

©2011 р. З.М. Микитюк, О.Є. Сушинський, В.І. Коцун,  
В.С. Петришак, О.В. Чабан

Національний університет "Львівська політехніка", Львів

## ФОРМУВАННЯ ПРОФІЛЮ ПОКАЗНИКА ЗАЛОМЛЕННЯ У ШАРІ РІДКОКРИСТАЛІЧНОГО МАТЕРІАЛУ

З метою створення світловодів на основі рідкокристалічних матеріалів із використанням програмного середовища *GBMOLDD* проведено моделювання розподілу профілю показника заломлення у рідкокристалічному шарі. Змодельовано текстуру приповерхневого шару рідкокристалічного матеріалу під дією електричного поля як із використанням орієнтуючого шару, так і без нього. Проведено порівняльні експериментальні дослідження залежності критичних напруг холестерико-нематичного переходу від впливу поверхні з використанням орієнтуючого шару і без нього.

**Ключові слова:** рідкі кристали, показник заломлення, орієнтуючий шар.

В статье с целью создания световодов на основе жидкокристаллических материалов с использованием программной среды *GBMOLDD* было проведено моделирование распределения профиля показателя преломления в жидкокристаллическом слое. Смоделирована текстура приповерхностного слоя жидкокристаллического материала под воздействием электрического поля как с использованием ориентирующего слоя, так и без него. Проведены сравнительные экспериментальные исследования зависимости критических напряжений холестерико-нематического перехода от влияния поверхности с использованием ориентирующего слоя и без него.

**Ключевые слова:** жидкие кристаллы, показатель преломления, ориентирующий слой.

The modeling of the distribution of the refractive index profile in the liquid crystal layer based on *GBMOLDD* software with the aim to design an optical fiber based on liquid crystal materials is proposed. Simulated texture of surface layer of liquid crystal material when the electric field is applied with orienting layer and without is obtained. The comparative experimental study of critical voltages of cholesteric-nematic transition versus surface influence with orienting layer and without is carry out.

**Keywords:** liquid crystals, refractive index, orienting layer.

### Вступ

У сучасних пристроях оптелектроніки широко застосовують як оптично активні середовища рідкокристалічні (РК) матеріали. Це пояснюється високою чутливістю таких матеріалів до різних зовнішніх впливів і можливістю керування їхніми оптичними властивостями за допомогою зовнішніх електричних і магнітних полів. Перспективним напрямком застосування РК матеріалів є створення на їх основі планарних світловодних структур [1]. Подаючи електричне поле на рідкокристалічну комірку, можна змінювати показник заломлення (РК) шару.

Метою праці є комп'ютерне моделювання впливу приповерхневих умов на зміну напрямку директора молекул рідкого кристала залежно від прикладеної напруги для зраз-

ків з планарно-орієнтуючим полімерним шаром і експериментальне дослідження критичних напруг холестерико-нематичного переходу від впливу поверхні.

### Програмне середовище *GBMOLDD*

Комп'ютерне моделювання молекулярних моделей здійснювалось за допомогою програми *GBMOLDD*, розробленої в Інституті фізики конденсованих систем НАН України Я.М.Ільницьким. Під час написання програми були використані програмні продукти, описані у [2-4]. Програмне середовище *GBMOLDD* працює з двома типами молекулярних моделей, а саме, моделлю гібридного типу, в якій молекулярна структура може містити два типи частинок: *LJ*-типу, які взаємодіють через потенціал Ланнард-Джонса (1) і моделлю двох частинок *GB*-типу, які

взаємодіють через потенціал Гей-Берне (2), наприклад, біфеніл, азобензин тощо. Можливий розгляд і окремих незв'язаних частинок.

$$U_{ij}^{(LJ)} = \left[ \frac{A_i^{(LJ)} A_j^{(LJ)}}{r_{ij}} \right]^{12} - \left[ \frac{C_i^{(LJ)} C_j^{(LJ)}}{r_{ij}} \right]^6, \quad (1)$$

$$U_{ij}^{(LJGB)} = e_{ij}^{(LJGB)} \left[ \left( \rho_{ij}^{(LJGB)} \right)^{12} - \left( \rho_{ij}^{(LJGB)} \right)^6 \right], \quad (2)$$

де  $i$  – псевдоатом  $LJ$ -типу,  $j$  –  $GB$ -типу.

Програмне середовище *GBMOLDD* дає змогу отримувати розподіл напрямку директора у шарі рідкого кристала, а відповідно і величину параметра порядку, безпосередньо пов'язану зі значенням показника заломлення у псевдошарі.

Базовими вхідними даними для проведення моделювання є:

$n_x, n_y, n_z$  – кількість молекул, відповідно, по осі  $Ox, Oy, Oz$ ;

$srf, fstr$  – величина сили зчеплення приповерхневих шарів;

$T$  – температура моделювання;

$axis$  – напрямок орієнтації молекул у приповерхневій області;

$fld-str$  – величина поля, яке діє на молекули РК в одному з напрямків  $Ox, Oy$  або  $Oz$ .

Результати виконання програми записуються у файли двох типів: *\*.coord* та *\*.lst*. Файли типу *\*.coord* дають змогу візуально відобразити переорієнтацію молекул у шарі РК, а відповідно і напрям директора молекул. Файли типу *\*.lst* уможливають отримання числових значень розподілу директора, які в подальшому обробляються для отримання зміни показника заломлення в РК шарі під дією електричного поля. Координатний файл створюється підпрограмою *LATTICE\_GB*.

Для отримання числових значень розподілу напрямку директора в шарі рідкого кристалу на основі отриманих *\*.coord* файлів (змодельованих картин) необхідно скористатися підпрограмою *Ord\_Profile.exe*, яка

входить у програмний пакет *GBMOLDD*.

### Результати моделювання

Початкову конфігурацію молекул рідкого кристала, для якої здійснюється моделювання і розподіл директора наведено на рис.1. У цій моделі напрямок директора може набувати значення від 1 (гомеотропна орієнтація) до  $-0,5$  (планарна орієнтація).

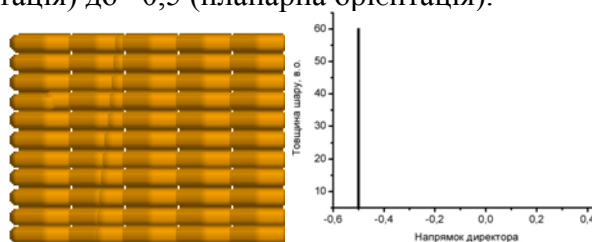


Рис. 1. Змодельована початкова планарна текстура та відповідний розподіл напрямку директора в шарі рідкого кристала.

На рис.2-4 наведено результати моделювання із використанням наведеного програмного пакету *GBMOLDD*, що відображені у програмі *RasMol*, та відповідні значення розподілу напрямку директора, обчислені за допомогою підпрограми *Ord\_Profile.exe*.

На рис.2-4 наведено модельні картини зміни напрямку орієнтації молекул рідкого кристала під дією зовнішнього модельного електричного поля для випадків з орієнтуючим шаром та без нього. Величина модельного електричного поля для обох випадків постійна та дорівнює модельному значенню 1, а напрямок дії поля перпендикулярний до шару рідкого кристала.

Після прикладення до РК шару електричного поля процес переорієнтації молекул починається зі збурення початкової планарної текстури. У подальшому спостерігається переорієнтація центральної частини шару РК для обох випадків. У результаті через певний проміжок часу відбувається переорієнтація більшості молекул РК у напрямку дії поля.

Із отриманих результатів видно, що для випадків з орієнтуючим шаром спостерігається повільніша зміна напрямку орієнтації молекул у приповерхневій області, що підтверджується як змодельованими картинками, так і відповідними числовими значеннями профілю параметра порядку. Для пов-

ної переорієнтації молекул приповерхневого шару час дії зовнішнього модельного електричного поля повинен бути більшим.

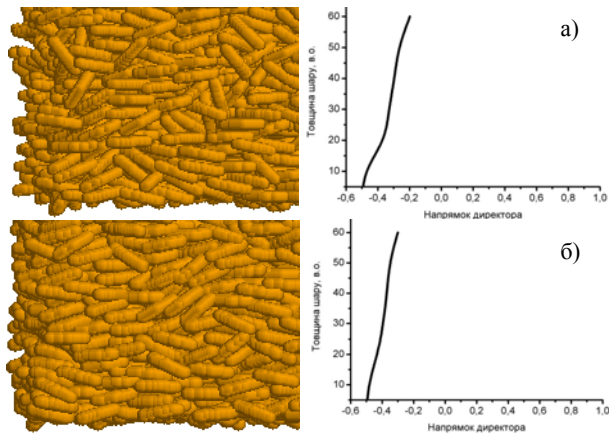


Рис. 2. Змодельовані текстури приповерхневого шару рідкого кристала і розподіл напрямку директора, отримані за результатами комп'ютерного моделювання для зразків: без орієнтуючого шару (а), з орієнтуючим шаром (б). Час дії електричного поля  $t=20$  мс.

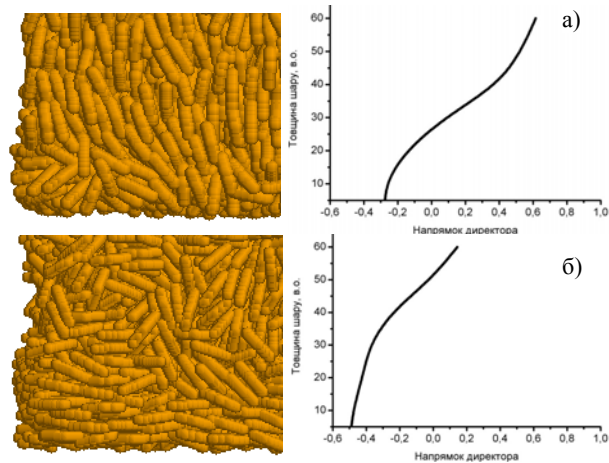


Рис. 3 Те, що рис. 2. Час дії електричного поля  $t=100$  мс.

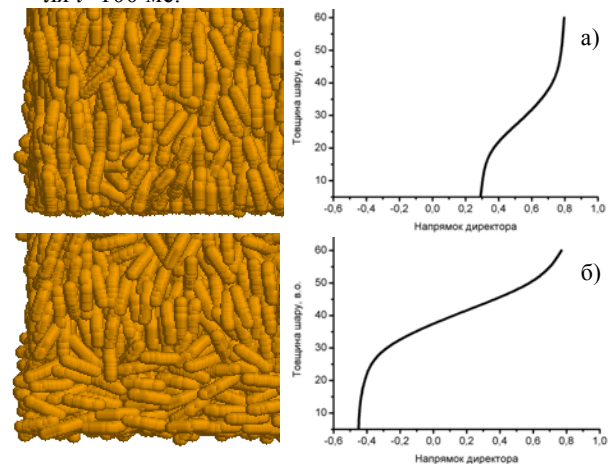


Рис. 4. Те, що рис. 2. Час дії електричного поля  $t=160$  мс.

## Експериментальні дослідження

Нами проведено дослідження залежності критичних напруг холестерико-нематичного переходу  $U_{cn}$  і  $U_{nc}$  від впливу поверхні. Дослідження проводились на сумішах РК-1289+2%СВ15, РК-1289+3,64%СВ15, РК-1289+5%СВ15 з шаром РК завтовшки  $d=20$  мкм. Для дослідів було вибрано комірки без орієнтуючих шарів та з планарно-орієнтуючим полімерним шаром PI 2555. Результати експерименту наведено на рис.5.

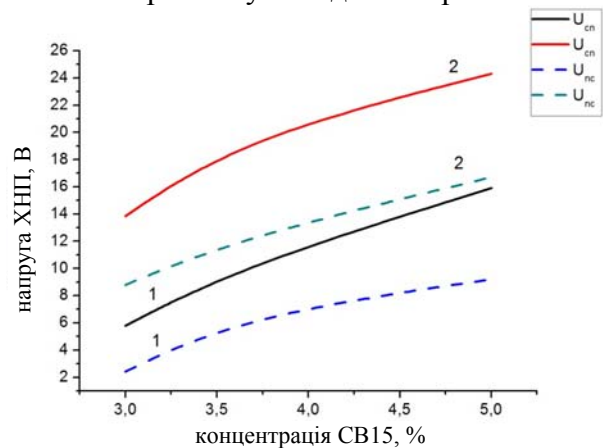


Рис. 5. Залежність критичних напруг ефекту ХНП від концентрації ХД СВ15 для зразків: без орієнтуючого шару (1), з планарно-орієнтуючим полімерним шаром PI 2555 (2).

Як видно з рис.5, наявність орієнтуючого шару приводить до зростання критичних напруг холестерико-нематичного переходу.

Автори виносять велику подяку студентці Національного університету "Львівська політехніка" Ірині Петрусь за допомогу у проведенні комп'ютерного моделювання РК структур.

## Висновки

За результатами проведеного комп'ютерного моделювання і експериментальних досліджень встановлено, що повільна переорієнтація молекул у приповерхневих шарах відбувається у випадках із орієнтуючим шаром і відбувається збільшення критичних напруг холестерико-нематичного переходу. Показано можливість створення світловодних РК структур для елементів інтегральної оптики з керованим електричним полем розподілом показника заломлення (від ступеневого до градієнтного).

## СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. *Brzdakiewicz K., Karpierz M., Fratalocchi A.* Nematic liquid crystal waveguide arrays // *Opto- Electr. Rev.* – 2005. – **13**(2). – P.107.
2. *Wilson M., Stimson L., Ilytskyi J.* The influence of lateral and terminal substitution on the structure of a liquid crystal dendrimer in nematic solution: A computer simulation study // *Liq. Cryst.* – 2006. – **33**(10). – P.1167.
3. *Wilson M., Ilytskyi J., Stimson L.* Computer simulations of a liquid crystalline dendrimer in liquid crystalline solvents // *J. of Chem. Phys.* – 2003. – **119**(6.) – P.3509.
4. *Shaphiannikova M., Radtchenko I., Sukhorukov G., et all.* Molecular-dynamics simulations and X-ray analysis of dye precipitates in the polyelectrolyte microcapsules // *J. of Chem. Phys.* – 2003. – **118**(19). – P.9007.
5. *Hotra Z., Mykytyuk Z., Fechan A. et all.* Method for determining of threshold voltages of cholesteric-nematic transition // *Mol. Cryst. and Liq. Cryst.* – 2011. – **535**. – P.225.
6. *Mykytyuk Z., Fechan A., Gural V. et all.* Study of elastic constants of cholesteric-nematic mixtures // *Mol. Cryst. and Liq. Cryst.* – 2008. – **493**. – P.3.