

文章编号:1007-2780(2015)01-0016-06

蓝相 II 液晶态结构及其光学特性

窦 虎,于亚楠,马红梅,孙玉宝*

(河北工业大学 应用物理系,天津 300401)

摘要:研究了蓝相 II 态液晶的双螺旋结构及特点,分析了缺陷与双螺旋结构的关系,解释了产生缺陷位置的原因。介绍了传统制作蓝相 II 态液晶晶格模型的方法,提出了一种制作蓝相 II 态液晶晶格模型的新方法,这种方法可以做出全空间的液晶分子指向矢。利用做出的新模型,采用时域有限差分法(FDTD)进行仿真模拟光学特性,当光源采用圆偏振时,模拟出的结果表明,左旋圆偏振和右旋圆偏振光的透过率有着显著的差别,与蓝相液晶螺旋方向相同的圆偏振光在特定的波长范围会被大量反射。

关 键 词:蓝相液晶;双螺旋结构;缺陷;时域有限差分法

中图分类号:TN104.3 **文献标识码:**A **doi:**10.3788/YJYXS20153001.0016

Structure and optical profile of blue phase II

DOU Hu, YU Ya-nan, MA Hong-mei, SUN Yu-bao*

(Department of Applied Physics, Hebei University of Technology, Tianjin 300401, China)

Abstract: The structure and characteristics of double-twist structure of blue phase liquid crystal (BPLC) II are researched, the relationship between the defects and the structure of double-twist cylinder is analyzed, and the reason that produces the position of defects is explained. The traditional method which makes the model of BPLC II structure is described, and a new method to make the model of the BPLC II structure is proposed, the molecular arrangement in the whole space can be built. The optical characteristics are simulated using finite difference time domain method and the BPLCD II structure. When the circularly polarized light is used, the result showed that the transmissions of the left-handed and right-handed circularly polarized light are obviously different; the circularly polarized light which is same to the twist direction of BPLC is reflected in certain wavelength range.

Key words: blue phase liquid crystal; double-twist structure; defect; FDTD

1 引 言

蓝相液晶由于快速响应特性^[1]及简单的制作

工艺^[2],在显示器的制作方面有着广泛的应用前景。液晶的蓝相是液晶的一种特殊状态,它在胆甾相和各向同性相之间很小的温度范围内存在,具有独特的双扭曲螺旋结构^[3]。已有的研究表

收稿日期:2014-06-23;修订日期:2014-07-22.

基金项目:国家自然科学基金(No. 11304074)

* 通信联系人,E-mail:sun_yubao@163.com

明,蓝相液晶具有 3D 周期晶格结构^[4],根据蓝相液晶的 3D 周期晶格结构,可以把它分为 3 种状态:蓝相 I 态(体心立方晶格结构)、蓝相 II 态(简单立方晶格结构)、和蓝相 III 态(晶格结构无定型)。其中晶格结构为简单立方的蓝相 II 态因为结构较为简单,便于建立模型来从微观角度分析其光学和电学特性^[5]。

2 晶格的建立与分析

2.1 蓝相 II 液晶分子晶格结构

蓝相 II 液晶分子的晶格结构为简单立方,它的结构图如图 1(a)所示,圆柱内液晶分子呈双螺旋排列,它的一个平面的示意图如图 1(b)所示。

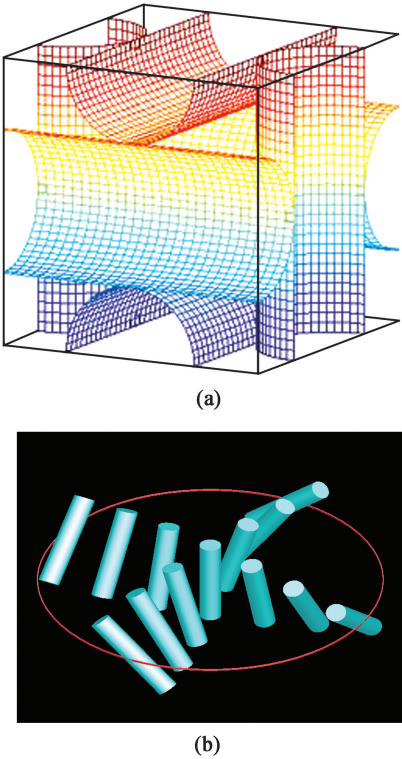


图 1 蓝相 II 液晶分子晶格示意图和双螺旋分子排列
Fig.1 Schematic of the BPLC II lattice model and double-twist molecules arrangement

在圆柱边缘的位置上液晶分子将旋转至与中心位置的分子呈大约 45° ,在靠近圆柱中心的过程中分子均匀旋转,最后在圆柱中心分子与圆柱的方向平行。值得注意的是液晶分子的旋转方向,为了保证液晶分子在圆柱体内的分子指向不发生抵触,我们可以这样描述分子的排列,取一条

圆柱直径上的分子,其他位置上的分子相当于这条直径上的分子旋转 90° 而得到。其中最特别的位置就是圆柱中心的轴线上,液晶分子的排列完全相同,都是沿着平行于圆柱的方向排列。

2.2 蓝相 II 液晶分子的晶胞模型

关于蓝相 II 分子晶胞模型的建立,传统方法为:在圆柱内的分子排列为规整的双螺旋排列^[6](如图 2),利用液晶分子的寻常折射率 n_o 和异常折射率 n_e 按照各向异性介质的性质来计算它的光学特性;而圆柱外的所有分子均可认为是各向同性的,平均折射率为 $(2n_o + n_e)/3$ 。

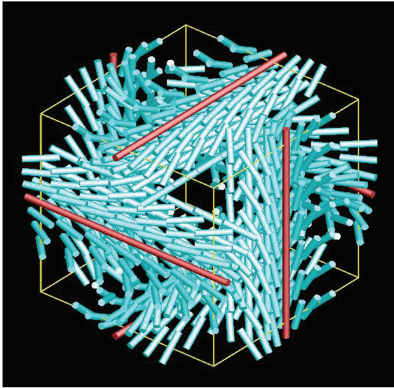


图 2 晶格里液晶分子的排列,红线是圆柱中心线
Fig.2 Molecules arrangement in a lattice, the red lines are centerlines of the cylinders.

在建立模型时为了使模型中的液晶分子均匀按格点排列同时旋转方向连续,我们先计算出 $1/4$ 圆柱的分子排列然后将其以圆柱的中心线为轴旋转 90° ,连续 3 次旋转之后就可以得到一个完整的圆柱。圆柱的截面图如图 3 所示,距离圆柱轴心相同位置的液晶具有相同的扭曲角度(相对于轴心),圆柱的边界处的扭曲角度为 45° 。

这种模型的建立方法虽然更简单一些,但是忽略了柱体边界外一部分液晶分子排列的有序性,将它们一同认为是排列非常混乱以至于可以当做各向同性状态来处理,而一般情况下只有缺陷处才可以认为是各向同性的介质。另外更重要的是这种方法也无法呈现出蓝相 II 分子晶格中缺陷的特点。

本文主要将考虑圆柱外液晶的排列状态来建立模型,通过圆柱中心线对液晶分子排列的影响来获得整个空间中的液晶排列。对于一个液晶分

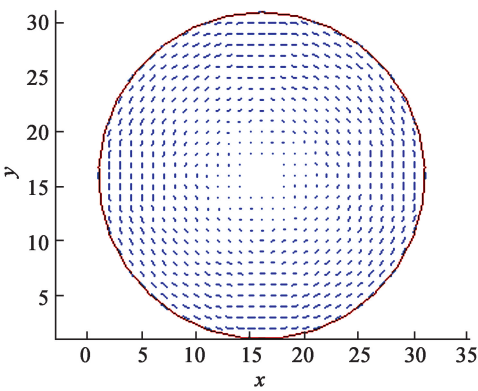


图 3 传统模型的圆柱中截面中的液晶排列示意图
Fig. 3 Crossed image of liquid crystal arrangement in a cylinder in traditional model

子,它受到圆柱中心线的作用大小与它到这条轴线的距离呈反比,也就是说分子越接近圆柱中心线的格点它的排列与圆柱中心线处分子的排列越相同。需要注意的是在同一个晶格内相同方向的相邻圆柱中心线给液晶分子的作用是相反的,这是因为这两条相邻的圆柱中心线上的分子旋转了 180° 。我们考虑 $3\times 3\times 3$ 个晶胞内的所有圆柱中心线对其中心晶胞内的液晶分子的影响作用,对于一个晶格我们把它分为 $61\times 61\times 61$ 个网格,晶格长度为 a ,液晶分子在 zoy 面、 xoz 面以及 xoy 面的指向分布投影如图 4 所示。图中可以看出:圆柱堆叠的地方,液晶指向矢的投影各个方向都有;在圆柱的中心的位置液晶指向矢垂直于纸面。

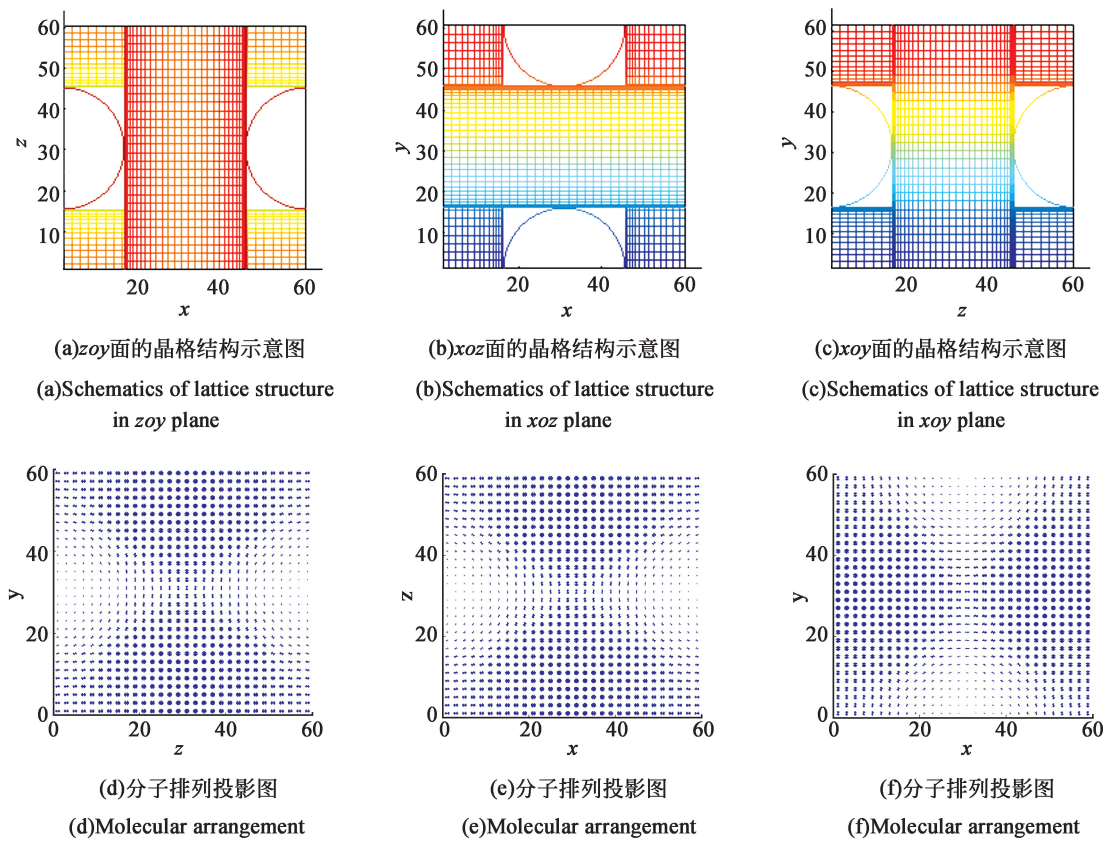


图 4 晶格结构在 3 个面上的透视示意图和液晶分子排列投影图

Fig. 4 Schematics of lattice structure and projection drawings of molecular arrangement on three planes

3 模拟计算

3.1 蓝相 II 液晶分子的缺陷

在建立蓝相 II 液晶晶格模型的过程中,为了

保证晶格内圆柱的双螺旋结构和圆柱之间交界处分子的连续排列,我们发现无论分子的旋转方向如何,缺陷的结构都是相同的^[7]。即如果把一个晶胞分为 $2\times 2\times 2$ 个网格的结构,两个相邻的网格必有一个一条对角线是缺陷而另一个网格没有

缺陷。如果我们选择液晶分子为右旋结构,那么蓝相 II 液晶分子的缺陷如图 5 所示。我们把 $61 \times 61 \times 61$ 个网格结构的晶格,分别截取 $y = 20, 31, 40$ 的 xoz 平面图,如图 5 所示,图中红色

圈的位置为缺陷的位置,从分子排列的二维图中,我们可以看出在缺陷位置处的液晶分子排列发生了突变,是混乱无序的。
产生这种独特缺陷是蓝相液晶的特殊性质。

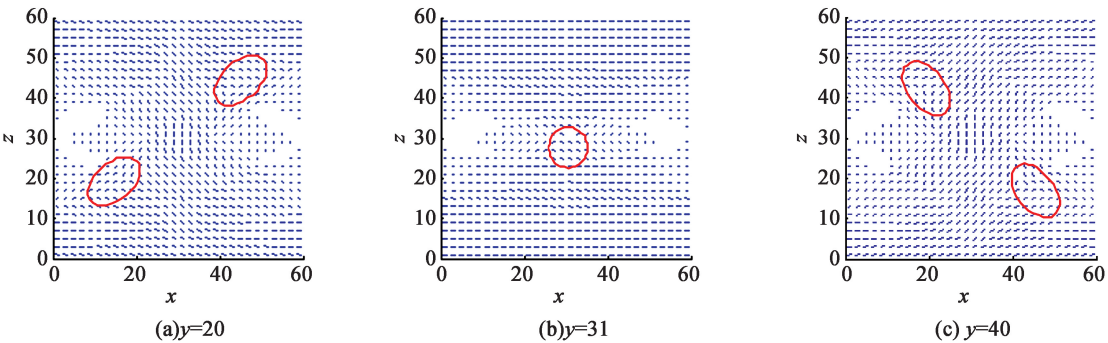


图 5 y 方向上的二维截面图
Fig. 5 Two-dimensional crossed drawing at y direction

蓝相液晶与胆甾相^[8]液晶有相似之处却又有显著的区别。在胆甾相中,液晶分子在同一层的排列是平行的,而在相邻层会发生一个微小的转动,我们把这种只在一个轴上发生转动的结构称为单螺旋,如果在胆甾相的基础上在垂直于螺旋轴的方向上再加一个螺旋轴,就会形成蓝相圆柱内分子的排列,这种有着两个螺旋轴的结构就可以称之为双螺旋。在圆柱中心线附近的分子排列是非常有序的,但是这样的一个个双螺旋结构的圆柱不会遍布在整个晶胞中,在双螺旋结构之间必然有“抵触”的地方,从而导致发生分子指向矢的突变,这些突变的地方就是蓝相液晶中缺陷的位置。

蓝相液晶一个周期中的缺陷位置如图 6 中圆棒所示。图 7 和 8 是下半部分周期中,圆柱体内部分液晶分子和缺陷的示意图,可以看出双螺旋结构相互抵触的原因,随着 z 轴的增加,如果设

图 7 的中心为原点,则在一、三象限里,分子的取向会向相同的方向渐变,因而不会产生缺陷;在二、四象限里,随着 z 轴的增加,分子的取向会相互抵触,因此会产生缺陷。如果我们取晶格的上半部分,y 方向圆柱中心线附近的分子会像相反的方向渐变,因而会在一、三象限产生缺陷而二、四象限的液晶分子指向不会发生“抵触”。

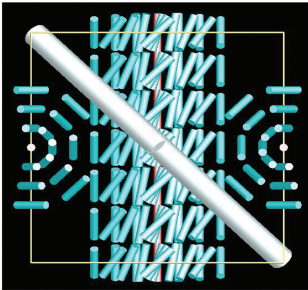


图 7 在 xoy 面的缺陷及部分液晶分子
Fig. 7 Two-dimensional drawing in xoz plane

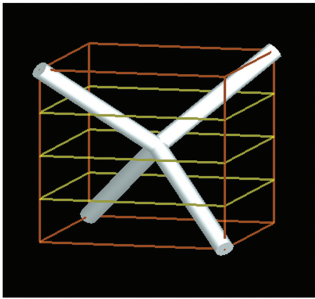


图 6 晶格内缺陷
Fig. 6 Defects in the lattice

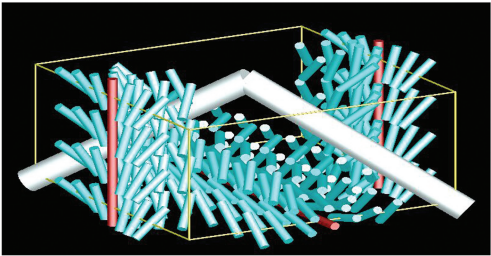


图 8 晶格下半部分的缺陷及部分液晶分子
Fig. 8 Lower half of the lattice

3.2 蓝相 II 液晶的光学特性

FDTD^[9](时域有限差分法)算法是将麦克斯韦方程转化为差分方程,在时间轴上逐步推进求解的严格求解过程,在处理小尺寸器件的计算时有着巨大的优势^[10]。当计算各向异性介质时^[11]需要用 D (电位移矢量)和 H (磁场强度)迭代,再根据 $E=\epsilon_r^{-1}D$ 求出电场强度 E ,其中 ϵ_r^{-1} 为相对介电常数张量^[12]。我们采用这种算法来研究蓝相 II 液晶的光学特性。

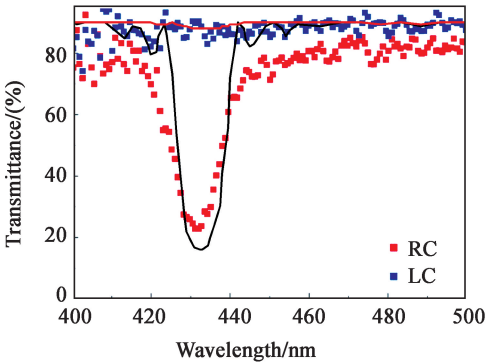


图 9 左旋和右旋圆偏振光通过液晶层后波长和透过率图

Fig. 9 Transmittance vs wavelength for left-handed and right-handed circularly polarized light passes through LC layer

将做出的晶胞模型沿着 z 轴方向平移形成 $n=67$ 个周期,液晶层厚度大约为 $9\text{ }\mu\text{m}$,晶格长度 $a=135\text{ nm}$,即液晶螺距为 270 nm ,螺旋方向定为右旋方向, x 和 y 方向采用周期性边界条件, z 方向用完全匹配(PML)层^[13]来吸收反射光。寻常光折射率 $n_o=1.5738$,非寻常光折射率 $n_e=1.6324$,时间采样间隔为 $\Delta t=5\times10^{-18}\text{ s}$,FDTD 网格尺寸 $\Delta x=\Delta y=\Delta z=2.5\text{ nm}$ 。模拟时采用两个

平面波做光源,电场偏振方向分别为 x 轴和 y 轴,并令这两个光源的相位差为 $\pm90^\circ$,这样就可以用来模拟左右旋的圆偏振光照射液晶层的情况。在模拟中,圆偏振的光波通过液晶层,模拟中的光波长从 400 nm 到 500 nm ,模拟结果如图 9 所示,模拟结果与实验所测^[14]结果符合的非常好。模拟和实验结果表明:选择性反射光的圆偏振方向与蓝相液晶的螺旋方向相同;选择反射光的中心波长和反射波段的半高宽度符合胆甾相液晶的选择性反射的特点。因此,蓝相液晶的一些光学特性可以采用胆甾相液晶的光学特性来判定。

4 结 论

提出了一种构造蓝相 II 液晶分子晶格结构的新方法,与传统构造晶格结构的方法相比,这种方法构造出来的晶格结构是全空间的液晶分子排列,可以描述出晶格结构中缺陷的具体位置和分子排列混乱无序的特点。晶格内缺陷产生的原因是多个双螺旋结构中的液晶在空间内发生了“抵触”而产生的结果,缺陷的位置就是双螺旋结构发生“抵触”的位置。使用左旋和右旋圆偏振的光照射液晶层,使用时域有限差分法模拟两种圆偏振光通过蓝相 II 液晶的透过率情况,在波长变化时会发生明显的差别。从模拟结果来看,右旋圆偏振光的波长在 432 nm 附近会有大量的光被反射回去。这种现象就是蓝相液晶对于圆偏振光的选择性反射,也是胆甾相液晶的一般特性。本文实现蓝相液晶的基本特性计算,我们将对蓝相液晶的其他特性进行研究。

参 考 文 献:

[1] Chen K M, Gauza S, Xianyu H, *et al.* Submillisecond gray-level response time of a polymer stabilized blue phase liquid crystal [J]. *J. Disp. Technol.*, 2010, 6(2):49-51.

[2] Kerr J. A new relation between electricity and light: dielectrified media birefringent [J]. *Philos. Mag.*, 1875, 50 (332):337-348.

[3] Wright D C, Mermin N D. Crystalline liquids: the blue phases [J]. *Reviews of Modern Physics*, 1989, 61(2): 385-433.

[4] Thieme M, Saupe A, Heppke G, *et al.* Surface-imaging of frozen blue phases in a discotic liquid crystal with a-

- tomic force microscopy Anton Hauser [J]. *J. Mater. Chem.*, 1997, 7(11): 2223-2229.
- [5] Ogawa Y, Fukuda J, Yoshida H, *et al.* Photonic band structure and transmission analysis of cholesteric blue phase II: electrostriction in the $[100]$ direction [J]. *Opt. Express*, 2014, 22(4): 3766-3772.
- [6] Ogawa Y, Fukuda J, Yoshida H, *et al.* Finite-difference time-domain analysis of cholesteric blue phase II using the Landau-de Gennes tensor order parameter model [J]. *Opt. Lett.*, 2013, 38(17): 3380-3383.
- [7] Fukuda J, Yoneya M, Yokoyama H. Simulation of cholesteric blue phases using a Landau-de Gennes theory: Effect of an applied electric field [J]. *Phys. Rev. E*, 2009 (80): 031706(1-15).
- [8] 李昌立, 孙晶, 蔡红星, 等. 胆甾相液晶的光学特性 [J]. *液晶与显示*, 2002, 17(3): 193-198.
Li C L, Sun J, Cai H X, *et al.* Optical properties of cholesteric liquid crystals [J]. *Chinese Journal of Liquid Crystals and Displays*, 2002, 17(3): 193-198. (in Chinese)
- [9] 葛德彪, 闫玉波. 时域有限差分方法 [M]. 3 版. 西安: 西安电子科技大学出版社, 2005: 13-20.
- [10] Yang P, Liou K N. Finite-difference time domain method for light scattering by small ice crystals in three-dimensional space [J]. *J. Opt. Soc. Am. A*, 1996, 13(10): 2072-2085.
- [11] Kriezis E E, Elston S J. Finite-difference time domain method for light wave propagation within liquid crystal devices [J]. *Opt. Communications*, 1999, 165(1): 99-105.
- [12] Kriezis E E, Elston S J. Light wave propagation in liquid crystal displays by the 2-D finite-difference time-domain method [J]. *Opt. Communications*, 2000, 177(1): 69-77.
- [13] Berenger J P. A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves [J]. *J. Comp. Phys.*, 1994, 114(2): 185-200.
- [14] Ojima M, Ogawa Y, Ozaki R, *et al.* Finite-difference time-domain analysis of polarization-dependent transmission in cholesteric blue phase II [J]. *Applied Physics Express*, 2010, 3(3): 032001 (1-3).

作者简介: 窦虎(1990—), 男, 河北邯郸人, 硕士研究生, 主要从事液晶器件方面的研究。E-mail: 1103322765@qq.com