial \varphi}{\partial t} \right) \Big|_{y=-\frac{a}{2}} = 0, \quad (5a)$$

$$\left( -\frac{\partial f}{\partial (\partial \varphi / \partial z)} + \frac{dg_3}{d\varphi_3} - \eta_{sz} \frac{\partial \varphi}{\partial t} \right) \Big|_{z=-\frac{b}{2}} = 0. \quad (5b)$$

Нас интересует картина данного искажения, вызванная в НЖК внешним полем, а также его релаксация, когда это поле выключено.

### РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ

Для начала рассмотрим случай, когда НЖК планарно ориентирован в отсутствие внешнего поля. Диэлектрическая анизотропия  $\varepsilon_a'$  предполагается положительной, то есть электрическое поле, параллельное оси  $Oz$ , может исказить первоначальную планарную ориентацию. Далее рассмотрим случай одноконстантного приближения, которое является общепринятым приближением для качественной оценки результатов и значительно упрощает решаемые уравнения. При наличии внешнего электрического поля объемная плотность энергии равна

$$f = \frac{1}{2} k \left( \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right)^2 + \frac{1}{2} k \left( \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right)^2 - \frac{\varepsilon_a E^2}{8\pi} \cos^2(\varphi), \quad (6)$$

а поверхностная энергия имеет вид потенциала Рапини [5]

$$g_1 = g_y = -\frac{w_y}{2} \cos^2(\varphi), \quad (7a)$$

$$g_3 = g_z = -\frac{w_z}{2} \cos^2(\varphi). \quad (7b)$$

Рассмотрим деформацию, вызванную постоянным электрическим полем. Обозначим для этого случая  $\varphi = \varphi_0$ , который находится из дифференциального уравнения в частных производных

$$k \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} + k \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} + \frac{1}{8\pi} \varepsilon_a E^2 \sin(2\varphi) = 0, \quad (8)$$

удовлетворяющего граничным условиям

$$\left( -k \frac{\partial \varphi}{\partial y} + \frac{1}{2} w_y \sin(2\varphi) \right) \Big|_{y=-\frac{a}{2}} = 0, \quad (9a)$$

$$\left( -k \frac{\partial \varphi}{\partial y} + \frac{1}{2} w_z \sin(2\varphi) \right) \Big|_{z=-\frac{b}{2}} = 0. \quad (9b)$$

Рассмотрим случай малой деформации, т. е. положим  $(\sin(\varphi_0) \approx \varphi_0)$ . Тогда уравнение (8) примет вид

$$k \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} + k \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} + \frac{1}{4\pi} \varepsilon_a E^2 \varphi = 0, \quad (10)$$

а граничные условия (9)

$$\left( -k \frac{\partial \varphi}{\partial y} + w_y \varphi \right) \Big|_{y=-\frac{a}{2}} = 0, \quad (11a)$$

$$\left( -k \frac{\partial \varphi}{\partial y} + w_z \varphi \right) \Big|_{z=-\frac{b}{2}} = 0. \quad (11b)$$

Рассмотрим случай  $a = b$ . Перепишем уравнения (10) и (11) в безразмерных переменных. Примем  $k = k'k_0$ ,  $z = z'a$ ,  $E = E'E_0$ ,  $w = w'w_0$ , тогда (15a) примет вид

$$\frac{k'k_0}{a^2} \left( \frac{d^2 \varphi_0}{dy'^2} + \frac{d^2 \varphi_0}{dz'^2} \right) + \frac{1}{4\pi} \varepsilon_a E'^2 E_0^2 \varphi_0 = 0,$$

или

$$\frac{d^2 \varphi_0}{dy'^2} + \frac{d^2 \varphi_0}{dz'^2} + \frac{\varepsilon_a E_0^2 a^2 E'^2}{4\pi k'k_0} \varphi_0 = 0. \quad (10a)$$

Примем  $w_0 = 10^4$  Дж/м<sup>2</sup> = 0,1 эрг/см<sup>2</sup> [6]. Значения  $E_0$ ,  $k_0$  и  $a$  подберем так, чтобы  $\frac{E_0^2 a^2}{4\pi k_0} = 1$ . Для МББА при  $22^\circ$   $k_0 = 8 \cdot 10^{-7}$  дин,

толщину ячейки примем  $a = 0,01$  см, тогда

$$E_0 = \frac{\sqrt{4\pi k_0}}{a} \approx 0,317 \text{ единиц СГС (95,2 В/см).}$$

Тогда (10a) можно переписать в виде

$$\frac{d^2 \varphi_0}{dy'^2} + \frac{d^2 \varphi_0}{dz'^2} + \frac{\varepsilon_a E'^2}{k'} \varphi_0 = 0. \quad (10b)$$

Граничное условие (11a) переписывается в виде

$$\left( -\frac{k'k_0}{a} \frac{d\varphi_0}{dy'} + w'_y w_0 \varphi_0 \right) \Big|_{y'=-\frac{1}{2}} = 0,$$

или

$$\left( -\frac{d\varphi_0}{dy'} + \frac{w'_y w_0 a}{k' k_0} \varphi_0 \right) \Big|_{y'=-\frac{1}{2}} = 0.$$

Учитывая, что  $\frac{w_0 y a}{k_0} = 1000$ , перепишем последнее выражение в виде

$$\left( -\frac{d\varphi_0}{dy'} + \frac{1000 w'_y}{k'} \varphi_0 \right) \Big|_{y'=-\frac{1}{2}} = 0. \quad (12a)$$

Аналогично условие (11b) перепишется как

$$\left( -\frac{d\varphi_0}{dz'} + \frac{1000 w'_z}{k'} \varphi_0 \right) \Big|_{z'=-\frac{1}{2}} = 0. \quad (12b)$$

Общее решение уравнения (10b) имеет вид

$$\varphi_0 = C_1 \exp(-\sqrt{C_2} |z|) \cos \left( \sqrt{C_2 + \frac{\varepsilon_a E'^2}{k'}} y + C_3 \right). \quad (13)$$

Полученное решение должно удовлетворять следующим требованиям:

- оно должно быть четно по  $z$  и  $y$ , поэтому в (13) используется  $|z|$  и  $\cos(y)$ ;

- для малых углов полагаем  $\sin(\varphi_0) \approx \varphi_0$ . Перепишем это условие в виде

$$\varphi_0 - \sin(\varphi_0) \leq \delta, \quad (14)$$

где  $\delta$  – сколь угодно малая величина. Очевидно, что  $C_1 = \varphi_{\max}(z)$ , отсюда условие (17) можно переписать в виде

$$C_1 - \sin(C_1) \leq \delta. \quad (14a)$$

Отсюда можно приблизительно определить постоянную  $C_1$ . Для наглядности предлагаемых расчетов примем  $\delta = 0,01$ , тогда значение  $C_1$  составит 0,392493389. В дальнейшем примем  $C_1 = 0,4$ ;

- функция  $\varphi_0$  должна удовлетворять граничным условиям, из которых получаем

$$C_2 = \frac{10^6 w'^2_z a^2}{k'^2},$$

$$C_3 = \arctan \left( \frac{\theta \sin\left(\frac{1}{2}\theta\right) k - 1000 w'_y a \cos\left(\frac{1}{2}\theta\right)}{\theta \cos\left(\frac{1}{2}\theta\right) k + 1000 w'_y a \sin\left(\frac{1}{2}\theta\right)} \right),$$

$$\text{где } \theta = \sqrt{C_2 + \frac{\varepsilon_a E'^2}{k'}}.$$

Теперь рассмотрим процесс релаксации возникающей деформации. Считая, что искажающее поле исчезает достаточно быстро, мы приходим к уравнению в частных производных,

которому удовлетворяет угол, характеризующий деформацию в НЖК

$$k \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} + k \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} = \eta_b \frac{\partial \varphi}{\partial t}. \quad (15)$$

Перейдем в этом уравнении к безразмерным переменным

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial y'^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z'^2} = \frac{\eta_b a^2}{k t_0} \frac{\partial \varphi}{\partial t'}. \quad (15a)$$

Граничные условия (5) для данного уравнения запишутся в виде

$$\left( -k \frac{\partial \varphi}{\partial y} + w_y \varphi - \eta_{sy} \frac{\partial \varphi}{\partial t} \right) \Big|_{y=-\frac{a}{2}} = 0, \quad (16a)$$

$$\left( -k \frac{\partial \varphi}{\partial z} + w_z \varphi - \eta_{sz} \frac{\partial \varphi}{\partial t} \right) \Big|_{z=-\frac{a}{2}} = 0. \quad (16b)$$

Перейдя в (16) к безразмерным переменным, получим:

$$\left( \frac{\partial \varphi}{\partial y'} - \frac{1000 w'_y \varphi}{k'} + \frac{\eta_s a}{t_0 k' k_0} \frac{\partial \varphi}{\partial t'} \right) \Big|_{y'=-1/2} = 0, \quad (16c)$$

$$\left( \frac{\partial \varphi}{\partial z'} - \frac{1000 w'_z \varphi}{k'} + \frac{\eta_s a}{t_0 k' k_0} \frac{\partial \varphi}{\partial t'} \right) \Big|_{z'=-1/2} = 0. \quad (16d)$$

где  $t_0 = \frac{\gamma_1 a^2}{k \pi^2}$  [7].

Уравнение (15) принадлежит к типу уравнений теплопроводности (диффузии), а оно имеет общее решение, которое записывается в виде

$$\varphi(y', z', t') = \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} C_{i,j} \cos(\alpha_i z') \cos(\beta_j z') \times \exp(-\delta_{i,j} t'), \quad (17)$$

где  $\delta_{i,j} = \frac{\alpha_i^2 + \beta_j^2}{\eta_b} \frac{\gamma_1}{\pi^2}$ .

Рассмотрим случай бесконечно сильного сцепления директора НЖК с поверхностями ячейки. Тогда граничные условия примут вид

$$\varphi \Big|_{y'=-\frac{1}{2}} = 0, \quad (18a)$$

$$\varphi \Big|_{z'=-\frac{1}{2}} = 0, \quad (18a)$$

откуда

$$\alpha_n = 2\pi n - \pi, \quad n = 1, 2, \dots, \infty, \quad (19a)$$

$$\beta_n = 2\pi n - \pi, \quad n = 1, 2, \dots, \infty. \quad (19b)$$

Решение  $\varphi(y', z', t')$  (как и решение  $\varphi_0(y', z')$  для стационарной деформации) должно удовлетворять нескольким условиям, а именно:

- решение должно быть четным по  $y'$  и  $z'$ , поэтому в выражении (17) используется четная функция косинуса;

- в начальный момент времени должно выполняться равенство  $\varphi(y', z', t')|_{t'=0} = \varphi_0(y', z')$ , отсюда следует, что

$$\varphi_0(y', z') = \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} C_{i,j} \cos(\alpha_i z') \cos(\beta_j y'). \quad (18)$$

Выражение (18) есть не что иное, как разложение функции  $\varphi_0(y', z')$  в неполный ряд Фурье (разложение по косинусам), отсюда можно определить  $C_{i,j}$ . Из теории рядов Фурье следует, что

$$C_{i,j} = 16 \int_{-1/2}^0 \int_{-1/2}^0 \varphi_0(y', z') \cos(\alpha_i z') \cos(\beta_j y') dz' dy'. \quad (19)$$

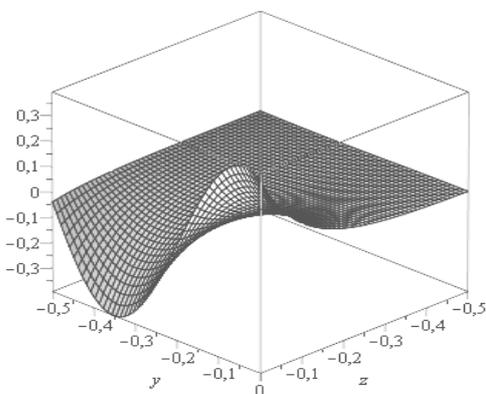
Это условие можно также записать в виде  $f_1 = \varphi(y', z', t')|_{t'=0} - \varphi_0(y', z') \leq \xi$ , где  $\xi$  – некоторая малая величина;

- должно выполняться равенство  $\sin(\varphi(y', z', t')) \approx \varphi(y', z', t')$ . Оно выполняется, если  $0 \leq \varphi(y', z', t') \leq \varphi_{\max}$ . Так как происходит процесс релаксации деформации, то  $\varphi(y', z', t') \leq \varphi_0(y', z')$ , а  $\varphi_0(y', z') \leq \varphi_{\max}$ . Отсюда следует, что  $\varphi(y', z', t')$  удовлетворяет данному условию;

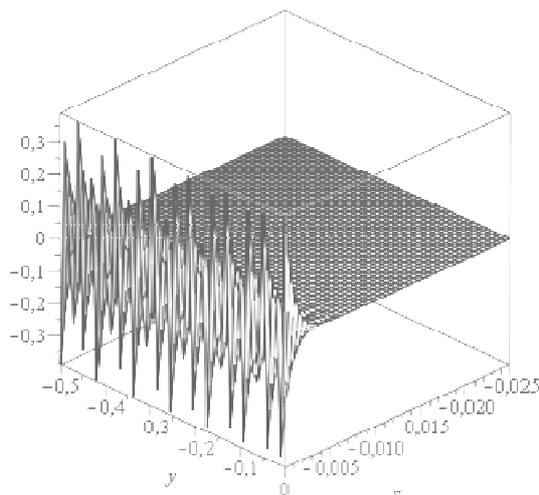
- решение должно удовлетворять граничным условиям (18).

### ПРИЛОЖЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

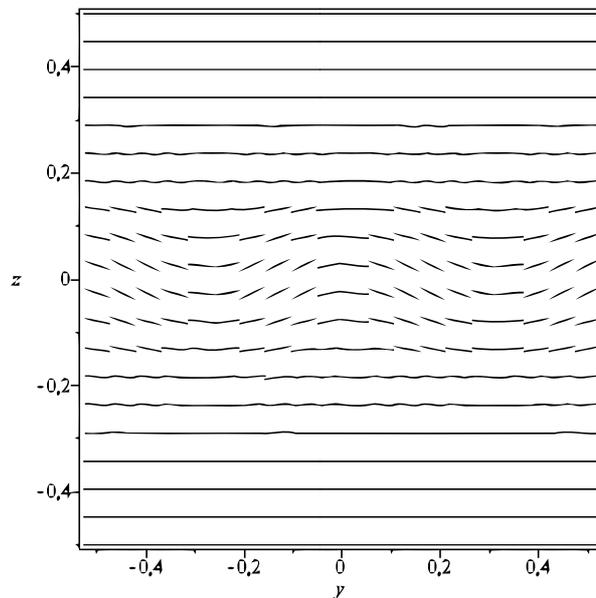
Рассмотрим вид возникающей деформации и его зависимость от основных параметров модели: величины приложенного поля и энергии сцепления директора НЖК с поверхностями ячейки (рис. 2–4).



**Рис.2.** Распределение угла поворота директора при  $E' = 10, \epsilon_a = 0,1, k' = 1, w_y = 0,1, w_z = 0,01$



**Рис. 3.** Распределение угла поворота директора при  $E' = 10, \epsilon_a = 0,1, k' = 1, w_y = 0,1, w_z = 1$



**Рис.4.** Поле директора в ячейке при  $E' = 10, \epsilon_a = 0,1, k' = 1, w_y = 0,1, w_z = 0,01$

Теперь рассмотрим процесс релаксации искажения поля директора. Размеры ячейки  $a = b = 0,01$  см. Параметры НЖК:  $w_y' = 1, w_z' = 0,01, k' = 1, \epsilon_a = 0,1, \eta_b = 0,76$  пуаз,  $\eta_s = 1$  пуаз [1],  $E' = 10$ , при  $m = n = 50$ .

Процесс релаксации можно визуализировать двумя основными путями – представить распределение угла поворота по толщине ячейки в различные значения времени и построить серию полей директора для различных моментов времени. В рассматриваемом случае жесткого сцепления более подходящим является первый путь (рис. 5).

## ВЫВОДЫ

В данной работе предложена модель релаксации малых деформаций поля директора в двумерной ячейке нематического жидкого кристалла с одинаковым сцеплением на противоположных границах. Задача рассматривалась в приближении малых углов:  $\sin(\varphi) \approx \varphi$ .

Предложенная математическая модель в случае достаточно сильного поля и сильного сцепления на всех поверхностях допускает возникновение сложных периодических структур вдоль оси  $Oy$ .

Полученные результаты могут быть обобщены на случай гомеотропной ориентации директора с отрицательной анизотропией диэлектрической постоянной НЖК.

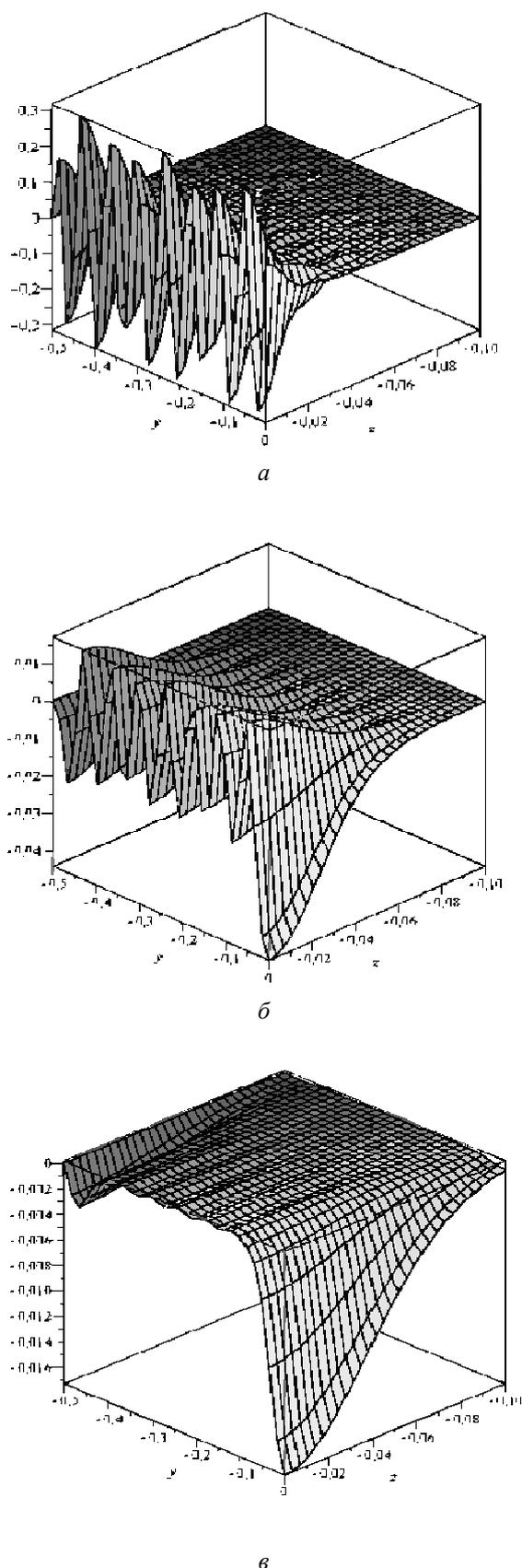
## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Barbero G., Pandolfi L.** Surface viscosity in nematic liquid crystals // *Physical Review*, E 79, 051701, 2009.
2. **П. де Жен** Физика жидких кристаллов. М.: Мир, 1977. 81 с.
3. **Эльсгольц Э. С.** Дифференциальные уравнения и вариационное исчисление. М., 1969. 305 с.
4. **Пикин С. А.** Структурные превращения в жидких кристаллах. М., 1981.
5. **Rapini A., Papoular M.**, *J. Phys. \_Paris\_, Colloq. 30, C4-54\_1969.*
6. **Кондратьев Д. В., Мигранов Н. Г.** Распределение молекул нематического жидкого кристалла в полупространстве, ограниченном структурированной подложкой // *Вестник Поморск. гос. ун-та.* 2009. № 3.
7. The electrohydrodynamic instability in homeotropic nematic layers. A. Hertrich [et al.] // *Phys. II, France 2 (1992) 1915-1930 November 1992, Page 1915.*

## ОБ АВТОРАХ

**Еникеев Юлиан Альбертович**, асп. каф. общей и теоретическ. физики Баш. гос. пед. ун-та. Дипл. учитель физики (БГПУ, 2009). Иссл. в обл. теории жидких кристаллов и анизотропных сред.

**Мигранов Наиль Галиханович**, проф. той же каф. Дипл. физик-теоретик (БашГУ, 1975). Д-р физ.-мат. наук по теоретическ. физике (Казанск. ун-т, 1999). Иссл. в обл. физики конденсированных сред, релятивистской космологии, теории групп и алгебр Ли.



**Рис. 5.** Релаксация искажения:  
 $a - t' = 0$ ;  $b - t' = 0,002$ ;  $v - t' = 0,004$