

Санкт-Петербургский Государственный Университет

Сванидзе Анастасия Владимировна

**СТРУКТУРА И ЭЛЕКТРООПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА
ХОЛЕСТЕРИЧЕСКИХ И НЕМАТИЧЕСКИХ ЖИДКИХ
КРИСТАЛЛОВ С НЕОДНОРОДНЫМ РАСПРЕДЕЛЕНИЕМ
ДИРЕКТОРА**

Специальность 01.04.07 —

«Физика конденсированного состояния»

Диссертация на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:

д. ф.-м. н.

Аксенова Елена Валентиновна

Санкт-Петербург — 2018

Оглавление

| | |
|--|-----------|
| Введение | 4 |
| 1 Полная свободная энергия жидкокристаллической ячейки | 12 |
| 1.1 Энергия Франка | 13 |
| 1.2 Вклад внешнего поля в свободную энергию жидкого кристалла . | 15 |
| 1.3 Поверхностная энергия сцепления жидкого кристалла с подложкой | 17 |
| 2 Метод прямой минимизации свободной энергии жидкокристаллической ячейки | 19 |
| 2.1 Энергия жидкокристаллической ячейки в сферических координатах | 20 |
| 2.1.1 Емкость жидкокристаллической ячейки | 22 |
| 2.2 Конфигурация директора | 22 |
| 2.2.1 Планарная твист-ячейка | 23 |
| 2.2.2 Гомеопланарная ячейка НЖК | 28 |
| 2.3 Результаты эксперимента | 32 |
| 2.3.1 Конструкция ЖК ячеек | 32 |
| 2.3.2 Сравнение экспериментальной зависимости емкости от напряжения с численным расчетом | 34 |
| 2.4 Функционал свободной энергии от функции нескольких переменных | 38 |

| | | |
|----------|--|-----------|
| 3 | Распространение света в жидкокристаллических ячейках . | 41 |
| 3.1 | Распространение света в ячейках жидких кристаллов, приближение геометрической оптики | 41 |
| 3.2 | Влияние экстинкции | 49 |
| 3.3 | Эксперимент | 51 |
| 3.4 | Результаты расчетов и сравнение с экспериментом | 54 |
| 3.4.1 | Глубина проникновения необыкновенного луча в слой жидкого кристалла | 54 |
| 3.4.2 | Зависимость минимального напряжения пропускания от предельного угла рефракции | 59 |
| 3.4.3 | Интенсивность света прошедшего сквозь ячейку | 62 |
| | Заключение | 66 |
| | Список литературы | 69 |
| A | Коэффициент экстинкции в твист-ячейке с большим шагом спирали | 78 |
| B | Список основных обозначений | 82 |

Введение

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 [1]. 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 [2, 3]. 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 [4]. Поэтому изучение распределения директора внутри ячейки играет важную роль при описании перехода Фредерикса.

При помещении ЖК между двумя тонкими проводящими плоскостями, на которые подается напряжение, эффект переориентации можно изучать измеряя емкость такого конденсатора. Мейерхофер одним из первых проследил за изменением емкости с увеличением напряжения для ячейки нематическо-

го ЖК [5]. Он обратил внимание, что если изначально НЖК ориентирован не планарно, а под некоторым углом к поверхности, то эффект Фредерикса во внешнем электрическом поле оказывается беспороговым. Также Мейерхофером емкостной метод был адаптирован для определения угла наклона молекул НЖК с однородной наклонной ориентацией во всем объеме [6].

Угол наклона ЖК на границе ячейки играет важную роль в характеристике и работе ЖК-дисплеев. Например, в ячейке нематика, подверженного деформации кручения, приготовленной со слабым углом наклона, 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 [7].

Для оптимизации качества работы таких устройств необходимы были способы точного определения угла наклона, вследствие этого емкостной метод получил дальнейшее развитие в работе [8], где проведен подробный разбор и анализ различных способов определения угла наклона НЖК в ячейке. Установливалась взаимосвязь угла наклона на границе от приложенного напряжения (при напряжениях много меньших порогового значения U_c перехода Фредерикса). Было обнаружено, что точность определения угла падает с увеличением напряжения, но при напряжениях $\sim 0.2U_c$ погрешность измерений не превышает 1° .

Емкостной метод на сегодняшний день активно используется для экспериментального исследования диэлектрических и магнитооптических свойств НЖК, допированных магнитными наночастицами [9–11].

Также широкое практическое применение жидких кристаллов вызывает большой интерес в изучении их оптических свойств и поведения во внешних полях. Это связано с простотой управления с помощью электрического поля

оптическими свойствами тонких слоев ЖК: 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 [1, 12–14]. На основе ЖК создают электрооптические модуляторы, индикаторы для различных диапазонов температур, биосенсоры [15], записывают голографические решетки и динамические голограммы [16, 17].

Жидкокристаллические 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 жидких кристаллов в зависимости от приложенного внешнего поля.

Описание структуры ЖК во внешних полях представляет собой достаточно сложную задачу, особенно в случае сильных полей, превышающих порог Фредерикса. Наличие пространственной геликоидальной структуры делает проблему описания перехода во внешних полях математически более слож-

ной. Впервые переход Фредерикса в холестерических жидких кристаллах был рассмотрен Лесли [18]. Повторим, что, в отличие от нематиков, в киральных системах между описаниями эффекта Фредерикса в электрическом и магнитном поле имеется существенное различие. Причина состоит в том, что электрическое поле в холестериках неоднородно. Детально эта проблема рассматривалась в работах [19–22]. В настоящее время для описания перехода Фредерикса используются также численные методы [23].

Теоретически проблема распространения света, падающего под углом на анизотропную среду с произвольным направлением оптических осей, решалась различными методами. Интенсивно используются численные методы [24–31]. Большое внимание уделяется точным и приближенным аналитическим методам [32–35], методу взаимодействующих мод [36, 37] и методам геометрической оптики [38, 39].

В настоящей работе рассматривается ячейка, в которой шаг спирали велик по сравнению с длиной световой волны. При описании распространения волна в таких системах используют так называемый адиабатический режим Могена [40]. Свойства таких сред меняются плавно на масштабе порядка длины волны света λ и оказывается возможным использовать методы типа ВКБ. Для задачи о распространении электромагнитных волн в локально изотропных средах с плавными неоднородностями проблема была решена в [41, 42], а для ХЖК с большим шагом в случае наклонного падения света — в [43]. Здесь также свет распространяется в адиабатическом режиме — имеется две нормальные волны, локально обыкновенная и локально необыкновенная, векторы поляризаций которых определяются локальными направлениями оптической оси и волнового вектора в данной точке. При этом сохраняется компонента волнового вектора, поперечная к оси спирали, а его длина (волновое число) определяется из локального дисперсионного уравнения [43].

При падении необыкновенного луча на слой ХЖК под углами, большими, чем некоторый минимальный угол, имеет место поворот (отражение) необыкновенного луча внутри среды и уход его из среды [44]. Обратим внимание, что поворот происходит внутри, а не на поверхности образца.

При распространении луча во флуктуирующей среде происходят потери его энергии на рассеяние. Эти потери описываются коэффициентом экстинкции. Последний совпадает с полным сечением рассеяния – проинтегрированной по всем углам рассеяния интенсивности рассеянного излучения, отнесенной к единице объема и единице интенсивности падающей волны. В однородной одноосной среде имеются два коэффициента экстинкции, связанных с рассеянием обыкновенных и необыкновенных волн [45, 46]. Поскольку длина траектории луча в рассматриваемых ячейках может быть значительной, мы будем учитывать при расчетах интенсивности прошедшего света затухание, связанное с экстинкцией.

Помимо рассмотрения жидких кристаллов с неоднородной структурой вдоль одного направления, методы, предложенные в работе, могут быть применены для описания ЖК-ячеек с неоднородным распределением директора вдоль двух направлений или ячеек с изменяющимся направлением оси, вдоль которой распределение директора неоднородно. Последнее может происходить под действием внешних факторов. Примером такой системы служат ЖК-ячейки со светочувствительной киральной добавкой [47, 48]. Под действием ультрафиолетового и видимого света такие молекулы добавки, как (S, S)-D4, могут обратимо изменять свою химическую структуру [47]. Это влияет на объемное распределение директора во всей ячейке: геликоидальная структура сначала становится однородной (происходит раскрутка спирали), а далее приобретает закрутку другого знака. Тогда изменения конфигурации директора могут быть определены методом прямой минимизации функцио-

нала энергии такой ЖК-ячейки в зависимости от значения обратного шага спирали.

Диссертационная работа построена следующим образом.

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

Во второй главе, используя метод прямой минимизации свободной энергии, исследуется изменение структуры ЖК во внешнем электрическом поле выше порога Фредерикса. Получены распределения вектора директора при различных значениях напряжения в объеме ячеек с планарной и гомеопланарной ориентацией директора на границах. Используя полученные распределения, численно рассчитаны емкости экспериментальных систем ЖК с неоднородной диэлектрической проницаемостью, вызванной структурными свойствами жидких кристаллов. Численный расчет электрической емкости сравнивался с экспериментальными результатами. Также в этой главе предложено описание и способ исследования ячеек светочувствительных жидких кристаллов, на основе прямой минимизации функционала свободной энергии. В этом случае свободная энергия представляет собой функционал от функции нескольких переменных.

В третьей главе рассматривается распространение света в ячейке ХЖК с планарной ориентацией во внешнем электрическом поле, превышающем порог Фредерикса. Изучается влияние искажения структуры ЖК на особенности распространения необыкновенного луча. Исследуется внутренняя рефракция луча в холестерике за счет пространственного изменения направ-

ления оптической оси в среде. Теоретическое описание распространения света строится в рамках приближения геометрической оптики, где в качестве большого параметра выступает отношение шага спирали ЖК к длине световой волны. Численно получены зависимости минимального напряжения пропускания от предельного угла рефракции и интенсивности прошедшего света от напряжения при фиксированном угле падения. Несмотря на то, что рассматривается ячейка ХЖК с поворотом директора на 90° , применяемый метод можно использовать и для других геометрий ячеек ЖК.

Основные результаты, полученные в данной работе, опубликованы в следующих статьях:

- *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 [*E. V. Aksenova, A. A. Karetnikov, N. A. Karetnikov, A. P. Kovshik, E. I. Ryumtsev, A. S. Sakhatskii, A. V. Svanidze* **Effect of an electric field on the orientation of a liquid crystal in the cell with a nonuniform director distribution** // Journal of Experimental and Theoretical Physics, 2016. Vol. 122, № 5. P. 942-949]
- *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 [*E. V. Aksenova, A. A. Karetnikov, A. P. Kovshik, E. S. Krainyukov, A. V. Svanidze* **The influence of an external electric field on the**

propagation of light waves in cholesteric liquid crystal cells // Optics and Spectroscopy, 2017. Vol. 122, № 5. P. 816–825]

- *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
 [*N.A. Karetnikov, A.P. Kovshik, A.A. Karetnikov, E.I. Ryumtsev, E.V. Aksenova, A.V. Svanidze* **Fast electro-optical response of a cell with a homeoplanar layer of a nematic liquid crystal** // JETP Letters, 2017. Vol. 106, № 5. P. 313–316]

Также результаты доложены на международной конференции “14th European Conference on Liquid Crystal” (Москва, Россия, 2017) и международной школе по моделированию жидкокристаллических систем CECAM School on Liquid Crystals (Erice, Italy, 2017).

Глава 1

Полная свободная энергия жидкокристаллической ячейки

Нематический жидкий кристалл представляет собой одноосную жидкость. Молекулы НЖК обычно являются вытянутыми и в среднем ориентированы вдоль определенного направления.

Макроскопическое состояние НЖК описывают с помощью задания в каждой точке единичного вектора $\mathbf{n}(\mathbf{r})$, называемого директором. В равновесном состоянии НЖК является однородным, неоднородные же распределения директора возникают в случае различных упругих деформаций жидкого кристалла. Далее будут рассматриваться случаи, в которых расстояние заметного изменения параметра порядка системы много больше, чем размер молекул. То есть деформации будут описываться континуальной теорией, пренебрегающей деталями структуры на молекулярном масштабе.

Более сложным объектом является холестерический жидкий кристалл, который в равновесном состоянии обладает геликоидальной структурой. ХЖК легко представить как результат равномерной закрутки нематика вокруг оси z , у которого вектор директора \mathbf{n} ориентирован в одном направлении в плоскости (x,y) . Геликоидальную структуру также можно получить, помещая киральную добавку в нематическую матрицу, или механически с помощью за-

крутки друг относительно друга подложек, которые определяют граничные положения жидкокристаллических молекул. Описание киральных НЖК аналогично описанию ХЖК.

Далее будут рассмотрены жидкокристаллические 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.

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

$$F_{tot} = F_e + F_f + F_{sf}. \quad (1.1)$$

1.1 Энергия Франка

Направим ось Oz по нормали к поверхностям подложек. В каждой плоскости $z = \text{const}$ система предполагается однородной, тогда $\mathbf{n}(\mathbf{r}) = \mathbf{n}(z)$. Объемные деформации описываются в полной мере векторным полем $\mathbf{n}(\mathbf{r})$. Так как предполагается, что характерные размеры деформаций велики по сравнению с размером молекул, то производные директора по координатам принимают тем меньшие значения, чем выше порядок производной.

Первый член суммы (1.1) является свободной энергией Франка, описывающей объемные искажения ЖК и получается путем разложения плотности

свободной энергии по степеням производных $\mathbf{n}(\mathbf{r})$ [49, 50]:

$$F_e = \frac{1}{2} \int_V [K_{11}(\operatorname{div} \mathbf{n}(\mathbf{r}))^2 + K_{22}(\mathbf{n}(\mathbf{r}) \cdot \operatorname{rot} \mathbf{n}(\mathbf{r}) + q_0)^2 + K_{33}(\mathbf{n}(\mathbf{r}) \times \operatorname{rot} \mathbf{n}(\mathbf{r}))^2] dV, \quad (1.2)$$

а с учетом неоднородности распределения директора только вдоль оси Oz это выражение преобразуется следующим образом

$$F_e = \frac{S_{\perp}}{2} \int_0^L [K_{11}(\operatorname{div} \mathbf{n}(z))^2 + K_{22}(\mathbf{n}(z) \cdot \operatorname{rot} \mathbf{n}(z) + q_0)^2 + K_{33}(\mathbf{n}(z) \times \operatorname{rot} \mathbf{n}(z))^2] dz, \quad (1.3)$$

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

Выражение для энергии учитывает равносильность направлений \mathbf{n} и $-\mathbf{n}$. Также в ней опущены слагаемые вида $\operatorname{div} \mathbf{v}(\mathbf{r})$, где $\mathbf{v}(\mathbf{r})$ – произвольное векторное поле. Они сводятся к интегралу по поверхности и не дают вклад в объемную энергию. Слагаемые вида $\mathbf{n} \cdot \operatorname{rot} \mathbf{n}$ являются псевдоскалярными величинами и меняют знак при инверсии осей координат. Это слагаемое будет присутствовать только в киральных жидких кристаллах, которые не являются centrosymmetric.

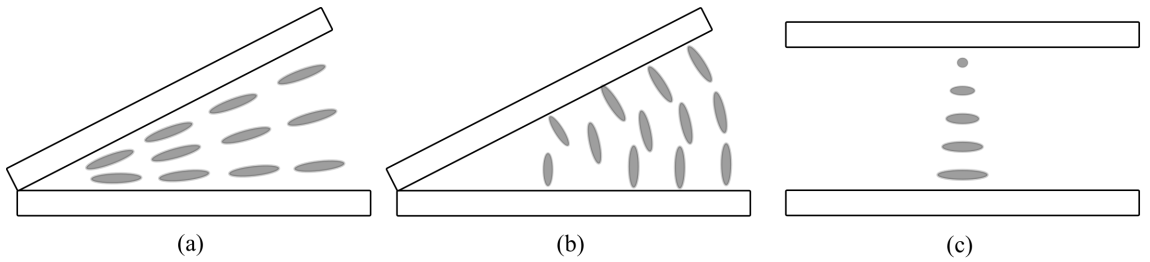


Рисунок 1.1: Различные виды деформации жидкого кристалла, заключенного между подложками. (a) – поперечный изгиб, (b) – продольный изгиб, (c) – кручение.

Модули Франка отвечают за различные деформации жидкого кристалла (1.1): деформация с $(\operatorname{div} \mathbf{n}) \neq 0$ – это деформация поперечного изгиба, с $\mathbf{n} \cdot \operatorname{rot} \mathbf{n} \neq 0$ – деформация кручения, с $\mathbf{n} \times \operatorname{rot} \mathbf{n} \neq 0$ – деформация продольного изгиба.

В случае, когда $q_0 = 0$ и граница ЖК является свободной, то минимизация свободной энергии Франка приводит к равновесной конфигурации $\mathbf{n} = const.$ Это случай нематического жидкого кристалла с однородным распределением директора. При q_0 отличном от нуля, минимизация функционала свободной энергии Франка приводит к решению $\mathbf{n}(z) = (\cos(q_0z + \phi_0), \sin(q_0z + \phi_0), 0)$. В этом случае директор равномерно "закручен" вдоль оси z с шагом спирали p_0 .

1.2 Вклад внешнего поля в свободную энергию жидкого кристалла

Второе слагаемое в сумме показывает вклад внешнего поля. Рассматривается случай, когда внешнее магнитное или электрическое поля также направлены по нормали к поверхностям подложек ($\mathbf{E}, \mathbf{H} \parallel z$).

Для магнитного поля этот вклад записывается в виде:

$$F_f = - \int \frac{\mathbf{B} \cdot \mathbf{H}}{8\pi} dV, \quad (1.4)$$

где $\mathbf{B} = \hat{\mu}\mathbf{H}$ - вектор магнитной индукции, $\mu_{\alpha\beta} = (1 + 4\pi\chi_{\perp})\delta_{\alpha\beta} + \chi_a n_{\alpha}n_{\beta}$ - тензор магнитной проницаемости, $\chi_a = \chi_{\parallel} - \chi_{\perp}$ - анизотропия магнитной восприимчивости, $\chi_{\parallel}, \chi_{\perp}$ - магнитная восприимчивость вдоль и поперек директора \mathbf{n} соответственно, $\delta_{\alpha\beta}$ - символ Кронекера, $\alpha, \beta = x, y, z$, $V = S_{\perp}L$ - объем системы.

Для электрического поля вклад в энергию будет иметь следующий вид:

$$F_f = - \int \frac{\mathbf{D} \cdot \mathbf{E}}{8\pi} dV, \quad (1.5)$$

где $\mathbf{D} = \hat{\varepsilon}\mathbf{E}$ - вектор электрической индукции, $\varepsilon_{\alpha\beta} = \varepsilon_{\perp}\delta_{\alpha\beta} + \varepsilon_a n_{\alpha}n_{\beta}$ - тензор диэлектрической проницаемости среды, $\varepsilon_a = \varepsilon_{\parallel} - \varepsilon_{\perp}$ - анизотропия диэлек-

трической проницаемости; ε_{\perp} , ε_{\parallel} – диэлектрические проницаемости вдоль и перпендикулярно направлению директора соответственно.

Магнитная восприимчивость большинства тел мала по сравнению с их диэлектрической восприимчивостью. В том числе для жидких кристаллов, не содержащих магнитных частиц и не синтезированных с добавлением парамагнитных атомов (примером таких ЖК могут служить лантанидосодержащие жидкие кристаллы [51, 52]), главные значения тензора магнитной восприимчивости являются малыми величинами, $\chi_{\parallel}, \chi_{\perp} \ll 1$. Таким образом магнитное поле \mathbf{H} в объеме ЖК будет практически однородным. В свою очередь главные значения тензора диэлектрической проницаемости НЖК и ХЖК сравнимы с единицей, что ведет к неоднородности электрического поля \mathbf{E} внутри среды в случае неоднородного распределения директора. Так как $\operatorname{div} \mathbf{D}(z) = 0$, z -компонента вектора электрической индукции D_z не зависит от z . Условие же $\operatorname{rot} \mathbf{E}(z) = 0$ с граничными условиями непрерывности электрического поля $\mathbf{E}_{x,y}(0) = \mathbf{E}_{x,y}(L) = 0$ дает лишь одну ненулевую компоненту электрического поля – E_z . Тогда связь векторов электрического поля и электрической индукции имеет вид:

$$E_z = \frac{D_z}{\varepsilon_{zz}} = \frac{D_z}{\varepsilon_{\perp} + \varepsilon_a n_z^2(z)}. \quad (1.6)$$

Таким образом неоднородность распределения ориентации директора содержится также в полевом члене суммы (1.1).

Обратим внимание, что свободная энергия (1.1), будет в равновесии достигать минимум по отношению к изменениям состояния при постоянной температуре и постоянных потенциалах проводников [53]. Вследствие этого вклад внешнего поля в свободную энергию будет браться в виде (1.4), (1.5), то есть со знаком минус.

1.3 Поверхностная энергия сцепления жидкого кристалла с подложкой

Третье слагаемое в уравнении (1.1) - это поверхностная энергия сцепления жидкого кристалла с подложками. Важной отличительной чертой жидкокристаллической фазы от обычной жидкой является анизотропия поверхностной энергии на границе ЖК-подложка: энергия имеет различную величину в случае параллельной и перпендикулярной ориентации ЖК молекул к подложке.

В общем виде эта энергия представима в виде:

$$F_{sf} = \frac{S_{\perp}}{2} \sum_{j=1,2} w_j(\mathbf{n}(z_j), \mathbf{n}^{0(j)}), \quad (1.7)$$

где $\mathbf{n}(z_j)$ ($j = 1, 2$, величины с индексами 1 и 2 относятся к нижней и верхней граням ячейки соответственно) – векторы директора на границах, векторы $\mathbf{n}^{0(j)}$ описывают оси легкого ориентирования, а w_j – это скалярные функции от двух единичных векторов. Эти функции принимают минимальное значение при $\mathbf{n}(z_j) = \mathbf{n}^{0(j)}$. Для малых отклонений директора от осей легкого ориентирования можно использовать квадратичную аппроксимацию по этой величине ($\mathbf{n}(z_j) - \mathbf{n}^{0(j)}$):

$$w_j(\mathbf{n}(z_j), \mathbf{n}^{0(j)}) = (\mathbf{n}(z_j) - \mathbf{n}^{0(j)}) \hat{W}_j (\mathbf{n}(z_j) - \mathbf{n}^{0(j)}), \quad (1.8)$$

где \hat{W}_j положительные симметричные матрицы 2×2 .

Наиболее часто используемый вид для потенциала поверхностной энергии – это потенциал Рапини-Популара [54]. Поверхностная энергия примет вид:

$$F_{sf} = \frac{S_{\perp}}{2} \sum_{j=1,2} \left(W_{\theta}^j \sin^2(\theta(z_j) - \theta^{0(j)}) + W_{\phi}^j \sin^2(\phi(z_j) - \phi^{0(j)}) \right), \quad (1.9)$$

где W_θ^j , W_ϕ^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 угол, 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.

В дальнейшем будем использовать Гауссово приближение для потенциала Рапини. В этом случае вклад поверхностной энергии будет представлен следующим образом:

$$F_{sf} = \frac{S_\perp}{2} \sum_{j=1,2} \left(W_\theta^j (\theta(z_j) - \theta^{0(j)})^2 + W_\phi^j (\phi(z_j) - \phi^{0(j)})^2 \right). \quad (1.10)$$

Также для описания сцепления в жидкокристаллических ячейках, применяется В-потенциал, предложенный Беляковым В.А. [55]:

$$F_{sf} = -\frac{S_\perp}{2} \sum_{j=1,2} \left(W_\theta^j \left(\cos^2 \frac{\theta(z_j) - \theta^{0(j)}}{2} - \frac{1}{2} \right) + W_\phi^j \left(\cos^2 \frac{\phi(z_j) - \phi^{0(j)}}{2} - \frac{1}{2} \right) \right). \quad (1.11)$$

Показано, что В-потенциал лучше описывает поверхностное сцепление в первых зонах клина Гранжана-Кано [56].

Для большого количества практических случаев поверхностная энергия велика по сравнению с объемной и задает определенное фиксированное направление директора на поверхности подложки. Такое сцепление называют жестким. В этом случае вместо минимизации суммы объемной и поверхностной энергии достаточно минимизировать лишь первое слагаемое с учетом заданных граничных условий для директора.

Глава 2

Метод прямой минимизации свободной энергии жидкокристаллической ячейки

В данной главе рассматривается эффект Фредерикса в ячейках ХЖК и НЖК: под действием внешнего поля изменяется распределение директора в объеме жидкокристаллической ячейки. Эффект может носить как пороговый характер: изменение ориентации молекул начинает происходить только при значении поля, превышающем некоторое критическое значение H_c или E_c , так и беспороговый: при любой величине внешнего поля начинает происходить переориентация молекул ЖК. В работе [35] показано, что в зависимости от параметров системы эффект Фредерикса может быть фазовым переходом первого или второго рода.

Также в этой главе рассматривается равновесная структура ЖК на основе континуальной модели. Получены профили директора при различных значениях внешнего электрического поля и зависимости емкости ячейки от значений внешнего электрического поля.

2.1 Энергия жидкокристаллической ячейки в сферических координатах

Рассмотрим ячейку ХЖК, которая представляет собой две плоскопараллельные пластины площадью S_{\perp} на расстоянии L , $\sqrt{S_{\perp}} \gg L$. Пространство между пластинами заполнено жидким кристаллом. ЖК ориентирован таким образом, что ось спирали перпендикулярна плоскостям пластин. Ячейка помещается во внешнее электрическое \mathbf{E} или магнитное \mathbf{H} поле, направленное вдоль оси спирали.

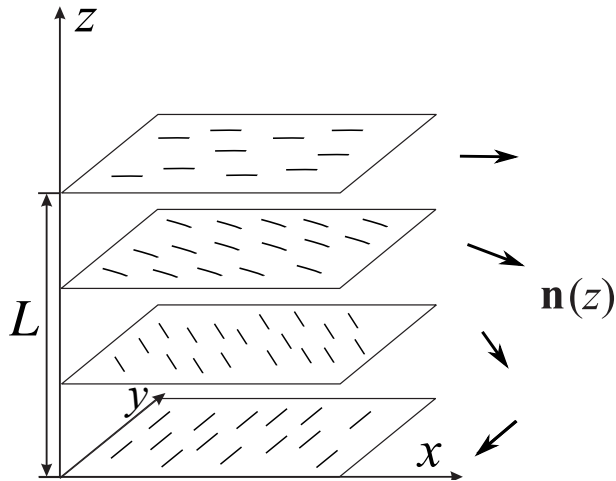


Рисунок 2.1: Схематичный вид рассматриваемой ячейки холестерического жидкого кристалла.

Введем декартову систему координат, как и ранее, так, чтобы ось z также была направлена вдоль оси спирали. Будем считать, что жидкий кристалл заключен между плоскостями $z = 0$ и $z = L$. В равновесном состоянии ХЖК директор $\mathbf{n}(\mathbf{r})$ направлен перпендикулярно оси спирали (т.е. в нашей системе координат $\mathbf{n} \perp z$). Для дальнейших вычислений удобно записать вектор \mathbf{n} в сферических координатах:

$$\mathbf{n}(z) = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta), \quad (2.1)$$

где полярный угол θ и азимутальный угол ϕ являются функциями z , $\theta = \theta(z)$ и $\phi = \phi(z)$. Угол θ отсчитывается от оси z , угол ϕ — от оси x .

Тогда выражение (1.3) принимает вид:

$$\begin{aligned} F_e &= \frac{V}{2} K_{22} q_0^2 + \frac{S_{\perp}}{2} \int_0^L \tilde{F}_e(\theta, \theta', \phi') dz = \\ &= \frac{V}{2} K_{22} q_0^2 + \frac{S_{\perp}}{2} \int_0^L [A(\theta)(\theta')^2 + B(\theta)(\phi')^2 - 2C(\theta)\phi'] dz, \end{aligned} \quad (2.2)$$

где

$$A(\theta) = K_{11} \sin^2 \theta + K_{33} \cos^2 \theta, \quad (2.3)$$

$$B(\theta) = \sin^2 \theta (K_{22} \sin^2 \theta + K_{33} \cos^2 \theta), \quad (2.4)$$

$$C(\theta) = q_0 K_{22} \sin^2 \theta. \quad (2.5)$$

Вклад магнитного поля (1.4) примет вид

$$F_f = -\frac{S_{\perp}}{2} \int_0^L \chi_a H^2 \cos^2 \theta dz. \quad (2.6)$$

В случае электрического поля (1.5) этот вклад будет иметь вид:

$$F_f = \frac{S_{\perp}}{2} \int_0^L \tilde{F}_f(\theta) dz = -\frac{S_{\perp}}{2} \int_0^L \frac{D_z^2}{4\pi(\varepsilon_{\perp} + \varepsilon_a \cos^2 \theta)} dz. \quad (2.7)$$

Для дальнейших расчетов и сравнения с экспериментальными данными удобно выразить вклад F_f для электрического поля через напряжение U , приложенное к верхней и нижней поверхностям жидкого кристалла:

$$U = \int_0^L E_z(z) dz = D_z \int_0^L (\varepsilon_{\perp} + \varepsilon_a \cos^2 \theta)^{-1} dz. \quad (2.8)$$

Так как $\operatorname{div} \mathbf{D}(z) = 0$, в этом уравнении z -компонента вектора \mathbf{D} не зависит от z и может быть вынесена за знак интеграла. Таким образом, полевой вклад

записывается в виде [4]

$$F_f = - \frac{S_{\perp} U^2}{8\pi \int_0^L (\varepsilon_{\perp} + \varepsilon_a \cos^2 \theta)^{-1} dz}. \quad (2.9)$$

Минимизируя свободную энергию (1.1), можно получить конфигурацию директора для различных по конструкции ячеек.

2.1.1 Емкость жидкокристаллической ячейки

Зная конфигурацию директора в объеме, несложно рассчитать емкость плоского конденсатора, которым является рассматриваемая ячейка. Пусть σ – поверхностная плотность заряда на положительной обкладке, тогда заряд на ней $q = \sigma S_{\perp}$. Напряженность поля внутри конденсатора $E_z(z) = 4\pi\sigma/\varepsilon_{zz}(z)$ (это справедливо, так как $\sqrt{S_{\perp}} \gg L$ и краевыми эффектами можно пренебречь). Для напряжения с учетом (1.6) и выражения для тензора диэлектрической проницаемости имеем:

$$U = 4\pi\sigma \int_0^L \frac{dz}{\varepsilon_{zz}} = \frac{4\pi q}{S_{\perp}} \int_0^L \frac{dz}{\varepsilon_{\perp} + \varepsilon_a \cos^2 \theta}. \quad (2.10)$$

В результате электрическая емкость конденсатора равна

$$C = \frac{q}{U} = \frac{S_{\perp}}{4\pi \int_0^L (\varepsilon_{\perp} + \varepsilon_a \cos^2 \theta)^{-1} dz}. \quad (2.11)$$

2.2 Конфигурация директора

Как правило конфигурацию вектора директора \mathbf{n} определяют, решая систему уравнений Эйлера-Лагранжа [3]. Сложности в решении уравнений Эйлера-Лагранжа возникают, если в системе имеется фазовый переход первого рода. В этом случае в уравнениях Эйлера-Лагранжа возникают точ-

ки бифуркаций. В нашей системе переход является непрерывным (второго рода), однако учет неоднородности электрического поля приводит к тому, что эти уравнения становятся интегро-дифференциальными. Поэтому вместо численного решения уравнений Эйлера-Лагранжа мы воспользуемся широко применяемым подходом, основанным на прямой минимизации функционала свободной энергии [35]. Обратим внимание, что решая уравнения Эйлера-Лагранжа, мы получаем экстремумы, и требуется дополнительный анализ для определения минимумов энергии, а в случае прямой минимизации этого не требуется.

Далее мы будем рассматривать два типа ячеек: 90° -твист ячейку с киральным ЖК с планарной ориентацией директора на поверхностях и ячейку с нематическим ЖК с гомеопланарной ориентацией. Выше приведены формулы для расчета свободной энергии кирального жидкого кристалла, заключенного между двумя проводящими плоскостями, на которые подается различное напряжение, но они также верны и для обычного нематического кристалла (необходимо в уравнениях (2.2), (2.5) положить $q_0 = 0$).

2.2.1 Планарная твист-ячейка

В планарной твист-ячейке при отсутствии внешних воздействий директор направлен параллельно поверхности подложки (\mathbf{n} перпендикулярен направлению оси z). Для ячейки, исследуемой в настоящей работе, сцепление на границе можно считать жестким. Это означает, что поверхностная энергия (1.7) велика по сравнению с объемной упругой энергией искажения жидкого кристалла (2.2) и вкладом от внешнего электрического поля (2.7). Заметим, что применяемый нами метод прямой минимизации позволяет учитывать конечную энергию сцепления с подложками. Влияние поверхностного сцепления с подложками на распределение директора изучено в работе [35]. Предложен-

ный в этой работе подход позволяет учитывать разные формы потенциала поверхностного сцепления.

В случае жесткого сцепления директор на границе строго совпадает с направлением оси легкого ориентирования $\mathbf{n}(z_j) = \mathbf{n}^{0(j)}$, $j = 1, 2$. Поскольку внутри твист-ячейки директор поворачивается на 90° , то шаг спирали равен $4L$.

Из первой вариации полной энергии

$$\delta F_{tot} = \frac{S_\perp}{2} \int_0^L \left(\frac{\partial \tilde{F}_e}{\partial \theta} \delta \theta + \frac{\partial \tilde{F}_e}{\partial \theta'} \delta \theta' + \frac{\partial \tilde{F}_e}{\partial \phi'} \delta \phi' + \frac{\partial \tilde{F}_f}{\partial \theta} \delta \theta \right) \quad (2.12)$$

после интегрирования по частям получаем уравнения Эйлера-Лагранжа

$$A'(\theta)(\theta')^2 + 2A(\theta)\theta'' = B(\theta)(\phi')^2 - 2C'(\theta)\phi' + \tilde{F}'_f(\theta), \quad (2.13)$$

$$\frac{d}{dz}(B(\theta)\phi' - C(\theta)) = 0. \quad (2.14)$$

Используя второе уравнение (2.14), получаем:

$$\phi' = \frac{C_1 + C(\theta)}{B(\theta)}, \quad (2.15)$$

где $C_1 = const$.

Интегрируя выражение (2.15), получим:

$$\phi_{tot} = C_1 I_1 + I_2, \quad (2.16)$$

где $I_1 = \int_0^L B^{-1}(\theta) dz$, $I_2 = \int_0^L C(\theta) B^{-1}(\theta) dz$, а $\phi_{tot} = \phi(L) - \phi(0)$. Свободная энергия Франка принимает вид:

$$F_e = \frac{VK_{22}q_0}{2} + \frac{S_\perp}{2} \int_0^L \left(A(\theta)(\theta')^2 - \frac{C^2(\theta)}{B(\theta)} \right) dz + \frac{S_\perp(\phi_{tot} - I_2)^2}{2I_1}. \quad (2.17)$$

Используя уравнение (2.15), равновесное распределение угла $\phi(z)$, выраженный через $\theta(z)$, имеет вид:

$$\phi(z) = -\frac{1}{2}\phi_{tot} + \int_0^z \frac{C(\theta)}{B(\theta)} dz + \frac{(\phi_{tot} - I_2)}{I_1} \int_0^z \frac{dz}{B(\theta)}. \quad (2.18)$$

Здесь граничные условия выбраны следующим образом: $\phi(0) = -\phi_{tot}/2$, $\phi(L) = \phi_{tot}/2$.

Для полной энергии, описывающей состояние кирального ЖК в ячейке с жестким сцеплением на подложках, получаем

$$F_{tot} = \frac{V}{2} K_{22} q_0^2 + \frac{S_{\perp}}{2} \int_0^L \left(A(\theta)(\theta')^2 - \frac{C^2(\theta)}{B(\theta)} + \tilde{F}_f(\theta) \right) dz + \frac{S_{\perp}}{2} \frac{(\phi_{tot} - I_2)^2}{I_1}. \quad (2.19)$$

Для нахождения минимума свободной энергии (2.19) мы разложим угол $\theta(z)$ в ряд Фурье. С учетом граничных условий разложение будет представлено в виде ряда по синусам:

$$\theta(z) = \frac{\pi}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \sin \frac{\pi z}{L} (2n - 1). \quad (2.20)$$

Задача минимизации состоит в поиске коэффициентов ряда a_n .

Для решения этой задачи была написана программа в Microsoft Office Excel. Возможности работы в Excel были 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 была необходима минимизация. Здесь можно было использовать встроенный пакет для поиска минимума функционала. В частности, для поиска конфигурации директора использовался метод сопряженных градиентов. При расчетах мы учитывали первые 40 членов ряда (2.20). Коэффициенты ряда a_n достаточно

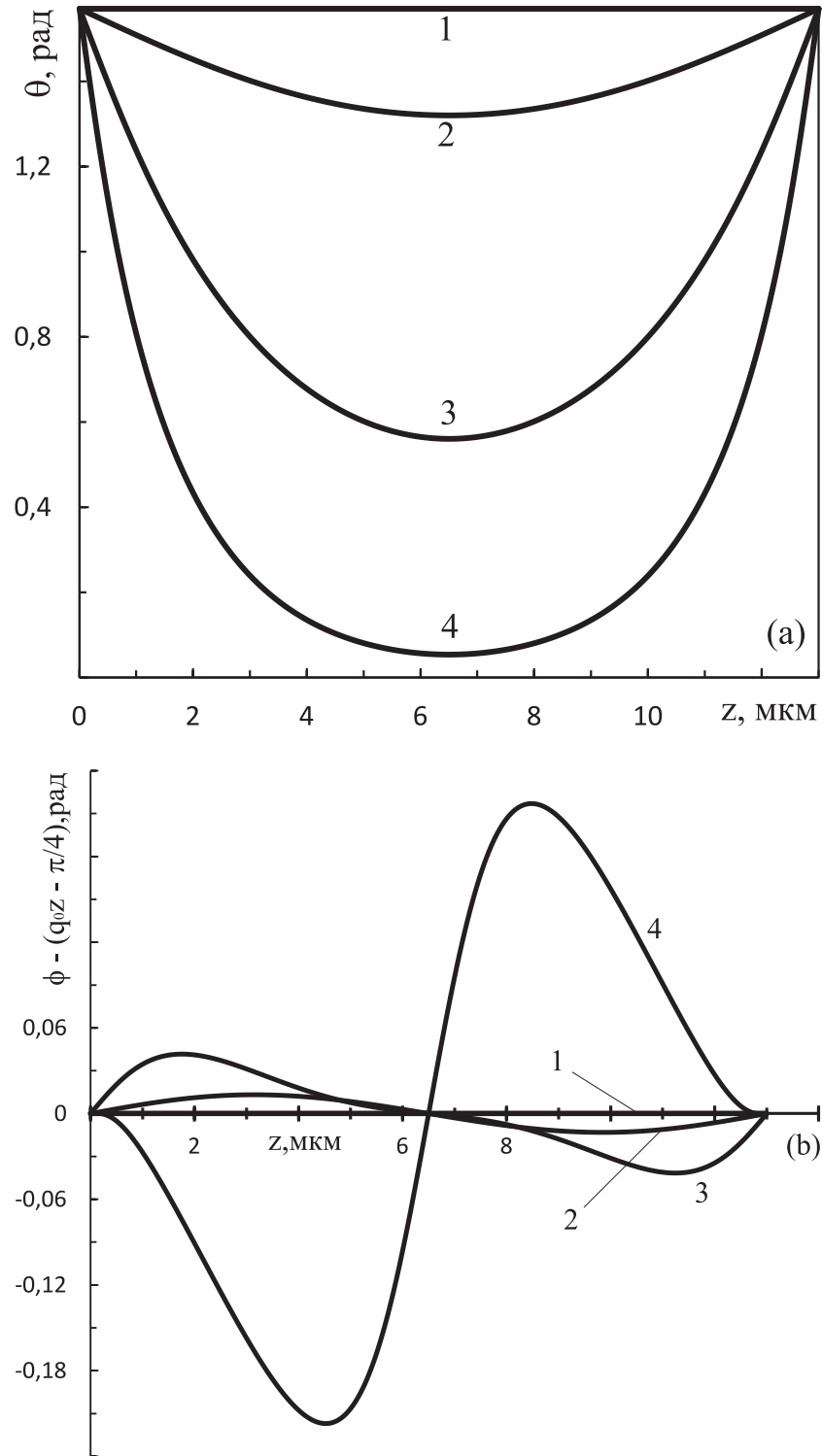


Рисунок 2.2: На рисунке представлены зависимости углов $\theta(z)$ и $\phi(z) - (q_0 z - \pi/4)$ для 90° твист-ячейки кирального ЖК с жесткой планарной ориентацией директора на границах: $\theta(0) = \theta(L) = \pi/2$, $\phi(0) = -\pi/4$, $\phi(L) = \pi/4$. Кривые построены для различных напряжений U : 1 – 1 В, 2 – 1.15 В, 3 – 1.6 В, 4 – 3 В. Толщина ячейки $L = 13$ мкм; площадь поверхности подложки $S_\perp = 11$ см²; 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, $K_{33} = 0.99K_{11}$.

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 большому количеству параметров. В программе используется метод минимизации, предложенный в [57].

На рисунке (Рис. 2.2) приведены профили углов $\theta(z)$ и $\phi(z)$ при различных величинах внешнего электрического поля. Значение напряжения $U = 1$ В не превышает пороговое значение U_c перехода Фредерикса и конфигурация директора совпадает с конфигурацией в отсутствие поля. При $U = 1.15$ В уже наблюдается отличие от недеформированного состояния. $U = 1.6$ В соответствует напряжению значительно выше порога Фредерикса. Ориентация директора существенно отличается от недеформированной. $U = 3$ В показывает сильную переориентацию, которая с дальнейшим увеличением поля заметно не меняется. При значениях напряжения больших 6 В предложенный метод расчета не позволял определить конфигурацию директора. Это связано с тем, что угол θ становится близким к нулю во всей ячейке (кроме границ) и возникает неопределенность в определении значения угла ϕ .

Используемая для расчетов ячейка кирального ЖК представляла собой ячейку, у которой на нижней грани $\phi(0) = -\pi/4$, а на верхней — $\phi(L) = \pi/4$. Значения азимутального угла ϕ на нижней и верхней гранях сами по себе не важны. Для данной задачи важна лишь полная закрутка директора ϕ_{tot} . Равновесному состоянию в отсутствие поля тогда отвечает значение $\phi = q_0 z - \pi/4$. Отклонение ϕ от этого значения невелико и для наглядности на рис. 2.2(b) построено именно отклонение.

2.2.2 Гомеопланарная ячейка НЖК

Направим ось z как и ранее, а ось x — вдоль большей стороны прямоугольника, образованного нижней поверхностью ячейки. В гомеопланарной ячейке мы будем считать, что на нижней грани ($z = 0$) директор ориентирован поверхностным веществом по нормали к ней. Это сцепление в общем случае является не жестким. На верхней грани ($z = L$) сцепление жесткое, директор лежит в плоскости поверхности и параллелен оси x .

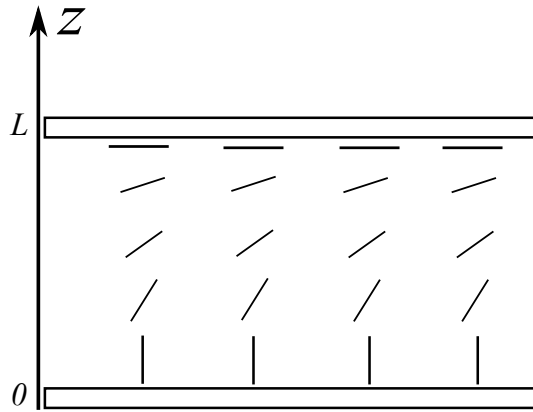


Рисунок 2.3: Жидкокристаллическая ячейка с гомеопланарной конфигурацией.

В рассматриваемом жидком кристалле не присутствует никаких киральных добавок, то есть будем считать, что постепенный переход конфигурации вектора директора из ориентации на нижней грани в ориентацию на верхней грани происходит в плоскостях параллельных xOz -плоскости. Для такой ячейки угол ϕ фиксирован ($\phi = 0$) и представление директора в сферических координатах принимает вид

$$\mathbf{n} = (\sin \theta(z), 0, \cos \theta(z)). \quad (2.21)$$

Для начала рассмотрим случай жесткого сцепления на обеих гранях, тогда для угла θ на границах строго выполняются равенства:

$$\theta(0) = 0, \quad \theta(L) = \frac{\pi}{2}. \quad (2.22)$$

Свободная энергия ЖК для этой системы в отсутствие внешнего поля переписывается следующим образом:

$$F_{tot} = \frac{S_{\perp}}{2} \int_0^L A(\theta)(\theta')^2 dz. \quad (2.23)$$

Соответствующее уравнение Эйлера-Лагранжа имеет вид

$$A'(\theta)(\theta')^2 + 2A(\theta)\theta'' = 0. \quad (2.24)$$

Домножая на $\theta' \neq 0$, можно выделить полную производную

$$\frac{d}{dz} (A(\theta)(\theta')^2) = \frac{d}{dz} (K_{11} \sin^2 \theta + K_{33} \cos^2 \theta) (\theta')^2 = 0. \quad (2.25)$$

Отсюда можно получить выражение для угла θ в следующем виде:

$$\int \sqrt{K_{11} \sin^2 \theta + K_{33} \cos^2 \theta} d\theta = C_1 z + C_2. \quad (2.26)$$

Константы C_1 и C_2 определяются из граничных условий (2.22):

$$C_2 = 0, \quad C_1 = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi/2} \sqrt{K_{11} \sin^2 \theta + K_{33} \cos^2 \theta} d\theta. \quad (2.27)$$

Выражение (2.26) представляет собой зависимость $z(\theta)$ и неудобно для определения конфигурации директора $\theta(z)$.

В случае одноконстантного приближения выражение (2.26) упрощается и позволяет определить зависимость $\theta(z)$ в явном виде. В этом приближении $K_{11} = K_{33} = \bar{K}$, учитывая граничные условия (2.22), для угла θ легко находится решение $\theta(z) = \pi z/2L$.

Далее будем считать, что на верхней поверхности сцепление остается жестким, а на нижней – нежесткое. Перепишем поверхностную энергию сцепления, используя аналог потенциала Рапини-Популара (1.10), выраженного че-

рез угол θ . Простейшее приближение в гауссовой форме для поверхностной энергии на нижней грани имеет вид:

$$w_1(\mathbf{n}(0), \mathbf{n}^{0(1)}) = W_\theta^{(1)}(\theta - \theta_0^{(1)})^2, \quad (2.28)$$

где $W_\theta^{(1)}$ – энергия сцепления; верхний индекс как и ранее показывает отношение этой константы к нижней грани ячейки, $\theta_0^{(1)}$ – задает направление оси легкого ориентирования на нижней поверхности, $\theta_0^{(1)} = 0$.

Заметим, что существуют различные представления для потенциала поверхностного сцепления. Кроме широко используемого представления Рапини-Популара, также применяется В-потенциал [55]. Эти потенциалы ведут себя по-разному при больших отклонениях от оси легкого ориентирования. В нашей же работе отклонение от вертикальной оси мало и с ростом внешнего поля лишь уменьшается. Тогда выбор вида потенциала в гауссовой форме Рапини-Популара или В-потенциала не играет важной роли. В случае использования В-потенциала значение электрической емкости будет отличаться от значения, рассчитанного с помощью потенциала Рапини-Популара, в пределах одного процента. Это отличие связано с незначительной разницей влияния вида потенциала на распределение директора вблизи поверхности.

При включении внешнего поля конфигурация директора изменяется и таким простым аналитическим способом её не найти. Для определения нового распределения вектора директора в зависимости от z -координаты, путем минимизации полной энергии ЖК во внешнем поле, использовался метод конечных разностей. Полная энергия для этой системы выражается следующим образом:

$$F_{tot} = \frac{S_\perp}{2} \int_0^L \left[A(\theta(z))(\theta'(z))^2 + \tilde{F}_f(\theta(z)) \right] dz + \frac{S_\perp}{2} W_\theta^{(1)} \theta^2(0). \quad (2.29)$$

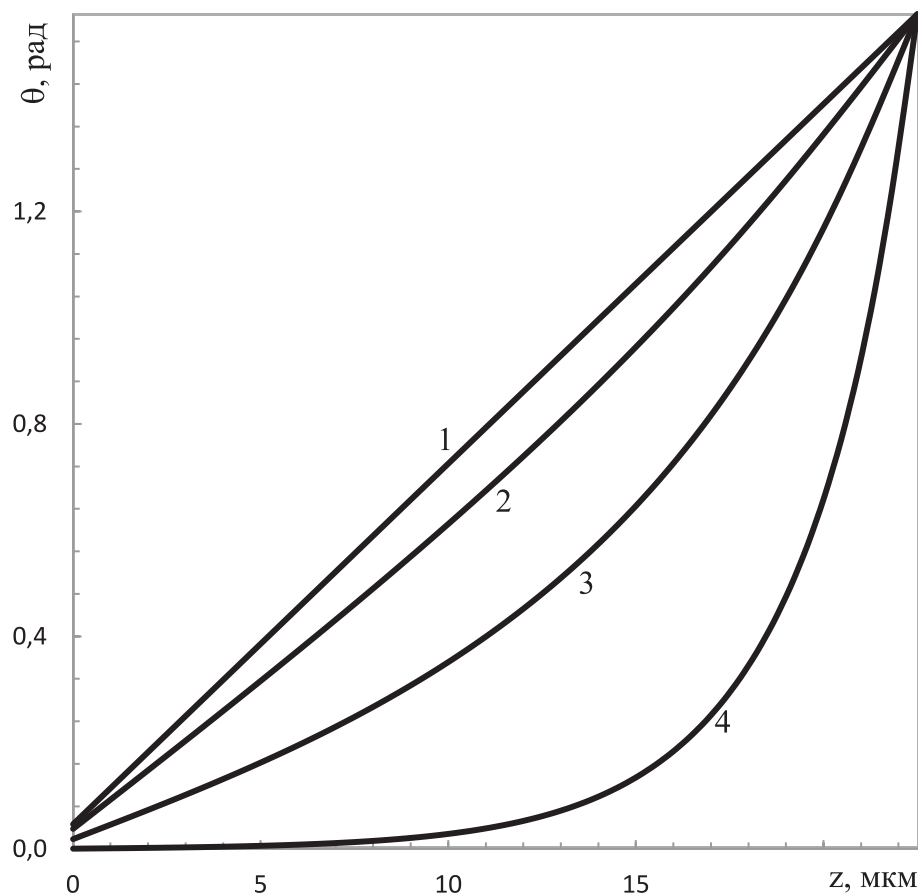


Рисунок 2.4: Зависимость угла $\theta(z)$ для ячейки НЖК с гомеопланарной ориентацией на границах. На нижней грани ячейки ($z = 0$) директор ориентирован по нормали к поверхности, сцепление считается нежестким, энергия сцепления $W_{\theta}^{(1)} = 1.6 \cdot 10^{-2}$ эрг/см². На верхней грани ($z = L$) ориентация директора планарная, сцепление считается жестким. Кривые построены для различных напряжений U : 1 – 0 В, 2 – 0.5 В, 3 – 1 В, 4 – 2.5 В. Толщина ячейки $L = 22.5$ мкм; диэлектрические проницаемости и значения модулей Франка такие же как на Рис. 2.2.

Строилась 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 θ_i . Для определения конфигурации директора, как и ранее, были написаны программы на языке С и в Excel, позволяющие проводить минимизацию свободной энергии по многим переменным. Результаты, полученные различными методами минимизации совпадают. Минимизация полной энергии проводилась методом сопряженных градиентов и методом, предложенным в работе [57], с $N = 50$.

Полученная зависимость $\theta(z)$ для различных по величине полей приведена на рисунке (Рис. 2.4). Заметим, что в отсутствие внешнего поля зависимость $\theta(z)$ практически линейная. Отклонение $\theta(0)$ от нулевого значения связано с наличием конечной энергии сцепления с поверхностью.

2.3 Результаты эксперимента

2.3.1 Конструкция ЖК ячеек

Для проведения экспериментов были изготовлены ячейки, состоящие из двух стеклянных пластин площадью 10.2 см^2 для гомеопланарной ячейки и 10.1 см^2 для планарной твист-ячейки с нанесенными на них прозрачными токопроводящими электродами. Для создания планарной ориентации ЖК на поверхность электродов наносилось полиимидное покрытие, которое затем натиралось хлопковой тканью. В этом случае сцепление ЖК с поверхностью можно считать жестким [58, 59]. В конце этого раздела мы приведем оценки для величины энергии сцепления. Гомеотропная ориентации создавалась с использованием раствора стеарилхлорида хрома в изопропиловом спирте. По литературным данным энергия сцепления ЖК с таким ориентантом составляет $W_\theta^{(1)} = 1.6 \cdot 10^{-2} \text{ эрг/см}^2$ [60].

Толщина слоя ЖК в ячейках задавалась с помощью тефлоновых спейсеров. Для твист-ячейки толщина слоя ЖК составляла 13.0 мкм. Ячейка заполнялась киральной жидкокристаллической смесью, состоящей из ЖК-1466 (НИОПИК) и активной добавки ВИХ-3 (Вильнюсский госуниверситет, Литва). Естественный шаг спирали смеси составлял $p_0 = 56$ мкм. При заданной толщине слоя директор жидкого кристалла совершал поворот на 90° при переходе от одной подложки к другой. Обратим внимание, что условия для изменения ориентации директора на такой угол не оптимальны, шаг спирали директора отличается от естественного шага спирали. Это приводит к тому, что в свободной энергии Франка (1.3) появляется дополнительное постоянное слагаемое, что никак не повлияет на результат минимизации энергии. Толщина слоя ЖК в гомеопланарной ячейке составляла 22.5 мкм. Модули упругости ЖК-1466 $K_{11} = 1.1 \cdot 10^{-6}$ дин, $K_{22} = 0.38 \cdot 10^{-6}$ дин, $K_{33} = 0.99K_{11}$.

Диэлектрические проницаемости жидкого кристалла ε_{\perp} и ε_{\parallel} были измерены отдельно в плоском титановом конденсаторе (расстояние между электродами 250 мкм) в диапазоне частот 500 Гц - 1 МГц с использованием измерителя полного импеданса Hioki 3532 при температуре 20°C . Необходимая макроскопическая однородная ориентация жидкого кристалла создавалась магнитным полем с напряженностью 5000 Э. Были получены значения $\varepsilon_{\perp} = 7.12$, $\varepsilon_{\parallel} = 19.41$ на частоте 1 кГц и $\varepsilon_{\perp} = 6.95$, $\varepsilon_{\parallel} = 19.23$ на ~ 10 кГц.

Эксперимент проводился на кафедре молекулярной биофизики и физики полимеров физического факультета СПбГУ, под руководством профессора А.П. Ковшика. Автором выполнялись лишь теоретические и численные расчеты.

2.3.2 Сравнение экспериментальной зависимости емкости от напряжения с численным расчетом

Экспериментальные ячейки представляют собой плоский конденсатор, заполненный слоем ЖК. Зависимость электрической емкости ячеек от напряжения была получена с помощью измерителя полного импеданса Hioki 3532 на частоте 1 кГц и 10 кГц.

При включении внешнего электрического поля происходит искажение ориентации директора. В следствие этого электрическое поле внутри ЖК становится неоднородным. Как показано в разд. 2.2.1, в случае планарной твист-ячейки ЖК для изменения конфигурации \mathbf{n} необходимо напряжение $U > U_c$, в случае же гомеопланарной ячейки НЖК это изменение происходит беспороговым образом.

Зная конфигурацию директора при различных значениях электрического напряжения, можно получить численно зависимость емкости ячеек от приложенного электрического напряжения. Распределение директора в объеме ячейки находилось с помощью прямой минимизации функционала свободной энергии. Для этого использовался метод конечных разностей: выполнялось разбиение на $N = 200$ слоев вдоль оси Oz , в каждом слое неизвестными считались углы θ_i и ϕ_i , $i = 1, \dots, N$. В процессе минимизации подбирались значения этих параметров. Определение значения емкости, которая представляла собой интегральную характеристику, проводилось по формуле Симпсона с помощью программы в Excel и программы на языке C (для контроля, получаемых результатов). Программы позволяли 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 было варьировать количество пара-

метров, по которым проводилась минимизация полной энергии при поиске конфигурации директора для заданного значения электрического напряжения. С увеличением этого количества заметно возрастало время минимизации.

Теоретические и экспериментальные зависимости электрической емкости ячеек от приложенного электрического напряжения приведены на Рис. 2.5, Рис. 2.6.

Для 90° твист-ячейки (Рис. 2.5) наблюдается хорошее совпадение расчетов и экспериментальных данных. Совпадают значения емкостей ниже порога Фредерикса, значение порога Фредерикса $U_c \approx 1.1$ В и зависимость емкости ячейки от напряжения выше порога Фредерикса. Заметим, что ниже порога Фредерикса выражение для емкости имеет простой вид:

$$C_0 = \frac{\varepsilon_{\perp} S_{\perp}}{4\pi L}. \quad (2.30)$$

Эта емкость на частоте поля 10 кГц в системе СИ равна $C_0 = 4.76 \cdot 10^{-9}$ Ф. Полученное значение согласуется с экспериментальными данными $C_0 = 4.7 \cdot 10^{-9}$ Ф (Рис. 2.5).

Для гомеопланарной ячейки видно хорошее совпадение экспериментальных данных и численных расчетов (Рис. 2.6). Заметим, что для этой ячейки переход Фредерикса носит беспороговый характер.

Предложенный метод расчета может быть также использован для определения одной из характеристик ЖК ячейки, такой как модуль Франка, диэлектрическая проницаемость, энергия сцепления с подложкой. Если один из этих параметров неизвестен, то, варьируя его в процессе прямой минимизации, можно добиться наилучшего совпадения результатов расчета с экспериментальными данными. Поскольку обычно модули Франка и диэлектриче-

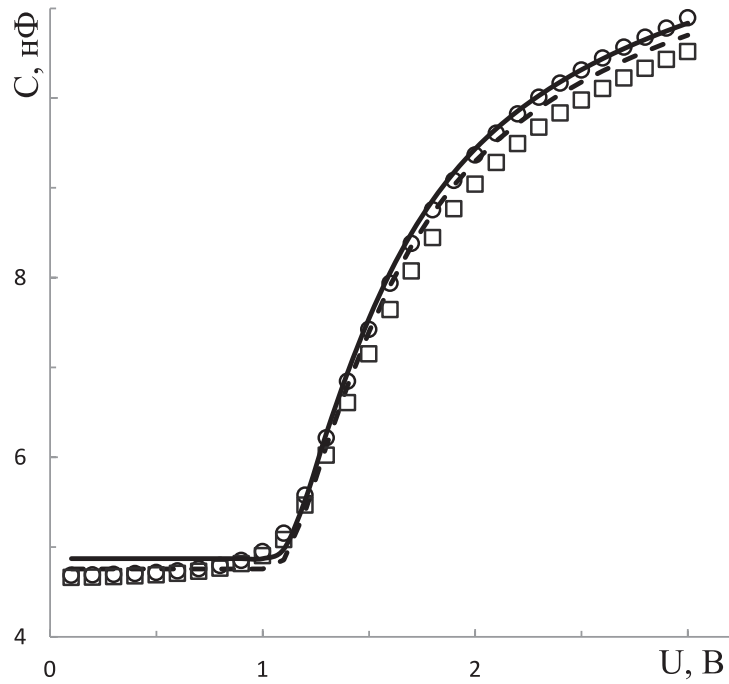


Рисунок 2.5: Зависимость электрической емкости 90° твист-ячейки кирального ЖК с жесткой планарной ориентацией от приложенного напряжения. \circ – экспериментальные данные на частоте измерений 1 кГц, \square – экспериментальные данные на частоте измерений 10 кГц. Сплошная линия – численный расчет емкости для 1 кГц, пунктирная линия – численный расчет емкости для 10 кГц. Площадь поверхности подложки $S_{\perp} = 10.1 \text{ см}^2$. Все остальные константы совпадают с используемыми для Рис. 2.2.

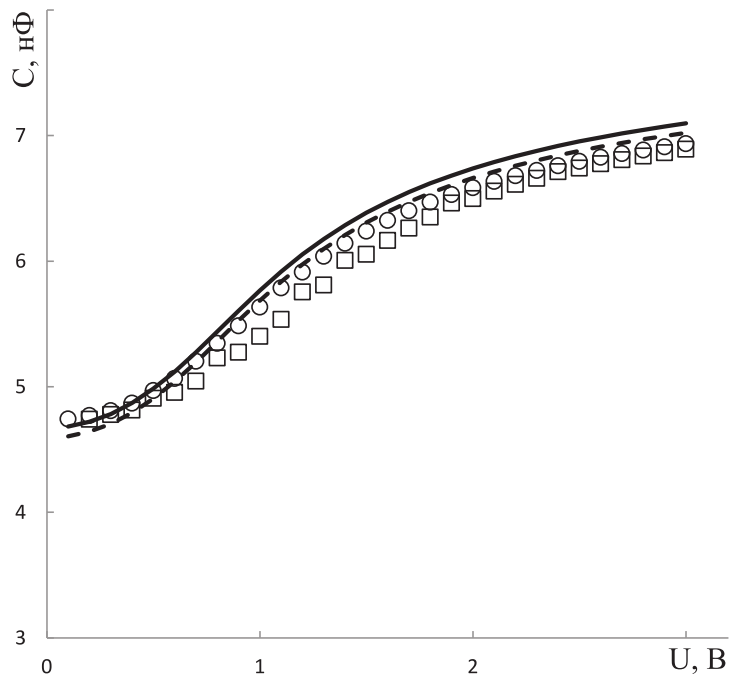


Рисунок 2.6: Зависимость электрической емкости гомеопланарной ячейки НЖК от приложенного напряжения. \circ – экспериментальные данные на частоте измерений 1 кГц, \square – экспериментальные данные на частоте измерений 10 кГц. Сплошная линия – численный расчет емкости для 1 кГц, пунктирная линия – численный расчет емкости для 10 кГц. Площадь поверхности подложки $S_{\perp} = 10.2 \text{ см}^2$. Все остальные константы совпадают с используемыми для Рис. 2.4.

ские проницаемости известны, то предложенный метод стоит применять для оценки энергии сцепления с подложкой.

В литературе можно найти разные значения для энергии сцепления в зависимости от типов полиимидов и жидких кристаллов [61, 62]. Сцепление с подложкой считается жестким при значениях энергии сцепления больше 10^{-2} эрг/см². Мы провели расчеты для различных значений энергии сцепления для планарной ориентации $W_{\theta}^{(2)}$ в гомеопланарной ячейке, используя гауссову форму для потенциала Рапини-Популара (1.10). В таблице 2.1 приведено относительное среднеквадратичное отклонение Δ результатов расчетов электрической емкости от результатов эксперимента для различных значений энергии сцепления.

Таблица 2.1: Относительное среднеквадратичное отклонение результатов расчетов электрической емкости от результатов эксперимента для различных значений энергии сцепления для планарной ориентации в гомеопланарной ячейке.

| | | | | | |
|--|-----------|-------------------|-----------|-------------------|----------|
| $W_{\theta}^{(2)}$, эрг/см ² | 10^{-2} | $5 \cdot 10^{-2}$ | 10^{-1} | $5 \cdot 10^{-1}$ | ∞ |
| Δ , % | 9.78 | 4.46 | 3.70 | 3.12 | 2.97 |

Из таблицы видно, что наилучшее совпадение с экспериментальными данными получено для жесткого сцепления. Таким образом, для планарной ориентации в рассматриваемых ячейках сцепление действительно можно считать жестким. Заметное отличие относительного среднеквадратичного отклонения наступает при величине сцепления менее $5 \cdot 10^{-2}$ эрг/см². Если величина энергии сцепления меньше этого значения, то при расчетах следует учитывать вклад энергии сцепления. Также в расчетах для выражения поверхностной энергии использовалось представление потенциала в виде В-потенциала, но это не дало принципиально других результатов.

2.4 Функционал свободной энергии от функции нескольких переменных

Для описания светочувствительных жидких кристаллов будем 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 и по оси Oy , $\mathbf{n}(\mathbf{r}) = \mathbf{n}(z, y)$ (Рис. 2.7). Будем предполагать, что вдоль оси Ox система остается однородной.

Представим директор, как и ранее в сферических координатах $\mathbf{n}(\mathbf{r}) = (\sin \theta(y, z) \cos \phi(y, z), \sin \theta(y, z) \sin \phi(y, z), \cos \theta(y, z))$. Далее в этом параграфе будем считать, что полярный и азимутальный углы являются функциями y и z , $\theta = \theta(y, z)$, $\phi = \phi(y, z)$.

Тогда функционал свободной энергии Франка принимает вид:

$$F_e = \frac{L_x}{2} \int_0^{L_y} \int_0^{L_z} \Psi^T(y, z) \hat{M}(y, z) \Psi(y, z) dz dy, \quad (2.31)$$

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

$$\Psi = \begin{pmatrix} \partial_y \theta \\ \partial_z \theta \\ \partial_y \phi \\ \partial_z \phi \\ q_0 \end{pmatrix}, \quad (2.32)$$

$$\partial_y = \frac{\partial}{\partial y}, \quad \partial_z = \frac{\partial}{\partial z}, \quad (2.33)$$

значок T – обозначает операцию транспонирования, \hat{M} – симметричная матрица 5×5 , с элементами:

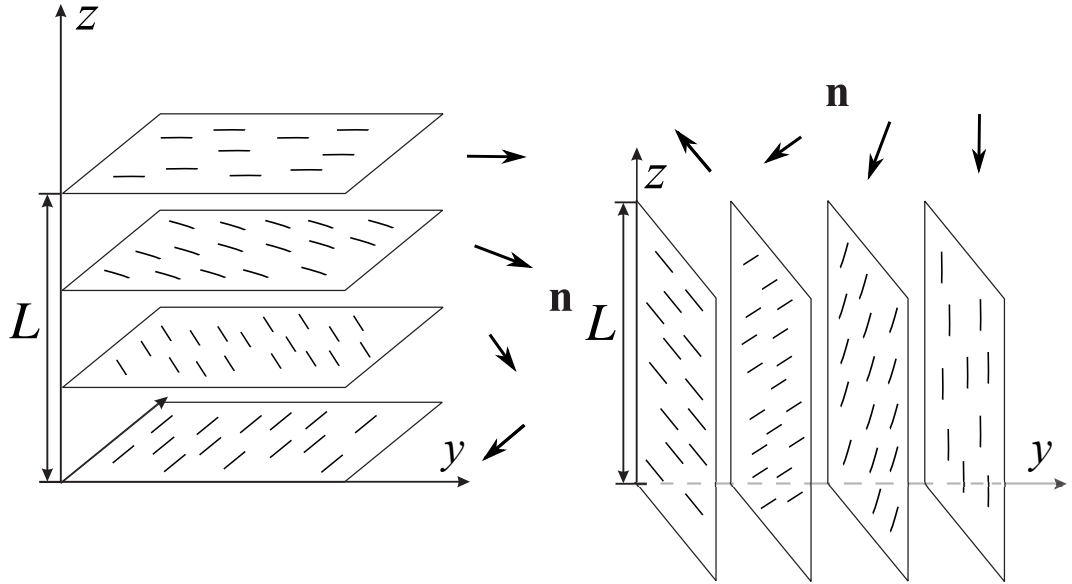


Рисунок 2.7: Изменение распределения директора в светочувствительном ЖК. Ось спирали изменяет свое направление. Ширина ячейки $L = L_z$.

$$M_{11} = K_{11} \cos^2 \theta \sin^2 \phi + K_{22} \cos^2 \phi + K_{33} \sin^2 \theta \sin^2 \phi,$$

$$M_{22} = K_{11} \sin^2 \theta + K_{33} \cos^2 \theta,$$

$$M_{33} = K_{11} \sin^2 \theta \cos^2 \phi + K_{22} \sin^2 \theta \cos^2 \theta \sin^2 \phi + K_{33} \sin^4 \theta \sin^2 \phi,$$

$$M_{44} = K_{22} \sin^4 \theta + K_{33} \sin^2 \theta \cos^2 \theta,$$

$$M_{55} = K_{22},$$

$$M_{12} = (K_{33} - K_{22}) \sin \theta \cos \theta \sin \phi,$$

$$M_{13} = (K_{11} - K_{22}) \sin \theta \cos \theta \sin \phi \cos \phi,$$

$$M_{14} = K_{22} \sin^2 \theta \cos \phi,$$

$$M_{15} = -K_{22} \cos \phi,$$

$$M_{23} = -K_{11} \sin^2 \theta \cos \phi,$$

$$M_{24} = M_{25} = 0,$$

$$M_{34} = (K_{33} - K_{22}) \sin^3 \theta \cos \theta \sin \phi,$$

$$M_{35} = K_{22} \sin \theta \cos \theta \sin \phi,$$

$$M_{45} = -K_{22} \sin^2 \theta.$$

Как и ранее можно построить сетку 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 θ_{ij} , ϕ_{ij} с помощью прямой минимизации свободной энергии (2.31) и использования метода конечных разностей. Была написана программа на языке C, позволяющая реализовать минимизацию свободной энергии Франка для кубической жидкокристаллической ячейки. Программа использует метод многомерной минимизации, предложенный в [57]. В ней также можно задавать различные параметры ячейки, такие как модули Франка, диэлектрические проницаемости и т.д. Вследствие отсутствия значений некоторых величин, определяемых из эксперимента [47], сравнение с экспериментом пока выполнить не удалось. Эта часть работы остается предметом дальнейших исследований.

Обратим внимание, q_0 является параметром, который влияет на равновесную конфигурацию директора. Экспериментально установлено, что жидкий кристалл, помимо изменения направления оси спирали, может изменять направление закрутки с левой на правую и наоборот [47], то есть величина q_0 может изменять знак при химическом изменении светочувствительной добавки под действием света определенной длины волны.

Для данной задачи этот метод сталкивается с рядом проблем. Во-первых, в случае неоднородности по двум направлениям количество величин, по которым необходимо проводить минимизацию, значительно возрастает (на несколько порядков). Во-вторых, для рассматриваемых ячеек, как правило, линейные размеры L_y и L_z отличаются минимум на три порядка.

Глава 3

Распространение света в жидкокристаллических ячейках

Распространение света будет рассматриваться в ЖК ячейках, описанных в предыдущей главе. Отметим, что главные значения тензора диэлектрической проницаемости $\hat{\varepsilon}$, определяющего оптические свойства среды, берутся на оптической частоте измерений. В дальнейшем будем считать среду немагнитной, т. е. тензор магнитной проницаемости $\mu_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta}$.

3.1 Распространение света в ячейках жидких кристаллов, приближение геометрической оптики

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:

$$\operatorname{div} \mathbf{D} = 0, \quad \operatorname{div} \mathbf{B} = 0, \quad (3.1)$$

$$\operatorname{rot} \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad \operatorname{rot} \mathbf{H} = \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}, \quad (3.2)$$

$$\mathbf{D} = \hat{\varepsilon} \mathbf{E}, \quad \mathbf{B} = \hat{\mu} \mathbf{H}. \quad (3.3)$$

Для поля монохроматической волны с величиной волнового вектора k_0 эти уравнения принимают вид

$$\operatorname{rot} \mathbf{E} = ik_0 \mathbf{H}(\mathbf{r}), \quad (3.4)$$

$$\operatorname{rot} \mathbf{H} = -ik_0 \hat{\varepsilon} \mathbf{E}(\mathbf{r}), \quad (3.5)$$

где $k_0 = \omega/c$, ω – круговая частота волны, c – скорость света в вакууме. Тогда для волнового уравнения относительно напряженности электрического поля имеем

$$(\operatorname{rot} \operatorname{rot} - k_0^2 \hat{\varepsilon}) \mathbf{E}(\mathbf{r}) = 0. \quad (3.6)$$

Так как система является однородной в плоскости xOy , то удобно использовать преобразование Фурье по ортогональным оси Oz координатам $f(\mathbf{k}_\perp, z) = \int d\mathbf{r}_\perp f(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{k}_\perp \cdot \mathbf{r}_\perp)$, $\mathbf{r}_\perp = (x, y)$, \mathbf{k}_\perp – составляющая волнового вектора, поперечная оси Oz , двумерный вектор. Без ограничения общности далее будем считать, что волновой вектор лежит в плоскости xOz , то есть вектор \mathbf{k}_\perp сонаправлен с осью Ox . Отметим также, что, вследствие однородности системы во всех плоскостях $z = \text{const}$, по закону Снеллиуса для поперечной составляющей волнового вектора получаем:

$$k_\perp = k_0 n_g \sin \delta, \quad (3.7)$$

где n_g – коэффициент преломления стекла, δ – угол падения на границу раздела стекло-ЖК.

Для уравнения (3.6) получаем

$$\left(\hat{D} + k_0^2 \hat{\varepsilon} \right) \mathbf{E}(\mathbf{k}_\perp, z) = 0, \quad (3.8)$$

$$\hat{D} = \begin{pmatrix} \partial_z^2 & 0 & -ik_{\perp}\partial_z \\ 0 & \partial_z^2 - k_{\perp}^2 & 0 \\ -ik_{\perp}\partial_z & 0 & k_{\perp}^2 \end{pmatrix}, \quad \partial_z = \frac{\partial}{\partial z}, \quad (3.9)$$

$$\hat{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{\perp}^{opt} + \varepsilon_a^{opt} \sin^2 \theta \cos^2 \phi & \varepsilon_a^{opt} \sin^2 \theta \sin \phi \cos \phi & \varepsilon_a^{opt} \sin \theta \cos \theta \cos \phi \\ \varepsilon_a^{opt} \sin^2 \theta \sin \phi \cos \phi & \varepsilon_{\perp}^{opt} + \varepsilon_a^{opt} \sin^2 \theta \sin^2 \phi & \varepsilon_a^{opt} \sin \theta \cos \theta \sin \phi \\ \varepsilon_a^{opt} \sin \theta \cos \theta \cos \phi & \varepsilon_a^{opt} \sin \theta \cos \theta \sin \phi & \varepsilon_{\perp}^{opt} + \varepsilon_a^{opt} \cos^2 \theta \end{pmatrix}, \quad (3.10)$$

где $\varepsilon_{\perp}^{opt}, \varepsilon_{\parallel}^{opt}$ – диэлектрические проницаемости поперек и вдоль директора соответственно, взятые на оптической частоте, $\varepsilon_a^{opt} = \varepsilon_{\parallel}^{opt} - \varepsilon_{\perp}^{opt}$. Здесь и далее полярный и азимутальный углы являются функциями координаты z , $\theta = \theta(z)$ и $\phi = \phi(z)$. Как и в предыдущей главе, они определяют конфигурацию директора, направление которого совпадает с направлением оптической оси.

Нас будут интересовать решения волнового уравнения (3.8). Рассмотрим случай, когда волна падает на плоскость $z = 0$. Будем считать, что в системе присутствует большой параметр Ω . Для геликоидальной среды таким параметром служит отношение шага спирали к длине световой волны $\Omega = p_0/\lambda$, в общем случае предполагается, что характерный масштаб изменения директора ($\sim \left| \frac{d\mathbf{n}}{dz} \right|^{-1}$) велик по сравнению с длиной волны. Можно решать волновое уравнение с помощью метода ВКБ [63]. В рамках этого метода ограничимся учетом двух первых порядков по большому параметру Ω . Тогда поле световой волны может быть записано в виде [64]:

$$\mathbf{E}_{\pm}^{(j)}(\mathbf{r}) = A_{\pm}^{(j)}(\mathbf{k}_{\perp}; z, z_0) \mathbf{e}_{\pm}^{(j)}(\mathbf{k}_{\perp}, z) \exp \left(i\mathbf{k}_{\perp} \cdot \mathbf{r}_{\perp} + i \int_{z_0}^z k_{z\pm}^{(j)}(\mathbf{k}_{\perp}, z') dz' \right), \quad (3.11)$$

где (j) – тип волны ((o) – обыкновенная или (e) – необыкновенная), $A_{\pm}^{(j)}$ – амплитуды волн, $z_0 = 0$, $\mathbf{e}_{\pm}^{(j)}$ – векторы 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.

Подставим поле световой волны (3.11) в волновое уравнение (3.8). Тогда для существования нетривиального решения $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ необходимо обращение в ноль определителя матрицы, получаемой при $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ с учетом большого параметра Ω . Это условие приводит к уравнению четвертого порядка для волнового вектора \mathbf{k} , называемому уравнением Френеля.

В общем случае уравнение Френеля дает поверхность четвертого порядка и определяет четыре решения для собственных волн, распространяющихся в данной среде. Для одноосной среды уравнение Френеля разделяется на два уравнения второго порядка, решения которых можно записать следующим образом [64]:

$$k_{z\pm}^{(o)} = \pm \sqrt{k_0^2 \varepsilon_\perp^{opt} - k_\perp^2}, \quad (3.12)$$

$$k_{z\pm}^{(e)} = \frac{k_0}{\varepsilon_\perp^{opt} + \varepsilon_a^{opt} \cos^2 \theta} \left(-\frac{k_\perp}{k_0} \varepsilon_a^{opt} \sin \theta \cos \theta \cos \phi \pm \varepsilon_\perp^{opt} \sqrt{D(k_\perp, \theta, \phi)} \right), \quad (3.13)$$

где

$$D(k_\perp, \theta, \phi) = \varepsilon_\parallel^{opt} \left(1 - \frac{k_\perp^2}{k_0^2 \varepsilon_\perp} + \frac{\varepsilon_a^{opt}}{\varepsilon_\perp^{opt}} \cos^2 \theta \right) + \frac{k_\perp^2 \varepsilon_a^{opt}}{k_0^2 \varepsilon_\perp^{opt}} \sin^2 \theta \sin^2 \phi, \quad (3.14)$$

$k_0 = 2\pi/\lambda$. Знаки $+$, $-$ – показывают направление распространения волн в сторону возрастания и убывания координаты z соответственно.

Для поляризаций обыкновенного и необыкновенного луча справедливы следующие соотношения [65]:

$$\mathbf{e}^{(o)} \perp \mathbf{n}, \quad \mathbf{e}^{(o)} \perp \mathbf{k}, \quad (3.15)$$

$$\hat{\varepsilon} \mathbf{e}^{(e)} \perp \mathbf{k}, \quad (3.16)$$

и вектор $\mathbf{e}^{(e)}$ лежит в плоскости, образованной векторами \mathbf{n} и \mathbf{k} . Учитывая вид тензора диэлектрической проницаемости (3.10), получаем для векторов поляризации обыкновенной и необыкновенной волн

$$\mathbf{e}^{(o)} \parallel \mathbf{k} \times \mathbf{n} \quad (3.17)$$

$$\hat{\varepsilon}\mathbf{e}^{(e)} \parallel \mathbf{n}(\mathbf{k}\hat{\varepsilon}\mathbf{k}) - \mathbf{k}(\mathbf{k}\hat{\varepsilon}\mathbf{n}). \quad (3.18)$$

Обратим внимание, что здесь направление оптической оси изменяется в зависимости от координаты z , а у волнового вектора остается постоянной лишь поперечная составляющая.

Выражения (3.12), (3.13) описывают четыре возможных решения волнового уравнения и позволяют построить поверхности волновых векторов.

Для обыкновенного луча поверхность волновых векторов представляет собой сферу:

$$k_z^2 + k_\perp^2 = \varepsilon_\perp^{opt} k_0^2, \quad (3.19)$$

В случае $n_g \sin \delta < \sqrt{\varepsilon_\perp^{opt}}$ обыкновенный луч прямолинейно распространяется в среде и его волновой вектор не зависит от z , в противном случае обыкновенный луч испытает полное внутреннее отражение на границе стекло-ЖК.

Поверхность волновых векторов для необыкновенной волны является эллипсоидом:

$$\begin{aligned} & \frac{k_z^2 (\varepsilon_\parallel^{opt} \cos^2 \theta + \varepsilon_\perp^{opt} \sin^2 \theta)}{k_0^2 \varepsilon_\parallel^{opt} \varepsilon_\perp^{opt}} + \\ & + \frac{k_\perp^2 (\varepsilon_a^{opt})^2 \sin^2 \theta \cos^2 \theta \cos^2 \phi + \varepsilon_\perp^{opt} \varepsilon_\parallel^{opt} - \varepsilon_\perp^{opt} \varepsilon_a^{opt} \sin^2 \theta \sin^2 \phi}{k_0^2 \varepsilon_\perp^{opt} \varepsilon_\parallel^{opt} (\varepsilon_\parallel^{opt} \cos^2 \theta + \varepsilon_\perp^{opt} \sin^2 \theta)} + \\ & + 2 \frac{k_z k_\perp \varepsilon_a^{opt} \sin \theta \cos \theta \sin \phi}{k_0^2 \varepsilon_\parallel^{opt} \varepsilon_\perp^{opt}} = 1 \quad (3.20) \end{aligned}$$

Сечение поверхности волновых векторов плоскостью xOz приведено на Рис. 3.1. Оптическая ось OO' задается полярным $\theta(z)$ и азимутальным $\phi(z)$ углами. По мере продвижения вдоль оси Oz это сечение изменяется. Если величина угла падения δ такова, что в рассматриваемой плоскости $z = const$ $k_{\perp} = k_{\perp 1} < k_{\perp 2}$, то волна распространяется в среде и в данной точке величина волнового вектора равна \mathbf{k}_1^+ или \mathbf{k}_1^- . Случай, когда $k_{\perp} = k_{\perp 2}$, получается вырождением решений (3.13). Для данного значения координаты z и угла δ это значит, что в этой точке среды происходит частичное внутреннее отражение и координата z называется точкой поворота. Если же оказывается, что $k_{\perp} = k_{\perp 3} > k_{\perp 2}$, то в данной точке луч находится в запрещенной зоне и уже распространяется с экспоненциальным затуханием.

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 внутреннее отражение волны. Волна, отражаясь от некоторого слоя внутри среды, начинает распространяться в обратном направлении относительно оси z . В анизотропной среде волновой вектор не будет располагаться по касательной к траектории луча. Эту роль выполняет лучевой вектор, направление которого определяется вектором Пойнтинга. В точке $z = z^*$ z -компонента вектора Пойнтинга обращается в ноль, что также согласуется с изменением направления распространения луча в среде.

В теории дифференциальных уравнений точки, в которых $D(\mathbf{k}_{\perp}, \theta(z^*), \phi(z^*)) = 0$, называются точками поворота. Построение поля

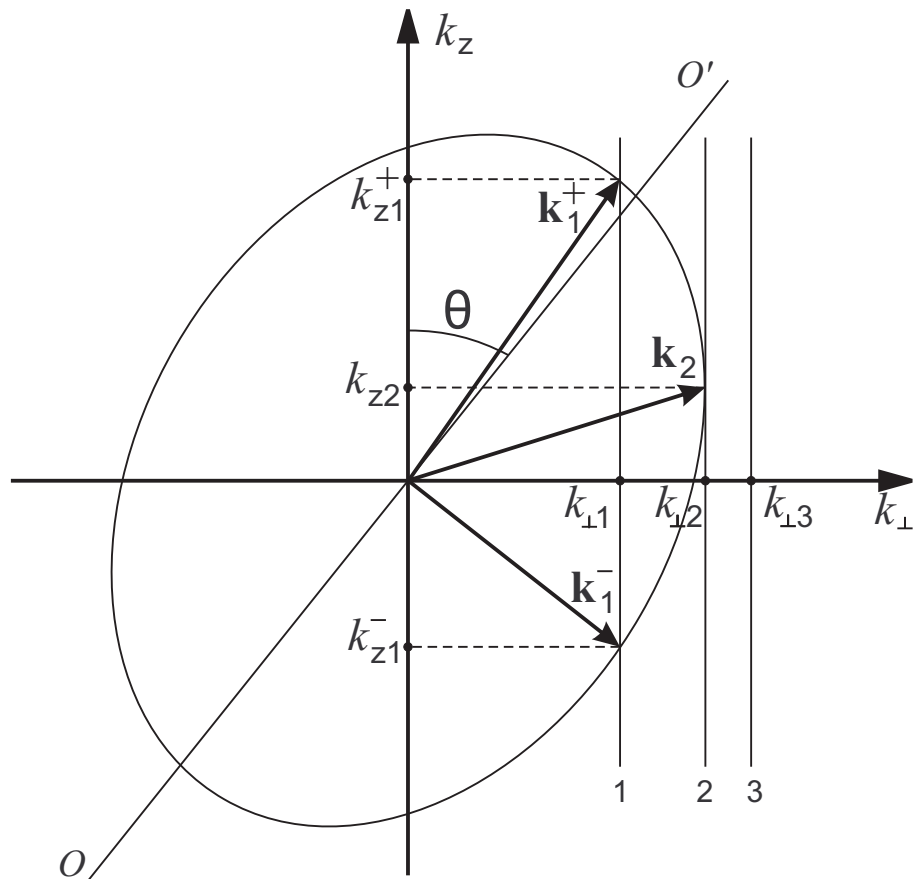


Рисунок 3.1: Сечение поверхности волновых векторов необыкновенной волны при некотором значении z плоскостью xOz . OO' – оптическая ось. В зависимости от величины угла падения на раздел сред стекло-ЖК δ для каждого значения координаты z можно определить будет ли в этой точке луч продолжать распространяться в среде (1), окажется ли он в точке поворота и частично отразится от некоторого слоя внутри жидкого кристалла (2) или же в этой точке луч уже распространяется с экспоненциальным затуханием в запрещенной зоне.

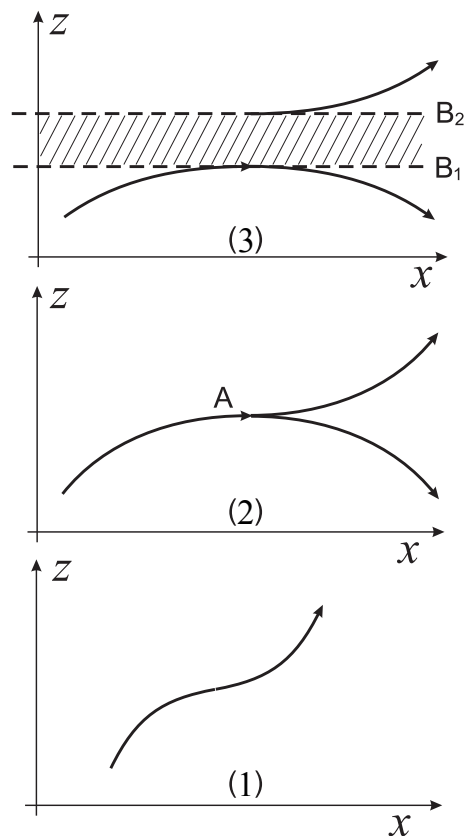


Рисунок 3.2: Иллюстрация возможных ситуаций, возникающих при распространении необыкновенного луча в киральном жидком кристалле при различных значениях угла падения δ на границу раздела стекло-ЖК. (1) – луч проходит через ячейку, (2) – в некоторой точке среды луч частично отражается, и начинает распространяться в обратную сторону, (3) – частичное внутреннее отражение луча и распространение с экспоненциальным затуханием через запрещенную зону B_1B_2

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.

Качественная картина распространения необыкновенного луча в жидкокристаллической ячейке приведена на Рис. 3.2. В зависимости от распределения директора внутри ячейки и угла падения световой волны δ возможны три варианта. Первый случай: луч проходит через ячейку (Рис. 3.2 (1)). Множество точек поворота, определяемых уравнением $D(\mathbf{k}_\perp, \theta, \phi) = 0$ не пересекается с кривой $\phi(\theta)$, задающей конфигурацию директора. Вторым случаем (Рис. 3.2 (2)) соответствует запрещенной зоне с нулевой шириной: в некоторой точке среды луч частично отражается, и начинает распространяться в обратную сторону. Здесь множество точек поворота касается кривой $\phi(\theta)$. При пересечении же этих двух множеств в среде будут присутствовать одна или более точек поворота. На Рис. 3.2 (3) показан случай двух точек поворота и наличие запрещенной зоны B_1B_2 . В точках поворота $z = B_1$ и $z = B_2$ будет происходить частичное внутреннее отражение луча и его дальнейшее распространение через ячейку с экспоненциальным затуханием через запрещенную зону B_1B_2 .

3.2 Влияние экстинкции

При распространении необыкновенного луча в ячейке ХЖК 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 ко-

эффицентом экстинкции σ :

$$I(L) = I(0) \exp \left(- \int_0^L \sigma(l) dl \right), \quad (3.21)$$

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

Элемент длины траектории можно записать в виде

$$dl = dz \sqrt{1 + \left(\frac{d\mathbf{r}_\perp}{dz} \right)^2}. \quad (3.22)$$

Касательная в каждой точке траектории луча параллельна вектору Пойнтинга \mathbf{S} :

$$\frac{d\mathbf{r}_\perp(z)}{dz} = \frac{\mathbf{S}_\perp(z)}{S_z(z)}. \quad (3.23)$$

Рассматриваемый нами ХЖК представляет собой локально одноосную среду. Для таких сред выполняется $\mathbf{S} \perp \mathbf{E}$, $\mathbf{k} \perp \mathbf{D} = \hat{\varepsilon}\mathbf{E}$. Тогда скалярное произведение векторов $\mathbf{k}\hat{\varepsilon}\mathbf{E} = 0$. Учитывая симметричность тензора диэлектрической проницаемости $\hat{\varepsilon}$ получаем, что $\mathbf{E}\hat{\varepsilon}\mathbf{k} = 0$. Для обыкновенного луча вектор поляризации $\mathbf{e}^{(o)}$ ортогонален волновому вектору $\mathbf{k}^{(o)}$. В этом случае вектор Пойнтинга будет сонаправлен с волновым вектором и не будет зависеть от координаты z , что соответствует прямолинейному распространению световой волны через ЖК-ячейку. Для необыкновенного луча картина усложняется. Так как векторы $\mathbf{S}^{(e)}$ и $\hat{\varepsilon}\mathbf{k}^{(e)}$ являются линейными комбинациями векторов \mathbf{n} и $\mathbf{k}^{(e)}$, то направление вектора Пойнтинга для необыкновенной волны связано с направлением волнового вектора следующим образом $\mathbf{S}^{(e)} \parallel \hat{\varepsilon}\mathbf{k}^{(e)}$, тогда получаем

$$\frac{\mathbf{S}_\perp^{(e)}(z)}{S_z^{(e)}(z)} = \frac{(\hat{\varepsilon}(z)\mathbf{k}_\perp^{(e)}(z))_\perp}{(\hat{\varepsilon}(z)\mathbf{k}_\perp^{(e)}(z))_z}, \quad (3.24)$$

$$\frac{d\mathbf{r}_\perp(z)}{dz} = \frac{\mathbf{n}_\perp(z)\varepsilon_a^{opt}k_\perp(\sin\theta\cos\phi + \cos\theta) + \mathbf{k}_\perp\varepsilon_\perp^{opt}}{k_\perp\varepsilon_a^{opt}\sin\theta\cos\theta\cos\phi + k_z^{(e)}\varepsilon_\perp^{opt}}. \quad (3.25)$$

Из последнего выражения, интегрированием можно получить траекторию луча в явном виде. Выражения (3.22), (3.25) и полученный в Приложении А коэффициент экстинкции позволяют рассчитывать потери света на рассеяние (3.21).

3.3 Эксперимент

Экспериментальная ячейка для исследования рефракции в ХЖК состояла из двух стеклянных трапецеидальных призм PR1 и PR2 с размером оснований 50 мм × 25 мм и высотой 18 мм (Рис. 3.3). Наклон боковых скошенных граней к основаниям составлял 68°. Показатель преломления стекла призм n_g равнялся 1.712 для длины волны $\lambda = 632.8$ нм. На основаниях призм находились прозрачные токопроводящие покрытия (электроды) и тонкие слои полиимида. Натиранием последних создавалась планарная ориентация жидкого кристалла, обеспечивающая жесткое сцепление ЖК с поверхностью. При этом директор ЖК на границе слоя, на которую падал луч света, направлен перпендикулярно плоскости рисунка (Рис. 3.3). На второй границе слоя директор лежит в плоскости рисунка. Необходимая толщина слоя ЖК равная 8 мкм задавалась с помощью тефлоновых спейсеров. Пространство между призмами было заполнено киральной жидкокристаллической смесью с шагом спирали 32 мкм, состоящей из ЖК-1466 (НИОПИК) и активной добавки ВИХ-3 (Вильнюсский госуниверситет, Литва). Модули Франка для ЖК-1466: $K_{11} = 1.1 \cdot 10^{-6}$ дин, $K_{22} = 0.38 \cdot 10^{-6}$ дин, $K_{33} = 0.99K_{11}$. Диэлектрическая анизотропия ε_a ЖК-1466 в диапазоне частот 500Гц -10кГц равна 12.3, диэлектрическая проницаемость поперек директора $\varepsilon_\perp = 6.95$. Главные значения тензора диэлектрической проницаемости $\varepsilon_\parallel^{opt}$ и ε_\perp^{opt} для длины вол-

ны $\lambda = 632.8$ нм равны 2.86 и 2.28 соответственно. При заданной толщине слоя и шаге спирали директор совершал поворот на 90° при переходе от одной границы слоя к другой.

Блок-схема экспериментальной установки представлена на Рис. 3.4 (вид сверху). Луч света от гелий-неонового лазера с длиной волны $\lambda = 632.8$ нм и диаметром пучка 1 мм направлялся на исследуемую ячейку с жидким кристаллом через полуволновую пластинку $\lambda/2$. С помощью полуволновой пластинки вектор поляризации падающего луча устанавливался параллельно направлению директора ЖК на границе раздела стекло – жидкий кристалл. Далее свет попадал на фотоприемник Ph, сигнал с которого регистрировался цифровым осциллографом Osc (АСК-3106) и компьютером. Управляющее электрическое переменное напряжение прямоугольной формы от генератора Актаком АНР-3122 через коммутатор подавалось на электроды ячейки и на осциллограф. Коммутатор формировал импульсы длительностью от 0.1 до 5 секунд. С целью изменения угла падения светового пучка на слой жидкого кристалла ячейка закреплялась на вращающемся столике с угловым отсчетным устройством с точностью отсчета 1 минута.

Пороговое напряжение U_{th} пропускания света через ячейку определялось с использованием зависимости интенсивности прошедшего света I от приложенного напряжения U . Пороговым напряжением мы считали такое напряжение, при котором интенсивность прошедшего света становилась больше или равна 10% от величины падающей интенсивности. Результаты эксперимента приведены на Рис. 3.9 и Рис. 3.11 в следующем разделе вместе с численными расчетами.

Эксперимент проводился на кафедре молекулярной биофизики и физики полимеров физического факультета СПбГУ, под руководством профессора

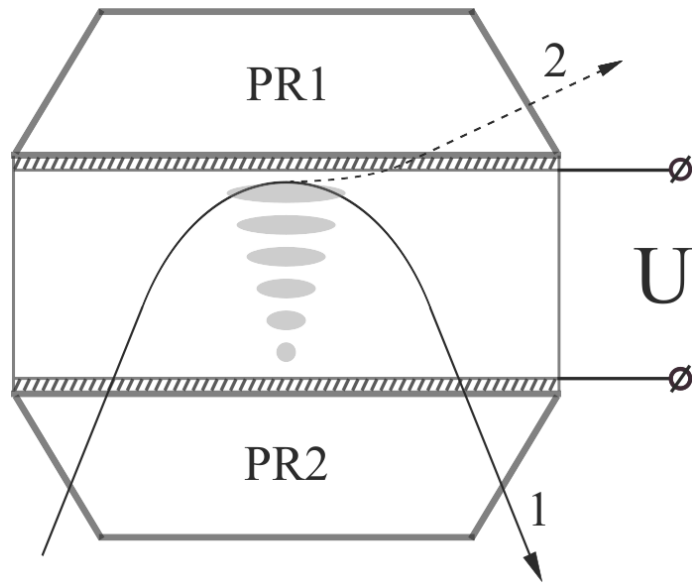


Рисунок 3.3: Жидкокристаллическая ячейка состоит из двух стеклянных трапециевидальных призм PR1 и PR2, на основания которых нанесены тонкие слои полиимида и прозрачные токопроводящие покрытия. На нижней грани ЖК-ячейки директор ориентирован перпендикулярно плоскости рисунка, на верхней грани – директор лежит в плоскости рисунка. 1 – схематически показан ход необыкновенного луча в отсутствие электрического поля, 2 – при некотором значении напряжения U необыкновенный луч начинает проходить сквозь ячейку.

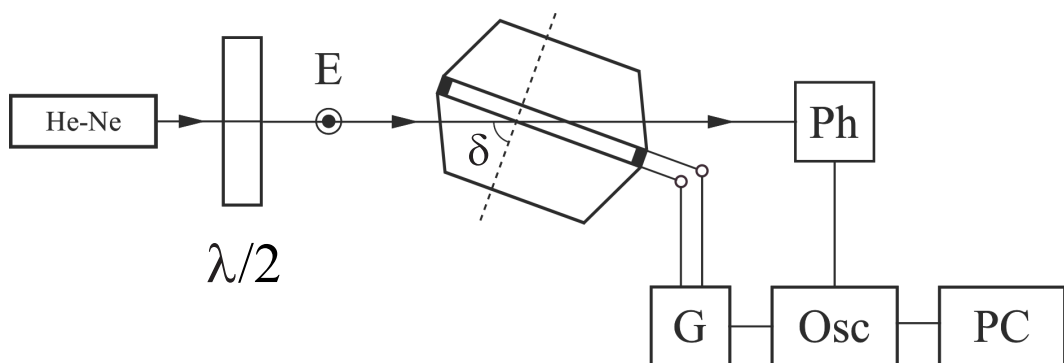


Рисунок 3.4: Схема экспериментальной установки: *He – Ne* – гелий-неоновый лазер, $\lambda/2$ – полуволновая пластинка, *Ph* – фотоприемник, *G* – генератор, *Osc* – осциллограф, *PC* – компьютер.

А.П. Ковшика. Автором выполнялись теоретические и численные расчеты, а также разработка программ, необходимых для выполнения расчетов.

3.4 Результаты расчетов и сравнение с экспериментом

3.4.1 Глубина проникновения необыкновенного луча в слой жидкого кристалла

Рассмотрим сначала глубину проникновения необыкновенного луча в слой ЖК в отсутствие внешнего электрического поля. В этом случае можно аналитически получить выражения для глубины проникновения в планарной твист-ячейке ХЖК и в гомеопланарной ячейке НЖК.

Рассмотрим сначала ячейку с геликоидальной структурой. Введем декартову систему координат так, чтобы $\mathbf{k} = (k_{\perp}, 0, k_z(z))$. Зависимость директора в свою очередь будет иметь вид $\mathbf{n} = (\cos(q_0z + \phi_0), \sin(q_0z + \phi_0), 0)$, где $\phi_0 = \pi/2$, $q_0L = \phi_{tot}$.

Тогда угол ψ между волновым вектором и директором определяется соотношением:

$$\cos \psi = \frac{k_{\perp} \cos(q_0z + \phi_0)}{|\mathbf{k}|}. \quad (3.26)$$

В отсутствие внешнего поля для планарной твист-ячейки в точке поворота z_* компонента k_z волнового вектора равна нулю.

Закон Снеллиуса для z_* необыкновенного луча $n^{(e)}(z_*) = n_g \sin \delta$, где δ – угол падения света на ЖК на нижней границе ячейки, n_g – коэффициент преломления стекла. Используя последнее, легко получить соотношение для глубины проникновения:

$$\cos(2q_0z_* + 2\phi_0) = \frac{2\varepsilon_{\perp}^{opt} \varepsilon_{\parallel}^{opt} - (\varepsilon_{\perp}^{opt} + \varepsilon_{\parallel}^{opt})n_g^2 \sin^2 \delta}{\varepsilon_a^{opt} n_g^2 \sin^2 \delta}. \quad (3.27)$$

Для рассматриваемой ячейки получаем

$$z_* = L - \frac{L}{\pi} \arccos \left(\frac{2\varepsilon_{\perp}^{opt} \varepsilon_{\parallel}^{opt} - (\varepsilon_{\perp}^{opt} + \varepsilon_{\parallel}^{opt}) n_g^2 \sin^2 \delta}{\varepsilon_a^{opt} n_g^2 \sin^2 \delta} \right). \quad (3.28)$$

В случае гомеопланарной ячейки даже для нулевого значения внешнего поля в точке поворота луча z -компонента волнового вектора будет отлична от нуля. Положение точки поворота в зависимости от угла падения δ будет определяться условием $D(\mathbf{k}_{\perp}, \theta(z^*), \phi(z^*)) = 0$, с учетом фиксированного азимутального угла $\phi(z^*) = 0$.

Глубина проникновения для гомеопланарной ячейки в отсутствие поля с учетом равенства $K_{11} = K_{33}$ принимает вид:

$$z_* = \frac{2L}{\pi} \arccos \sqrt{\frac{n_g^2 \sin^2 \delta - \varepsilon_{\perp}^{opt}}{\varepsilon_a^{opt}}}. \quad (3.29)$$

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 ϕ 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 будем принимать середину этого слоя. Как и ранее, использовались программы, написанные на языке С и в Excel, дополненные функциями, позволяющими получить электрооптические характеристики.

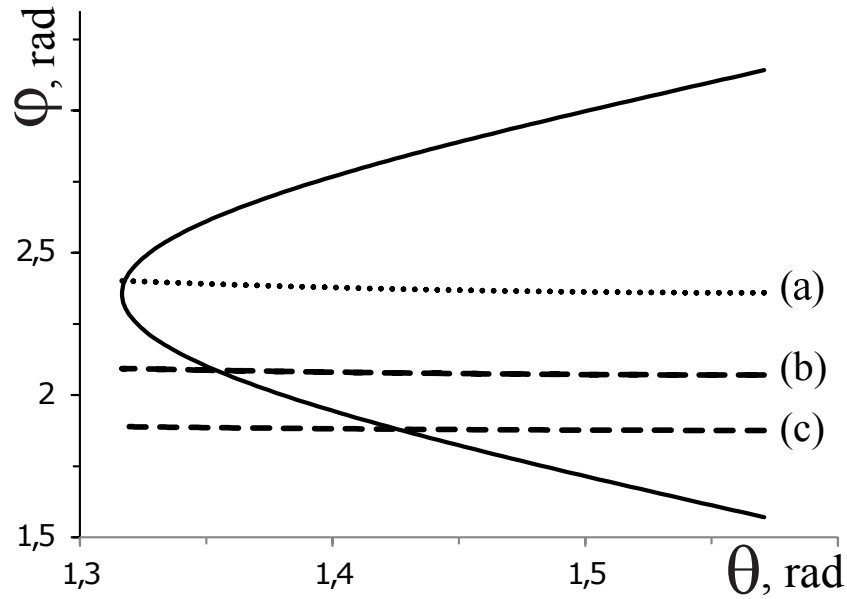


Рисунок 3.5: Сплошная линия представляет зависимость азимутального угла ϕ от полярного угла θ при напряжении $U = 1.15\text{В}$ в планарной ячейке ХЖК. Прерывистыми линиями изображено множество точек поворота при различных углах падения δ : (a) – $\delta = 68,5^\circ$, (b) – $\delta = 74^\circ$, (c) – $\delta = 78^\circ$

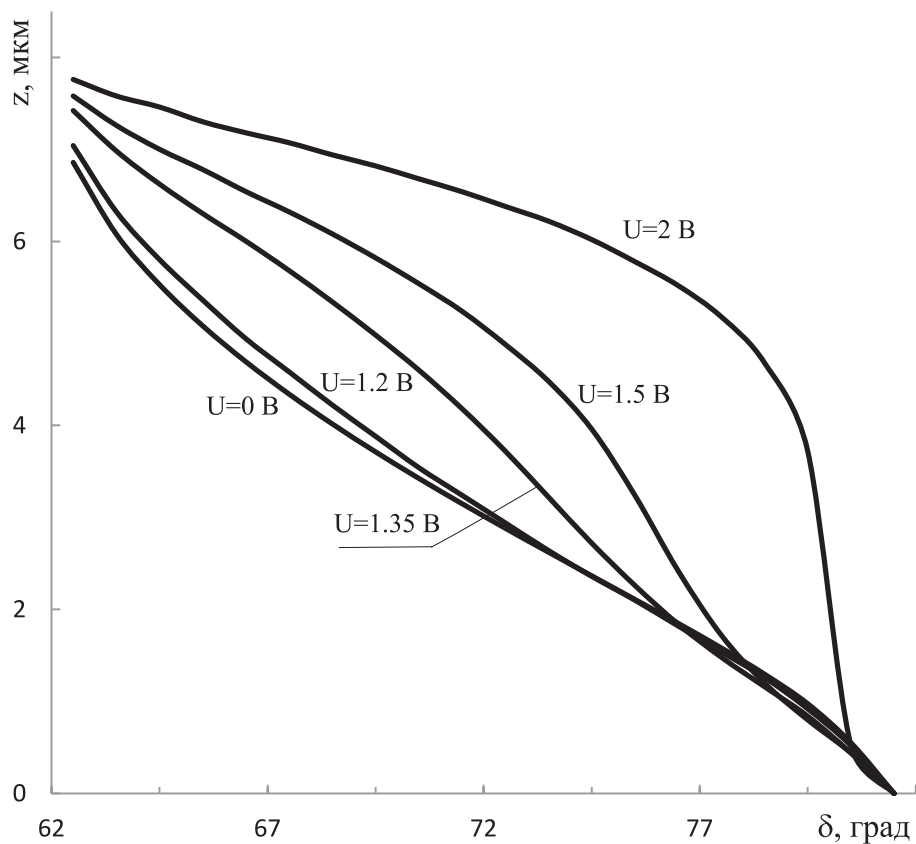


Рисунок 3.6: Зависимость глубины проникновения необыкновенного луча в планарной ячейке ХЖК от угла падения света на слой ЖК при различных значениях электрического напряжения.

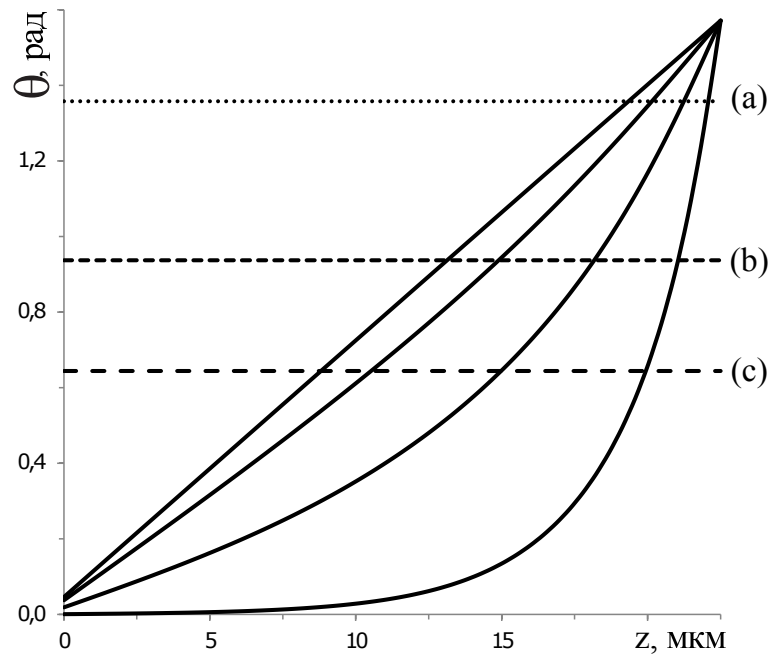


Рисунок 3.7: Сплошная линия представляет зависимость полярного угла $\theta(z)$ в гомеопланарной ячейке НЖК для различных значений напряжения (см. Рис. 2.4). Прерывистыми линиями изображено множество точек поворота при различных углах падения δ : (а) – $\delta = 62,5^\circ$, (b) – $\delta = 67^\circ$, (c) – $\delta = 72^\circ$.

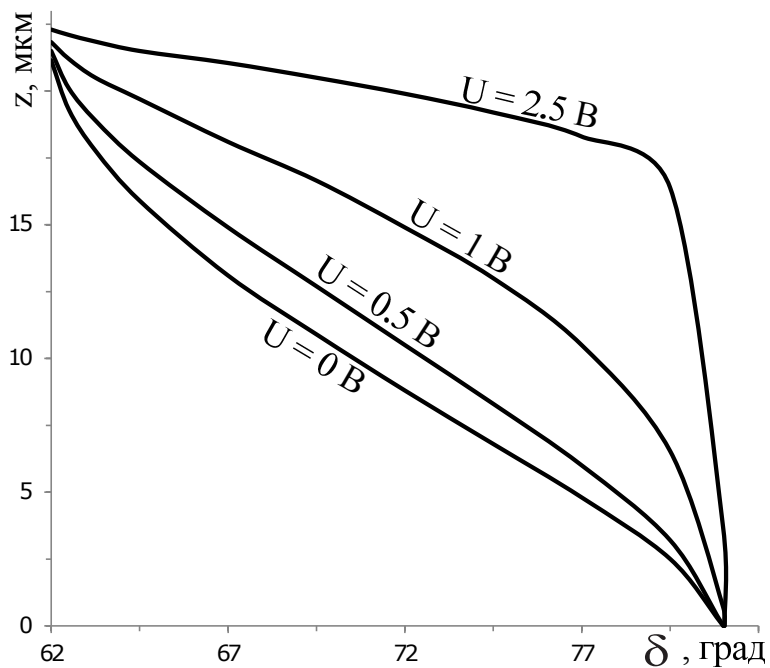


Рисунок 3.8: Зависимость глубины проникновения необыкновенного луча в гомеопланарной ячейке НЖК от угла падения света на слой ЖК при различных значениях электрического напряжения.

На Рис. 3.5 приведены множества точек поворота для планарной твист-ячейки при различных углах падения луча δ (они показаны прерывистыми линиями) и зависимость $\phi(\theta)$ (сплошная линия) при определенном значении электрического напряжения выше порога Фредерикса, $U = 1.15$ В. Последняя кривая задает конфигурацию директора, $\phi(\theta)$ в данном случае не является функцией и задается параметрически. В планарной 90° твист-ячейке из-за жесткого сцепления на верхней грани всегда будет присутствовать одна точка поворота, после которой волновой вектор будет приобретать мнимую добавку, и дальнейшее распространение луча вдоль оси Oz будет сопровождаться экспоненциальным затуханием. С увеличением значения внешнего электрического поля можно добиться того, чтобы точка поворота оказывалась достаточно близко к верхней грани ячейки, но запрещенная зона всё равно не будет обладать нулевой шириной.

В случае гомеопланарной ячейки с жестким сцеплением на верхней грани так же, как и для планарной твист-ячейки, при всех возможных углах падения δ будет существовать одна точка поворота внутри слоя ЖК и ненулевая запрещенная зона от точки поворота до верхней границы ячейки (границы с планарной ориентацией директора). На Рис. 3.7 сплошными линиями показаны зависимости $\theta(z)$ для различных напряжений (см. Рис. 2.4). Горизонтальные прерывистые линии – множество точек поворота при различных углах падения δ световой волны на границу раздела ЖК-стекло с гомеотропной ориентацией директора: (a) – $\delta = 62,5^\circ$, (b) – $\delta = 67^\circ$, (c) – $\delta = 72^\circ$.

На Рис. 3.6 и Рис. 3.8 приведены глубины проникновения в зависимости от угла падения света на ЖК при различных напряжениях для планарной и гомеопланарной ячеек соответственно. Из рисунков видно, что при увеличении угла падения глубина проникновения уменьшается, а также при фиксированном угле падения глубина проникновения увеличивается с ростом напряже-

ния. При больших углах падения глубина проникновения слабо зависит от напряжения. Также для гомеопланарной ячейки наблюдаются участки линейного убывания функции $z(\delta)$.

3.4.2 Зависимость минимального напряжения пропускания от предельного угла рефракции

Для планарной 90° ячейки ХЖК экспериментально была получена зависимость минимального напряжения пропускания от предельного угла рефракции. То есть от наибольшего угла падения света на границу стекло – жидкий кристалл, при котором свет еще проходит сквозь ячейку. Далее мы рассчитаем эту зависимость.

Положение точки поворота зависит от $k_\perp = k_0 n_g \sin \delta$. Диапазон значений δ , при которых существуют точки поворота определяется следующим условием:

$$\frac{\sqrt{\varepsilon_\perp}}{n_g} \leq \sin \delta \leq \frac{\sqrt{\varepsilon_\parallel}}{n_g}. \quad (3.30)$$

Подбирая величину δ , можно добиться того, чтобы поворот луча наступал достаточно близко к верхней границе ячейки. Для диапазона углов (3.30) в рассматриваемой геометрии ячейки ориентация директора на верхней границе обеспечивает поворот необыкновенного луча внутри объема. Строго говоря, в окрестности точек поворота геометрическая оптика неприменима, поскольку в окрестности этих точек оптические свойства среды сильно меняются на расстояниях порядка длины волны. В этих окрестностях возможна трансформация мод. Следствием трансформации мод является, например, эффект просачивания. Этот эффект становится заметным, если точка поворота находится на расстоянии $\leq \lambda$ от верхней границы ячейки. В этом случае из-за эффекта просачивания интенсивность прошедшего света отлична от нуля. Если же точка поворота расположена на расстоянии большем, чем λ от верхней

границы, то эффект просачивания практически не проявляется. Таким образом, если точка поворота находится на расстоянии $\propto \lambda$ от верхней границы ячейки при фиксированных U и δ , то мы будем считать, что эти напряжение и угол представляют собой минимальное напряжение пропускания для данного угла падения, при которых волна не проходит сквозь ячейку. При больших напряжениях или меньших углах волна будет проходить сквозь ячейку.

Расчет минимального напряжения пропускания от предельного угла рефракции выполнялся следующим образом. Сначала для фиксированного U путем минимизации свободной энергии (1.1) определялось распределение дивергента в объеме ячейки, то есть наборы значений $\theta(z_i)$ и $\phi(z_i)$, $i = 0, 1, \dots, N$. Полученные значения подставлялись в выражение (3.14). Туда же подставлялись значения угла падения δ из диапазона (3.30). Из семейства уравнений для точек поворота $D(\mathbf{k}_\perp, \theta(z_i), \phi(z_i)) = 0$ определялось такое δ , при котором точка поворота находится на расстоянии $\propto \lambda$ от верхней границы ячейки. Этот угол δ и является предельным углом рефракции. Для расчетов использовались программы, написанные на языке C и в Excel.

На Рис. 3.9 показаны зависимости минимального напряжения пропускания от угла падения, полученные экспериментально и в результате численных расчетов. Пунктирная линия получена при условии, что точка поворота расположена на расстоянии равном длине волны от верхней границы ячейки. Наилучшее совпадение с экспериментальными данными дает расчет, при котором точка поворота располагается на расстоянии 1.2λ от верхней границы. Результаты этого расчета приведены на рисунке сплошной линией. Из графика видно, что с ростом угла падения растет минимальное напряжение пропускания. Такое поведение вызвано тем, что при больших углах падения глубина проникновения становится малой, и, как видно из предыдущего рисунка, необходимо приложить большее напряжение, чтобы луч начал про-

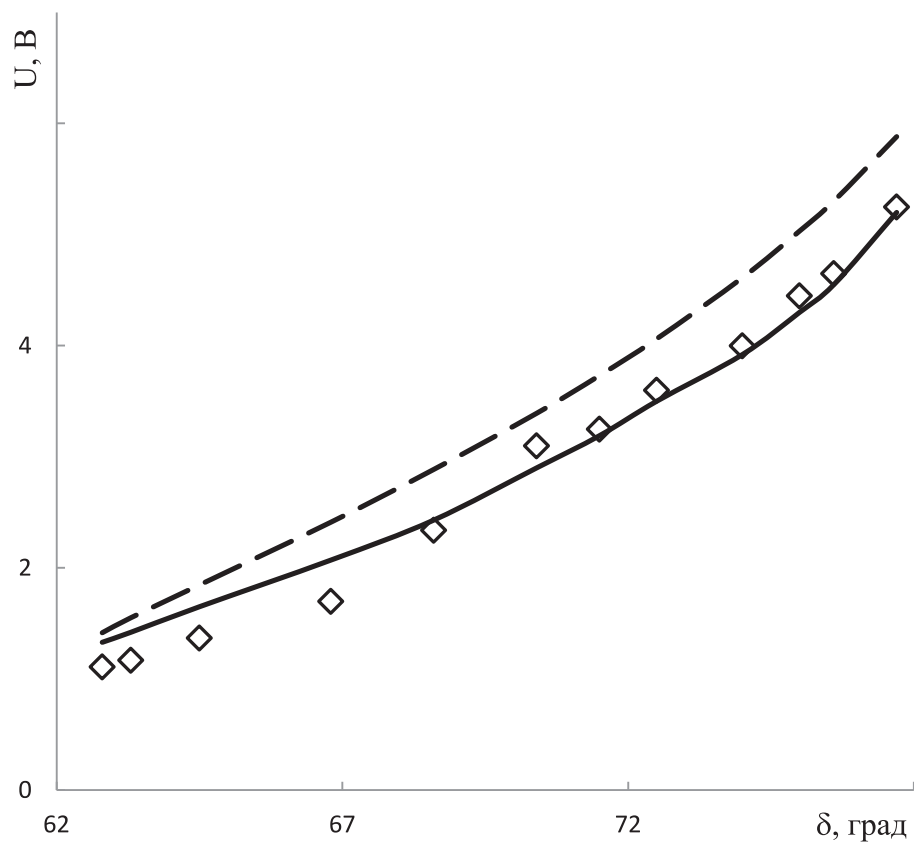


Рисунок 3.9: Зависимость минимального напряжения пропускания от угла падения света на слой ЖК для планарной 90° ячейки ХЖК. \diamond – экспериментальные данные.

Пунктирная линия – численный расчет, для которого полагалось, что эффект просачивания происходит на расстоянии равном длине волны. Сплошная линия – численный расчет, для которого полагалось, что эффект просачивания происходит на расстоянии в 1.2 раза большем длины волны.

ходить через ячейку. Подобная по характеру зависимость наблюдалась и для ЖК-ячейки с поворотом директора на 180° , изучавшейся в работе [64].

3.4.3 Интенсивность света прошедшего сквозь ячейку

Наличие точек поворота сказывается на интенсивности света прошедшего сквозь ячейку. Если точки поворота отсутствуют, то интенсивность прошедшего света может быть получена с помощью выражения:

$$I(L) = I(0) \exp \left(- \int_0^L \sigma(z) \sqrt{1 + \left(\frac{d\mathbf{r}_\perp}{dz} \right)^2} dz \right), \quad (3.31)$$

где выражение для $\sigma(z)$ приведено в Приложении А и имеет вид (П.1). Зависимость экстинкции от z проявляется в том, что угол между директором и волновым вектором изменяется по мере продвижения в объеме ЖК вдоль оси Oz .

Отдельно для данного жидкого кристалла строилась угловая зависимость величины экстинкции σ от угла θ^* между падающим волновым вектором и директором в данной точке среды. Эта зависимость, полученная с помощью выражения (П.20), приведена на Рис. 3.10.

Интеграл (3.31) можно вычислить по формуле Симпсона, используя наборы θ_i и ϕ_i , $i = 0, 1, \dots, N$, полученные в результате минимизации энергии (1.1). Эти наборы подставляются в выражения для экстинкции (П.1) и касательной в каждой точке к траектории луча (3.25). При наличии точек поворота, расположенных на расстоянии меньшем длины волны от верхней границы ячейки, в выражении для интенсивности (3.31) интегрирование следует проводить до точки поворота $z = z_*$

$$I_* = I(0) \exp \left(- \int_0^{z_*} \sigma(z) \sqrt{1 + \left(\frac{d\mathbf{r}_\perp}{dz} \right)^2} dz \right). \quad (3.32)$$

Также можно оценить коэффициент затухания, связанный с появлением мнимой части в z -компоненте волнового вектора при $z > z_*$:

$$A = \exp \left(-2 \int_{z_*}^L \operatorname{Im} k_z(z) dz \right). \quad (3.33)$$

На Рис. 3.11 (a) приведены зависимости интенсивности прошедшего света от напряжения при фиксированном угле падения, полученные экспериментально и численно. При увеличении напряжения с 1.1 В до 2 В интенсивность прошедшего света линейно возрастает. Интенсивности нормированы на максимальное значение интенсивности пропускания. Из рисунка видно, что экспериментальные данные и результаты численных расчетов хорошо совпадают. Для сравнения на Рис 3.11 (b) также приведены результаты численных расчетов, нормированные на значение интенсивности падающего света. Численные расчеты также дают линейный рост интенсивности (сплошные линии на Рис 3.11 (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.

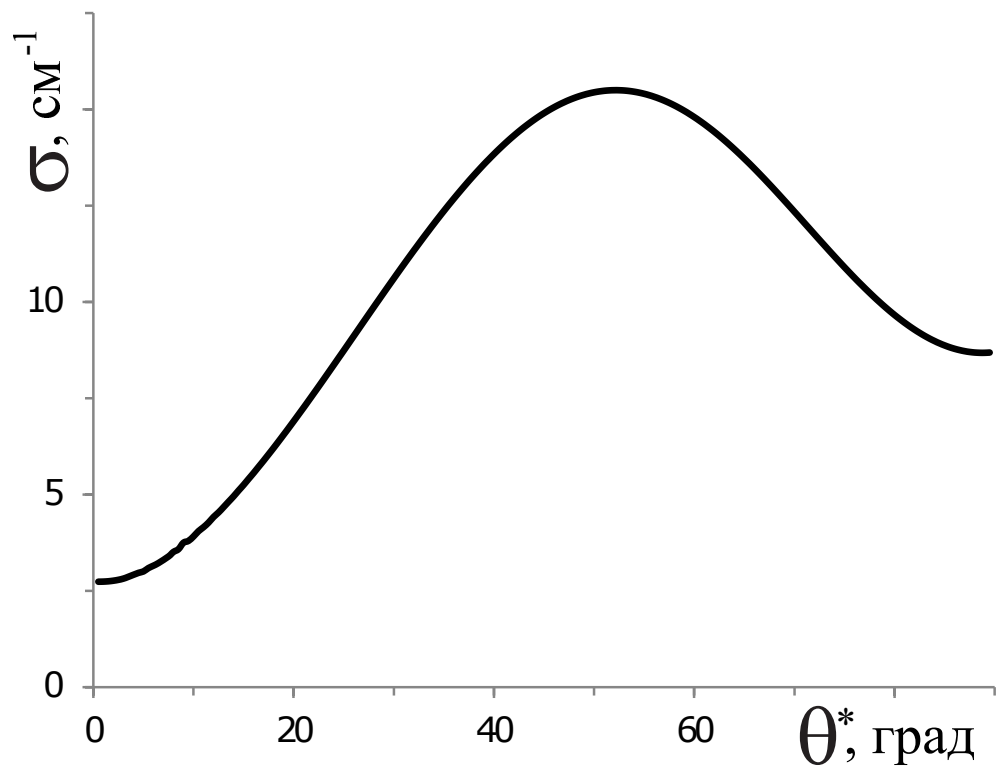


Рисунок 3.10: Угловая зависимость коэффициента экстинкции необыкновенного луча в ЖК-1466.

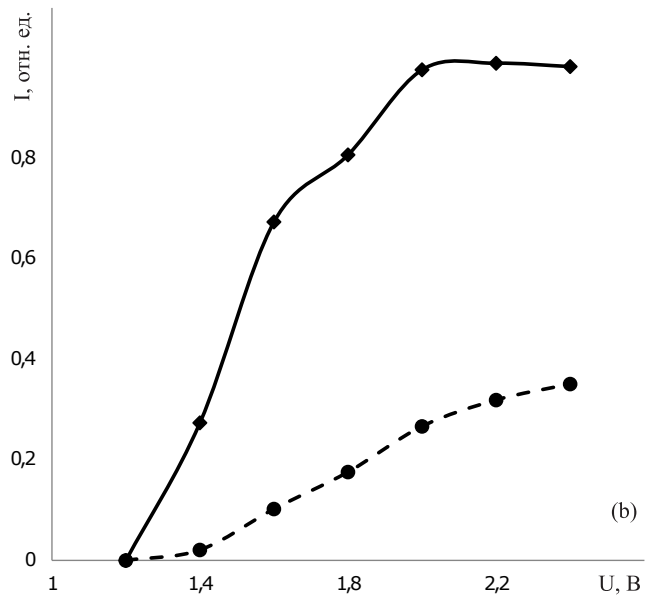
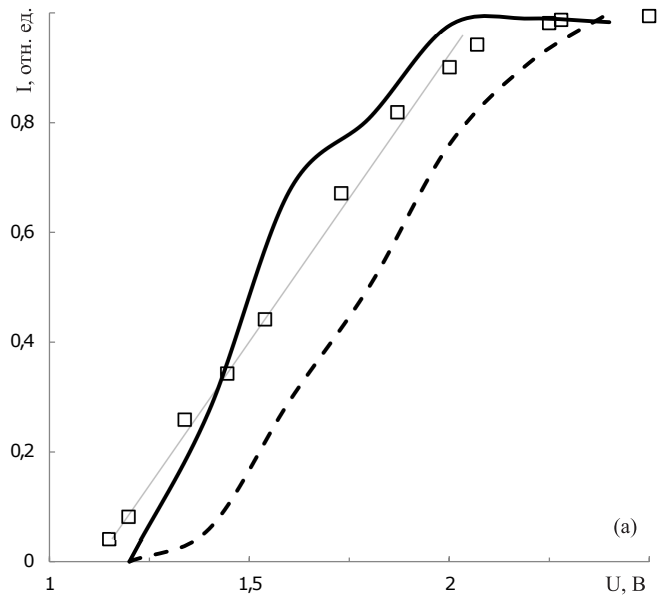


Рисунок 3.11: Зависимость интенсивности пропускания для необыкновенного луча от напряжения, приложенного к ячейке; угол падения $\delta = 63^\circ$; (а) – интенсивность нормирована на максимальное значение интенсивности пропускания, \square – экспериментальные данные, сплошная линия – зависимость интенсивности 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.

Заключение

В данной работе исследовалось поведение жидкокристаллических систем во внешнем электрическом поле. Путем прямой минимизации свободной энергии ЖК численно рассчитаны зависимости $\theta(z)$ и $\phi(z)$, определяющие ориентацию директора, при различных значениях напряжения для гомеопланарной ячейки и планарной 90° твист-ячейки НЖК.

Используя данный метод, мы оценили энергию сцепления на грани с планарной ориентацией директора в гомеопланарной ячейке НЖК.

Численно получены зависимости емкости различных ячеек от приложенного напряжения. Видно, что результаты расчетов хорошо согласуются с экспериментом. Однако рассчитанная нами электрическая емкость является интегральной характеристикой ячейки. Данный метод не позволяет определять локальные характеристики системы. Например, нельзя подтвердить рассчитанное распределение директора в объеме. Согласие теории и эксперимента для электрической емкости лишь косвенно подтверждает распределение директора.

Предложен способ определения конфигурации директор светочувствительных жидких кристаллов в зависимости от значения обратного шага спирали.

Заметим, что предложенный 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 [9], путем добавления к энергии членов, связанных с взаимодействием поверхности наночастиц и молекул жидкого кристалла.

Зная распределение директора, была численно построена зависимость глубины проникновения необыкновенного луча от угла падения при различных напряжениях для гомеопланарной ячейки и планарной 90° твист-ячейки НЖК. В эксперименте угол падения задается с точностью 0.1° , позволяющей плавно менять глубину проникновения света в слой жидкого кристалла. Последнее предоставляет уникальную возможность для изучения локальной ориентационной структуры директора ЖК и динамики ее изменения во внешних электрических полях.

Стоит отметить, что теоретическое описание распространения света строилось в рамках приближения геометрической оптики, где в качестве большого параметра выступало отношение шага спирали ЖК к длине световой волны. Численно получены зависимости минимального напряжения пропускания от предельного угла рефракции и интенсивности прошедшего света от напряжения при фиксированном угле падения в планарной 90° твист-ячейке НЖК для необыкновенного луча.

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 также 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).

Список литературы

1. *Wu, Shin-Tson and Yang, Deng-Ke* Fundamentals of Liquid Crystal Devices. – John Wiley & Sons, 2006. – P. 394.
2. *P.-G. de Gennes and J. Prost* The Physics of Liquid Crystals. – Oxford University Press, 1993. – P. 616.
3. *Stewart I.W.* The Static and Dynamic Continuum Theory of Liquid Crystals: A Mathematical Introduction, Liquid Crystals book series. – Taylor & Francis, London, 2004. – P. 360.
4. *Deluling H.J.* Deformation of Nematic Liquid Crystals in an Electric Field // *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* – 1972. – Vol. 19. – P. 123.
5. *Meyerhofer D.* Elastic and dielectric constants in mixtures of nematic liquid crystals // *Phys. Lett.* – 1975. – Vol. 51A. –P. 407.
6. *Meyerhofer D.* New technique of aligning liquid crystals on surfaces // *Appl. Phys. Lett.* – 1976. – Vol. 29. – Pp. 691-692.
7. *Helfrich W.* Alignment-Inversion walls in nematic liquid crystals in the presence of a magnetic field // *Phys. Rev. Lett.* –1969. – Vol. 22. – P. 1342.
8. *Scheffer T.J., Nehring J.* Accurate determination of liquid crystal tilt bias angles // *J. Appl. Phys.* –1977. – Vol. 48. –P. 1783.

9. *T. Tóth-Katona, P. Salamon, N. Éber, N. Tomašovičová, Z. Mitróová, P. Kopčanský* High concentration ferronematics in low magnetic fields // *J. Magn. Mater.* – 2014. – Vol. 372. – P. 117-121.
10. *N. Tomašovičová, Z. Mitróová, M. Koneracká, M. Rajňak, N. Éber, T. Tóth-Katona, X. Chaud, J. Jadzyn, P. Kopčanský* Capacitance changes in ferronematic liquid crystals induced by low magnetic fields // *Phys. Rev. E* – 2013. – Vol. 87. – P. 014501.
11. *P. Kopčanský, N. Tomašovičová, M. Koneracká, M. Timko, V. Závíšová, N. Éber, K. Fodor-Csorba, T. Tóth-Katona, A. Vajda, J. Jadzyn, E. Beaugnon, X. Chaud* The structural instabilities in ferronematic based on liquid crystal with negative diamagnetic susceptibility anisotropy // *J. Magn. Mater.* – 2010. – Vol. 322. no. 22. – Pp. 3696-3700.
12. *Cai W., Shalaev V.* Optical Metamaterials. – Springer, 2010. – P. 200.
13. *Joannopoulos J., Meade R., Winn J., Johnson S.* Photonic Crystals. – Princeton University Press, 2008. – P. 286.
14. *Sakoda K.* Optical Properties of Photonic Crystals. – Springer, 2001. – P. 224.
15. *Woltman S.J., Jay G.D., Crawford G.P.* Liquid-crystal materials find a new order in biomedical applications // *Nature mater.* – 2007. – Vol. 6. no. 6. – Pp. 929-938.
16. *Венедиктов В.Ю., Невская Г.Е., Томилин М.Г.* Жидкие кристаллы в динамической голографии (Обзор) // *Опт. и спектр.* – 2011. – Vol. 111. no. 1. – Pp. 121-142.
17. *Matharu A.S., Jeeva S., Ramanujam P.S.* Liquid crystals for holographic optical data storage // *Chem. Soc. Rev.* – 2007. – Vol. 36. no. 12. – P. 1868.

18. *Leslie F.M.* Distortion of twisted orientation patterns in liquid crystals by magnetic fields // *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* – 1970. – Vol. 12. no. 1. – P. 57.
19. *Berreman D.W., Heffner W.R.* New bistable liquid-crystal twist cell // *J. Appl. Phys.* – 1981. – Vol. 52. no. 4. – P. 3032.
20. *Thurston R.N.* // *J. Appl. Phys.* – 1983. – Vol. 54. no. 9. – P. 4966.
21. *Thurston R.N., Berreman D.W.* Equilibrium and stability of liquid-crystal configurations in an electric field // *J. Appl. Phys.* – 1981. – Vol. 52. – Pp. 508-509.
22. *Hirning R., Funk W., Trebin H.-R., Schmidt M., Schmiedel H.* Threshold behavior and electro-optical properties of twisted nematic layer with weak anchoring in the tilt and twist angle // *J. Appl. Phys.* – 1991. – Vol.70. – Pp.4211-4216.
23. *Aursand P., Napoli G., Ridder J.* On the dynamics of the weak Fréedericksz transition for nematic liquid crystals // *Commun. Comput. Phys.* – 2016. – Vol. 20. no. 5. – Pp. 1359-1380.
24. *Hong Qi, Wu T.X., Wu Shin-Tson* Optical wave propagation in a cholesteric liquid crystal using the finite element method // *Liq. Cryst.* – 2003. – Vol. 30. no. 3. – P. 367-375.
25. *Berreman D. W., Scheffer T. J.* Order versus temperature in cholesteric liquid crystals from reflectance spectra // *Phys. Rev. A* – 1972. – Vol. 5. – Pp. 1397-1403.
26. *Berreman D. W.* Optics in stratified and anisotropic media: 4×4 -matrix formulation // *J. Opt. Soc. Am.* – 1972. – Vol. 62. – Pp. 502–510.

27. *Berreman D. W.* Stratified media: optics in smoothly varying anisotropic planar structures: application to liquid-crystal twist cells // *J. Opt. Soc. of Am.* – 1973. – Vol. 63. no. 2. – P. 1374.
28. *Палто С.П.* Алгоритм решения оптической задачи для слоистых анизотропных сред // *ЖЭТФ* – 2001. – Vol. 119. – P. 638; *Palto S.P.* // *JETP* – 2001. – Vol. 92. – P. 552.
29. *Gevorgyan A.H.* Photonic band gaps from a stack of right- and left-hand chiral photonic crystal layers // *Phys. Rev. E.* – 2012. – Vol. 85. – P. 021704.
30. *Aursand P., Koley U.* Local discontinuous Galerkin schemes for a nonlinear variational wave equation modelling liquid crystals // *Journal of Computational and Applied Mathematics* – 2017. – Vol. 317. – Pp.478-499.
31. *Nianyu Yi, Hailiang Liu* An energy conserving local discontinuous Galerkin method for a nonlinear variational wave equation // *Commun. Comput. Phys.* – 2018. – Vol. 23. no. 3. – Pp. 747-772.
32. *Беляков В.А., Дмитриенко В.Е.* Оптика поглощающих холестерических жидких кристаллов // *Физика тверд. тела.* – 1973. – Vol. 15. no. 9. – Pp. 2724-2731; *Belyakov V.A., Dmitrienko V.E.* // *Sov. Phys. Solid State.* – 1974. – Vol. 15. no.9. – P. 1811.
33. *Дмитриенко В.Е., Беляков В.А.* О высших порядках селективного отражения света холестерическими жидкими кристаллами // *Физика тверд. тела.* – 1973. – Vol. 15. no. 12. – Pp. 3325-3331; *Dmitrienko V.E., Belyakov V.A.* Higher orders of the selective reflection of light by cholesteric liquid crystals // *Sov. Phys. Solid State.* – 1974. – Vol. 15. no. 12. – Pp. 2213-2216.

34. *Lakhtakia A., Weiglhofer W.S.* Simple and exact analytic solution for oblique propagation in a cholesteric liquid crystal // *Microwave Opt. Technol.* – 1996. – Vol. 12. – Pp. 245-248.
35. *Val'kov A.Yu., Aksenova E.V., Romanov V.P.* First-order and continuous Fredericksz transitions in cholesteric liquid crystals // *Phys. Rev. E.* – 2013. – Vol. 87. no. 2. – P. 022508.
36. *Rokushima K., Yamakita J.* Analysis of anisotropic dielectric gratings // *J. Opt. Soc. Am.* – 1983. – Vol. 73. no. 7. – P. 901.
37. *Wang F., Lakhtakia A.* Response of slanted chiral sculptured thin films to dipolar sources // *Opt. Commun.* – 2004. – Vol. 235. – Pp. 133-151.
38. *Avendano-Alejo M.* Analysis of the refraction of the extraordinary ray in a plane-parallel uniaxial plate with an arbitrary orientation of the optical axis // *Optics Express.* – 2005. – Vol. 13. no. 7. – Pp. 2549-2555.
39. *Panasyuk G., Kelly J., Gartland E.C., Allender D.W.* Geometrical optics approach in liquid crystal films with three-dimensional director variations // *Phys.Rev. E.* – 2003. – Vol. 67. – P. 041702.
40. *Mouguin M.C.* // *Bull. Soc. Franc. Miner. Cryst.* – 1911. – Vol. 34. – P. 71.
41. *Liberman V. S., Zel'dovich B. Ya.* Birefringence by a smoothly inhomogeneous locally isotropic medium // *Phys. Rev. E.* – 1994. – Vol. 49. – P. 2389.
42. *Savchenko A. Yu., Zel'dovich B. Ya.* Birefringence by a smoothly inhomogeneous locally isotropic medium: Three-dimensional case // *Phys. Rev. E.* – 1994. – Vol. 50. – P. 2287.

43. *Вальков А. Ю., Гринин Р. В., Романов В. П.* Распространение света в хиральных жидких кристаллах с большим шагом спирали. // *Опт. и спектр.* – 1997. – Vol. 83. – P. 239.
44. *Aksenova E.V., Karetnikov A.A., Kovshik A.P., Romanov V.P., Val'kov A.Yu.* Return back of the extraordinary beam for oblique incidence in helical liquid crystals with large pitch // *Europhys. Lett.* 2005. – V. 69. no. 1. – P. 68.
45. *Langevin D., Bouchiat M.-A.* Anisotropy of the turbidity of an oriented nematic liquid crystal // *J. de Phys.* – 1975. – Vol. 36. – Pp. 197-202.
46. *Вальков А.Ю., Романов В.П.* Особенности распространения и рассеяния света в нематических жидких кристаллах // *ЖЭТФ* –1986. – Vol. 90. no. 4. – Pp. 1264-1274.
47. *Zhi-gang Zheng, Yannian Li, Hari Krishna Bisoyi, Ling Wang, Bunning T.J., Quan Li* Three-dimensional control of the helical axis of a chiral nematic liquid crystal by light // *Nature* – 2016. – Vol. 531. – P. 352.
48. *Orlova T.N., Iegorov R.I., Kiselev A.D.* Light-induced pitch transitions in photosensitive cholesteric liquid crystals: Effects of anchoring energy // *Phys. Rev. E* –2014. – Vol. 89. – P. 012503.
49. *Oseen C.W.* The theory of liquid crystals // *Trans. Faraday Soc.* – 1933. – Vol. 29. – Pp. 883-899.
50. *Frank F.C.* On the theory of liquid crystals // *Discuss. Faraday Soc.* – 1958. – Vol. 25. – Pp 19-28.
51. *Mironov V.S., Galyametdinov Yu.G., Ceulemans A., Gorller-Walrand C., Binnemans K.* Influence of crystal-field perturbations on the room-

- temperature magnetic anisotropy of lanthanide complexes // *Chem. Phys. Lett.* – 2001. – Vol. 345. – Pp. 132-140.
52. *Mironov V.S., Galyametdinov Yu.G., Ceulemans A., Binnemans K.* On the magnetic anisotropy of lanthanide-containing metallomesogens // *J. Chem. Phys.* – 2000. – Vol. 113. no. 22. – Pp 1-11.
53. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Электродинамика сплошных сред – ФИЗМАТЛИТ, 2016. – P. 656.
54. *Rapini A., Papoular M.* Distortion d'une lamelle nématique sous champ magnétique conditions d'ancrage aux parois // *J. Phys. Colloq.* – 1969. – Vol. 30. – Pp. C4-54-C4-56.
55. *Беляков В.А., Кац Е.И.* Поверхностное сцепление и температурные вариации шага в тонких холестерических слоях // *ЖЭТФ* – 2000. – Vol. 118. no 3. – Pp. 560-569; *V.A. Belyakov, E.I. Kats* Surface anchoring and temperature variations of the pitch in thin cholesteric layers // *JETP* – 2000. – Vol. 91. no. 3. – Pp. 488-496.
56. *K. Nowicka, D. Dardas, W. Kuczyński, V.A. Belyakov, D.V. Shmeliova* Director distribution and surface anchoring potential in Grandjean-Cano wedge // *Liquid Crystals* – 2014. – Vol. 41. no. 10. – Pp. 1448-1454.
57. *Bessarab P.F., Uzdinb V.M.,c, Jónsson H.* Method for finding mechanism and activation energy of magnetic transitions, applied to skyrmion and antivortex annihilation // *Computer Physics Communications* – 2015. – Vol. 196. – Pp. 335-347.
58. *Y. Choi, H. Yokoyama, J.S. Gwag* Determination of surface nematic liquid crystal anchoring strength using nano-scale surface grooves // *Optics Express* – 2013. – Vol. 21. – Pp. 12135-12144.

59. *Seo D.-S., Limura Ya. , and Kobayashi S. // Appl. Phys. Lett.* – 1992. – Vol. 61. – P. 234.
60. *Блинов Л.М., Раджабов Д.З., Собачюс Д.Б., Яблонский С.В. // ЖЭТФ* – 1991. – Vol. 53. – P. 223.
61. *Subacius D., Pergamenshchik V. M., Lavrentovich O. D.* Measurement of polar anchoring coefficient for nematic cell with high pretilt angle // *Appl. Phys. Lett.* – 1995. – Vol. 67. – Pp. 214-216.
62. *Hwang Sh.-J., Jeng Sh.-Ch., Hsieh I-M.* Nanoparticle-doped polyimide for controlling the pretilt angle of liquid crystals devices // *Optics Express* – 2010. – Vol. 18. no. 16. – Pp. 16507-16512.
63. *Мэттьюз Дж., Уокер Р.* Математические методы физики. – Атомиздат, 1972. – P. 401.
64. *Аксенова Е.В., Дивинский Б.Б., Каретников А.А., Каретников Н.А., Ковшик А.П., Крюков Е.В., Романов В.П.* Особенности распространения света в ячейках киральных жидких кристаллов во внешнем электрическом поле // *ЖЭТФ* – 2014. – Vol. 145. no. 2. – P. 369; *Aksenova E.V., Divinskii B.B., Karetnikov A.A., Karetnikov N.A., Kovshik A.P., Kryukov E.V., Romanov V.P.* Peculiarities of light propagation in chiral liquid crystal cells in an external electric field // *JETP* – 2014. – Vol. 118. no. 2. – Pp. 323-332.
65. *Аксенова Е.В., Вальков А.Ю., Каретников А.А., Ковшик А.П., Романов В.П., Рюмцев Е.И.* Особенности рефракции необыкновенного луча в геликоидальной среде с большим шагом спирали // *ЖЭТФ* – 2004. – Vol. 126. no. 5. – Pp. 1109-1122; *Aksenova E. V., Val'kov A. Yu., Karetnikov A. A., Kovshik A. P., Romanov V. P., Rymtsev E. I.* Extraordinary ray

refraction in a large pitch helical medium // *JETP* – 2004. – Vol. 99. no. 5. – Pp. 965-977.

66. *Вальков А.Ю., Романов В.П., Шалагинов А.Н.* Флуктуации и рассеяние света в жидких кристаллах // *УФН* – 1994. – Vol. 164. no. 2. – Pp. 149-193.
67. *Kuz'min V.L., Romanov V.P., Zubkov L.A.* Propagation and scattering of light in fluctuating media // *Physics reports* – 1994. – Vol. 248. no. 2-5. – Pp. 71-368.

Приложение А

Коэффициент экстинкции в

твист-ячейке с большим шагом спирали

В однородной анизотропной среде имеются два коэффициента экстинкции $\sigma^{(o)}$ и $\sigma^{(e)}$. В борновском приближении они имеют вид [46, 66, 67]:

$$\sigma^{(i)} = \frac{k_0^4}{16\pi^2} \frac{e_\alpha^{(i)} e_\beta^{(i)}}{n^{(i)} \cos \delta^{(i)}} \sum_{s=o,e} \int d\Omega_{\mathbf{k}^{(s)}} \frac{n^{(s)} e_\mu^{(s)} e_\nu^{(s)}}{\cos^2 \delta^{(s)}} G_{\alpha\mu\beta\nu}. \quad (\text{П.1})$$

Здесь индексы (i) и (s) , относящиеся, соответственно к падающей и рассеянной волнам, принимают два значения, отвечающие в одноосной среде модам (o) и (e) . Величины $\delta^{(j)}$ — углы между векторами $\mathbf{e}^{(j)}$ и $\hat{\varepsilon}\mathbf{e}^{(j)}$, $G_{\alpha\mu\beta\nu} = G_{\alpha\mu\beta\nu}(\mathbf{k}^{(s)} - \mathbf{k}^{(i)})$ — фурье-образ корреляционной функции флуктуаций директора, $\hat{G}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \langle \delta\hat{\varepsilon}(\mathbf{r}) \delta\hat{\varepsilon}^*(\mathbf{r}') \rangle$, $\delta\varepsilon_{\alpha\beta} = \varepsilon_a (n_\alpha \delta n_\beta + n_\beta \delta n_\alpha)$, $n^{(j)}$ — показатели преломления обыкновенной и необыкновенной волн соответственно,

$$G_{\alpha\mu\beta\nu}(\mathbf{q}) = \sum_{l=1}^2 \langle |\delta n_l|^2 \rangle (a_{l\alpha} a_{l\beta} n_\nu n_\mu + a_{l\alpha} a_{l\mu} n_\nu n_\beta + a_{l\nu} a_{l\mu} n_\alpha n_\beta + a_{l\nu} a_{l\beta} n_\alpha n_\mu), \quad (\text{П.2})$$

где

$$\langle |\delta n_l|^2 \rangle = \frac{k_B T \varepsilon_a^2}{K_{ll} q^2 + (K_{33} - K_{ll})(\mathbf{q} \cdot \mathbf{n})^2}, \quad (\text{П.3})$$

– средний квадрат флуктуаций,

$$\mathbf{a}_2 = \frac{[\mathbf{q} \times \mathbf{n}]}{\sqrt{q^2 - (\mathbf{q} \cdot \mathbf{n})^2}}, \quad (\text{П.4})$$

$$\mathbf{a}_1 = [\mathbf{a}_2 \times \mathbf{n}], \quad (\text{П.5})$$

$\int d\Omega_{\mathbf{k}^{(s)}}$ обозначает интегрирование по всем направлениям единичного вектора $\mathbf{k}^{(s)}/k^{(s)}$.

В ряде случаев это выражение допускает существенные упрощения и может быть сосчитано аналитически. При $q \rightarrow 0$ корреляционная функция флуктуаций директора расходится как q^{-2} . Это приводит к логарифмической расходимости в интеграле (П.1). Обращение q в ноль возможно только в том случае, если совпадают длины падающей и рассеянной волн. При этом по геометрическим причинам рассеяние типа $(o) \rightarrow (o)$ отсутствует. Таким образом логарифмическая расходимость появляется только при рассеянии типа $(e) \rightarrow (e)$. Вклады в экстинкцию от рассеяний типа $(o) \rightarrow (e)$ и $(e) \rightarrow (o)$ сводятся к однократным интегралам вида

$$\sigma_{(o,e)} = \tau_0 \int_{-1}^1 du \frac{1 - u^2}{(1 + au^2)^{3/2}} ((1 - u^2)(I_1(t_2) - I_1(t_1)) + I_2(t_2)), \quad (\text{П.6})$$

$$\sigma_{(e,o)} = \frac{\tau_0 \sin^2 \theta^*}{(1 + a \cos^2 \theta^*)^{3/2}} \int_{-1}^1 du (\rho_2^2 \sin^2 \theta^* (I_1(t_2) - I_1(t_1)) + I_2(t_2)), \quad (\text{П.7})$$

где

$$\tau_0 = \frac{\omega^2 k_B T \varepsilon_a^2}{8\pi c^2 K_{33} \sqrt{\varepsilon_{\perp} \varepsilon_{\parallel}}}, \quad (\text{П.8})$$

$$I_1(t) = \frac{t}{E(E + At + I_2^{-1}(t))}, \quad (\text{П.9})$$

$$I_2(t) = (E^2 + 2tAE + t^2 F^2)^{-1/2}, \quad (\text{П.10})$$

$$E = (\rho_1 \cos \theta^* - u)^2, \quad (\text{П.11})$$

$$A = \rho_1^2 \sin^2 \theta^* + 1 - u^2, \quad (\text{П.12})$$

$$F = \rho_1^2 \sin^2 \theta^* + u^2 - 1, \quad (\text{П.13})$$

$$\rho_1 = \sqrt{(1 + au)/(1 + a)}, \quad (\text{П.14})$$

$$\rho_2 = \sqrt{(1 + a)/(1 + a \cos^2 \theta^*)}, \quad (\text{П.15})$$

$$a = \varepsilon_a/\varepsilon_\perp, \quad t_l = K_{ll}/K_{33}, \quad l = 1, 2.$$

Логарифмический вклад в экстинкцию от рассеяния типа $(e) \rightarrow (e)$ может быть записан в виде

$$\sigma_{(e,e)}^{ln} = \frac{\tau_0(\varepsilon_\perp \varepsilon_\parallel)^{3/2} \sin^2 2\theta^*}{P^2 F_1} \frac{t_1(F_1 + F_2)}{(t_1 F_2 + t_2 F_1)} \ln \frac{L}{\lambda}, \quad (\text{П.16})$$

где

$$P = \varepsilon_\parallel \cos^2 \theta^* + \varepsilon_\perp \sin^2 \theta^*, \quad (\text{П.17})$$

$$F_l = (t_l^2 \varepsilon_\parallel^2 \cos^2 \theta^* + t_l \varepsilon_\perp^2 \sin^2 \theta^*)^{1/2}. \quad (\text{П.18})$$

Заметим, что в этом выражении появился логарифм отношения L/λ . Это связано с тем, что корреляции директора ограничены размерами образца. Вклад вида (П.16) обращается в ноль при $\theta_* = 0$ и $\theta_* = \pi/2$. На самом деле для этих углов вклад ненулевой. Поэтому кроме логарифмического вклада учтем линейный по углу θ_* . Для этого мы рассчитаем экстинкцию при $\theta_* = 0$ и $\theta_* = \pi/2$. Тогда линейный вклад примет вид

$$\sigma_{(e,e)}^{lin} = \sigma_{(e,e)}(0) + \frac{2}{\pi} \theta_* \left(\sigma_{(e,e)}\left(\frac{\pi}{2}\right) - \sigma_{(e,e)}(0) \right). \quad (\text{П.19})$$

Исходя из геометрических соображений, можно показать, что $\sigma_{(e,e)}(0) = \sigma_{(o,e)}(0)$. Значение $\sigma_{(e,e)}(\frac{\pi}{2})$ можно получить численно из выражения (П.1). Таким образом экстинкция необыкновенного луча принимает вид

$$\sigma^{(e)} = \sigma_{(e,o)} + \sigma_{(e,e)}^{ln} + \sigma_{(e,e)}^{lin}. \quad (\text{П.20})$$

В геликоидальной среде с большим шагом спирали формула (П.1) сохраняет смысл, если учесть, что величины $\mathbf{e}^{(j)}$, $n^{(j)}$, $\delta^{(j)}$ и $\hat{G}(\mathbf{q})$, являющиеся функциями директора $\mathbf{n}(z)$, зависят от z . Фактически, мы будем использовать выражение (П.1) в приближении локальной однородности, то есть для каждого слоя директор определяется углами θ_i и ϕ_i данного слоя.

Приложение В

Список основных обозначений

| | |
|---|---|
| B | вектор магнитной индукции |
| C | электрическая емкость плоского конденсатора |
| D | вектор электрической индукции |
| $\mathbf{e}_{\pm}(\mathbf{k}_{\perp}, z)$ | единичный вектор поляризации |
| E | вектор напряженности электрического поля (E_x, E_y, E_z) |
| H | вектор напряженности магнитного поля (H_x, H_y, H_z) |
| I | интенсивность света |
| $(i), (s)$ | индексы величин, относящихся к падающей и рассеянной волнам соответственно |
| k | волновой вектор падающей на среду волны (\mathbf{k}_{\perp}, k_z) |
| \mathbf{k}_{\perp} | двумерный вектор, не зависит от координат, его величина определяется углом падения света на среду |
| k_0 | волновое число однородной изотропной среды |
| K_{11}, K_{22}, K_{33} | модули Франка |
| L | расстояние между подложками жидкокристаллической ячейки |
| $\mathbf{n}(\mathbf{r})$ | вектор директор |

| | |
|------------------------------|---|
| n_g | коэффициент преломления стекла призм |
| $(o), (e)$ | тип волны: обыкновенная или необыкновенная соответственно |
| p_0, p | естественный шаг спирали ХЖК и шаг спирали, обусловленный граничными условиями, соответственно |
| q_0, q | естественный обратный шаг геликоидальной спирали и обратный шаг, обусловленный граничными условиями, соответственно |
| \mathbf{r} | радиус вектор (x, y, z) |
| \mathbf{r}_\perp | двумерный вектор, составляющая радиус вектора, ортогональная оси Oz |
| \mathbf{S} | вектор Пойнтинга (\mathbf{S}_\perp, S_z) |
| S_\perp | площадь поверхности подложки жидкокристаллической ячейки |
| U | электрическое напряжение |
| $V = S_\perp L$ | объем рассматриваемой системы |
| $W_\theta^{(1)}$ | поверхностная энергия сцепления на нижней грани ЖК ячейки |
| z_* | координата z точки среды, в которой необыкновенная волна меняет направление распространения на противоположное |
| λ | длина падающей световой волны |
| δ | угол падения световой волны на границу раздела стекло-жидкий кристалл |
| $\hat{\mu}$ | тензор магнитной проницаемости |
| $\chi_\parallel, \chi_\perp$ | магнитная восприимчивость вдоль и поперек директора соответственно |

| | |
|--|---|
| $\hat{\varepsilon}$ | тензор диэлектрической проницаемости среды |
| $\varepsilon_{\parallel}, \varepsilon_{\perp}$ | диэлектрические проницаемости вдоль и перпендикулярно направлению директора соответственно, значения на частоте внешнего электрического поля |
| ε_a | $\varepsilon_{\parallel} - \varepsilon_{\perp}$, анизотропия диэлектрической проницаемости, значение на частоте внешнего электрического поля |
| $\varepsilon_{\parallel}^{opt}, \varepsilon_{\perp}^{opt}$ | диэлектрические проницаемости вдоль и перпендикулярно направлению директора соответственно, значения на оптической частоте |
| ε_a^{opt} | $\varepsilon_{\parallel}^{opt} - \varepsilon_{\perp}^{opt}$, анизотропия диэлектрической проницаемости, значения на оптической частоте |
| θ | полярный угол, задает направление вектора директора, отсчитывается от оси z |
| θ^* | угол между падающим волновым вектором и директором |
| ϕ | азимутальный угол, задает направление вектора директора, отсчитывается от оси x |
| σ | коэффициент экстинкции |