三维圆柱区域内的液晶线缺陷构型

献给林群教授 80 华诞

胡煜成^①, 屈旻^②, 张平文^{②*}

① 清华大学周培源应用数学中心, 北京 100084;

② 北京大学数学科学学院和数学及其应用教育部重点实验室, 北京 100871

E-mail: huyuc@tsinghua.edu.cn, quyang@pku.edu.cn, pzhang@pku.edu.cn

收稿日期: 2014-11-05; 接受日期: 2014-12-19; * 通信作者

国家自然科学基金 (批准号: 11421101, 11421110001 和 11301294) 资助项目

摘要 由刚性棒状分子构成的向列相液晶是最简单也是理论上研究最多的液晶模型. 当液晶分子在边界上的指向受到拓扑约束时, 液晶材料内部可能会产生缺陷. 预测液晶缺陷的分布和构型是近年来研究的热点和难点. 本文在 Landau-de Gennes 张量模型的基础上, 通过数值模拟, 结合理论分析, 研究三维圆柱区域内液晶缺陷在不同边界条件下的构型. 本文的主要结论为, 线缺陷比点缺陷更常见也更稳定; 边界条件带来的拓扑约束会对线缺陷的构型产生质的影响.

关键词 向列相液晶 Landau-de Gennes 张量模型 线缺陷

MSC (2010) 主题分类 76A15, 81T80, 82D30

1 引言

向列相液晶可以看作是介于长程有序 (如固体) 与完全无序 (如液体) 之间的一种状态. 微观上, 构成向列相液晶的分子可以认为是刚性的棒状分子, 这些各向异性的棒状分子在空间中的排列可使得液晶具有宏观指向性. 与刚性材料不同, 液晶材料的局部指向性很容易因为外界影响 (如边界的几何形状^[1]、不同材料交界面处的分子指向以及外加热、电场、磁场和压力等) 而改变, 而液晶分子指向性的改变往往造成材料性质的改变 (如光学性质、流变学性质和力学性质). 上述性质使得液晶被广泛应用于新材料领域, 如显示器以及各种光学材料和传感器等.

伴随液晶分子局部指向的变化, 在液晶材料中经常会出现缺陷. 直观上, 缺陷包括点缺陷和线缺陷, 它们是由局部分子指向的不连续所导致的 (参见文献 [2]). 缺陷的静力学结构和动力学行为对材料的性质有着重要的影响. 如何理解和预测缺陷的位置和结构是近年来一个研究热点, 相关研究不仅对开发自组装复合型材料有重要的实际意义 (参见文献 [3, 4]), 也对拓展现有的建模、分析和算法具有重要的理论价值 (参见文献 [5-7]).

本文关心在 Landau-de Gennes (LdG) 泛函下三维空间中向列相液晶材料内的缺陷的位置和结构. 相比以 Oseen-Frank 模型为代表的向量模型, LdG 张量模型有两个明显的优势:

(1) 物理上棒状分子的首尾不变性 (即 $-\mathbf{n}$ 与 $\mathbf{n}$ 等价) 在张量模型中能够自动满足, 而向量模型本身并不能保证这一性质 (参见文献 [8]);

英文引用格式: Hu Y C, Qu Y, Zhang P W. Disclination lines of liquid crystals confined in cylinder (in Chinese). Sci Sin Math, 2015, 45: 1249-1264, doi: 10.1360/N012014-00237

(2) 张量模型对液晶状态有更全面的描述, 典型的代表是张量模型存在双轴性的指向, 此时液晶分子的局部平均指向不能仅用一个向量表示, 而数值计算和理论分析都表明, 双轴性与缺陷结构有非常密切的关系 (参见文献 [9, 10]).

本文考虑液晶材料被限制在一个圆柱形区域内, 当区域边界上的液晶分子排布受到特定的拓扑约束时会导致缺陷产生. 通过改变边界条件可以得到各种各样的缺陷. 在平衡状态下, 缺陷的位置和结构由自由能极小与边界约束共同决定, 是二者相互作用下所达成的一个微妙的平衡. 探究在这种平衡下不同缺陷之间的共性及相互关系是本文关注的重点.

我们先来总结一下关于向列相液晶缺陷已有的一些结果. 理论上研究最多的缺陷模型为限制在三维球体内的液晶外加垂直锚定边界条件, 即球面上液晶分子的指向垂直于球面. 此时存在一个径向对称解, 其中球体内任何一点的液晶分子指向都沿径向, 唯一的例外在球心处, 在此处液晶为各向同性, 于是在球心处存在一个拓扑度为 $+1$ 的点缺陷. 对于 LdG 泛函, 理论和数值结果都表明, 当温度充分低时, 该点缺陷不稳定, 会扩张成一个旋转度为 $+1/2$ 的缺陷环 (参见文献 [11–14]). 缺陷环的大小与液晶分子的特征长度为同一量级. 数值模拟还观察到, 缺陷环的外围包裹了一层双轴性区域. 由于双轴性只在张量模型而不在向量模型中出现, 我们猜测向量模型无法给出稳定的线缺陷解, 或者说, 线缺陷是张量模型所特有的 (参见文献 [15]). 最近的理论分析进一步支持了这一猜测 (参见文献 [16, 17]).

在文献 [15] 中, 我们考虑了三维球体内液晶在相切锚定边界条件下缺陷的精细结构, 并依据几何直观对缺陷进行了分类. 我们发现线缺陷附近总是伴随有双轴性的区域, 但是在缺陷处, 液晶处于单轴态, 且沿单轴方向的指向强度系数 s 为负数, 表明液晶在该方向上受到了压缩. 在我们的计算结果中, 缺陷上的单轴指向与缺陷线本身的走向几乎保持一致, 因此, 我们猜测这一性质反映了缺陷的内在属性, 与材料本身的性质和边界条件无关.

为了深入研究液晶缺陷的共性, 我们首先需要获得更多的在不同几何约束和边界条件下的缺陷构型. 我们将考虑限制在三维圆柱形区域内的液晶^[9, 18]. 在文献 [15] 中, 我们考虑了二维圆盘区域内的缺陷结构, 并在不同的边界条件下得到了一系列的缺陷结构. 在液晶状态沿与圆盘垂直的 z 轴方向不变的假设下, 二维圆盘中得到的点缺陷就对应于三维圆柱中的线缺陷, 据此, 我们对线缺陷的局部构型作了详细的刻画. 然而用二维圆盘代替三维圆柱有两个明显的弊端:

- (1) 二维结果转换为三维需要假设解沿 z 轴不变, 而很多情形下这一假设并不成立;
- (2) 在二维情形下无法考虑更为复杂的边界条件 (如旋转等).

因此, 本文将直接对三维圆柱作数值模拟. 另外, 此前计算三维圆柱缺陷结构的工作, 如文献 [19, 20], 只考虑了一类比较特殊的边界条件. 相比之下, 这里考虑了多种不同的边界条件, 并系统地总结了缺陷构型上的相似和不同之处, 最终, 我们希望回答下列问题:

(1) 点缺陷是否存在? 这个问题又可以分为两个方面: 是否存在离散的各向同性的点缺陷? 对于三维球内液晶加上垂直锚定边界条件, 这样的点缺陷在一定参数范围内是存在且稳定的. 而对于三维圆柱在侧面加上垂直锚定边界条件, 文献 [19] 指出, 不论参数如何选取, 都不存在点缺陷. 因此, 我们思考, 是否对于其他的边界条件也不存在单个点缺陷? 问题的第二个方面涉及缺陷的收缩性. 我们知道, 垂直锚定边界条件下三维球中的缺陷环的大小主要由材料性质决定, 如果我们令球半径 R 趋于无穷大, 同时对球坐标作归一化 $\tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{x}/R$, 将区域变换成单位球, 则缺陷环将收缩到一个点, 因此在极限的意义下得到一个点缺陷. 对于相切锚定边界条件下的三维球中的缺陷, 上述极限行为同样成立. 因此, 我们问, 是否这个性质对于圆柱也是成立的, 或者说 Oseen-Frank 模型是否可以看作是 LdG 模型的某种极限?

(2) 缺陷处的液晶分子指向与线缺陷自身的方向之间有何关系? 文献 [15] 中的计算结果表明, 绝

大多数情形下缺陷位置上的液晶指向与线缺陷自身的方向重合. 这里希望进一步探讨缺陷处液晶指向与线缺陷切方向之间的关系并试图发现线缺陷结构内在的、与边界和参数无关的性质.

针对上述问题, 本文接下来的部分将以如下结构展开: 第 2 节给出 LdG 泛函的数学描述以及问题的设定, 并介绍所采用的数值方法; 第 3 节按照拓扑性质对边界条件进行分类, 并讨论不同边界条件下缺陷的位置和结构; 第 4 节总结和讨论本文的主要结果.

2 模型

2.1 Landau-de Gennes 泛函

令 $\Omega = D_R \times [0, H]$ 为 $\mathbb{R}^3$ 中圆柱形区域, 其中

$$D_R := \{(x, y) \mid x^2 + y^2 \leq R^2\}$$

是半径为 R 的圆盘. 我们使用张量序参量 $\mathbf{Q}$ 来描述液晶的状态, $\mathbf{Q} \in W^{1,2}(\Omega; \mathcal{S}_0)$,

$$\mathcal{S}_0 := \{\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{3 \times 3} : \mathbf{Q} = \mathbf{Q}^T, \operatorname{tr}(\mathbf{Q}) = 0\}$$

为 3×3 的对称迹零矩阵构成的集合. LdG 泛函为

$$F[\mathbf{Q}] = \int_{\Omega} f_b(\mathbf{Q}) + f_e(\mathbf{Q}) dV, \quad (2.1)$$

其中体积能

$$f_b(\mathbf{Q}) = \frac{A}{2} \operatorname{tr}(\mathbf{Q}^2) - \frac{B}{3} \operatorname{tr}(\mathbf{Q}^3) + \frac{C}{4} \operatorname{tr}(\mathbf{Q}^2)^2, \quad (2.2)$$

弹性能

$$f_e(\mathbf{Q}) = \frac{L}{2} \mathbf{Q}_{ij,k} \mathbf{Q}_{ij,k}.$$

A, B 和 C 为由系统温度和材料性质决定的参数, L 为材料的弹性系数. 注意, 这里对重复下标默认求和, 逗号表示对相应分量的空间导数. 对上述泛函作无量纲化, 取

$$\xi_0 = \sqrt{\frac{27CL}{B^2}}$$

为特征长度,

$$t = \frac{27AC}{B^2}$$

为特征温度, 令

$$\tilde{x} = \frac{x}{\xi_0}, \quad \tilde{\mathbf{Q}} = \sqrt{\frac{27C^2}{2B^2}} \mathbf{Q}, \quad \tilde{F} = \sqrt{\frac{27C^3}{4B^2L^3}} F,$$

可得

$$\tilde{F}[\tilde{\mathbf{Q}}] = \int_{\tilde{\Omega}} \tilde{f}_b(\tilde{\mathbf{Q}}) + \frac{1}{2} \tilde{\mathbf{Q}}_{ij,k} \tilde{\mathbf{Q}}_{ij,k} dV,$$

其中积分区域 $\tilde{\Omega}$ 变为

$$D_{\tilde{R}} \times [0, \tilde{H}], \quad \tilde{R} = \frac{R}{\xi_0}, \quad \tilde{H} = \frac{H}{\xi_0},$$

体积能

$$\tilde{f}_b(\tilde{\mathbf{Q}}) = \frac{t}{2} \text{tr}(\tilde{\mathbf{Q}}^2) - \sqrt{6} \text{tr}(\tilde{\mathbf{Q}}^3) + \frac{1}{2} \text{tr}(\tilde{\mathbf{Q}}^2)^2.$$

以下所有的记号均默认带有 $\sim$ 上标, 略去该记号后自由能为

$$F[\mathbf{Q}] = \int_{\Omega} \frac{t}{2} \text{tr}(\mathbf{Q}^2) - \sqrt{6} \text{tr}(\mathbf{Q}^3) + \frac{1}{2} \text{tr}(\mathbf{Q}^2)^2 + \frac{1}{2} \mathbf{Q}_{ij,k} \mathbf{Q}_{ij,k} dx. \quad (2.3)$$

定义 $\mathcal{S}_0$ 的子集

$$\mathcal{U} := \left\{ \mathbf{Q} = s \left(\mathbf{n}\mathbf{n} - \frac{\mathbf{I}}{3} \right) : s \in \mathbb{R}, \mathbf{n} \in \mathbb{S}^2 \right\}, \quad (2.4)$$

以及

$$\mathcal{U}^+ := \left\{ \mathbf{Q} = s^+ \left(\mathbf{n}\mathbf{n} - \frac{\mathbf{I}}{3} \right) : \mathbf{n} \in \mathbb{S}^2 \right\}, \quad (2.5)$$

其中

$$s^+ = \sqrt{\frac{3}{2}} \cdot \frac{3 + \sqrt{9 - 8t}}{4}. \quad (2.6)$$

$\mathcal{U}$ 为满足单轴性的 $\mathbf{Q}$ 所在的集合, 而在 $\mathcal{U}^+$ 中进一步限制了 $\mathbf{Q}$ 的指向性序参量 s 为常数 s^+ , 即 $\mathcal{U}^+$ 是使体积能 f_b 取到极小的全体 $\mathbf{Q}$ 的集合.

2.2 边界条件

考虑在边界 $\partial\Omega$ 上 $\mathbf{Q}$ 满足的边界条件. 在圆柱侧面 $\partial D_R \times [0, H]$ 上, 我们给定 Dirichlet 边界条件: 假定 $\mathbf{Q} \in \mathcal{U}^+$, 且 $\mathbf{n}$ 所在直线方向由线场 g 给出, 其中 g 为从 $\partial D_R \times [0, H]$ 到 $\mathbb{R}P^2$ 中的连续映射, $\mathbb{R}P^2$ 为 $\mathbb{S}^2$ 在等价关系 $\mathbf{n} \sim -\mathbf{n}$ 下的商空间. 在圆柱的上下底面 $\mathbf{Q}$ 满足周期边界条件:

$$\mathbf{Q}(x, y, 0) = \mathbf{Q}(x, y, H), \quad \forall (x, y) \in D_R.$$

注 1 尽管限制在 $\mathcal{U}^+$ 上 LdG 泛函和 Oseen-Frank 泛函有着完全等价的自由能表达式, 但两者仍有一个重要区别: 前者中 $\mathbf{Q}$ 同构于 $\mathbb{R}P^2$ 中的线场, 而后者中 $\mathbf{n}$ 属于单位向量场 $\mathbb{S}^2$. 以 $\mathbf{n}$ 和 $-\mathbf{n}$ 为例, 在 $\mathbb{R}P^2$ 中两者等价而在 $\mathbb{S}^2$ 中两者不相等. 从一个连续的向量场总能诱导出一个连续的线场; 反过来一个连续的线场却不一定总能嵌入到一个连续的向量场中, 具体参见文献 [8]. 由于 $\mathbb{R}P^2$ 的基本群为 $\mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$, 因此, 任何边界条件 $g(\partial D_R \times [0, H], \mathbb{R}P^2)$, 要么对应 $\mathbb{R}P^2$ 中的平凡群 — 此时 g 可以诱导出 $\mathbb{S}^2$ 中的连续连续向量场; 要么对应 $\mathbb{R}P^2$ 中的非平凡群 — 此时不存在能被 g 嵌入的连续向量场. 这个性质对缺陷的拓扑结构有着深刻的影响 (见定理 1).

2.3 双轴性和缺陷的表示

张量 $\mathbf{Q} \in \mathcal{S}_0$ 为 3×3 对称迹零矩阵, 当矩阵 $\mathbf{Q}$ 的三个特征值都相等 (都等于 0) 时对应各向同性状态; 当有且仅有两个特征值相等时对应单轴态, 此时 $\mathbf{Q}$ 可以写成公式 (2.4) 的形式, $\mathbf{n}$ 为对应的轴方向; 当 $\mathbf{Q}$ 的三个特征值都不相等时, $\mathbf{Q}$ 具有双轴性, 此时我们定义指标 β 来表征双轴性的强度,

$$\beta = 1 - 6 \frac{(\text{tr} \mathbf{Q}^3)^2}{(\text{tr} \mathbf{Q}^2)^3}. \quad (2.7)$$

对任意 $\mathbf{Q} \neq \mathbf{0}$ 有 $0 \leq \beta \leq 1$, 且 $\mathbf{Q}$ 为单轴等价于 $\beta = 0$.

为了将张量场 $Q(\Omega, \mathcal{S}_0)$ 可视化, 我们计算出 Ω 上每一点处 Q 的特征值 $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \lambda_3$ 和特征向量 ν_1, ν_2, ν_3 . 由 Q 的物理意义可知, 在无量纲化之前, Q 的特征值在 $[-1/3, 2/3]$ 之间 (参见文献 [21]). 设无量纲化之后的 Q 的特征值的取值范围变为 $[\lambda_{\min}, \lambda_{\max}]$, 其中 $\lambda_{\max} = -2\lambda_{\min}$, 我们定义

$$D = \frac{Q^{\text{diag}} - \lambda_{\min} I}{\lambda_{\max} - \lambda_{\min}} = \begin{pmatrix} d_1 & 0 & 0 \\ 0 & d_2 & 0 \\ 0 & 0 & d_3 \end{pmatrix},$$

其中 Q^{diag} 为 Q 的对角阵, I 为单位矩阵. 矩阵 D 的特征值满足 $d_1 \geq d_2 \geq d_3 \geq 0$ 以及 $d_1 + d_2 + d_3 = 1$. 图像上我们可以用一个椭球来表示张量 Q , 该椭球的三个半轴长度分别等于 D 的特征值, 轴的方向为对应的 Q 的特征方向. 在这种表示方式下, 各向同性的 Q 对应一个球, 单轴的 Q 对应长球形 ($s > 0$) 或扁球形 ($s < 0$). 当 Q 是单轴时, 我们也可以用圆柱来表示, 其中半径对应 D 的两个相等特征值, 高为其第三个特征值.

为了找出缺陷点的位置, 根据文献 [22], 我们定义

$$c_l = d_1 - d_2, \quad c_p = 2(d_2 - d_3), \quad c_s = 3d_3. \quad (2.8)$$

c_l, c_p 和 c_s 满足性质

$$0 \leq c_l, \quad c_p, c_s \leq 1,$$

以及

$$c_l + c_p + c_s = 1.$$

在缺陷点处 $c_l = 0$, 所以, $c_l = \delta$ 的等值面可用来表征缺陷的位置, 其中 δ 是一个小的正常数.

2.4 数值算法

这里对本文中使用的算法进行一个简单的描述. 我们计算的泛函是 (2.3) 所示的 LdG 自由能加上由边界条件导出的惩罚项. 考虑圆柱内的一组基函数, 它在 x 和 y 方向由多项式构成, 在 z 方向由三角函数构成. 我们对 $Q \in \mathcal{S}_0$ 利用这组基函数进行展开, 泛函将变为关于展开式系数的函数. 接着再使用 BFGS 方法 [23] 进行迭代求出函数的极小点. 这种谱展开的方法很适合于球体、圆盘或圆柱等规则几何图形, 与有限差分或者有限元相比, 它能在变量更少的情形下给出更高的精度. 算法具体细节见附录.

3 数值结果和分析

3.1 沿 z 轴方向不变的边界条件

首先考虑一类沿 z 轴方向不变的边界条件, 此时只需在圆盘边界 ∂D_R 上给定液晶分子的指向. 假设 $\mathbf{n}$ 满足

$$\mathbf{n}(R \cos \theta, R \sin \theta) = \left(\cos \frac{k}{2} \theta, \sin \frac{k}{2} \theta, 0 \right), \quad (3.1)$$

其中 $0 \leq \theta < 2\pi$, $k = \pm 1, \pm 2, \dots$. 容易验证 $\mathbf{n}$ 投影在 $\mathbb{R}P^2$ 上 ($\forall \mathbf{n} \in \mathbb{S}^2$, $\mathbf{n}$ 在 $\mathbb{R}P^2$ 上的投影 $\mathbf{l}$ 为 $\mathbf{n}$ 或 $-\mathbf{n}$ 所在的直线) 是连续线场. 我们有如下引理:

引理 1 在射影空间 $\mathbb{R}P^2$ 中, 当 k 为偶数时, (3.1) 对应的线场可以连续延拓到整个圆盘区域 D_R ; 当 k 为奇数时则不存在这样的连续延拓: 即满足该边界条件的区域 D_R 中的线场必含有奇点.

证明 对于 k 为偶数的情形, 我们可以构造如下的向量场:

$$\tilde{\mathbf{n}}(r \cos \theta, r \sin \theta) = \left(\frac{r}{R} \cos \frac{k}{2} \theta, \frac{r}{R} \sin \frac{k}{2} \theta, \sqrt{1 - \left(\frac{r}{R} \right)^2} \right), \quad 0 \leq r \leq R. \quad (3.2)$$

容易验证向量场 $\tilde{\mathbf{n}}$ 为 $\mathbf{n}$ 在 D_R 上的一个连续延拓. 又因为任意连续向量场总存在对应的连续线场, 因此命题成立.

对于 k 为奇数的情形, 边界条件可以看作是射影空间 $\mathbb{R}P^2$ 中的一条封闭路径, 且该路径对应 $\mathbb{R}P^2$ 基本群 $\mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$ 中的非平凡元. 因此, 拓扑上该路径不可能退化到一点上, 从而在 D_R 中不存在其连续延拓. $\square$

由上述引理知, (3.1) 给出的边界条件从拓扑上可以分为两类: k 为偶数对应 $\mathbb{R}P^2$ 基本群中的平凡元, k 取奇数对应 $\mathbb{R}P^2$ 基本群中的非平凡元. 下面的定理说明, 边界条件的这一属性会对 Ω 内线场的缺陷产生重要影响.

定理 1 考虑 (3.1) 中的边界条件, 当 k 为偶数时, 存在 Ω 中的光滑线场; k 为奇数时, 任意满足此边界条件的 Ω 中的线场必含有奇点且其数目不可数. 事实上, 该线场在任意垂直于 z 轴的截面内都必含有奇点.

证明 考虑垂直于 z 轴的平面截圆柱所得的圆盘区域, 在该圆盘上边界条件服从 (3.1). 当 k 为偶数时, 对任意 z 都给出引理 1 中构造的连续向量场公式 (3.2), 即得整个圆柱内的连续向量场, 同时由该向量场可以诱导出连续线场. 当 k 为奇数时, 由引理 1, 任意的圆盘内必包含有奇点. $\square$

下面分别考虑 k 为偶数 (以下称为平凡边界条件) 和奇数 (以下称为非平凡边界条件) 两种情形下 LdG 解的性质.

3.1.1 平凡边界条件

考虑 (3.1) 中 $k = 2$ 和 $k = 4$ 的情形. 由定理 1 知此时存在满足边界条件的点点单轴的张量场 $\mathbf{Q} \in (\Omega, \mathcal{Q}^+)$. 对 LdG 泛函求极小得到的单轴解如图 1 所示, 此单轴解没有奇点. 在此类边界条件下, LdG 泛函还存在其他能量极小解, 包括单线缺陷解 (planar radial) 和多线缺陷解 (planar polar), 其结构以及相图参见文献 [15] 中的图 9、10 和 12. 上述所有解中 $\mathbf{Q}$ 在 z 方向上都处处相等. 由于不含缺陷, 单轴解在低温和大半径下是能量全局极小的稳定解.

如果 $\mathbf{Q}$ 限制在单轴上, 则可计算得到点缺陷解. 以 $k = 2$ 的情形为例, 这时有两个点缺陷. 如果取消单轴限制, 则点缺陷不稳定, 在低温时会扩张成一个缺陷环, 在环上, $\mathbf{Q}$ 为单轴且指向序参量 $s < 0$; 同时在环的周围, $\mathbf{Q}$ 会呈现出双轴性. 这个过程类似于液晶球体在垂直锚定边界条件下的点缺陷解扩张成缺陷环的过程^[12]. 我们通过随机选取初值极小化 LdG 泛函得到的带有缺陷环的解见图 2(a). $k = 2$ 时在圆柱内有两个缺陷环, 如果把环收缩成一点, 则形成与单轴条件下相同的两个点缺陷. 缺陷环所在的平面与 z 轴平行, 并且缺陷环在 z 轴方向上有一定程度的拉伸, 其原因来自有限的圆柱尺寸带来的约束^[19]. 两个缺陷环所在的平面可能重合, 也可能相互垂直, 图 2(b) 给出缺陷环附近的液晶分子平均指向. 类似地, $k = 4$ 时圆柱区域内可以形成四个缺陷环 (图 2(c)).

注意到在带有缺陷环的解中, $\mathbf{Q}$ 在 z 轴方向不再保持不变, 这类解无法通过简单求解二维圆盘区域得到. 从拓扑上看, 单轴解在 z 方向具有向上或向下的指向性 (图 1), 把一段指向朝下的单轴解和另一段指向朝上的单轴解拼接起来就得到一个点缺陷, 由此, 缺陷环解可以看作是单轴解的某种扰动.

图 1 平凡边界条件下的单轴解. 参数选取为 (a) $t = -6$, $R = 5$; (b) $t = -6$, $R = 10$

图 2 平凡边界条件下的缺陷环解. 参数选取为 (a) $k = 2$, $t = -5$, $R = 10$; (b) $k = 2$ 缺陷环的细节结构, 黑色短实线为张量最大特征值对应的特征方向; (c) $k = 4$, $t = -5$, $R = 15$; (d) 相切锚定边界, $t = -5$, $R = 10$. 缺陷用 $c_t = 0.2$ 的等值面刻画

数值结果也发现, 缺陷环解的能量确实要比光滑单轴解的能量高, 而且随着圆柱高度 H 的增大, 缺陷环之间沿 z 轴的距离也相应增加, 这表明缺陷环解是暂稳态解.

除了 (3.1) 中 k 为偶数的情形外, 对于其他平凡边界条件, LdG 泛函的解也具有类似性质. 例如,

与圆盘相切的边界条件如下:

$$\mathbf{n}(R \cos \theta, R \sin \theta) = (-\sin \theta, \cos \theta, 0),$$

容易验证该边界条件拓扑上也对应 $\mathbb{R}P^2$ 中的平凡元. 三维数值计算结果表明, 该边界条件下也有单线缺陷解、双线缺陷解和光滑单轴解 (参见文献 [15, 图 13]), 而且单轴解在低温和大半径时是全局极小解. 同样, 在该边界条件下也有如图 2(d) 所示的缺陷环解, 为局部极小态.

3.1.2 非平凡边界条件

首先考虑此类边界条件中最简单的情形, 即 (3.1) 中取 $k = 1$. 由定理 1 知, 在任意一个垂直 z 轴的截面中必然有缺陷, 又由之前的工作我们知道, 限制在该截面内 LdG 泛函的能量极小会给出在圆盘正中心有一个旋转度为 $+1/2$ 的缺陷 (参见文献 [15, 图 8]). 如果限制在圆盘 D_R 内该解是全局极小解, 则下面的定理 2 保证了该解在 z 方向上延拓到 Ω 上得到的解 (即一条通过轴心的强度为 $+1/2$ 的线缺陷) 是全局极小解.

定理 2 设 LdG 泛函 (2.3) 在 Ω 上的全局极小解为 $\mathbf{Q}^*(x, y, z)$, 边界条件沿 z 轴不变, 即

$$\mathbf{Q}(x, y, z) = \mathbf{Q}_b(x, y), \quad \forall (x, y, z) \in \partial D_R \times [0, H],$$

则必有

$$\mathbf{Q}^*(x, y, z) = \mathbf{Q}^*(x, y, 0), \quad \forall (x, y, z) \in \Omega.$$

证明 定义集合 $M := \{\mathbf{Q}(x, y, z) \in \mathcal{S}_0 : (x, y, z) \in \Omega \text{ 且 } \mathbf{Q}(x, y, z) = \mathbf{Q}_b(x, y), \forall (x, y, z) \in \partial D_R \times [0, H]\}$, $N := \{\mathbf{Q}(x, y) \in \mathcal{S}_0 : (x, y) \in D_R \text{ 且 } \mathbf{Q}(x, y) = \mathbf{Q}_b(x, y), \forall (x, y) \in \partial D_R\}$, 则 $\mathbf{Q}^* \in M$, 且对任意给定 z_0 , 有 $\mathbf{Q}^*(x, y, z_0) \in N$. 考虑在 D_R 上定义的泛函

$$\tilde{F}[\mathbf{Q}] = \int_{D_R} \frac{t}{2} \text{tr}(\mathbf{Q}^2) - \sqrt{6} \text{tr}(\mathbf{Q}^3) + \frac{1}{2} \text{tr}(\mathbf{Q}^2)^2 + \frac{1}{2} (\mathbf{Q}_{ij,x} \mathbf{Q}_{ij,x} + \mathbf{Q}_{ij,y} \mathbf{Q}_{ij,y}) dS,$$

边界条件满足 $\mathbf{Q}(x, y) = \mathbf{Q}_b(x, y), \forall (x, y) \in \partial D_R$, 设其全局极小解为 $\tilde{\mathbf{Q}}^*(x, y)$, 则

$$\tilde{F}[\mathbf{Q}^*(x, y, z_0)] \geq \tilde{F}[\tilde{\mathbf{Q}}^*].$$

从而有

$$\begin{aligned} F[\mathbf{Q}^*] &= \int_0^H \int_{D_R} \frac{t}{2} \text{tr}(\mathbf{Q}^{*2}) - \sqrt{6} \text{tr}(\mathbf{Q}^{*3}) + \frac{1}{2} \text{tr}(\mathbf{Q}^{*2})^2 \\ &\quad + \frac{1}{2} (\mathbf{Q}_{ij,x}^* \mathbf{Q}_{ij,x}^* + \mathbf{Q}_{ij,y}^* \mathbf{Q}_{ij,y}^* + \mathbf{Q}_{ij,z}^* \mathbf{Q}_{ij,z}^*) dS dz \\ &\geq \int_0^H \tilde{F}[\tilde{\mathbf{Q}}^*] dz \\ &= F[\tilde{\mathbf{Q}}^*], \end{aligned}$$

且仅当

$$\int_0^H \int_{D_R} \mathbf{Q}_{ij,z}^* \mathbf{Q}_{ij,z}^* dS dz = 0$$

时等号成立, 即 $\mathbf{Q}^*(x, y, z) = \mathbf{Q}^*(x, y, 0)$. □

注 2 $k=1$ 时在圆盘 D 内 LdG 泛函的全局极小解中的缺陷一定位于圆心, 目前还没有在理论得到证明, 但所有的计算都支持这个结论. 在后续工作中, 我们希望能从理论上证明这个结论.

下面考虑一个更为复杂的非平凡边界条件:

$$\mathbf{n}(R \cos \theta, R \sin \theta) = \left(\cos \frac{\theta}{2} \cos \theta, \cos \frac{\theta}{2} \sin \theta, \sin \frac{\theta}{2} \right). \quad (3.3)$$

根据该边界条件, 单位长度的液晶分子围绕圆周运动一周形成的曲面正好是一个 Möbius 带. 由定理 1 知, 在该边界条件下, 任意一个垂直于 z 轴的截面中必然有缺陷. 限制在二维圆盘内计算得到的解有一个旋转度为 $+1/2$ 的缺陷, 但该缺陷的位置偏离圆盘中心 (参见文献 [15, 图 13]). 将该解在 Ω 中沿 z 轴上延拓得到一条平行于 z 轴但不通过轴心的线缺陷. 在全三维的计算中, 该边界条件下没有发现别的稳定解.

到目前为止, 我们考虑的所有边界条件都是沿 z 轴不变的. 下一步我们将在其基础上加上沿 z 轴的旋转, 目的是通过外加扰动得到更一般的线缺陷结构, 有助于我们理解线缺陷构型的内在特点.

3.2 外加旋转的边界条件

在下面的边界条件中, 我们先在 $z=0$ 处对 ∂D_R 要求满足 $k=1$ 的公式 (3.1) 或 Möbius 边界条件 (3.3), 然后将上述圆盘边界沿着 z 轴以角速度 $|\omega| = 2\pi R/H$ 旋转, 其中 ω 取值满足逆时针方向为正, 顺时针为负, 由此得到三维圆柱的旋转边界条件, 此时从 $z=0$ 到 H 圆盘边界正好旋转一周.

3.2.1 $k=1$ 旋转边界条件

$k=1$ 的旋转边界条件可以写为

$$\mathbf{n}(R \cos \theta, R \sin \theta, z) = \left(\cos \frac{1}{2} \left(\theta - \frac{\omega}{R} z \right), \sin \frac{1}{2} \left(\theta - \frac{\omega}{R} z \right), 0 \right),$$

其中

$$0 \leq \theta < 2\pi, \quad 0 \leq z \leq H.$$

计算发现, 当转速 ω 较小时, 缺陷仍然为一条与 z 轴平行且通过圆柱中心的直线 (图 3(a)); 当 ω 较大时, 缺陷会有一个从直线到螺旋线的相变. 观察发现, 此时缺陷附近的双轴区域不再是圆形, 而是被压缩成了椭圆, 当 ω 很大时甚至接近带状 (图 3(b)).

为了进一步分析螺旋线的构造, 在图 4 中, 我们将圆柱等分成若干份, 并给出等分截面上张量场的俯视图. 追踪图中的边界可以看到, 沿着 z 轴正方向, 边界是顺时针旋转的; 同时, 追踪图中被压缩的长方体, 可以看到缺陷是逆时针旋转的, 与边界的旋转方向相反. 这个结果与我们的直观想象不同, 它说明此时三维的旋转解并不是由一个二维解通过旋转堆砌而成的, 否则缺陷的旋转方向将与边界的旋转方向一致. 之所以出现这样的解, 可以从能量极小的角度理解: 图 4 中可以看到, 所有圆盘在中心附近的很大一块区域内的液晶分子的指向是沿 z 轴不变的, 因为这样的状态能够达到自由能的极小, 而此时旋转的边界和缺陷恰恰形成了一个边界层, 缺陷的旋转抵消了边界的变化. 随着转速 ω 的增大, 缺陷环将越来越靠近圆柱边缘.

关于该螺旋缺陷解的另一个观察是, 任意位置的 $\mathbf{Q}$ 都有一个特征方向平行于 z 轴, 在缺陷处 $\mathbf{n}$ 总是与 z 轴平行的.

图 3 外加旋转 $k = 1$ 边界条件下的线缺陷解. (a) 直线相, $t = -5$, $R = 10$, $\omega = 1$; (b) 螺旋线相, $t = -5$, $R = 10$, $\omega = 4$. 缺陷用 $c_l = 0.2$ 的等值面刻画

图 4 外加旋转 $k = 1$ 边界条件下的线缺陷解. 每个圆盘对应一个 $z = 0$ 到 H 之间的截面的俯视图, 小图右下的角度可以换算成相应截面的高度 (0 度为 $z = 0$, 360 度为 $z = H$). 图中的小椭圆对应液晶分子的局部指向及其强度, 在缺陷处椭球的俯视图接近一个球形

3.2.2 Möbius 旋转边界条件

旋转的 Möbius 边界条件提法如下:

$$n(R \cos \theta, R \sin \theta, z) = \left(\cos \left(\frac{\theta}{2} - \frac{\omega z}{2R} \right) \cos \theta, \cos \left(\frac{\theta}{2} - \frac{\omega z}{2R} \right) \sin \theta, \sin \left(\frac{\theta}{2} - \frac{\omega z}{2R} \right) \right).$$

与 $k = 1$ 的旋转边界不同, 此时只要有 $\omega > 0$, 线缺陷也跟着旋转, 且旋转方向与边界的旋转方向一致 (见图 5). 进一步我们发现, 不同截面上的解是旋转等价的, 表明三维的旋转 Möbius 解是由一个二维圆盘上的解顺着旋转方向旋转并堆叠起来的. 图 6 显示, 随着边界转速 ω 的增大, 单位高度的自由能也随之增加, 其原因来自于 z 方向上由旋转带来的弹性能增加; 并且随着 ω 趋于 0, 缺陷点处的单轴方向 $\mathbf{n}$ 将趋于线缺陷的切线方向.

在图 7 中, 我们给出缺陷的精细结构. 图中的绿色箭头对应缺陷处的液晶平均指向 $\mathbf{n}$. 图 7 截取了圆柱的一段区域, 其中 (a) 对应逆时针旋转 (俯视), (b) 对应顺时针旋转. 上下截面的天蓝色棒状结构对应张量 $\mathbf{Q}$ 的值, 截面之间的红色曲面对应 $c_l = 0.2$ 的等高面, 线缺陷便位于该等高面内. 图中的绿色圆盘和箭头分别对应了缺陷上的 $\mathbf{Q}$ (扁球形) 和单轴方向 $\mathbf{n}$. 在给定参数下, 整个圆柱内的缺陷上的任意一点处 $\mathbf{n}$ 与线缺陷的切方向的夹角都相等. 有趣的是, 如果按照不同的方向以同样的转速旋转 (分别对应 ω 和 $-\omega$), 截面的能量完全相等, 但是 $\mathbf{n}$ 和线缺陷的切方向的角度却明显不同 (比较图 7(a) 和 (b) 中的绿色箭头).

图 5 外加旋转 Möbius 边界条件下的线缺陷解. (a) $t = -5$, $R = 10$, $\omega = 1$; (b) $t = -5$, $R = 10$, $\omega = 5$. 缺陷用 $c_l = 0.2$ 的等值面刻画

图 6 (a) 单位高度的自由能 (截面自由能) 随 ω 变化; (b) 线缺陷上的 $\mathbf{Q}$ 对应的 $\mathbf{n}$ 和 z 轴的夹角与 ω 的关系

图 7 Möbius 边界条件下缺陷解的细节图

4 总结和讨论

本文通过数值计算和理论分析, 详细探讨了三维圆柱区域内 LdG 向列相液晶模型在不同边界条件下的缺陷构型. 数值结果表明, 液晶中的缺陷由边界条件和自由能极小共同决定, 随着参数和边界条件的不同而不同, 表现出复杂多样的结构. 下面综合前述结果讨论缺陷所共有的性质, 希望总结出缺陷结构内在的规律性, 为实验设计和理论分析提供参考.

4.1 线缺陷比点缺陷更稳定

缺陷微观上对应液晶分子指向的不连续性. 缺陷的存在导致了其附近自由能的增加. 为了极小化自由能, 缺陷的区域会倾向于集中在 (拓扑条件允许的) 尽可能的小范围内, 例如, 所有的面缺陷都是不稳定的. 可以稳定存在的缺陷包括点缺陷和线缺陷. 对于垂直锚定边界条件的三维球体, 在一定的参数范围内, 点缺陷可以是稳定的, 即便如此, 当温度充分低和球体半径充分大时, 点缺陷将会扩张成一个线缺陷环 (这个现象又称作“双轴逃逸”^[12]). 然而在三维圆柱内, 我们可以得到缺陷环解却得不到稳定的点缺陷解 (如果把 Q 限制在单轴区域 (2.4) 内求解可以得到点缺陷, 但一旦取消单轴限制点缺陷便会扩张成缺陷环), 这进一步说明, 在张量模型中线缺陷比点缺陷更稳定更普遍.

4.2 缺陷处的分子指向与线缺陷切方向的关系

线缺陷总是与双轴性相伴, 我们认为它是张量模型有别于向量模型的一个重要特征. 线缺陷的结构遵循一定的规律: 当温度足够低时, 只有旋转度为 $1/2$ 的线缺陷是稳定的, 此时在线缺陷法平面内, 绕缺陷一周, Q 的最大特征值对应的特征方向正好旋转 π 的角度; 同时在缺陷处, Q 是单轴的且指向序参量 $s < 0$. 进一步我们问, 不同条件下的线缺陷在局部是否有某种拓扑相似性 (参见文献 [15])? 我们猜测这种相似性可能体现在缺陷位置 Q 的单轴指向向量 $\mathbf{n}$ 与线缺陷的切方向 (下面记作 $\mathbf{m}$) 之间的关系上.

在很多线缺陷结构中, 我们都发现 $\mathbf{n}$ 与 $\mathbf{m}$ 重合. 例如, 三维球体中垂直锚定边界条件下的缺陷环、垂直锚定边界条件下的 $1/2$ 线缺陷^[15] 和三维圆柱在边界条件 (3.1) 下的 $1/2$ 线缺陷, 以及 $k = 2$ 的缺陷环解中整体拓扑度为 $+1$ 的缺陷环 (见图 8(a)). 在旋转边界条件下, $\mathbf{n}$ 与 $\mathbf{m}$ 可能不重合, 两者往往保持一个与转速 ω 有关的固定角度. 还有一些情形, $\mathbf{n}$ 与 $\mathbf{m}$ 的关系并不明确, 例如, $k = 2$ 的缺陷环解中整体拓扑度为 -1 的缺陷环 (见图 8(b)), 又如图 9 中给出的一个比较特殊的边界条件. 另外,

图 8 $k=2$ 缺陷环解中两个缺陷环上 n 与 m 的关系. (a) 整体拓扑度为 $+1$ 的缺陷环; (b) 整体拓扑度为 -1 的缺陷环. 圆环为缺陷的位置, 短实线为 n 所在直线

图 9 线缺陷上液晶平均指向与线缺陷切方向的关系. 红色曲线代表了线缺陷, 绿色圆盘对应液晶平均指向的法平面. 当 $0 \leq z < 7\pi/16$ 或 $9\pi/16 \leq z \leq 2\pi$ 时为 Möbius 边界条件公式 3.3, 而在 $7\pi/16 \leq z < 9\pi/16$ 内边界条件由以转速 $\omega = 32\pi R$ 旋转 Möbius 边界条件的平面得到 (旋转 2π 后与另一段圆柱对接)

我们注意到, 图 7 中所示 n 与 m 的夹角虽然不一样, 但系统的自由能却完全一样. 上述结果表明, n 与 m 之间的关系似乎并不足以完全刻画线缺陷的拓扑性质. 在今后的工作中, 我们将想办法揭示线缺陷更本质更一般的特征.

4.3 张量模型与向量模型的关系

根据 $\mathbb{R}P^2$ 空间基本群, 我们将圆柱的边界条件分成了非平凡边界和平凡边界两类. 在平凡边界条件下, 线场 $l(\Omega, \mathbb{R}P^2)$ 可以连续嵌入向量场 $n(\Omega, S^2)$ 内 (参见文献 [8]), 此时问题转化为 S^2 中的调和映射问题 (求 Oseen-Frank 泛函 $\int_{\Omega} |\nabla n|^2 dV$ 的极小). 可以证明, 此时极小化 Oseen-Frank 的向量场只有有限个离散的奇点 (参见文献 [24]). 进一步, 文献 [21] 证明了, 当系统尺寸 $R \rightarrow \infty$ 且在对空间坐标以 R 作归一化之后, LdG 的解强收敛到 Oseen-Frank 的解. 因此, 在平凡边界条件下, 当温度充分低区域充分大时, LdG 模型的解可以是光滑解或包含有限个缺陷环的解. 而对于非平凡边界条件, 边界上的线场不能连续“提升”为向量场, 所以, 上述理解不再成立. 定理 1 说明, 此时缺陷并不会收缩到一个有限区域, 又由定理 2 知, 对于 z 方向上不变的边界条件, LdG 泛函的极小值必包含与 z 轴平行的线缺陷. 这说明边界的拓扑约束对于缺陷的构型起着非常重要的作用, 非平凡边界条件下的 LdG 模型的极限有待今后更深入地研究.

参考文献

- 1 Gupta J K, Sivakumar S, Caruso F, et al. Size-dependent ordering of liquid crystals observed in polymeric capsules with micrometer and smaller diameters. *Angew Chem Int Ed Engl*, 2009, 48: 1652–1655
- 2 de Gennes P G, Prost J. *The Physics of Liquid Crystals*, 2nd ed. Oxford: Oxford University Press, 1995
- 3 Miller D S, Wang X G, Abbott N L. Design of functional materials based on liquid crystalline droplets. *Chem Mater*, 2013, 26: 496–506
- 4 Lopez-Leon T, Fernandez-Nieves A. Drops and shells of liquid crystal. *Colloid Polym Sci*, 2011, 289: 345–359
- 5 Erdmann J H, Žumer S, Doane J W. Configuration transition in a nematic liquid crystal confined to a small spherical cavity. *Phys Rev Lett*, 1990, 64: 1907–1910
- 6 Lin F H, Liu C. Static and dynamic theories of liquid crystals. *J Partial Differential Equations*, 2001, 14: 289–330
- 7 Cheng H, Zhang P W. A tensor model for liquid crystals on a spherical surface. *Sci China Math*, 2013, 56: 2549–2559
- 8 Ball J M, Zarnescu A. Orientability and energy minimization in liquid crystal models. *Arch Ration Mech Anal*, 2011, 202: 493–535
- 9 Kralj S, Virga E G, Žumer S. Biaxial torus around nematic point defects. *Phys Rev E*, 1999, 60: 1858–1866
- 10 Canevari G. Biaxiality in the asymptotic analysis of a 2-D Landau-de Gennes model for liquid crystals. *ArXiv:1307.8065*, 2013
- 11 Schopohl N, Sluckin T J. Hedgehog structure in nematic and magnetic systems. *J Phys France*, 1988, 49: 1097–1101
- 12 Mkaddem S, Gartland Jr E C. Fine structure of defects in radial nematic droplets. *Phys Rev E*, 2000, 62: 6694
- 13 Gartland E C, Mkaddem S. Instability of radial hedgehog configurations in nematic liquid crystals under Landau-de Gennes free-energy models. *Phys Rev E*, 1999, 59: 563–567
- 14 Ignat R, Nguyen L, Slastikov V, et al. Stability of the melting hedgehog in the Landau-de Gennes theory of nematic liquid crystals. *ArXiv:1404.1729*, 2014
- 15 Hu Y C, Qu Y, Zhang P W. On the disclination lines of nematic liquid crystals. *ArXiv:1408.6191*, 2014
- 16 Contreras A, Lamy X. Biaxial escape in nematics at low temperature. *ArXiv:1405.2055*, 2014
- 17 Lamy X. Uniaxial symmetry in nematic liquid crystals. *ArXiv:1402.1058*, 2014
- 18 Fratta G D, Robbins J M, Slastikov V, et al. Profiles of point defects in two dimensions in Landau-de Gennes theory. *ArXiv:1403.2566*, 2014
- 19 Luca G D, Rey A D. Point and ring defects in nematics under capillary confinement. *J Chem Phys*, 2007, 127: 104902
- 20 Kralj S, Rosso R, Virga E G. Finite-size effects on order reconstruction around nematic defects. *Phys Rev E*, 2010, 81: 021702
- 21 Majumdar A. Equilibrium order parameters of nematic liquid crystals in the Landau-de Gennes theory. *Eur J Appl Math*, 2010, 21: 181–203
- 22 Callan-Jones A C, Pelcovits R A, Slavin V A, et al. Simulation and visualization of topological defects in nematic liquid crystals. *Phys Rev E*, 2006, 74: 061701
- 23 Nocedal J, Wright S J. *Numerical Optimization*, 2nd ed. Berlin/New York: Springer-Verlag, 2006
- 24 Brezis H, Coron J M, Lieb E H. Harmonic maps with defects. *Comm Math Phys*, 1986, 107: 649–705

附录

为了数值计算的需要, 首先要对泛函 (2.3) 再作归一化, 将积分区域限制到单位区域中. 令

$$\bar{x} = \frac{x}{R}, \quad \bar{y} = \frac{y}{R}, \quad \omega = \frac{2\pi R}{H}, \quad \bar{z} = \frac{\omega}{R}z, \quad \bar{\Omega} = D_1 \times [0, 2\pi], \quad F[\mathbf{Q}] = \frac{R^3}{\omega} \bar{F}(\mathbf{Q}),$$

得到

$$\bar{F}(\mathbf{Q}) = \int_{\bar{\Omega}} f_b(\mathbf{Q}) + \frac{1}{2R^2} (\mathbf{Q}_{ij,\bar{x}} \mathbf{Q}_{ij,\bar{x}} + \mathbf{Q}_{ij,\bar{y}} \mathbf{Q}_{ij,\bar{y}} + \omega^2 \mathbf{Q}_{ij,\bar{z}} \mathbf{Q}_{ij,\bar{z}}) dV.$$

记 $\mathbf{Q}$ 的 5 个独立分量分别为 $Q_{11} = q_1$, $Q_{12} = q_2$, $Q_{13} = q_3$, $Q_{22} = q_4$, $Q_{23} = q_5$, 对每个 q_i 用下面基函数展开:

$$q_i(r, \theta, z) = \sum_{m=1-M}^{M-1} \sum_{l=1-L}^{L-1} \sum_{n=|l|}^{N-1} A_{nlm}^{(i)} Z_{nl}(r, \theta) X_m(z),$$

其中 $Z_{nl} = R_n^{(|l|)}(r)X_l(\theta)$ 为 2D 的 Zernike 多项式,

$$X_l(\theta) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cos l\theta, & l > 0, \\ \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sin |l|\theta, & l < 0, \\ \frac{1}{\sqrt{2\pi}}, & l = 0, \end{cases}$$

可以推出

$$\int_0^1 \int_0^{2\pi} \nabla Z_{nl} \cdot \nabla Z_{n'l'} r d\theta dr = \delta_{ll'} K_{nn'l},$$

其中

$$K_{nn'l} = \int_0^1 \frac{dR_n^{(l)}}{dr} \frac{dR_{n'}^{(l)}}{dr} r dr + l^2 \int_0^1 R_n^{(l)}(r) R_{n'}^{(l)}(r) \frac{1}{r} dr.$$

设 $f(r, \theta, z)$ 的展开式系数为 f_{nlm} , 在 $\{(r_i, \theta_j, z_k) : 0 \leq i \leq I, 0 \leq j \leq J-1, 0 \leq k \leq K-1\}$ 的值为 $f(r_i, \theta_j, z_k)$, 其中 r_i 为 Gauss 节点,

$$\theta_j = \frac{2j\pi}{J}, \quad z_k = \frac{2k\pi}{K}.$$

为了保证数值积分精确, 一般应该保证 $I \geq N, J \geq 2L, K \geq 4M$. 程序中实际计算到的最高次数为 $N = L = M = 128$. 大多数的结果计算到 $N = L = 64, M = 16$ 即可,

$$f(r_i, \theta_j, z_k) = \sum_{m=1-M}^{M-1} X_m(z_k) \sum_{l=1-L}^{L-1} X_l(\theta_j) \sum_{n=|l|}^{N-1} f_{nlm} R_n^{(|l|)}(r_i).$$

记

$$h^{lm}(r_i) = \sum_{n=|l|}^{N-1} f_{nlm} R_n^{(|l|)}(r_i), \quad g^m(r_i, \theta_j) = \sum_{l=1-L}^{L-1} X_l(\theta_j) h^{lm}(r_i),$$

则

$$f(r_i, \theta_j, z_k) = \sum_{m=1-M}^{M-1} X_m(z_k) g^m(r_i, \theta_j),$$

$$\int_{\Omega} f(r, \theta, z) Z_{nl}(r, \theta) X_m(z) dV = \frac{4\pi^2}{JK} \sum_{i=0}^{I-1} E_i R_n^{(|l|)}(r_i) r_i \sum_{j=0}^{J-1} X_l(\theta_j) \sum_{k=0}^{K-1} f(r_i, \theta_j, z_k) X_m(z_k),$$

其中 E_i 是数值积分公式的系数. 令

$$K_m^{ij} = \sum_{k=0}^{K-1} f(r_i, \theta_j, z_k) X_m(z_k), \quad L_{lm}^i = \sum_{j=0}^{J-1} X_l(\theta_j) K_m^{ij},$$

则

$$\int_{\Omega} f(r, \theta, z) Z_{nl}(r, \theta) X_m(z) dV = \frac{4\pi^2}{JK} \sum_{i=0}^{I-1} E_i R_n^{(|l|)}(r_i) r_i L_{lm}^i,$$

$$\int_{\Omega} q_{i,x}^2 + q_{i,y}^2 dV = \sum_{m=1-M}^{M-1} \sum_{l=1-L}^{L-1} \sum_{n,n'} A_{nlm}^{(i)} A_{n'lm}^{(i)} K_{nn'l},$$

$$\int_{\Omega} q_{i,z}^2 dV = \sum_{m=1-M}^{M-1} \sum_{l=1-L}^{L-1} \sum_{n=|l|}^{N-1} m^2 A_{nlm}^{(i)2}.$$

Disclination lines of liquid crystals confined in cylinder

HU YuCheng, QU Yang & ZHANG PingWen

Abstract In this paper, we study disclination lines in nematic liquid crystals confined in three-dimensional cylinder. The study of defects and their pattern in liquid crystals has recently attracted a lot of attention. Within the Landau-de Gennes tensor model, we investigate, both numerically and analytically, the common behavior of disclination lines under different boundary conditions. We found that, disclination lines is more generic than point defects; and the pattern of disclination lines is a result of subtle balance between boundary constraints and energy minimization.

Keywords nematic liquid crystals, Landau-de Gennes tensor model, disclination line

MSC(2010) 76A15, 81T80, 82D30

doi: 10.1360/N012014-00237