

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ  
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

*На правах рукописи*

Сванидзе Анастасия Владимировна

**Структура и электрооптические свойства холестерических и  
нематических жидких кристаллов с неоднородным  
распределением директора**

01.04.07 — физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Санкт-Петербург  
2018

Работа выполнена в Санкт-Петербургском государственном университете.

Научный руководитель: **Аксенова Елена Валентиновна**  
доктор физико-математических наук,  
профессор кафедры статистической физики, ФГБОУ ВО  
Санкт-Петербургский государственный университет

Официальные оппоненты : **Куликов Кирилл Геннадьевич**  
доктор физико-математических наук, профессор кафедры  
высшей математики, ФГАОУ ВО Санкт-Петербургский  
политехнический университет Петра Великого,  
г. Санкт-Петербург

**Миранцев Леонид Владимирович**  
доктор физико-математических наук, ведущий  
научный сотрудник лаборатории микромеханики  
материалов, ФГБУН Институт проблем  
машиноведения РАН, г. Санкт-Петербург

Ведущая организация : Санкт-Петербургский национальный исследовательский  
университет информационных технологий, механики  
и оптики, г. Санкт-Петербург

Защита состоится “ ” \_\_\_\_\_ 2018 г. на заседании диссертационного совета  
Д 212.232.33 по защите диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на  
соискание ученой степени доктора наук на базе Санкт-Петербургского государственного  
университета по адресу 198504, г. Санкт-Петербург, Петродворец, Ульяновская, д. 1,  
Малый конференц-зал.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке им. М. Горького Санкт-  
Петербургского государственного университета по адресу: 199034, Санкт-Петербург, Уни-  
верситетская наб., д. 7/9. Диссертация и автореферат диссертации размещены на сайте  
<https://disser.spbu.ru>

Отзывы на автореферат в двух экземплярах, заверенные печатью, просьба направ-  
лять по адресу: 198504, Санкт-Петербург, Петродворец, Ульяновская ул., д. 1, ученому  
секретарю диссертационного совета Д 212.232.33 А.М. Поляничко.

Автореферат разослан “ ” \_\_\_\_\_ 2018 г.

Ученый секретарь Совета Д 212.232.33,  
кандидат физико-математических наук, доцент

Поляничко А.М.

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

**Актуальность темы исследования.** В настоящее время продолжается поиск и создание новых типов устройств отображения информации на основе ячеек жидких кристаллов (ЖК). Важную роль для функционирования таких устройств играет эффект молекулярной переориентации ЖК под воздействием внешнего магнитного или электрического полей. Этот эффект называется переходом Фредерикса. Для однородных ячеек нематических жидких кристаллов (НЖК) эффект имеет пороговый характер. Существует некоторое значение поля, ниже которого ориентация молекул остается не измененной. Выше этого значения ориентация постепенно изменяется с дальнейшим увеличением поля. Эффект Фредерикса тщательно изучался для различных геометрий ячеек и материалов. Особенно подробно этот эффект изучался в НЖК, но ряд работ посвящен также и холестерическим жидким кристаллам (ХЖК), для которых картина становится сложнее в связи с киральной структурой вещества. Изменение ориентации директора от слоя к слою приводит к наличию неоднородного распределения электрического поля внутри ЖК. Поэтому изучение распределения директора внутри ячейки играет важную роль при описании перехода Фредерикса.

Как правило конфигурацию вектора директора  $\mathbf{n}$  определяют, решая систему уравнений Эйлера-Лагранжа. Если в системе имеется фазовый переход первого рода, то в уравнениях Эйлера-Лагранжа возникают точки бифуркаций. В случае же фазового перехода второго рода учет неоднородности электрического поля приводит к тому, что эти уравнения становятся интегро-дифференциальными. Поэтому для нахождения распределения директора вместо численного решения уравнений Эйлера-Лагранжа в работе использован метод прямой минимизации функционала свободной энергии ЖК. Обратим внимание, что решая уравнения Эйлера-Лагранжа, получают экстремумы, и требуется дополнительный анализ для определения минимумов энергии, а в случае прямой минимизации этого не требуется.

При помещении ЖК между двумя тонкими проводящими плоскостями, на которые подается напряжение, эффект переориентации можно изучать, измеряя емкость такого конденсатора. Угол наклона ЖК на границе ячейки играет важную роль в характеристике и работе ЖК-дисплеев. Например, в ячейке нематика, подверженного деформации кручения, приготовленной с малым отклонением директора от плоскости границы, при включении внешнего электрического поля могут возникать различные нежелательные эффекты рассеяния света, вызванные формированием инверсных стенок, схожих с Блоховскими стенками или стенками Нееля в ферромагнетиках. Для оптимизации качества работы ЖК-ячеек необходимы способы точного определения угла наклона. Для решения этой задачи можно использовать в том числе емкостной метод исследования таких систем. На сегодняшний день этот метод активно используется для экспериментального исследования диэлектрических и магнитооптических свойств НЖК, допированных магнитными наночастицами.

Также в связи с широким практическим применением ЖК, изучение их оптических

свойств и поведения во внешних полях вызывает большой интерес. Это связано с простотой управления оптическими свойствами тонких слоев ЖК с помощью электрического поля: под действием электрического поля происходит переориентация директора ЖК, что позволяет регулировать интенсивность проходящего через слой ЖК света.

Уникальные электрооптические свойства ЖК используются в дисплейной технике, системах передачи информации и в разнообразных оптических устройствах. На основе ЖК создают электрооптические модуляторы, индикаторы для различных диапазонов температур, биосенсоры, записывают голографические решетки и динамические голограммы.

ЖК-ячейки представляют собой достаточно сложные системы. Для описания поведения ЖК необходимо знать такие параметры, как модули Франка, диэлектрические проницаемости, энергии сцепления ЖК с подложкой. Задание ориентации молекул ЖК на границах ячейки влияет на распределение директора в объеме, что также определяет оптические характеристики ячейки. Изучение различных геометрий ячеек и сравнение их характеристик представляет большой интерес с точки зрения определения оптимальных свойств ячеек для различных приложений.

Сложность описания ЖК систем во внешних полях вызвана тем, что распределение директора и, следовательно, оптические характеристики не постоянны, а меняются по толщине образца. Кроме того, присутствие оптической анизотропии приводит к тензорному характеру задачи. Расчет интенсивностей и изучение траекторий лучей, проходящих через такие системы, дает возможность исследовать изменение локальной структуры ЖК в зависимости от приложенного внешнего поля.

**Цель работы.** Диссертационная работа посвящена изучению структуры и электрооптических свойств ЖК-ячеек с неоднородным распределением директора. Целью исследования было развитие метода расчета конфигурации директора для широкого класса ячеек и исследовать электрооптические свойства таких ячеек. В работе предложенный метод применен к двум типам ячеек: планарной  $90^\circ$  ячейке ХЖК и гомеопланарной ячейке НЖК. В этих ячейках проведено детальное сравнение теоретических расчетов с экспериментальными данными. Для достижения этой цели были поставлены следующие задачи:

- Изучить переход Фредерикса во внешнем электрическом поле с помощью прямой минимизации полной свободной энергии системы.
- Провести оценку величины энергии сцепления на грани с планарной ориентацией директора в гомеопланарной ячейке НЖК.
- Теоретически исследовать распространение света в планарной  $90^\circ$  ячейке ХЖК во внешнем электрическом поле выше порога Фредерикса в приближении геометрической оптики.
- В борновском приближении рассчитать коэффициент экстинкции необыкновенного луча и интенсивность прошедшего сквозь ячейку света.

**Научная новизна.** В настоящей работе получены следующие результаты:

1. Методом прямой минимизации выполнены расчеты конфигураций директора в присутствии внешнего электрического поля в плоскопараллельных ЖК-ячейках: планарной  $90^\circ$  ячейке ХЖК и гомеопланарной ячейке НЖК.
2. Получено хорошее согласие результатов численных расчетов емкости указанных ячеек с результатами экспериментов.
3. Предложен метод расчета конфигураций директора в плоскопараллельных ячейках нематических и геликоидальных ЖК в случае неоднородности сразу в двух пространственных измерениях.
4. Выполнены численные расчеты и проведено сравнение с данными экспериментов для предельного угла пропускания ячеек в зависимости от приложенного напряжения для планарной  $90^\circ$  ячейки ХЖК.
5. Рассчитаны зависимости интенсивности прошедшего сквозь твист-ячейку света от приложенного к ячейке напряжения при фиксированном угле падения света. Результаты расчетов хорошо согласуются с экспериментальными данными.

**Научная и практическая значимость.** Предложенный метод расчета может быть использован для определения одной из характеристик ЖК-ячейки, таких как модуль Франка, диэлектрическая проницаемость, энергия сцепления с подложкой. Если один из этих параметров неизвестен, то, варьируя его, можно добиться наилучшего совпадения результатов расчета с экспериментальными данными. Поскольку обычно модули Франка и диэлектрические проницаемости известны, предложенный метод стоит применять для оценки энергии сцепления с подложкой.

Предложен способ определения конфигурации директора светочувствительных ЖК [1] в зависимости от значения обратного шага спирали.

Предложенный в работе метод может применяться практически для любых других ЖК ячеек, поскольку для определения конфигурации необходима лишь свободная энергия. Этот метод является удобным для изучения перехода Фредерикса, причем как в присутствии электрического поля, так и магнитного. Например, его можно адаптировать для изучения системы термотропного НЖК, допированного ферромагнитными сферическими наночастицами и нанотрубками, путем добавления к энергии членов, связанных с взаимодействием поверхности наночастиц и молекул ЖК.

При расчетах не делалось никаких упрощающих предположений о свойствах ЖК. Расчеты учитывали все модули Франка, анизотропию диэлектрической проницаемости, неоднородность электрического поля в ЖК.

В теоретическом описании распространения света в ЖК-ячейках учитывается наличие точек поворота необыкновенного луча внутри образца. Представленный в работе метод описания оптических свойств ЖК может быть применен к широкому классу ячеек. Единственным существенным ограничением, накладываемым на систему, является условие применимости геометрической оптики (метода ВКБ).

### Положения, выносимые на защиту.

- Метод прямой минимизации свободной энергии позволяет исследовать изменение структуры ЖК во внешнем электрическом или магнитном поле выше порога Фредерикса. С помощью этого метода получены распределения вектора директора в объеме ячеек с планарной и гомеопланарной ориентацией директора на границах при различных значениях напряжения. Численно рассчитанные емкости систем ЖК с неоднородной диэлектрической проницаемостью совпадают с экспериментальными данными. Метод прямой минимизации может быть обобщен для исследования ячеек светочувствительных ЖК. В этом случае свободная энергия представляет собой функционал от функции нескольких переменных.
- Искажение структуры ЖК в ячейке с планарной ориентацией, находящейся во внешнем электрическом поле, влияет на особенности распространения необыкновенного луча. Теоретическое описание распространения света может быть построено в рамках приближения геометрической оптики, где в качестве большого параметра выступает отношение шага спирали ЖК к длине световой волны. Полученные численно зависимости минимального напряжения пропускания от предельного угла рефракции и интенсивности прошедшего света от напряжения при фиксированном угле падения находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными.
- Распределение директора для гомеопланарной ячейки и планарной  $90^\circ$  твист-ячейки НЖК дает возможность построить зависимость глубины проникновения необыкновенного луча от угла падения при различных напряжениях. В эксперименте угол падения задается с точностью  $0.1^\circ$ , позволяющей плавно менять глубину проникновения света в слой ЖК. Последнее предоставляет уникальную возможность для изучения локальной ориентационной структуры директора ЖК и динамики ее изменения во внешних электрических полях.

**Степень достоверности и апробация работы.** Достоверность полученных результатов обусловлена хорошим совпадением с данными экспериментов. На каждом этапе расчетов выполнялось сравнение с известными результатами для более простых моделей. Результаты, изложенные в диссертации, были представлены на двух международных конференциях и школах: международная конференция «14th European Conference on Liquid Crystal» (Москва, Россия, 2017), международная школа по моделированию жидкокристаллических систем «CECAM School on Liquid Crystals» (Erice, Italy, 2017). А также неоднократно докладывались на семинарах кафедры статистической физики Санкт-Петербургского государственного университета.

**Публикации и личный вклад автора.** По теме диссертации опубликованы 3 статьи в журналах, входящих в перечень ВАК, базы данных Web of Science и Scopus, а также тезисы одного доклада. Личный вклад автора заключается в том, что диссертант принимал непосредственное участие в постановке и решении задач, в подготовке материалов для

публикации в журналах и на конференциях. Автором выполнено теоретическое описание рассматриваемых систем и написаны все программы, позволяющие осуществлять расчеты, представленные в диссертации. Автор не участвовал в получении экспериментальных данных.

**Структура и объем диссертации.** Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения, списка литературы из 67 наименований и приложений. Общий объем диссертации 84 страницы машинописного текста, включая 19 рисунков и 1 таблицу.

## СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во **введении** обоснована актуальность темы диссертационной работы, дан краткий обзор состояния исследований по теме диссертации, сформулированы ее цели и задачи, показана научная новизна и практическая значимость полученных результатов, описаны методы исследования и структура работы.

В **первой главе** рассматривается плоскопараллельная ЖК-ячейка в рамках континуальной теории. Приведен общий вид полной свободной энергии этой системы с учетом неоднородности внешнего электрического поля внутри ЖК-ячейки и конечного значения энергии сцепления ЖК с границами ячейки. Эта глава носит обзорный характер.

Рассматриваются ЖК-ячейки следующего вида: жидкий кристалл помещен между двумя стеклянными плоскопараллельными пластинами, поверхности которых обработаны так, чтобы создавать определенную ориентацию директора на границах ячейки. На эти поверхности также нанесены токопроводящие полиимиды, с помощью которых можно подавать электрическое напряжение в направлении ортогональном плоскости пластин. Расстояние между пластинами, заполненное жидким кристаллом, много меньше их линейных размеров. Для ячейки ХЖК ось спирали направлена по нормали к плоскостям подложек.

Полная свободная энергия  $F_{tot}$  такой системы представляет собой сумму из трех слагаемых:

$$F_{tot} = F_e + F_f + F_{sf}. \quad (1)$$

Первый член суммы (1) является свободной энергией Франка, описывающей объемные искажения ЖК:

$$F_e = \frac{1}{2} \int_V [K_{11}(\operatorname{div} \mathbf{n}(\mathbf{r}))^2 + K_{22}(\mathbf{n}(\mathbf{r}) \cdot \operatorname{rot} \mathbf{n}(\mathbf{r}) + q_0)^2 + K_{33}(\mathbf{n}(\mathbf{r}) \times \operatorname{rot} \mathbf{n}(\mathbf{r}))^2] dV, \quad (2)$$

где  $\mathbf{n}$  – единичный вектор директор,  $K_{11}, K_{22}, K_{33}$  – модули Франка.  $p_0 = 2\pi/q_0$  – шаг спирали (если  $a$  – характерный молекулярный размер системы, то  $p_0 \gg a$ ).

Второе слагаемое в (1) – вклад электрического поля:

$$F_f = - \int \frac{\mathbf{D} \cdot \mathbf{E}}{8\pi} dV, \quad (3)$$

где  $\mathbf{E}$  – вектор напряженности электрического поля,  $\mathbf{D} = \hat{\epsilon} \mathbf{E}$  – вектор электрической индукции,  $\epsilon_{\alpha\beta} = \epsilon_{\perp} \delta_{\alpha\beta} + \epsilon_a n_{\alpha} n_{\beta}$  – тензор диэлектрической проницаемости среды,  $\epsilon_a = \epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}$

- анизотропия диэлектрической проницаемости;  $\varepsilon_{\perp}$ ,  $\varepsilon_{\parallel}$  – диэлектрические проницаемости вдоль и перпендикулярно направлению директора соответственно. Если направить ось  $Oz$  вдоль оси спирали, то, с учетом неоднородности распределения директора только вдоль этого направления, связь для векторов электрического поля и электрической индукции имеет вид:

$$E_z = \frac{D_z}{\varepsilon_{zz}} = \frac{D_z}{\varepsilon_{\perp} + \varepsilon_a n_z^2(z)}, \quad (4)$$

где индекс  $z$  обозначает  $z$ -компоненту соответствующего вектора. Таким образом неоднородность распределения ориентации директора содержится также в полевом члене суммы (1).

Третье слагаемое в уравнении (1) – это поверхностная энергия сцепления ЖК с подложками. В работе в основном используется Гауссово приближение для потенциала Рапини. В этом случае вклад поверхностной энергии будет представлен следующим образом:

$$F_{sf} = \frac{S_{\perp}}{2} \sum_{j=1,2} (W_{\theta}^j(\theta(z_j) - \theta^{0(j)})^2 + W_{\phi}^j(\phi(z_j) - \phi^{0(j)})^2). \quad (5)$$

где  $S_{\perp}$  – площадь подложек,  $W_{\theta}^j$ ,  $W_{\phi}^j$  – энергии сцепления, положительные величины, в нормальных условиях являются постоянными для данного ЖК и полиимидов, с помощью которых обрабатываются подложки ЖК-ячейки,  $\theta^{0(j)}$  и  $\phi^{0(j)}$  – полярный и азимутальный углы, определяющие направление осей легкого ориентирования на верхней ( $j = 2$ ) и нижней ( $j = 1$ ) подложках, аналогично углы  $\theta(z_j)$  и  $\phi(z_j)$  определяют положение директора на верхней и нижней подложках.

Во **второй главе**, используя метод прямой минимизации свободной энергии, исследуется изменение структуры ЖК во внешнем электрическом поле выше порога Фредерикса в планарной  $90^{\circ}$  ячейке ХЖК и гомеопланарной ячейке НЖК. Получена полная свободная энергия ячейки ХЖК в сферических координатах:

$$F_{tot} = \frac{V}{2} K_{22} q_0^2 + \frac{S_{\perp}}{2} \int_0^L [A(\theta)(\theta')^2 + B(\theta)(\phi')^2 - 2C(\theta)\phi'] dz - \\ - \frac{S_{\perp} U^2}{8\pi \int_0^L (\varepsilon_{\perp} + \varepsilon_a \cos^2 \theta)^{-1} dz} + \frac{S_{\perp}}{2} \sum_{j=1,2} (W_{\theta}^j(\theta(z_j) - \theta^{0(j)})^2 + W_{\phi}^j(\phi(z_j) - \phi^{0(j)})^2), \quad (6)$$

где

$$A(\theta) = K_{11} \sin^2 \theta + K_{33} \cos^2 \theta, \quad (7)$$

$$B(\theta) = \sin^2 \theta (K_{22} \sin^2 \theta + K_{33} \cos^2 \theta), \quad (8)$$

$$C(\theta) = q_0 K_{22} \sin^2 \theta, \quad (9)$$

$U$  – электрическое напряжение, подаваемое на подложки,  $L$  – толщина ЖК-ячейки. Выражение (6) справедливо и для НЖК, лишь необходимо положить  $q_0 = 0$ . Минимизируя свободную энергию (6), можно получить конфигурацию директора для различных по конструкции ячеек.



Для нахождения распределения директора в ЖК-ячейках используется два способа: первый основан на разложении в ряд Фурье полярного угла директора, второй - на применении метода конечных разностей по переменной  $z$ .

В планарной твист-ячейке с закруткой директора на  $90^\circ$  с жесткими граничными условиями ( $\theta(0) = \theta(L) = \pi/2$ ), используя уравнения Эйлера-Лагранжа, из уравнения (6) исключается азимутальный угол  $\phi = \phi(\theta)$ . После этого полная свободная энергия системы принимает вид:

$$F_{tot} = \frac{V}{2} K_{22} q_0^2 + \frac{S_{\perp}}{2} \int_0^L \left( A(\theta)(\theta')^2 - \frac{C^2(\theta)}{B(\theta)} + \tilde{F}_f(\theta) \right) dz + \frac{S_{\perp}}{2} \frac{(\phi_{tot} - I_2)^2}{I_1}. \quad (10)$$

Для нахождения минимума свободной энергии (10) угол  $\theta(z)$  раскладывается в ряд Фурье. С учетом граничных условий разложение будет представлено в виде ряда по синусам:

$$\theta(z) = \frac{\pi}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \sin \frac{\pi z}{L} (2n - 1). \quad (11)$$

Задача минимизации состоит в поиске коэффициентов ряда  $a_n$ . Для решения этой задачи написана программа в Microsoft Office Excel. Возможности работы в Excel ограничены количеством параметров минимизации (не более 200 параметров). В случае поиска конфигурации в планарной твист-ячейке использование программы в Excel удобно вследствие сравнительно небольшого количества переменных, по которым выполнялась минимизация. Здесь был использован встроенный пакет для поиска минимума функционала. В частности, для поиска конфигурации директора использовался метод сопряженных градиентов. При расчетах учитываются первые 40 членов ряда (11). Коэффициенты ряда  $a_n$  достаточно быстро убывают с ростом  $n$ :  $a_1/a_5 \approx 10^4$ ,  $a_5/a_{10} \approx 10^3$ ,  $a_{10}/a_{15} \approx 10^3$ . В этом случае можно было бы рассматривать и меньшее количество членов ряда. Для твист-ячейки также была написана программа на языке C, позволяющая использовать метод конечных разностей и проводить минимизацию по большему количеству параметров. В программе используется метод минимизации, предложенный в [2].

Вторая рассматриваемая ячейка – гомеопланарная ячейка НЖК. На нижней грани директор ориентирован по нормали к поверхности подложки, сцепление полагается мягким, на верхней грани директор лежит в плоскости подложки, а сцепление – жесткое. Полная энергия для этой системы выражается следующим образом:

$$F_{tot} = \frac{S_{\perp}}{2} \int_0^L \left[ A(\theta(z))(\theta'(z))^2 + \tilde{F}_f(\theta(z)) \right] dz + \frac{S_{\perp}}{2} W_{\theta}^{(1)} \theta^2(0). \quad (12)$$

Для нахождения минимума функционала (12) строится сетка величин  $\theta_i = \theta(iL/2N)$ ,  $i = 0, 1, \dots, 2N - 1$ , где  $N$  – целое число,  $\theta_{2N} = \pi/2$ . Тогда задача сводится к поиску  $\theta_i$ . Для определения конфигурации директора написаны программы на языке C и в Excel, позволяющие проводить минимизацию свободной энергии по многим переменным. Результаты, полученные различными методами минимизации, совпадают. Минимизация полной энергии проводится методом сопряженных градиентов и методом, предложенным в работе [2], с  $N = 50$ .

В работе рассматриваются определенные конструкции ячеек для сравнения с экспериментом, который проводился на кафедре молекулярной биофизики и физики полимеров физического факультета СПбГУ, под руководством профессора А.П. Ковшика. Автор не участвовал в получении экспериментальных данных.

Результаты минимизации полной свободной энергии различных ЖК-ячеек представлены в работе в виде зависимостей  $\theta(z)$  и  $\phi(z)$ .

Зная конфигурацию директора при различных значениях электрического напряжения, можно получить численно зависимость емкости ячеек от приложенного электрического напряжения. Определение значения емкости, которая представляет собой интегральную характеристику, проводится по формуле Симпсона с помощью программы в Excel и программы на языке C (для контроля получаемых результатов). Программы позволяют задавать различные значения для таких параметров системы, как диэлектрические проницаемости, модули Франка, энергии сцепления с подложками, величина электрического напряжения, толщина ячейки, площадь подложек, шаг спирали, положения осей легкого ориентирования. Также можно варьировать количество параметров, по которым проводится минимизация полной энергии при поиске конфигурации директора для заданного значения электрического напряжения. С увеличением этого количества заметно возрастает время минимизации.

Теоретические и экспериментальные зависимости электрической емкости ячеек от приложенного электрического напряжения приведены на Рис. 1 и 2.

Также в работе приводится относительное среднеквадратичное отклонение  $\Delta$  результатов расчетов электрической емкости для различных значений энергии сцепления от результатов эксперимента.

Предлагается для описания светочувствительных ЖК [1] использовать приведенный выше подход. В этом случае, если система будет испытывать под действием света переход в состояние с другим направлением спирали, необходимо учитывать неоднородность распределения директора по двум направлениям,  $\mathbf{n}(\mathbf{r}) = \mathbf{n}(z, y)$ . Предполагается, что вдоль оси  $Ox$  система остается однородной.

Тогда функционал свободной энергии Франка принимает вид:

$$F_e = \frac{L_x}{2} \int_0^{L_y} \int_0^{L_z} \Psi^T(y, z) \hat{M}(y, z) \Psi(y, z) dz dy, \quad (13)$$

где  $L_x, L_y, L_z$  – размеры системы вдоль осей  $Ox, Oy$  и  $Oz$  соответственно,  $\Psi$  – пятимерный вектор

$$\Psi = \begin{pmatrix} \partial_y \theta \\ \partial_z \theta \\ \partial_y \phi \\ \partial_z \phi \\ q_0 \end{pmatrix}, \quad \partial_y = \frac{\partial}{\partial y}, \quad \partial_z = \frac{\partial}{\partial z}, \quad (14)$$

значок  $T$  – обозначает операцию транспонирования,  $\hat{M}$  – симметричная матрица  $5 \times 5$ , с

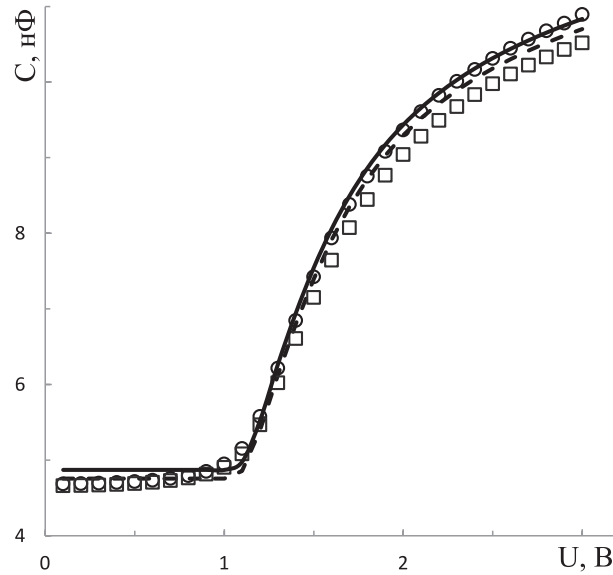


Рис. 1: Зависимость электрической емкости  $90^\circ$  твист-ячейки кирального ЖК с жесткой планарной ориентацией от приложенного напряжения.  $\circ$  – экспериментальные данные на частоте измерений 1 кГц,  $\square$  – экспериментальные данные на частоте измерений 10 кГц. Сплошная линия – численный расчет емкости для 1 кГц, пунктирная линия – численный расчет емкости для 10 кГц. Толщина ячейки  $L = 13$  мкм; площадь поверхности подложки  $S_{\perp} = 10.1$  см $^2$ ; диэлектрические проницаемости  $\varepsilon_{\perp} = 6.95$ ,  $\varepsilon_{\parallel} = 19.23$ ; значения модулей Франка для ЖК-1466:  $K_{11} = 1.1 \cdot 10^{-6}$  дин,  $K_{22} = 0.38 \cdot 10^{-6}$  дин,  $K_{33} = 0.99K_{11}$ .

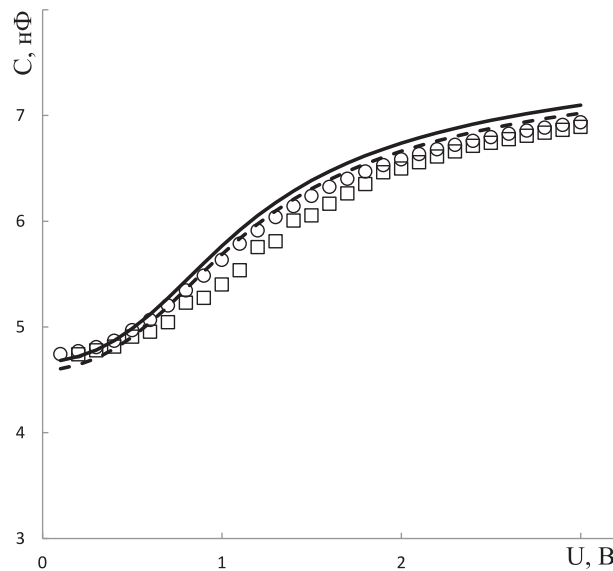


Рис. 2: Зависимость электрической емкости гомеопланарной ячейки НЖК от приложенного напряжения.  $\circ$  – экспериментальные данные на частоте измерений 1 кГц,  $\square$  – экспериментальные данные на частоте измерений 10 кГц. Сплошная линия – численный расчет емкости для 1 кГц, пунктирная линия – численный расчет емкости для 10 кГц. Площадь поверхности подложки  $S_{\perp} = 10.2$  см $^2$ ; толщина ячейки  $L = 22.5$  мкм. Все остальные константы совпадают с используемыми для Рис. 1.

элементами, зависящими от тригонометрических функций полярного  $\theta$  и азимутального  $\phi$  углов.

Как и ранее строится сетка величин  $\theta_{ij} = \theta(iL_y/2N_y, jL_z/2N_z)$ ,  $\phi_{ij} = \phi(iL_y/2N_y, jL_z/2N_z)$ ,  $i = 0, 1, \dots, 2N_y$ ,  $j = 0, 1, \dots, 2N_z$ , где  $N_y, N_z$  – целые числа. Тогда задача сводится к поиску  $\theta_{ij}, \phi_{ij}$  с помощью прямой минимизации свободной энергии (13) и использования метода конечных разностей. Написана программа на языке С, позволяющая реализовать минимизацию свободной энергии Франка ЖК-ячейки. Программа использует метод многомерной минимизации, предложенный в [2]. В ней также можно задавать различные параметры ячейки, такие как модули Франка, диэлектрические проницаемости и т.д.

В **третьей главе** рассматривается распространение света в ЖК-ячейках во внешнем электрическом поле, превышающем порог Фредерикса. Изучается влияние искажения структуры ЖК на особенности распространения необыкновенного луча. ЖК-ячейки обладают такой же конструкцией, как и ранее. Главные значения тензора диэлектрической проницаемости  $\hat{\epsilon}$ , определяющего оптические свойства среды, берутся на оптической частоте измерений. Среда полагается немагнитной.

НЖК по своим оптическим свойствам являются одноосными жидкими кристаллами, ХЖК в свою очередь можно рассматривать как локально одноосную систему. Распространение света в таких системах описывается уравнениями Максвелла. Нас интересуют решения волнового уравнения для поля световой волны. Рассматривается случай, когда волна падает на плоскость  $z = 0$  (нижняя грань ячейки). Будем считать, что в нашей системе присутствует большой параметр равный отношению шага спирали к длине световой волны  $\Omega = p_0/\lambda$ . Поэтому мы решаем волновое уравнение с помощью метода ВКБ. В рамках этого метода ограничимся учетом двух первых порядков по большому параметру  $\Omega$ . Тогда поле световой волны может быть записано в виде:

$$\mathbf{E}_{\pm}^{(j)}(\mathbf{r}) = A_{\pm}^{(j)}(\mathbf{k}_{\perp}; z, z_0) \mathbf{e}_{\pm}^{(j)}(\mathbf{k}_{\perp}, z) \exp\left(i\mathbf{k}_{\perp} \cdot \mathbf{r}_{\perp} + i \int_{z_0}^z k_{z\pm}^{(j)}(\mathbf{k}_{\perp}, z') dz'\right), \quad (15)$$

где  $(j)$  – тип волны ( $(o)$  – обыкновенная или  $(e)$  – необыкновенная),  $A_{\pm}^{(j)}$  – амплитуды волн,  $z_0 = 0$ ,  $\mathbf{e}_{\pm}^{(j)}$  – вектора поляризации, волновой вектор  $\mathbf{k}$  имеет вид  $\mathbf{k} = (\mathbf{k}_{\perp}, k_z)$ ,  $\mathbf{k}_{\perp}$  – двумерный вектор, не зависящий от координат, и его величина определяется углом падения света на среду  $\delta$ . Продольная компонента волнового вектора  $k_z$  имеет достаточно сложный вид и может быть получена из уравнения эйконала [3]:

$$k_{z\pm}^{(o)} = \pm \sqrt{k_0^2 \varepsilon_{\perp} - k_{\perp}^2}, \quad (16)$$

$$k_{z\pm}^{(e)} = \frac{k_0}{\varepsilon_{\perp} + \varepsilon_a \cos^2 \theta} \left( -\frac{k_{\perp}}{k_0} \varepsilon_a \sin \theta \cos \theta \cos \phi \pm \varepsilon_{\perp} \sqrt{D(k_{\perp}, \theta, \phi)} \right), \quad (17)$$

где

$$D(k_{\perp}, \theta, \phi) = \varepsilon_{\parallel} \left( 1 - \frac{k_{\perp}^2}{k_0^2 \varepsilon_{\perp}} + \frac{\varepsilon_a}{\varepsilon_{\perp}} \cos^2 \theta \right) + \frac{k_{\perp}^2 \varepsilon_a}{k_0^2 \varepsilon_{\perp}} \sin^2 \theta \sin^2 \phi, \quad (18)$$

$k_0 = 2\pi/\lambda$ . Выражение (15) описывает четыре возможные решения волнового уравнения.

В рассматриваемой системе необыкновенный луч может распространяться в сторону уменьшения показателя преломления. В этом случае возможно полное внутреннее отражение луча, т. е. в процессе распространения волновой вектор постепенно меняет направление на противоположное. В некоторой точке среды ( $z = z^*$ ) функция  $D(\mathbf{k}_\perp, \theta(z^*), \phi(z^*)) = 0$ , после чего становится меньше нуля. Это означает, что у  $k_z^{(e)}$  появляется мнимая добавка и волна начинает экспоненциально затухать. На самом деле в этой точке происходит полное отражение волны. Волна, отражаясь от некоторого слоя внутри среды, начинает распространяться в обратном направлении относительно оси  $z$ . Точки, в которых  $D(\mathbf{k}_\perp, \theta(z^*), \phi(z^*)) = 0$ , называются в теории дифференциальных уравнений точками поворота. Построение поля в окрестности этих точек представляет собой сложную задачу, поскольку метод ВКБ становится неприменим. Так как нас интересует прохождение света через ячейку, то наличие и расположение точек поворота играет большую роль.

При распространении необыкновенного луча в ячейке ЖК при достаточно больших углах падения длина траектории луча оказывается значительной. Это приводит к тому, что на интенсивность прошедшего через ячейку луча влияют потери, связанные с рассеянием света. Эти потери описываются коэффициентом экстинкции  $\sigma$ :

$$I(L) = I(0) \exp\left(-\int_0^L \sigma(l) dl\right), \quad (19)$$

где  $I(0)$  – интенсивность падающего света,  $dl$  – элемент длины траектории луча. Выражение для экстинкции приведено в Приложении.

Рассматривается качественная картина распространения света в ячейках ЖК в присутствии внешнего электрического поля.

Приводится описание эксперимента, который проводился на кафедре молекулярной биофизики и физики полимеров физического факультета СПбГУ, под руководством профессора А.П. Ковшика. Автор не участвовал в получении экспериментальных данных.

При включении внешнего электрического поля компонента  $k_z$  волнового вектора для обеих ячеек не равна нулю в точке поворота. В этом случае зависимость  $z_*(\delta)$  можно получить численно. Минимизируя свободную энергию при определенном электрическом напряжении, получаем распределение директора в объеме ячейки, то есть наборы значений  $\theta(z_i)$  и  $\phi(z_i)$ ,  $i = 0, 1, \dots, N$  для данного  $U$ . Для гомеопланарной ячейки  $\phi(z_i) = 0$  (угол  $\phi$  фиксирован и равен нулю во всем объеме ЖК-ячейки). Подставляя их в функцию  $D(k_\perp, \theta(z), \phi(z))$ , легко определить в каком слое  $z_i^* < z < z_{i+1}^*$  она меняет знак. В этом слое и находится точка поворота. В качестве глубины проникновения луча в ячейку принимается середина этого слоя. Как и ранее, использовались программы, написанные на языке С и в Excel, дополненные функциями, позволяющими получить электрооптические характеристики. На Рис. 3 приведена глубина проникновения в зависимости от угла падения света на ЖК при различных напряжениях для планарной  $90^\circ$  ячейки ХЖК. Также эта зависимость получена для гомеопланарной ячейки НЖК.

Численно получена зависимость минимального напряжения пропускания от предельного угла рефракции. Для расчетов использовались программы, написанные на языке С

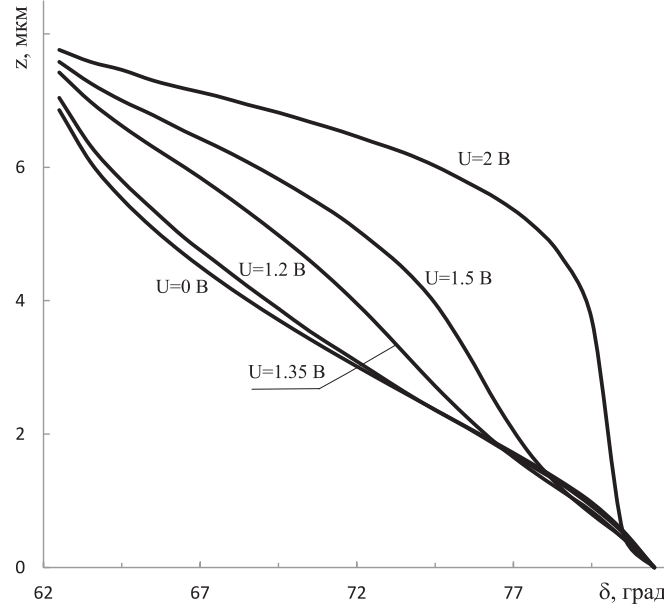


Рис. 3: Зависимость глубины проникновения необыкновенного луча в планарной ячейке ХЖК от угла падения света на слой ЖК при различных значениях электрического напряжения.

и в Excel.

Отдельно для данного ЖК строилась угловая зависимость величины экстинкции  $\sigma$  от угла  $\theta^*$  между падающим волновым вектором и директором в данной точке среды.

Интернсивность прошедшего сквозь ячейку света (19) можно получить по формуле Симпсона, используя наборы  $\theta_i$  и  $\phi_i$ ,  $i = 0, 1, \dots, N$ , полученные в результате минимизации энергии (1), а также угловую зависимость экстинкции. При наличии точек поворота, расположенных на расстоянии большем длины волны от верхней границы ячейки, в выражении для интенсивности (19) интегрирование следует проводить до точки поворота  $z = z_*$

$$I_* = I(0) \exp \left( - \int_0^{z_*} \sigma(z) \sqrt{1 + \left( \frac{d\mathbf{r}_\perp}{dz} \right)^2} dz \right). \quad (20)$$

Коэффициент затухания, связанный с появлением мнимой части в  $z$ -компоненте волнового вектора при  $z > z_*$ :

$$A = \exp \left( -2 \int_{z_*}^L \text{Im } k_z(z) dz \right). \quad (21)$$

На Рис. 4 (a) приведены зависимости интенсивности прошедшего света от напряжения при фиксированном угле падения, полученные экспериментально и численно. Интенсивности нормированы на максимальное значение интенсивности пропускания. Из рисунка видно, что экспериментальные данные и результаты численных расчетов хорошо совпадают. Для сравнения на Рис 4 (b) также приведены результаты численных расчетов, нормированные на значение интенсивности падающего света. Численные расчеты также дают линейный рост интенсивности (сплошные линии на Рис 4 (b)). Учет коэффициента затухания для данной системы более чем в два раза уменьшает интенсивность прошедшего

света. Все расчеты проводились в программе, написанной на языке С.

В **заклучении** сформулированы основные результаты и выводы работы. В **приложении** приведены выражения для экстинкции в борновском приближении и список основных обозначений.

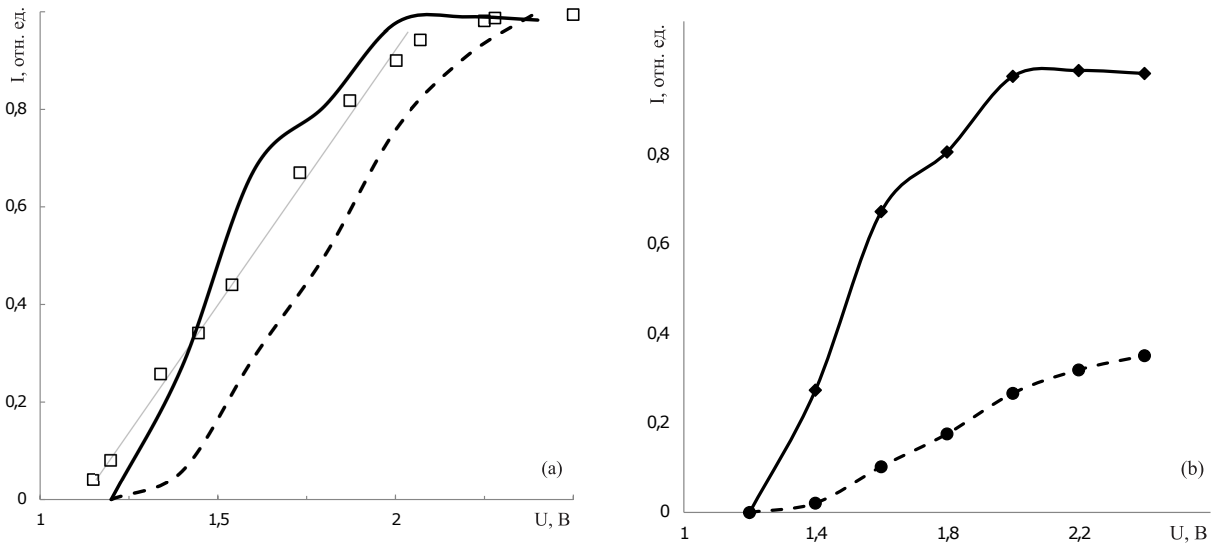


Рис. 4: Зависимость интенсивности пропускания для необыкновенного луча от напряжения, приложенного к ячейке; угол падения  $\delta = 63^\circ$ ; (а) – интенсивность нормирована на максимальное значение интенсивности пропускания,  $\square$  – экспериментальные данные, сплошная линия – зависимость интенсивности пропускания от напряжения без учета коэффициента затухания  $A$ , пунктирная линия – зависимость интенсивности пропускания от напряжения с учетом коэффициента затухания; (б) – интенсивность нормирована на значение интенсивности падающего света, кругами и ромбами обозначены точки, полученные численно, сплошная и пунктирная линии схематически показывают зависимость интенсивности пропускания от напряжения без учета коэффициента затухания  $A$  и с учетом коэффициента затухания соответственно.

#### СПИСОК ОСНОВНЫХ ПУБЛИКАЦИЙ

1. *Е.В. Аксенова, А.А. Каретников, Н.А. Каретников, А.П. Ковшик, Е.И. Рюмцев, А.С. Сахацкий, А.В. Сванидзе* **Исследование влияния электрического поля на ориентацию жидкого кристалла в ячейках с неоднородным распределением директора** // Журнал экспериментальной и теоретической физики, 2016. Т. 149, № 5. С. 1087-1095.
2. *Е.В. Аксенова, А.А. Каретников, А.П. Ковшик, Е.С. Крайнюков, А.В. Сванидзе* **Влияние внешнего электрического поля на распространение световых волн в ячейках холестерических жидких кристаллов** // Оптика и спектроскопия, 2017. Т. 122, № 5. С. 844-854.

3. *Н.А. Каретников, А.П. Ковшик, А.А. Каретников, Е.И. Рюмцев, Е.В. Аксенова, А.В. Сванидзе* **Быстрый электрооптический отклик ячейки с гомеопланарным слоем нематического жидкого кристалла** // Письма в ЖЭТФ, 2017. Т. 106, № 5. С. 293-296.
4. *A. Svanidze, E. Aksenova* **P78 Theoretical and numerical investigation of liquid crystal cells with nonuniform director distribution**. 14th European Conference on Liquid Crystals, June 25-30, 2017, Moscow, Russia. Book of abstracts. P. 173-173.

## Список литературы

1. *Zhi-gang Zheng, Yannian Li, Hari Krishna Bisoyi, Ling Wang, Bunning T.J., Quan Li* // Nature – 2016. – Vol. 531. – P. 352.
2. *Bessarab P.F., Uzdin V.M., Jónsson H.* // Computer Physics Communications – 2015. – Vol. 196. – Pp. 335-347.
3. *Аксенова Е.В., Дивинский Б.Б., Каретников А.А., Каретников Н.А., Ковшик А.П., Крюков Е.В., Романов В.П.* // ЖЭТФ – 2014. – Vol. 145. no. 2. – P. 369.