

## ПРОПУСКАНИЕ СВЕТА СЛОЕМ КАПСУЛИРОВАННОГО ПОЛИМЕРОМ ЖИДКОГО КРИСТАЛЛА ПРИ НЕОДНОРОДНОМ СЦЕПЛЕНИИ НА ПОВЕРХНОСТИ КАПЕЛЬ

© 2016 г. В. А. Лойко\*, В. Я. Зырянов\*\*, А. В. Конколович\*, А. А. Мискевич\*

\* Институт физики им. Б.И. Степанова НАН Беларуси, 220072 Минск, Беларусь

\*\* Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского Отделения РАН, 660036 Красноярск, Россия

E-mail: loiko@dragon.bas-net.by

Поступила в редакцию 14.10.2014 г.

В окончательной редакции 08.07.2015 г.

Развита модель и реализован алгоритм расчета коэффициента когерентного (направленного) пропускания света слоем из капель жидкого кристалла (ЖК) в полимерной матрице. Модель основана на приближении аномальной дифракции Хюльста для описания рассеяния на отдельной частице и приближении Фолди-Тверского для когерентного поля. Она позволяет исследовать капсулированные полимером жидкокристаллические (КПЖК) материалы с однородным и неоднородным межфазным поверхностным сцеплением на поверхности капли. Для расчета конфигурации поля локального директора в капле использован релаксационный метод решения задачи минимизации объемной плотности свободной энергии. Проведена верификация модели в сопоставлении с экспериментом при инверсном режиме ионной модификации межфазной границы капля ЖК-полимер. Модель позволяет решать задачи оптимизации электрооптического отклика КПЖК пленок в зависимости от их толщины и оптических характеристик полимерной матрицы, размеров, полидисперсности, концентрации и параметров анизотропии капель. На ее основе предложена методика оценки размера капель ЖК по данным о зависимости коэффициента пропускания от напряжения.

DOI: 10.7868/S0030403416010128

### ВВЕДЕНИЕ

Управляемое рассеяние света в композитных жидкокристаллических материалах под воздействием внешнего электрического или магнитного поля является одним из широко исследуемых и перспективных способов формирования отклика в устройствах отображения информации, телекоммуникации, оптоэлектронике, фотонике [1–6].

Среди композитных жидкокристаллических материалов особое место занимают капсулированные полимером жидкокристаллические (КПЖК) материалы [4, 7, 8]. Они представляют собой полимерные пленки с диспергированными в них каплями жидкого кристалла (ЖК). В режиме светорассеивающей моды электрооптические эффекты в КПЖК пленках реализуются путем изменения конфигурации молекул ЖК в каплях под действием внешнего управляющего поля.

Можно выделить два подхода, используемые для управления электрооптическими свойствами КПЖК пленок.

Один из них (традиционный) основан на классическом эффекте Фредерикса [7–10]. Его суть состоит в том, что внешним управляющим полем изменяют ориентацию молекул ЖК в объеме

ЖК-капель. При этом поверхностное сцепление молекул ЖК с полимерной матрицей остается неизменным. После выключения поля внутренняя ориентационная структура ЖК-капель возвращается в исходное состояние за счет упругих сил, свойственных ЖК. Классический эффект Фредерикса лежит в основе функционирования современных электрооптических ЖК-устройств.

Другой подход развивается на основе так называемых локальных переходов Фредерикса [11, 12], представляющих собой трансформацию объемной ориентации оптической оси (директора) вследствие изменения баланса ориентирующего действия различных поверхностных сил. Типичным примером является переориентация слоя нематического ЖК, экранированного тонкой аморфной пленкой (толщиной  $\sim 10$  нм) от кристаллической подложки. При этом ориентирующее воздействие пленки и подложки должно быть различным, например планарным и гомеотропным. Вариация температуры [13] или толщины пленки [14] изменяет баланс ориентирующего действия и инициирует переориентацию слоя ЖК. В практических приложениях наиболее востребованы способы модификации граничных условий с применением электрического поля.

Например, в работе [15] для этого использованы подложки, покрытые сегнетоэлектрическим ЖК-полимером. Азимутальная переориентация директора в ЖК-полимере при изменении полярности приложенного напряжения вызывает соответствующее ориентационное превращение в объеме нематика, граничащего с такой подложкой.

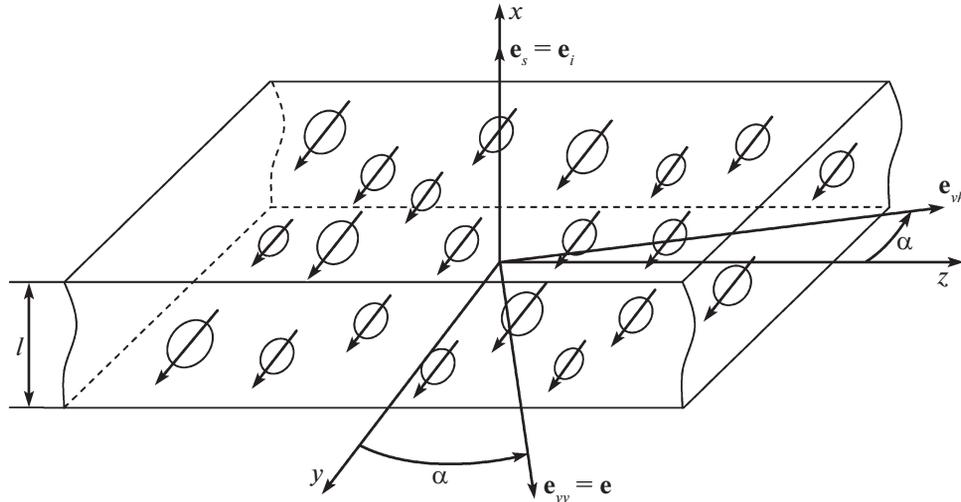
Использование локальных переходов Фредерика создает возможности для разработки новых типов средств отображения информации. Поэтому актуальна задача поиска путей их реализации. Один из них – это использование капсулированных полимером ЖК, на поверхности капель которых создается неоднородное поверхностное сцепление [16, 17]. В этом случае внешнее воздействие вначале изменяет ориентацию молекул ЖК в приграничном слое ЖК-капель, что затем ведет к переориентации всего объема ЖК. Этот подход, базирующийся на принципиально ином по сравнению с классическим эффектом Фредерика механизме переориентации внутренней структуры ЖК-капель, позволяет создавать КПЖК слои с малым энергопотреблением.

Модификация межфазного поверхностного сцепления достигается путем использования ионообразующих сурфактантов (поверхностно активных веществ) в процессе изготовления КПЖК пленок. В зависимости от концентрации сурфактанта могут иметь место прямой и инверсный режимы электроуправляемой ионной модификации межфазной границы. Прямой режим реализуется при низкой концентрации ионного сурфактанта. При этом в исходном состоянии в отсутствие управляющего поля капли нематика имеют однородное тангенциальное сцепление и биполярную конфигурацию локальных оптических осей. Инверсный режим [17] реализуется при высокой концентрации ионного сурфактанта. В этом случае исходной структурой капель нематика является радиальная конфигурация директора с однородными нормальными граничными условиями. Воздействие управляющего электрического поля ведет к образованию областей с разным поверхностным сцеплением на поверхности капли. Эти области определяют ориентационную структуру молекул ЖК в капле. Доля областей с нормальной и планарной ориентацией и соответственно ориентационная структура молекул ЖК зависят от величины поля. В сильном поле реализуется однородное поверхностное сцепление. Тип сцепления противоположен исходному, реализуемому в отсутствие поля: если в отсутствие поля реализуется планарное сцепление, то в сильном поле имеет место гомеотропное сцепление, и наоборот. Обратим внимание, что ЖК-капли с модифицированным поверхностным сцеплением представляют собой не что иное, как частицы Януса [18, 19] с управляемыми

свойствами. Одна часть капли имеет планарное сцепление, другая – гомеотропное. Их соотношение зависит от величины приложенного поля.

При исследовании рассеяния света в дисперсных КПЖК слоях необходимо учитывать оптическую анизотропию ЖК, изменение поверхностного сцепления и внутренней структуры капель в управляющем поле, концентрацию капель, многократность рассеяния света и другие параметры [4, 8]. Строгие методы решения прямых и обратных задач рассеяния света КПЖК пленками, учитывающие комплексное влияние перечисленных факторов, отсутствуют. Основное внимание уделяется разработке приближенных методов решения, позволяющих выявить основные закономерности формирования электрооптического отклика с целью его оптимизации [20–35].

В настоящей работе на основе приближений Фолди–Тверского [36] для описания среднего поля [8] и аномальной дифракции для описания рассеяния на отдельной частице [25, 37] разработана оптическая модель для анализа коэффициентов когерентного (направленного) пропускания света КПЖК слоем при освещении его линейно поляризованным и неполяризованным монохроматическим излучением. Модель позволяет исследовать слои с однородным [4, 8] и неоднородным [16, 17, 33, 35] межфазным поверхностным сцеплением. Рассмотрен слой из полидисперсных ориентированных капель нематического ЖК эллипсоидальной формы. Описан релаксационный метод решения задачи минимизации объемной плотности свободной энергии для нахождения внутренней структуры ЖК-капель в зависимости от отношения долей поверхности, имеющих нормальное и гомеотропное сцепление. Проведен анализ коэффициента когерентного пропускания КПЖК слоя, состоящего из сферических ЖК-капель, с учетом влияния неоднородности поверхностного сцепления капли. Проведена верификация разработанной оптической модели в сопоставлении с экспериментом при инверсном режиме ионной модификации межфазной границы ЖК-полимер, когда в капле в отсутствие управляющего поля реализуется радиальная структура поля директора. Разработанная оптическая модель позволяет решать задачи оптимизации электрооптического отклика КПЖК слоя с целью повышения контраста и глубины модуляции прямопрошедшего излучения в зависимости от параметров пленки и составляющих ее капель, в которых реализуется однородное или неоднородное поверхностное сцепление, в частности размеров, параметров анизотропии, полидисперсности, концентрации ЖК-капель и толщины пленки.



**Рис. 1.** Схематическое представление геометрии освещения и ориентационной структуры КПЖК слоя;  $(x, y, z)$  – лабораторная система координат,  $l$  – толщина слоя,  $e_i$  – единичный вектор в направлении падения света,  $e_s$  – единичный вектор рассеянной прямо вперед волны,  $e_{vv}$  и  $e_{vh}$  – единичные векторы  $vv$ - и  $vh$ -компонент рассеянной волны с поляризациями в плоскости поляризации ( $e_p, e$ ) падающей волны и ортогональной к ней плоскости ( $e_i, e_{vh}$ ) соответственно,  $\alpha$  – угол поляризации падающего света.

### ОСНОВНЫЕ СООТНОШЕНИЯ ДЛЯ КОЭФФИЦИЕНТОВ КОГЕРЕНТНОГО ПРОПУСКАНИЯ КПЖК СЛОЯ

Найдем коэффициенты когерентного пропускания КПЖК слоя толщины  $l$  при освещении линейно поляризованным и неполяризованным монохроматическим излучением. Пусть слой состоит из полидисперсных капель ЖК эллипсоидальной формы, ориентированных в одном направлении в плоскости слоя. Выберем лабораторную систему координат  $(x, y, z)$  таким образом, чтобы ось  $x$  совпала с нормалью к КПЖК слою, а плоскость  $(y, z)$  – с его передней границей (рис. 1). Пусть длинные оси ЖК-капель в слое ориентированы вдоль оси  $y$  лабораторной системы координат  $(x, y, z)$ . Оптические оси (директора) [4] капель  $N$  совпадают с их длинными осями и соответственно также ориентированы вдоль оси  $y$ . Внутренняя структура и анизотропия одинаковы у всех капель.

Рассмотрим сначала случай освещения по нормали линейно поляризованной плоской волной в направлении единичного вектора  $e_i$ . На рис. 1  $e$  – единичный вектор поляризации падающей волны,  $\alpha$  – угол поляризации падающего излучения, отсчитываемый относительно оси  $y$ ,  $e_s$  – единичный вектор рассеянной волны. В рамках разрабатываемой модели мы рассматриваем случай рассеяния в направлении волнового вектора падающей волны, т.е.  $e_s = e_i$ . Единичные векторы  $e_{vv}$  и  $e_{vh}$  задают  $vv$ - и  $vh$ -компоненты когерентной (прямошедшей) волны:  $vv$ -компонента поляризована в плоскости поляризации падающей

волны ( $e_i, e$ ),  $vh$ - в ортогональной к ней плоскости ( $e_i, e_{vh}$ ). В эксперименте  $vv$ - и  $vh$ -компоненты соответствуют измерениям в параллельных и скрещенных поляризаторе и анализаторе.

Прошедшее излучения может быть представлено в виде суммы когерентной (средней) и некогерентной (флуктуирующей) компонент. Уравнения для их описания известны как уравнения Дайсона и Бете-Солпитера соответственно [29, 36, 38, 39]. Мы рассматриваем только когерентное поле. Для его нахождения используем формализм Фолди–Тверского, описанный для скалярного случая в [36].

Для слоя из анизотропных капель ЖК запишем векторное интегральное уравнение Фолди–Тверского в виде [24]

$$\begin{pmatrix} E_y \\ E_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Psi_y(x) |_{x=l} & 0 \\ 0 & \Psi_z(x) |_{x=l} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \alpha \\ \sin \alpha \end{pmatrix}, \quad (1)$$

где  $E_y$  и  $E_z$  – это  $y$ - и  $z$ -компоненты когерентного поля при единичной амплитуде падающей волны, функции  $\Psi_{y,z}(x)$  являются решениями интегральных уравнений

$$\Psi_{y,z}(x) = \exp(ikx) \times \left( 1 - q \langle S_{2,1}^0 \rangle \int_0^x \exp(-ikx') \Psi_{y,z}(x') dx' \right). \quad (2)$$

Здесь  $q = 2\pi k^{-2} N_v$ ,  $k = 2\pi n_p / \lambda$ ,  $n_p$  – показатель преломления связующего полимера,  $\lambda$  – длина волны падающего света,  $N_v$  – число капель ЖК в

единице объема,  $\langle S_{2,1}^0 \rangle$  – усредненные по размерам капель диагональные элементы амплитудной матрицы рассеяния при нулевом угле рассеяния. Угловые скобки  $\langle \dots \rangle$  здесь и ниже означают усреднение по размерам капель. В общем случае, когда капли имеют разную внутреннюю структуру, необходимо дополнительное соответствующее усреднение.

Для геометрии, представленной на рис. 1, волна, поляризованная вдоль оси  $y$ , является необыкновенной, поляризованная вдоль оси  $z$  – обыкновенной.

Решение уравнения (2) имеет вид

$$\Psi_{y,z}(x) = \exp(ik_{2,1}x), \quad (3)$$

где постоянные распространения  $k_2$  и  $k_1$  соответствуют необыкновенной и обыкновенной волнам,

$$k_{2,1} = k + iq \langle S_{2,1}^0 \rangle. \quad (4)$$

Для определения амплитудных коэффициентов пропусканий КПЖК слоя  $T_a^{vv}$  и  $T_a^{vh}$  с  $vv$ - и  $vh$ -поляризациями запишем следующие соотношения:

$$T_a^{vv} = \mathbf{e}_{vv} \underline{\Psi} \mathbf{e}_{vv}, \quad (5)$$

$$T_a^{vh} = \mathbf{e}_{vh} \underline{\Psi} \mathbf{e}_{vv}, \quad (6)$$

$$\underline{\Psi} = \begin{pmatrix} \exp(ik_2l) & 0 \\ 0 & \exp(ik_1l) \end{pmatrix}. \quad (7)$$

Выполнив необходимые преобразования, из (5)–(7) получим

$$T_a^{vv} = t_e \cos^2 \alpha + t_o \sin^2 \alpha, \quad (8)$$

$$T_a^{vh} = (t_o - t_e) \sin \alpha \cos \alpha, \quad (9)$$

где  $t_e$  и  $t_o$  – амплитудные коэффициенты пропускания КПЖК слоя для необыкновенной ( $e$ ) и обыкновенной ( $o$ ) волн,

$$t_{e,o} = \exp(ikl) \exp(-iq \langle \text{Im} S_{2,1}^0 \rangle l) \exp(-q \langle \text{Re} S_{2,1}^0 \rangle l). \quad (10)$$

Выражение (10) удобно преобразовать к виду

$$t_{e,o} = \exp(ikl) \exp(-\phi_{e,o}) \exp(-\gamma_{e,o}l/2). \quad (11)$$

Здесь

$$\phi_{e,o} = q \langle \text{Im} S_{2,1}^0 \rangle l, \quad (12)$$

$$\gamma_{e,o} = N_v \langle \sigma_{e,o} \rangle, \quad (13)$$

$$\langle \sigma_{e,o} \rangle = \frac{4\pi}{k} \langle \text{Re} S_{2,1}^0 \rangle, \quad (14)$$

где  $\phi_e$  и  $\phi_o$  – фазовые набег для необыкновенной и обыкновенной волн на толщине  $l$  КПЖК слоя,  $\gamma_e$  и  $\gamma_o$  – показатели ослабления слоя для необык-

новенной и обыкновенной волн,  $\langle \sigma_e \rangle$  и  $\langle \sigma_o \rangle$  – соответствующие средние значения сечений ослабления для отдельной ЖК-капли, определяемые в соответствии с оптической теоремой [39].

Коэффициент когерентного (направленного) пропускания КПЖК слоя  $T_c^p$  при освещении линейно поляризованным излучением в отсутствие анализатора можно записать следующим образом:

$$T_c^p = T_c^{vv} + T_c^{vh}. \quad (15)$$

Здесь  $T_c^{vv}$  и  $T_c^{vh}$  – коэффициенты когерентного пропускания при параллельных и скрещенных поляризаторе и анализаторе,

$$T_c^{vv} = |T_a^{vv}|^2, \quad (16)$$

$$T_c^{vh} = |T_a^{vh}|^2. \quad (17)$$

При освещении неполяризованным излучением для нахождения коэффициента когерентного пропускания  $T_c^{np}$  необходимо усреднение  $T_c^p$  по углу поляризации  $\alpha$ . Используя выражения (8), (9), (15)–(17), получим

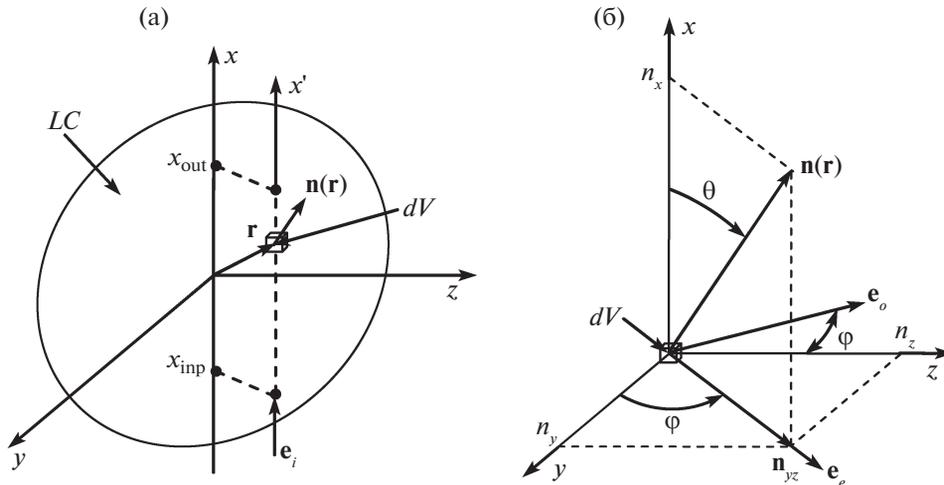
$$T_c^{np} = \frac{T_c^p(\alpha = 0) + T_c^p(\alpha = \pi/2)}{2}. \quad (18)$$

Соотношения (16)–(18) позволяют анализировать коэффициенты когерентного пропускания КПЖК слоя при освещении поляризованным и неполяризованным излучением для полидисперсных ориентированных капель одинаковой внутренней структуры. Из формул (8), (9), (11), (15)–(18) несложно найти, что

$$T_c^p = \exp(-\gamma_e l) \cos^2 \alpha + \exp(-\gamma_o l) \sin^2 \alpha, \quad (19)$$

$$T_c^{np} = \frac{\exp(-\gamma_e l) + \exp(-\gamma_o l)}{2}. \quad (20)$$

Капли ЖК, диспергированные в полимере, как правило, имеют относительный показатель преломления, слабо отличающийся от единицы [4, 8]. Поэтому мы использовали приближение аномальной дифракции [22–26, 37]. Оно позволяет анализировать рассеяние света крупными оптически мягкими ЖК-каплями: параметр дифракции  $\rho = ka \gg 1$ ,  $|n_{LC} - 1| \ll 1$ , где  $n_{LC}$  – максимальный относительный показатель преломления ЖК, который в общем случае может быть комплексным. В рамках этого приближения рассеянное световое поле в дальней зоне определяется как результат дифракции на эквивалентном плоском амплитудно-фазовом экране [39] с комплексной матрицей пропускания, заданной на главном поперечном сечении капли  $\sigma = \pi bc$ , где  $b$  и  $c$  – полуоси капли вдоль осей  $y$  и  $z$  лабораторной системы координат в плоскости, ортогональной



**Рис. 2.** Схематическое представление геометрии капли с произвольной внутренней структурой (а) и ее элементарного объема  $dV$  (б).  $\mathbf{n}(\mathbf{r})$  – локальный директор для элементарного объема  $dV$  в точке с радиусом-вектором  $\mathbf{r}$ ,  $x_{inp}$  и  $x_{out}$  – координаты входа и выхода луча на поверхности ЖК-капли,  $\theta$  и  $\varphi$  – полярный и азимутальный углы ориентации локального директора,  $\mathbf{e}_o$  и  $\mathbf{e}_e$  – единичные векторы поляризации обыкновенной и необыкновенной волн в точке  $\mathbf{r}$ .

направлению падения света (оси  $x$ ). Для элементов амплитудной матрицы рассеяния  $S_{2,1}^0$ , используя соотношения, полученные в работе [30], имеем

$$S_{2,1}^0 = \frac{k^2}{2\pi} \int_{\sigma} (1 - T_{2,1}(y, z)) dy dz. \quad (21)$$

Здесь  $T_{2,1}(y, z)$  – диагональные элементы матрицы Джонса  $\underline{T}(y, z)$  [40] для эквивалентного амплитудно-фазового экрана, отождествляемого с ЖК-каплей,

$$\underline{T}(y, z) = \prod_{x=x_{inp}(y,z)}^{x_{out}=x_{out}(y,z)} R^T(x) P R(x). \quad (22)$$

В выражении (22)  $x_{inp}$  и  $x_{out}$  – координаты входа и выхода луча на поверхности ЖК-капли, зависящие от  $y$  и  $z$  (рис. 2а),  $P$  – матрица локальных фазовых набегов для необыкновенной и обыкновенной волн,  $R(x)$  – матрица преобразования (поворота) локального базиса к лабораторному,  $R^T(x)$  – транспонированная матрица обратного преобразования,

$$P = \begin{pmatrix} \exp(ik(n_e(x)/n_p - 1)\Delta x) & 0 \\ 0 & \exp(ik(n_o/n_p - 1)\Delta x) \end{pmatrix}, \quad (23)$$

$$R(x) = \begin{pmatrix} \cos \varphi(x) & -\sin \varphi(x) \\ \sin \varphi(x) & \cos \varphi(x) \end{pmatrix}, \quad (24)$$

$$R^T(x) = \begin{pmatrix} \cos \varphi(x) & \sin \varphi(x) \\ -\sin \varphi(x) & \cos \varphi(x) \end{pmatrix}. \quad (25)$$

Здесь  $n_e(x)$  – локальный показатель преломления для необыкновенной волны в точке  $x = x(y, z)$ ,  $n_o$  – показатель преломления для обыкновенной волны, не зависящий от координат  $x, y, z$  и равный обыкновенному показателю преломления ЖК  $n_{\perp}$ ,  $\Delta x$  – продольный размер элементарного объема  $dV$  вдоль направления распространения света,  $\varphi(x)$  – азимутальный угол ориентации локальной главной плоскости в точке  $x = x(y, z)$  (рис. 2б).

На рис. 2  $\mathbf{n}(\mathbf{r})$  – локальный директор элементарного объема  $dV$  в точке с радиусом-вектором  $\mathbf{r}$ ,  $|\mathbf{n}(\mathbf{r})| = 1$ ,  $\theta$  – полярный угол ориентации локального директора,  $n_x, n_y, n_z$  – декартовы компоненты локального директора  $\mathbf{n}(\mathbf{r})$ ,  $\mathbf{e}_o$  и  $\mathbf{e}_e$  – единичные векторы поляризации обыкновенной и необыкновенной волн в точке  $\mathbf{r}$ .

Из рис. 2б можно видеть, что локальный показатель преломления для необыкновенной волны  $n_e(x)$  и значения косинуса и синуса азимута ориентации локальной главной плоскости  $\varphi(x)$  выражаются через компоненты локального директора  $n_x, n_y, n_z$  следующим образом:

$$n_e = n_{\parallel} n_{\perp} / \sqrt{n_{\parallel}^2 \cos^2 \theta + n_{\perp}^2 \sin^2 \theta} = n_{\parallel} n_{\perp} / \sqrt{n_{\parallel}^2 n_x^2 + n_{\perp}^2 (1 - n_x^2)}, \quad (26)$$

где  $n_{\parallel}$  – необыкновенный показатель преломления ЖК,

$$\cos \varphi(x) = n_y / \sqrt{1 - n_x^2}, \quad (27)$$

$$\sin \varphi(x) = n_z / \sqrt{1 - n_x^2}. \quad (28)$$

Анализ выражений (21)–(28) показывает, что если анизотропия ЖК-капель в слое одинакова, т.е. для полуосей капли  $a$ ,  $b$ ,  $c$  имеют место соотношения  $\varepsilon_y = b/a = \text{const}$ ,  $\varepsilon_z = c/a = \text{const}$ , то при одинаковой конфигурации директора в объеме капли элементы амплитудной матрицы рассеяния по направлению строго вперед  $S_{2,1}^o$  зависят только от продольной полуоси  $a$ ,

$$S_{2,1}^o = S_{2,1}^o(a). \quad (29)$$

Как видно из формул (13), (14), (29), для расчета  $\gamma_e$  и  $\gamma_o$  необходимо знание функции распределения продольной полуоси  $P(a)$ . Ее нахождение является сложной задачей, поскольку необходим экспериментальный анализ большого количества поперечных срезов образца. Поэтому рассмотрим другой способ нахождения  $\gamma_e$  и  $\gamma_o$ . Он позволяет оценить значения продольной полуоси из измерений пропускания слоя.

Используя выражения (13), (14), с учетом формулы (29) запишем

$$\gamma_{e,o} = N_v \frac{4\pi}{k^2} \int_{a_1}^{a_2} \text{Re} S_{2,1}^o(a) P(a) da, \quad (30)$$

где  $a_1$  и  $a_2$  – максимальное и минимальное значения продольной полуоси  $a$  для ансамбля ЖК-капель в слое. Эта формула на основании теоремы о среднем может быть записана следующим образом:

$$\begin{aligned} \gamma_{e,o} &= N_v \frac{4\pi}{k^2} \text{Re} S_{2,1}^o(a_{ef}^{e,o}) \int_{a_1}^{a_2} P(a) da = \\ &= N_v \frac{4\pi}{k^2} \text{Re} S_{2,1}^o(a_{ef}^{e,o}). \end{aligned} \quad (31)$$

Здесь  $a_{ef}^e$  и  $a_{ef}^o$  – эффективные значения продольной полуоси при рассмотрении ослабления необыкновенной и обыкновенной волн соответственно,  $a_1 \leq a_{ef}^{e,o} \leq a_2$ . Функция распределения  $P(a)$  нормирована:

$$\int_{a_1}^{a_2} P(a) da = 1. \quad (32)$$

В результате выражения (19), (20) можно записать в виде

$$T_c^p = \exp(-\gamma_e(a_{ef}^e)l) \cos^2 \alpha + \exp(-\gamma_o(a_{ef}^o)l) \sin^2 \alpha, \quad (33)$$

$$T_c^{np} = \frac{\exp(-\gamma_e(a_{ef}^e)l) + \exp(-\gamma_o(a_{ef}^o)l)}{2}. \quad (34)$$

Как видно из выражения (33), эффективные значения  $a_{ef}^e$  и  $a_{ef}^o$  продольной полуоси  $a$  могут быть найдены путем сопоставления численных расчетов с экспериментальными данными для коэффициента когерентного пропускания  $T_c^p$  при освещении КПЖК слоя под углом поляризации  $\alpha = 0$  и  $\alpha = \pi/2$  соответственно. Значения  $a_{ef}^e$  и  $a_{ef}^o$  могут быть также найдены, если априорно известна функция распределения продольной полуоси  $P(a)$ . Ниже в отдельном разделе проводится сравнение данных расчета коэффициента когерентного пропускания по описываемой модели с экспериментом.

Подчеркнем, что полученные соотношения позволяют проводить анализ коэффициентов когерентного пропускания КПЖК слоя на основе данных о конфигурации директора  $\mathbf{n}(\mathbf{r})$  в объеме ЖК-капли. Она зависит от граничных условий на поверхности капли и управляющего поля. Конфигурация директора в капле при заданных граничных условиях находится из решения задачи минимизации объемной плотности свободной энергии [1].

#### МЕТОДИКА РАСЧЕТА ВНУТРЕННИХ ОРИЕНТАЦИОННЫХ СТРУКТУР КАПЕЛЬ НЕМАТИЧЕСКОГО ЖК

Внутренняя ориентационная структура ЖК-капель в полимерной матрице определяется следующими основными факторами [8, 41, 42]: (i) межмолекулярным взаимодействием в ЖК, приводящим к упорядочению молекул, характерному для данной фазы ЖК (нематической, холестерической, смектической и других фаз), (ii) взаимодействием с полимером, которое в зависимости от межфазных граничных условий на поверхности капли ведет к ориентации молекул ЖК вдоль ее границ (тангенциальные граничные условия) или перпендикулярно к ним (нормальные граничные условия), (iii) внешним электрическим (или магнитным) полем. Молекулы в ЖК-капле ориентируются таким образом, чтобы обеспечить минимум свободной энергии.

В одноконстантном приближении [1] для векторного поля локального директора  $\mathbf{n}(\mathbf{r})$ , соответствующего минимуму плотности свободной энергии, можно записать следующее дифференциальное уравнение:

$$K \Delta \mathbf{n}(\mathbf{r}) + \varepsilon(\mathbf{E}, \mathbf{n}(\mathbf{r})) \mathbf{E} = 0. \quad (35)$$

Здесь  $\Delta$  – оператор Лапласа,  $K$  – константа упругости ЖК,  $\varepsilon = \varepsilon_0 \Delta \varepsilon$ ,  $\varepsilon_0 = 8.85 \times 10^{-12}$  Кл<sup>2</sup>/(Н м<sup>2</sup>) – электрическая постоянная,  $\Delta \varepsilon$  – диэлектрическая анизотропия ЖК,  $\mathbf{E}$  – вектор напряженности внешнего управляющего электрического поля.

При решении уравнения (35) в декартовой системе координат для нахождения компонент  $n_x$ ,  $n_y$  и  $n_z$  локального директора  $\mathbf{n}(\mathbf{r})$  мы используем разностную схему вычислений [43]. Для точки  $\mathbf{r} = (0, 0, 0)$  в центре ЖК капли

$$K \left( \frac{n_x(-1, 0, 0) + n_x(1, 0, 0) - 2n_x}{(\Delta x)^2} + \frac{n_x(0, -1, 0) + n_x(0, 1, 0) - 2n_x}{(\Delta y)^2} + \frac{n_x(0, 0, -1) + n_x(0, 0, 1) - 2n_x}{(\Delta z)^2} \right) + \varepsilon E_x (E_x n_x + E_y n_y + E_z n_z) = 0, \quad (36)$$

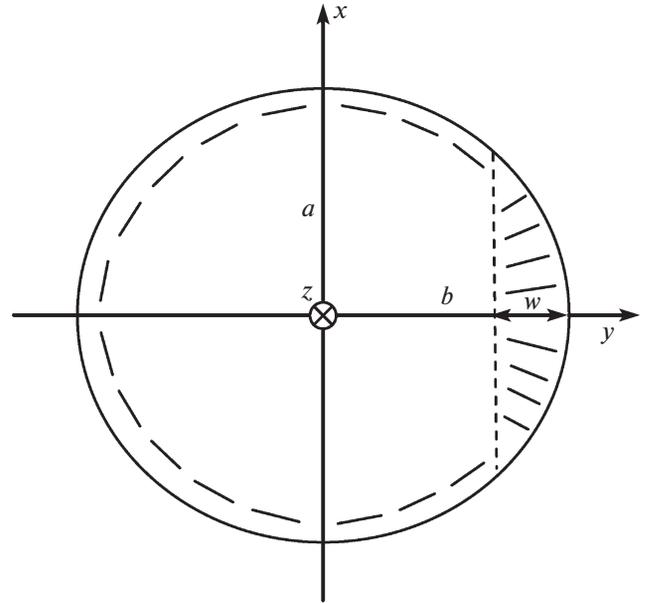
$$K \left( \frac{n_y(-1, 0, 0) + n_y(1, 0, 0) - 2n_y}{(\Delta x)^2} + \frac{n_y(0, -1, 0) + n_y(0, 1, 0) - 2n_y}{(\Delta y)^2} + \frac{n_y(0, 0, -1) + n_y(0, 0, 1) - 2n_y}{(\Delta z)^2} \right) + \varepsilon E_y (E_x n_x + E_y n_y + E_z n_z) = 0, \quad (37)$$

$$K \left( \frac{n_z(-1, 0, 0) + n_z(1, 0, 0) - 2n_z}{(\Delta x)^2} + \frac{n_z(0, -1, 0) + n_z(0, 1, 0) - 2n_z}{(\Delta y)^2} + \frac{n_z(0, 0, -1) + n_z(0, 0, 1) - 2n_z}{(\Delta z)^2} \right) + \varepsilon E_z (E_x n_x + E_y n_y + E_z n_z) = 0, \quad (38)$$

$$n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = 1, \quad (39)$$

где  $\Delta x$ ,  $\Delta y$ ,  $\Delta z$  – шаги итерации по соответствующим осям лабораторной системы координат  $(x, y, z)$  при дискретизации выражения (35),  $E_x$ ,  $E_y$ ,  $E_z$  – значения проекций вектора напряженности электрического поля  $\mathbf{E}$  на соответствующие оси координат.

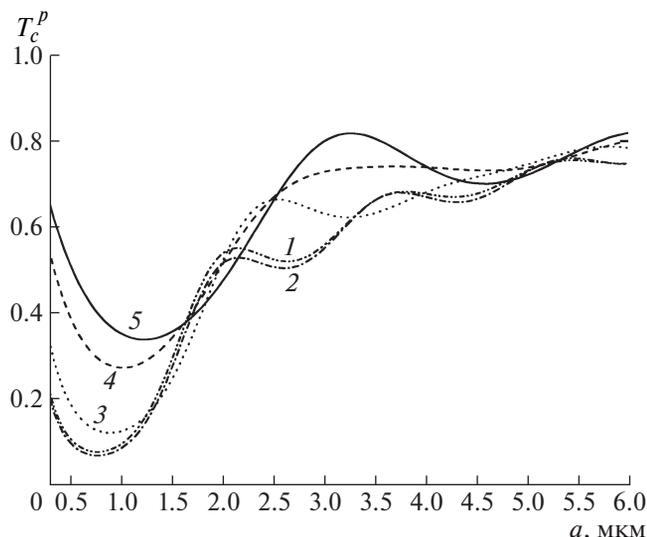
Методика расчета внутренней ориентационной структуры ЖК-капли заключается в следующем: (i) сначала задается какая-то определенная ориентация директора в объеме капли, (ii) объем капли разбивается на ячейки, в каждой из которых определяется ориентация локального директора  $\mathbf{n} = \mathbf{n}(\mathbf{r})$ , (iii) затем из уравнений (36)–(38) определяются компоненты локального директора  $n_x$ ,  $n_y$ ,  $n_z$  в ячейке с координатами  $x$ ,  $y$ ,  $z$ . На каждой последующей итерации влияние жестко заданной ориентации директора на границе раздела распространяется все дальше в объем капли. В итоге такая итерационная процедура (релаксационный метод) приводит к определению ориентационной



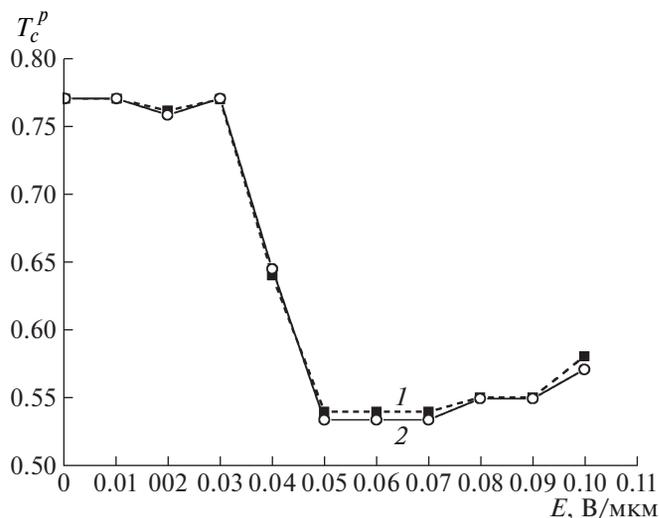
**Рис. 3.** Схематическое изображение разреза ЖК-капли с неоднородными граничными условиями в плоскости  $x, y$ . Параметр  $w$  характеризует долю поверхности капли с нормальным (гомеотропным) поверхностным сцеплением,  $a$  и  $b$  – полуоси капли.

структуры нематической ЖК-капли, соответствующей минимуму свободной энергии всего ее объема. При этом в первом приближении можно считать, что поверхность ЖК-капли разбивается на две характерные области (рис. 3), где ориентация длинных осей молекул ЖК-капли направлена по нормали (нормальные граничные условия) и по касательной (тангенциальные граничные условия). Схематическое представление ЖК-капли в форме эллипсоида представлено на рис. 3. Для количественной оценки степени неоднородности межфазного поверхностного сцепления ЖК с полимерной матрицей мы используем параметр  $w$  (рис. 3). Он характеризует область капли с нормальным поверхностным сцеплением. Отметим, что значения  $w = 0\%$  и  $w = 100\%$  соответствуют однородному поверхностному сцеплению на поверхности ЖК–полимер. При  $w = 0\%$  имеет место только тангенциальное поверхностное сцепление, и формируется биполярная конфигурация ЖК в капле. При  $w = 100\%$  реализуется только нормальное поверхностное сцепление, и внутренняя ориентационная структура капли является радиальной.

Параметр  $w$  зависит от внешнего управляющего поля, которое приводит к электроуправляемому изменению внутренней структуры капели и соответственно их оптических характеристик и характеристик слоя в целом. На практике, как уже отмечено выше, изменение параметра  $w$  в по-



**Рис. 4.** Рассчитанные значения коэффициента когерентного пропускания КПЖК пленки  $T_c^p$  в зависимости от радиуса  $a$  сферических капель жидкого кристалла 5СВ ( $n_{\perp} = 1.531$ ,  $n_{\parallel} = 1.717$ ).  $w = 0$  (кривая 1), 25 (2), 50 (3), 75 (4), 100% (5).  $\alpha = 0$ ,  $n_p = 1.515$ ,  $\lambda = 0.658$  мкм,  $c_v = 0.073$ ,  $l = 16$  мкм.



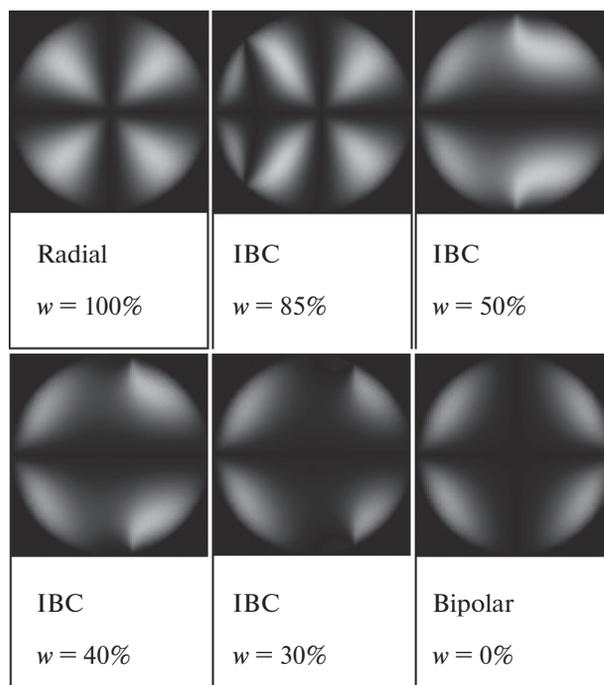
**Рис. 5.** Экспериментальная (1) и рассчитанная (2) зависимости пропускания  $T_c^p$  от напряженности управляющего поля для композитной КПЖК пленки с неоднородным межфазным поверхностным сцеплением. Вектор поляризации падающей волны параллелен оси  $y$ . Жидкий кристалл 5СВ ( $n_{\perp} = 1.531$ ,  $n_{\parallel} = 1.717$ ).  $\alpha = 0$ ,  $n_p = 1.515$ ,  $\lambda = 0.658$  мкм,  $c_v = 0.073$ ,  $l = 16$  мкм.  $a_{ef}^e = 2.85$  мкм.

ле реализуется путем использования поверхностно активных веществ – сурфактантов [16, 17].

### АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ. СРАВНЕНИЕ С ЭКСПЕРИМЕНТОМ

Сравним результаты, полученные в рамках разработанной оптической модели, с экспериментальными данными. Используем экспериментальную зависимость электрооптического отклика (коэффициента когерентного пропускания  $T_c^p$  от напряженности приложенного поля  $E$ ), приведенную в [44] для КПЖК слоя при полевом переходе, соответствующем исходной (в отсутствие поля) радиальной конфигурации ЖК-капель (параметр  $w = 100\%$ ) в слое. Параметр  $w$  уменьшается при наложении внешнего управляющего электрического поля в плоскости образца.

Композитная пленка приготавливалась на основе нематического ЖК 5СВ с обыкновенным показателем преломления  $n_{\perp} = 1.531$  и необыкновенным  $n_{\parallel} = 1.717$  на длине волны  $\lambda = 0.658$  мкм. В качестве полимерной матрицы выбран поливиниловый спирт (PVA), пластифицированный глицерином. ЖК был допирован катионным сурфактантом СТАВ. Весовое соотношение компонентов PVA:глицерин:5СВ:СТАВ составляло 9.3:3.7:1:0.02, что в перерасчете на объемную концентрацию ЖК-капель  $c_v$  дает значение  $c_v = (1 +$



**Рис. 6.** Рассчитанные текстуры ЖК-капель в скрещенных поляризаторах. Первая текстура соответствует нормальному ( $w = 100\%$ ), последняя – тангенциальному ( $w = 0\%$ ) поверхностному сцеплению. Остальные – получены при неоднородном поверхностном сцеплении (inhomogeneous boundary conditions (IBC) при значениях  $w = 85, 50, 40$  и  $30\%$ , используемых в эксперименте (рис. 5 и таблица).

Рассчитанные и экспериментальные данные для коэффициента когерентного пропускания КПЖК пленки с неоднородными межфазными границами  $T_c^p$  и восстановленные значения параметра  $w$  при разных напряженностях управляющего поля

$E$ , В/мкм	$T_c^p$ , эксперимент	$\Delta T$	$w$ , %	$T_c^p$ , теория
0.0	0.77	0.0	100.0	0.7699
0.01	0.77	0.0	100.0	0.7699
0.02	0.761	0.009	85.0	0.7578
0.03	0.77	0.0	100.0	0.7699
0.04	0.64	0.13	50.0	0.6447
0.05	0.54	0.23	30.0	0.5337
0.06	0.54	0.23	30.0	0.5337
0.07	0.54	0.23	30.0	0.5337
0.08	0.55	0.22	35.0	0.5494
0.09	0.55	0.22	35.0	0.5494
0.1	0.58	0.19	40.0	0.5708

Первая колонка – значения напряженности поля  $E$ . Вторая – экспериментальные значения пропускания  $T_c^p$ . Третья – разность экспериментальных значений коэффициентов пропусканий при  $E = 0$  и при заданном значении  $E$ :  $\Delta T = T_c^p(E = 0) - T_c^p(E \neq 0)$ . Четвертая – восстановленные значения параметра  $w$ . Пятая – рассчитанные значения коэффициента пропускания  $T_c^p$ .

$+ 0.02)/(9.3 + 3.7) \approx 0.078$ . Толщина пленки  $l = 16$  мкм. Концентрация ЖК-капель в приготовленном образце снижается за счет растворения ЖК в полимере и остаточной воды. При численных расчетах принято значение объемной концентрации ЖК-капель в КПЖК слое  $c_v = 0.073$ . При выбранном количестве сурфактанта (2% по массе относительно ЖК) реализуется нормальное поверхностное сцепление и радиальная конфигурация ЖК-капель ( $w = 100\%$ ) в отсутствие управляющего поля. Под действием поля реализуется инверсный режим ионной модификации межфазных границ, при котором доля тангенциального сцепления с полимером возрастает [17]. Показатель преломления использованного полимера  $n_p = 1.532$ . В образце добавка глицерина понижает показатель преломления до значения  $n_p = 1.515$ . Образец освещался по нормали. Вектор поляризации падающей волны параллелен оси  $u$  ( $\alpha = 0$ ). Электрическое поле прикладывалось в плоскости КПЖК пленки вдоль оси  $u$ . Поперечный размер капель в плоскости пленки находился в диапазоне 2–3 мкм. Капли, согласно поляризационно-микроскопическим измерениям в отсутствие механического растяжения КПЖК пленки,

имели сферическую форму: параметры анизотропии  $\varepsilon_y = \varepsilon_z = 1$ . Значение коэффициента когерентного пропускания в отсутствие поля  $T_c^p = 0.77$  (средняя длина свободного пробега фотона при этом  $\sim 60$  мкм).

На рис. 4 представлена рассчитанная зависимость пропускания  $T_c^p$  от радиуса  $a$  ЖК-капель в слое при разных значениях параметра  $w$ . Ее вид определяется осциллирующим характером зависимости фактора эффективности ослабления ЖК капли. Как видно из сопоставления этих результатов с экспериментальными данными рис. 5, экспериментальному значению пропускания  $T_c^p = 0.77$  при  $w = 100\%$ , реализуемому в отсутствие поля ( $E = 0$ ), соответствует значение  $a = 2.85$  мкм (рис. 4). Оно определяет величину эффективного размера капли  $a_{ef}^e$ , входящего в выражение (33). Таким образом,  $a_{ef}^e = 2.85$  мкм.

Дальнейшая процедура сравнения с экспериментом заключалась в расчетах пропускания  $T_c^p(\alpha = 0)$  для значения  $a_{ef}^e = 2.85$  мкм при варьировании параметра  $w$  и определении (восстановлении) значений  $w$ , соответствующих экспериментально измеренным значениям пропускания образца в управляющем электрическом поле. Результаты сопоставления представлены на рис. 5 и в таблице. В таблице показаны также экспериментальные значения глубины модуляции в прямом прошедшем свете  $\Delta T = T_c^p(E = 0) - T_c^p(E \neq 0)$ , где  $E$  – напряженность управляющего поля. Погрешность между теоретическими и экспериментальными данными по пропусканию при восстановлении  $w$  не превышала 1.6%.

Текстуры ЖК-капли для восстановленных значений коэффициента пропускания слоя показаны на рис. 6. Первая текстура в форме “мальтийского креста” соответствует полностью однородным нормальным граничным условиям и радиальной конфигурации ЖК-капли. Следующие четыре текстуры построены при значениях  $w$ , соответствующих значениям приложенного напряжения, при которых проведены измерения пропускания (см. таблица). Последняя из приведенных текстур реализуется при тангенциальном поверхностном сцеплении.

Из данных, представленных на рис. 5, 6 и в таблице, можно сделать вывод, что в управляющем поле структура ЖК-капель не переходит из радиальной (значение  $w = 100\%$ ) в биполярную, для которой  $w = 0\%$ . Минимальное значение  $w$ , как следует из сопоставления теоретических и экспериментальных данных, равно 30%. Это, вероятно, обусловлено энергетически выгодным балансом упругой и диэлектрической составляющих объемной энергии при использованной кон-

центрации сурфактанта в исследуемом образце в рассмотренном диапазоне изменения управляющего поля.

Для рассмотренной модификации межфазных границ модуляция коэффициента когерентного пропускания обусловлена, как следует из рис. 4, уменьшением доли поверхности капли с нормальным поверхностным сцеплением и ростом доли поверхности с тангенциальным поверхностным сцеплением.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Разработана оптическая модель для описания коэффициентов когерентного пропускания слоя анизотропных капель в изотропной матрице. Она основана на развитии приближений Фолди—Тверского и аномальной дифракции на векторный случай для слоя из капель ЖК с произвольной внутренней структурой.

Модель позволяет анализировать коэффициенты когерентного пропускания КПЖК слоя при нормальном освещении линейно поляризованным и неполяризованным излучением в зависимости от размеров ЖК-капель, их анизотропии и концентрации, толщины слоя, показателей преломления ЖК и внутренней структуры капель. Для нахождения внутренней структуры ЖК-капель использован релаксационный метод решения задачи минимизации объемной плотности свободной энергии в одноконстантном приближении. Проведено сопоставление теоретических и экспериментальных данных для КПЖК слоя из полидисперсных эллипсоидальных капель нематического ЖК с неоднородным межфазным поверхностным сцеплением. Разработанная оптическая модель позволяет решать задачи оптимизации электрооптического отклика таких пленок. Предложена методика оценки размера капель ЖК по данным о зависимости коэффициента пропускания от напряжения.

Работа выполнена при поддержке НАН Беларуси и СО РАН (проект № 36), Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований БРФФИ (проект Ф15СО-039).

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Blinov L.M., Chigrinov V.G.* Electrooptic Effects in Liquid Crystal Materials. N. Y.: Springer-Verlag, 1993. 464 p.
2. Flexible Flat Panel Displays / Ed. by Crawford G.P. Hoboken: John Wiley & Sons, 2005. 525 p.
3. *Castellano J.A.* Liquid Gold: The Story of Liquid Crystal Displays and the Creation of an Industry. Singapore: World Scientific Publishing, 2005. 302 p.
4. *Simoni F.* Nonlinear Properties of Liquid Crystals and Polymer Dispersed Liquid Crystals. Singapore: World Sci., 1997. 259 p.
5. Display systems / Ed. by MacDonald L.W., Lowe A.C. N. Y.: J. Wiley & Sons, 1997. 418 p.
6. *Chigrinov V.G.* Liquid Crystal Devices: Physics and Application. Boston-London: Artech House, 1999. 357 p.
7. *Воловик Г.Е., Лаврентович О.Д.* // ЖЭТФ. 1983. Т. 85. № 6 (12). С. 1997.
8. *Drzaic P.S.* Liquid Crystal Dispersions. Singapore: World Scientific, 1995. 429 p.
9. *West J.L., Doane J.W., Zumer S.* // Patent US 4.685.771. Int.Cl. G02F 1/13. Publ. 11.08.1987.
10. *Freedericksz V.K., Zolina V.* // Trans. Far. Soc. 1933. V. 29. P. 919.
11. *Dubois-Violette E., De Gennes P.G.* // J. de Phys. Lett. 1975. V. 36. P. L-255.
12. *Блинов Л.М., Кац Е.И., Совин А.А.* // УФН. 1987. Т. 152. № 3. С. 449.
13. *Ryschenkow G., Kléman M.* // J. Chem. Phys. 1976. V. 64. P. 404.
14. *Блинов Л.М., Давыдова Н.Н., Сонин А.А. и др.* // Кристаллография. 1984. Т. 29. № 3. С. 537.
15. *Komitov L., Helgee B., Felix J.* // Appl. Phys. Lett. 2005. V. 86. № 3. P. 023502.
16. *Зырянов В.Я., Крахалев М.Н., Прищепина О.О. и др.* // Письма в ЖЭТФ. 2007. Т. 86. С. 440.
17. *Zyryanov V.Ya., Krakhalev M.N., Prishchepa O.O. и др.* // JETP Lett. 2008. V. 88. P. 597.
18. *Walther A., Muller A.* // Soft Matter. 2008. V. 4. P. 663.
19. *Perro A., Reculosa S., Ravaine S. Bourgeat-Lami E., Duquet E.* // J. Mater. Chem. 2005. V. 15. P. 3745.
20. *Basile F., Bloisi F., Vicari L., Simoni F.* // Phys. Rev. E. 1993. V. 48. № 1. P. 432.
21. *Presnyakov V.V., Galstian T.V.* // Mol. Cryst. Liq. Cryst. 2004. V. 413. P. 435.
22. *Loiko V.A., Konkolovich A.V.* // JETP. 2006. V. 103. № 6. P. 935.
23. *Лойко В.А., Молочко В.И.* // ЖТФ. 1999. Т. 69. № 11. С. 86-90.
24. *Klett J.D., Sutheland R.A.* // Appl. Opt. 1997. V. 31. № 3. P. 373.
25. *Zumer S.* // Phys. Rev. A. 1988. V. 37. № 10. P. 4006.
26. *Яковлев Д.А., Афонин О.А.* // Опт. и спектр. 1997. Т. 82. № 1. С. 86.
27. *Лойко В.А., Максименко П.Г., Конколлович А.В.* // Опт. и спектр. 2008. Т. 105. № 5. С. 853.
28. *Kiselev A.D., Yaroshchuk O.V., Dolgov L.* // J. Phys. Condens. Matter. 2004. V. 16. P. 183.
29. *Иванов А.П., Лойко В.А., Дик В.П.* Распространение света в плотноупакованных дисперсных средах. Минск: Наука и техника, 1988. 191 с.
30. *Лойко В.А., Машке У., Зырянов В.Я. и др.* // Опт. и спектр. 2011. Т. 110. № 1. С. 111.
31. *A. Khan A., Shiyonovskaya I., Schneider T. et al.* // J. the SID. 2007. V. 15. № 1). P. 9.
32. *Крахалев М.Н., Лойко В.А., Зырянов В.Я.* // Письма в ЖЭТФ. 2011. Т. 37. № 1. С. 72.
33. *Прищепина О.О., Шабанов А.В., Зырянов В.Я. и др.* // Письма в ЖЭТФ. 2006. Т. 84. В. 1. С. 723.
34. *Mertelj A., Čopič M.* // Phys. Rev. E. 2007. V. 75. P. 011705.

35. Прищепина О.О., Эгамов М.Х., Герасимов В.П. и др. // Известия вузов. Физика. 2013. Т. 56. № 2/2. С. 258.
36. Исимару А. Распространение и рассеяние волн в случайно-неоднородных средах. Т. 2. М.: Мир, 1986. 317 с.
37. Холст Г. Рассеяние света малыми частицами. М.: Изд-во иностр. лит-ры, 1961. 536 с.
38. Апресян Л.Г., Кравцов Ю.А. Теория переноса излучения. М.: Наука, Гл. ред. физ-мат. лит-ры, 1983. 216 с.
39. Рытов С.М., Кравцов Ю.А., Татарский В.И. Введение в статистическую радиофизику Ч. 2. Случайные поля. М.: Наука, 1978. 463 с.
40. Ищенко Е.Ф., Соколов А.Л. Поляризация оптика. М.: Изд-во МЭИ, 2005. 335 с.
41. Val'kov A.Yu., Aksenova E.V., Romanov V.P. // Phys. Rev. E. 2013. V. 87. P. 022508.
42. Prishchepa O.O., Shabanov A.V., V.Ya. Zyryanov. // JETP Lett. 2006. V. 84. P. 723.
43. Соловейчик Ю.Г., Рояк М.Э., Персова М.Г. Метод конечных элементов для скалярных и векторных задач. Новосибирск: НГТУ, 2007. 896 с.
44. Крахалев М.Н. Лойко В.А., Зырянов В.Я. // Письма в ЖТФ. 2011. Т. 37. С. 72.