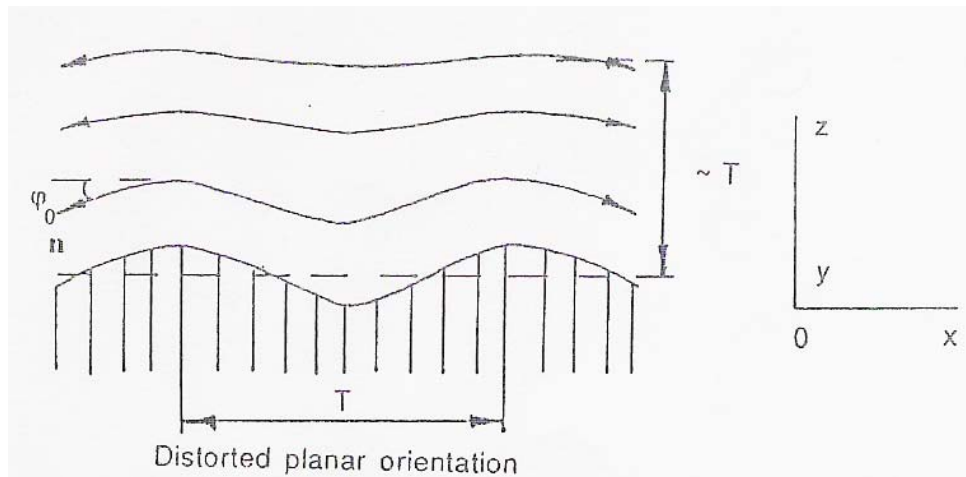


研究題目: 液晶分子於溝槽結構表面上的排列

溝槽理論

使用定向摩擦法製造一個表面的溝槽結構的同時，也會使得鄰近於此表面的液晶分子具有方向上的變形。圖一所示即為一溝槽結構與在其上的導向排列的可能狀況，其中 y 軸方向為溝槽方向，導向的排列於 x-z 表面上。



圖一 distorted planar orientation ; equilibrium director arrangement when the surface director orientation lies in the substrate plane

Bereman 根據分子幾何的觀點出發，於 1972 年提出溝槽理論加以解釋液晶排列的機構。以鑽石粉末摩擦玻璃表面(rubbing)而產生一正弦的起伏結構

$$\zeta = A \cos(qx) \quad (6)$$

其中 q 為波數，A 為振幅。

此一溝槽上的排列狀況可以 mesophase 的液晶分子彈性形變的能量(elastic strain energy)來解釋。由 Frank 的彈性自由能：

$$g = \frac{1}{2} [k_{11}f_1 + k_{22}f_2 + k_{33}f_3 - (k_{22} + k_{24})f_4] \quad (7)$$

其中 g 為單位體積的彈性自由能， k_{11} ， k_{22} ， k_{33} ，分別為 splay、twist、bend 方向的

彈性常數，另外 k_{22} ， k_{24} 則為 splay-twist cross 項的彈性常數； f_1 到 f_4 為液晶分子導向的空間導函數。

首先我們討論 Berreman 所做的幾個假設：

1. 遵守 Oseen-Frank 的彈性體理論
2. 所有秩序參數為常數
3. 在平面的導向都平行於表面
4. 等向性的彈性常數

因此溝槽方向(y 方向上)液晶分子導向的變化可以忽略，所以 f_1 、 f_2 、 f_3 、 f_4 在 y 方向上的導函數都可以忽略，即在 y 方向上的導函數的項都消失。我們將其在其他兩個方向上的變化，利用極角座標以 θ 和 φ 兩個角來重新定義分子導向 n：

$$\begin{aligned} n_x &= \sin \theta \cos \varphi \\ n_y &= \cos \theta \\ n_z &= \sin \theta \sin \varphi \end{aligned} \tag{8}$$

且由於溝槽結構的邊緣不陡峭，我們可以設 θ 為常數，最後我們可以化簡自由能密度為

$$g = \frac{k}{2} \left[\left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \varphi}{\partial z} \right)^2 \right] \tag{9}$$

為了得到最小的自由能，必須滿足 Euler-Lagrange 方程式

$$\left[\left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \varphi}{\partial z} \right)^2 \right] = 0 \tag{10}$$

發生在表面的邊界條件為

$$n_z = -\frac{\partial \zeta}{\partial x} \tag{11}$$

所得到的解為

$$\varphi(x, z) = Aq \cos(qx)e^{-qz} \quad (12)$$

因此彈性變形的自由能密度可以得到

$$g = \frac{k}{2}(Aq)^2 q^2 e^{-2qz} \quad (13)$$

單位面積的總能量，即為 Berreman 所定義出的錨附能(anchoring energy)

$$W_a = \int_0^{\infty} g(z)dz = \frac{1}{4}k(Aq)^2 q \quad (14)$$

但是 Berreman 的 model 在很多情況下並不適用：

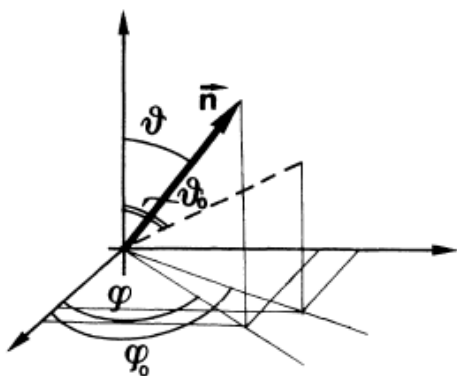
1. 向列型液晶的彈性常數並非處處相等，即非等向性
2. 導向並非總是平行於表面，即沒有考慮到 polar anchoring energy 的 finite 值

引入 polar anchoring

Berreman 的 model 在當秩序參數有所變化時，錨附能並無對應的變化，針對這個問題，Sandro Faetti 在 1986 年提出了關於 polar anchoring energy 的想法。在液晶和表面的交界面由一個單位面積的 excess of surface free energy γ 特性化

$$\gamma = \gamma(\theta_0, \varphi_0) + W(\theta - \theta_0, \varphi - \varphi_0) \quad (15)$$

假設 excess of free energy 沿著一個 easy axis，即其導向沿著 θ_0 和 φ_0 ，會有一個最小值，可由圖二看出其幾何參數。

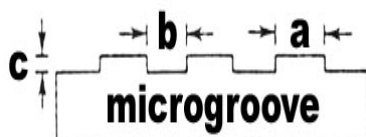


圖二 定義導向在交界面的幾何參數， θ 和 φ 分別為 polar angle(tilt angle)和 azimuthal angle。

微溝槽結構

在 Berreman(1972)的溝槽理論當中，以及 Faetti 在 1986 年所提出而引入的 polar anchoring 裡，都是利用正弦結構的溝槽來進行計算，我們期望可以將此計算的結構改為我們實驗上所做的微溝槽結構來輔助計算加以驗證。

圖三為我們實驗上使用的微溝槽結構。



圖三 微溝槽結構， a 為溝槽突起的方柱寬， b 為方柱間の間隔長度， c 為方柱高度。

主導方程式及邊界條件

若我們將計算的結構改變，主導方程式和邊界條件必須重新決定。為了達到能量最適化，在此我們定義出一個可使能量最低的導向 \hat{n}_b 。

令任一空間的導向為 $\hat{n} = \hat{n}_b + \delta\hat{n}$ ，其中 $\delta\hat{n}$ 為一很小的變異值，利用差分的概念我們列出

$$F(\hat{n}) - F(\hat{n}_b) = a_1\delta\hat{n} + a_2(\delta\hat{n})^2 \quad (29)$$

由於 $\delta \hat{n}$ 很小，因此二次項以上的項都忽略，一次項的係數必須為零。因此可以得到主導方程式

$$\nabla^2 \hat{n} = 0 \quad (30)$$

但若我們再將 surface free energy 考慮進去，則可以得到邊界條件

$$\hat{n} \times (W(\hat{n} \cdot \hat{N} - \cos \theta_0) \hat{N} - K \hat{N} \cdot \nabla \hat{n}) = 0 \quad (31)$$

其中 \hat{N} 為垂直於表面的法向量，因此可以隨著結構的起伏或是不同的結構的改變。因此視不同的結構，可以利用主導方程式和邊界條件進而算出液晶分子的導向排列方向。目前我們做到這個部份，接下來要使用有限差分法來做數值解。