

ПОВЕРХНОСТНОЕ СЦЕПЛЕНИЕ И РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ДИРЕКТОРА В КЛИНЕ ГРАНЖАНА – КАНО

С. В. Семенов^{a*}, В. А. Беляков^{b**}

^a Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»
123182, Москва, Россия

^b Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау Российской академии наук
142432, Черноголовка, Московская обл., Россия

Поступила в редакцию 1 декабря 2017 г.

Для различных модельных потенциалов сцепления выполнены теоретические расчеты распределения директора в клине Гранжана–Кано в зависимости от силы сцепления и взаимной ориентации легких осей. Сравнение теории с экспериментом позволяет предложить так называемый модельный D -потенциал, как наилучший для описания экспериментальных данных в области углов, в которой проводились измерения. Для того чтобы потенциал удовлетворял общим требованиям на поверхности клина, предложена модификация D -потенциала. Сформулированы оптимальные условия для проведения эксперимента, направленного на восстановление потенциала во всей области его определения (в частности, непараллельная ориентация легких осей на поверхности клина).

DOI: 10.7868/S0044451018050152

1. ВВЕДЕНИЕ

Прогресс в экспериментальном, модельно-независимом восстановлении реального потенциала сцепления [1–3], в результате чего область углов, в которой воспроизводится потенциал, расширена до $\pi/4$ (угол между легкой осью и директором) приводит к вопросу о дальнейших исследованиях с целью восстановления потенциала во всей области определения. Экспериментальные работы [1–3] показали, что хорошо известный модельный потенциал сцепления Рапини–Папулар (и другие, предложенные в литературе модельные потенциалы) не дают удовлетворительного описания опытных данных. Сравнение теоретических и экспериментальных результатов позволяет предложить так называемый модельный D -потенциал [3] как наиболее подходящий для фитирования данных эксперимента по определению распределения директора в клине Гранжана–Кано в области углов, соответствующих измерениям, проведенным в работах [1–3]. В нашей работе излагается ход дальнейших теоретических и экспериментальных поисков

возможных подходов, направленных на описание наблюдений, выполненных с помощью техники поляризационного микроскопа при изучении оптических свойств клиновидной ячейки со слабыми силами сцепления на поверхности, заполненной киральным нематическим жидким кристаллом (клин Гранжана–Кано) [1, 2] и имеющих целью наметить оптимальное направление последующих экспериментальных работ по расширению области углов, в которой будет проводиться восстановление потенциала поверхностного сцепления, до угла $\pi/2$. В данной работе мы рассматриваем случай сильного полярного сцепления на обеих поверхностях клина, когда конечной является только азимутальная часть поверхностного потенциала. При этом угол преднаклона принимается равным нулю, т.е. директор параллелен поверхности клина. Наряду с уменьшением силы поверхностного сцепления, увеличение области восстановления поверхностного потенциала может быть также достигнуто надлежащим выбором геометрии измерения (в частности, непараллельной ориентации легких осей на поверхностях клина). Мы также привлекаем внимание к тому факту, что измерения оптических характеристик клина Гранжана–Кано можно эффективно использовать для измерения силы потенциала поверхностного сцепления.

* E-mail: Semenov_SV@nrcki.ru

** E-mail: Bel1937@mail.ru

2. ОБЩИЕ УРАВНЕНИЯ

Большинство работ по исследованию оптических свойств клина Гранжана–Кано проведено для параллельной ориентации легких осей на поверхности клина. Однако, как мы увидим в дальнейшем, изменение взаимной ориентации легких осей приводит к сдвигу зон Гранжана–Кано в клине по отношению к их положению при параллельной ориентации. Как известно [2, 4, 5], положение зон Гранжана–Кано (положение стенок, разделяющих соседние зоны) с хорошей точностью не зависит от формы потенциала и его силы и определяется геометрическим фактором (углом клина, равновесным значением шага холестерической спирали, взаимной ориентацией легких осей на поверхности клина). Для случая параллельной ориентации легких осей на поверхности клина, например, при бесконечном сцеплении на одной поверхности клина и конечном сцеплении на другой, задача об оптических свойствах клина Гранжана–Кано исследовалась, в частности, в работах [1, 2]. Рассмотрение в настоящей работе той же самой проблемы при непараллельной ориентации легких осей на поверхностях клина приводит к следующему уравнению, описывающему ориентацию директора на поверхности клина с конечным сцеплением и, естественно, распределение шага холестерической спирали в зонах Гранжана–Кано:

$$dW_s(\varphi - \Delta\varphi)/d\varphi + W(S_d\varphi - 2\pi l_p) = 0, \quad (1)$$

где φ — угол отклонения директора от направления выстраивания на поверхности с конечным сцеплением, $\Delta\varphi$ — угол между легкими осями на противоположных поверхностях клина, $W_s(\varphi)$ — потенциал поверхностного сцепления, K_{22} — модуль упругого кручения, d — локальная толщина клина, параметры S_d и l_p , соответственно, определяются следующим образом:

$$S_d = K_{22}/Wd, \quad l_p = K_{22}/Wp_0,$$

p_0 — равновесное значение шага холестерической спирали, W — глубина потенциала поверхностного сцепления.

Уравнение (1) было решено ранее [1] для случая параллельной ориентации легких осей на поверхностях клина ($\Delta\varphi = 0$), что соответствует экспериментальным измерениям в работах [1, 2]. Было проведено сравнение наблюдаемых больших угловых отклонений директора от легкой оси (см. также [3]) с теоретически предсказанными результатами на основе двух модельных потенциалов: Рапини–Папулар (RP) [6] и так называемого B -потенциала [7, 8].

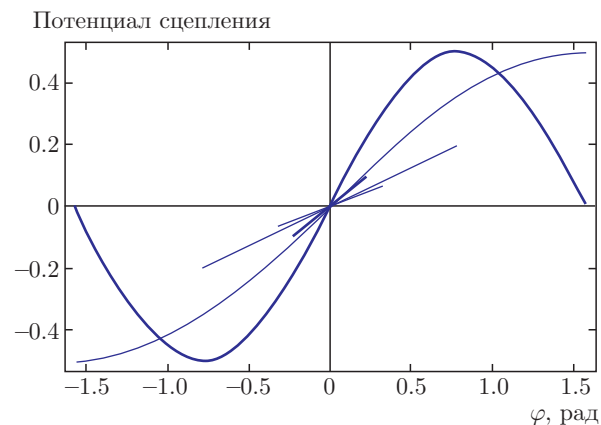


Рис. 1. Производная потенциала сцепления как функция угла. (Измерения [3, 10, 11] соответствуют прямым линиям, результаты расчетов изображены с помощью толстой и тонкой линий соответственно для RP - и B -потенциалов)

Было показано, что хорошо известный модельный потенциал Рапини–Папулар (и другие предложенные в литературе модельные потенциалы) не подходит для удовлетворительного описания экспериментально наблюдаемого поведения директора (см. рис. 1), и так называемый модельный D -потенциал [3] является наилучшим для аппроксимации экспериментальных данных во всей области углов, в которой проводились измерения.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ВЫЧИСЛЕНИЙ

Был проведен теоретический расчет распределения директора в клине Гранжана–Кано для ортогональных легких осей ($\Delta\varphi = \pi/2$), которое можно сравнить со случаем $\Delta\varphi = 0$ (рис. 2). Вычисления (выполненные также и для различных значений $\Delta\varphi$) показали, что распределение директора обнаруживает сильную зависимость от силы сцепления и взаимной ориентации легких осей в первой зоне Гранжана–Кано с последующим ослаблением этой зависимости с ростом номера зоны. Вычисления показывают, что изменение ориентации легких осей открывает возможность сдвигать положения стенок в структуре клина Гранжана–Кано и, в частности, минимизировать локальную толщину клина в точке расположения любой стенки в этой структуре. Соответствующее изменение локальной толщины клина может оказывать особенное влияние на распределение директора в первых зонах Гранжана–Кано, так как для этих зон соответствующее отношение измененных и неизмененных локальных толщин может быть существенно меньше единицы. Это уменьше-

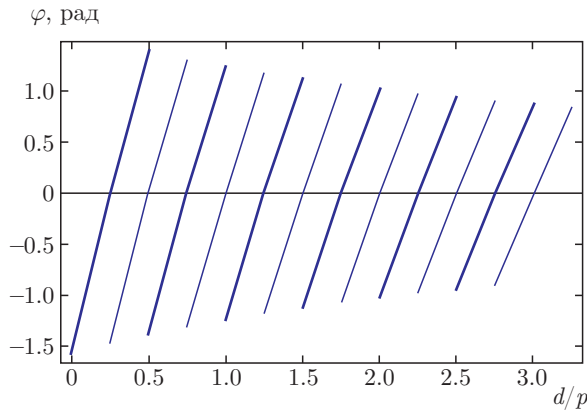


Рис. 2. Рассчитанное распределение угла φ отклонения директора от легкой оси в клине Гранжана–Кано для D -потенциала (толстые линии — перпендикулярные легкой оси, тонкие линии — параллельные легкой оси, $l_p = 1.5$)

ние локальных толщин соответствует значительному увеличению параметра S_d , т. е. эффективному уменьшению сцепления [1] и скачка угла φ ориентации директора на стенке между зонами Гранжана–Кано.

4. ЗОНЫ ГРАНЖАНА–КАНО В СЛУЧАЕ D -ПОТЕНЦИАЛА

Нормированный модельный D -потенциал [3] задается формулой

$$w_D(\varphi) = (2/\pi)^2 \varphi^2 / 2 - 1/2, \quad -\pi/2 < \varphi < \pi/2. \quad (2)$$

Для D -потенциала вида (2) уравнение (1), задающее распределение директора в клине, имеет простое аналитическое решение. Это решение для определенной зоны Гранжана–Кано записывается следующей формулой:

$$\varphi = [2\pi l_p (d/p_0 - n/2) - \Delta\varphi l_p] / [(2/\pi)^2 (d/p_0) + l_p], \quad (3)$$

где n — номер зоны Гранжана–Кано, p_0 — равновесное значение шага и d — локальная толщина слоя. Выражение для нормированного шага следует из уравнения (3):

$$p/p_0 = 2\pi(d/p_0) / [\varphi + n\pi + \Delta\varphi]. \quad (4)$$

Уравнения (2)–(4) использовались при расчетах, проведенных в предыдущем разделе. Для того чтобы упростить дальнейшее сравнение результатов предсказаний, полученных в различных подходах,

приведем точные выражения для широко используемых потенциалов сцепления (Рапини–Папулар (RP) [6] и так называемый B -потенциал [7]). RP -потенциал задается формулой

$$W_{RP}(\varphi) = -(W/2) \cos^2(\varphi), \quad (5)$$

и уравнение, следующее из (1) и позволяющее определять распределение директора в определенной зоне Гранжана–Кано, имеет вид

$$(1/2) \sin(2(\varphi - \Delta\varphi)) + l_p [(p_0/d)(\varphi + \Delta\varphi + n\pi) - 2\pi] = 0. \quad (6)$$

B -потенциал задается выражением

$$W_B(\varphi) = -W [\cos^2(\varphi/2) - 1/2], \quad -\pi/2 < \varphi < \pi/2, \quad (7)$$

и соответствующее уравнение для поля директора записывается следующим образом:

$$(1/2) \sin \varphi + l_p [(p_0/d)(\varphi + \Delta\varphi + n\pi) - 2\pi] = 0. \quad (8)$$

5. МОДИФИЦИРОВАННЫЙ D -ПОТЕНЦИАЛ

Как показано в предыдущих теоретических работах [1–3], ненулевое значение производной потенциала поверхностного сцепления на границе потенциальной ямы приводит к скачку по φ на стенках между всеми зонами Гранжана–Кано, включая первые зоны. Другой теоретический вывод состоит в том, что нулевое значение производной потенциала сцепления на границе области определения потенциала будет приводить к исчезновению скачка угла φ отклонения директора на стенках между первыми зонами Гранжана–Кано в том случае, когда сцепление достаточно слабое [1, 3]. Поскольку нулевое значение потенциала поверхностного сцепления на границах потенциальной ямы ($\varphi = \pm\pi/2$) следует из общих физических соображений, целесообразно модифицировать модельный D -потенциал таким образом, чтобы его производная при $\varphi = \pm\pi/2$ обращалась в нуль. Простая модификация модельного потенциала, обеспечивающая соответствующее приравнивание нулю производной, предложенная в работе [3], приводит к исчезновению скачка угла φ направления директора на стенке между первыми зонами Гранжана–Кано. Предложенная в настоящей работе новая модификация модельного D -потенциала наряду с нулевым значением его производной на границе при $\varphi = \pm\pi/2$ также обеспечивает

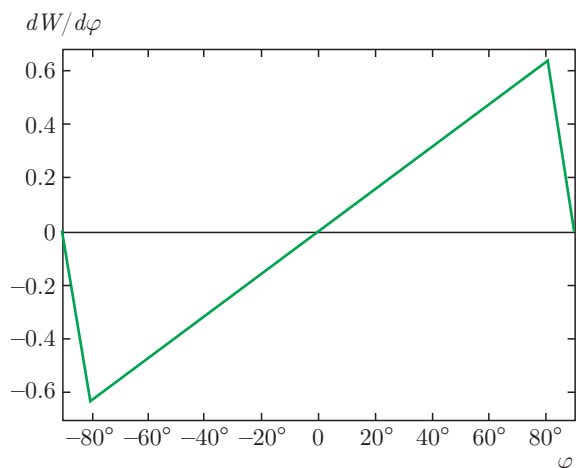


Рис. 3. Предложенный вид производной модифицированного D -потенциала, $\varphi_0 = 80^\circ$

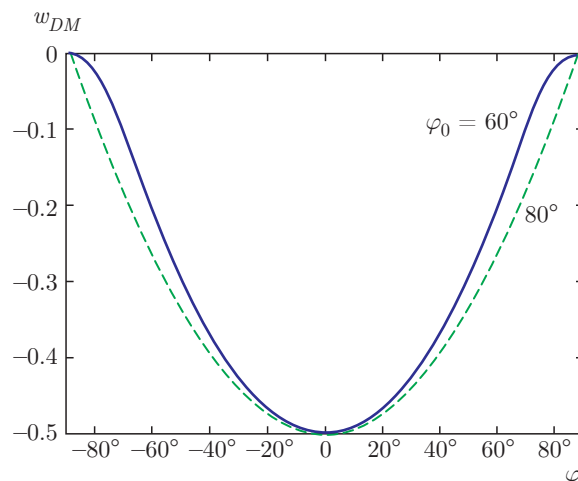


Рис. 4. Модифицированный D -потенциал $w_{DM}(\varphi)$ для двух значений φ_0

непрерывность производной и неизменяемую глубину потенциальной ямы. Более точно, чем в работе [3], модифицированный D -потенциал $w_{DM}(\varphi)$ задается следующей простой моделью.

В области углов $|\varphi| < \varphi_0$ $w_{DM}(\varphi)$ совпадает с модельным D -потенциалом, а в области углов $\varphi_0 \leq |\varphi| \leq \pi/2$ $w_{DM}(\varphi)$ отличается от модельного D -потенциала.

Вид $w_{DM}(\varphi)$ в области углов $\varphi_0 \leq |\varphi| \leq \pi/2$ определяется нашим выбором производной $w_{DM}(\varphi)$. Таким образом, для $w_{DM}(\varphi)$ справедливо выражение

$$w_{DM}(\varphi) = w \left(-1/2 + \int_0^\varphi (dw_{DM}/d\varphi) d\varphi \right),$$

где функция $dw_{DM}/d\varphi$ построена на рис. 3. Мы видим, что производная потенциала состоит из двух линейных отрезков и обращается в нуль при $|\varphi| = \pi/2$. Значение $dw_{DM}/d\varphi$ при $|\varphi| = \varphi_0$ определяется требованием

$$\int_0^{\pi/2} (dw_{DM}/d\varphi) d\varphi = 1/2$$

или $w_{DM}(\pi/2) = 0$. Соответственно при $|\varphi| < \varphi_0$ для потенциала имеет место квадратичная зависимость от угла, $w \propto \varphi^2$, что отвечает D -потенциалу.

На рис. 4 построен модифицированный D -потенциал $w_{DM}(\varphi)$ для двух определенных значений параметра φ_0 .

Отметим, что простая модификация D -потенциала, предложенная в работе [3], записывается в виде следующих формул:

$$w_{DM}(\varphi) = [(2/\pi)^2 \varphi^2 / 2 - 1/2], \quad |\varphi| < \varphi_0, \quad (9)$$

$$w_{DM}(\varphi) = - [(2/\pi)^2 / 2] [(\varphi_0 + \pi/2) / (\pi/2 - \varphi_0)] \times (|\varphi| - \pi/2)^2, \quad |\varphi| > \varphi_0,$$

где параметр φ_0 определяет угол отклонения директора, начиная с которого модифицированный D -потенциал отличается от модельного D -потенциала (2). К недостаткам данной модификации D -потенциала следует отнести существование скачка производной потенциала при $|\varphi| = \varphi_0$. Расчеты, представленные на рис. 5–8, подтверждают известные наблюдения того, что для гладкого потенциала поверхностного сцепления резкий скачок направления директора на стенках между соседними ГК-зонами может отсутствовать для первых ГК-зон. Однако для реализации области непрерывности между соседними зонами ГК-потенциал поверхностного сцепления должен быть достаточно слабым (см. рис. 7, где скачок направления директора для первых ГК-зон исчезает только при значении параметра l_p , соответствующем более слабому поверхностному сцеплению).

Непараллельные легкие оси эффективно соответствуют более слабому потенциалу поверхностного сцепления по сравнению с геометрией коллинеарных легких осей на поверхности клина (см. рис. 8, где скачки угла направления директора исчезают для одной определенной взаимной ориентации легких осей).

Аналогичный эффект исчезновения скачка угла направления директора обнаружен при расчете распределения директора в клине ГК, который демон-

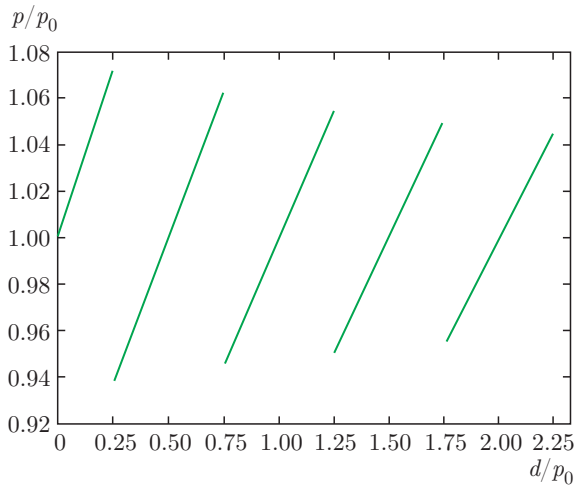


Рис. 5. Рассчитанный нормированный шаг как функция толщины в клине Гранжана–Кано при параллельных легких осях, $\varphi_0 = 85^\circ$, $l_p = 1.5$

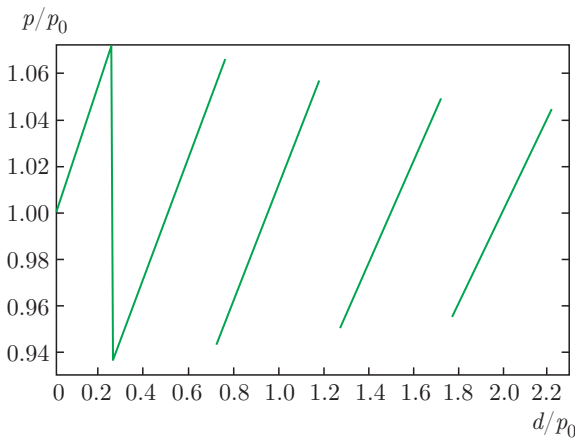


Рис. 6. Рассчитанный нормированный шаг как функция толщины в клине Гранжана–Кано для модифицированного D -потенциала и параллельных легких осей при $\varphi_0 = 80^\circ$, $l_p = 1.5$

стрирует существенную зависимость этого распределения от области, в которой имеет место сглаживание D -потенциала (см. рис. 5, 6, где скачок угла направления директора происходит с увеличением угловой области сглаживания $\pi/2 - \varphi_0$).

В результате определения параметров нового модельного модифицированного D -потенциала путем сравнения теоретических результатов с наблюдаемым распределением директора в некоторой зоне Гранжана–Кано возможно также найти параметр l_p , напрямую связанный с силой сцепления.

Однако имеют место определенные неточности в соответствующей процедуре определения параметра l_p из-за неоднозначности модификации D -потенци-

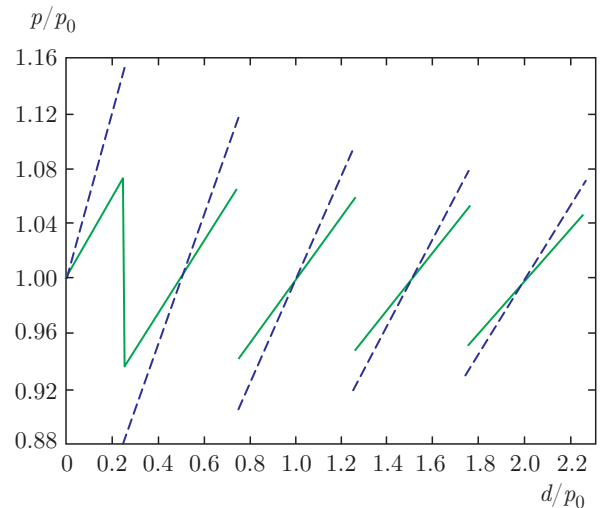


Рис. 7. Рассчитанный нормированный шаг как функция толщины в клине Гранжана–Кано для модифицированного D -потенциала при параллельных легких осях для разных значений поверхностного сцепления: $l_p = 1.5$ (сплошные линии), $l_p = 0.75$ (штриховые); $\varphi_0 = 80^\circ$

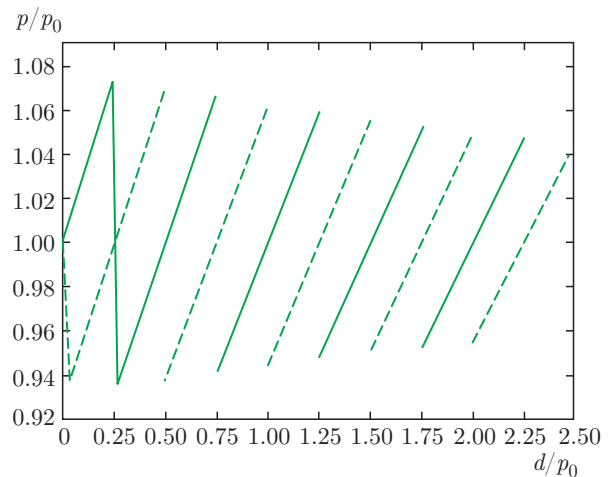


Рис. 8. Рассчитанный нормированный шаг как функция толщины в клине Гранжана–Кано для модифицированного D -потенциала в случае разных ориентаций легких осей: параллельной (сплошные линии) и перпендикулярной (штриховые линии); $l_p = 1.5$, $\varphi_0 = 80^\circ$

ала, в частности в выборе угла, начиная с которого модифицированный потенциал будет отличаться от D -потенциала (целесообразно предположить, что в достаточно большой угловой области вокруг $\varphi = 0$ модифицированный потенциал совпадает с модельным D -потенциалом). Вот почему в качестве первого шага при определении значения параметра l_p можно выбрать его значение, полученное для модельного D -потенциала.

6. СИЛА СЦЕПЛЕНИЯ И РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ДИРЕКТОРА В КЛИНЕ

На распределение директора в клине влияют как сила поверхностного сцепления, так и вид потенциала [1–3]. Следовательно, для определения распределения директора в клине недостаточно знать только глубину потенциальной ямы. Нужно также иметь информацию о форме потенциала поверхностного сцепления. Например, если мы принимаем, что вид потенциала поверхностного сцепления соответствует D -потенциалу, то из формулы (3) можно получить, что параметр l_p следующим образом связан с отклонением директора от легкой оси в n -й зоне на поверхности клина:

$$l_p = (\varphi/2\pi)(2/\pi)^2 \times (d/p_0) / [d/p_0 - n/2 - (\varphi + \Delta\varphi)/2\pi]. \quad (10)$$

Для произвольной формы потенциала сцепления соответствующее соотношение имеет следующий вид:

$$l_p = (1/2\pi)(dw(\varphi - \Delta\varphi)/d\varphi) \times (d/p_0) / [d/p_0 - n/2 - (\varphi + \Delta\varphi)/2\pi], \quad (11)$$

где $w(\varphi)$ — нормализованный модельный (или реальный) потенциал поверхностного сцепления. Подставляя в уравнения (10), (11) экспериментально измеренные значения угла φ для определенных значений d/p_0 и n можно получить параметр l_p , определяющий силу сцепления. Разумеется, для различных модельных потенциалов (2), (5), (7) полученные значения будут различными. Таким образом, чтобы получить верное значение l_p , предпочтительно использовать в этом подходе реальный потенциал сцепления или максимально приближенный к нему. Например, подставляя в уравнение (11) экспериментально измеренное значение $\varphi = \pi/4$ на границе второй зоны Гранжана–Кано [2] (см. также рис. 1) можно получить следующие значения l_p : 0.088, 0.063 и 0.062 соответственно для модельных RP -, B - и D -потенциалов.

Если известен модуль упругого кручения K_{22} для используемого в эксперименте материала, то величина потенциала равна: $W = K_{22}/(p_0 l_p)$. Если нет информации о величине K_{22} , то тогда можно получить отношение глубин потенциальной ямы при различных параметрах, характеризующих процесс поверхностного выстраивания (например, при различных дозах облучения): $W_1/W_2 = l_{p2}/l_{p1}$, где l_{p1} и l_{p2} — значения l_p , соответствующие первой и второй дозам облучения.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Выполненное выше теоретическое изучение оптических свойств клина Гранжана–Кано позволяет сформулировать стратегию экспериментальных исследований, направленных на восстановление потенциала поверхностного сцепления во всей области его определения. Для восстановления потенциала поверхностного сцепления во всей области его определения желательно получить структуру зон Гранжана–Кано, в которой отсутствуют скачки направления директора на первых стенках между соседними зонами Гранжана–Кано, т. е. в области малых толщин клина. Кроме способа достижения этой цели путем уменьшения силы сцепления, есть и другая возможность, основанная на использовании особой геометрии (определенная взаимная ориентация легких осей), что будет сдвигать стенки в область малых толщин клина. Вследствие того, что обнаружение границ между зонами Гранжана–Кано в отсутствие скачка направления директора по-видимому является достаточно сложной экспериментальной проблемой, наблюдение зависимости местонахождения стенок между зонами Гранжана–Кано от взаимной ориентации легких осей на поверхностях клина в случае сохранения скачков угла направления директора на границах между зонами Гранжана–Кано может рассматриваться в качестве полезной предварительной стадии этих исследований. Достигнутый в настоящее время прогресс техники фотоориентации жидких кристаллов [9] позволяет рассчитывать на то, что в ближайшем будущем будет достигнуто восстановление потенциала поверхностного сцепления во всей области его определения. Восстановление потенциала поверхностного сцепления, в свою очередь, предоставит возможность провести более точные измерения силы поверхностного потенциала в экспериментах с клином Гранжана–Кано.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты №№ 16-02-0295_a, 16-02-0679_a, 18-52-05010-Arm_a).

ЛИТЕРАТУРА

1. V. A. Belyakov, S. V. Semenov, and D. V. Shmeliova, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **559**, 31 (2012).
2. K. Nowicka, D. Dardas, W. Kuczyński, V. A. Belyakov, and D. V. Shmeliova, *Liquid Crystals* **41**, 1448 (2014).

3. D. V. Shmeliova and V. A. Belyakov, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **646**, 160 (2017).
4. P. G. de Gennes and J. Prost, *The Physics of Liquid Crystals*, Clarendon Press, Oxford (1993).
5. D. V. Shmeliova and V. A. Belyakov, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **527**, 53 (2010).
6. A. Rapini and M. Papoular, *J. de Phys. Colloq.* **30** (Supl. C4), 54 (1969).
7. V. A. Belyakov, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **467**, 155 (2007); **489**, 54 (2008).
8. В. А. Беляков, *ЖЭТФ* **126**, 89 (2004).
9. V. Kozenkov, G. V. Chigrinov, Hoi-Sing Kwok et al., Surface Anchoring, In *Proc. of Euro Display 11* (2005), p. 246.
10. Г. Цинк, В. А. Беляков, *ЖЭТФ* **112**, 524 (1997).
11. V. A. Belyakov and W. Kuczyński, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **438**, 123 (2005).