



## 拓扑荷在圆盘状向列相液晶薄膜中的尺寸效应

梁德山 黄厚兵 赵亚楠 柳祝红 王浩宇 马星桥

### Size effect of topological charge in disc-like nematic liquid crystal films

Liang De-Shan Huang Hou-Bing Zhao Ya-Nan Liu Zhu-Hong Wang Hao-Yu Ma Xing-Qiao

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 70, 044202 (2021) DOI: 10.7498/aps.70.20201623

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201623>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

## 您可能感兴趣的其他文章

### Articles you may be interested in

#### 液滴撞击圆柱内表面的数值研究

Numerical study of droplet impact on the inner surface of a cylinder

物理学报. 2018, 67(18): 184701 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180364>

#### 染料掺杂液晶可调谐光纤荧光光源的研究

Tuning characteristics of fluorescent light source by dye-doped liquid crystal filled hollow fiber

物理学报. 2017, 66(15): 154205 <https://doi.org/10.7498/aps.66.154205>

#### 贝塞尔-高斯涡旋光束相干合成研究

Generation of Bessel-Gaussian vortex beam by combining technology

物理学报. 2018, 67(13): 134203 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180325>

#### 声子晶体中的多重拓扑相

Multiple topological phases in phononic crystals

物理学报. 2017, 66(22): 227804 <https://doi.org/10.7498/aps.66.227804>

#### 利用单轴压强下的电阻变化研究铁基超导体中的向列涨落

Nematic fluctuations in iron-based superconductors studied by resistivity change under uniaxial pressure

物理学报. 2018, 67(12): 127401 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180627>

#### 相场模型及其在电化学储能材料中的应用

Phase-field model and its application in electrochemical energy storage materials

物理学报. 2020, 69(22): 226401 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20201411>

# 拓扑荷在圆盘状向列相液晶薄膜中的尺寸效应\*

梁德山<sup>1)</sup> 黄厚兵<sup>2)</sup> 赵亚楠<sup>1)</sup> 柳祝红<sup>1)</sup> 王浩宇<sup>1)</sup> 马星桥<sup>1)†</sup>

1) (北京科技大学数理学院, 北京 100083)

2) (北京理工大学前沿交叉科学研究院, 北京 100081)

(2020年9月30日收到; 2020年10月16日收到修改稿)

拓扑现象对于病毒颗粒的空间分布、高分子聚合物纳米囊泡的成型以及玻色-爱因斯坦凝聚物等方面都发挥着重要作用. 本文利用 Landau-de Gennes 理论, 构建模型来模拟液晶中拓扑荷分布及其他现象. 通过对数值模型序参量场的演化, 以及模拟液晶薄膜中所生成的拓扑荷之间的相互作用来分析液晶 (Lqc) 薄膜的尺寸对拓扑荷的影响. 研究表明, 随着液晶盘半径增大, 拓扑荷间最优距离与半径之比渐增并趋于稳定. 此研究结论对利用拓扑荷凝聚颗粒物效应设计分离容器有指导意义, 有助于进一步理解拓扑胶体和液晶以及液晶共聚物等软物质中的拓扑现象.

**关键词:** 向列相液晶, 相场, 拓扑荷, Landau-de Gennes 模型

**PACS:** 42.70.Df, 61.30.Jf, 61.30.-v

**DOI:** 10.7498/aps.70.20201623

## 1 引言

拓扑荷是有序介质中形成的拓扑缺陷, 在超流体、玻色-爱因斯坦凝聚物<sup>[1,2]</sup> (Bose-Einstein condensate) 以及卡拉比-丘流形<sup>[3]</sup> (Calabi-Yau manifold) 中都有出现. 它们影响病毒颗粒的分布<sup>[4-6]</sup>、影响液晶的光电性质<sup>[7-10]</sup>、影响液晶共聚物纳米囊泡的自组织成型<sup>[11-13]</sup>. 利用拓扑荷的特殊性质, 装配<sup>[14]</sup>和分离微小颗粒<sup>[15]</sup>、预先设定人真皮纤维细胞的生长纹理及方向<sup>[16]</sup>. 在向列相液晶 (NLqc) 中拓扑荷间有着类电荷的相互作用<sup>[17]</sup>. 在科学研究中制造并控制拓扑荷, 以制作拓扑复合材料<sup>[18,19]</sup>. 拓扑荷是物理学中应用最广泛的概念之一. 液晶中的缺陷也可以用拓扑荷来描述. 液晶及其聚合物等软物质体系中, 液晶分子在空间中占据位置, 而且其分子取向也有丰富多变的排布方式. 其他体系中能够出现的拓扑现象, 在液晶体系中都有存在, 而

且由于液晶的光学特性, 拓扑现象在液晶体系中十分便于观测. 因此液晶等软材料是研究此类拓扑现象的优良研究对象.

本工作模拟拓扑荷在不同尺寸的圆盘型向列相液晶薄膜中的空间分布<sup>[20,21]</sup>, 模拟格点大小  $128 \times 128 \times 4$ , 格点尺寸与模拟圆盘的半径相关. 并且模拟了液晶圆盘的偏光光学显微镜 (polarizing optical microscope, POM) 视图. 基于自由能最小化的数值模拟结果表明, 向列相液晶薄膜中的二维拓扑荷, 有近似固定的平衡位置, 平衡位置随圆盘大小浮动, 并由自由能平面分布图来解释这一现象.

## 2 理论计算模型及方法

液晶中的缺陷可以用缺陷的拓扑荷来描述, Landau-de Gennes 模型<sup>[22]</sup>可以解释在物理上观察到的整数拓扑荷和半整数拓扑荷. 在本研究采用 Landau-de Gennes 模型, 通过相场方法模拟向

\* 国家自然科学基金 (批准号:11174030, 51271157, 11504020) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: xqma@sas.ustb.edu.cn

列相液晶中的拓扑荷.

Landau-de Gennes 模型通过对称的无迹张量  $Q_{ij}$  作为序参量 [22]:

$$Q_{ij} = S \left( n_i n_j - \frac{1}{3} \delta_{ij} \right), \quad (1)$$

$$\text{Tr} \mathbf{Q} = 0, \quad (2)$$

其中,  $S$  是标量序参量, 其范围是  $-1/2 < S < 1$ . 室温下,  $S$  在 0.40—0.60 之间, 本文取  $S = 0.50$ . 向列相液晶指向矢  $\mathbf{n} = (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta)$ , 其中,  $\theta$  是指向矢与  $z$  轴的夹角,  $\varphi$  是指向矢在  $x-y$  平面内的投影与  $x$  轴之间的夹角, 如图 1 (a) 所示.

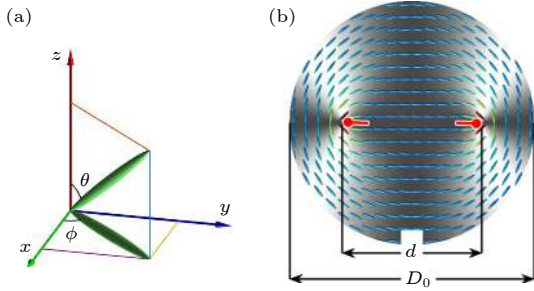


图 1 (a) 液晶指向矢与空间坐标轴之间夹角的示意图; (b) 液晶圆盘直径  $D_0$  和两个大小为  $+1/2$  拓扑荷之间距离  $d$  的示意图, 红色标记表示  $+1/2$  拓扑荷

Fig. 1. (a) Schematic of the angle between director of liquid crystal and the spatial axis; (b) schematic of the NLqc disc diameter  $D_0$  and  $d$  the distance between two topological charges,  $+1/2$  topological charges represented by red markers.

体积自由能密度表达式 [22] 为

$$f_{\text{bulk}} = \frac{1}{2} a Q_{ij} Q_{ij} - \frac{1}{3} b Q_{ij} Q_{jk} Q_{kl} + \frac{1}{4} c_1 (Q_{ij} Q_{ij})^2 + \frac{1}{4} c_2 Q_{ij} Q_{jk} Q_{kl} Q_{li}, \quad (3)$$

其中,  $a = (a^*(T - T^*))$ ,  $T$  是温度,  $T^*$  为相变点,  $b$ ,  $c_1$  和  $c_2$  与具体材料有关 [23]. 弹性能表达式为

$$f_{\text{grad}} = \frac{1}{2} L_1 \nabla_i Q_{jk} \nabla_i Q_{jk} + \frac{1}{2} L_2 \nabla_i Q_{ik} \nabla_j Q_{jk} + L_3 \epsilon_{ijk} Q_{il} \nabla_k Q_{jl}, \quad (4)$$

其中 Landau-de Gennes 模型的弹性能系数 [23]  $L_1 = 4.20 \times 10^{-12}$  (N),  $L_2 = 5.51 \times 10^{-12}$  (N),  $L_3 = 1.02 \times 10^{-12}$  (N) 它们的值和展曲弹性系数  $k_{11} = 6.7010^{-12}$  (N), 扭曲弹性系数  $k_{22} = 3.60 \times 10^{-12}$  (N), 弯曲弹性系数  $k_{33} = 9.00 \times 10^{-12}$  (N) [24] 以及  $S$  相关 [25,26], (5CB(LC 1264) [27] 的展曲、扭曲和弯曲弹性能系数  $\epsilon_{ijk}$  是列维-奇维塔符号:

$$L_1 = (k_{33} + 2k_{22} - k_{11}) / (9S^2), \quad (5)$$

$$L_2 = 4(k_{11} - k_{22}) / (9S^2), \quad (6)$$

$$L_3 = (k_{33} - k_{11}) / (9S^3). \quad (7)$$

表面锚定能密度 [28] 为

$$f_s = W_1 (\tilde{Q}_{ij} - \tilde{Q}_{ij}^{\parallel}) + W_2 (\tilde{Q}_{ij}^2 - S^2)^2, \quad (8)$$

其中  $W_1 > 0$  ( $W_1 = 9.00 \times 10^{-8}$  (N)) 对应锚定强度, 有利于指向矢沿着边界的切线方向,  $W_2 > 0$  保证了表面标量参数的最小值.  $\tilde{Q}_{ij} = Q_{ij} + \frac{1}{3} S \delta_{ij}$ ,  $\tilde{Q}_{ij}^{\parallel} = P_{ij} Q_{kl} P_{lj}$ , 其中  $P_{ij} = \delta_{ij} - t v_i v_j$ ,  $\vec{v}$  是边界切线方向的单位矢量.

系统总自由能为

$$F = F_0 + \int_{\Omega} (f_{\text{bulk}} + f_{\text{grad}}) d^3x + \int_{\partial\Omega} f_s ds. \quad (9)$$

在相场模拟中, 相场参数的演化是由含时 Ginzburg-Landau 方程控制:

$$\frac{\partial Q_{ij}(r, t)}{\partial t} = -\Gamma \frac{\delta F}{\delta Q_{ij}(r, t)}, \quad (i, j = x, y, z), \quad (10)$$

其中  $\Gamma$  是向列相液晶的黏度系数. 数值方法求解方程 (10), 得到向列相液晶的指向矢随时间的空间分布, 从而得到向列相液晶中的缺陷的演化. 模型所用参数如表 1 所列.

表 1 5CB(LC 1264) 的弹性常数 [27]  
Table 1. Elastic constants of 5CB (LC 1264).

Constants/N	5CB
$k_{11}$	$6.70 \times 10^{-12}$
$k_{22}$	$3.60 \times 10^{-12}$
$k_{33}$	$9.00 \times 10^{-12}$
$L_1$	$4.20 \times 10^{-12}$
$L_2$	$5.51 \times 10^{-12}$
$L_3$	$1.02 \times 10^{-12}$

### 3 结果与讨论

对于不同半径的液晶圆盘, 使用  $128 \times 128 \times 4$  的网格系统, 计算不同指向矢分布的体系总自由能大小. 如图 1 (b) 所示, 液晶盘直径为  $D_0$  (取 0.4—12 mm), 其中格点尺寸对应为 (0.0031, 0.0055, 0.0078, 0.0102, 0.0141, 0.0234 0.0391, 0.0547, 0.0703, 0.0938) mm, 在每个圆盘中对称分布有两

个值为  $1/2$  的拓扑荷, 两个拓扑荷的距离为  $d$ , 计算总自由能, 得到不同尺寸圆盘状液晶薄膜总自由能随拓扑荷之间的距离变化的彩色曲线如图 2 (a) 所示, 其中曲线上标注的自由能最小值点即为两个拓扑荷的最优距离. 其中, 在两个拓扑荷间距  $d/D_0$  在  $0.542\text{--}0.559$  时, 为二者最优距离, 此时自由能最小.

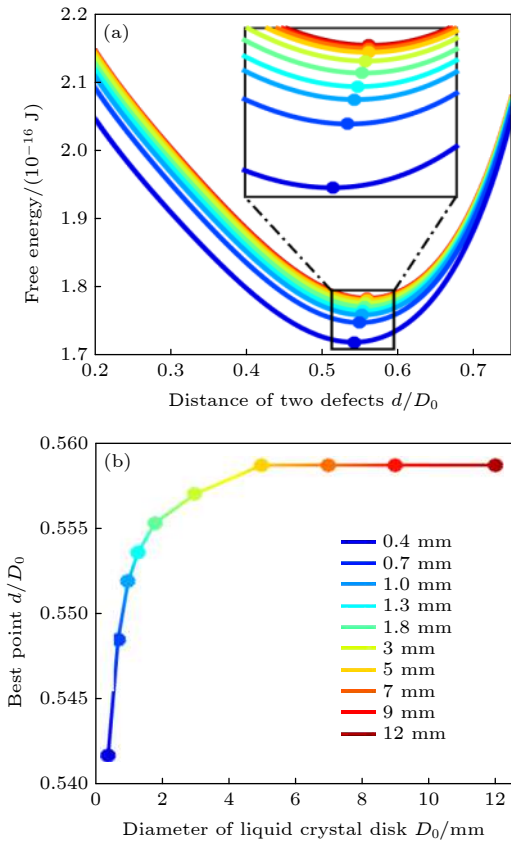


图 2 (a) 直径分别为 0.4—12 mm 圆盘中液晶薄膜自由能随中心两个拓扑荷的间距变化曲线; (b) 两个拓扑荷的最优位置随液晶圆盘直径变化的趋势图

Fig. 2. (a) The free energy of liquid crystal film in a disk with diameters ranging from 0.4 mm to 12 mm as a function of the distance between the two topological charges; (b) the trend of the optimal position of the two topological charges as a function of the diameter of the liquid crystal disk.

图 2 (b) 中曲线上的点是由图 2 (a) 每条曲线上的自由能最小值点得到的. 自由能最小值点, 随圆盘直径变化, 其变化规律如图 2 (b) 所示, 随直径由 0.4 mm 到 12 mm 逐渐增大, 在 0—5 mm 段内, 两个  $+1/2$  缺陷平衡位置的距离与圆盘直径的比值逐渐增大, 由 0.542 增大到趋近于 0.558, 5—12 mm 段, 这一比值保持在 0.559 附近. 这种

现象是因为, 边界锚定能作用区域较小, 随着圆盘直径增大, 两个拓扑荷距离边界越来越远, 边界对其排斥作用越来越小.

图 3 (a), 和图 3(b) 分别为液晶圆盘直径为 0.4 和 12 mm 模拟超长时间的 POM 偏光显微镜下的显影. 可以看出, 直径为 0.4 mm 时两个  $+1/2$  的拓扑荷比直径为 12 mm 时更靠近圆心. 图 3 (c), 和图 3(d) 是模拟过程中的 POM 图像, 模拟过程中两个拓扑荷的夹角在非常长的时间内都在  $140^\circ\text{--}180^\circ$  之间不断变化.

基于以上的结果, 固定一个  $+1/2$  的拓扑荷在距离圆心  $0.55 R_0$  处, 另一个  $+1/2$  的拓扑荷遍历整个圆面, 通过数值方法计算出体系的总自由能随其位置变化的热值图, 如图 3 (e) 所示. 在图中左侧蓝色月牙状区域体系自由能最小, 因此平衡时拓扑荷优先占据此区域. 这一结果与 Duclos 等<sup>[29]</sup> 拍

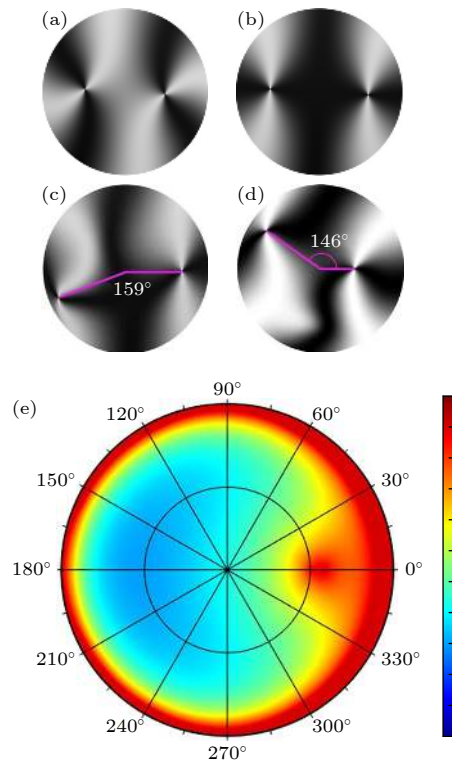


图 3 (a)—(d) 偏光镜图片 (a), (b) 圆盘直径为 0.4 和 12 mm 时得到的平衡位置 POM 图; (c), (d) 计算模拟的接近最终平衡位置的偏光显微镜图片. (e) 自由能随角度和位置变化的分布图

Fig. 3. (a)—(d) are polarizing optical microscope images: (a), (b) are POM images of the optimal positions for disk diameters of 0.4 and 12 mm, respectively; (c), (d) POM images of a near-final optimal position obtained from computational simulation. (e) Free energy as a function of position.



摄的 486 个圆盘结果一致. 图 3 (e) 中自由能较低的区域, 正是第二个拓扑荷出现概率最大的区域. 两个拓扑荷的夹角在  $140^\circ$ — $180^\circ$  之间.

演化过程中两个拓扑荷的位置不断变化, 在统计路径时, 通过旋转液晶圆盘, 把其中一个拓扑荷固定在圆心指向右侧的半径上, 它可以在此半径上左右平移. 模拟十种不同的相对位置, 得到十条曲线, 如图 4 所示. 图中黑色圆点表示轨迹的起点, 蓝色圆点表示轨迹的终点; 每个彩色线代表一组拓扑荷的相对运动轨迹, 红色到蓝色的变化表示时间. 图中拓扑荷的运动轨迹最后都走向图 3 (e) 所示的蓝色区域, 此区域是自由能较低的状态.

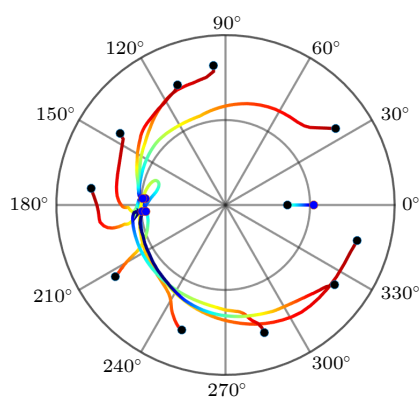


图 4 十个不同相对位置的拓扑荷演化过程的运动迹图

Fig. 4. Motion traces of the topological charges evolution process for 10 different relative positions.

## 4 结 论

圆盘的尺寸对拓扑荷的平衡位置有影响. 拓扑荷的相对平衡位置在 0.542—0.558 之间, 其中 0—5 mm 液晶圆盘中两个  $+1/2$  拓扑荷的间距与圆盘直径的比值由 0.542 增大到 0.558, 之后在 5—12 mm 段这一比值基本稳定在 0.558. 随着圆盘尺寸的增大边界锚定能的影响越小, 平衡位置即两拓扑荷的间距与圆盘直径的比值趋近于恒定值. 这一平衡位置是圆盘边界对  $+1/2$  拓扑荷的斥力和这两个拓扑荷之间排斥力平衡的结果. 液晶圆盘中两个拓扑荷的夹角在  $140^\circ$ — $180^\circ$  之间. 拓扑荷的运动轨迹, 是其寻找自由能最低点的过程, 轨迹的终点在自由能最小值区域.

## 参考文献

- [1] Crawford G P, Zumer S 1996 *Liquid Crystals in Complex Geometries: Formed by Polymer and Porous Networks* (CRC Press: Boca Raton) p521
- [2] Takeuchi H, Tsubota M 2006 *J. Phys. Soc. Jpn.* **75** 063601
- [3] Joyce D D 2000 *Compact Manifolds with Special Holonomy* (Oxford: Oxford University Press) p395.
- [4] Dammone O J, Zacharoudiou I, Dullens R P, Yeomans J M, Lettinga M P, Aarts D G 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 108303
- [5] Duclos G, Adkins R, Banerjee D, Peterson M S E, Varghese M, Kolvin I, Baskaran A, Pelcovits R A, Powers T R, Baskaran A, Toschi F, Hagan M F, Streichan S J, Vitelli V, Beller D A, Dogic Z 2020 *Science* **367** 1120
- [6] Manyuhina O V, Lawlor K B, Marchetti M C, Bowick M J 2015 *Soft Matter* **11** 6099
- [7] Smalyukh I I, Lansac Y, Clark N A, Trivedi R P 2010 *Nat. Mater.* **9** 139
- [8] Senyuk B, Liu Q, He S, Kamien R D, Kusner R B, Lubensky T C, Smalyukh I I 2013 *Nature* **493** 200
- [9] Liu Y J, Sun W M, Liu X Q, Yao L S, Lu X H, Xuan L 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 114211 (in Chinese) [刘永军, 孙伟民, 刘晓颀, 姚丽双, 鲁兴海, 宣丽 2012 *物理学报* **61** 114211]
- [10] Lü Y L, Yin X B, Yang Y, Liu Y J, Yuan L B 2017 *Acta Phys. Sin.* **66** 154205 (in Chinese) [吕月兰, 尹向宝, 杨月, 刘永军, 苑立波 2017 *物理学报* **66** 154205]
- [11] Ackerman P J, van de Lagemaat J, Smalyukh I I 2015 *Nat. Commun.* **6** 6012
- [12] Xing X, Shin H, Bowick M J, Yao Z, Jia L, Li M H 2012 *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A* **109** 5202
- [13] Opathalage A, Norton M M, Juniper M P N, Langeslay B, Aghvami S A, Fraden S, Dogic Z 2019 *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **116** 4788
- [14] Dolganov P V, Cluzeau P, Dolganov V K 2019 *Liq. Cryst. Rev.* **7** 1
- [15] Peng C, Lavrentovich O D 2019 *Micromachines-Basel* **10** 02187
- [16] Turiv T, Krieger J, Babakhanova G, Yu H, Shiyankovskii S V, Wei Q H, Kim M H, Lavrentovich O D 2020 *Sci. Adv.* **6** eaaz6485
- [17] Giomi L, Kos Z, Ravnik M, Sengupta A 2017 *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **11** 4
- [18] Liu Q, Senyuk B, Tasinkevych M, Smalyukh I I 2013 *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **110** 9231
- [19] Solodkov N V, Shim J U, Jones J C 2019 *Nat. Commun.* **10** 198
- [20] Liang D, Ma X, Liu Z, Jafri H M, Cao G, Huang H, Shi S, Chen L Q 2020 *J. Appl. Phys.* **128** 124701
- [21] Tang X, Selinger J V 2017 *Soft Matter* **13** 5481
- [22] De Gennes P G, Prost J 1993 *The Physics of Liquid Crystals* (Vol. 83) (New York: Oxford University Press) p597.
- [23] Pelka R, Saito K 2006 *Phys. Rev. E* **74** 041705
- [24] Frank F C 1958 *Discuss. Faraday Soc.* **25** 19
- [25] Berreman D W, Meiboom S 1984 *Phys. Rev. A* **30** 1955
- [26] Longa L, Monselesan D, Trebin H R 1987 *Liq. Cryst.* **2** 769
- [27] Inukai T, Miyazawa K 1917 *Outline of Development of Nematic Liquid Crystal Compounds for LCD* (The Museum: King's Printer for British Columbia) p559.
- [28] Fournier J B, Galatola P 2005 *Europhys. Lett.* **72** 403
- [29] Duclos G, Erlenkämper C, Joanny J F, Silberzan P 2017 *Nat. Phys.* **13** 58

# Size effect of topological charge in disc-like nematic liquid crystal films\*

Liang De-Shan<sup>1)</sup> Huang Hou-Bing<sup>2)</sup> Zhao Ya-Nan<sup>1)</sup> Liu Zhu-Hong<sup>1)</sup>  
Wang Hao-Yu<sup>1)</sup> Ma Xing-Qiao<sup>1)†</sup>

<sup>1)</sup> (*Department of Physics, University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083, China.*)

<sup>2)</sup> (*Advanced Research Institute of Multidisciplinary Science, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China.*)

( Received 30 September 2020; revised manuscript received 16 October 2020 )

## Abstract

Algebraic topology, algebraic geometry, and category theory are new branches of mathematics that have developed in the last hundred years and have had profound collisions with modern physics in recent decades. A large number of topological phenomena are found in systems such as viruses, bacteria, fingerprints, fish school, typhoons, and the galaxies. Topological phenomena play a significant role in the spatial distribution of viral particles, the formation of nanovesicles of polymer, and Bose-Einstein condensates. In this paper, based on Landau-de Gennes theory, models have been constructed to simulate the topological charge distribution and other topological phenomena in liquid crystals. The research indicates that as the radius of the liquid crystal panel grows, the ratio of the optimal distance between the topological charge to the radius gradually increases and tends to stabilize. The size of the disc affects the equilibrium position of the topological load. The relative equilibrium position of topological load is between 0.542 and 0.558, in which the ratio of the distance between the two  $+1/2$  topological loads in the 0–5 mm disc increases from 0.542 to 0.558, and then in the 5–12 mm section the ratio is almost stable at 0.558. As the size of the disc increases, the influence of the boundary anchoring energy decreases, and the equilibrium position, i.e. the distance between the two topological charges and the diameter of the disc, approaches a constant value. This equilibrium position is the result of the repulsive force of the disc boundary on the  $+1/2$  topological load and the repulsive force between the two topological loads. The angle between two topological charges in a liquid crystal disc is between  $140^\circ$  and  $180^\circ$ . The trajectory of the topological charge is the process of finding the lowest free energy point, and the end of the trajectory is in the region of minimum free energy. The result is instructive significance in the design of classification containers by using topological charge condensate effect. And it is helpful to further understand the topological phenomena in soft materials including topological colloids, liquid crystals, and liquid crystal copolymers.

**Keywords:** nematic liquid crystal, phase-field, topological charge, Landau-de Gennes model

**PACS:** 42.70.Df, 61.30.Jf, 61.30.-v

**DOI:** [10.7498/aps.70.20201623](https://doi.org/10.7498/aps.70.20201623)

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11174030, 51271157, 11504020).

† Corresponding author. E-mail: [xqma@sas.ustb.edu.cn](mailto:xqma@sas.ustb.edu.cn)