

混合排列向列相液晶薄盒中 $-1/2$ 向错引起的有序重构的扩散*

路丽霞¹⁾²⁾³⁾ 张志东^{3)†} 周璇³⁾

1) (中国科学院长春光学精密机械与物理研究所, 长春 130033)

2) (中国科学院大学, 北京 100049)

3) (河北工业大学理学院, 天津 300401)

(2013年3月28日收到; 2013年7月26日收到修改稿)

基于 Landau-de Gennes 理论, 利用松弛迭代法, 研究了混合排列向列相液晶薄盒中 $-1/2$ 向错引起的有序重构的扩散现象, 给出了 $-1/2$ 向错的核结构、双轴性结构, 以及盒厚减小时有序重构的扩散。当盒厚小于 15ξ 时, 随着盒厚的减小, 向错范围和有序重构区域沿基板方向迅速扩散; 当盒厚减小到临界厚度 10ξ 时, 有序重构的范围扩散到整个液晶盒中, 以向错中心所对应的平面为界, 指向矢一部分垂面排列, 另一部分沿面排列。本文的研究对拓扑缺陷对向列相液晶中的亚微米胶体粒子的调节作用具有一定的理论指导意义。

关键词: 混合排列向列相液晶薄盒, $-1/2$ 向错, 有序重构扩散, 松弛迭代法

PACS: 61.30.Jf, 61.30.Gd

DOI: 10.7498/aps.62.226101

1 引言

液晶由于其独特的存在形态和电光特性, 使其得到广泛应用^[1-3], 液晶的物理特性及其物理效应一直是物理研究的重要内容。而缺陷广泛存在于自然界中, 是粒子物理学、宇宙学、凝聚态物理学的重要内容, 其在相变 (phase transitions)、塑性形变 (plastic deformations)、电子过程 (electronic processes) 中具有重要作用^[4]。液晶中的缺陷除了上述作用外, 还可以捕获纳米粒子, 调节胶体粒子间的相互作用, 可以为胶体微组装提供有序模板, 控制缺陷位置对自组装向列序中缺陷调节的胶体组合以及聚合和结晶化过程具有重要作用^[5]。缺陷影响到液晶的光学、流体动力学等特性^[4], 是液晶基础理论研究以及电光应用领域中的重要课题^[6,7]。液晶中的缺陷是一种拓扑缺陷^[4,8,9], 产生于系统连续对称性的破坏, 产生以后, 就没有连续

的形变能使它消失 (即回到原来没有畸变的排列状态)^[9]。由于它是排列方向上的不连续变化, 因此又称之为向错 (disclination)^[9,10]。向列相中的向错通常是强度为 $m = \pm 1$ 的点向错以及 $m = \pm \frac{1}{2}$ 的线向错^[4]。根据转动轴的方向, 向错又可以分为两种类型: 一种为转动轴平行于向错线的楔形向错 (wedge disclination), 另一种为转动轴垂直于向错线的扭曲向错 (twist disclination)^[4]。

关于向错能量的定量描述一直是液晶缺陷研究的重要内容。由于指向矢场在向错处的奇异性, 起初, 人们以 Frank 弹性理论为基础, 通过挖掉这些奇异区域的方法^[10] 来计算向错周围指向矢场的畸变能, 发现液晶向错的能量与向错强度的平方成正比。

为了研究向错区域的结构和性质, 必须依赖于以序参数张量 \mathbf{Q} 为变量的 Landau-de Gennes 理论。Schopohl 和 Sluckin 基于 Landau-de Gennes 理论, 首次从理论上证实了强度 $m = \pm \frac{1}{2}$ 楔形向错中的有

* 国家自然科学基金 (批准号: 11374087) 和河北省高等学校科学技术研究指导项目 (批准号: Z2011133) 资助的课题。

† 通讯作者. E-mail: zhidong_zhang@yahoo.cn

序重构现象,证实了向错核内双轴性的存在^[11],激起了不同边界条件下向列相向错核结构和有序重构的一系列研究^[12–18]. 实验上则多是对强电场诱导的有序重构的研究^[17,19]. Carbone 等^[20]从实验上实现含有 $-1/2$ 向错的仿混合排列向列相液晶(HAN)薄盒,通过原子力显微镜对附着在悬臂梁的液晶小球与基板间作用力进行测量,得到力-距离谱,由此发现,无外场作用时,拓扑缺陷诱导的有序重构随盒厚变化.

有序重构数学上称为本征值交换,即在向列序的张量表述中,两个具有正交指向矢的单轴态互相交换,中间不存在本征矢的转动,但本征值随位置变化,中间存在一双轴构型连接两个单轴态^[12,13]. 该模型成功解释了混合锚定纳米尺寸的向列相样品^[13,21]以及强电场下的薄液晶盒^[17,22]的实验结果. 然而,至今还没有人详细研究无外场作用下有序重构的扩散现象.

本文基于 Landau-de Gennes 理论,利用松弛迭代法,研究了薄 HAN 盒中 $-1/2$ 向错引起的有序重构的扩散现象. 改变液晶盒厚,就能控制缺陷和有序重构的范围,这在拓扑缺陷介导方式 (topological defect-mediated patterning) 和在控制液晶中的胶体粒子等方面具有重要作用,对于拓扑缺陷对向列相液晶中的亚微米胶体粒子的调节作用具有一定的理论指导意义.

2 理论基础

2.1 Landau-de Gennes 理论

Landau-de Gennes 理论中,用二阶对称无迹序参数张量 \mathbf{Q} 来描述取向序^[23]:

$$\mathbf{Q} = \sum_{i=1}^3 \lambda_i \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_i, \quad (1)$$

其中, λ_i 和 \mathbf{e}_i 分别为 \mathbf{Q} 的第 i 个本征值和本征矢. 各向同性相, \mathbf{Q} 消失. 单轴序下, \mathbf{Q} 的两个本征值相等并且可以表示为

$$\mathbf{Q} = S(\mathbf{n} \otimes \mathbf{n} - I), \quad (2)$$

其中 S 为单轴标量序参数, \mathbf{n} 为向列指向矢. \mathbf{Q} 的所有本征值都不相等时, 液晶处于双轴态. 双轴性的大小通过双轴性参数 β^2 来确定^[17,24]:

$$\beta^2 = 1 - \frac{6[\text{tr}(\mathbf{Q}^3)]^2}{[\text{tr}(\mathbf{Q}^2)]^3}, \quad (3)$$

其在 $[0, 1]$ 之间取值, 单轴态时 $\beta^2 = 0$; 系统具有最大双轴性时 $\beta^2 = 1$.

对于不依赖于 z 轴的平面问题, 在约化空间, 通过解平衡态方程, 得到两个耦合方程(详见附录):

$$\begin{aligned} & (\tilde{\mathcal{Q}}_{12,11} + \tilde{\mathcal{Q}}_{12,22}) - \left[A\tilde{\mathcal{Q}}_{12} + (\tilde{\mathcal{Q}}^2)_{12} + \frac{1}{9}\text{tr}(\tilde{\mathcal{Q}}^2)\tilde{\mathcal{Q}}_{12} \right] \\ & + \left(\frac{L_2 + L_3}{2L_1} \right) (\tilde{\mathcal{Q}}_{12,11} + \tilde{\mathcal{Q}}_{22,21} + \tilde{\mathcal{Q}}_{11,12} + \tilde{\mathcal{Q}}_{12,22}) \\ & = 0, \end{aligned} \quad (4a)$$

$$\begin{aligned} & [(\tilde{\mathcal{Q}}_{11,11} + \tilde{\mathcal{Q}}_{11,22}) - (\tilde{\mathcal{Q}}_{22,11} + \tilde{\mathcal{Q}}_{22,22})] \\ & + \left(\frac{L_2 + L_3}{L_1} \right) [(\tilde{\mathcal{Q}}_{11,11} + \tilde{\mathcal{Q}}_{12,21}) - (\tilde{\mathcal{Q}}_{21,12} + \tilde{\mathcal{Q}}_{22,22})] \\ & - \left\{ A(\tilde{\mathcal{Q}}_{11} - \tilde{\mathcal{Q}}_{22}) + [(\tilde{\mathcal{Q}}^2)_{11} - (\tilde{\mathcal{Q}}^2)_{22}] \right. \\ & \left. + \frac{1}{9}\text{tr}(\tilde{\mathcal{Q}}^2)(\tilde{\mathcal{Q}}_{11} - \tilde{\mathcal{Q}}_{22}) \right\} = 0. \end{aligned} \quad (4b)$$

2.2 数值方法

设 HAN 盒上表面垂面排列, 下表面沿面排列. 令液晶盒基板位于 $y = \pm \frac{d}{2}$, 向错线平行于液晶盒的 z 轴, 且与 $x-y$ 平面的交点为坐标原点. 远离缺陷处, 指向矢位于 $x-y$ 平面内, 与 x 轴夹角 $\theta(\mathbf{r}) = -\frac{1}{2}\phi(\mathbf{r})^{[10]}$, $\phi(\mathbf{r})$ 为位置矢量与 x 轴的夹角, 则初始位形为

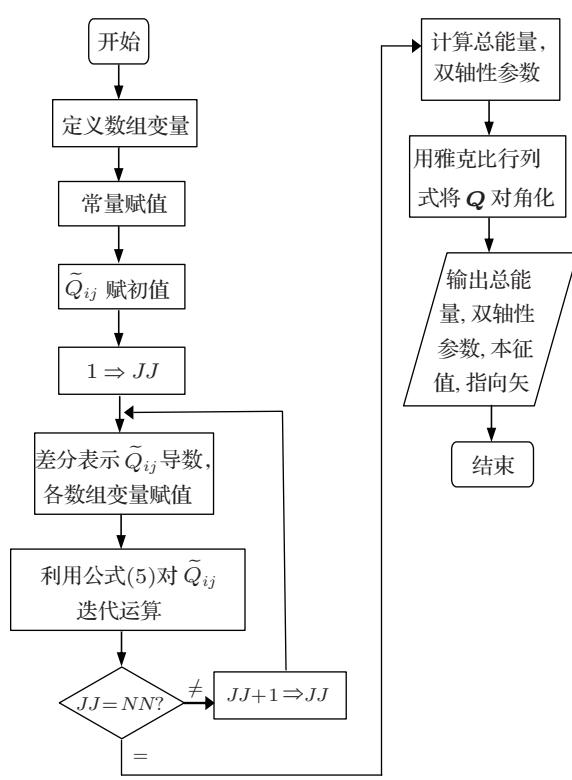
$$\tilde{\mathcal{Q}} = t \begin{pmatrix} 3\cos^2\theta - 1 & 3\cos\theta\sin\theta & 0 \\ 3\cos\theta\sin\theta & 3\sin^2\theta - 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

$$\text{其中 } t = \frac{S}{S_c} = \frac{3}{4} \left(1 + \sqrt{1 - \frac{8\tilde{A}}{3}} \right).$$

采用约化变量进行计算, 将约化空间离散为具有相同间隔 $\Delta x = \Delta y = 0.25$ 的隔点. 对 $\tilde{\mathcal{Q}}_{ij}$ 的迭代, 利用二维差分迭代方法, 采用的迭代方程为

$$\frac{\partial \tilde{F}(\tilde{\mathcal{Q}}, \tilde{\Lambda})}{\partial \tilde{\mathcal{Q}}_{ij}} - \frac{\partial}{\partial \tilde{x}_k} \frac{\partial \tilde{F}(\tilde{\mathcal{Q}}, \tilde{\Lambda})}{\partial \tilde{\mathcal{Q}}_{i,j,k}} = \gamma \frac{\partial \tilde{\mathcal{Q}}_{ij}}{\partial t}. \quad (5)$$

数值过程中, 时间步长取 5.0×10^{-5} s(能够保证数值过程的稳定性), 系统达到平衡的步数为 50000(足以保证系统达到平衡态). 系统达到平衡态后, 计算得到序参数张量 \mathbf{Q} , 对角化后得到本征值和指向矢, 最后计算了双轴性参数 β^2 以及单位厚度液晶的总能量. 计算流程如图 1 所示.

图 1 数值计算流程图: JJ 为循环步数变量, NN 为总循环步数

3 结果与讨论

分别对厚度为 $30\xi, 20\xi, 15\xi, 12.5\xi, 10\xi, 7.5\xi, 5\xi, 3\xi$ 的 HAN 盒进行迭代运算。令 $\gamma = 0.0783$, 约化温度 $\tilde{A} = 0.25$ (系统处于向列相)。

HAN 盒平衡时指向矢分布有两种可能状态, 一种是按向错形式分布, 另外一种交换形式分布^[12]: 以向错中心所对应的平面为界, 一部分沿面排列, 另一部分垂面排列。为了消除边界对向错附近液晶排列的影响, 计算了 x 方向取不同数值范围时, 两种分布(向错、交换形式)所对应的能量随盒厚的变化, 如图 2 所示。

由图 2 可知, 当数值计算区间为 60ξ 以上时, 能量分布一样, 计算区间的边界对向错附近液晶的排列没有影响。因此, 我们计算时选取的区间为 90ξ , 在约化空间, $x \in [-45, 45]$ 。由图 2(c) 可知, 当 HAN 盒厚度大于 10ξ 时, 按向错形式分布时能量更低, 系统更稳定, 因此平衡时指向矢应按向错形式分布。当厚度减小到 10ξ 及以下时, 两种分布能量完全一样, 此时液晶平衡时指向矢按交换形式分布。图 3 为不同盒厚指向矢分布图, 其中图 3(a)–(e) 分别是盒厚为 $30\xi, 15\xi, 12.5\xi, 10\xi, 3\xi$ 时指向矢分布图。盒厚大于 15ξ 时, 指向矢分布没有变化, 盒

厚对 $-1/2$ 向错没有影响。远离缺陷处, 指向矢分别通过左旋和右旋连续形变从沿面排列转化成垂面排列; 在缺陷附近, 指向矢发生了突变, 以 $x = 0$ 的切面为例, 经过向错中心, 指向矢由沿面排列突变为垂面排列。盒厚小于 15ξ 时, 沿 x 方向, 指向矢突变的区域以 $x = 0$ 切面为中心向两边扩散, 盒厚度越小, 扩散范围越大。当盒厚减小到 10ξ 及以下时, 突变区域扩散到整个液晶, 以向错中心所对应的平面为分界, 指向矢一部分沿面排列, 另一部分垂面排列。

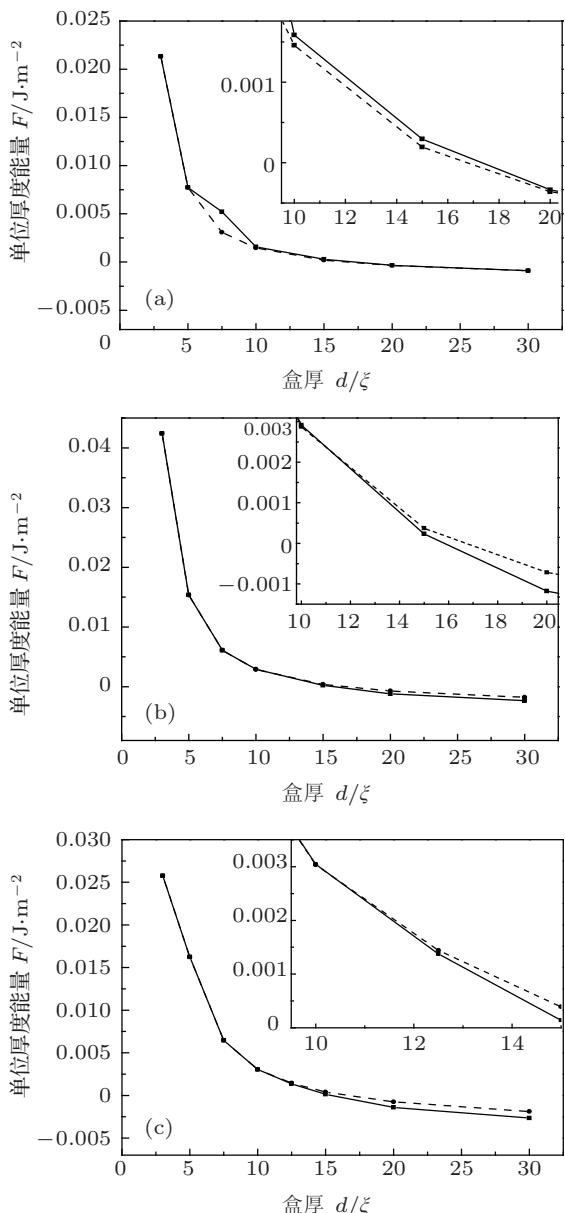
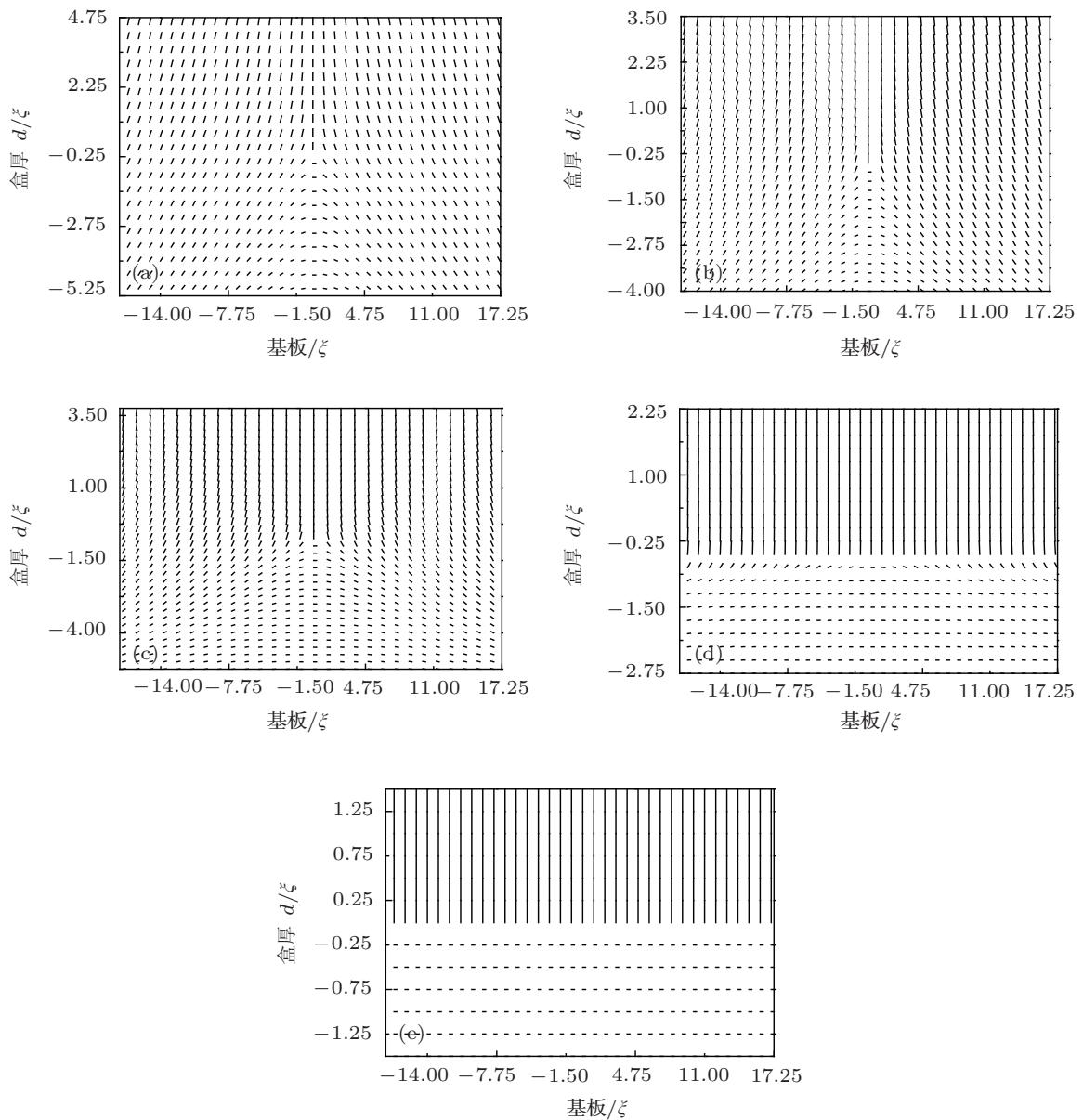


图 2 两种指向矢分布(实线按向错分布, 虚线按交换形式分布)能量随盒厚的变化 (a) 数值计算区间为 $x \in [-15, 15]$, 插图为盒厚 $[10\xi, 20\xi]$ 放大图; (b) 数值计算区间为 $x \in [-30, 30]$, 插图为盒厚 $[10\xi, 20\xi]$ 放大图; (c) 数值计算区间为 $x \in [-45, 45]$, 插图为盒厚 $[10\xi, 15\xi]$ 放大图

图 3 不同盒厚指向矢分布图: (a) $d = 30\xi$; (b) $d = 15\xi$; (c) $d = 12.5\xi$; (d) $d = 10\xi$; (e) $d = 3\xi$

指向矢由沿面排列突变到垂面排列, 只能通过有序重构实现, 即随着盒厚的减小, 有序重构范围不断扩散, 当盒厚减小到临界厚度 10ξ 及以下时, 有序重构范围扩散到整个液晶.

为了证明此结论, 我们计算了不同盒厚下本征值的分布, 如图 4 所示. 图 4 中 (a), (b), (c) 分别是盒厚为 30ξ , 15ξ , 12.5ξ 沿 $x=0$ 切面处本征值分布. 向错核处, 两本征值相等, 为单轴态. 距向错核约 2.5ξ 范围内, 三本征值明显不相等, 液晶具有双轴态, 距向错核约 $\pm 1\xi$ 处, 一本征值为零, 此时 $\beta^2 = 1$, 系统的双轴性最强. 在双轴态区域, 一本征值显著增加, 而另一本征值相应减小, 发生了本征

值交换. 通过本征值交换, 液晶由沿面排列突变到垂面排列态. 图 4(d), (e) 分别是盒厚为 10ξ , 3ξ 沿 $x = -5\xi$ 切面处本征值分布, 任意一平行于 y 轴切面的本征值分布均相同. 由此可知, 当 HAN 盒厚减小到临界厚度 10ξ 及以下时, 本征值交换扩散到整个液晶中. 这与图 3 结论一致.

图 5 是不同厚度双轴性参数图. 当液晶盒厚大于 15ξ 时, 双轴性参数无明显变化, 盒厚对 $-1/2$ 向错没有影响. 向错核为单轴态, 被半径约 2.5ξ 的圆形双轴态区域包围, 距向错核约 1ξ 处, $\beta^2 = 1$, 液晶双轴性最强. 当盒厚小于 15ξ 时, 随着厚度的减小, 双轴态范围沿 x 轴方向迅速扩散, 沿 y 轴方向则略

有减小. 盒厚减小到 10ξ 及以下时, 沿 x 轴方向, 双轴态扩散到整个液晶中, 向错随之扩散到整个液晶,

由此引起的有序重构也扩散到整个液晶.

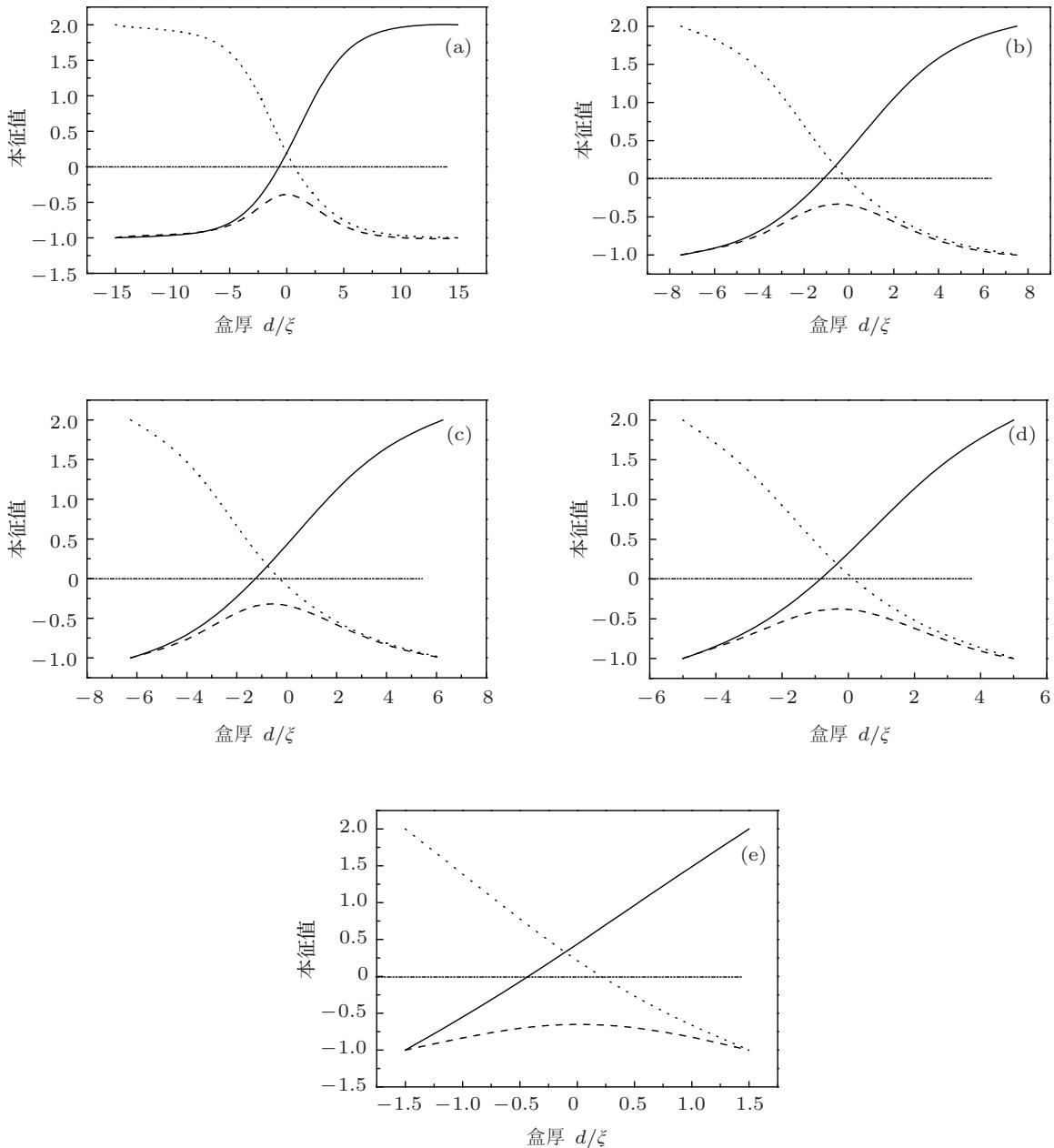


图 4 不同盒厚本征值分布(三条曲线分别表示三本征值, 平行于横轴值为零的虚线是本征值为零的参考线) (a), (b), (c) 分别为 $d = 30\xi$, $d = 15\xi$, $d = 12.5\xi$ 沿 $x = 0$ 切面处本征值分布图; (d), (e) 分别为 $d = 10\xi$ 和 $d = 3\xi$ 沿 $x = -5\xi$ 切面处本征值分布图; 任意一平行于 y 轴切面本征值分布均相同

4 结 论

基于 Landau-de Gennes 理论, 利用松弛迭代法, 通过计算不同厚度 HAN 盒中 $-1/2$ 向错的本征值、指向矢、双轴性以及能量, 研究了 HAN 盒中 $-1/2$ 向错引起的有序重构的扩散现象. 盒厚小于 15ξ 时, 沿 x 方向, 有序重构范围以 $x = 0$ 切面为中心向两边扩散, 当液晶盒厚减小到临界厚度 10ξ 时, 向错扩散到整个液晶, 有序重构的范围也随之扩散到整

个液晶, 以向错中心所对应的平面为界, 指向矢一部分垂面排列, 另一部分沿面排列. 本文的计算结果与 Carbone 等^[20] 的实验结果基本一致. 通过控制液晶盒的厚度, 就能控制缺陷和有序重构的范围. 本文的研究在拓扑缺陷介导方式和在控制液晶中的胶体粒子等方面具有重要作用, 对于拓扑缺陷对向列相液晶中的亚微米胶体粒子的调节作用具有一定的理论指导意义.

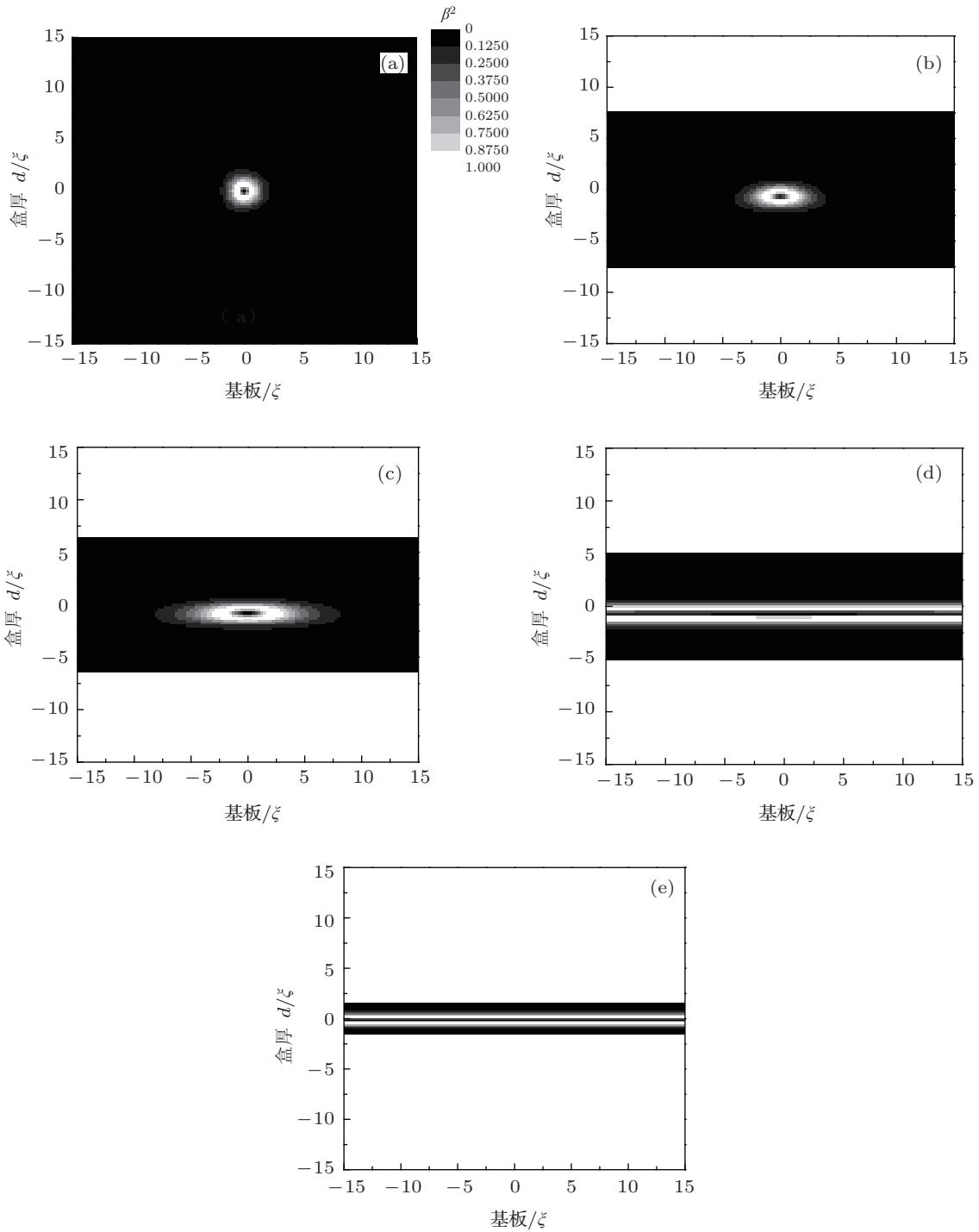


图5 双轴性参数 β^2 随盒厚的变化(图中从黑色到白色 β^2 逐渐增大) (a) $d = 30\xi$; (b) $d = 15\xi$; (c) $d = 12.5\xi$; (d) $d = 10\xi$; (e) $d = 3\xi$

附录

引入拉格朗日参数张量^[11] $\Lambda_{ij} = \lambda_0 \delta_{ij} - \varepsilon_{ijk} \lambda_k$, 以保证序参数张量的对称无迹性, 则无外场作用时, 液晶体系的 Landau-de Gennes 总自由能密度为

$$F(\mathbf{Q}, \boldsymbol{\Lambda}) = f_e + 2\text{tr}(\boldsymbol{\Lambda}\mathbf{Q}) + f_b, \quad (\text{A1})$$

其中 f_e 为由液晶序的不均匀引起的弹性自由能密度, 依赖于序参数张量 \mathbf{Q} 的空间变化率, 若只考虑到 \mathbf{Q} 及导数的二

次项, 弹性能密度可表示为

$$\begin{aligned} f_e = & L_1 \frac{\partial Q_{ij}}{\partial x_k} \frac{\partial Q_{ij}}{\partial x_k} + L_2 \frac{\partial Q_{ij}}{\partial x_j} \frac{\partial Q_{ik}}{\partial x_k} \\ & + L_3 \frac{\partial Q_{ij}}{\partial x_k} \frac{\partial Q_{ik}}{\partial x_j}, \end{aligned} \quad (\text{A2})$$

f_b 为本体自由能密度, 只依赖于序参数张量, 不依赖于其空间变化率, 具体表达式为

$$f_b = A \text{tr} \mathbf{Q}^2 + \frac{2}{3} B \text{tr} \mathbf{Q}^3 + \frac{1}{2} C (\text{tr} \mathbf{Q}^2)^2, \quad (\text{A3})$$

(A2), (A3) 式中, L_1, L_2, L_3 为弹性系数, $A = A_0(T - T^*)$, A_0, B, C 为常数, T^* 为最低过冷温度.

单轴序下, 平衡态时 $S = -\frac{B}{12C} \left(1 + \sqrt{1 - \frac{24AC}{B^2}}\right)$, 相变时 $S_c = -\frac{B}{9C}$. 定义 $q_0 = S_c = -\frac{B}{9C}$, 以及约化变量 $\tilde{F}(\tilde{\mathbf{Q}}, \tilde{\Lambda}) = \frac{F(\tilde{\mathbf{Q}}, \tilde{\Lambda})}{B^4/(9C)^3}$, $\tilde{f}_b = \frac{f_b}{B^4/(9C)^3}$, $\tilde{f}_e = \frac{f_e}{B^4/(9C)^3}$, $\tilde{Q}_{ij} = \frac{Q_{ij}}{q_0}$, $\tilde{\Lambda} = \frac{9AC}{B^2}$, $\tilde{x} = x/\xi$, $\tilde{y} = y/\xi$, 其中 $\xi = \sqrt{-\frac{L_1}{Bq_0}} = \sqrt{\frac{9CL_1}{2B^2}}$, 则总能量密度可约化为

$$\tilde{F}(\tilde{\mathbf{Q}}, \tilde{\Lambda}) = \tilde{f}_b + 2\text{tr}(\tilde{\Lambda}\tilde{\mathbf{Q}}) + \tilde{f}_e, \quad (\text{A4})$$

其中,

$$\tilde{f}_b = \tilde{\Lambda} \text{tr} \tilde{\mathbf{Q}}^2 - \frac{2}{3} \text{tr} \tilde{\mathbf{Q}}^3 + \frac{1}{18} (\text{tr} \tilde{\mathbf{Q}}^2)^2, \quad (\text{A5})$$

$$\begin{aligned} \tilde{f}_e = & \frac{\partial \tilde{Q}_{ij}}{\partial \tilde{x}_k} \frac{\partial \tilde{Q}_{ij}}{\partial \tilde{x}_k} + \frac{L_2}{L_1} \frac{\partial \tilde{Q}_{ij}}{\partial \tilde{x}_j} \frac{\partial \tilde{Q}_{ik}}{\partial \tilde{x}_k} \\ & + \frac{L_3}{L_1} \frac{\partial \tilde{Q}_{ij}}{\partial \tilde{x}_k} \frac{\partial \tilde{Q}_{ik}}{\partial \tilde{x}_j}, \end{aligned} \quad (\text{A6})$$

$N-I$ 相变时的约化温度为 $\tilde{A}_c = 1/3$.

对于不依赖于 z 轴的平面问题, 在约化空间, 通过解平衡态方程:

$$\frac{\partial \tilde{F}(\tilde{\mathbf{Q}}, \tilde{\Lambda})}{\partial \tilde{Q}_{ij}} - \frac{\partial}{\partial \tilde{x}_k} \frac{\partial \tilde{F}(\tilde{\mathbf{Q}}, \tilde{\Lambda})}{\partial \tilde{Q}_{ij,k}} = 0 \quad (\text{A7})$$

并消去拉格朗日因子, 仅保留变量 $\tilde{Q}_{11}, \tilde{Q}_{12}$, 可得到正文中 (4a), (4b) 两式.

- [1] Guo J C, Guo H C 2000 *Acta Phys. Sin.* **49** 1995 (in Chinese) [郭建成, 郭海成 2000 物理学报 **49** 1995]
- [2] Deng S P, Li W C, Huang W B, Liu Y G, Peng Z H, Lu X H, Xuan L 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 066103 (in Chinese) [邓舒鹏, 李文萃, 黄文彬, 刘永刚, 彭增辉, 鲁兴海, 宣丽 2011 物理学报 **60** 066103]
- [3] Dai Q, Li Y, Wu R N, Geng Y, Quan W, Li Y Q, Peng Z H, Yao L S 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 044219 (in Chinese) [岱钦, 李勇, 乌日娜, 耿岳, 全薇, 李业秋, 彭增辉, 姚丽双 2013 物理学报 **62** 044219]
- [4] Kurik M V, Lavrentovich O D 1988 *Sov. Phys. Usp.* **31** 196
- [5] Takuya O, Jun-ichi F, Kosuke S, Tomohiko Y 2012 *Phys. Rev. E* **86** 030701(R)
- [6] Reichenstein M, Stark H, Stelzer J, Trebin H R 2001 *Phys. Rev. E* **65** 011709
- [7] Tiribocchi A, Gonnella G, Marenduzzo D, Orlandini E 2010 *Appl. Phys. Lett.* **97** 143505
- [8] Mermin N D 1979 *Rev. Mod. Phys.* **51** 591
- [9] Yang G H, Zhang H, Duan Y S 2002 *Chin. Phys.* **11** 415
- [10] Gennes P G, Prost J 2008 *The Physics of Liquid Crystals* (2nd Ed.) (Beijing: Science Press) p166, 171, 165
- [11] Schopohl N, Sluckin T J 1987 *Phys. Rev. Lett.* **59** 2582
- [12] Palffy-Muhoray P, Gartland E C, Kelly J R 1994 *Liq. Cryst.* **16** 713
- [13] Kralj S, Virga E G 2001 *J. Phys. A* **34** 829
- [14] Rosso R, Virga E G 1996 *J. Phys. A* **29** 4247
- [15] Kralj S, Virga E G, Žumer S 1999 *Phys. Rev. E* **60** 1858
- [16] Ambrožič M, Kralj S, Virga E G 2007 *Phys. Rev. E* **75** 031708
- [17] Barberi R, Ciuchi F, Durand G, Iovane M, Sikharulidze D, Sonnet A, Virga E 2004 *Eur. Phys. J. E* **13** 61
- [18] Kralj S, Rosso R, Virga E G 2010 *Phys. Rev. E* **81** 021702
- [19] Martinot-Lagarde P, Dreyfus-Lambez H, Dozov I, 2003 *Phys. Rev. E* **67** 051710
- [20] Carbone G, Lombardo G, Barberi R 2009 *Phys. Rev. Lett.* **103** 167801
- [21] Zappone B, Richetti P, Barberi R, Bartolino R, Nguyen H T 2005 *Phys. Rev. E* **71** 041703
- [22] Ayeb H, Ciuchi F, Lombardo G, Barberi R 2008 *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **481** 73
- [23] Bisi F, Gartland E C, Rosso R, Virga E G 2003 *Phys. Rev. E* **68** 021707
- [24] Lombardo G, Ayeb H, Barberi R 2008 *Phys. Rev. E* **77** 051708

Diffusion of order reconstruction induced by $-1/2$ wedge disclination in a thin hybrid nematic liquid-crystal cell*

Lu Li-Xia¹⁾²⁾³⁾ Zhang Zhi-Dong^{3)†} Zhou Xuan³⁾

1) (*Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics, Chinese Academy of Sciences, Changchun 130033, China*)

2) (*University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China*)

3) (*School of Science, Hebei University of Technology, Tianjin 300401, China*)

(Received 28 March 2013; revised manuscript received 26 July 2013)

Abstract

Based on the Landau-de Gennes theory, the diffusion of order reconstruction induced by $-1/2$ wedge disclination in a thin hybrid cell is investigated by the relaxation iterative method. The core structure, the biaxial structure, and the diffusion of order reconstruction as the cell thickness decreases, are explored. The defect structure and the range of order reconstruction do not change when the cell thickness is larger than 15ξ . As the thickness decreases from 15ξ , the defect range broadens along the substrate direction, and the biaxial region as well as the range of order reconstruction also enlarges. When the thickness further decreases to below the critical value of 10ξ , the biaxial region and the order reconstruction range merge into an entire cell, where the planar orientation is abruptly converted into the perpendicular one across the biaxial wall. The results obtained in this paper are important for further studying the regulating effect of topological defect on submicron colloidal particles in nematics.

Keywords: thin hybrid nematic liquid-crystal cell, $-1/2$ wedge disclination, diffusion of order reconstruction, relaxation iterative method

PACS: 61.30.Jf, 61.30.Gd

DOI: 10.7498/aps.62.226101

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11374087) and the Research Project of Hebei Education Department, China (Grant No. Z2011133).

† Corresponding author. E-mail: zhidong_zhang@yahoo.cn