



Univerza v Mariboru

Fakulteta za naravoslovje
in matematiko

Ureditev tekočega kristala v feroelektrični nematski fazi v planarnih celicah

Diplomski seminar na študijskem programu 1. stopnje Fizika

Andrej Belcer

Mentorica: prof. dr. Nataša Vaupotič

Maribor, 2022

BELCER, A: Ureditev tekočega kristala v feroelektrični nematski fazi v planarnih celicah

Diplomski seminar, Univerza v Mariboru, Fakulteta za naravoslovje in matematiko, Oddelek za fiziko, 2022.

Povzetek:

V diplomskem seminarju obravnavamo ravnovesno ureditev feroelektričnega nematskega tekočega kristala v planarnih celicah v konstantnem zunanjem električnem polju v primerih zelo močnega planarnega in polarnega homeotropnega sidranja molekul na površinah celice. Krajevno odvisnost smeri polarizacije izračunamo numerično z minimizacijo proste energije, v kateri upoštevamo prispevke elastične, elektrostatične in Landau-Lifshitzove proste energije. Krajevne odvisnosti smeri polarizacije podamo v odvisnosti od debeline celice, velikosti elastičnih konstant, elektrostatičnih lastnosti in jakosti zunanjega električnega polja. V primeru debelih celic brez zunanjega električnega polja prevladuje vpliv lastne elektrostatične energije, zato je polarizacija v večinskem delu celice usmerjena v smeri vzdolž površine, v tankih celicah pa prevladuje vpliv površin. Ali je celica tanka ali debela je določeno z razmerjem med karakteristično dolžino, ki je odvisna od energijske cene deformacije v smeri polarizacije, in debelino celice.

Ključne besede: feroelektrična nematska faza, planarne celice, odvisnost polarizacije, polarno homeotropno sidranje, planarno sidranje.

Abstract:

In the diploma seminar, we discuss the equilibrium structure of a ferroelectric nematic liquid crystal in planar cells in a constant external electric field in the case of a very strong planar and polar homeotropic anchoring of molecules at cell surfaces. A spatial dependence of the polarization direction is calculated numerically by minimizing the free energy, which includes contributions of elastic, electrostatic and Landau-Lifshitz free energy. We find the spatial dependence of polarization direction as a function of the cell thickness, size of the elastic constants, electrostatic properties and strength of an external electric field. In the case of thick cells without an external electric field, the influence of the self-electrostatic energy dominates, so the polarization is oriented in the direction along the surface in the majority of the cell, while in thin cells the influence of surfaces dominates. The regime of the cell being thin or thick is determined by the ratio of a characteristic length, which depends on the energy cost of deformation in the polarization direction, and the cell thickness.

Key words: ferroelectric nematic phase, planar cells, spatial dependence of polarization, polar homeotropic anchoring, planar anchoring.

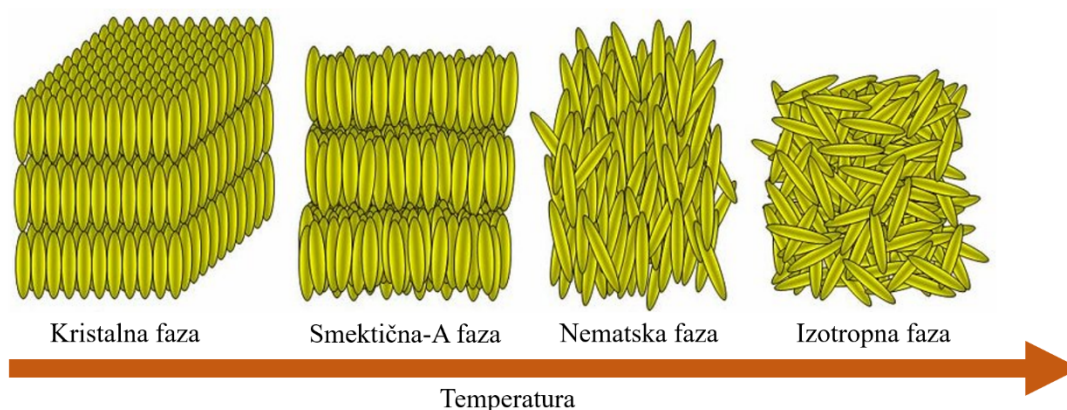
Kazalo vsebine

1 Uvod.....	1
2 Feroelektrični nematski tekoči kristali.....	3
3 Ureditev feroelektrične nematske faze v planarnih celicah	5
3.1 Gostota proste energije.....	8
3.2 Numerični pristop.....	11
4 Rezultati modela	15
4.1 Ureditev v zunanjem električnem polju	19
5 Zaključek.....	26

1 Uvod

Tekoči kristali so materiali, ki lahko zavzamejo tekočokristalno agregatno stanje. To stanje ima lastnosti tako trdne kristalne faze (gradniki so namreč do neke stopnje urejeni) kot tudi tekoče faze (saj so gradniki gibljivi) [1, 2]. Zaradi ureditve gradnikov imajo v tekočokristalni fazi materiali anizotropne lastnosti. Tekočokristalno fazo lahko imajo snovi, katerih gradniki so velike anizotropne organske molekule, kot so npr. velike podolgovate molekule, na katere se bomo v nadaljevanju tudi omejili. Obravnavali bomo termotropne kristale, ki so sestavljeni iz samo enega tipa gradnikov, njihova faza pa je odvisna od temperature. V najpreprostejši tekočokristalni fazi so delno urejene dolge osi molekul. Povprečno usmerjenost dolgih osi molekul znotraj majhnega volumna opišemo z enotskim vektorjem, ki ga imenujemo direktor (\vec{n}), smeri \vec{n} in $-\vec{n}$ pa sta enakovredni.

Obstaja veliko tekočokristalnih faz, ki se med seboj razlikujejo po načinu ureditve molekul. Glavni predstavniki so nematske in smektične faze (Slika 1). V nematski fazi so težišča molekul razporejena naključno po prostoru, dolge osi pa so v povprečju urejene v isti smeri. V smektični fazi se molekule uredijo v plasti, znotraj katerih so dolge osi v povprečju poravnane v isti smeri, med posameznimi plastmi pa se lahko smer ureditve razlikuje. Različni tekočokristalni materiali lahko imajo različno število tekočokristalnih faz.



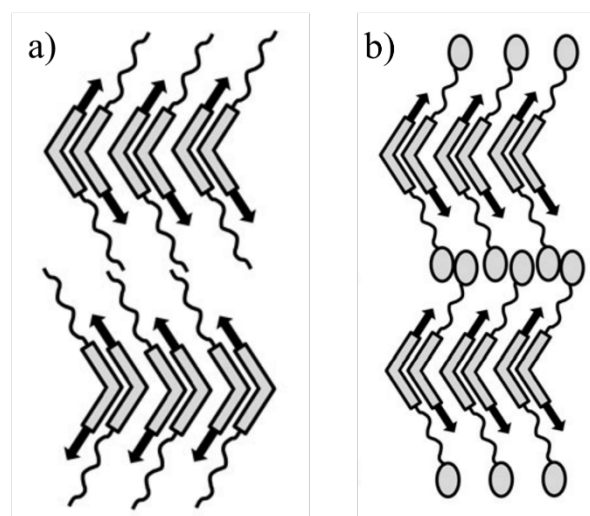
Slika 1. Primer zaporedja faz v termotropnem tekočem kristalu, ki ima smektično-A in nematsko fazo. Prirejeno po [3].

Organske molekule imajo električni dipol, ki je najpogosteje usmerjen v smeri dolge osi molekule ali pravokotno na njo. Kljub temu je v večini snovi polarizacija nič. Komponenta, vzporedna z dolgo osjo, se izpovpreči zaradi enakovrednosti smeri \vec{n} in $-\vec{n}$, pravokotna komponenta pa zaradi enake verjetnosti vseh zasukov molekul okoli njihove dolge osi. To pa ne drži v feroelektrični fazi, za katero je značilna preferenčna usmerjenost molekul, tako da smeri \vec{n} in $-\vec{n}$ nista več enakovredni. To povzroči, da je snov polarna.

Prva odkrita feroelektrična faza je bila feroelektrična smektična-C faza, ki so jo odkrili leta 1975 [4] v materialu DOBAMBC. V smektičnih-C fazah se molekule uredijo v plasti, tako kot v smektični-A fazi (Slika 1), vendar pa so dolge osi nagnjene glede na normalo na plast za kot ϕ . Če molekule nimajo zrcalne simetrije (so kiralne), tako kot v primeru DOBAMBC, se lahko zaradi nagnjenosti molekul v plasti polarizacija ne izpovpreči. Večji kot je kot ϕ , večja je

polarizacija materiala. Smer polarizacije je pri tem omejena na smer pravokotno na ravnino, ki jo določata direktor in normala na plast smektika. Velikost polarizacije DOBAMBC je $6 \times 10^{-5} \text{ C/m}^2$ pri kotu $\phi = 30^\circ$ [5].

Velik korak naprej je bil narejen leta 1996, ko so odkrili, da se lahko molekule z ukrivljeno sredico zlagajo v polarne plasti [6]. Njihov dipolni moment je pravokoten na dolgo os molekule, zaradi svoje oblike pa se zlagajo v plasti, kot je prikazano na Sliki 2. V večini materialov se smer polarizacije od plasti do plasti izmenjuje (Slika 2.a). V tem primeru je faza antiferoelektrična, saj se polarizacija v materialu izpovpreči v nič. Leta 2011 pa so potrdili fazo snovi, v kateri se zaradi povezovanja plasti preko repov molekul molekule v sosednjih plasteh orientirajo tako, da je faza polarna (Slika 2.b) [7]. Polarizacija v tako imenovani feroelektrični smektični-A fazi je velikostnega reda 10^{-3} C/m^2 [7].



Slika 2. a) Antiferoelektrična in b) feroelektrična smektična-A faza iz molekul z ukrivljenimi sredicami. Prirejeno po [6].

Za praktično uporabo tekoče kristale pogosto omejimo v tanke planarne celice. Če na površine dodamo še elektrode, ki jih priključimo na zunanjo napetost, lahko že z napetostmi reda 1 V vplivamo na ureditev molekul v celici. Takšna uporaba je recimo v tekočeh kristalnih (LCD) zaslonih. V nepolarnih tekočih kristalih z zunanjim električnim poljem induciramo električne dipole, na katere polje nato deluje z navorom in tako vrta polarizacijo v smeri zunanjega polja. Hitrost odziva je tako odvisna od električne susceptibilnosti in viskoznosti materiala.

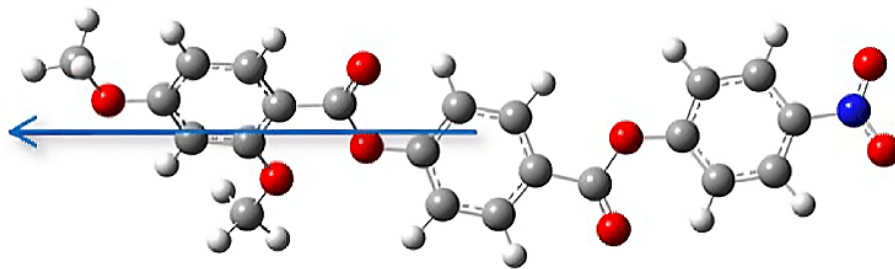
Feroelektrični kristali so že v osnovi polarni, kar jim omogoča visoko občutljivost na zunanje električno polje in s tem hitrejši odziv. Vendar pa smektične faze v tankih celicah tvorijo cikcak defekte, tako da se namesto njih večinoma uporabljajo nematiki, čeprav je njihova odzivnost na električno polje manjša. Leta 2018 pa so prvič poročali o fazi snovi, ki je feroelektrična v nematski fazi [8]. Feroelektrična nematska faza združuje prvini močne odzivnosti na zunanje električno polje in ne-tvorjenja defektov v tankih celicah. Poleg tega je polarizacija v feroelektričnih nematikih še za velikostni red večja od kristalov v feroelektrični smektični-A fazi, saj je reda velikosti 10^{-2} C/m^2 [9].

V diplomskem seminarju bomo obravnavali ureditev molekul feroelektričnega nematika. Zanimala nas bo ureditev v planarnih celicah. Cilj diplomskega seminarja je izračunati krajevno odvisnost direktorja tekočega kristala v feroelektrični nematski fazi v planarnih celicah v odvisnosti od debeline celice in lastnosti kristala ob upoštevanju konstantnega zunanega električnega polja. Uporabili bomo kontinuumski model in ravnovesno strukturo določili z minimizacijo proste energije tekočega kristala v celici. Pri tem bomo upoštevali prispevka elastične in elektrostatične proste energije, prispevek Landau–Lifshitzovih členov, ki opišejo prehod med nematsko in feroelektrično nematsko fazo, in vpliv sidranja molekul na površino celice.

Struktura diplomskega seminarja je sledeča. V drugem poglavju bomo opisali feroelektrične nematske tekoče kristale, nato pa se bomo v tretjem poglavju posvetili numerični minimizaciji proste energije. V četrtem poglavju bomo predstavili rezultate krajevne odvisnosti direktorja v odvisnosti od debeline celice, elastičnih in elektrostatičnih lastnosti nematika in zunanega električnega polja, nato pa v petem povzeli rezultate in podali predloge za nadaljnje delo.

2 Feroelektrični nematski tekoči kristali

Feroelektrično nematsko fazo so prvič opazili v materialu 4-(4-nitrofenoksikarbonil)fenil 4-metoksi-2-metoksibenzoata (Slika 3), ki so ga s kratico poimenovali RM734. Posledično je bilo glede feroelektrične nematske faze do sedaj opravljenih največ raziskav ravno na tem materialu. Molekula ima permanentni električni dipol z velikostjo $3,79 \times 10^{-29}$ Cm, njegova smer pa približno sovпада z dolgo osjo molekule [8]. Lokalna polarizacija kristala globoko v feroelektrični fazi je okoli $(3\sim 6) \times 10^{-2}$ C/m² [9].



Slika 3. Molekula materiala RM734, pri katerem so leta 2018 opazili feroelektrično nematsko fazo. Sive kroglice predstavljajo ogljik, rdeče kisik, bele vodik, modra pa dušik. Modra puščica prikazuje smer električnega dipolnega momenta molekule. Povzeto po [8].

RM734 ima tališče pri temperaturi 139,8 °C, pri kateri preide v nematsko fazo, temperaturo bistrišča, pri kateri tekoči kristali zavzamejo izotropno tekočo fazo, pa ima pri 187,9 °C. Da dosežemo feroelektrično nematsko fazo, moramo nematsko fazo počasi ohlajati pod tališče kristala, kjer pride do faznega prehoda pri temperaturi 132,7 °C [8]. Trenutno še ne vemo, kaj povzroči nastanek feroelektrične nematske faze, predvideva pa se, da je nastanek povezan z gostejšim zlaganjem gradnikov, do katerega pride pri faznem prehodu iz nematske v feroelektrično nematsko fazo [10]. Ta preureditev je povezana z interakcijo med glavami in repi sosednjih molekul. Najpogosteje se nastanek feroelektrične nematske faze pripisuje

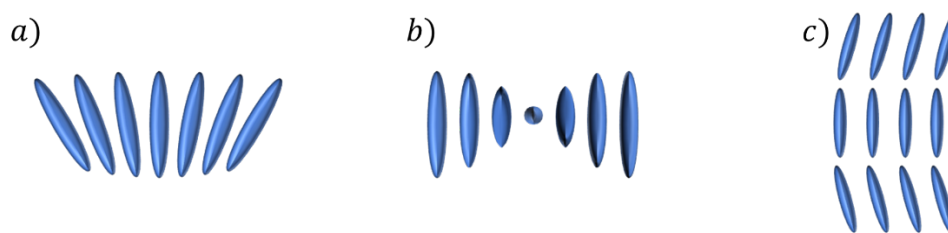
fleksoelektričnemu pojavu [8]. V dielektričnih materialih se namreč v primeru neenakomerne napetosti materiala pojavi spontana polarizacija [11].

Do sedaj so odkrili še nekaj drugih materialov s feroelektrično nematsko fazo, vsi pa so zaenkrat omejeni na molekule podobnih oblik kot RM734 [10, 12, 13]. Takšni sta recimo molekula RM554, za katero je bila s simulacijo napovedana polarizacija $7 \times 10^{-2} \text{ C/m}^2$ [10], in molekula DIO, na kateri so bile opravljene bolj natančne meritve. Velikost njenega električnega dipola je $3,15 \times 10^{-29} \text{ Cm}$, kristal pa ima polarizacijo $4,4 \times 10^{-2} \text{ C/m}^2$ pri temperaturi $50 \text{ }^\circ\text{C}$ [13].

Zelo zanimiva je snov, o kateri so leta 2021 poročali v [12], saj ima feroelektrično nematsko fazo tudi pri sobni temperaturi. Velikost električnega dipola molekule je primerljiva z RM734, in sicer $3,77 \times 10^{-29} \text{ Cm}$, smer dipola pa je prav tako skoraj popolnoma vzdolž dolge osi molekule. Snov običajno nima tekočokristalnih faz. Pri temperaturi $44 \text{ }^\circ\text{C}$ se tali iz izotropne kristalne v izotropno tekočo fazo. Vendar pa pri previdnem ohlajanju izotropne tekoče faze snov pri temperaturi $19,6 \text{ }^\circ\text{C}$ preide direktno v feroelektrično nematsko fazo brez vmesne nematske faze. Material se iz feroelektrične nematske faze vrne v izotropno tekočo fazo pri temperaturi $21,8 \text{ }^\circ\text{C}$, prehod iz feroelektrične nematske faze v kristal pa je okoli temperature $-7 \text{ }^\circ\text{C}$.

V neomejenem tekočem kristalu v nematski fazi se pojavijo domene, znotraj katerih je smer direktorja konstantna, tako kot se pojavijo magnetne domene znotraj feromagnetnih materialov. Monodomenske vzorce dobimo z zunanjim električnim poljem ali pa v tankih celicah, kjer pride do ureditve zaradi vpliva površin. Pri tem morajo biti celice dovolj tanke, da je vpliv njihovih površin dovolj močan skozi celotno celico.

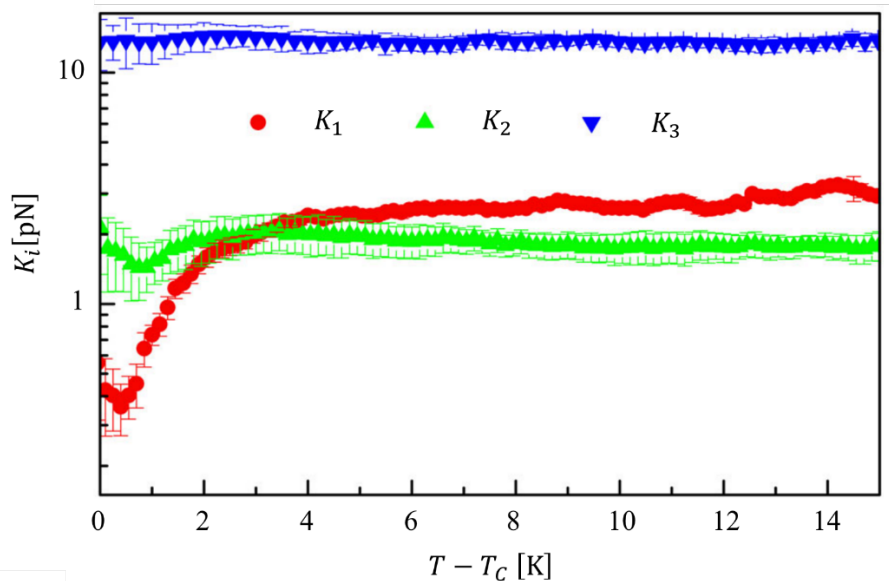
V seminarju nas zanima krajevna odvisnost direktorja v feroelektrični nematski fazi znotraj takšne celice. Za nematike so značilne tri vrste deformacij v smeri direktorja: pahljačasta, zvojna in upogibna (Slika 4). Energijsko ceno lokalnega spreminjanja smeri direktorja opišejo elastične konstante materiala, in sicer K_1 pahljačasto, K_2 zvojno in K_3 upogibno.



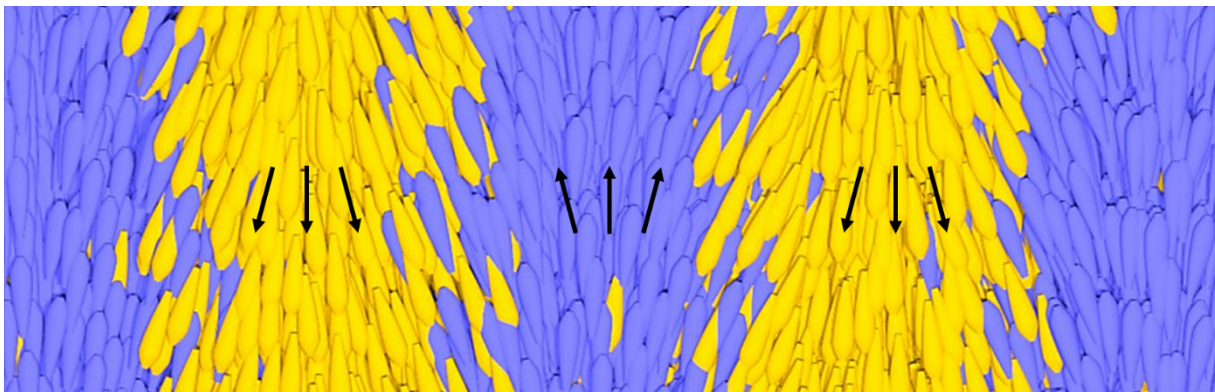
Slika 4. Elastične deformacije direktorja tekočega kristala v nematski fazi. a) Pahljačasta, b) zvojna in c) upogibna deformacija.

Elastične konstante so reda velikosti ($1\sim 10$) pN [2]. Za RM734 so te konstante izmerili v nematski fazi na približno $K_1 \approx 2 \text{ pN}$, $K_2 \approx 2 \text{ pN}$ in $K_3 \approx 12 \text{ pN}$ [8]. Glede na trenutno opravljene raziskave je za feroelektrične nematike značilno, da je K_3 nekajkrat večja kot K_1 in K_2 . V bližini faznega prehoda v feroelektrično nematsko fazo pa so opazili močno zmanjšanje konstante K_1 (Slika 5). To zmanjšanje konstante ob prehodu je značilnost večine feroelektričnih nematikov [10].

Ker je K_1 v feroelektrični nematski fazi tako majhna, je energijsko najugodnejša pahljačasta deformacija, kar omogoča tvorbo polarnih domen (Slika 6). Fazo so zato ob odkritju najprej poimenovali pahljačasta nematska faza [8].



Slika 5. Elastične konstante materiala RM734 merjene v nematski fazi v bližini prehoda v feroelektrično nematsko fazo. K_1 je pahljačasta, K_2 zvojna in K_3 upogibna elastična konstanta materiala. Indeks i v oznaki K_i zavzame vrednosti od 1 do 3 in s tem opredeli, za katero konstanto gre. T je temperatura, pri kateri so bile konstante izmerjene, $T_c = 132,7^\circ\text{C}$ pa temperatura faznega prehoda. Prirejeno po [8].

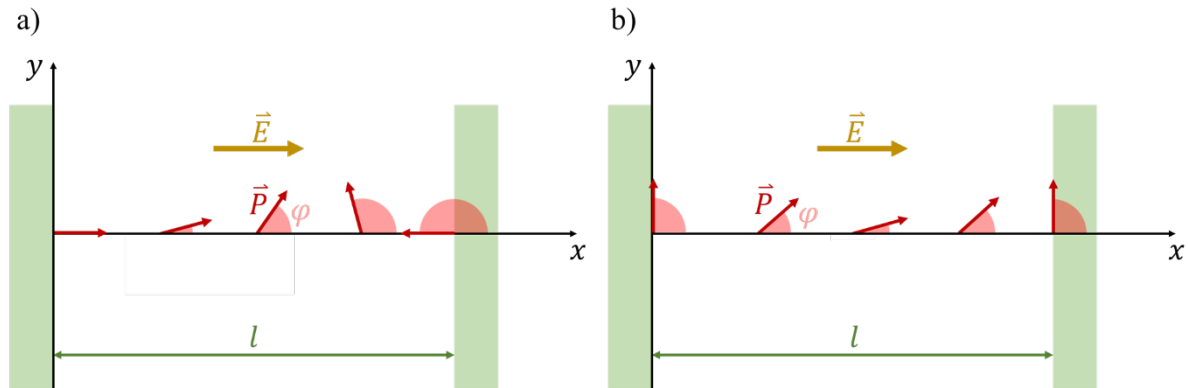


Slika 6. Ureditev feroelektričnega nematika, ki so jo predpostavili v [8]. Rumena in modra barva označujeta obratno orientacijo polarizacije v domenah. Puščice kažejo smer polarizacije. Prirejeno po [8].

3 Ureditev feroelektrične nematske faze v planarnih celicah

Zanima nas ureditev tekočega kristala v feroelektrični nematski fazi v planarni celici z in brez zunanega električnega polja. Koordinatni sistem postavimo tako, da steni celice ležita v ravnini yz . Obravnavamo homeotropno in planarno sidranje molekul na površini celice. V primeru homeotropnega sidranja se molekule ob površini celice z dolgo osjo zasidrajo pravokotno na celico. Ker je smer električnega dipola molekul feroelektričnih nematikov skoraj povsem v smeri njihovih dolgih osi, privzamemo, da sta polarizacija in direktor vzporedna. Obravnavamo

primer, ko polarizacija ob stenah kaže v smer proti notranjosti celice (Slika 7.a), kar pomeni, da je sidranje polarno. Pri planarnem sidranju se dolge osi molekul ob površini usmerijo vzporedno s površino, privzamemo pa, da sta na obeh straneh smeri sidranja enaki in da polarizacija kaže v smeri koordinatne osi y (Slika 7.b).



Slika 7. Prostorska odvisnost polarizacije \vec{P} , označene z rdečimi puščicami, znotraj celice debeline l . Polarizacija z osjo x oklepa kot φ , po usmerjenosti pa je ob stenah celice a) pravokotna na površini ali b) vzporedna s površinama. \vec{E} je zunanje električno polje.

V ravnovesni strukturi je potencialna energija, ki jo v tem primeru imenujemo prosta energija (G), ob upoštevanju robnih pogojev najnižja. Ravnovesno ureditev zato poiščemo z minimizacijo proste energije. Celotna prosta energija je vsota integrala gostote proste energije (f) po volumnu celice (V) in prispevka zaradi površine celice (G_S):

$$G = \int f dV + G_S. \quad (1)$$

Privzamemo, da je sidranje na površino zelo močno. To pomeni, da je direktor ob površini celice v homeotropnem primeru sidranja povsem pravokoten na površino, pri planarnem pa z njo vzporeden. Prispevek energije zaradi vpliva površine je zato konstanten in ga pri minimizaciji ne upoštevamo. Ker je celica omejena samo v smeri x , električno polje pa ima prav tako samo komponento x , je gostota proste energije odvisna samo od koordinate x . Kot bomo pokazali v naslednjem podpoglavju, je gostota proste energije odvisna samo od kota $\varphi(x)$, ki je kot med polarizacijo in osjo x (Slika 7), ter od krajevnega spreminjanja tega kota. Posledično se lahko omejimo na prosto energijo na enoto površine (F) med površinama celice s površino S :

$$F = \int_0^l f \left(\varphi, \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) dx, \quad (2)$$

kjer je $F = G/S$, l pa je debelina celice.

Najti želimo ravnovesno krajevno odvisnost kota φ , pri kateri ima sistem najmanjšo možno vrednost proste energije. Zato sedaj $\varphi(x)$ definirajmo kot sestavljeno funkcijo te ravnovesne odvisnosti kota φ , ki jo označimo s $\varphi_r(x)$, in poljubne variacijske funkcije $\eta(x)$, ki je pomnožena s poljubno konstanto α :

$$\varphi(x) = \varphi_r(x) + \alpha\eta(x). \quad (3)$$

Za variacijsko funkcijo zahtevamo, da velja $\eta(0) = 0$ in $\eta(l) = 0$, ker nas zanimajo samo funkcije, ki ustrezajo robnemu pogoju, ki definira vrednosti $\varphi_r(0)$ in $\varphi_r(l)$. Če v enačbo (2) vstavimo sestavljeno funkcijo iz enačbe (3), vemo, da bo prosta energija minimalna pri $\alpha = 0$ in da zato velja ekstrem:

$$\left(\frac{dF}{d\alpha}\right)_{\alpha=0} = 0, \quad (4)$$

kar je ekvivalentno pogoju:

$$\int_0^l \left[\frac{\partial f}{\partial \varphi} \frac{\partial \varphi(x)}{\partial \alpha} + \frac{\partial f}{\partial \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x}\right)} \frac{\partial \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x}\right)}{\partial \alpha} \right]_{\alpha=0} dx = 0. \quad (5)$$

Ker upoštevamo pogoj $\alpha = 0$, velja $\varphi = \varphi_r$. Enačba (5) je torej:

$$\int_0^l \left[\frac{\partial f}{\partial \varphi_r} \eta(x) + \frac{\partial f}{\partial \left(\frac{\partial \varphi_r}{\partial x}\right)} \frac{\partial \eta(x)}{\partial x} \right] dx = 0. \quad (6)$$

Drugi člen enačbe (6) preoblikujemo z uporabo metode per partes. Tako dobimo:

$$\int_0^l \frac{\partial f}{\partial \left(\frac{\partial \varphi_r}{\partial x}\right)} \frac{\partial \eta(x)}{\partial x} dx = \left(\frac{\partial f}{\partial \left(\frac{\partial \varphi_r}{\partial x}\right)} \eta(x) \right) \Big|_0^l - \int_0^l \left\{ \frac{d}{dx} \left[\frac{\partial f}{\partial \left(\frac{\partial \varphi_r}{\partial x}\right)} \right] \eta(x) \right\} dx. \quad (7)$$

Ker smo se pri izbiri variacijske funkcije že omejili na $\eta(0) = 0$ in $\eta(l) = 0$, vemo, da je prvi člen na desni v enačbi (7) enak nič. Enačbo (6) lahko zato zapišemo kot:

$$\int_0^l \left\{ \frac{\partial f}{\partial \varphi_r} - \frac{d}{dx} \left[\frac{\partial f}{\partial \left(\frac{\partial \varphi_r}{\partial x}\right)} \right] \right\} \eta(x) dx = 0. \quad (8)$$

Integral v enačbi (8) je enak nič za vsako poljubno funkcijo $\eta(x)$ samo takrat, kadar je tudi vrednost v zavitem oklepaju enaka nič. Energija na enoto površine (F) je torej minimalna, kadar zadostimo pogoju

$$\frac{\partial f}{\partial \varphi_r} - \frac{d}{dx} \left[\frac{\partial f}{\left(\frac{\partial \varphi_r}{\partial x} \right)} \right] = 0, \quad (9)$$

ki ga imenujemo Euler-Lagrangeev pogoj. Sedaj moramo definirati še funkcijo gostote proste energije, kar bomo storili v naslednjem podpoglavju.

3.1 Gostota proste energije

Gostota proste energije tekočega kristala je odvisna od prispevka zaradi elastične/deformacijske (f_D), elektrostatične (f_E) in Landau–Lifshitzove (f_L) gostote proste energije [13–15]:

$$f = f_D + f_E + f_L. \quad (10)$$

Gostota proste elastične energije je odvisna od pahljačaste, zvojne in upogibne deformacije direktorja (Slika 4). Imenujemo jo Oseen-Frankova prosta energija in jo z direktorjem lahko izrazimo kot [2]:

$$f_D = \frac{K_1}{2} [\vec{n}(\nabla \cdot \vec{n})]^2 + \frac{K_2}{2} [\vec{n} \cdot (\nabla \times \vec{n})]^2 + \frac{K_3}{2} [\vec{n} \times (\nabla \times \vec{n})]^2, \quad (11)$$

kjer prvi člen opisuje prispevek pahljačaste, drugi zvojne in tretji upogibne deformacije. Deformacijo v nematik vsiljujeta površini celice in zunanje električno polje. Pri izbrani geometriji planarne celice (Slika 7) direktor nima komponente z , zato ga lahko zapišemo kot:

$$\vec{n} = (n_x(x), n_y(x), 0), \quad (12)$$

kjer sta n_x in n_y komponenti x in y direktorja \vec{n} . Ker direktor nima komponente z , je produkt drugega člena enačbe (11) enak nič, kar pomeni, da v tekočem kristalu ne pride do zvojne deformacije, elastična prosta energija pa se poenostavi v:

$$f_D = \frac{K_1}{2} \left(\frac{dn_x}{dx} \right)^2 + \frac{K_3}{2} \left(\frac{dn_y}{dx} \right)^2. \quad (13)$$

Gostoto proste elektrostatične energije zapišemo kot [17, 16]:

$$f_E = \frac{P_x^2}{2 \varepsilon \varepsilon_0} - \vec{P} \cdot \vec{E}, \quad (14)$$

kjer je ε dielektrična konstanta tekočega kristala pri visokih frekvencah, ε_0 influenčna konstanta, \vec{E} pa jakost električnega polja. Prvi člen v enačbi (14) predstavlja lastno gostoto

električne energije, ker se dipoli nahajajo v električnem polju zaradi vezanega naboja zaradi krajevnega spreminjanja polarizacije. Drugi člen opiše gostoto energije dipolov zaradi zunanjega električnega polja. Kot smo že omenili v prejšnjem podpoglavju, smemo privzeti, da smer polarizacije kar sovpada s smerjo direktorja:

$$\vec{P} = P \vec{n}. \quad (15)$$

Edina smiselna usmeritev električnega polja pri delu s planarnimi celicami je v smeri pravokotno na stene celice (torej smer x), zato se enačba (14) še dodatno poenostavi v:

$$f_E = P^2 \frac{n_x^2}{2 \varepsilon \varepsilon_0} - P n_x E. \quad (16)$$

Landau–Lifshitzovi člani [2, 18] opišejo energijo pri prehodu med nematsko in feroelektrično nematsko fazo:

$$f_L = \frac{A}{2} P^2 + \frac{B}{4} P^4 + \frac{b}{2} (\nabla \vec{P})^2, \quad (17)$$

kjer so A , B in b parametri snovi. Parameter B je pozitiven, A pa je odvisen od temperature (T) in je negativen, kadar je tekoči kristal v feroelektrični fazi. Blizu kritične temperature (T_C), pri kateri nastopi prehod iz nematske v feroelektrično nematsko fazo, lahko A v približku zapišemo kot:

$$A = a(T - T_C), \quad (18)$$

kjer je a pozitivna konstanta. Ker je velikost polarizacije določena z minimumom proste energije, smemo zapisati:

$$\frac{df_L}{dP} = 0, \quad (19)$$

kar pomeni, da velja:

$$AP + BP^3 = 0. \quad (20)$$

Ena rešitev enačbe (20) je seveda $P = 0$, kar predstavlja vrednost polarizacije v nematski fazi. V feroelektrični pa je polarizacija neničelna. Tako nam ostane:

$$A + BP^2 = 0, \quad (21)$$

iz česar izpeljemo rešitev:

$$P = \sqrt{\frac{-A}{B}}. \quad (22)$$

Vrednost velikosti polarizacije ima neničelno realno vrednost samo v primeru, ko se tekoči kristal nahaja v feroelektrični fazi ($A < 0$). V tem primeru dobimo za rezultat dve rešitvi, fizikalno smiselna pa je samo pozitivna vrednost. Ker nas zanima ravnovesno stanje pri konstantni temperaturi, je konstantna tudi velikost polarizacije. Iz tega je razvidno, da sta konstantna tudi prva dva člena v enačbi (17), zato ju v modelu lahko izpustimo. Tretji člen v enačbi (17) opiše energijsko ceno krajevnega spreminjanja polarizacije. Gradientni člen predstavlja seštevek kvadratov odvodov vsake komponente P po vsaki koordinati posebej [15]. Ker je velikost polarizacije konstanta, operator divergence deluje zgolj na komponente direktorja. Ker se njegovi komponenti x in y spreminjata samo v smeri x , komponenta z pa je nič, je Landau–Lifshitzova gostota energije enaka:

$$f_L = \frac{b}{2}P \left[\left(\frac{dn_x}{dx} \right)^2 + \left(\frac{dn_y}{dx} \right)^2 \right]. \quad (23)$$

Sedaj vstavimo enačbe (13), (16) in (23) v gostoto proste energije, podano z enačbo (10), in dobimo:

$$f(x) = \frac{K_1}{2} \left(\frac{dn_x}{dx} \right)^2 + \frac{K_3}{2} \left(\frac{dn_y}{dx} \right)^2 + \frac{P^2 n_x^2}{2 \varepsilon \varepsilon_0} - P n_x E + \frac{b}{2} P^2 \left[\left(\frac{dn_x}{dx} \right)^2 + \left(\frac{dn_y}{dx} \right)^2 \right]. \quad (24)$$

Ker je direktor \vec{n} enotski vektor, velja $n_x^2 + n_y^2 = 1$, kar pomeni, da lahko enačbo (24) izrazimo s samo eno neodvisno spremenljivko. Najbolj ugodno je direktor izraziti s kotom φ :

$$(n_x, n_y, 0) = (\cos \varphi, \sin \varphi, 0), \quad (25)$$

saj je na ta način numerična metoda bolj stabilna. Ko v enačbo (24) vstavimo enačbo (25), dobimo gostoto proste energije, izraženo s kotom φ :

$$f(\varphi) = \frac{1}{2} (K_1 \sin^2 \varphi + K_3 \cos^2 \varphi + bP^2) \left(\frac{d\varphi}{dx} \right)^2 + \frac{P^2}{2 \varepsilon \varepsilon_0} \cos^2 \varphi - EP \cos \varphi. \quad (26)$$

Čeprav je v številnih raziskavah predpostavljeno, da je fleksoelektrični pojav vzrok za nastanek feroelektrične nematske faze, fleksoelektričnega člena ne upoštevamo. V primeru, ko je velikost polarizacije konstantna in sidranje na površine zelo močno, pojav namreč nima vpliva na ravnovesno ureditev. Polarizacija zaradi fleksoelektričnih lastnosti materiala je [18, 19]:

$$\vec{P}_f = e_1 \vec{n} (\nabla \cdot \vec{n}) + e_3 \vec{n} \times (\nabla \times \vec{n}), \quad (27)$$

kjer je e_1 pahljačasti fleksoelektrični koeficient, e_3 pa upogibni. Največji fleksoelektrični koeficient za paličaste molekule je e_1 in je velikostnega reda $(1 \sim 10) \times 10^{-12}$ C/m [20, 21]. Ker v našem primeru privzamemo, da smo daleč od prehoda v feroelektrično nematsko fazo, je

spontana polarizacija dovolj velika, da je sprememba velikosti polarizacije zaradi fleksoelektričnega člena zanemarljiva. Poleg tega lahko v dovolj tanki celici privzamemo, da imamo samo eno polarizacijsko domeno (Slika 6).

Fleksoelektrični prispevek h gostoti proste energije dobimo, ker lokalno polje zaradi polarizacije \vec{P} deluje na fleksoelektrično polarizacijo. Gostoto proste energije zaradi pahljačaste fleksoelektrične polarizacije (f_{fl_1}) zapišemo kot [19, 14]:

$$f_{fl_1} = -\gamma_1 \vec{n} (\nabla \cdot \vec{n}) \vec{P}, \quad (28)$$

kjer je $\gamma_1 \sim e_1/3\epsilon\epsilon_0$ energijski fleksoelektrični koeficient. V naši geometriji celice dobimo:

$$f_{fl_1} = \gamma_1 P \sin \varphi \frac{d\varphi}{dx}. \quad (29)$$

Ker smo privzeli, da je velikost polarizacije konstantna, gostota proste fleksoelektrične energije ne vpliva na krajevno odvisnost direktorja. Če namreč f_{fl_1} iz enačbe (29) vstavimo v Euler-Lagrangeev pogoj (enačba (9)), dobimo:

$$\frac{\partial f_{fl_1}}{\partial \varphi_r} - \frac{d}{dx} \left[\frac{\partial f_{fl_1}}{\left(\frac{\partial \varphi_r}{\partial x} \right)} \right] = \gamma P \cos \varphi \frac{d\varphi}{dx} - \gamma P \cos \varphi \frac{d\varphi}{dx} = 0. \quad (30)$$

Sedaj smo definirali vse pomembne člene gostote proste energije. Kot smo že napovedali, moramo to energijo sedaj še minimizirati, da dobimo ravnovesno ureditev $\varphi_r(x)$. To naredimo tako, da enačbo (26) vstavimo v Euler-Lagrangeev pogoj. Dobljeno enačbo rešujemo numerično. Postopek podrobneje razložimo v naslednjem podpoglavju.

3.2 Numerični pristop

Pri numeričnem reševanju Euler-Lagrangeeve enačbe (9) gostoto proste energije (enačba (26)) pretvorimo v brezdimenzijsko obliko. Najprej vpeljemo brezdimenzijsko koordinato \tilde{x} :

$$\tilde{x} = \frac{x}{l}. \quad (31)$$

Steni celice se tako nahajata na koordinatah $\tilde{x} = 0$ in $\tilde{x} = 1$. Sedaj lahko gostoto proste energije zapišemo kot:

$$f = \frac{K_3}{l^2} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{K_1}{K_3} \sin^2 \varphi + \cos^2 \varphi + \frac{bP^2}{K_3} \right) \left(\frac{d\varphi}{d\tilde{x}} \right)^2 + \frac{l^2 P^2}{2 \epsilon \epsilon_0 K_3} \cos^2 \varphi - \frac{l^2 EP}{K_3} \cos \varphi \right]. \quad (32)$$

V enačbi (32) smo izpostavili faktor K_3/l^2 , ki ima enoto gostote proste energije (Nm^{-2}). Člen v oglatem oklepaju enačbe (32) je torej brez dimenzije in ga lahko zato poimenujemo brezdimenzijska gostota proste energije. Pri izpostavljenem členu smo se odločili za konstanto K_3 , ker je ta pri feroelektričnih nematikih večja kot K_1 , velikosti parametra b pa ne poznamo.

Sedaj vpeljemo karakteristično dolžino ξ , ki pove velikostni red razdalje, do katere se pozna deformacija v direktorju zaradi vpliva površine celice:

$$\xi^2 = \frac{\varepsilon \varepsilon_0 K_3}{P^2}. \quad (33)$$

Za dielektrično konstanto izberemo $\varepsilon \approx 5$, kar je splošna približna vrednost za tekoče kristale [2, 22]. Če upoštevamo še, da je $K_3 \approx 10 \text{ pN}$ in $P \approx 10^{-2} \text{ C/m}^2$, je karakteristična dolžina v feroelektrični nematski fazi velikostnega reda $\xi \approx 10^{-9} \text{ m}$. Za primerjavo povejmo, da je velikost enega samega atoma ogljika malo manj kot $0,1 \text{ nm}$, debelina tipičnih tankih celic pa je $(1\sim 10) \mu\text{m}$. V realnih primerih bomo torej obravnavali celice, katerih debelina je velikokrat večja kot karakteristična dolžina ξ .

Enačbo (32) še dodatno preoblikujemo tako, da uvedemo nove brezdimenzijske parametre:

$$\tilde{K} = \frac{K_1}{K_3}, \quad \tilde{b} = \frac{bP^2}{K_3}, \quad \tilde{E} = \frac{E\varepsilon\varepsilon_0}{P}. \quad (34)$$

Parameter \tilde{K} je za feroelektrične nematike manjši kot ena, saj je zanj značilno, da je K_3 največja izmed elastičnih konstant, kot smo že omenili v drugem poglavju. Za njegovo vrednost izberemo $\tilde{K} = 1/6$, kar je razmerje med izmerjenimi elastičnimi konstantami v nematski fazi materiala RM734 (Slika 5). Parameter b še ni bil izmerjen, zato tudi velikosti \tilde{b} ne moremo oceniti. Vpliv parametra \tilde{b} na krajevno odvisnost $\varphi_r(\tilde{x})$ nas bo zato še dodatno zanimal. Ko bomo opazovali vpliv drugih parametrov, ga bomo postavili na vrednost $\tilde{b} = 1$, da bo njegov vpliv primerljiv z elastičnimi koeficienti. Pri parametru \tilde{E} nas zanima člen $(P/\varepsilon\varepsilon_0)$, ki ima enoto jakosti električnega polja, njegova vrednost pa je velikostnega reda 10^8 V/m . To pomeni, da moramo na $1 \mu\text{m}$ debelo celico priključiti napetost 100 V , da bo parameter \tilde{E} velikostnega reda 1. Ob upoštevanju brezdimenzijskih parametrov (enačbe (34)) se brezdimenzijska gostota proste energije (\tilde{f}) zapiše kot:

$$\tilde{f} = \frac{1}{2} (\tilde{K} \sin^2 \varphi + \cos^2 \varphi + \tilde{b}) \left(\frac{d\varphi}{d\tilde{x}} \right)^2 + \frac{l^2}{2\xi^2} \cos^2 \varphi - \frac{l^2}{\xi^2} \tilde{E} \cos \varphi. \quad (35)$$

Brezdimenzijsko gostoto proste energije (enačba (35)) vstavimo v Euler-Lagrangeovo enačbo (9) in dobimo:

$$0 = \tilde{h}_1 + \tilde{h}_2, \quad (36)$$

kjer sta dela enačbe definirana kot

$$\tilde{h}_1 = \frac{l^2 \left[\tilde{E} - \frac{1}{2} \sin(2\varphi) \right]}{\xi^2} + \frac{1}{2} (1 - \tilde{K}) \sin(2\varphi) \left(\frac{d\varphi}{d\tilde{x}} \right)^2 \quad (37)$$

in

$$\tilde{h}_2 = -(\tilde{b} + \cos^2 \varphi + \tilde{K} \sin^2 \varphi) \left(\frac{d^2 \varphi}{d\tilde{x}^2} \right). \quad (38)$$

Enačbo (36) bomo rešili numerično, da dobimo ravnovesno odvisnost kota φ od koordinate x . Kot smo že omenili, je vrednost \tilde{K} manjša kot ena, celica pa bo zaradi fizikalnih omejitev vsaj nekajkrat debelejša od karakteristične dolžine ξ . Na ravnovesno prostorsko ureditev kota φ_r najbolj vpliva prvi člen v enačbi (37), razen v primeru zelo visokega neznanega koeficienta \tilde{b} .

Zaradi numeričnega reševanja prostor med stenama celice najprej diskretiziramo na N delov, tako da je razdalja med dvema sosednjima deloma enaka $\Delta\tilde{x}$ (Slika 8):

$$\Delta\tilde{x} = \frac{1}{N-1}. \quad (39)$$

Točka \tilde{x}_i se tako nahaja na:

$$\tilde{x}_i = \frac{i}{N} \Delta\tilde{x}, \quad (40)$$

kjer je i celo število, ki zavzame vrednosti od 0 do N . Smer direktorja \vec{n}_i in polarizacije \vec{P}_i ($\vec{P}_i = P\vec{n}_i$) v točki \tilde{x}_i definiramo s kotom φ_i :

$$\varphi_i = \varphi(\tilde{x}_i). \quad (41)$$

V vsaki točki \tilde{x}_i izberemo začetno vrednost kota φ_i ($\varphi_i^{(0)}$). Ker želimo, da numerična metoda konvergira k pravi rešitvi $\varphi(\tilde{x}) = \varphi_r(\tilde{x})$, začetne vrednosti ne izberemo naključno, pač pa določimo linearno spreminjanje kota od ene do druge površine celice:

$$\varphi_i^{(0)} = \varphi_0 + (\varphi_N - \varphi_0) \frac{i}{N}. \quad (42)$$

V enačbi (42) sta φ_0 in φ_N kota ob površini celice, njuni vrednosti pa že poznamo, saj sta določeni z robnimi pogoji močnega sidranja. V primeru polarnega homeotropnega sidranja sta $\varphi_0 = 0$ in $\varphi_N = \pi$, v planarnem primeru pa $\varphi_0 = \pi/2$ in $\varphi_N = \pi/2$. Vse vmesne točke bomo od sedaj naprej zaradi jasnosti imenovali notranje točke. Kote φ_i v vseh notranjih točkah izračunamo iz Euler-Lagrangeevega pogoja, zato iz enačbe (36) tvorimo brezdimenzijsko funkcijo \tilde{h}_i :

$$\tilde{h}_i = \tilde{h}_{i_1} + \tilde{h}_{i_2}, \quad (43)$$

kjer sta funkciji \tilde{h}_{i_1} in \tilde{h}_{i_2} definirani kot:

$$\tilde{h}_{i_1} = \frac{l^2 \left[\tilde{E} - \frac{1}{2} \sin(2\varphi_i) \right]}{\xi^2} + \frac{1}{2} (1 - \tilde{K}) \sin(2\varphi_i) \left[\left(\frac{d\varphi}{d\tilde{x}} \right)_i \right]^2 \quad (44)$$

in

$$\tilde{h}_{i_2} = -(\tilde{b} + \cos^2 \varphi_i + \tilde{K} \sin^2 \varphi_i) \left(\frac{d^2 \varphi}{d\tilde{x}^2} \right)_i. \quad (45)$$

Za prvi odvod uporabimo približek:

$$\left(\frac{d\varphi}{d\tilde{x}} \right)_i \approx \frac{\varphi_{i+1} - \varphi_{i-1}}{2 \Delta \tilde{x}}, \quad (46)$$

za drugega pa:

$$\left(\frac{d^2 \varphi}{d\tilde{x}^2} \right)_i \approx \frac{\varphi_{i+1} + \varphi_{i-1} - 2 \varphi_i}{\Delta \tilde{x}^2}. \quad (47)$$

Euler-Lagrangeevemu pogoju zadostimo takrat, ko za vse notranje točke velja $\tilde{h}_i = 0$. Pogoj z začetno linearno odvisnostjo kota φ še ne bo izpolnjen, zato vsakemu kotu φ_i prištejemo popravek $\Delta\varphi_i$, tako da velja pogoj:

$$\tilde{h}_i(\varphi_i + \Delta\varphi_i) = 0. \quad (48)$$

Da dobimo približek vrednosti popravka, enačbo (48) razvijemo v Taylorjev razvoj okoli φ_i do prvega reda:

$$\tilde{h}_i(\varphi_i + \Delta\varphi_i) \approx \tilde{h}_i(\varphi_i) + \Delta\varphi_i \left(\frac{d\tilde{h}}{d\varphi} \right)_i. \quad (49)$$

Iz enačbe (49) izrazimo iskani popravek:

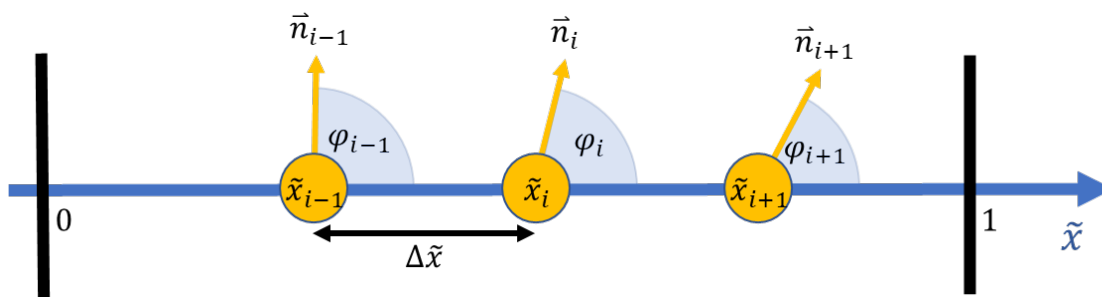
$$\Delta\varphi_i = \frac{-\tilde{h}_i(\varphi_i)}{\left(\frac{d\tilde{h}}{d\varphi} \right)_i}. \quad (50)$$

Sedaj kot v vsaki točki spremenimo za izračunan popravek:

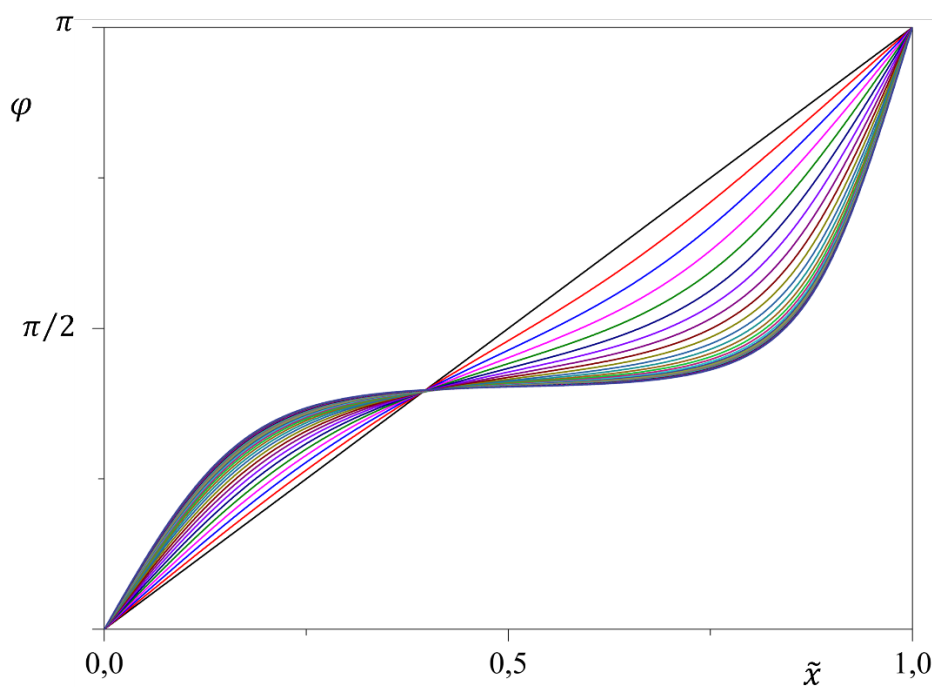
$$\varphi_i^{(n+1)} = \varphi_i^{(n)} + \Delta\varphi_i^{(n)}, \quad (51)$$

kjer je n trenutni korak simulacije. Tako popravljene kote nato vzamemo kot začetno stanje za naslednji korak, korake pa ponavljamo (Slika 9) dovolj dolgo, da postanejo razlike v kotih med dvema sosednjima korakoma manjše kot neka izbrana majhna vrednost, ki smo jo v našem primeru določili za 10^{-7} .

Za izvedbo zgoraj opisane numerične metode sem napisal lastno programsko kodo v C#. Rezultati so prikazani v naslednjem poglavju.



Slika 8. Razdaljo med stenama celice razdelimo na N delov. Razdalja med sosednjima točkama je $\Delta\tilde{x}$, i pa je števec, ki določa točko v prostoru. Točke med stenami, podane s števci od 0 do N , se nahajajo med koordinatama $\tilde{x} = 0$ in $\tilde{x} = 1$. V točki \tilde{x}_i je smer direktorja \vec{n}_i podana s kotom φ_i .



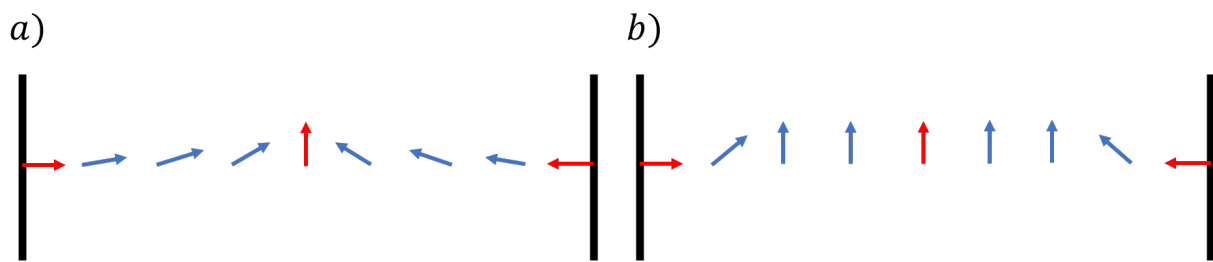
Slika 9. Krajevna odvisnost kota φ od brezdimenzijske koordinate \tilde{x} po različnem številu korakov reševanja brezdimenzijske Euler-Lagrangeeve enačbe (36). Steni celice se nahajata na $\tilde{x} = 0$ in $\tilde{x} = 1$. Funkcije se med seboj razlikujejo za 2500 korakov. Uporabljeni parametri: $\tilde{K} = 1/6$, $\tilde{b} = 1$, $l/\xi = 15$ in $\tilde{E} = 0,3$.

4 Rezultati modela

Z reševanjem Euler-Lagrangeeve enačbe smo poiskali ravnovesno ureditev direktorja v planarnih celicah. Najprej smo obravnavali ureditev brez zunanega električnega polja, kjer smo obravnavali primer polarnega homeotropnega sidranja, nato pa še ureditev pod vplivom zunanega električnega polja, kjer smo poleg polarnega homeotropnega sidranja obravnavali še planarno. Zanimalo nas je, kako na ureditev direktorja v celici vplivajo razmerje med debelino celice in karakteristično dolžino ter velikosti parametrov \tilde{K} , \tilde{b} in \tilde{E} .

Zaradi močnega polarnega homeotropnega sidranja se mora polarizacija od ene do druge površine celice zavrteti za kot π . V primeru brez zunanje električnega polja je ravnovesna ureditev φ_r glede na sredino celice simetrična, saj so pogoji ob obeh površinah enaki. Kot φ_r ima zato na sredini celice vrednost $\pi/2$ (Slika 10). V zelo tankih celicah ima bistveni pomen energijska cena v deformaciji smeri direktorja in polarizacije, ker se mora polarizacija zavrteti od ene površine do sredine celice za kot $\pi/2$ (Slika 10.a). Oblika ravnovesne ureditve φ_r je v tem primeru odvisna od parametrov \tilde{K} in \tilde{b} . V debelih celicah prevlada vpliv lastne elektrostatične proste energije, ki je najnižja, ko je polarizacija poravnana z osjo y (Slika 10.b).

Vpliv debeline celice na ravnovesno ureditev $\varphi_r(\tilde{x})$ feroelektričnega nematika v primeru polarnega homeotropnega sidranja je prikazan na Sliki 11. Dokler je debelina celice manjša kot karakteristična dolžina ($l < \xi$), je celica dovolj tanka, da se vpliv površin pozna skozi celotno celico, ureditev direktorja pa je v teh primerih praktično neodvisna od debeline l (črna in rdeča krivulja na Sliki 11). Kadar je celica zadostno debelejša od karakteristične dolžine ξ , je deformacija smeri direktorja ob površini celice omejena na območje, katerega debelina je reda velikosti karakteristične dolžine. V notranjosti takšnih celic je direktorsko polje homogeno in usmerjeno vzporedno z osjo y . V feroelektričnih nematikih je debelina celice veliko večja kot pa karakteristična dolžina ($l \gg \xi$), zato realno stanje v celicah še najbolj predstavlja temno modra krivulja na Sliki 11.



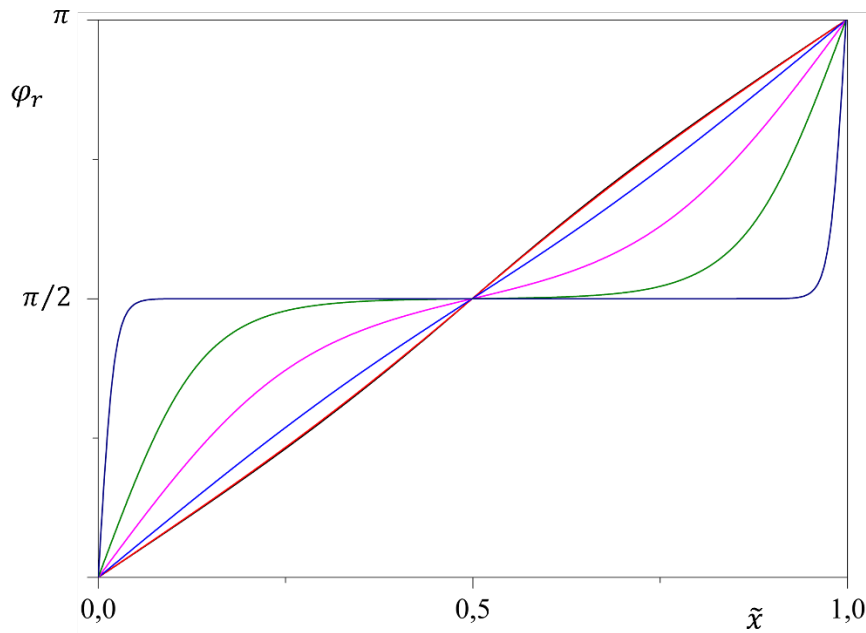
Slika 10. Krajevna odvisnost smeri polarizacije v a) tanki in b) debeli celici ob močnem polarnem homeotropnem sidranju. Z rdečo so označene polarizacije, ki so v vseh celicah enake, z modro pa tiste, katerih orientacija je odvisna od izbire debeline celice in elastičnih ter elektrostatičnih lastnosti materiala.

Vpliv parametra \tilde{b} na ravnovesno ureditev je prikazan na Sliki 12. Ker velikosti \tilde{b} ne poznamo, smo ureditev izračunali za vrednosti \tilde{b} , ki se razlikujejo za več velikostnih redov. Vidimo, da ima večanje parametra \tilde{b} podoben učinek kot tanjšanje celice. Ker \tilde{b} opiše energijsko ceno deformacije v smeri polarizacije, je z višanjem vrednosti parametra ureditev smeri polarizacije in posledično direktorja vse bolj linearna, vpliv površine pa seže vse globlje v celico. Karakteristično dolžino smo v enačbi (33) definirali z elastično konstanto K_3 , ker je bila ta največja izmed znanih konstant. V primerih visoke konstante \tilde{b} pa prevlada ta in je relevantna karakteristična dolžina ξ_b :

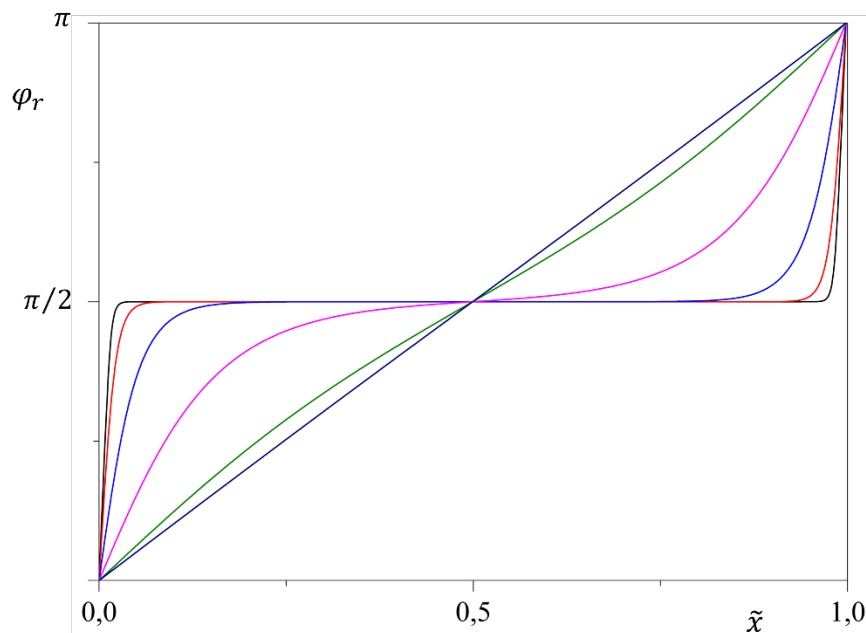
$$\xi_b^2 = \varepsilon \varepsilon_0 b. \quad (52)$$

Da bo vpliv različnih parametrov na ravnovesno ureditev bolj očiten, se v nadaljnjih rezultatih omejimo na celice debelin velikosti $l = (1 \sim 100) \times \xi$, čeprav so celice tako majhnih debelin nerealne. Na Sliki 13 je prikazan vpliv parametra \tilde{K} . Iz primerjave Slike 4 o tipih deformacije in Slike 10.a o krajevni odvisnosti polarizacije znotraj celice je razvidno, da ob površinah celice

v primeru polarnega homeotropnega sidranja prevladuje upogibna deformacija, v središču pa pahljačasta. Parameter \tilde{K} , ki opiše energijsko ceno pahljačaste deformacije, zato večinoma vpliva samo na ureditev v notranjem delu celic, ob robovih pa je ureditev v tanjši (Slika 13.a) in debelejši (Slika 13.b) celici za vse izbrane vrednosti parametra \tilde{K} skoraj enaka.

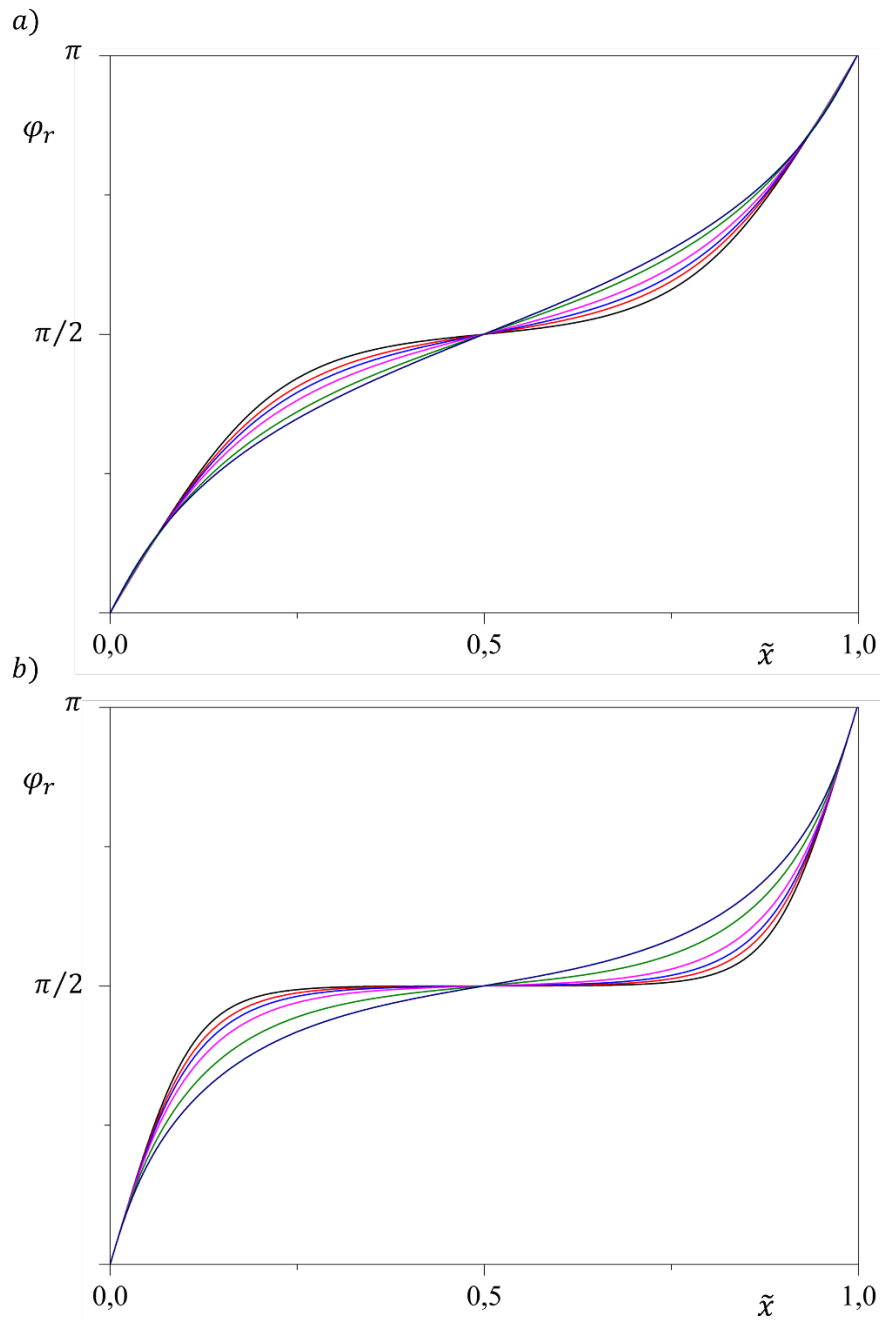


Slika 11. Odvisnost ravnovesnega kota φ_r od brezdimenzijske koordinate \tilde{x} pri različnih razmerjih med debelino in karakteristično dolžino. Črna krivulja: $l/\xi = 1/100$, rdeča: $l/\xi = 1$, modra: $l/\xi = 4$, roza: $l/\xi = 8$, zelena: $l/\xi = 16$, in temno modra: $l/\xi = 100$. Uporabljeni parametra: $\tilde{K} = 1/6$ in $\tilde{b} = 1$.

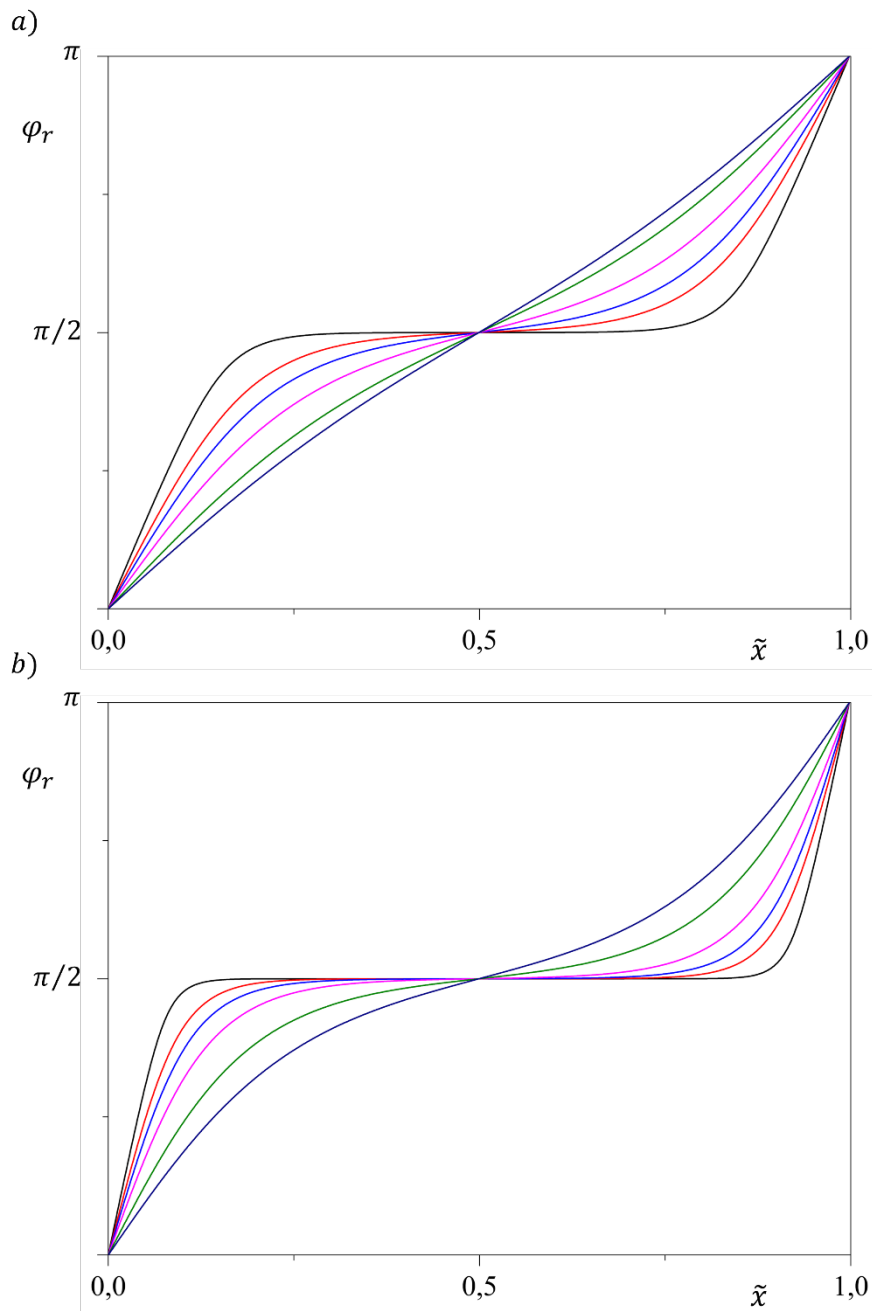


Slika 12. Odvisnost ravnovesnega kota φ_r od brezdimenzijske koordinate \tilde{x} pri različnih izbirah velikostnega reda parametra \tilde{b} v celici, ki je glede na karakteristično dolžino ξ debela. Črna krivulja: $\tilde{b} = 0$, rdeča: $\tilde{b} = 1$, modra: $\tilde{b} = 10$, roza: $\tilde{b} = 10^2$, zelena: $\tilde{b} = 10^3$ in temno modra: $\tilde{b} = 10^4$. Uporabljeni parametra: $\tilde{K} = 1/6$ in $l/\xi = 100$.

Z večanjem parametra \tilde{K} ali \tilde{b} se povečuje vpliv površin. Na Sliki 14 je prikazan še vpliv parametra \tilde{b} , ko je ta primerljivih velikosti kot \tilde{K} ali je od njega večji za velikostni red.



Slika 13. Odvisnost ravnovesnega kota φ_r od brezdimenzijske koordinate \tilde{x} pri različni izbiri parametra \tilde{K} . Črna krivulja: $\tilde{K} = 0$, rdeča: $\tilde{K} = 0,5$, modra: $\tilde{K} = 1$, roza: $\tilde{K} = 2$, zelena: $\tilde{K} = 5$ in temno modra: $\tilde{K} = 10$. Uporabljeni parametri: $\tilde{b} = 1$ in a) $l/\xi = 10$ ter b) $l/\xi = 20$.

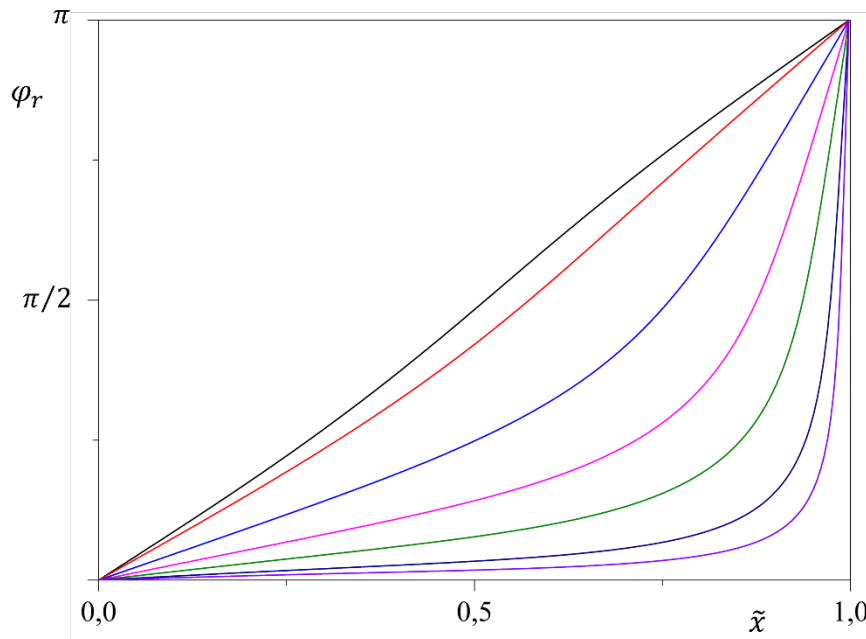


Slika 14. Odvisnost ravnovesnega kota φ_r od brezdimenzijske koordinate \tilde{x} pri različni izbiri parametra \tilde{b} . Črna krivulja: $\tilde{b} = 0$, rdeča: $\tilde{b} = 0,5$, modra: $\tilde{b} = 1$, roza: $\tilde{b} = 2$, zelena: $\tilde{b} = 5$ in temno modra: $\tilde{b} = 10$. Uporabljena parametra: $\tilde{K} = 1/6$ in a) $l/\xi = 10$ ter b) $l/\xi = 20$.

4.1 Ureditev v zunanjem električnem polju

Sedaj predstavimo še rezultate ravnovesne odvisnosti kota $\varphi_r(\tilde{x})$ v primeru, ko se celica nahaja v zunanjem električnem polju. Ker električno polje z navorom deluje na polarizacijo in jo vrti v smeri \vec{E} , v primeru polarnega homeotropnega sidranja funkcija $\varphi_r(\tilde{x})$ ne bo več simetrična. Vpliv debeline celice na ravnovesno ureditev v celici v zelo velikem zunanjem električnem polju ($\vec{E} = 1$) je prikazan na Sliki 15. Električno polje deluje skozi vso celico, deformacije

zaradi površine celice pa so omejene na razdaljo reda ξ ali ξ_b . Debelejša kot je celica, v večjem delu celice bo smer polarizacije približno v smeri \vec{E} .



Slika 15. Odvisnost ravnovesnega kota φ_r od brezdimenzijske koordinate \tilde{x} v celicah različnih debelin v zunanjem električnem polju. Črna krivulja: $l/\xi = 1$, rdeča: $l/\xi = 2$, modra: $l/\xi = 5$, roza: $l/\xi = 10$, zelena: $l/\xi = 20$, temno modra: $l/\xi = 50$ in vijolična: $l/\xi = 100$. Uporabljeni parametri: $\tilde{K} = 1/6$, $\tilde{b} = 1$ in $\tilde{E} = 1$.

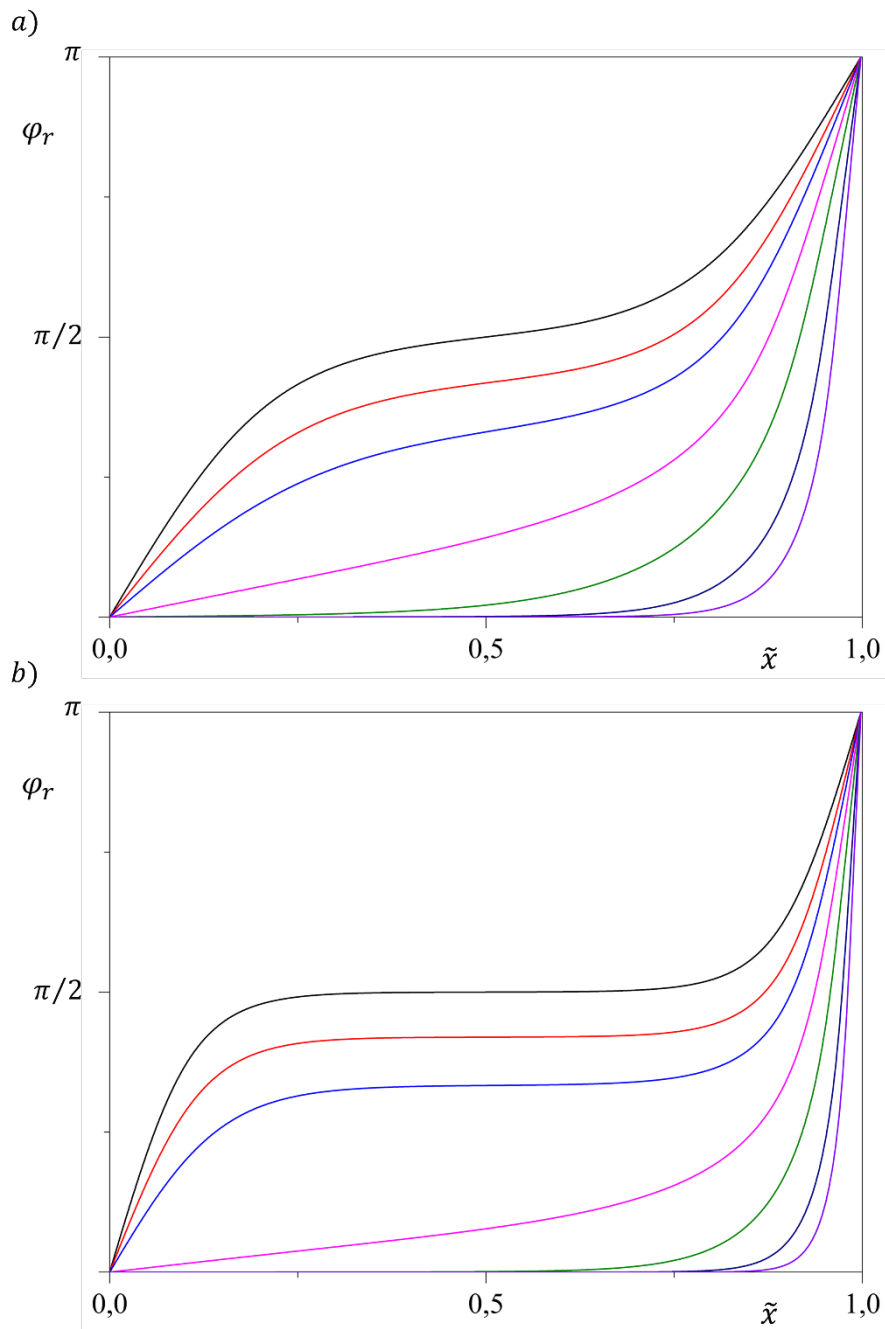
Krajevna odvisnost $\varphi_r(\tilde{x})$ je seveda močno odvisna od jakosti električnega polja (Slika 16). Večje kot je električno polje in debelejša kot je celica, manjši je povprečni kot med smerema polarizacije in električnega polja. To najlažje vidimo, če izračunamo povprečni kot $\langle\varphi\rangle$:

$$\langle\varphi\rangle = \int_0^1 \varphi_r(\tilde{x}) d\tilde{x} \quad (53)$$

v odvisnosti od parametra \tilde{E} , kar je prikazano na Sliki 17. Dokler zunanjega polja ni, zaradi simetrije velja $\langle\varphi\rangle = \pi/2$. Z večanjem jakosti polja in debeljenjem celice se povprečni kot vse bolj približuje vrednosti $\langle\varphi\rangle = 0$.

Vpliv parametrov \tilde{K} in \tilde{b} na ravnovesno ureditev φ_r v primeru zunanjega električnega polja je prikazan na Sliki 18. Ker se z večanjem obeh parametrov povečujeta vpliv površin in energijska cena deformacij, je vpliv parametra \tilde{E} na ureditev vse manj izrazit.

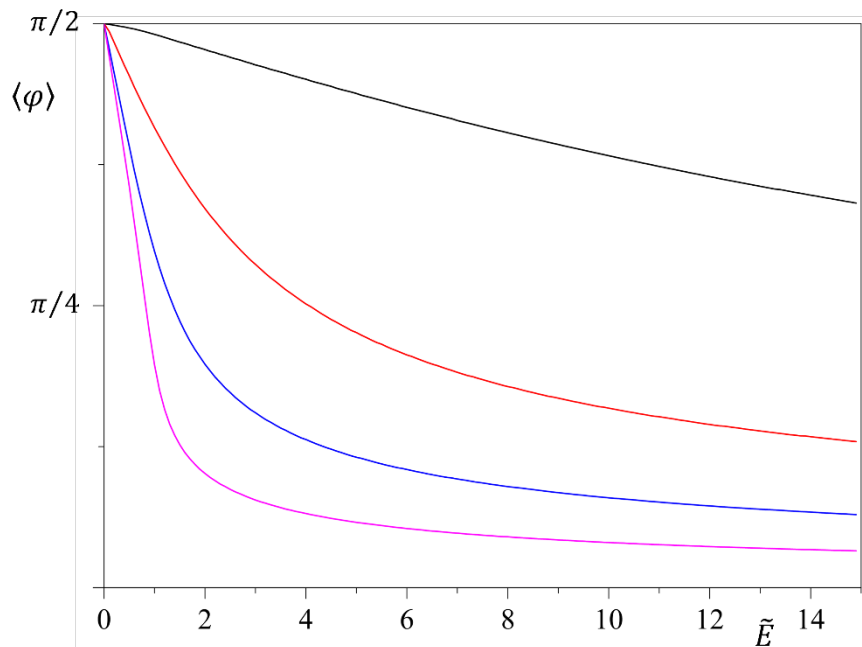
Sedaj pokažimo rezultate še za planarno sidranje. V primeru, ko zunanjega električnega polja ni, sta direktor in polarizacija skozi celico ves čas homogena in kažeta v smeri osi y . Z zunanjim električnim poljem polarizacijo vrtimo v smeri polja, čemur nasprotuje vpliv površin. Vpliv jakosti električnega polja na ureditev φ_r v primeru planarnega sidranja je prikazan na Sliki 19. Kot smo že omenili pri primeru homeotropnega sidranja, se vpliv električnega polja veča tudi z debelino celice, kar je razvidno iz primerjave Slike 19.a in Slike 19.b.



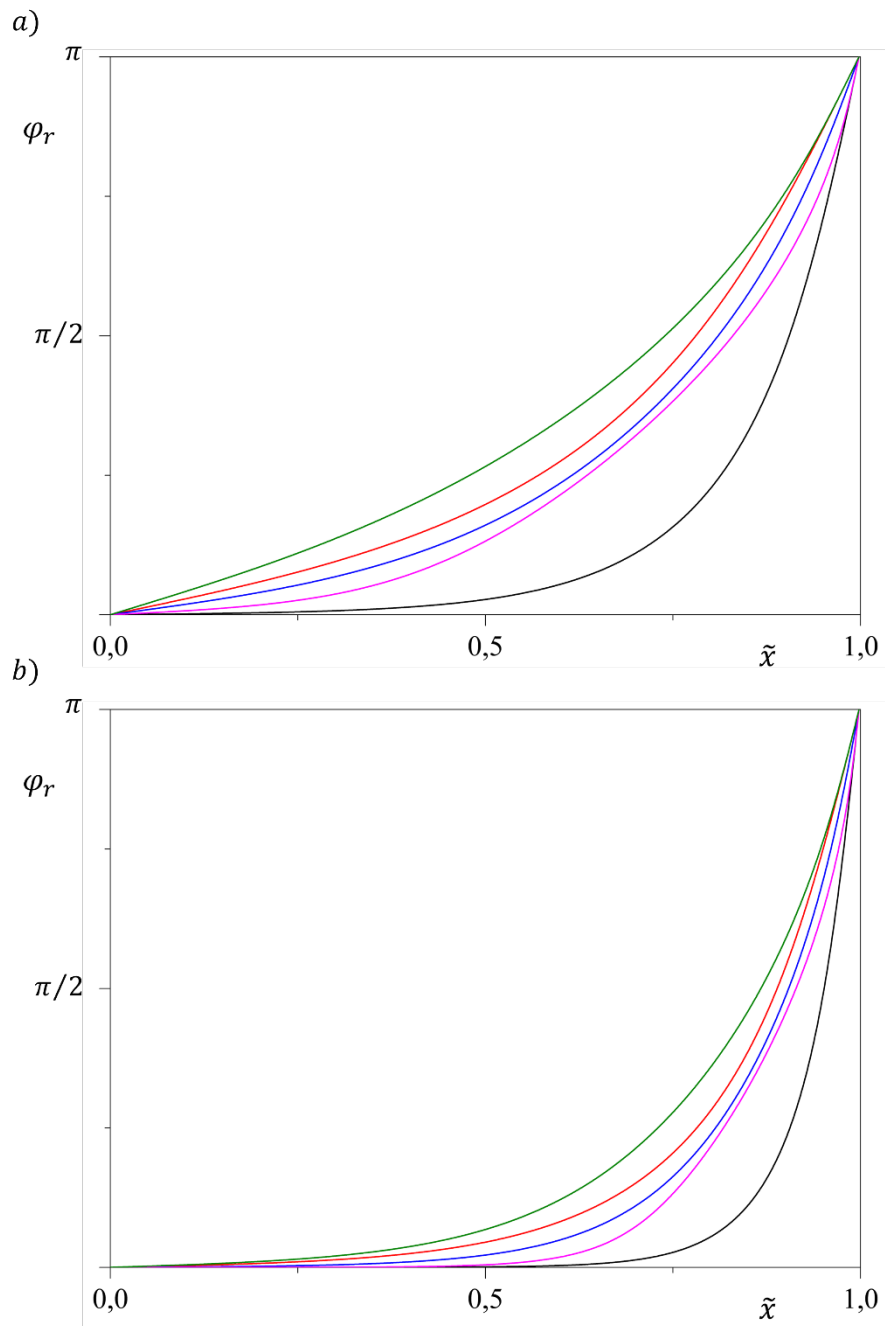
Slika 16. Odvisnost ravnovesnega kota φ_r od brezdimenzijske koordinate \tilde{x} pri različni izbiri parametra \tilde{E} . Črna krivulja: $\tilde{E} = 0$, rdeča: $\tilde{E} = 0,25$, modra: $\tilde{E} = 0,5$, roza: $\tilde{E} = 1$, zelena: $\tilde{E} = 2$, temno modra: $\tilde{E} = 5$ in vijolična: $\tilde{E} = 10$. Uporabljeni parametri: $\tilde{K} = 1/6$, $\tilde{b} = 1$ in a) $l/\xi = 10$ ter b) $l/\xi = 20$.

Vpliv parametrov \tilde{K} in \tilde{b} na ravnovesno ureditev v primeru zunanega električnega polja je prikazan na Sliki 20. Tako kot v primeru polarnega homeotropnega sidranja večanje parametrov \tilde{K} in \tilde{b} zmanjšuje kot, za katerega se zavrti polarizacija zaradi zunanega električnega polja. Pri tem je vredno omeniti, da za razliko od primera polarnega homeotropnega sidranja pri planarnem sidranju ob stenah prevladuje pahljačasta deformacija, deformacija v notranjem delu celice pa je odvisna od velikosti deformacije zaradi zunanega električnega polja. Z večanjem polja se večja vpliv energijske cene upogibne deformacije.

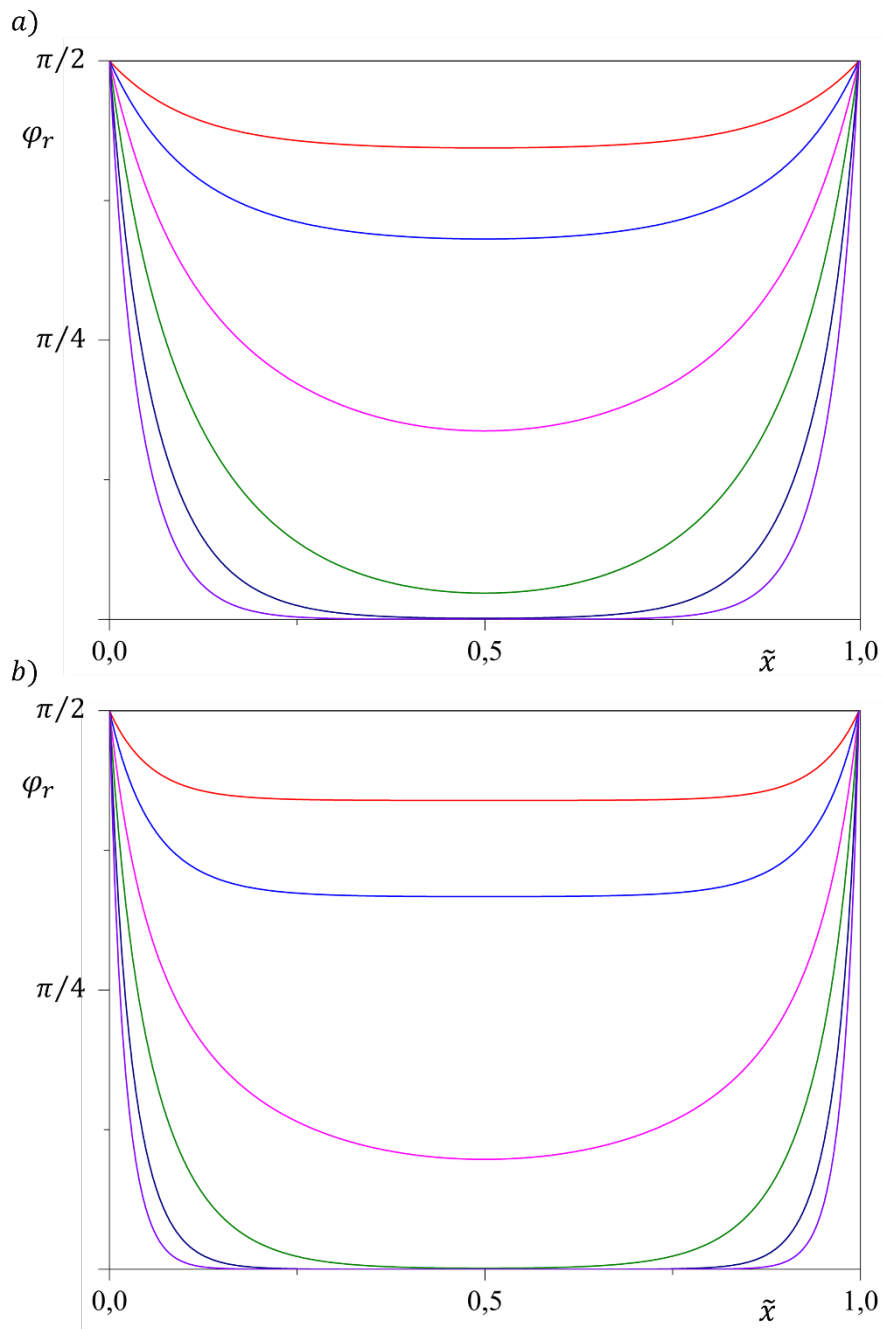
Enako kot v primeru polarnega homeotropnega sidranja se tudi v primeru planarnega sidranja z večanjem jakosti polja in izbiro debelejših celic večja sklopitev polarizacije z zunanjim električnim poljem. Odvisnost povprečnega kota $\langle\varphi\rangle$ od jakosti polja v primeru planarnega sidranja je prikazana na Sliki 21.



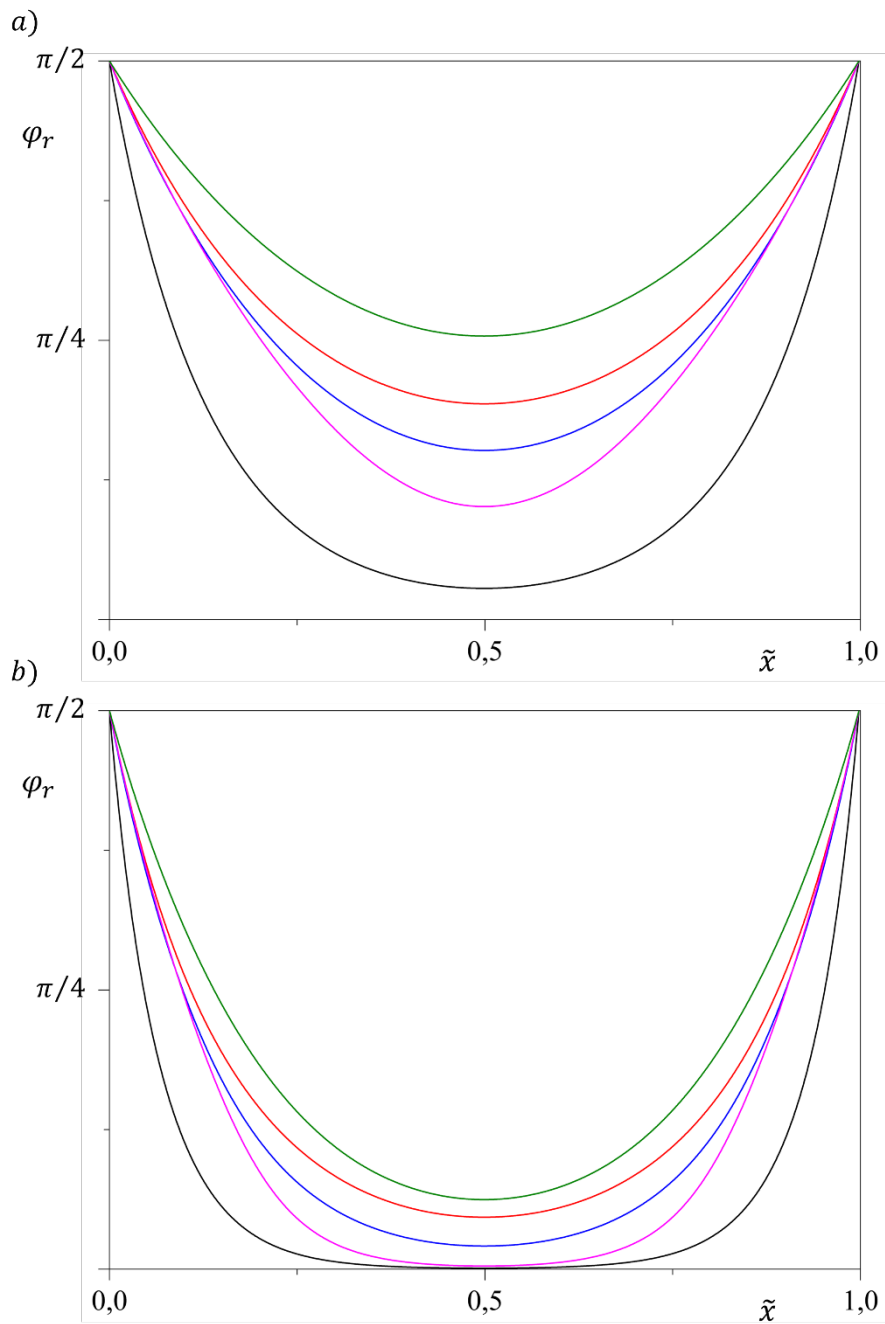
Slika 17. Odvisnost povprečnega kota $\langle\varphi\rangle$ od brezdimenzijskega parametra \tilde{E} za različne izbrane debeline celic pri pogoju polarnega homeotropnega sidranja na površino celice. Črna krivulja: $l/\xi = 1$, rdeča: $l/\xi = 3$, modra: $l/\xi = 6$ in roza: $l/\xi = 12$. Uporabljeni parametri: $\tilde{K} = 1/6$ in $\tilde{b} = 1$.



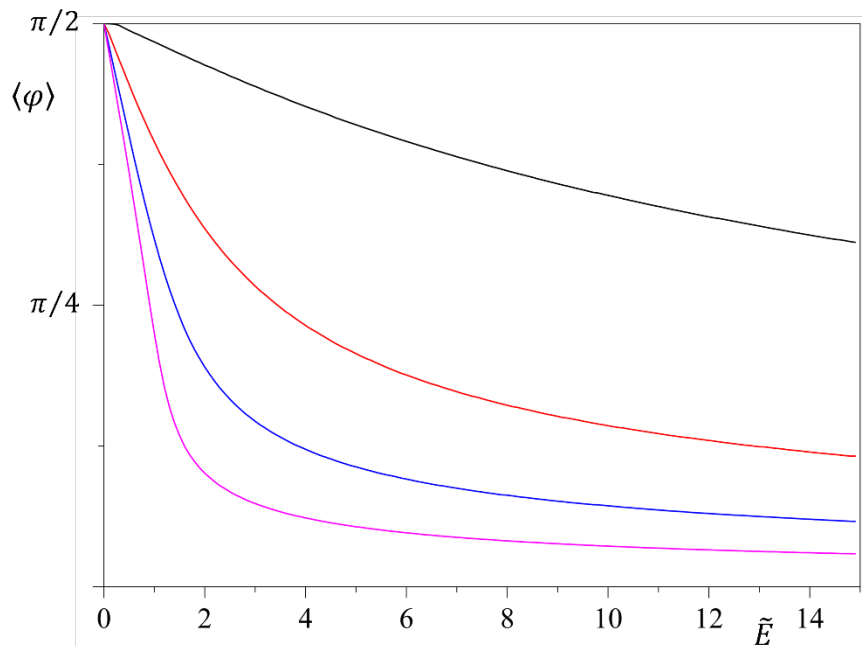
Slika 18. Odvisnost ravnovesnega kota φ_r od brezdimenzijske koordinate \tilde{x} pri različni izbiri parametrov \tilde{K} in \tilde{b} ob upoštevanju zunanega električnega polja. Črna krivulja: $\tilde{K} = 1$ in $\tilde{b} = 1$, roza: $\tilde{K} = 10$ in $\tilde{b} = 1$, modra: $\tilde{K} = 5$ in $\tilde{b} = 5$, rdeča: $\tilde{K} = 1$ in $\tilde{b} = 10$ ter zelena: $\tilde{K} = 10$ in $\tilde{b} = 10$. Uporabljeni parametri: $\tilde{E} = 2$ in a) $l/\xi = 10$ ter b) $l/\xi = 20$.



Slika 19. Odvisnost ravnovesnega kota φ_r od brezdimenzijske koordinate \tilde{x} pri različni izbiri parametra \tilde{E} . Črna krivulja: $\tilde{E} = 0$, rdeča: $\tilde{E} = 0,25$, modra: $\tilde{E} = 0,5$, roza: $\tilde{E} = 1$, zelena: $\tilde{E} = 2$, temno modra: $\tilde{E} = 5$ in vijolična: $\tilde{E} = 10$. Uporabljeni parametri: $\tilde{K} = 1/6$, $\tilde{b} = 1$ in a) $l/\xi = 10$ ter b) $l/\xi = 20$.



Slika 20. Odvisnost ravnovesnega kota φ_r od brezdimenzijske koordinate \tilde{x} pri različni izbiri parametrov \tilde{K} in \tilde{b} ob upoštevanju zunanega električnega polja. Črna krivulja: $\tilde{K} = 1$ in $\tilde{b} = 1$, roza: $\tilde{K} = 10$ in $\tilde{b} = 1$, modra: $\tilde{K} = 5$ in $\tilde{b} = 5$, rdeča: $\tilde{K} = 1$ in $\tilde{b} = 10$ ter zelena: $\tilde{K} = 10$ in $\tilde{b} = 10$. Uporabljeni parametri: $\tilde{E} = 2$ in a) $l/\xi = 10$ ter b) $l/\xi = 20$.



Slika 21. Odvisnost povprečnega kota $\langle \varphi \rangle$ od brezdimenzijskega parametra \tilde{E} za različne izbrane debeline celic pri pogoju planarnega sidranja na površino celice. Črna krivulja: $l/\xi = 1$, rdeča: $l/\xi = 3$, modra: $l/\xi = 6$ in roza: $l/\xi = 12$. Uporabljeni parametra: $\tilde{K} = 1/6$ in $\tilde{b} = 1$.

5 Zaključek

V diplomskem seminarju smo obravnavali ravnovesno ureditev feroelektričnega nematskega tekočega kristala v planarnih celicah v konstantnem zunanjem električnem polju. Privzeli smo, da je polarizacija vzporedna s smerjo direktorja. Ravnovesno ureditev smo opisali s kotom φ , ki opisuje kot med osjo, ki je pravokotna na površino celice, in smerjo direktorja/polarizacije (Slika 7). Krajevno odvisnost kota φ smo izračunali numerično z minimizacijo proste energije, v kateri smo upoštevali prispevke elastične, elektrostatične in Landau–Lifshitzove proste energije.

Obravnavali smo primera zelo močnega polarnega homeotropnega in planarnega sidranja na površini (Slika 7), pri obeh pogojih sidranja pa so nas zanimali vplivi debeline celice, elastičnih in elektrostatičnih lastnosti tekočega kristala ter jakosti zunanjega električnega polja na krajevno odvisnost kota φ v ravnovesnem stanju. Površini celice vsiljujeta ureditev polarizacije ob površini, vpliv česar se pozna do razdalje velikostnega reda karakteristične dolžine. Relevantni sta dve karakteristični razdalji. Karakteristična razdalja ξ (enačba (33)) je odvisna od elastičnih konstant, ker te opišejo energijsko ceno deformacije v smeri direktorja. Druga karakteristična razdalja ξ_b (enačba (52)) je odvisna od parametra b , ki opiše energijsko ceno deformacije v smeri polarizacije. Zaradi visoke polarizacije v feroelektrični nematski fazi so celice za karakteristično dolžino ξ debele, karakteristične dolžine ξ_b pa trenutno ne poznamo, saj parameter b še ni bil izmerjen.

Znotraj planarne celice imamo vedno dve vrsti deformacije, pahljačasto in upogibno. V primeru polarnega homeotropnega sidranja prevladuje upogibna ob površinah celice, pahljačasta pa v notranjosti (Slika 10.a). V tem primeru s spreminjanjem parametra \tilde{K} , ki opiše energijsko ceno pahljačaste deformacije z razmerjem med elastičnima konstantama, vplivamo na ravnovesno krajevno odvisnost φ predvsem v notranjem delu celice (Slika 13), s parametrom \tilde{b} pa čez celo celico (Slika 14), saj parameter \tilde{b} opisuje energijsko ceno obeh tipov deformacije. V primeru planarnega sidranja ob stenah prevladuje pahljačasta deformacija, zastopanost deformacij skozi celico pa je močno odvisna od zunanjega električnega polja.

V primeru debelih celic brez zunanjega električnega polja prevladuje vpliv lastne elektrostatske energije, zato je polarizacija v večinskem delu celice usmerjena v smeri vzdolž površine, v tankih celicah pa prevladuje vpliv površin. Ko celico postavimo v zunanje električno polje z jakostjo električnega polja v smeri pravokotno na površino celice, se zaradi navora električnega polja polarizacija zavrti proti smeri jakosti električnega polja. Z večanjem jakosti polja in z izbiro debelejših celic se vrednost povprečnega kota φ vse bolj približuje kotu 0, kar pomeni, da je usmeritev polarizacije vse bolj v smeri jakosti zunanjega električnega polja (Sliki 17 in 21).

V nadaljevanju raziskave bi bilo potrebno upoštevati še, da velikost polarizacije v splošnem ni konstanta, prav tako pa ni nujno, da sta smeri direktorja in polarizacije vzporedni. Obravnavali bi lahko tudi odziv ureditve na izmenično zunanje električno polje.

LITERATURA IN VIRI

- [1] M. Vilfan in I. Muševič, *Tekoči kristali* (DMFA-založništvo, Ljubljana, 2002).
- [2] P. G. de Gennes in J. Prost, *The Physics of Liquid Crystals Second Edition* (Clarendon Press, Oxford, 1993).
- [3] P. Tallavaara, *Characterization of liquid crystals in porous materials by means of NMR of probe atoms and molecules*, doktorska disertacija (Univerza v Oulu, Oulu, 2008).
- [4] R. B. Meyer, L. Liebert, L. Strzelcki in P. Keller, *Ferroelectric Liquid Crystals*, J. Phys. Lett. **36**, 69 (1975).
- [5] S. Dumrongrattana in C. C. Huang, *Polarization and Tilt-Angle Measurements near the Smectic-A-Chiral-Smectic-C Transition of p-(n-decyloxybenzylidene)-p-amino-(2-methyl-butyl)cinnamate (DOBAMBC)*, Phys. Rev. Lett. **56**, 464 (1986).
- [6] H. Takezoe, *Polar liquid crystals – ferro, antiferro, banana, and columnar -*, Mol. Cryst. Liq. Cryst. **646**, 46 (2017).
- [7] R. A. Reddy, C. Zhu, R. Shao in ostali, *Spontaneous Ferroelectric Order in a Bent-Core Smectic Liquid Crystal of Fluid Orthorhombic Layers*, Science **332**, 72 (2011).

- [8] A. Mertelj, L. Cmok, N. Sebastián in ostali, *Splay Nematic Phase*, Phys. Rev. X **8**, 041025 (2018).
- [9] X. Chen, E. Korblova, D. Dong in ostali, *First-principles experimental demonstration of ferroelectricity in a thermotropic nematic liquid crystal: Polar domains and striking electro-optics*, Proc. Nat. Acad. Sci. U.S.A. **117**, 14021 (2020).
- [10] R. J. Mandle, N. Sebastián, J. Martinez-Perdiguero in A. Mertelj, *On the molecular origins of the ferroelectric splay nematic phase*, Nat. Commun. **12**, 1 (2021).
- [11] R. B. Meyers, *Piezoelectric effects in liquid crystals*, Phys. Rev. Lett. **22**, 918 (1969).
- [12] A. Manabe, M. Bremer in M. Kraska, *Ferroelectric nematic phase at and below room temperature*, Liq. Cryst. **48**, 1079 (2021).
- [13] H. Nishikawa, K. Shiroshita, H. Higuchi in ostali, *A Fluid Liquid-Crystal Material with Highly Polar Order*, Adv. Mater. **29**, 1702354 (2017).
- [14] N. Sebastián, L. Cmok, R. Mandle in ostali, *Ferroelectric-Ferroelastic Phase Transition in a Nematic Liquid Crystal*, Phys. Rev. Lett. **124**, 037801 (2020).
- [15] S. M. Shamid, S. Dhakal in J. V. Selinger, *Statistical mechanics of bend flexoelectricity and the twist-bend phase in bent-core liquid crystals*, Phys. Rev. E **87**, 052503 (2013).
- [16] M. Škarabot, I. Muševič in R. Blinc, *Solitonlike dynamics in submicron ferroelectric liquid-crystal cells*, Phys. Rev. E **57**, 6725 (1998).
- [17] M. Nakagawa in T. Akahane, *Effect of polarization field on elastic deformation in a 180° twisted sample of chiral smectic C liquid crystal*, J. Phys. Soc. Jpn. **55**, 1516 (1986).
- [18] E. I. Kats, *Stability of the uniform ferroelectric nematic phase*, Phys. Rev. E **103**, 012704 (2021).
- [19] P. Oswald in P. Pieranski, *Nematic and Cholesteric Liquid Crystals* (CRC Press, Boca Raton, 2005)
- [20] I. Dozov, P. Martinot-Lagarde in G. Durand, *Flexoelectrically controlled twist of texture in a nematic liquid crystal*, J. Phys. Lett. **43**, 365 (1982).
- [21] N. V. Madhusudana in G. Durand, *Linear flexo-electro-optic effect in a hybrid aligned nematic liquid crystal cell*, J. Phys. Lett. **46**, 195 (1985).
- [22] Z. Belarbi, G. Guillaud, M. Maitrot, J. Huck in ostali, *Dielectric measurements of liquid crystals*, Rev. Phys. Appl. **23**, 143 (1988).