

文章编号:1007-2780(2019)04-0327-08

不同初始分布向列相液晶电容特性的相场法研究

王舒凯,周志东*

(厦门大学 材料学院,福建省特种先进材料重点实验室,福建 厦门 361000)

摘要:液晶盒内的液晶分子在不同的外加电场作用下重新排布,其极化指向发生改变,从而影响液晶盒整体的电学特性。本文考虑液晶材料的挠曲电效应,分析液晶盒的整体自由能表达式,包含弹性形变自由能密度、介电自由能密度和挠曲电自由能密度。基于液晶弹性理论和相场方法,构建描述液晶核指向矢分布及演化的相场方程,并运用离散方法推导出液晶盒约化电容的表达式。讨论边界强锚定的混合液晶盒(HAN)和平行液晶盒(PAN)表面电荷密度对液晶核指向矢偏转角的影响。进一步分析了挠曲电系数、表面电荷密度以及液晶盒厚度对两种不同初始指向分布液晶盒电容性能的影响。数值分析结果表明,表面电荷密度越大、挠曲电系数越小,液晶核指向矢偏角越大。在混合液晶盒中,约化电容随着表面电荷或液晶厚度的增加而增加,最终趋于饱和;而在平行液晶盒中,当表面电荷密度或液晶盒厚度达到某个临界值时,液晶核的指向矢才发生改变,液晶的约化电容才有明显的变化。随着表面电荷密度增加,液晶核指向矢发生偏转的临界厚度减小。

关键词:液晶盒;相场法;挠曲电效应;表面电荷密度;电容

中图分类号:O753+.2;TM532.5 **文献标识码:**A **doi:**10.3788/YJYXS20193404.0327

Phase field method in capacitance characteristics of nematic liquid crystals with different initial alignments

WANG Shu-kai, ZHOU Zhi-dong*

(Fujian Key Laboratory of Advanced Materials, College of Materials,
Xiamen University, Xiamen 361005, China)

Abstract: Subjected to different electric fields, liquid crystal molecules would rearrange and the polarization directors would change, which could affect the capacitance characteristics of liquid crystal cells. Based on the free energy of liquid crystals due to the flexoelectric effect, the expressions of the elastic, dielectric and flexoelectric free energy density are obtained. Applying the elastic theory and the phase field methods of liquid crystals, the phase field equations describing the distribution and switching of liquid crystal director are obtained, and the expression of the capacitance of the liquid crystal cell is derived by discrete methods. The influences of the surface charge density on the liquid crystal directors are discussed in the strong anchoring hybrid alignment nematic (HAN) and the parallel alignment nematic (PAN) liquid crystal cells. Furthermore, the effects of flexoelectricity, surface charge density

收稿日期:2018-10-31;修订日期:2019-01-20.

基金项目:国家自然科学基金(No. 11572271)

Supported by National Natural Science Foundation of China(No. 11572271)

* 通信联系人, E-mail: zdzhou@xmu.edu.cn

and the thickness of the liquid crystal cell on the capacitance performance of two different initial alignments are analyzed in detail. The results of numerical analysis show that the larger surface charge density and the smaller flexoelectric coefficients would induce the larger angle of the director. In the HAN liquid crystal cell, the capacitance increases with increasing surface charge or liquid crystal thickness, and finally becomes saturated. In the PAN liquid crystal cell, the liquid crystal directors switch only upon the surface charge density or the thickness of the liquid crystal cell reaching a certain critical value, and the capacitance of the liquid crystal changes significantly. With increasing surface charge density, the critical thickness of the liquid crystal cell decreases.

Key words: liquid crystal cell; phase field method; flexoelectric effect; surface charge density; capacitance

1 引言

20 世纪 50 年代末,发现了液晶材料在热图像方面的应用价值,激发了人们对液晶的研究热潮^[1]。液晶盒又称液晶显示板,是将薄层液晶注入到两块玻璃基板之间,加以密封。当施加外电场时,液晶分子的排列状态和指向矢发生改变,从而改变液晶盒宏观的电学和光学特性。液晶盒也可以当作一个电容器^[2],液晶层的有效介电常数会随着外加电学条件的变化而变化^[3],其电容可调。同时,液晶的介电常数^[4]、弹性常数^[5-6]、挠曲电系数^[7-9]和基板的锚定条件^[10-11]等特性,对液晶盒电容特性及其液晶显示器件性能具有重要的影响。

液晶盒中的液晶分子呈楔形、纺锥形或香蕉形。当分子指向发生变化时,会引起整体结构的弯曲、展曲和扭曲等机械形变,此时存在显著的挠曲电效应。挠曲电效应描述了向列相液晶发生形变后液晶盒产生的自发极化现象,并具有永久的偶极矩^[12-13],影响液晶盒的介电常数^[7]。崔文静等基于液晶弹性理论和变分原理,推导了液晶盒系统的平衡态方程和电容的表达式,模拟不同挠曲电系数下电压-电容曲线,分析了液晶挠曲电特性对液晶盒电容的影响^[8],以及弹性常数和介电各向异性对混合液晶盒和平行液晶盒电容的影响^[14]。Kaur 等^[15]实验测试了液晶盒中液晶分子指向偏转的临界电压,获得了展曲和弯曲挠曲电系数的差值。Reshetnyak 等^[16]采用一种半定量的方法描述了光折变材料中两束光引起的能量增益,发现液晶的挠曲电能是驱动光栅结构的主要物理机

制。Vitoriano 和 Satiro^[17]考虑液晶盒中液晶分子不同的分布密度,分析了液晶分子指向密度耦合理论在实验测量挠曲电系数 e_3 和 e_1 以及组合 $e_1 + e_3$ 和 $e_1 - e_3$ 中的实际应用。

相场法可以模拟并预测材料在不同的物理场下各种微观结构的形成及演化过程。Oates 和 Wang^[18]建立了向列相液晶的相场模型,研究了液晶中单畴和多畴结构,分析了热和机械拉伸加载过程中液晶核的自发形态和多畴结构的演化。液晶器件大部分是在电压控制下进行工作,如果液晶器件与其他电容器连接时,也可以在恒定表面电荷控制下工作。但是,关于采用相场方法研究各种初始取向液晶在表面电荷密度作用下液晶核指向的演化,并最终分析如何影响宏观电学特性的工作还很少见。

本文考虑构建研究液晶微结构的相场方法,结合液晶材料的挠曲电效应,应用液晶相整体的自由能密度,分析液晶指向矢随外加表面电荷密度的演化,并给出液晶盒约化电容离散化的表达式。通过数值算例,分析讨论混合液晶盒和平行液晶盒液晶指向矢、约化电容与挠曲电系数、机械约束条件、表面电荷密度和液晶盒厚度等的相互数值关系与演变趋势。

2 液晶系统的相场方法

2.1 液晶盒系统的自由能密度

图 1 给出了混合液晶盒(a)和平行液晶盒(b)的结构示意图,其中,液晶盒沿 z 方向上的厚度为 d 。在 xoz 平面内,液晶分子有一个初始的稳定分布。混合液晶盒内,液晶分子从下表面的水平排列连续变化到上表面的垂直排列;而平行液

晶盒内,液晶分子都保持水平排列。两种液晶盒内上下表面的液晶分子被基板锚定。当在垂直于液晶分子指向的方向施加一电场,由于液晶分子自带极性,其指向矢 $\mathbf{n}$ 将发生改变以减少系统整体的能量,这种分子指向矢方向的改变将引起液晶盒整体的机械形变。在图1中,每个液晶分子指向与 x 轴的夹角用 θ 角表示。本文考虑液晶分子沿 x 方向均匀分布,因而 θ 仅是 z 的函数,即指向矢 $\mathbf{n}(z) = \hat{x} \cos\theta(z) + \hat{z} \sin\theta(z)$ 。在混合液晶盒中,边界液晶分子的指向矢偏角为 $\theta_{(z=0)} = 0$, $\theta_{(z=d)} = \frac{\pi}{2}$; 在平行液晶盒中,边界液晶分子的指向矢偏角为 $\theta_{(z=0)} = \theta_{(z=d)} = 0$ 。

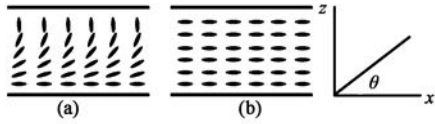


图1 混合液晶盒(a)和平行液晶盒(b)结构和坐标系

Fig.1 Structure of liquid crystal cells and the coordinate system. (a) HAN cell, (b) PAN cell.

液晶盒的总自由能可以表示为^[19]:

$$F = \int (f_{of} + f_{diel} + f_{flex}) dV, \quad (1)$$

其中: f_{of} 、 f_{diel} 和 f_{flex} 分别表示弹性形变自由能密度、介电自由能密度和挠曲电效应引起的自由能密度。弹性形变自由能的表达式为^[20]:

$$f_{of} = \frac{1}{2} K_1 (\nabla \times \mathbf{n})^2 + \frac{1}{2} K_2 [\mathbf{n} \cdot (\nabla \times \mathbf{n})]^2 + \frac{1}{2} K_3 |\mathbf{n} \times (\nabla \times \mathbf{n})|^2, \quad (2)$$

其中: K_1 、 K_2 和 K_3 分别表示液晶的展曲、扭曲和弯曲弹性系数, ∇ 为拉普拉斯算子。对于本文分析的一维问题,代入液晶指向矢 $\mathbf{n}(z)$ 可以得到形变自由能密度为:

$$f_{of} = \frac{1}{2} (K_1 \sin^2\theta + K_3 \cos^2\theta) \left(\frac{d\theta}{dz} \right)^2. \quad (3)$$

式(3)中不存在含 K_2 的项,说明在一维问题中液晶盒没有发生扭曲形变,只有展曲和弯曲形变。对于本文研究的对象,液晶的电位移矢量可以表示为:

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 [\epsilon_{\perp} \mathbf{E} + (\Delta\epsilon) (\mathbf{E} \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n}] + \mathbf{P}_f, \quad (4)$$

其中: ϵ_0 为真空介电常数, $\epsilon_{\perp}$ 为垂直于液晶分子长轴方向的相对介电常数, $\epsilon_{\parallel}$ 为平行于液晶分子长轴方向的相对介电常数, $\Delta\epsilon = \epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}$ 为液晶材料的介电各向异性。 $\mathbf{E}$ 表示液晶中的电场强度。 $\mathbf{P}_f$ 是液晶中由于挠曲电效应产生的极化强度^[17]:

$$\mathbf{P}_f = e_1 \mathbf{n} (\nabla \cdot \mathbf{n}) + e_3 [(\nabla \times \mathbf{n}) \times \mathbf{n}], \quad (5)$$

其中: e_1 和 e_3 表示液晶展曲和弯曲的挠曲电系数。对于一维问题, z 方向上的极化强度 P_{fz} 可以表示为:

$$P_{fz} = -\frac{(e_1 + e_3)}{2} \left(\frac{d\theta}{dz} \right) \sin 2\theta. \quad (6)$$

当液晶盒表面存在自由表面电荷密度 σ 时,可以获得液晶盒内沿厚度方向上的电场分布为^[17]:

$$E_z = \frac{(\sigma - P_{fz})}{\epsilon_0 (\epsilon_{\parallel} + |\Delta\epsilon| \sin^2\theta)}, \quad (7)$$

因此,液晶系统的介电自由能 f_{diel} 可以表示为:

$$f_{diel} = \frac{\sigma [\sigma + \frac{(e_1 + e_3)}{2} \left(\frac{d\theta}{dz} \right) \sin 2\theta]}{2 \epsilon_0 (\epsilon_{\parallel} + |\Delta\epsilon| \sin^2\theta)}, \quad (8)$$

而由于挠曲电效应引起的自由能为:

$$f_{flex} = -P_{fz} E_z = -\frac{P_{fz} (\sigma - P_{fz})}{\epsilon_0 (\epsilon_{\parallel} + |\Delta\epsilon| \sin^2\theta)}, \quad (9)$$

结合式(4,6,8,9)可以看出,液晶系统的自由能密度与液晶分子的指向矢即液晶核的极化方向密切相关。当外加物理场发生改变时,液晶分子通过改变其指向矢(极化方向)来降低系统的自由能,使得液晶盒系统更稳定。

2.2 液晶指向矢的相场方程

相场方法可以通过序参量模拟材料内部微结构的演化,也可以很容易推广描述二维和三维结构。本文把表示液晶分子指向矢的偏转角 θ 作为液晶系统的序参量,其在外场下的演化可以通过动态金兹堡-朗道方程来求解^[21]:

$$\frac{\partial \theta(r, t)}{\partial t} = -L \frac{\delta F}{\delta \theta(r, t)}, \quad (10)$$

其中: $\delta F / \delta \theta(r, t)$ 表示热力学驱动力, t 为时间, L 为动力学系数。将式(1,3,8,9)代入式(10),得到关于液晶指向矢偏角 θ 的相场方程具体表达式:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = L \left\{ (K_1 \sin^2 \theta + K_3 \cos^2 \theta) \left(\frac{d^2 \theta}{dz^2} \right) + \frac{1}{2} (K_1 - K_3) \left(\frac{d\theta}{dz} \right)^2 \times \sin(2\theta) + \frac{\sigma^2 |\Delta \epsilon| \sin(2\theta)}{2 \epsilon_0 (\epsilon_{\parallel} + |\Delta \epsilon| \sin^2 \theta)^2} + \frac{(e_1 + e_3)^2}{4 \epsilon_0} \times \left[\frac{2 \sin(2\theta)}{\epsilon_{\parallel} + |\Delta \epsilon| \sin^2 \theta} \left(\frac{d^2 \theta}{dz^2} \right) + \frac{4(\epsilon_{\parallel} + |\Delta \epsilon| \sin^2 \theta) \cos(2\theta) - |\Delta \epsilon| \sin^2(2\theta)}{(\epsilon_{\parallel} + |\Delta \epsilon| \sin^2 \theta)^2} \left(\frac{d\theta}{dz} \right)^2 \right] \times \sin(2\theta) \right\}. \quad (11)$$

式(11)相场方程可以通过有限差分法求解。将液晶盒沿厚度方向平均划分成 m 份, 在第 i ($1 < i < m+1$) 个节点位置上 θ 的一阶和二阶偏导分别用如下差分形式表示:

$$\frac{\partial \theta}{\partial z} = \frac{\theta_{i+1} - \theta_{i-1}}{2\Delta h}, \quad (12)$$

$$\frac{d^2 \theta}{dz^2} = \frac{\theta_{i+1} - 2\theta_i + \theta_{i-1}}{\Delta h^2}, \quad (13)$$

其中: $\Delta h = \frac{d}{m}$ 为每个单元格的尺寸。将式(12, 13)代入式(11)得到第 i 个节点位置上 θ 的离散表达式为:

$$\frac{\partial \theta_i}{\partial t} = L \left\{ (K_1 \sin^2 \theta_i + K_3 \cos^2 \theta_i) \frac{\theta_{i+1} - 2\theta_i + \theta_{i-1}}{\Delta h^2} + \frac{1}{2} (K_1 - K_3) \left(\frac{\theta_{i+1} - \theta_{i-1}}{2\Delta h} \right)^2 \times \sin(2\theta_i) + \frac{\sigma^2 |\Delta \epsilon| \sin(2\theta_i)}{2 \epsilon_0 (\epsilon_{\parallel} + |\Delta \epsilon| \sin^2 \theta_i)^2} + \frac{(e_1 + e_3)^2}{4 \epsilon_0} \left[\frac{2 \sin(2\theta_i)}{\epsilon_{\parallel} + |\Delta \epsilon| \sin^2 \theta_i} \left(\frac{\theta_{i+1} - 2\theta_i + \theta_{i-1}}{\Delta h^2} \right) + \frac{4(\epsilon_{\parallel} + |\Delta \epsilon| \sin^2 \theta_i) \cos(2\theta_i) - |\Delta \epsilon| \sin^2(2\theta_i)}{(\epsilon_{\parallel} + |\Delta \epsilon| \sin^2 \theta_i)^2} \left(\frac{\theta_{i+1} - \theta_{i-1}}{2\Delta h} \right)^2 \right] \times \sin(2\theta_i) \right\}. \quad (14)$$

将式(14)简化为如下函数形式:

$$\frac{\partial \theta_i}{\partial t} = F_1(\theta_{i+1}, \theta_i, \theta_{i-1}). \quad (15)$$

式(15)运用四阶龙格-库塔法可以求解液晶盒内各节点液晶指向矢关于时间的演化。在 $t_1 + \Delta t$ 时刻, 液晶指向矢偏角 $\theta_{i1}^{t_1+\Delta t}$ 可以表示为:

$$\theta_{i1}^{t_1+\Delta t} = \theta_{i1}^{t_1} + (X_1^{t_1} + 2X_2^{t_1} + 2X_3^{t_1} + X_4^{t_1})/6, \quad (16)$$

其中:

$$\begin{aligned} X_1^{t_1} &= F_1(\theta_{i+1}^{t_1}, \theta_{i1}^{t_1}, \theta_{i-1}^{t_1}), \\ X_2^{t_1} &= F_1(\theta_{i+1}^{t_1}, \theta_{i1}^{t_1} + \Delta t \times X_1^{t_1}/2, \theta_{i-1}^{t_1}), \\ X_3^{t_1} &= F_1(\theta_{i+1}^{t_1}, \theta_{i1}^{t_1} + \Delta t \times X_2^{t_1}/2, \theta_{i-1}^{t_1}), \\ X_4^{t_1} &= F_1(\theta_{i+1}^{t_1}, \theta_{i1}^{t_1} + \Delta t \times X_3^{t_1}/2, \theta_{i-1}^{t_1}), \end{aligned} \quad (17)$$

其中: Δt 表示时间步长。

2.3 液晶盒电容表达式

通过数值求解式(16)可得到液晶盒内每一个节点上最终稳定的液晶指向矢偏角。液晶盒电容 C [7,8] 可以表示为: $dC = \frac{S\epsilon(z)}{dz}$, S 为基板的面积, 对其沿厚度方向积分可得:

$$\frac{1}{C} = \frac{1}{S \epsilon_0 \epsilon_{\perp}} \int_0^d \frac{dz}{1 + r \sin^2 \theta}, \quad (18)$$

其中: $r = \frac{\epsilon_{\parallel}}{\epsilon_{\perp}} - 1$ 。对式(18)右端的积分项离散求解, 可得:

$$\int_0^d \frac{dz}{1 + r \sin^2 \theta} = \sum_{i=1}^m \frac{1}{2} [f(\theta_i) + f(\theta_{i+1})] \Delta h, \quad (19)$$

其中: $f(\theta) = \frac{1}{1 + r \sin^2 \theta}$ 。因此, 结合式(18, 19)

液晶盒的约化电容可表示为:

$$c = \frac{Cd}{S \epsilon_0 \epsilon_{\perp}} = \sum_{i=1}^{m+1} \frac{1}{2m} [f(\theta_i) + f(\theta_{i+1})]. \quad (20)$$

从式(20)可以看粗, 约化电容与液晶盒内液晶分子指向分布密切相关。

3 数值分析与讨论

在整个数值计算过程中, 采用如下材料参数^[8]: $r = 1$, $L = 1$, $K_1 = 6.2$ pN, $K_3 = 8.3$ pN,

$\Delta\epsilon=5.2$, $\epsilon_{\parallel}=10.5$, $\epsilon_0=8.85\times 10^{-12}\text{ C}^2/(\text{N}\cdot\text{m}^2)$ 。液晶盒厚度取 $d=4\text{ }\mu\text{m}$, 沿厚度方向分成 10 等份, 即 $m=10$, 计算时间步长 $\Delta t=1\times 10^{-4}$, 整个时间循环次数为 5000~30 000。通过数值算例发现, 对于平行液晶盒, 在临界厚度或临界电荷密度工况下, 时间循环次数需要达到 30 000 时结果才能趋于稳定值。在液晶盒上下基板位置上设定液晶核的机械边界条件, 对于平行液晶盒 $\theta_{(1)}=\theta_{(11)}=0$, 而混合液晶盒 $\theta_{(1)}=0$, $\theta_{(11)}=\pi/2$, 在液晶盒内每个节点液晶指向矢偏角的计算初始值赋予微小高斯随机值。

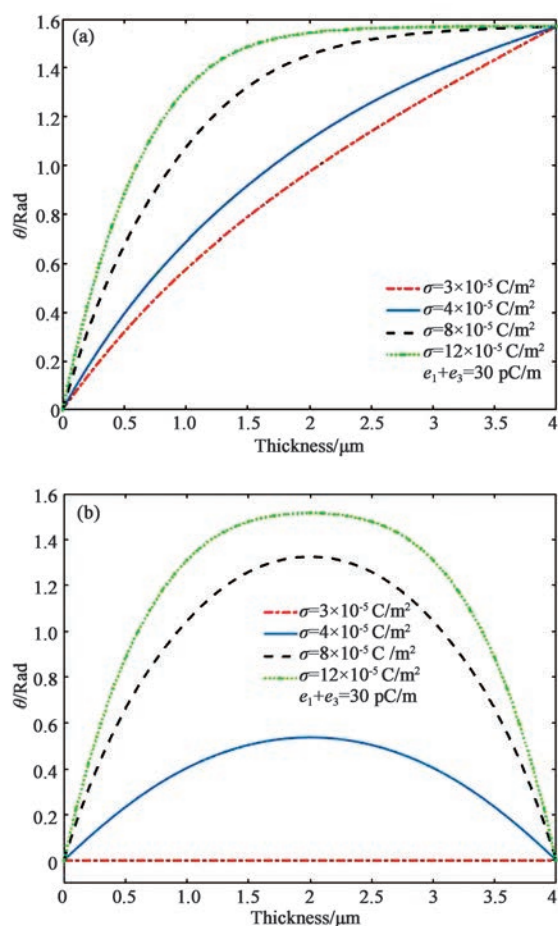


图2 不同表面电荷密度值对混合液晶盒(a)和平行液晶盒(b)指向矢厚度分布的影响

Fig.2 Distribution of director in (a) HAN cell and (b) PAN cell with different surface charge density

图2给出了不同表面电荷对混合液晶盒与平行液晶盒内液晶分子指向矢分布的影响, 此时挠曲电系数取 $e_1+e_3=30\text{ pC/m}$ 。从图2(a)中可以看出, 在混合液晶盒中, 表面电荷密度越大, 液

晶分子的指向矢偏角越大, 沿厚度方向指向矢偏角在 $0\sim\pi/2$ 连续变化。从图2(b)可以看出, 在平行液晶盒中, 当表面电荷密度超过某一临界值时(大约 $3\times 10^{-5}\text{ C/m}^2$), 液晶分子指向矢才能发生改变, 并在液晶盒中间层出现最大值。当表面电荷密度低于临界值时, 液晶分子指向矢保持不变。临界表面电荷密度值与液晶盒的厚度密切相关, 将在下节讨论。

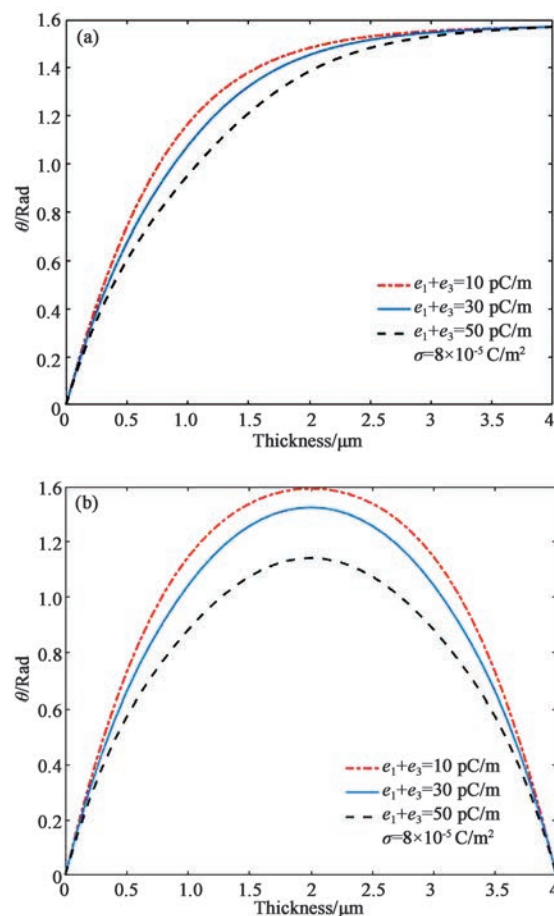


图3 不同挠曲电系数对混合液晶盒(a)和平行液晶盒(b)指向矢厚度分布的影响

Fig.3 Distribution of director in (a) HAN cell and (b) PAN cell with different flexoelectric coefficients

图3给出了挠曲电效应对两种液晶盒指向矢分布的影响, 此时表面电荷密度取 $\sigma=8\times 10^{-5}\text{ C/m}^2$ 。从图中可以看出, 在混合液晶盒和平行液晶盒中, 挠曲电效应对液晶核指向矢的影响是一样的, 即挠曲电系数和越大, 液晶核指向矢偏角越小。这个结果与文献[7]报道的结果很类似, 他们讨论的是电压控制。

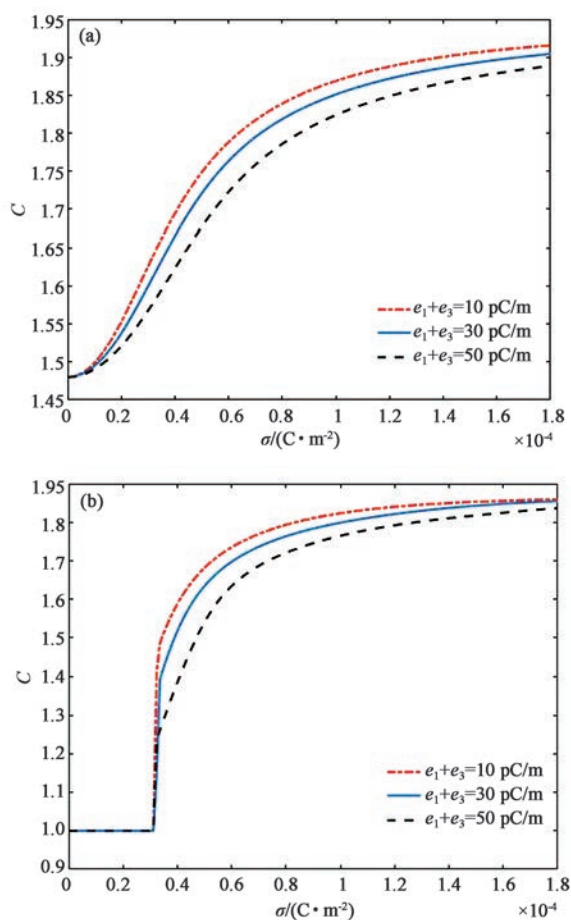


图 4 不同挠曲电系数对混合液晶盒(a)和平行液晶盒(b)约化电容-表面电荷密度曲线的影响

Fig.4 Capacitance-surface charge density curve in (a) HAN and (b) PAN cell with different flexoelectric coefficients

图 4 分别给出了挠曲电效应对约化电容-表面电荷密度曲线的影响。从图 4(a)可以发现,在混合液晶盒中,当表面电荷密度较小时,约化电容随表面电荷密度的增加而显著增加,当表面电荷密度较大时,约化电容趋于稳定值。这是因为在不断加大的表面电荷作用下,液晶分子指向矢都稳定地趋于电场的加载方向,因此约化电容的变化逐渐平缓并最终趋于稳定。而从图 4(b)可以发现,在平行盒液晶盒中,当表面电荷密度低于临界值时,约化电容不发生改变,当表面电荷密度超过临界值时,液晶盒的约化电容发生陡变,并最终趋于稳定。这是因为,在平行液晶盒中,电荷密度达到临界值后,液晶分子指向矢发生变化,从而引起电容的巨大变化,而且平行液晶盒的液晶分子指向矢比混合液晶的液晶分子指向矢更快的达到

饱和指向。图 4 也显示了在混合液晶盒和平行液晶盒中,挠曲电系数和越大,约化电容越小,但随着表面电荷密度的增加,约化电容最终会趋于相等。因此,我们可以通过调节液晶材料的挠曲电系数来调控液晶盒的宏观电容特性。

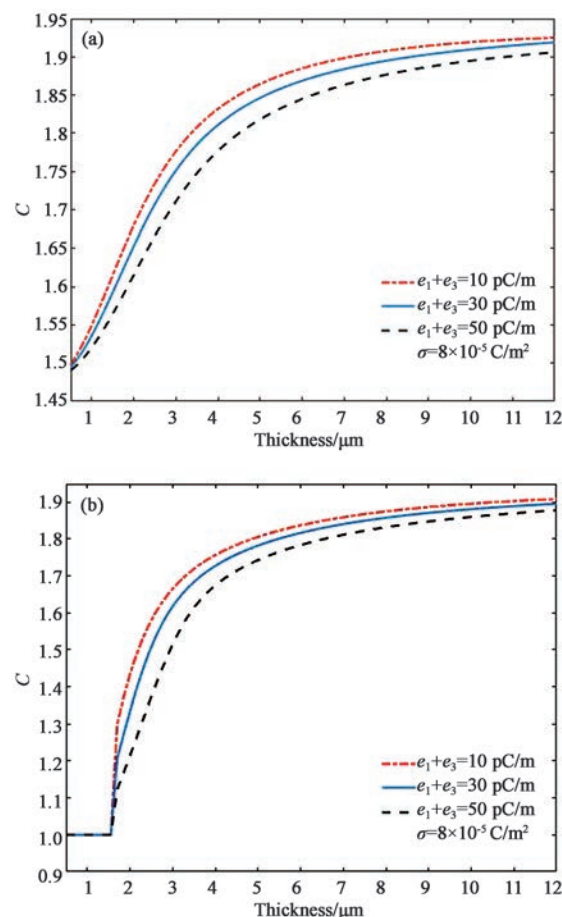


图 5 不同挠曲电系数对(a)混合液晶盒和(b)平行液晶盒约化电容-厚度曲线的影响

Fig.5 Capacitance-Thickness in (a) HAN and (b) PAN cell with different flexoelectric coefficients

图 5 给出了两种液晶盒中挠曲电效应对约化电容-厚度关系曲线的影响,此时表面电荷密度取 $\sigma = 8 \times 10^{-5} \text{ C/m}^2$ 。图 5(a)显示,在混合液晶盒中,当表面电荷密度确定时,约化电容随着液晶盒厚度的增加而增加。当液晶盒厚度达到一定值时,约化电容趋于稳定。从图 5(b)可以看出,在平行液晶盒中,当表面电荷确定时,液晶厚度存在一临界值,当液晶盒厚度小于此临界值时,约化电容保持不变;当液晶盒厚度达到此临界值时,电容发生陡增并很快达到稳定值。因此,当设计液晶

器件时,需要充分考虑其应用工况。例如,当工况表面电荷密度确定时,设计平行液晶盒的厚度必须大于临界厚度,这样才能获得大的电容特性。从图 5(b)也可以看出,挠曲电效应对液晶盒厚度临界值几乎无影响。

图 6 分别给出了两种液晶盒中表面电荷密度对约化电容-厚度关系的影响,此时挠曲电效应取 $e_1 + e_3 = 30 \text{ pC/m}$ 。从图 6(a)中可以看出,大的

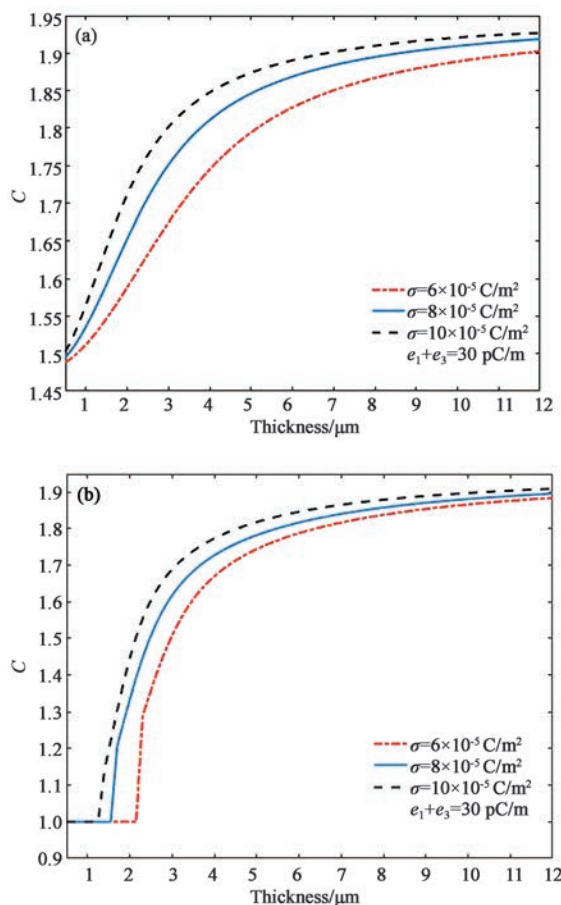


图 6 不同表面电荷密度对(a)混合液晶盒和(b)平行液晶盒约化电容-厚度曲线的影响

Fig.6 Capacitance-Thickness curve in (a) HAN and (b) PAN cell with different surface free charge density

表面电荷密度产生更大的约化电容,但是,表面电荷密度大小对大厚度的液晶盒几乎无影响。而图 6(b)的结果显示,在平行液晶盒中,表面电荷密度越大,液晶盒的约化电容发生改变时的液晶盒厚度越小,即液晶分子发生反转时的临界厚度越小。因此,当设计应用于小表面电荷密度工况下工作的平行液晶盒时,液晶盒的厚度应该尽量小。图 6(b)也显示,对于大厚度液晶盒,表面电荷密度也几乎不改变液晶盒的约化电容。

4 结 论

本文采用相场方法研究了表面电荷作用下不同初始分布向列相液晶盒(混合液晶盒与平行液晶盒)中挠曲电效应对液晶电容特性的影响。基于液晶盒的整体能量,构建描述液晶分子指向矢偏角在外加电场下演化的相场方程,给出了液晶盒约化电容的数值表达式。分析了挠曲电系数和表面电荷密度对混合液晶盒和平行液晶核指向矢的影响,讨论了两种初始分布的液晶盒内约化电容-表面电荷密度曲线和约化电容-厚度曲线。分析结果表明,在混合液晶盒中,表面电荷密度越大,挠曲电系数越小,液晶核指向矢偏角越大并最终沿电荷加载的方向趋于稳定,其约化电容随表面电荷和液晶厚度的增加而增加并趋于平缓。在平行液晶盒中,表面电荷密度和液晶厚度都存在临界值,当超过其临界值时,液晶核的指向矢才会发生偏转,从而引起液晶电容的巨大改变。当表面电荷密度越大,液晶盒约化电容发生显著变化的临界厚度越小,而表面电荷密度几乎不影响大厚度液晶盒的约化电容。因而,液晶器件在设计时应该充分考虑其应用工况(表面电荷密度)、液晶盒厚度、液晶核初始取向与液晶材料等各种因素的影响。

参 考 文 献:

- [1] 谢毓章. 液晶物理学[M]. 北京: 科学出版社, 1998: 61-66.
XIE Y Z. *The Physics of Liquid Crystals*[M]. BeiJing: Science Press, 1998: 61-66.
- [2] YANG D K, Wu S T. *Fundamentals of liquid crystal devices*[M]. John Wiley & Sons Ltd, 2006: 274
- [3] MORRIS S W. Measurements of the elastic constants of a liquidcrystal[D]. Vancouver: University of British Columbia, 1985.
- [4] WELFORD K R, MINERS F, SAMBLES J R. A new technique for determining the dielectric constants of a nemat-

- ic liquid crystal[J]. *Journal of Physics D, Applied Physics*, 1988, 21(9): 1320.
- [5] 温庆祥, 黄锡珉, 何林, 等. C-V 法液晶弹性常数的测定[J]. 液晶通讯, 1993(1): 73-78.
WENG Q X, HUANG X M, He L, *et al.* Measurement of liquid crystal elastic constants by C-V method[J]. *Chinese Letter of Liquid Crystal*, 1993(1): 73-78.
- [6] 孔祥建, 荆海, 黄霞, 等. 一种改进的 C-V 方法对向列相液晶弹性常数 k_{11} 、 k_{33} 测量的理论研究[J]. 液晶与显示, 2007, 22(5): 587-590.
KONG X J, JIN H, HUANG X, *et al.* Theoretical research of improved C-V method to measure k_{11} and k_{33} of nematic liquid crystals[J]. *Chinese Journal of Liquid Crystals and Displays*, 2007, 22(5): 587-590.
- [7] 崔文静, 邢红玉, 张艳君, 等. 挠曲电效应对向列相液晶盒电容的影响[J]. 数值计算与计算机应用, 2012, 33(2): 129-137.
CUI W J, XIN H Y, ZHANG Y J, *et al.* Influence of the flexoelectric effect on the capacitance of nematic liquid crystal cell[J]. *Journal on Numerical Methods and Computer Applications*, 2012, 33(2): 129-137.
- [8] 崔文静, 邢红玉, 张艳君, 等. 混合排列向列相液晶盒电容特性研究[J]. 液晶与显示, 2012, 27(5): 608-612.
CUI W J, XIN H Y, ZHANG Y J, *et al.* Capacitance characteristics of hybrid aligned nematic liquid crystal cell[J]. *Chinese Journal of Liquid Crystals and Displays*, 2012, 27(5): 608-612.
- [9] YE W J, XING H Y, CUI W J, *et al.* Determining the sum of flexoelectric coefficients in nematic liquid crystals by the capacitance method[J]. *Chinese Physics B*, 2014, 23(11): 414-421.
- [10] MURAUSKI A, CHIGRINOV V, MURAVSKY A, *et al.* Determination of liquid-crystal polar anchoring energy by electrical measurements[J]. *Physical Review E*, 2005, 71(1): 061707.
- [11] 顾利忠, 苏菲, 赵颀, 等. 用瞬态激振法测量微机械材料的弹性模量[J]. 清华大学学报(自然科学版), 2001, 41(9): 126-128.
GU L Z, SU F, ZHAO J, *et al.* Measurement of Young's modulus for micro-machined materials using transient excitation[J]. *Journal of Tsinghua University*, 2001, 41(9): 126-128.
- [12] Meyer R B. Piezoelectric effects in liquid crystals[J]. *Physical Review Letters*, 1969, 22(18): 918-921.
- [13] Gennes P G D. Polymeric liquid crystals: Frank elasticity and light scattering[J]. *Molecular Crystals*, 1976, 34(8): 177-182.
- [14] 崔文静, 邢红玉, 叶文江, 等. 液晶可调电容器的研究[J]. 液晶与显示, 2013, 28(2): 173-178.
CUI W J, XIN H Y, YE W J, *et al.* Liquid crystal tunable capacitor[J]. *Chinese Journal of Liquid Crystals and Displays*, 2013, 28(2): 173-178.
- [15] KAUR S, PANOVA V P, GRECO C, *et al.* Flexoelectricity in an oxadiazole bent-core nematic liquid crystal[J]. *Applied Physics Letters*, 2014, 105(22): 022505.
- [16] RESHETNYAK V Y, PINKEVYCH I P, COOK G, *et al.* Two-beam energy exchange in a hybrid photorefractive-flexoelectric liquid-crystal cell[J]. *Physical Review E*, 2010, 81: 031705.
- [17] VITORIANO C, SÁTIRO C. Consequences of director-density coupling theory for flexoelectricity in nematic liquid crystals[J]. *Physical Review E*, 2016, 93(2): 022702.
- [18] OATES W S, WANG H. A new approach to modeling liquid crystal elastomers using phase field methods[J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2009, 17(6): 064004.
- [19] KISCHKA C, PARRY-JONES L A, ELSTON S J, *et al.* Measurement of the flexoelectric coefficients e_1 and e_3 in nematic liquid crystals[J]. *Molecular Crystals and Liquid Crystals*, 2008, 480(1): 103-110.
- [20] VITORIANO C. Generalization of the Ericksen-Leslie theory[J]. *European Physical Journal E*, 2017, 40(4): 48.
- [21] ZHOU Z D, WU D Y. Domain structures of ferroelectric films under different electrical boundary conditions[J]. *AIP Advances*, 2015, 5(10): 107206.

作者简介:



王舒凯(1992—),男,湖北孝感人,厦门大学材料学院研究生,主要从事液晶物理性能的研究。E-mail: 943153819@qq.com