

文章编号:1007-2780(2016)08-0768-05

基于向列相液晶弹性各向异性偏振光栅 结构方位锚定能的理论研究

张艳君^{1,2}, 张志东¹, 朱礼智³, 杨瑞霞^{2*}

(1. 河北工业大学 理学院, 天津 300401; 2. 河北工业大学 电子信息工程学院, 天津 300401;

3. 天津科技大学 包装与印刷工程学院, 天津 300222)

摘要:通过设计上下基板向列相液晶分子排列构建偏振光栅结构模型,并根据向列相液晶 Frank 弹性理论计算其方位锚定能,其理论结果可为实验测量提供有力的理论指导作用。本文根据弹性理论,考虑弹性各向异性计算了偏振光栅结构的方位锚定能,得到了方位锚定能与光栅条纹宽度关系的解析解。弹性各向异性对方位锚定能有着显著影响。由于液晶具有各向异性,考虑弹性各向异性研究方位锚定能是必要的,其结果更具有普遍性。

关键词:向列相;方位锚定能;偏振光栅结构;弹性各向异性

中图分类号:O753.2 **文献标识码:**A **doi:**10.3788/YJYXS20163108.0768

Theoretical study of azimuthal anchoring energy in polarization grating configuration based on elastic anisotropy of nematic liquid crystals

ZHANG Yan-jun^{1,2}, ZHANG Zhi-dong¹, ZHU Li-zhi³, YANG Rui-xia^{2*}

(1. School of Sciences, Hebei University of Technology, Tianjin 300401, China;

2. School of Electronic and Information Engineering, Hebei University of Technology,

Tianjin 300401, China; 3. College of Packaging & Printing Engineering,

Tianjin University of Science and Technology, Tianjin 300222, China)

Abstract: The azimuthal anchoring energy can be calculated by designing nematic molecular alignment at two substrates to build a polarization grating configuration, based on the Frank elastic theory of nematic liquid crystals. The theoretical results can provide a powerful theoretical guidance for experimental measurement. In this paper, we study the azimuthal anchoring energy based on the elastic anisotropy of the nematic liquid crystals and obtain the analytic solutions of azimuthal anchoring energy related to the widths of dark stripes. The elastic anisotropy has a significant influence on the azimuthal anchoring energy. It is necessary to consider the elastic anisotropy to study the azimuthal anchoring energy because of the anisotropy of liquid crystal.

Key words: nematic; azimuthal anchoring energy; polarization grating configuration; the elastic anisotropy

收稿日期:2016-04-01; **修订日期:**2016-05-17.

基金项目:国家自然科学基金(No.11374087, No.11304074); 河北省高等学校科学技术研究青年基金(No. QN2015260)

Supported by the National Natural Science Foundation of China (No. 11374087, No.11304074); Research Project of Hebei Education Department, China (No. QN2015260)

* 通信联系人, E-mail: yangrx@hebut.edu.cn

1 引言

向列相液晶表面锚定能无论对于液晶的基础研究还是对于液晶器件的应用都有着至关重要的作用^[1-3],它是研究液晶分子表面排列机理的重要信息。表面锚定能可分为极化表面锚定能和方位表面锚定能两大类。方位锚定能是包括液晶显示在内的液晶器件的重要的参数之一。随着液晶物理的发展对液晶极化锚定能的研究日趋成熟,但是对方位锚定能的研究还是比较缺乏。对于方位锚定能的理论研究,起源于 1972 年 Berreman 对栅状基板提出的沟槽理论^[4]。许多科研工作者基于此模型对栅状基板的方位锚定性进行了深入的研究,主要有极向锚定对方位锚定能的影响^[5-6]以及液晶弹性常数各向异性的影响^[7-8]。对于方位锚定能的实验研究主要有设计不同几何构型法^[5,9-10]、加外场法^[11-13]、摩擦取向法^[14]、缺陷分析法^[15-16]等。然而在大多数的方法中,估算锚定能时会或多或少使用了统计的方法,因为在相同的条件下对一个样本只能获得单一的数值,这就要用到重复测量时的统计平均。在文献^[17]中给出了一个很好的计算和测量方位锚定能的方法。通过设计偏振光栅结构,利用 Frank 弹性理论对方位锚定能进行了计算,方位锚定能的数值对应于正交偏振片下形变区域黑色条纹的宽度测量。但是文献中的理论计算是在单一常数近似下给出的结果,存在一定的局限性,不具有普遍性。

本文中,我们对偏振光栅结构的方位锚定能进行理论研究。我们首先给出偏振光栅结构模型;然后考虑弹性各向异性下计算偏振光栅结构向列相液晶的方位锚定能,并与文献中的理论结果进行对比分析;最后给出结论。

2 模型

建立一个偏振光栅结构向列相液晶薄层。假设 z 轴垂直于盒厚方向, $z=0$ 及 $z=d$ 分别为下基板和上基板,并且 x 及 y 方向远大于盒厚尺度。如图 1(a)所示,下基板液晶分子沿着 x 轴排列;上基板处,当 $-\frac{h}{2} \leq y \leq 0$ 时液晶分子方位角为 $\pi/4$,当 $0 \leq y \leq \frac{h}{2}$ 液晶分子方位角为 $-\pi/4$,如图(b)所示。

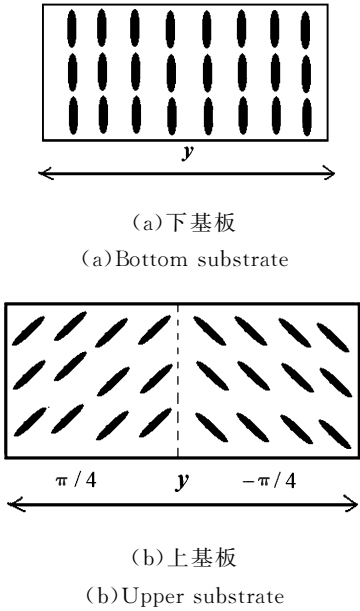


图 1 向列相液晶偏振光栅结构分子排列

Fig.1 Schematic diagram of molecular alignment in a polarization grating configuration of liquid crystal

在有两个相互扭曲区域的液晶偏振光栅结构中,在相互扭曲的区域中,液晶分子的方位锚定能将会对区域边界上的液晶分子的指向矢产生巨大的影响,液晶分子的方位角在 x - y 平面发会连续的变化,沿着 y 轴线性的扭曲成两个相对的扭曲区域,我们称之为形变区域,如图 2 所示。

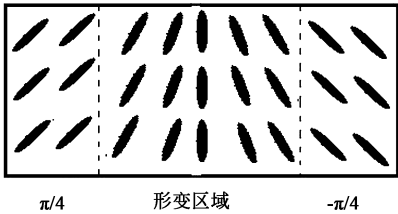


图 2 上基板畴边界上液晶指向矢分布

Fig.2 Schematic diagram of the liquid crystals director distribution near domain boundaries in the upper substrate

3 液晶弹性理论研究

向列相液晶弹性自由能密度可以表示为指向矢 n 的函数^[18]

$$f_{el} = \frac{1}{2} [K_{11} (\nabla \cdot n)^2 + K_{22} (n \cdot \nabla \times n)^2 + K_{33} (n \times \nabla \times n)^2] \quad (1)$$

为了简单起见,我们只考虑方位角的改变,即整个形变区域中液晶分子极角 θ 为 $\pi/2$ 不变,液晶分子的指向矢只依赖于方位角 φ ,指向矢可表示为:

$$\mathbf{n} = (\cos\varphi, \sin\varphi, 0). \quad (2)$$

根据对称性可知,液晶指向矢在 $-\frac{h}{2} \leq y \leq \frac{h}{2}$ 之间发生均匀形变,方位角在 y 及 z 方向的变化为线性变化,可以表示为:

$$\varphi(y, z) = \frac{\pi y z}{2hd} \quad (3)$$

将式(2)、(3)代入式(1)可得弹性自由能密度为:

$$f_{el} = \frac{1}{2} K_{22} \frac{\pi^2 y^2}{4h^2 d^2} + \frac{1}{4} (K_{33} + K_{11}) \frac{\pi^2 z^2}{4h^2 d^2} - \frac{1}{4} (K_{33} - K_{11}) \cos\left(\frac{\pi y z}{hd}\right) \frac{\pi^2 z^2}{4h^2 d^2}. \quad (4)$$

形变区域的弹性自由能可根据弹性自由能密度 f_{el} 积分求得,即 z 从 $0 \rightarrow d$, y 从 $-h/2 \rightarrow h/2$, x 取单位长度即 $0 \rightarrow 1$ 进行积分,则

$$F_{el} = \frac{\pi^2 K_{11}}{24hd} \left[\left(\frac{d^2}{2} - \frac{12d^2}{\pi^3} \right) \frac{K_{33}}{K_{11}} + \left(\frac{d^2}{2} + \frac{12d^2}{\pi^3} \right) + \frac{h^2}{4} \frac{K_{22}}{K_{11}} \right], \quad (5)$$

表面锚定能采用 R-P 锚定能公式^[19]:

$$f_s = \frac{1}{2} w_a (\sin\alpha)^2, \quad (6)$$

其中: w_a 代表锚定能系数或锚定强度,而 α 是易取向方向与指向矢之间的夹角。

当 $z=d$ 时,方位角 $\varphi_0 = \frac{\pi y}{2h}$, 根据(6)可求,

当 $-h/2 \leq y \leq 0$ 时 α 为 $\varphi_0 + \frac{\pi}{4}$, 当 $0 \leq y \leq$

$h/2$ 时, α 为 $\varphi_0 - \frac{\pi}{4}$ 。 f_s 从 $-h/2 \leq y \leq h/2$ 及

x 从 $0 \rightarrow 1$ 进行积分,表面能为

$$F_s = \frac{hw_a}{2} \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{\pi} \right), \quad (7)$$

总自由能为

$$F_{tot} = F_{el} + F_s = \frac{\pi^2 K_{11}}{24hd} \left[\frac{d^2}{2} \left(\frac{K_{33}}{K_{11}} + 1 \right) + \frac{h^2}{4} \frac{K_{22}}{K_{11}} + \frac{12d^2}{\pi^3} \left(1 - \frac{K_{33}}{K_{11}} \right) \right] + \frac{hw_a}{2} \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{\pi} \right). \quad (8)$$

F_{tot} 以 h 为变量的函数,平衡态 $\frac{dF_{tot}}{dh} = 0$, 可

得方位锚定能 w_a 用 h 来表示:

$$w_a = \frac{K_{11} \pi^3 \left\{ d^2 \left[\frac{1}{2} \left(\frac{K_{33}}{K_{11}} + 1 \right) + \frac{12}{\pi^3} \left(1 - \frac{K_{33}}{K_{11}} \right) \right] - \frac{h^2}{4} \frac{K_{22}}{K_{11}} \right\}}{6h^2 d (\pi - 2)}. \quad (9)$$

根据文献[17],在正交偏振器下偏振光栅结构的形变区域会产生黑色条纹结构,通过测量条纹宽度,即 h 的数值,可以间接测得方位锚定能。我们的理论结果将为方位锚定能的实验测量提供有力的理论指导作用。

根据式(9)可知,在单一常数近似下,即 $K_{11} = K_{22} = K_{33}$ 时,回到文献[17]中的结果;方位锚定系数随弹性常数 K_{33}/K_{11} , K_{22}/K_{11} 值的变化线性变化。对于大部分液晶材料来说,弹性常数满足^[20]: $0.5 < K_{33}/K_{11} < 3.0$, $0.5 < K_{22}/K_{11} < 0.8$, 我们计算了方位锚定能随着弹性常数变化图,如图 3 所示。从图中可以看到,弹性各向异性对方位锚定系数有着较大的影响。当考虑 $h = (8.59 \pm 1.48) \mu\text{m}$ 时, $K_{22}/K_{11} = 0.5$, $K_{33}/K_{11} = 3.0$ 时取最大锚定系数 $(6.53 \pm 2.61) \times 10^{-6}$

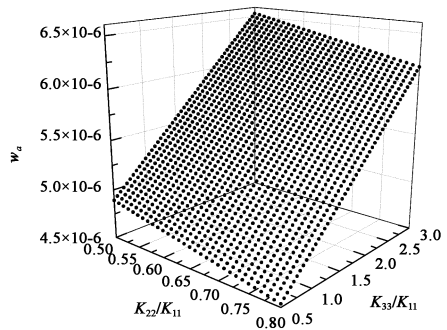


图 3 当 $K_{11} = 10^{-11} \text{ N}$, $d = 9.48 \mu\text{m}$, $h = 8.59 \mu\text{m}$ 时^[17] 方位锚定能随弹性常数值的变化。

Fig.3 Azimuthal anchoring energy vs. elastic constants as $K_{11} = 10^{-11} \text{ N}$, $d = 9.48 \mu\text{m}$, $h = 8.59 \mu\text{m}$.

J/m^2 , $K_{22}/K_{11} = 0.8$, $K_{33}/K_{11} = 0.5$ 时取最小值

$(4.53 \pm 2.01) \times 10^{-6} \text{ J/m}^2$ 。单一常数近似下结果^[17]为 $(4.62 \pm 2.67) \times 10^{-6} \text{ J/m}^2$ 。

4 结 论

通过设计偏振光栅结构模型,考虑弹性各向异性,根据向列相液晶 Frank 弹性理论,可以得到方位锚定能与条纹宽度关系的解析解。结果表

明:弹性常数各向异性对方位锚定能有着显著影响;当 3 个弹性常数相等时,即单一弹性常数近似下能够回到文献[18]的结果;由于液晶具有各向异性,我们的结果相对于单一常数近似的结果更具有普遍性。文献[18]指出,实验上设计偏振光栅结构,测量条纹的宽度可以计算方位锚定能强度,我们的理论结果将为方位锚定能的实验测量提供有力的理论指导作用。

参 考 文 献:

- [1] NEHRING J, KMETZ A R, SCHEFFER T J. Analysis of weak-boundary-coupling effects in liquid-crystal displays [J]. *Journal of Applied Physics*, 1976, 47(3): 850-857.
- [2] JEROME B. Surface effects and anchoring in liquid crystals [J]. *Reports on Progress in Physics*, 1991, 54(3): 391-451.
- [3] DE GENNES P G, PROST J. *The Physics of Liquid Crystals* [M]. 2nd ed. Oxford: Oxford University Press, 1995.
- [4] BERREMAN D W. Solid surface shape and the alignment of an adjacent nematic liquid crystal [J]. *Physical Review Letters*, 1972, 28(26): 1683-1686.
- [5] FAETTI S. Azimuthal anchoring energy of a nematic liquid crystal at a grooved interface [J]. *Physical Review A*, 1987, 36(1): 408-410.
- [6] FOURNIER J B, GALATOLA P. Coarse-graining analysis of the Berreman anchoring [J]. *Physical Review E*, 1999, 60(2): 2404-2407.
- [7] FUKUDA J I, YONEYA M, YOKOYAMA H. Surface-groove-induced azimuthal anchoring of a nematic liquid crystal: berreman's model reexamined [J]. *Physical Review Letters*, 2007, 98(18): 187803.
- [8] FUKUDA J I, YONEYA M, YOKOYAMA H. Consistent numerical evaluation of the anchoring energy of a grooved surface [J]. *Physical Review E*, 2009, 79(1): 011705.
- [9] IIMURA Y, KOBAYASHI N, KOBAYASHI S. A new method for measuring the azimuthal anchoring energy of a nematic liquid crystal [J]. *Japanese Journal of Applied Physics*, 1994, 33(3B): L434-L436.
- [10] SERGAN V, DURAND G. Anchoring anisotropy of a nematic liquid crystal on a bistable SiO evaporated surface [J]. *Liquid Crystals*, 1995, 18(1): 171-174.
- [11] UCHIDA T, HIRANO M, SAKAI H. Director orientation of a ferroelectric liquid crystal on substrates with rubbing treatment: the effect of surface anchoring strength [J]. *Liquid Crystals*, 1989, 5(4): 1127-1137.
- [12] 闫石,王维强,黄锡珉.磁场作用下液晶材料参数和锚定能的测试 [J].*液晶与显示*, 1998, 13(4): 283-296.
YAN S, WANG W Q, HUANG X M. Testing of LC material parameters and anchoring energy with high magnetic field [J]. *Chinese Journal of Liquid Crystals and Displays*, 1998, 13(4): 283-296. (in Chinese)
- [13] 孙睿鹏,黄锡珉.向列液晶的表面锚定能[J].*液晶通讯*, 1993, 1(2): 1-13.
SUN R P, HUANG X M. Surface anchoring energy of nematic liquid crystals [J]. *Chinese Letter of Liquid Crystal*, 1993, 1(2): 1-13. (in Chinese)
- [14] ACHARYA B R, KIM J H, KUMAR S. Material-independent determination of anchoring properties on rubbed polyimide surfaces [J]. *Physical Review E*, 1999, 60(6): 6841-6846.
- [15] RYSCHENKOW G, KLEMAN M. Surface defects and structural transitions in very low anchoring energy nematic thin films [J]. *The Journal of Chemical Physics*, 1976, 64(1): 404-412.
- [16] BOGI A, MARTINOT-LAGARDE P, DOZOV I, et al. Anchoring screening of defects interaction in a nematic liquid crystal [J]. *Physical Review Letters*, 2002, 89(22): 225501.
- [17] YU C J. Azimuthal anchoring energy using the splay deformation in a polarization grating configuration [J]. *Japa-*

nese *Journal of Applied Physics*, 2010, 49(6R): 060204.

[18] FRANK F C. I. Liquid crystals. On the theory of liquid crystals [J]. *Discussions of the Faraday Society*, 1958, 25: 19-28.

[19] RAPINI A, PAPOULAR M. Distorsion d’une lamelle nématique sous champ magnétique conditions d’ancrage aux parois [J]. *Le Journal De Physique Colloques*, 1969, 30(C4): C4-54-C4-56.

[20] SCHARF T. *Polarized Light in Liquid Crystals and Polymers* [M]. Hoboken, NJ, USA: John Wiley & Sons, Inc., 2006: 187.

作者简介:张艳君(1977—),女,河北清河人,副教授,硕士生导师,主要从事液晶物理方面的研究。E-mail:zyj513@hebut.edu.cn.