МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное образовательное учреждение
высшего образования
«Южно-Уральский государственный университет» (НИУ)
«Институт естественных и точных наук»
Физический Факультет
Кафедра физическая электроника

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ

Заведующий кафедрой

_____/Гуревич С.Ю./

«____»_____ 2018г.

Динамика переключения сегнетоэлектрических ЖК электрическим полем

ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА

К ВЫПУСКНОЙ КВАЛИФИКАЦИОННОЙ РАБОТЕ

ЮУрГУ – 11.03.04.2018.029 ПЗ ВКР

Руководитель, к.ф.-м.н., доцент

_____/Подгорнов Ф.В./

"____"_____ 2018г.

Автор, студент группы ЕТ – 453

_____/Горобец А.В./

"____"_____ 2018г.

Нормоконтролер, к.т.н., доцент

_____/Колмакова Н.С./

"____"_____ 2018г.

Челябинск 2018

АННОТАЦИЯ

Горобец А.В. Динамика переключения сегнетоэлектрических ЖК электрическим полем. – Челябинск: ЮУрГУ, ИЕТН, ЕТ-453; 2018, 73. 13 ил., библиогр. список – 43 наим.

Цель выпускной квалификационной работы – создать модель численного расчета времени отклика сегнетоэлектрической жидкокристаллической ячейки в зависимости от концентрации ионов.

В ходе выполнения выпускной квалификационной работы детально рассмотрены эффекты, возникающие в сегнетоэлектрических жидких кристаллах в отсутствии и при наложении электрического поля, также приведены методы численного расчета электрических и оптических свойств жидкокристаллических ячеек. В результате была создана модель численного расчета времени отклика сегнетоэлектрической жидкокристаллической ячейки, учитывающая концентрацию ионов как в объеме, так и адсорбированных на поверхностях ориентирующих слоев.

Данная модель может использоваться для теоретической оценки параметров слоя поверхностно стабилизированного сегнетоэлектрического жидкого кристалла, заключенного между стеклянными подложками.

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ 5
1 ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР 7
1.1 Жидкие кристаллы и их классификация. 7
1.2 Ориентационный порядок в жидких кристаллах. 12
1.2.1 Параметр ориентационного порядка. 12
1.3 Сегнетоэлектрические жидкие кристаллы 17
1.4 Плотность свободной энергии 19
1.4.1 Упругая часть плотности свободной энергии 19
1.4.2 Диэлектрическая часть плотности свободной энергии и диэлектрический вращательный момент СЖК 22
1.4.3 Энергия сцепления жидких кристаллов с подложкой. 23
1.5 Расчет поля директора 26
1.5.1 Метод минимизации методом Эйлера-Лагранжа 26
1.5.1.1 Постановка задачи 26
1.5.1.2 Уравнение Эйлера-Лагранжа для постоянных граничных условий 26
1.5.1.3 Уравнение Эйлера-Лагранжа для переменных граничных условий 27
1.5.2 Динамика переключения СЖК 27
1.5.3 Моделирование конфигурации директора 28
1.5.3.1 Угловое представление 29
1.5.3.2 Векторное представление 30
1.6 Расчет электрического поля 33
1.7 Поляризационные состояния монохроматических волн 36
1.7.1 Линейное поляризационное состояние 36
1.7.2 Круговое поляризационное состояние. 37
1.7.3 Эллиптическое поляризационное состояние. 37

1.7.4 Распространение света в однородной анизотропной оптической среде 39
1.8 Матричный метод Джонса 40
1.8.1 Вектор Джонса 40
1.8.2 Матрица Джонса 41
1.8.3 Метод Джонса для неоднородной двулучепреломляющей пленки 47
1.9 Ионная генерация 50
1.9.1 Генерация ионов в жидкокристаллической ячейке: элементарная модель 53
2 МОДЕЛЬ ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ 57
2.1 Расчет вектора Джонса прошедшего излучения. 57
2.2 Расчет динамики угла поворота директора СЖК. 59
2.3 Расчет электрического поля в слое СЖК 61
2.4 Кинетика адсорбции ионов в жидкокристаллической ячейке с блокирующими электродами 64
ЗАКЛЮЧЕНИЕ 66
БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК 67

ВВЕДЕНИЕ

Целью данной работы является создать модель численного расчета времени отклика сегнетоэлектрической жидкокристаллической ячейки в зависимости от концентрации ионов.

Задачи работы:

1. Предложить метод расчета прохождения поляризованного светового пучка через слой поверхностно стабилизированного сегнетоэлектрического жидкого кристалла, заключенного между стеклянными подложками;
2. Предложить метод расчета динамики переключения поля директора поверхностно стабилизированного сегнетоэлектрического жидкого кристалла в ячейке с блокирующим электродом во внешнем знакопеременном электрическом поле;
3. Предложить метод расчета динамики пространственного распределения концентрации ионов.

В настоящее время хорошо известны сегнетоэлектрические жидкие кристаллы, которые были предсказаны и синтезированы в 1975 г. Р. Мейером. Сегнетоэлектричество в жидких кристаллах существует в смектической фазе С*. Эта фаза, как и другие жидкокристаллические фазы, состоит из органических анизотропных молекул. За счет взаимодействия между такими молекулами возникает дальний ориентационный порядок их длинных молекулярных осей, который приводит к анизотропии различных физических свойств[1].

Сегнетоэлектрическое жидкокристаллическое материаловедение переживает в последние годы настоящий расцвет. Несмотря на сложную структуру молекул, обладающих спиральностью и поперечным дипольным моментом, своеобразная молекулярная инженерия позволяет обеспечить необходимое значение дипольного момента и локализацию так называемого «спирального» центра. В последнее время на этом пути достигнуты большие

успехи: количество новых жидкокристаллических сегнетоэлектриков быстро растет, их спонтанная поляризация приближается по величине к спонтанной поляризации кристаллических сегнетоэлектриков.

Теоретическое описание явлений и фазовых переходов в сегнетоэлектрических жидких кристаллах является задачей достаточно сложной; тем не менее эмпирические закономерности, устанавливаемые физиками и химиками в рядах родственных соединений, позволяют быстро развиваться этому направлению, обещая создание весьма перспективных материалов – элементов оптических компьютеров, эффективно изменяющих свои оптические характеристики под действием малых электрических и магнитных полей. Интерес, проявляемый учеными в направлении теоретического описания и исследования фазовых переходов в жидких кристаллах, подтверждается многочисленными публикациями по всему миру.

Кроме фундаментального значения, физические характеристики смектиков-С* имеют важное практическое значение. Например, они необходимы при расчете работы электрооптических элементов. Однако, при измерении физических свойств жидких кристаллов, они помещаются в тонкие измерительные ячейки толщиной несколько микрометров. Поэтому, можно ожидать, что взаимодействие ЖК с поверхностями ячейки может существенно влиять на измеренные значения различных физических величин. В частности, в работе [2] было проведено теоретическое исследование такого влияния.

1 ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР

1.1 Жидкие кристаллы и их классификация.

Жидкие кристаллы являются мезофазным состоянием между кристаллическими твердыми телами и изотропными жидкостями. Их структурными элементами являются удлиненные стержневидные (каламитики) или дисковидные (дискотики) органические молекулы. Размер молекул обычно равен нескольким нанометрам. Отношение между длиной и диаметром стержневидных молекул ≥ 5. Поскольку молекулы не имеют сферической формы, они могут иметь, помимо позиционного порядка, еще и ориентационный [3].

Для жидкокристаллической молекулы необходимо, чтобы она имела жесткое ядро и гибкий хвост. В том случае, если молекула является полностью гибкой, она не будет иметь ориентационного порядка. Если же молекула полностью жесткая, она будет переходить из изотропной жидкой фазы в кристаллическое твердое тело при понижении температуры и достижения температуры фазового перехода. Жесткая часть отвечает и за ориентационный, и за позиционный порядок. При балансе жесткой и гибкой частей, молекула может переходить в жидкокристаллическое состояние.

Жидкокристаллическое состояние имеет различные фазы. При высоких температурах, молекулы находятся в изотропном жидком состоянии, где они не имеют ни позиционного, ни ориентационного порядка. Молекулы не испытывают проблем при движении и материал может течь как вода. Поступательная вязкость жидких кристаллов сравнима с вязкостью воды. Длинная и короткая молекулярные оси могут быть направлены в любом направлении[3].

При уменьшении температуры материал переходит в нематическую фазу (Рисунок 1.1.), которая является наиболее общей и простой жидкокристаллической фазой. При этом молекулы имеют ориентационный порядок, но все еще не имеют позиционного порядка. Молекулы все еще могут диффундировать в объеме, и поступательная вязкость не сильно отличается от

поступательной вязкости изотропной жидкости. Длинная ось молекулы имеет предпочтительное направление. Хотя молекулы все также вертятся из-за теплового движения, среднее по времени направление длинной молекулярной оси хорошо определено и одинаково для всех молекул в макроскопическом масштабе. Среднее направление длинной молекулярной оси записывается как $\vec{n}$ и представляет собой единичный вектор, который называется директором жидкого кристалла. Короткие молекулярные оси не имеют ориентационного порядка в одноосном нематическом жидком кристалле.

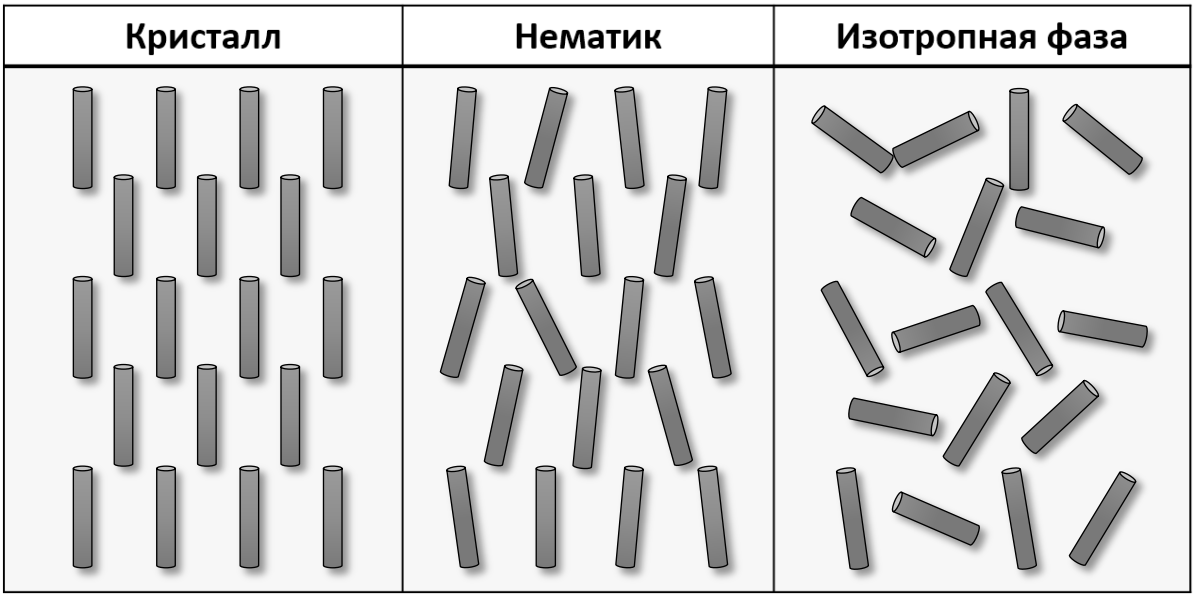
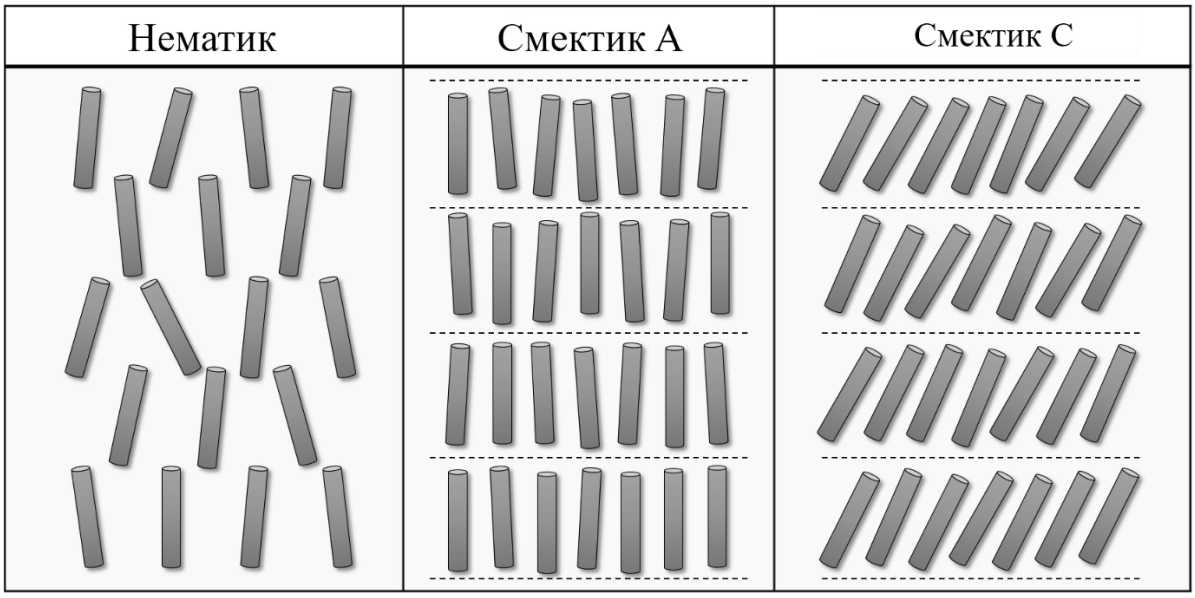


Рисунок 1.1. Схематическая диаграмма, показывающая молекулярный порядок кристаллической, нематической и изотропной фазы.

Если температура продолжает понижаться, материал переходит в фазу смектик-А. Эта фаза характеризуется тем, что помимо ориентационного порядка, молекулы также имеют частичный позиционный порядок, т.е. молекулы выстраиваются в слоистую структуру. Директор жидкого кристалла перпендикулярен слоям. Смектик-А представляет собой одноразмерный кристалл, молекулы которого имеют ориентационный порядок в направлении нормали к слою. Представленная диаграмма (Рисунок1.2), является схематической. В

действительности границы между соседними слоями не так явны, как показано на рисунке. Молекулярная плотность имеет волнистость с длиной волны около одной длины молекулы. Внутри слоя, это двухразмерная жидкость в которой не существует позиционного порядка и молекулы могут двигаться. Для материалов в фазе смектик-А, поступательная вязкость значительно больше, и поэтому он начинает вести себя как жир. Когда температура падает еще ниже, материал



переходит в фазу смектик-С, в которой жидкокристаллический директор больше не перпендикулярен слою, а направлен под углом к нормали.

Рисунок 1.2. Схематическая диаграмма, показывающая молекулярный порядок нематической фазы, смектика-А и смектика-С.

При более низких температурах, материал переходит в твердотельную фазу, в которой существуют и позиционный, и ориентационный порядок. Поступательная вязкость становится бесконечной и молекулы (большинство) больше не диффундируют в объеме материала.

Жидкие кристаллы получили «кристаллическую» часть своего названия, потому что они имеют оптическое двулучепреломление аналогично кристаллическим твердым телам. А «жидкостную» часть своего названия они получили, потому что могут течь, как обычные жидкости. Молекулы жидких

кристаллов вытянуты и имеют различные молекулярные поляризуемости вдоль своих длинных и коротких осей. Как только длинные оси молекул ориентируются вдоль общего направления, коэффициенты преломления вдоль и перпендикулярно директору становятся различными. Следует отметить, что не все стержневидные молекулы могут переходить в жидкокристаллическое состояние.

Обсуждаемые выше жидкие кристаллы называются термотропными жидкими кристаллами и переходят из одной фазы в другую при изменении температуры. Существует другой тип жидких кристаллов, а именно лиотропные жидкие кристаллы (лиотропики), который существуют за счет взаимодействия структурных молекул с молекулами растворителя. Фазовые переходы из одной фазы в другую обусловлены концентрацией растворителя. Лиотропные жидкие кристаллы обычно состоят из амфифильных молекул, которые имеют гидрофобную группу на одном конце и гигрофильную группу на другом, смешанные с водой в качестве растворителя. Обычно лиотропная жидкокристаллическая фаза является мицельной и ламинарной. Лиотропные жидкие кристаллы важны в биологии.

Жидкие кристаллы имеют историю более, чем в 100 лет. Считается, что обнаружил жидкокристаллическое состояние Фридрих Рейнитзер, австрийский ботаник. Жидкокристаллическая фаза исследовалась им в 1888 году. С тех пор жидкие кристаллы прошли долгий путь и стали важным объектом междисциплинарных наук. С точки зрения науки, жидкие кристаллы являются важным объектом исследования, за счет богатства их структур и переходов. Технологически, они получили большой успех в дисплеях и фотонных приложениях.

1.2 Ориентационный порядок в жидких кристаллах.

Ориентационный порядок – это наиболее важная особенность жидкокристаллической фазы. Для стержневидных жидкокристаллических молекул их длинные молекулярные оси параллельны друг другу. Именно из-за наличия ориентационного порядка жидкие кристаллы обладают анизотропией физических свойств[4].

Для описания ориентации молекулы к ней привязывают три оси: одну вдоль длинной молекулярной оси и две другие перпендикулярные друг другу и длинной молекулярной оси. На самом деле молекула не является цилиндрической, однако благодаря быстрому (порядка 10^{-9} с.) вращению вокруг длинной молекулярной оси ее можно рассматривать как цилиндр. В этом случае жидкий кристалл рассматривается как одноосный, так как не существует предпочтительного выбора коротких осей. Если существует помеха для вращения, то молекула жидкого кристалла является двуосной. Таким образом вращательная симметрия может быть нарушена ввиду некоторых ограничений[3].

1.2.1 Параметр ориентационного порядка.

В случае одноосных жидкокристаллических молекул рассматривают ориентацию только длинной оси. Для описания ориентации вводят вектор $\vec{a}$, который направлен вдоль длинной молекулярной оси. В нематической жидкокристаллической фазе среднее направление вектора $\vec{a}$ в целом для всех молекул объема называется жидкокристаллическим директором и обозначается единичным вектором $\vec{n}$. В пространстве направление вектора $\vec{a}$ определяется введением полярного угла θ и азимутального угла φ, при этом ось z направлена вдоль вектора $\vec{n}$, как показано на рисунке 1.3. В общем случае ориентационный порядок вектора $\vec{a}$ является функцией ориентационного распределения $f(\theta, \varphi)$. $f(\theta, \varphi)d\Omega, (d\Omega = \sin\theta\, d\theta d\varphi)$ вероятность того, что вектор $\vec{a}$ ориентирован вдоль

направления угла θ и φ в пределах телесного угла $d\Omega$. В изотропной фазе отсутствует ориентационный порядок, поэтому вектор $\vec{a}$ имеет хаотичное направление, а функция ориентационного распределения во всех направлениях одинаковая, $f(\theta, \varphi) = const$. Для одноосных жидких кристаллов не существует преимущественной ориентации в азимутальном направлении, поэтому функция ориентационного распределения зависит только от полярного угла θ, $f = f(\theta)$.

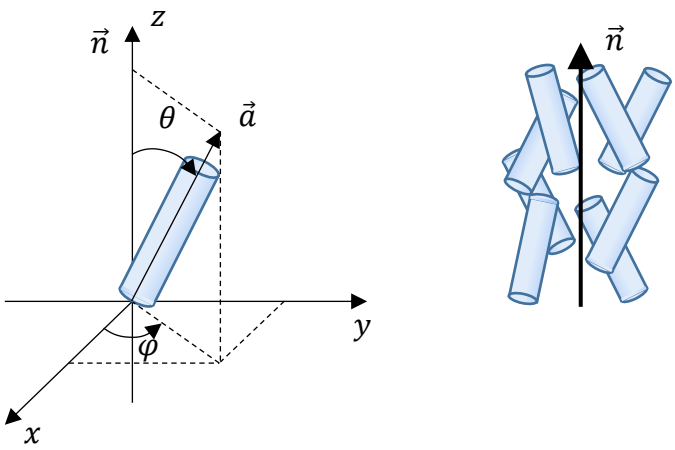


Рисунок 1.1. Схематическая диаграмма, показывающая ориентацию стержневидных молекул[3].

Стержневидные молекулы жидких кристаллов могут иметь постоянный дипольный момент. В случае, когда дипольный момент перпендикулярен вектору $\vec{a}$, то диполь может с одинаковой вероятностью быть ориентирован в любом направлении плоскости, перпендикулярной длинной молекулярной оси. Это имеет место быть из-за быстрого вращения вокруг вектора $\vec{a}$ одноосных жидких кристаллов. В этом случае дипольным моментам молекул не удаётся создать спонтанную поляризацию. Если постоянный дипольный момент ориентирован параллельно вектору $\vec{a}$, то вращение вокруг неё замедляется в несколько тысяч раз (порядка 10^{-5} с), поэтому сказанное выше не выполняется. Для того, чтобы увидеть ориентацию диполей, рассматриваем взаимодействие между двумя диполями[5]. Если один диполь находится под другим, и они параллельны друг другу, энергия их взаимодействия невелика и, следовательно, параллельная

ориентация является предпочтительной для диполей. Когда диполи расположены бок о бок друг с другом, то наименьшая энергия их взаимодействия достигается тогда, когда они коллинеарные, но противоположно направлены. Как известно, молекулы не проникают друг в друга. Для молекул, расположенных друг над другом, расстояние между ними больше, чем, когда они расположены бок о бок. Энергия взаимодействия двух диполей обратно пропорциональна кубической степени расстояния между ними. Поэтому обратное направление диполей является доминирующим для стержневидных молекулах. В объеме образца существует равное количество диполей сонаправленных и противоположно направленных директору. Постоянный диполь, расположенный параллельно вектору $\vec{a}$, не создает спонтанной поляризации. Исходя из этого вывода можно утверждать, что даже если молекулы жидкого кристалла обладают постоянным дипольным моментом вдоль длинной молекулярной оси, их можно рассматривать как цилиндры, которые как сверху, так и снизу одинаковы. Отсюда можно принять, что направления $\vec{n}$ и $-\vec{n}$ равнозначны.

В целях количественной оценки ориентационного порядка обязательным условием является то, чтобы параметр порядка был известен. Параметр порядка можно найти следующим способом: он равен нулю в неупорядоченной фазе, и не равен нулю в низкотемпературной упорядоченной фазе. Можно считать среднее значение проекции вектора $\vec{a}$ на директор $\vec{n}$, то есть

$$\langle \cos\theta \rangle = \int_0^{\pi} \cos\theta f(\theta) \sin\theta \, d\theta \Big/ \int_0^{\pi} f(\theta) \sin\theta \, d\theta \qquad (1.1)$$

где $\langle\rangle$ указывает на среднее значение (пространственные и временные средние равны) и $\cos\theta$ является полиномом Лежандра первого порядка. В изотропной фазе молекулы ориентированы случайным образом и поэтому $\langle \cos\theta \rangle = 0$. В нематической фазе вероятности того, что молекула ориентирована под полярными углами θ и $\pi - \theta$ равны, то есть, $f(\theta) = f(\pi - \theta)$. Этот вывод можно сделать на основании того, что нематическая фаза все еще

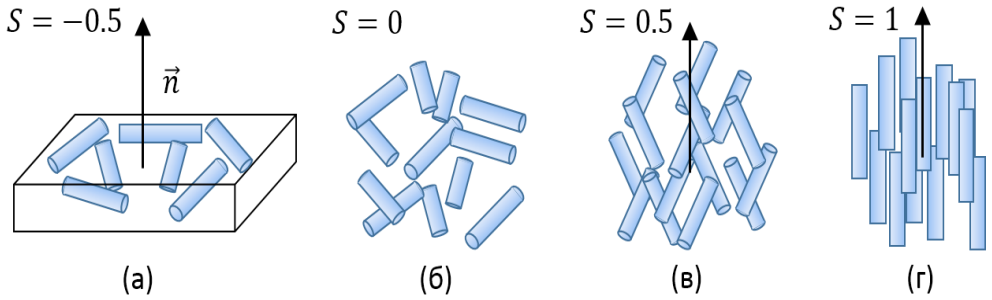
остается низко упорядоченной. Следовательно, $\langle \cos\theta \rangle = 0$, отсюда возникает следующее утверждение, что $\langle \cos\theta \rangle$ не представляет никакой практической ценности при определении ориентационного порядка. Поэтому далее рассмотрим среднее значение полинома Лежандра второго порядка для параметра ориентационного порядка [6]:

$$S = \langle P_2 \langle \cos\theta \rangle \rangle = \langle \frac{1}{2}(3\cos^2\theta - 1) \rangle = \int_0^\pi \frac{1}{2}(3\cos^2\theta - 1) f(\theta) \sin\theta \, d\theta / \int_0^\pi f(\theta) \sin\theta \, d\theta \quad (1.2)$$

В изотропной фазе $f(\theta) = c$, функция ориентационного распределения постоянна, и

$$\int_0^\pi \frac{1}{2}(3\cos^2\theta - 1) f(\theta) \sin\theta \, d\theta = \int_0^\pi \frac{1}{2}(3\cos^2\theta - 1) c \sin\theta \, d\theta = 0 \quad (1.3)$$

В нематической фазе $f(\theta)$ зависит от угла θ. В идеально ориентированной нематической фазе, показанной на рисунке, $f(\theta) = \delta(\theta)$, где $\sin\theta\,\delta\theta = \infty$, при



$\theta = 0$ и $\sin\theta\,\delta\theta = 0$, при $\theta \neq 0$. Тогда $\int_0^\pi \delta(\theta)\sin\theta\,d\theta = 1$, и параметр ориентационного порядка $S = \frac{1}{2}(3\cos^2\theta - 1) = 1$. Следует отметить, что ориентационный порядок может быть как положительным, так и отрицательным. Два ориентационных параметра, равных по абсолютной величине, но различающиеся знаком, соответствуют различным состояниям. Если векторы $\vec{a}$ молекул компланарны и ориентированы случайным образом, как показано на рисунке, функция распределения $f(\theta) = \delta(\theta - \pi/2)$, где $\delta(\theta - \pi/2) = \infty$, когда $\theta = \pi/2, \delta(\theta - \pi/2) = 0$ при $\theta \neq \pi/2$, и $\int_0^\pi \delta(\theta - \pi/2)\sin\theta\,d\theta = 1$, тогда ориентационный порядок определяется $S = \frac{1}{2}(3\cos^2(\pi/2) - 1) = -0{,}5$. В этом случае среднее направление молекул не определено.

Рисунок 1.2. Схематическая диаграмма, показывающая состояния с различным ориентационным порядком[3].

1.3 Сегнетоэлектрические жидкие кристаллы

Мы знаем, что нематические жидкие кристаллы не имеют спонтанную поляризацию, потому что они имеют зеркальную симметрию. Сейчас мы приступим к рассмотрению возможности спонтанной поляризации в других жидкокристаллических фазах. Для стержневидных молекул в любой жидкокристаллической фазе невозможно иметь спонтанную поляризацию, потому что что направления $\vec{n}$ и $-\vec{n}$ равнозначны.

Холестерики хиральные молекулы и поэтому не имеют зеркальной симметрии. В нематической фазе холестерики инвариантны при двукратном повороте вокруг директора, что исключает возможность спонтанной поляризации перпендикулярной директору. Они также инварианты при двукратном повороте вокруг оси, которая перпендикулярна плоскости спиральной оси, что исключает возможность спонтанной поляризации параллельной директору. Ввиду вышеизложенного можно сделать вывод, что у холестериков отсутствует спонтанная поляризация.

Жидкий кристалл смектик-А, кроме того, что имеет ориентационный порядок как нематики, имеет частичный позиционный порядок. Они имеют слоистую структуру. Директор жидкого кристалла в этой фазе перпендикулярен слоям смектика. И в случае хиральных, и в случае не хиральных молекул, поворот вокруг директора инвариантен. Они также инварианты при двукратном повороте вокруг любой оси перпендикулярной директору. Поэтому не существует спонтанной поляризации в направлении перпендикулярном директору смектика-А. Следовательно, в смектиках-А не существует сегнетоэлектричества, даже когда структурные молекулы являются хиральными[7].

Жидкие кристаллы смектики-С подобны смектикам-А, но у них директор не перпендикулярен слоям, а направлен под углом к нормали. Двукратный поворот вокруг любой оси также инвариантен. Это исключает возможность спонтанной поляризации в жидких кристаллах смектик-С.

Согласно Мейеру[8], зеркальная симметрия жидких кристаллов смектика С может быть разрушена, если структурные молекулы являются хиральными, и таким образом становится возможным появление спонтанной поляризации. Эта фаза называется хиральным смектиком С или фаза смектик-С*. Внутри слоя, его структура такая же, как и в смектике-С. Однако директор жидкого кристалла больше не ориентирован одинаково в пространстве, а закручивается от слоя к слою. Таким образом смектики-С* являются сегнетоэлектрическими жидкими кристаллами, так как у них присутствует спонтанная поляризация вдоль оси вращения.

1.4 Плотность свободной энергии

В общем виде плотность свободной энергии записывается как:

$$f = f_t + f_{elas} + f_{electric} + f_s \tag{1.4}$$

f_t – термодинамическая часть;

f_{elas} – упругая часть;

$f_{electric}$ – диэлектрическая часть;

f_s – часть, описывающая сцепление с подложкой.

В реальности, конфигурация жидкокристаллического директора меняется в пространстве из-за влияния внешних сил. Это пространственное изменения ориентации директора называется деформацией директора, на этот эффект затрачивается дополнительная энергия. Когда деформация происходит на расстояниях, гораздо больших, чем размер молекулы, параметр ориентационного порядка остается постоянным, и изменение может быть описано с помощью теории сплошных сред по аналогии с классической теории упругости твердых тел.

1.4.1 Упругая часть плотности свободной энергии

Возможные деформации жидкокристаллического директора показаны на рисунке 1.5. Упругую часть свободной энергии в общем виде можно записать в виде следующего выражения[9]:

$$\begin{aligned} f_{elas} = \frac{1}{2}K_{11}(\nabla \cdot \vec{n})^2 + \frac{1}{2}K_{22}(\vec{n} \cdot \nabla \times \vec{n} + q_0)^2 \\ + \frac{1}{2}K_{33}(\vec{n} \times \nabla \times \vec{n} - b)^2 + K_4(\cos(\theta) - \vec{n} \cdot k) \end{aligned} \tag{1.5}$$

где K_{11} – коэффициент упругого растяжения;

K_{22} – коэффициент упругого кручения;

K_{33} – коэффициент упругого изгиба;

K_4 – описывает сжимаемость смектических слоёв;

q_0 и b – соответственно описываю спонтанное кручение и изгиб директора $\vec{n}$.

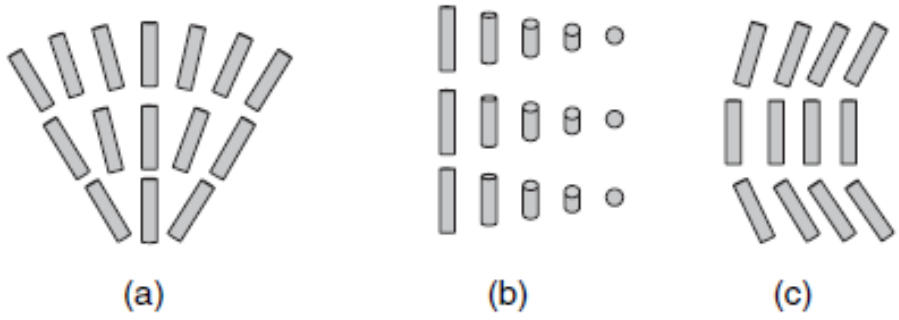


Рисунок 1.5. Схематическая диаграмма, показывающая три типа возможных деформаций директора: a) растяжение; b) кручение; c) изгиб.

Данную энергию упругости называют энергией Озеена-Франка, а K_{11}, K_{22} и K_{33} называют постоянными упругости Франка. Коэффициент K_4 имеет место при рассмотрении энергии, которую затрачивают молекулы, чтобы без проникновения молекул одного слоя в другой изменить толщину слоя.

Смектические жидкие кристаллы кроме того, что обладают как нематики и холестерики ориентационным порядком, также обладают частичным позиционным порядком. Рассмотрим более простой случай для смектиков, а именно смектик-А. Упругая энергия деформации жидкокристаллического директора в смектике-А такая же как в нематическом жидком кристалле. Кроме этого, сжатие смектического слоя также требует затрат энергии, что выражается следующим уравнением[3]:

$$f_{layer} = \frac{1}{2}B\left(\frac{d - d_0}{d_0}\right)^2 \tag{1.6}$$

Где B является постоянной упругости сжатия слоя и аналогична модулю Юнга в механике, d_0 и d – это равновесная толщина слоя и действительная толщина сематического слоя, соответственно. Типичные значения B составляют порядка 10^6-10^7 Дж/м^3, что является на 3-4 порядка меньше, чем в твердых телах.

В слегка деформированном смектике-А, рассматривается замкнутый контур, как показано на рисунке 1.6. Полное количество слоев, пройденных контуром равно нулю, что может быть выражено математически как $\oint \vec{n} \cdot dl = 0$. Используя теорему Стокса, мы получим следующее: $\int \nabla \times \vec{n} d\vec{s} = \oint \vec{n} \cdot dl = 0$. Поэтому можно сделать вывод, что ротор директора в смектиках-А равен нулю:

$$\nabla \times \vec{n} = 0 \tag{1.7}$$

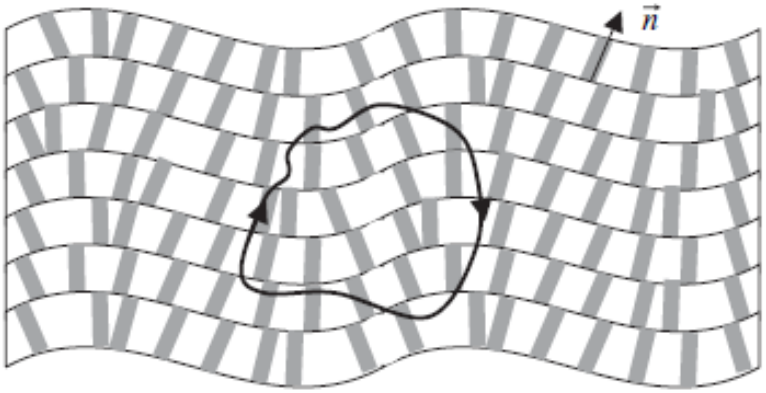


Рисунок 1.6. Схематическая диаграмма, показывающая деформацию директора и смектических слоев в смектике-А.

Отсюда следует, что $\vec{n} \cdot \nabla \times \vec{n} = 0$ и $\vec{n} \times \nabla \times \vec{n} = 0$. Таким образом, для смектика-А можно сделать вывод, что кручение и изгиб директора не допускаются, так как они будут изменять толщину слоя, а это требует больших затрат энергии. Следовательно, упругая часть свободной энергии в смектике-А выглядит следующим образом:

$$f_{elas} = \frac{1}{2}\left(K_{11}(\nabla \cdot \vec{n})^2 + B\left(\frac{d - d_0}{d_0}\right)^2\right) \tag{1.8}$$

Предполагается, что смектические слои в смектике-А не сжимаемы, поэтому вторым слагаемым можно пренебречь. Ввиду этого перепишем уравнение в следующем виде:

$$f_{elas} = \frac{1}{2}K_{11}(\nabla \cdot \vec{n})^2 \tag{1.9}$$

Для смектиков-С упругая часть плотности свободной энергии аналогична свободной энергии для нематиков и имеет следующий вид:

$$f_{elas} = \frac{1}{2}[K_{11}(\nabla \cdot \vec{n})^2 + K_{22}(\vec{n} \cdot \nabla \times \vec{n} + q_0)^2 + K_{33}(\vec{n} \times \nabla \times \vec{n} - b)^2] \quad (1.10)$$

1.4.2 Диэлектрическая часть плотности свободной энергии и диэлектрический вращательный момент СЖК

Диэлектрическая часть плотности свободной энергии является положительной при постоянном заряде на границе слоя СЖК. Она представлена как:

$$f_{electric} = \frac{D_i E}{2} \quad (1.11)$$

где D_i - индуцированная составляющая диэлектрического смещения, $D = D_0 + D_i \equiv P_s + \varepsilon E$, здесь ε - тензор диэлектрической проницаемости, выражающий диэлектрическую анизотропию: $\Delta\varepsilon = \varepsilon_{||} - \varepsilon_{\perp}$, $D_0 = P_s$ – спонтанная поляризация. Таким образом, электрическая часть свободной энергии, при $E = (0,0,E_z)$ и $D_i = (D_{xi}, D_{yi}, D_{zi})$ находится как:

$$f_{electric} = \frac{D_{zi}E_z}{2} = \frac{(D_0 - P_{sz})^2}{2\varepsilon_{\perp}(1 + \frac{\Delta\varepsilon}{\varepsilon_{\perp}} n_z^2)} \quad (1.12)$$

Вследствие того, что в смектике-С* существует хиральность $P_{sz} = P_0[(k \cdot n)(k \times n)]_0$, где P_0 – коэффициент, который выражает взаимное влияние спонтанной поляризации и угла наклона. $P_0 = \frac{P_s}{((k \cdot n_0)(k \times n_0)} = \frac{P_s}{\cos\theta \sin\theta}$.

При подстановке последнего в уравнение (1.12) и его дифференцировании получены три компоненты действующего на директор электрического вращательного момента:

$$f_{electric} = \frac{1}{2}\varepsilon_0 \Delta\varepsilon \vec{E}^2 - P_s \vec{E}\cos(\varphi) \quad (1.13)$$

1.4.3 Энергия сцепления жидких кристаллов с подложкой.

Во многих жидкокристаллических устройствах, жидкие кристаллы находятся между двумя подложками, покрытых ориентирующими слоями. В отсутствие внешних полей, ориентация директора жидкого кристалла в ячейке определяется условиями сцепления с ориентирующим слоем[10].

Рассмотрим границу раздела между жидким кристаллом (z>0) и ориентирующим слоем (z<0) как показано на рисунке 1.7. Некоторую жидкокристаллическую молекулу на границе раздела окружают другие молекулы жидкого кристалла, а также молекулы ориентирующего слоя. Ориентация молекулы на границе раздела фаз отлична от ориентации молекулы в объеме, где все окружающие молекулы являются жидкокристаллическими. На границе раздела, ориентационный и позиционный порядки могут отличаться от объемных. Жидкий кристалл имеет анизотропные физические свойства. Если ориентирующий слой тоже имеет анизотропные свойства, то существует преимущественное направление для жидкокристаллического директора на границе раздела, называемое легкой осью. Легкая ось показана на рисунке 1.7 и обозначена как $\hat{e}$. Энергия взаимодействия минимальна, когда директор жидкого кристалла направлен вдоль легкой оси. Ось z перпендикулярна поверхности раздела и указывает от ориентирующего слоя. Полярный и азимутальный углы легкой оси обозначаются θ_0 и φ_0 соответственно. Если $\theta_0 = 0$, то сцепление называется гомеотропным. Если $\theta_0 = 90^o$ и φ_0 точно определен, то сцепление называется однородным (гомогенным). Если $\theta_0 = 90^o$ и не существует предпочтительного азимутального угла, то сцепление называется планарным. Если $0 < \theta_0 < 90^o$, то говорят, что сцепление наклонное.

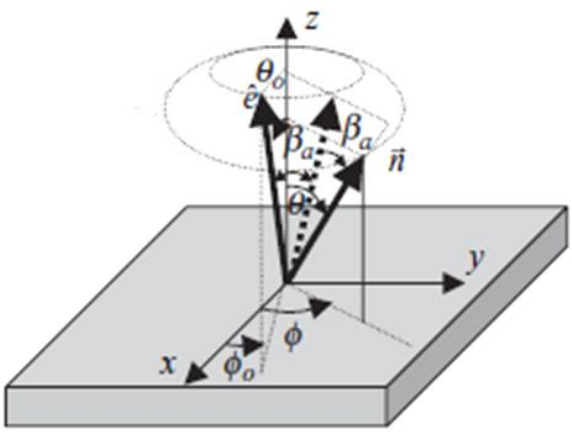


Рисунок 1.7. Схематическая диаграмма, показывающая геометрию при расчете энергии сцепления.

Когда жидкокристаллический директор $\vec{n}$ выравнен вдоль направления, соответствующего полярному и азимутальному углам, анизотропная часть поверхностной энергии жидкого кристалла является функцией $f_s = f_s(\theta, \varphi)$, называемой функцией энергии сцепления. Когда $\theta = \theta_0$ и $\varphi = \varphi_0$, f_s равна минимальному значению (нулю), и поэтому $\partial f_s/\partial\theta|_{\theta=\theta_0} = 0$ и $\partial f_s/\partial\varphi|_{\varphi=\varphi_0} = 0$. Так как материалы ориентирующего слоя и жидкого кристалла отличны, то зеркальной симметрии не существует. Если $\theta_0 \neq 0$, энергия сцепления не имеет азимутальной вращательной симметрии вокруг направления, соответствующего легкой оси. Поэтому энергии сцепления различны для азимутального и полярного отклонений. При малых отклонениях, энергия сцепления может быть выражена как [11]:

$$f_s = \frac{1}{2} W_p \sin^2\beta_p + \frac{1}{2} W_a \sin^2\beta_a \tag{1.14}$$

где β_p и β_a – это углы между директором и легкой осью, когда директор указывает в полярном и азимутальном направлении от легкой оси, соответственно; W_p и W_a – это полярная и азимутальная сила сцепления. Для малых $\theta - \theta_0$ и $\varphi - \varphi_0$, мы можем аппроксимировать тригонометрические функции как $\sin^2\beta_p = \sin^2(\theta - \theta_0)$ и $\sin^2\beta_a = \sin^2(\varphi - \varphi_0)\sin^2\theta_0$. Учитывая это, функция энергии сцепления примет следующий вид:

$$f_s = \frac{1}{2} W_p \sin^2(\theta - \theta_0) + \frac{1}{2} W_a \sin^2(\varphi - \varphi_0) \sin^2\theta_0 \quad (1.15)$$

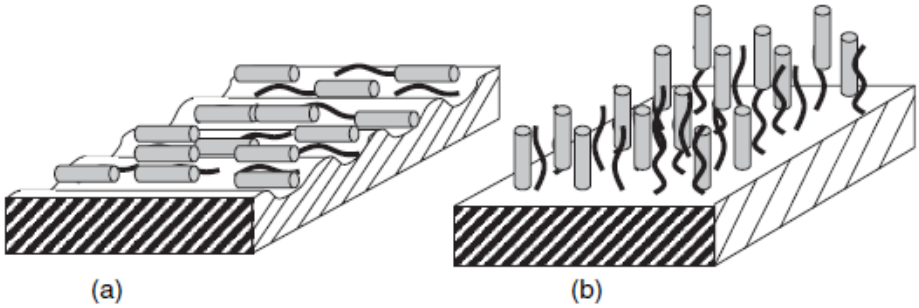


Рисунок 1.8. Схематическая диаграмма, показывающая различную ориентацию директора ЖК на границе фаз: a) параллельно подложке; b) перпендикулярно подложке.

1.5 Расчет поля директора

1.5.1 Метод минимизации методом Эйлера-Лагранжа

1.5.1.1 Постановка задачи

Пусть функция $F = F(x, y, y')$ непрерывно дифференцируема по всем аргументам трижды. Найти функцию, которая соответствует слабому экстремуму функционала:

$$V[y] \int_{x_0}^{x_1} F(x, y, y')\, dx \tag{1.16}$$

И удовлетворяет начальным условиям:

$$y(x_0) = y_0 \qquad y(x_1) = y_1 \tag{1.17}$$

Иначе говоря, одна из самых простых задач вариационного исчисления заключается в том, чтобы найти слабый экстремум функционала вида (1.16) на множестве гладких кривых, которые соединяют две данные точки $A(x_0, y_0)$ и $B(x_1, y_1)$.

1.5.1.2 Уравнение Эйлера-Лагранжа для постоянных граничных условий

Для того, чтобы представленный выше функционал, определенный на множестве функций $y = y(x)$, который непрерывно дифференцируем и удовлетворяет (1.17), достигал на области определения экстремум, необходимо и достаточно, чтобы этот функционал удовлетворял уравнению Эйлера-Лагранжа[12]:

$$\frac{\partial F}{\partial y} - \frac{d}{dx}\frac{\partial F}{\partial y'} = 0 \tag{1.18}$$

Представленное выше выражение является дифференциальным уравнением второго порядка, поэтому необходимо, чтобы общее решение представляло собой

функцию от двух произвольных констант. Конкретные значения этих констант находится из граничных условий.

Таким образом поставленную задачу можно представить в виде следующей системы:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial F}{\partial y} - \dfrac{d}{dx}\dfrac{\partial F}{\partial y'} = 0 \\ y(x_0) = y_0 \qquad y(x_1) = y_1 \end{cases} \tag{1.19}$$

Известны случаи, когда решения не существует. А если решение существует, то это решение может являться не единственным.

1.5.1.3 Уравнение Эйлера-Лагранжа для переменных граничных условий

В случае, если граничные условия не имеют фиксированного значения, то к функционалу добавляются слагаемые, описывающие поведение системы на границе:

$$F = \int_0^h F(x, y, y')dx + F_{\text{гран}}[y(x = x_0)] + F_{\text{гран}}[y(x = x_1)] \tag{1.19}$$

Поэтому наряду с решением уравнения (1.18) необходимо решать два следующих уравнения [3]:

$$\left(-\frac{\partial F}{\partial y'} + \frac{\partial F_{\text{гран}}}{\partial y}\right)\bigg|_{x=x_0} = 0 \tag{1.20}$$

$$\left(\frac{\partial F}{\partial y'} + \frac{\partial F_{\text{гран}}}{\partial y}\right)\bigg|_{x=x_1} = 0 \tag{1.21}$$

1.5.2 Динамика переключения СЖК

Запишем свободную энергию для сегнетоэлектрических жидких кристаллов через угол наклона θ:

$$f = \frac{1}{2}K_{11}\cos^2\theta\theta'^2 + \frac{1}{2}K_{22}(q_0 - \cos^2\theta\varphi')^2 + \frac{1}{2}K_{33}\sin^2\theta(\theta' + \cos^2\theta\varphi'^2) - \frac{1}{2}\varepsilon_0\Delta\varepsilon E^2\sin^2\theta + P_s E\cos\varphi \quad (1.22)$$

где σ является плотностью поверхностных зарядов, а $\theta' = \partial\theta/\partial z$. Заметим, что здесь θ — это угол между директором жидкого кристалла и осью z. Вращение директора жидкого кристалла подчиняется законам динамики: упругий и электрический моменты сбалансированы моментом вращательной вязкости. Математически можно записать как [13]:

$$\gamma_r\frac{\partial\theta}{\partial t} = -\frac{\delta f}{\delta\theta} \quad (1.23)$$

Используя выражение для свободной энергии, представленное выше, после дифференцирования мы получим:

$$\gamma_r\frac{\partial\theta}{\partial t} = (K_{11}\cos^2\theta + K_{33}\sin^2\theta)\theta'' + [(K_{33} - K_{11})\theta'^2 + (2K_{22}\cos^2\theta - K_{33}\cos 2\theta)\varphi'^2 + \varepsilon_0\Delta\varepsilon E^2 - 2K_{22}q_0\varphi']\sin\theta\cos\theta + P_s E\sin\theta \quad (1.24)$$

1.5.3 Моделирование конфигурации директора

Во многих жидкокристаллических устройствах конфигурация жидкокристаллического директора не может быть вычислена аналитически и должны применяться количественные методы расчёта. Когда жидкий кристалл находится в равновесном состоянии, полная свободная энергия минимальна. Если система находится в неравновесном состоянии, она будет стремиться перейти в состоянии с наименьшей свободной энергией. По мере того, как изменяется ориентация жидкокристаллического директора, свободная энергия падает. Изменение ориентации директора останавливается, когда достигнут минимум свободной энергии. Уравнение динамики, которое называется методом релаксации, для изменения директора жидкого кристалла может быть использовано для численного вычисления равновесной ориентации директора.

1.5.3.1 Угловое представление

Это наиболее простой способ для описания жидкокристаллического директора $\vec{n}$ в терминах полярного θ и азимутального φ углов. Углы могут изменяться в одном, двух или трех измерениях. Жидкокристаллический директор определен через угол наклона θ: $\vec{n} = \cos\theta(z)\hat{x} + \sin\theta(z)\hat{z}$, где ось z направлена по нормали к ячейке. Электрическое поле приложено к ячейке в нормальном направлении. В это случае мы имеем плотность свободной энергии для смектиков-С (1.22).

В равновесном состоянии полная свободная энергия минимальна, и конфигурация директора $\theta_{eq}(z)$ удовлетворяет уравнению Эйлера-Лагранжа:

$$\begin{aligned} -\frac{\delta f}{\delta\theta}|_{eq} = -\left[\frac{\partial f}{\partial\theta} - \frac{d}{dz}\left(\frac{\partial f}{\partial\theta'}\right)\right]|_{eq} \\ = \left(K_{11}\cos^2\theta_{eq} + K_{33}\sin^2\theta_{eq}\right){\theta_{eq}}'' + [(K_{33} - K_{11}){\theta_{eq}}'^2 \\ + (2K_{22}\cos^2\theta_{eq} - K_{33}\cos 2\,\theta_{eq})\varphi'^2 + \varepsilon_0\Delta\varepsilon E^2 \\ - 2K_{22}q_0\varphi']\sin\theta_{eq}\cos\theta + P_s E\sin\varphi_{eq} \end{aligned} \quad (1.25)$$

$$u(\theta_{eq})\theta''_{eq} + w(\theta_{eq}, \theta'_{eq}) = 0 \quad (1.26)$$

Если система находится в неравновесном состоянии, она будет стремиться перейти в равновесное состояние. Уравнение динамики, описывающее релаксацию системы:

$$\gamma_r\frac{\partial\theta}{\partial t} = -\frac{\delta f}{\delta\theta} = -\frac{\partial f}{\partial\theta} + \frac{d}{dz}\left(\frac{\partial f}{\partial\theta'}\right) = u(\theta)\theta'' + w(\theta,\theta') \quad (1.27)$$

Используя это уравнение, можно вычислить угол в интервале времени $\mathrm{t} + \Delta t$, зная значение угла в момент времени t [14]:

$$\theta^{\,t+\Delta t} = \theta^t + \frac{\Delta t}{\gamma_r}[u(\theta^t)\theta''^t + w(\theta,\theta'^t) \quad (1.28)$$

Когда система достигает состояния равновесия, конфигурация директора больше не изменяется и $\frac{\partial\theta}{\partial t} = -\frac{\partial f}{\partial\theta} = 0$. Уравнение (1.28) может не отражать реальный динамический процесс, потому что гидродинамический эффект не рассматривается, однако рассмотренная конечная конфигурация директора является действительной для равновесного состояния.

Представленный метод моделирования допустим, когда изменение угла внутри ячейки не превышает 90°. В противном случае использовать его следует осторожно, например, когда жидкокристаллические директоры в двух соседних узлах решетки противоположно направленны. Численные вычисления могут дать высокие значения упругой энергии, в то время как реальная упругая энергия равняется нулю, потому что $\vec{n}$ и $-\vec{n}$ равнозначны.

1.5.3.2 Векторное представление

Директор жидкого кристалла $\vec{n}$ также можно записать через три его компоненты (n_x, n_y, n_z). Плотность свободной энергии (при постоянном напряжении) выражается через компоненты директора и их пространственные производные. Для смектиков плотность свободной энергии можно записать в следующем виде:

$$f = \frac{1}{2}K_{11}(\nabla\cdot\vec{n})^2 + \frac{1}{2}K_{22}(\vec{n}\cdot\nabla\times\vec{n})^2 + \frac{1}{2}K_{33}(\vec{n}\times\nabla\times\vec{n})^2 + q_0K_{22}\vec{n}\cdot\nabla\times\vec{n} - \frac{1}{2}\vec{D}\cdot\vec{E} \quad (1.29)$$

Электрическую энергию можно переписать как:

$$-\frac{1}{2}\vec{D}\cdot\vec{E} = -\frac{1}{2}\vec{E}\cdot\left(\vec{\varepsilon}\cdot\vec{E}\right) = -\frac{1}{2}\vec{E}\cdot\left[\varepsilon_0\varepsilon_\perp\vec{E} + \varepsilon_0\Delta\varepsilon\left(\vec{E}\cdot\vec{n}\right)\vec{n}\right] = -\frac{1}{2}\varepsilon_0\varepsilon_\perp E^2 - \frac{1}{2}\varepsilon_0\Delta\varepsilon E_iE_jn_in_j \quad (1.30)$$

Первое слагаемое в правой части представленного выше уравнения является постоянной, независящей от координаты и поэтому не оказывает влияния на ориентацию директора жидкого кристалла и ей можно пренебречь.

Изменение свободной энергии выраженное через n_i:

$$\frac{\delta f}{\delta n_i} = \frac{\partial f}{\partial n_i} - \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\frac{\partial f}{\partial n'_{i,j}}\right) \tag{1.31}$$

В равновесном состоянии, полная свободная энергия минимальна. При равновесном состоянии компоненты директора n_i $(i = x, y, z)$ могут быть также рассчитаны релаксационным методом. В узлах решетки (l_x, l_y, l_z) изменения компонент директора от шага τ до шага $(\tau + 1)$ вычисляется через значение компонент директора на шаге τ [15]:

$$\Delta n_i^{\tau+1}(lx, ly, lz) = \alpha(\Delta x)^2(-\frac{\delta f}{\delta n_i})^{\tau}(lx, ly, lz) \tag{1.32}$$

После подстановки (1.29, 1.30) в (1.31) получим, что $-\frac{\delta f}{\delta n_i}$ определяется как:

$$\begin{aligned} -\frac{\delta f}{\delta n_i} = {} & (K_{11} - K_{22})\frac{\partial^2 n_j}{\partial x_j \partial x_i} + K_{22}\frac{\partial^2 n_i}{\partial x_j^2} + (K_{33} - K_{22}) n_j n_k \frac{\partial^2 n_i}{\partial x_k \partial x_j} \\ & + (K_{33} - K_{22})\left(n_j \frac{\partial n_i}{\partial x_k}\frac{\partial n_k}{\partial x_j} + n_k \frac{\partial n_i}{\partial x_k}\frac{\partial n_j}{\partial x_j} - n_j \frac{\partial n_k}{\partial x_i}\frac{\partial n_k}{\partial x_j}\right) \\ & - 2q_0 K_{22} e_{ijk}\frac{\partial n_k}{\partial x_j} + \varepsilon_0 \Delta\varepsilon E_i E_j n_j \end{aligned} \tag{1.33}$$

Если взаимодействие жидкого кристалла с подложкой ячейки бесконечно большое, то $\vec{n}$ остается постоянным на границе. Если взаимодействие слабое, то энергия сцепления может быть рассмотрена при минимизации полной свободной энергии. Энергия сцепления, выраженная в терминах жидкокристаллического директора представлена ниже:

$$f_{surface} = \frac{1}{2} W_{ij} n_i n_j \tag{1.34}$$

где W_{ij} – это тензор взаимодействия, который симметричен. В принципиальной координатной плоскости взаимодействия, тензор взаимодействия представляет собой диагональную матрицу [16].

1.6 Расчет электрического поля

Как известно, электрическое поле $\vec{E}$ зависит от электрического потенциала следующим образом: $\vec{E} = -\nabla p$. Жидкие кристаллы являются диэлектрической средой и обычно внутри них не существует свободных зарядов. Согласно уравнениям Максвелла:

$$\nabla \cdot \vec{D} = \nabla \cdot \left(\overleftrightarrow{\varepsilon} \cdot \vec{E}\right) = -\nabla \cdot (\overleftrightarrow{\varepsilon} \cdot \nabla \mathrm{p}) = 0 \tag{1.38}$$

Для начала рассмотрим простой случай, когда среда изотропная и однородная. В этом случае уравнение (1.38) примет вид:

$$\nabla^2 p = 0 \tag{1.39}$$

Которое известно, как уравнение Лапласа. Для решения уравнения Лапласа разработано несколько подходов. Метод конечных разностей (FDM) является наиболее простым и распространенным.

В методе конечных разностей используется регулярная сетка в области, в которой должно быть найдено решение. Например, рассматривается прямоугольник с длинами L_x и L_y в направлениях x и y соответственно. Накладывают сетку на прямоугольник. Ячейка представляет собой квадрат со стороной Δ. В каждом узле решетки, потенциал имеет вид $p(i,j)$, и уравнение Лапласа можно аппроксимировать следующим образом:

$$\frac{p(i+1,j) + p(i-1,j)}{\Delta^2} + \frac{p(i,j+1) + p(i,j-1) - 2p(i,j)}{\Delta^2} = 0 \tag{1.40}$$

Где $i = 0, 1, 2, \dots, N_x (N_x = L_x/\Delta)$ и $j = 0, 1, 2, \dots, N_y (N_y = L_y/\Delta)$. Перепишем уравнение (1.40) в более удобной форме:

$$p(i,j) = \frac{1}{4}[p(i+1,j) + p(i-1,j) + p(i,j+1) + p(i,j-1)] \tag{1.41}$$

Обычно потенциал на границе известен. Согласно граничным условиям предположим начальные условия $p_0(i,j)$. Потенциал в любой точке решетки может быть рассчитан из предполагаемых потенциалов в ближайших соседних точках решетки, используя уравнение, приведенное выше. При расчёте известные

значения потенциала всегда используются в правой части уравнения. Решение уравнения Лапласа может проводиться многократно. Этот процесс имеет недостаток, а именно вычисления проводятся очень медленно. Скорость вычислений может быть увеличена при использовании следующего метода:

$$p^{\tau}(i,j) = (1-\alpha)p^{\tau}(i,j) + \frac{\alpha}{4}[p^{\tau}(i+1,j) + p^{\tau}(i-1,j) + p^{\tau}(i,j+1) + p^{\tau}(i,j-1)] \quad (1.42)$$

где τ – это порядок итерации, а α – это константа релаксации, которая должна быть положительной и меньше, чем 1,5, для получения стабильного решения. Уравнение (1.42) может быть переписано как

$$p^{\tau+1}(i,j) = p^{\tau}(i,j) + \frac{\alpha}{4}[p^{\tau}(i+1,j) + p^{\tau}(i-1,j) - 2p^{\tau}(i,j) + p^{\tau}(i,j+1) + p^{\tau}(i,j-1) - 2p^{\tau}(i,j)] \quad (1.43)$$

Что тоже самое

$$p^{\tau+1}(i,j) = p^{\tau}(i,j) + \frac{\alpha\Delta^2}{4}\left[\frac{\partial^2 p^{\tau}}{\partial x^2}(i,j) + \frac{\partial^2 p^{\tau}}{\partial y^2}(i,j)\right] \quad (1.44)$$

По мере того, как $p^{(i,j)}(i,j)$ приближается к фактическому решению уравнения Лапласа, изменение $\Delta p^{\tau}(i,j) = p^{\tau+1}(i,j) - p^{\tau}(i,j)$ становится все меньше и меньше. Когда $p^{\tau}(i,j)$ остается неизменным, то есть:

$$\frac{\partial^2 p^{\tau}}{\partial x^2}(i,j) + \frac{\partial^2 p^{\tau}}{\partial y^2}(i,j) = 0 \quad (1.45)$$

уравнение Лапласа считается решенным. При численном вычислении, итерации останавливаются, когда максимум $|\Delta p_m|$ абсолютного значения $\Delta p^{\tau}(i,j)$ в узлах решетки становится меньше, чем заданное значение. Для трехмерной неоднородной анизотропной среды, потенциал может быть численно вычислен как:

$$
\begin{aligned}
p^{\tau+1}(i,j,k) &= p^{\tau}(i,j,k) + \frac{\alpha\Delta^2}{4}\nabla\cdot(\overleftrightarrow{\varepsilon}\cdot\nabla p)^{\tau}(i,j,k) \\
&= p^{\tau}(i,j,k) \\
&+ \frac{\alpha\Delta^2}{4}\left[\frac{\partial}{\partial x}\left(\varepsilon_{11}\frac{\partial p}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial x}\left(\varepsilon_{12}\frac{\partial p}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial x}\left(\varepsilon_{13}\frac{\partial p}{\partial z}\right)\right]^{\tau}(i,j,k) \\
&+ \frac{\alpha\Delta^2}{4}\left[\frac{\partial}{\partial y}\left(\varepsilon_{21}\frac{\partial p}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\varepsilon_{22}\frac{\partial p}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\varepsilon_{23}\frac{\partial p}{\partial z}\right)\right]^{\tau}(i,j,k) \\
&+ \frac{\alpha\Delta^2}{4}\left[\frac{\partial}{\partial z}\left(\varepsilon_{31}\frac{\partial p}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\varepsilon_{32}\frac{\partial p}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\varepsilon_{33}\frac{\partial p}{\partial z}\right)\right]^{\tau}(i,j,k)
\end{aligned}
\tag{1.46}
$$

1.7 Поляризационные состояния монохроматических волн

Когда плоская монохроматическая волна света распространяется в гомогенной изотропной среде, достаточно только электрического поля для описания ее, потому что другие величины могут быть вычислены из электрического поля. Электрическое поле является вектором и в общем случае имеет вид:

$$\vec{E} = \vec{A}e^{i(\omega t - \vec{k}\vec{r})} \tag{1.47}$$

Где $\vec{A}$ является константой. Понятно, что действительная часть этого уравнения представляет собой действующее электрическое поле. Это представление называется аналитическим представлением. Поляризационное состояние пучка света задается вектором электрического поля. Во многих жидкокристаллических устройствах, жидкие кристаллы используются для управления поляризационным состоянием света.

Когда направление распространения лежит вдоль оси z, действительная часть электрического поля имеет две компоненты (вдоль осей x и y):

$$E_x = A_x \cos(\omega t - kz + \delta_x) \tag{1.48}$$

$$E_y = A_y \cos\left(\omega t - kz + \delta_y\right)$$

A_x и A_y являются положительными числами, соответствующие амплитудам; δ_x и δ_y – это фазы и они определены в диапазоне $-\pi < \delta_i \leq \pi$ $(i = 1{,}2)$. Важной величиной выступает разница фаз, определяемая как:

$$\delta = \delta_y - \delta_x \tag{1.49}$$

δ также определена в диапазоне $-\pi < \delta \leq \pi$. Для задания поляризационного состояния достаточно только отношения A_y/A_x и разница фаз δ.

1.7.1 Линейное поляризационное состояние

Рассмотрим изменение вектора электрического поля в заданном положении (z фиксировано). Если электрическое поле колеблется в постоянном направлении

(в плоскости x-y), свет называют линейно поляризованным. Это происходит, когда $\delta = 0$ или $\delta = \pi$. Угол φ электрического поля относительно оси x определяется как $tg(\varphi) = A_y/A_x$ для $\delta = 0$ или $tg(\varphi) = -A_y/A_x$ для $\delta = \pi$. Если мы исследуем пространственное изменение вектора в данный момент времени (скажем, t=0), для линейно поляризованного света, кривая, которую электрическое поле описывает в пространстве, ограничена плоскостью. По этой причине линейно поляризованный свет также называют плоско поляризованным светом.

1.7.2 Круговое поляризационное состояние.

Если амплитуды в направлениях x и y одинаковы и разница фаз равна $\delta = \pi/2$,

$$E_x = Acos(\omega t - kz)$$

$$E_y = Acos(\omega t - kz + \pi/2) = -Asin(\omega t - kz) \qquad (1.50)$$

В случае фиксированной координаты, скажем z=0, $E_x = Acos(\omega t)$, а $E_y = -Asin(\omega t)$. Конец вектора электрического поля будет описывать окружность по часовой стрелке на плоскости x-y (свет приближается к наблюдателю). В случае заданного времени, скажем t=0, $E_x = Acos(kz)$, а $E_y = -Asin(kz)$. Конец вектора электрического поля вдоль прямой в направлении распространения описывает спираль, закрученную вправо в пространстве. Поляризация относится к правосторонней круговой поляризации. Если $\delta = -\pi/2$, в данный момент времени, конец вектора электрического поля будет описывать в пространстве левозакрученную спираль, и такая поляризация называется левосторонней круговой поляризацией.

1.7.3 Эллиптическое поляризационное состояние.

В общем случае, амплитуды в направлениях x и y не равны и разница фаз не равна ни 0, ни π. Для упрощения задачи, возьмем $\delta_x = 0$. Из представленных выше уравнений мы имеем:

$$E_x/A_x = \cos(\omega t - kz)$$

$$E_y/A_y = \cos(\omega t - kz + \delta) \tag{1.51}$$

$$= \cos(\omega t - kz)\cos(\delta) - \sin(\omega t - kz)\sin(\delta)$$

Избавляясь от $\sin(\omega t - kz)$ и $\cos(\omega t - kz)$ мы получим

$$\left(\frac{E_x}{A_x}\right)^2 + \left(\frac{E_y}{A_y}\right)^2 - 2\left(\frac{E_x}{A_x}\right)\left(\frac{E_y}{A_y}\right)\cos(\delta) = \sin^2(\delta) \tag{1.52}$$

Это эллиптическое уравнение. При заданной координате, конец вектора электрического поля описывает эллипс в плоскости x-y, как показано на рисунке. По этой причине, свет называют эллиптически поляризованным. В координатной плоскости x'y', где координатные оси направлены вдоль главных осей эллипса, компоненты E'_x и E'_y электрического вектора определяются уравнением:

$$\left(\frac{E'_x}{a}\right)^2 + \left(\frac{E'_y}{a}\right)^2 = 1 \tag{1.53}$$

Где a и b являются длинами главных полуосей эллипса. φ – это азимутальный угол основной оси x' относительно оси x. Преобразование компонент вектора электрического поля между двумя координатными плоскостями осуществляется:

$$E_x = E'_x\cos(\varphi) - E'_y\sin(\varphi)$$

$$E_y = E'_x\sin(\varphi) - E'_y\cos(\varphi) \tag{1.54}$$

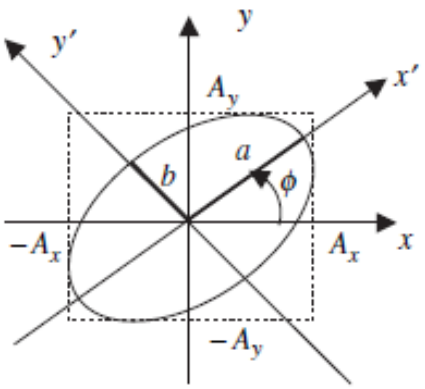


Рисунок 1.9. Схематическая диаграмма, показывающая эллиптическое поляризационное состояние.

1.7.4 Распространение света в однородной анизотропной оптической среде

Рассмотрим распространение света в однородной немагнитной анизотропной среде. Скорость света в среде, а следовательно, и фаза, изменяются в пространстве зависимо от направления электрического поля относительно оптической оси среды. Оптические свойства анизотропной среды описываются диэлектрическим тензором $\overleftrightarrow{\varepsilon}$:

$$\overleftrightarrow{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} & \varepsilon_{32} & \varepsilon_{33} \end{pmatrix} \tag{1.55}$$

Если среда не поглощающая, диэлектрический тензор действителен и симметричен ($\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji}$). Значения элементов зависит от выбора координатных осей. Так как тензор симметричный, часто возможно выбрать координатную плоскость (принципиальная координатная плоскость) с тремя ортогональными осями такими, что только элементы главной диагональ диэлектрического тензора не равны нулю. Если координатная плоскость xyz является принципиальной координатной плоскость, диэлектрический тензор имеет вид:

$$\overleftrightarrow{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \varepsilon_x & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_y & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_z \end{pmatrix} \tag{1.56}$$

1.8 Матричный метод Джонса

1.8.1 Вектор Джонса

В наше время очень развито применение жидких кристаллов в устройствах отображения информации. При конструировании данных приборов необходимо знать функцию зависимости конфигурации (поляризации) ЖК от приложенного поля, а также оптические характеристики для данного жидкокристаллического слоя.

Для многих жидкокристаллических устройств, их оптически свойства нельзя вычислить аналитически потому, что их показатели преломления варьируются в пространстве[17]. В этом разделе обсуждается один из основных методов, который может быть использован для численного вычисления оптических свойств жидкокристаллических приборов.

Для пучка света с частотой ω, распространяющегося в однородной среде, достаточно знать вектор электрического поля, чтобы определить этот пучок. При решении данной задачи координатные оси всегда выбираются таким образом, чтобы направление распространения было направлено вдоль оси Z, если не указано иное. В этом разделе рассматривается только тот случай, когда направление распространения света параллельно нормали к оптической пленке, т. е. нормально падающий свет. Свет представляет собой поперечную волну. Если среда рассматривается изотропной, вектор напряженности электрического поля лежит в плоскости X-Y. Если среда одноосная (анизотропная) и ее оптические оси лежат в плоскости X–У или параллельны к оси Z, вектор электрического поля также лежит в плоскости X-У. В этих случаях единственными величинами, необходимыми для задания светового луча, являются его компоненты электрического поля, E_x и E_y. Таким образом, волна может быть представлена вектором Джонса, определенном как:

$$\vec{E} = \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix} \tag{1.57}$$

Если нас интересует только поляризационное состояние волны, то удобно использовать нормализованный вектор Джонса, который удовлетворяет условию:

$$\vec{E}^* \cdot \vec{E} = 1 \tag{1.58}$$

Где $\vec{E}^*$ является комплексно-сопряженным. Для света, линейно поляризованного в направлении, составляющем угол φ относительно оси X, вектор Джонса представляет собой:

$$\vec{L}(\varphi) = \begin{pmatrix} \cos\varphi \\ \sin\varphi \end{pmatrix} \tag{1.59}$$

Векторы Джонса для право - и левоциркулярно поляризованного света имеют следующий вид:

$$\vec{C}_R = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$$

$$\vec{C}_L = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} \tag{1.60}$$

1.8.2 Матрица Джонса

В представлении Джонса действие, оказываемое оптическим элементом на световой луч, может быть представлено матрицей 2x2, известной как матрица Джонса. Для начала рассмотрим матрицу Джонса одноосной двулучепреломляющей пленки с обычным и необычным показателями преломления n_o и n_e соответственно. Это пример однородного нематического жидкого кристалла. Как известно, в одноосной двулучепреломляющей пленке есть два собственных режима, чьи электрические векторы не меняются в пространстве. Если оптические ось (одноосная, также называется ось C) вдоль оси X лабораторной координатной плоскости, один из собственных режимов имеет свой собственный вектор вдоль оси X и распространяется со скоростью c/n_e; другой собственный режим имеет свой собственный вектор вдоль оси У и распространяется со скоростью c/n_o. Если $n_e > n_o$, ось X называется медленной осью, а ось Y называется быстрой осью. Если падающий свет на пленку имеет

вектор Джонса $\overrightarrow{E_i^T} = (E_{xi}, E_{yi})$, когда компонента электрического вектора вдоль ось X проходит через пленку, его амплитуда остается E_{xi}, и ее изменение фазы соответствует $e^{-2\pi n_e z/\lambda}$. Когда компонента электрического вектора вдоль оси У распространяется через пленку, ее амплитуда остается E_{yi} и ее изменение фазы соответственно равна $e^{-2\pi n_o z/\lambda}$. Поэтому вектор Джонса $\overrightarrow{E_i^T} = (E_{xi}, E_{yi})$ исходящего из пленки света будет представлять собой:

$$\overrightarrow{E_o} = \begin{pmatrix} E_{xo} \\ E_{yo} \end{pmatrix} = e^{-i[\pi(n_e+n_o)h/\lambda]} \begin{pmatrix} e^{-i\Gamma/2} & 0 \\ 0 & e^{i\Gamma/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{xi} \\ E_{yi} \end{pmatrix} \quad (1.61)$$

где Г является фазовым торможением и определяется как $\Gamma = 2\pi(n_e - n_o)h/\lambda$, где h-толщина пленки и λ -длина волны света в вакууме. Однородные двулучепреломляющие пленки называются пленками заторможенности или волновыми пластинами. Если $\Gamma = \pi/2$, то пленка называется четвертьволновой пластиной. Если $\Gamma = \pi$, то пленка называется полуволновой пластиной. Фактором фазы $e^{-i[\pi(n_e-n_o)h/\lambda]}$можно пренебречь, когда абсолютная фаза не важно. Матрицы замедления Джонса имеет следующий вид:

$$\overleftrightarrow{G}(\Gamma) = \begin{pmatrix} e^{-i\Gamma/2} & 0 \\ 0 & e^{i\Gamma/2} \end{pmatrix} \quad (1.62)$$

Уравнение для описания исходящего из пластины света, представленное выше, можно переписать:

$$\overrightarrow{E_o} = \overleftrightarrow{G} \cdot \overrightarrow{E_i} \quad (1.63)$$

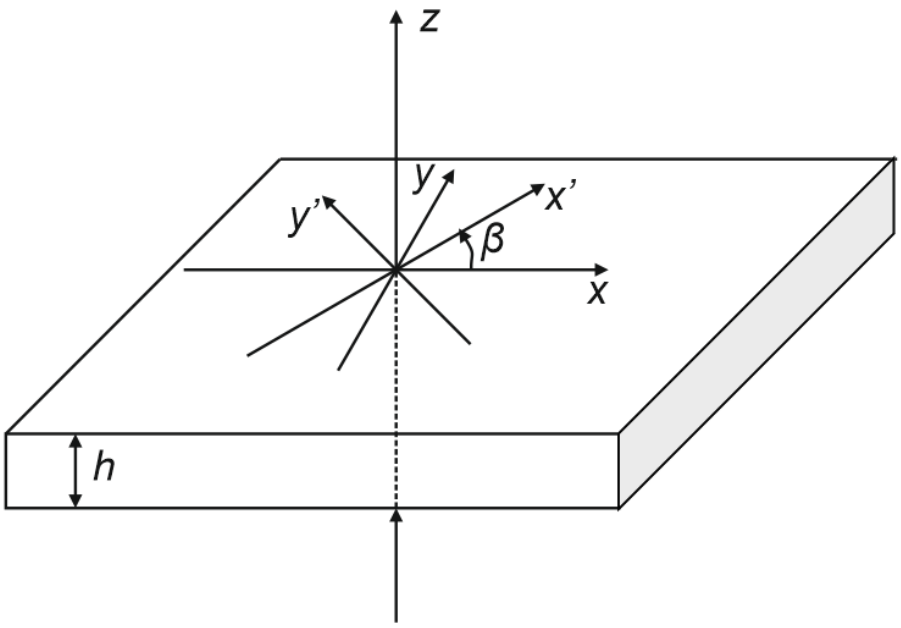


Рисунок 1.9. Схематическая диаграмма, показывающая прохождение светового пучка сквозь одноосную двулучепреломляющую пленку.

Если оптическая ось имеет угол β с осью X лабораторной координатной плоскостью, как показано на рис. 1, то собственные векторы больше не находятся в направлениях X и У. Для неполяризованного падающего вдоль оптической оси света, собственная поляризация изменится в пространстве при прохождении через пленку. В этом случае мы должны использовать так называемую основную координатную плоскость X'У', ось X' которой параллельна оптической оси пленки. В основной координатной плоскости, для описания исходящего света действует то же самое уравнение. Вектор Джонса $\overrightarrow{E_i'}$ падающего света в основной координатной плоскости связан с вектором Джонса E_i в лабораторной координатной плоскости как

$$\overrightarrow{E_i'} = \begin{pmatrix} E'_{xi} \\ E'_{yi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\beta & \sin\beta \\ -\sin\beta & \cos\beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\beta & \sin\beta \\ -\sin\beta & \cos\beta \end{pmatrix} \overrightarrow{E_i} \tag{1.64}$$

Определим матрицу поворота как

$$\overleftrightarrow{R}(\beta) = \begin{pmatrix} \cos\beta & -\sin\beta \\ \sin\beta & \cos\beta \end{pmatrix} \tag{1.65}$$

Примем, что

$$\overleftrightarrow{R}^{-1}(\beta) = \overleftrightarrow{R}(-\beta) \tag{1.66}$$

Следовательно:

$$\overrightarrow{E_i'} = \overleftrightarrow{R}^{-1}(\beta) \cdot \overrightarrow{E_i} \tag{1.67}$$

В основной координатной плоскости амплитуды электрических полей в направлениях X' и У' не изменяются с координатой Z, но распространяются с разной скоростью c/n_e и c/n_o, соответственно, и таким образом их задержки фазы различны. Исходящий из пленки свет в основной координатной плоскости определяется как

$$\vec{E}_o' = \begin{pmatrix} E_{xo}' \\ E_{yo}' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-i\Gamma/2} & 0 \\ 0 & e^{i\Gamma/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{xi}' \\ E_{yi}' \end{pmatrix} = \overleftrightarrow{G}(\Gamma) \cdot \overrightarrow{E_i'} \tag{1.68}$$

Вектор Джонса исходящего света в лабораторной координатной плоскости представляет собой

$$\overrightarrow{E_o} = \begin{pmatrix} E_{xo} \\ E_{yo} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} cos\beta & -sin\beta \\ sin\beta & cos\beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{xo}' \\ E_{yo}' \end{pmatrix} = \overleftrightarrow{R}(\beta) \cdot \overleftrightarrow{G}(\Gamma) \cdot \overleftrightarrow{R}^{-1}(\beta) \cdot \overrightarrow{E_i} \tag{1.69}$$

Решая вышеприведенные уравнения получим аналитическое выражение для исходящего света в лабораторной координатной плоскости:

$$\overrightarrow{E_o} = \begin{pmatrix} cos^2\beta e^{-i\Gamma/2} + sin^2\beta e^{i\Gamma/2} & sin\beta cos\beta(e^{-i\Gamma/2} - e^{i\Gamma/2}) \\ sin\beta cos\beta(e^{-i\Gamma/2} - e^{i\Gamma/2}) & sin^2\beta e^{-i\Gamma/2} + cos^2\beta e^{i\Gamma/2} \end{pmatrix} \overrightarrow{E_i} \tag{1.70}$$

Поляризацию светового луча можно изменить в любое другое состояние поляризации используя нужную двулучепреломляющую пленку. Если падающий свет линейно поляризован вдоль оси X и использована одноосная двулучепреломляющая пленка, представляющая собой четвертьволновую пластину с медленной осью (одноосной осью) сдвинутой на 45^0 по отношению к оси X, то $\overrightarrow{E_0^T} = (1/\sqrt{2})(1, -i)$, исходящий свет является левоциркулярно поляризованным. Если медленная ось сдвинута на -45^0 относительно оси X, то $\overrightarrow{E_0^T} = (1/\sqrt{2})(1, i)$, исходящий свет является правоциркулярно поляризованным. Если пленка является полуволновой пластиной и медленная ось на сдвинута на 45

относительно X, то $\overrightarrow{E_0^T} = (-i)(0,1)$, исходящий свет является линейно поляризованным вдоль оси y.

Если двулучепреломляющая пленка зажата между двумя поляризаторами с осью поляризации нижнего поляризатора вдоль оси X, т.е. $\overrightarrow{E_i^T} = (1,0)$. Поляризация исходящего света выражается следующим образом

$$\overrightarrow{E_o} = \begin{pmatrix} cos^2\beta e^{-i\Gamma/2} + sin^2\beta e^{i\Gamma/2} & sin\beta cos\beta(e^{-i\Gamma/2} - e^{i\Gamma/2}) \\ sin\beta cos\beta(e^{-i\Gamma/2} - e^{i\Gamma/2}) & cos^2\beta e^{-i\Gamma/2} + sin^2\beta e^{i\Gamma/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} cos^2\beta e^{-i\Gamma/2} + sin^2\beta e^{i\Gamma/2} \\ sin\beta cos\beta(e^{-i\Gamma/2} - e^{i\Gamma/2} \end{pmatrix} \quad (1.71)$$

Если ось поляризации анализатора (верхний поляризатор) направлена вдоль оси Y, то только компонента Y исходящего света может пройти через анализатор, и пропускаемость в таком случае будет:

$$T = \left|E_{yo}\right|^2 = \left|sin\beta cos\beta(e^{-i\Gamma/2} - e^{i\Gamma/2})\right|^2 = sin^2(2\beta)sin^2(\Gamma/2) \quad (1.72)$$

При $\beta = \pi/4$ и $\Gamma = \pi$, определен максимум пропускаемости T=1.

Двулучепреломляющие пленки используются в качестве компенсационных пленок для улучшения угла обзора жидкокристаллических дисплеев. Они могут быть разделены на три группы в зависимости от ориентации одноосной оси (ось C) относительно нормали пленки:

a пластина: ось C перпендикулярна к нормали пленки;

c пластина: ось C параллельна к нормали пленки;

o пластина: ось C составляет промежуточный угол с нормалью к пленки.

Вектор Джонса для различных поляризационных состояний является известной функцией и приведена в таблице 1.

Таблица 1. Основные матрицы. Стандартные матрицы для различных сред, поляризаторов и пластинок, сдвигающих фазу.

Оптическое устройство	Матрица Джонса
Вакуум или идеальная пластинка изотропного непоглощающего стекла	$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$
Идеальная пластинка изотропного поглощающего стекла с пропусканием k(или p^2)	$\begin{bmatrix} p & 0 \\ 0 & p \end{bmatrix}$
Полностью поглощающая пластинка	$\begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$
Идеальный деполяризатор (воображаемое устройство)	нет
Азимут θ оси пропускания	Матрица Джонса
0^0	$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$
90^0	$\begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$
45^0	$\frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$
-45^0	$\frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}$
Общий случай	$\begin{bmatrix} C_1^2 & C_1S_1 \\ C_1S_1 & S_1^2 \end{bmatrix}$
Вид поляризатора	Матрица Джонса
Правоциркулярный	$\frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1 & -i \\ i & 1 \end{bmatrix}$
Левоциркулярный	$\frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1 & i \\ -i & 1 \end{bmatrix}$

Продолжение таблицы 1

Эллиптический, общий случай	$\begin{bmatrix} \lvert m\rvert^2 & mn^* \\ m^*n & \lvert n\rvert^2 \end{bmatrix}$ где наибольший и наименьший собственные векторы Джонса: $\begin{bmatrix} m \\ n \end{bmatrix}$ и $\begin{bmatrix} -n^* \\ m^* \end{bmatrix}$
Вид пластинки	Матрица Джонса
Правоциркулярная, $\delta = 90^0$	$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}$
Левоциркулярная, $\delta = 90^0$	$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$
Право- или левоциркулярная $\delta = 180^0$	$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}$
Правоциркулярная, δ произвольно	$\begin{bmatrix} \cos\frac{\delta}{2} & \sin\frac{\delta}{2} \\ -\sin\frac{\delta}{2} & \cos\frac{\delta}{2} \end{bmatrix}$
Левоциркулярная, δ произвольно	$\begin{bmatrix} \cos\frac{\delta}{2} & -\sin\frac{\delta}{2} \\ \sin\frac{\delta}{2} & \cos\frac{\delta}{2} \end{bmatrix}$

1.8.3 Метод Джонса для неоднородной двулучепреломляющей пленки

Когда свет распространяется через пленку, в которой медленная и быстрая оси, а также показатели преломления являются функциями от координаты Z,

метод матрицы Джонса также может быть использован в качестве метода аппроксимации по мере того, как показатели преломления не изменяют более чем в одном расстоянии длины волны. В таком случае пленку делят на N пластин как показано на рисунке 2. Тогда толщина пластины $\Delta h = h/N$ достаточно мала, после этого внутри каждой пластины, медленную ось можно рассматривать фиксированной.

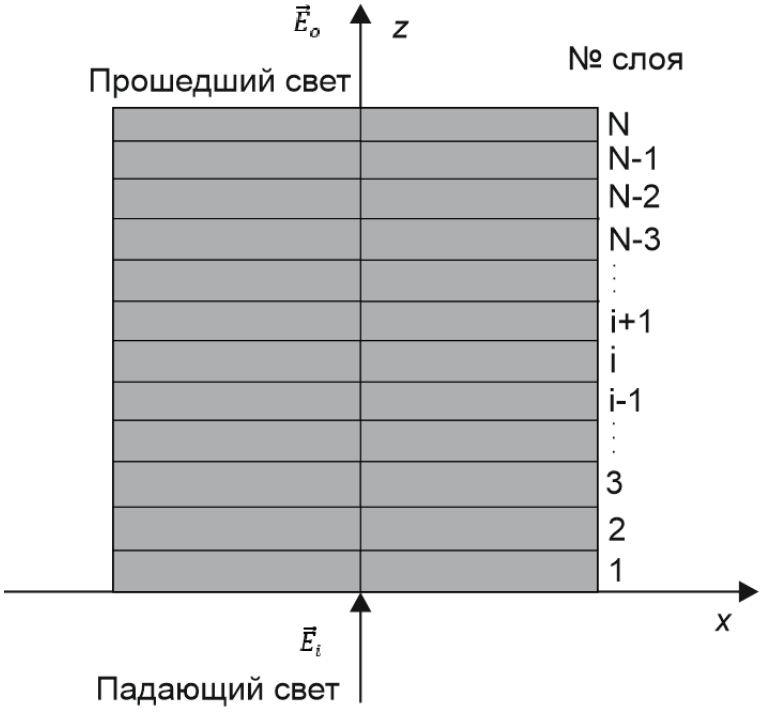


Рисунок 1.10. Схематическая диаграмма, показывающая прохождение светового пучка в неоднородной среде.

Для слоя j, угол медленной оси относительно оси X есть β_i и фазовое замедления $\Gamma = 2\pi[n_e(z = j\Delta h) - n_0(z = j\Delta h)]\Delta h/\lambda$. В лабораторной координатной плоскости, вектор Джонса падающего света на слой E_{ji}, который равен вектору Джонса, $\vec{E}_{(j-1)0}$, для света выходящего из слоя (j-1) , и вектор Джонса исходящего света $\vec{E}_{j0}$:

$$\vec{E}_{jo} = \overleftrightarrow{R}(\beta_j) \cdot \overleftrightarrow{G}(\Gamma_j) \cdot \overleftrightarrow{R}^{-1}(\beta_j)\vec{E}_{ji} = \overleftrightarrow{R}(\beta_j) \cdot \overleftrightarrow{G}(\Gamma_j) \cdot \overleftrightarrow{R}^{-1}(\beta_j)\vec{E}_{(j-1)o} \quad (1.73)$$

Вектор Джонса, $\vec{E}_0$, исходящего света относительно вектора Джонса, $\vec{E}_i$, падающего света

$$\vec{E}_o = \left[\overleftrightarrow{R}(\beta_N) \cdot \overleftrightarrow{G}(\Gamma_N) \cdot \overleftrightarrow{R}^{-1}(\beta_N)\right] \cdot \left[\overleftrightarrow{R}(\beta_{N-1}) \cdot \overleftrightarrow{G}(\Gamma_{N-1}) \cdot \overleftrightarrow{R}^{-1}(\beta_{N-1})\right] \cdot \ldots$$
$$\cdot \left[\overleftrightarrow{R}(\beta_1) \cdot \overleftrightarrow{G}(\Gamma_1) \cdot \overleftrightarrow{R}^{-1}(\beta_1)\right] \cdot \vec{E}_i \qquad (1.74)$$
$$= \prod_{j=1}^{N} \left[\overleftrightarrow{R}(\beta_j) \cdot \overleftrightarrow{G}(\Gamma_j) \cdot \overleftrightarrow{R}^{-1}(\beta_j)\right] \cdot \vec{E}_i$$

Обычно умножение матриц осуществляется численно. Аналитические решения могут быть получены в некоторых особых случаях для простых систем.

1.9 Ионная генерация

Важность ионов в молекулярных жидких кристаллах была продемонстрирована в 1960-х годах при открытии динамического рассеяния в нематиках [18]. Это породило очень активное исследование электрических свойств жидких кристаллов, например [19]. Динамическое рассеяние в нематических жидких кристаллах основано на разрушающем действии ионного движения, вызывающего образование локализованных центров рассеяния [18]. Для улучшения электро-оптических характеристик таких устройств, в жидкие кристаллы намеренно добавляют ионы [20]. Обычно, ионносодержащие вещества с собственной диссоциацией таких, как тетрабутиламмоний пикрата и тетрабутиламмоний тетраэтил борида, используются в качестве ионной легирующей добавки [20]. Относительно высокое потребление мощности и короткий срок службы сделали дисплеи, основанные на эффекте динамического рассеяния, не практичными. Изобретение эффекта скрученного нематического поля и активно-матричной адресации стало крупным технологическим прорывом, который позволил использовать жидкие кристаллы в современных дисплеях [21]. Однако, эти новые виды жидкокристаллических дисплеев были основаны на действии электрического поля и не зависели от ионов. Ионы стали помехой и их присутствие в жидких кристаллах считалось очень нежелательным из-за многих эффектов, связанных с ионами (мелькание изображения, уменьшение коэффициента удержания тока, медленный отклик)[22]. В результате, современные жидкокристаллические материалы, используемые в дисплеях характеризуются их относительно низкой электрической проводимостью (порядка 10^{-12} См/м или меньше). Это также потребовало сместить фокус современных исследований на изучение происхождения ионов в жидких кристаллах. Так как любой вид ионного загрязнения в жидких кристаллах может вызвать изменение любой характеристики жидкокристаллического устройства, понимание

возможных источников генерации ионов в жидких кристаллах является очень важной проблемой[23].

Ионы в молекулярных жидких кристаллах могут появляться из различных источников[19]. Наиболее распространённые из них – это генерация ионов за счет диссоциации нейтральных молекул, присутствующих в объеме жидкого кристалла[24]; небольшие следы неорганических ионных примесей, полученные при химическом синтезе[25,26]; химическое разложение жидкокристаллических материалов; ионное загрязнение жидких кристаллов через клей, используемый для уплотнения жидкокристаллической ячейки[27]; посредством ориентирующих слоев[28]. К тому же, ионы могут быть введены в жидкие кристаллы намеренно путем введения ионосодержащих примесей, могут быть также сгенерированы с помощью ионизирующего излучения и путем электрохимических реакций.

Генерацию ионов в жидких кристаллах можно классифицировать на следующие группы [29]:

генерация ионов в объеме;

ионная генерация на поверхности.

В случае генерации ионов в объеме, наиболее общепринятый механизм генерации может быть описан следующей химической реакцией[24]:

$$\nu_0 \leftrightarrow \nu_+ + \nu_- \qquad (1.74)$$

Где ν_0 – это концентрация нейтральных молекул, ν_+ и ν_- называют концентрациями положительно и отрицательных ионов, соответственно. Согласно вышеприведенному процессу, положительные и отрицательные ионы в жидких кристаллах происходят из диссоциации нейтральных молекул. При равновесии, нейтральные молекулы уравновешены с положительными и отрицательными ионами. Процесс диссоциации характеризуется постоянной скорости диссоциации k_d, а процесс рекомбинации характеризуется постоянной скорости рекомбинации k_r. В общем случае, эти постоянные скорости могут зависеть от внешних факторов таких, как приложенное электрическое поле, облучение светом

и температура, которые приводят к эффектам температурным, индуцированных светом и электрическим полем. Эти эффекты можно экспериментально наблюдать в жидких кристаллах.

Стоит отметить, что реакция является довольно общей и может учитывать как слабо, так и полностью ионизированные молекулы в жидких кристаллах. Вот почему этот тип объемной генерации ионов в жидких кристаллах является общепринятым и применяется как для ионных примесей, специально добавленных в жидкие кристаллы, так и для ионных примесей, существующих в жидких кристаллах в результате химического синтеза.

В то время, как генерация ионов в объеме жидких кристаллов получила достаточно большое внимание в литературе, генерация ионов на поверхности остается плохо изученной и понятой. В первые года эры жидкокристаллических дисплеев, электрохимические реакции на электродах рассматривались в качестве главного фактора цикла генерации/рекомбинации ионов в жидких кристаллах, при режиме динамического рассеяния. Со сменой взгляда на эту проблему и переходом на использование эффектов электрического поля в жидких кристаллах, этот источник генерации ионов стал незначительным. Действительно, использование ориентирующих слоев и переменного электрического поля с высоко очищенными жидкими кристаллами практически исключили возможность этого типа генерации в жидких кристаллах. Сегодня, всеми принято, что подложка жидкокристаллической ячейки должна быть рассмотрена как возможный источник возникновения ионов в жидких кристаллах, ввиду их неконтролируемого загрязнения ионами. Тем не менее, практически нет количественных моделей, описывающих подложки жидкокристаллической ячейки, как источник ионной генерации в жидких кристаллах. Этот источник ионов в жидких кристаллах может стать критическим для широкого спектра применения жидких кристаллов, использующих очень тонкие ячейки. Механизм генерации ионов на подложке может быть вызван присутствием ориентирующих

слоев или внешними факторами такими, как механическое трение или облучение светом [3].

1.9.1 Генерация ионов в жидкокристаллической ячейке: элементарная модель

Рассмотрим генерацию ионов в стандартной жидкокристаллической ячейке, которая представляет собой жидкий кристалл, зажатый подложками с двух сторон с нанесенным ориентирующем слоем. Ориентирующие слои такой ячейки загрязнены ионами еще перед заполнением ячейки жидкими кристаллами. Эти ионные загрязнения могут стать источником ионов для жидких кристаллов. Для описания количественно этого процесса, поверхность ориентирующих слоев представлена общим числом участков поверхности: $N_s = A_s\sigma_s$, где A_s – это площадь поверхности подложки, а σ_s является поверхностной плотностью этих участков. Однако, только часть от всей поверхности загрязнена ионами, и поэтому только эта часть способна генерировать ионы. Эта часть поверхности называется «центры ионного загрязнения» на поверхности ориентирующих слоев. Они могут быть оценены количественно с помощью фактора загрязнения v_s, определяемого как отношение числа участков, загрязненных ионами N_i к общему количеству всех участков поверхности N_s: $v_s = N_i/N_s$ [30]. Таким образом, $0 \leq v_s \leq 1$.

Как только пустая ячейка заполняется жидкими кристаллами, часть ионных загрязнений могут покинуть поверхность ориентирующих слоев, таким образом, обогащая жидкие кристаллы ионами. Обратный процесс, а именно захват подвижных ионов поверхностью ориентирующих слоев, также возможен. В итоге эти два процесса уравновешивают друг друга, что приводит к равновесному состоянию, которое характеризуется постоянной концентрацией ионов в объеме жидкого кристалла. В простейшем случае, процесс испускание ионов с поверхности подложки может быть описан десорбцией ионов от поверхности ориентирующих слоев. В то время, как процесс захвата ионов описывается

адсорбцией ионов на поверхность ориентирующих слоев. Следующее кинетическое уравнение может быть использовано для описания адсорбционно-десорбционных процессов внутри жидкокристаллической ячейки[31]:

$$\frac{d\nu}{dt} = -k_a \frac{\sigma_s}{d} \nu (1 - \theta_s) + k_d \frac{\sigma_s}{d} \theta_s \tag{1.75}$$

Где ν – это концентрация подвижных ионов в жидком кристалле; t – время; d – это толщина ячейки; σ_s является поверхностной плотностью всех центров адсорбции на поверхности ориентирующих слоев; θ_s является частью поверхности, покрытой ориентирующими слоями; k_a – константа скорости адсорбции; k_d – константа десорбции. Уравнение должно решаться совместно с уравнением (1.76), которое представляет собой закон сохранения полного числа ионов в жидкокристаллической ячейке [32]:

$$\nu_0 + \frac{\sigma_s}{d} M = \nu + \frac{\sigma_s}{d} \theta_s \tag{1.76}$$

Где ν_0 является начальной концентрацией ионов в жидком кристалле, а M является фактором загрязнения ориентирующих слоев жидкокристаллической ячейки.

Однако, как будет показано далее уравнение (1.75) самостоятельно неспособно описать процессы и ионного испускания, и ионного захвата. Для объяснения широкого разнообразия существующих экспериментальных результатов, фактор загрязнения v_s должен быть введен и уравнение (1.75) должно решаться совместно с уравнением (1.76). Эти уравнения можно применить при расчете концентрации ионов в жидких кристаллах. Относительно низкая концентрация подвижных ионов в жидких кристаллах (порядка 10^{18}-10^{21} м$^{-3}$) является основным физическим фактором применимости этих уравнений. Вкратце, в результате этой небольшой концентрации ионов в жидких кристаллах[33,34]:

1. длина Бьеррума (расстояние на котором электростатическая энергия двух зарядов равна их тепловой энергии) меньше, чем среднее расстояние между ионами;

2. поверхностный охват ориентирующих слоев является очень мал, этим обуславливается использование аппроксимации, выраженной уравнениями (1.74) и (1.75).

Однако, если концентрация ионов сопоставима с типичными электролитами (порядка 10^{24} м$^{-3}$), следует рассматривать более строгий подход, основанный на уравнении Пуассона-Больцмана [35].

Следует отметить, что, если ориентирующие слои жидкокристаллической ячейки не загрязнены ионами до заполнения ячейки, адсорбция ионов на поверхности ориентирующих слоев приведет к захвату ионов (уменьшение концентрации ионов). Интересной особенностью этого процесса является его зависимость от толщины жидкокристаллической ячейки: эффект захвата ионов выражен тем больше, чем тоньше используемая ячейка.

Зависимость от времени процесса захвата ионов характеризуется константой времени τ_s, определяемой как $\frac{\nu(t=\tau_s)-\nu(t=0)}{\nu(t=\infty)-\nu(t=0)} = 1 - \frac{1}{e}$. Эта константа времени зависит от толщины ячейки согласно уравнению (1.77) [36]:

$$\tau_s = \frac{1}{k_d(\frac{K_s\sigma_s}{d} + 1)} \tag{1.77}$$

Где $K_s = k_d/k_a$. Влияние толщины ячейки значительно, если использованы относительно тонкие ячейки (d << $K_s\sigma_s$). Оно становятся пренебрежимо мало в том случае, если ячейка относительно толстая (d>> $K_s\sigma_s$).

В случае, когда ориентирующие слои загрязнены ионами до заполнения ячейки жидкими кристаллами ($v_s > 0$), существует три типа режима захвата ионов. Тип достигаемого режима определяется величинами, называемые критической концентрацией ионов $\nu_C = \frac{M}{K_s(1-M)}$ и критическим фактором

загрязнения $M^C = \frac{\nu_0 K_s}{1+\nu_0 K_s}$. Режим захвата ионов наблюдается, если $\nu_0 > \nu_C$ (или $M < M^C$); режим испускания ионов достигается, если $\nu_0 < \nu_C$ (или $M > M^C$), и никакой режим не соответствует $\nu_0 = \nu_C$ (или $M = M^C$). Следует ответить, что постоянная времени не зависит от фактора загрязнения ориентирующего слоя и определяется тем же уравнением (1.77).

Предложенная модель может легко быть обобщена для нескольких видов ионов в жидких кристаллах. Для простоты рассмотрим два типа полностью ионизированных вида, характеризуемых объемной концентрацией $\nu_1 = \nu_{1+} = \nu_{1-}$ и $\nu_2 = \nu_{2+} = \nu_{2-}$. В этом случае, следующая система уравнений должна быть решена совместно с законом сохранения общего числа ионов (i=1,2) [32]:

$$\begin{cases} \frac{d\nu_i}{dt} = -k_{a(i)} \frac{\sigma_{s(i)}}{d} \nu_i (1 - \theta_{s1} - \theta_{s2}) + k_{d(i)} \frac{\sigma_{s(i)}}{d} \theta_{s(i)} \\ \nu_{0(i)} + \frac{\sigma_{s(i)}}{d} M_{s(i)} = \nu_i + \frac{\sigma_{s(i)}}{d} \theta_{s(i)} \end{cases} \quad (1.78)$$

В случае нескольких типов ионов в жидких кристаллах, можно наблюдать как монотонную, так и немонотонную зависимости концентраций ионов от времени.

Следует отметить, что генерация ионов связана с ионным загрязнением поверхности, контактирующей с жидким кристаллом, имеет место быть только в том случае, если соблюдено условие режима испускания $\nu_0 < \nu_C$ (или $M > M^C$). Также загрязнение ориентирующих слоев должно быть рассмотрено, как основной источник ионов в жидком кристалле. Данная модель не учитывает важные физические механизмы, приводящие к ионному загрязнению ориентирующих слоев. Вместо этого ионное загрязнение введено как фактор загрязнения. Тем не менее, эта модель может быть применена для объяснения существующих экспериментальных данных [32,37].

2 МОДЕЛЬ ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ

2.1 Расчет вектора Джонса прошедшего излучения.

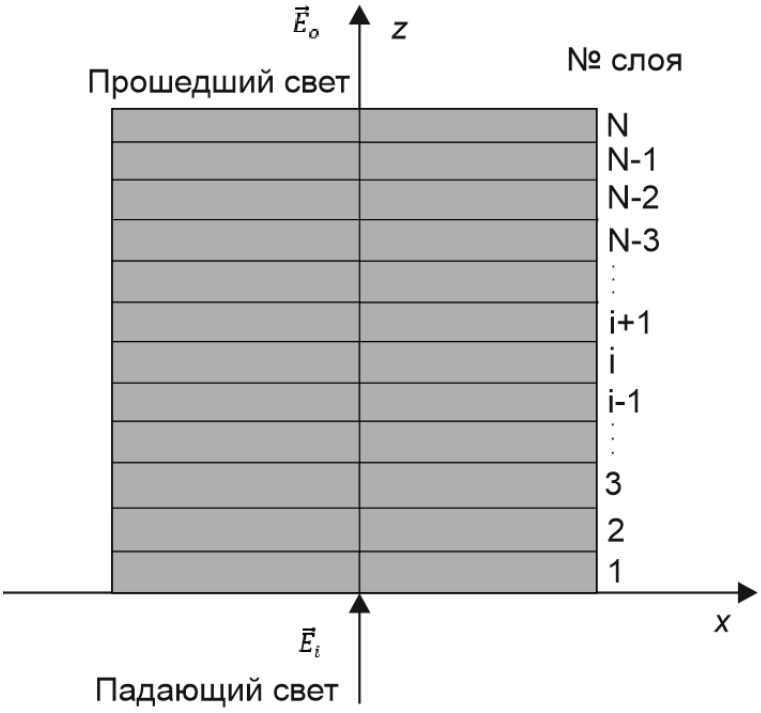


Рисунок 2.1. Схематическая диаграмма, показывающая прохождение светового пучка в неоднородной среде.

С помощью преобразования Джонса можно вычислить вектор Джонса, $\vec{E}_0$, прошедшего света, зная вектор Джонса, $\vec{E}_i$, падающего света, поляризованного вдоль оси x [38]:

$$\vec{E}_o = P\prod_{j=1}^{N}\left[\overleftrightarrow{R}(\beta_j)\cdot\overleftrightarrow{G}(\Gamma_j)\cdot\overleftrightarrow{R}^{-1}(\beta_j)\right]\cdot\vec{E}_i \tag{2.1}$$

где $\vec{E}_i = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$

$\overleftrightarrow{R}(\beta_j)$ – матрица поворота:

$\overleftrightarrow{R}(\beta) = \begin{pmatrix}cos\beta & -sin\beta\\ sin\beta & cos\beta\end{pmatrix}$;

$\overleftrightarrow{R}^{-1}(\beta) = \begin{pmatrix}cos\beta & sin\beta\\ -sin\beta & cos\beta\end{pmatrix}$

Где β – это угол поворота оптической оси.

$\overleftrightarrow{G}(\Gamma)$ – это матрица фазового замедления Джонса имеет следующий вид:

$$\overleftrightarrow{G}(\Gamma) = \begin{pmatrix} e^{-i\Gamma/2} & 0 \\ 0 & e^{i\Gamma/2} \end{pmatrix} \quad (2.2)$$

где Г является фазовым замедлением, вносимая слоем ЖК, и равна $\Gamma = 2\pi(n_e - n_o)h/\lambda N$, где h-толщина пленки, λ -длина волны света в вакууме и N – количество слоев.

P-матрица анализатора:

$P = \begin{vmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix}$.

2.2 Расчет динамики угла поворота директора СЖК.

Вращение директора жидкого кристалла подчиняется законам динамики: упругий и электрический моменты сбалансированы моментом вращательной вязкости. Математически мы имеем:

$$\gamma_r \frac{\partial \varphi}{\partial t} = -\frac{\delta f}{\delta \varphi} \tag{2.3}$$

Подставляя, плотность свободной энергии в это уравнение получим:

$$\gamma_r \frac{\partial \varphi}{\partial t} = A(1 + \nu sin^2\varphi)\frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} + \frac{\nu}{2} A sin2\varphi (\frac{\partial \varphi}{\partial y})^2 + \frac{\Delta\varepsilon'}{2}\varepsilon_\perp sin2\varphi + P_s E sin\varphi \tag{2.4}$$

Где γ_r – коэффициент вращательной вязкости;

$A = K_{11} sin^2\theta;$

$B = (K_{22} cos^2\theta + K_{33} sin^2\theta) sin^2\theta;$

$\nu = \frac{B-A}{A};$

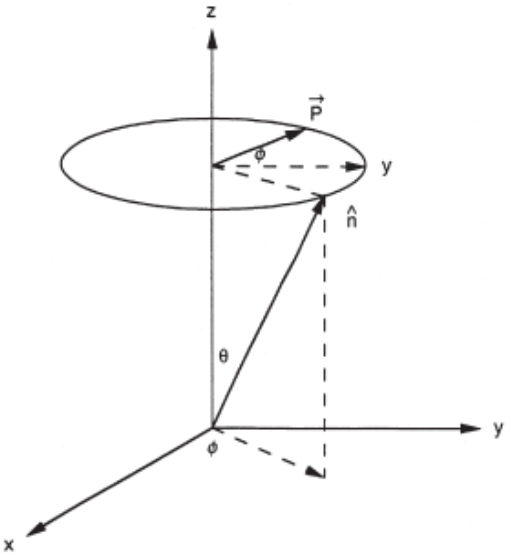


Рисунок 2.2. Схематическая диаграмма, показывающая геометрические обозначения при расчете угла поворота директора.

$\Delta\varepsilon'$ – диэлектрическая анизотропия, которая определяется как:

$$\Delta\varepsilon' = \frac{\varepsilon'_\parallel - \varepsilon_\perp}{\varepsilon},$$

Где $\varepsilon'_{\parallel} = \varepsilon_{\perp} cos^2\theta + \varepsilon_{\parallel} sin^2\theta$

$\varepsilon = \frac{\varepsilon_{\perp}+\varepsilon_{\parallel}}{2}$

Подробный расчет полярного угла θ (угла наклона жидкокристаллического директора) представлен в разделе 1.5.3 данной работы.

2.3 Расчет электрического поля в слое СЖК

Рассмотрим стандартную жидкокристаллическую ячейку, представленную на рисунке 2.3. Ось y направленна перпендикулярно электродам. Толщина ориентирующего слоя равна λ. Предполагается, что используются блокирующие электроды. Плотности зарядов, приложенные к ячейке для обеспечения разности потенциалов в ее объеме, обозначаются $\pm q\sum$, где $q -$ единичный заряд, $\sum$ - поверхностная плотность заряженных частиц.

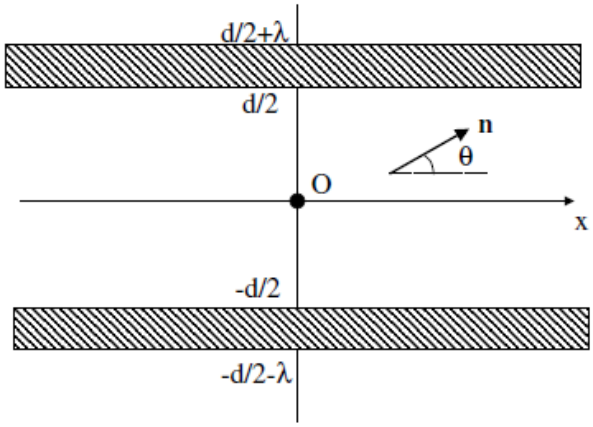


Рисунок 2.3. Схема стандартной жидкокристаллической ячейки.

Считаем, что все физические величины, входящие в модель, зависят только от координаты y. Присутствие в объеме жидкого кристалла ионов сильно влияет на его электрофизические свойства, так как в этом случае электрический потенциал больше не является гармонической функцией.

При отсутствии внешнего электрического поля концентрации положительных и отрицательных ионов: $\nu_{0+}(y,0) = \nu_{0-}(y,0) = \nu_0$. При наложении внешнего поля, ионы начинают двигаться упорядоченно и продолжают свое движение до тех пор, пока не будет достигнуто их равновесное распределение в объеме. В этом случае концентрации положительно и отрицательно заряженных ионов не равны и записываются $\nu_+(y,t)$ и $\nu_-(y,t)$, соответственно.

Зависимость плотности электрического тока от концентрации ионов описывается следующей системой уравнений:

$$\begin{cases} q\dfrac{\partial \nu_+}{\partial t} = \dfrac{\partial j_+}{\partial y} \\ q\dfrac{\partial \nu_-}{\partial t} = -\dfrac{\partial j_-}{\partial y} \end{cases} \tag{2.4}$$

Уравнение Пуассона примет следующий вид [9]:

$$\frac{\partial^2 p}{\partial y^2} = -\frac{q}{\varepsilon}(\nu_+ - \nu_-) \tag{2.5}$$

где q – это заряд ионов, p – потенциал, создаваемый полем в точке с координатой y, а j_+ и j_- — это плотность тока, создаваемая положительными и отрицательными ионами, соответственно, которые можно найти, решая следующую систему уравнений:

$$\begin{cases} j_+ = -\mu_+ q\left(\nu_+\dfrac{\partial p}{\partial y} + \dfrac{kT}{q}\dfrac{\partial \nu_+}{\partial y}\right) \\ j_- = -\mu_- q\left(\nu_-\dfrac{\partial p}{\partial y} - \dfrac{kT}{q}\dfrac{\partial \nu_+}{\partial y}\right) \end{cases} \tag{2.6}$$

где $\mu_\pm$ — это подвижность ионов. В этих уравнениях первое слагаемое соответствует плотности тока, связанного с дрейфом электрического поля. Второе слагаемое отвечает за плотность диффузионного тока.

Поскольку предполагается, что электроды являются блокирующими, то мы имеем следующие граничные условия для плотности тока[39]:

$$\begin{cases} j_+\left(\pm\dfrac{d}{2}, t\right) = -\mu_+ q\left(\nu_+\dfrac{\partial p}{\partial y} + \dfrac{kT}{q}\dfrac{\partial \nu_+}{\partial y}\right) = 0 \\ j_-\left(\pm\dfrac{d}{2}, t\right) = -\mu_- q\left(\nu_-\dfrac{\partial p}{\partial y} - \dfrac{kT}{q}\dfrac{\partial \nu_+}{\partial y}\right) = 0 \end{cases} \tag{2.7}$$

Напряженность электрического поля в точке с координатой y, выраженный через распределение ионного заряда и приложенного напряжения, записывается в следующем виде [40]:

$$E(y,t) = \frac{q}{\varepsilon_\perp}\left[\int_{-\frac{d}{2}}^{y} \nu(y',t)dy' - \frac{\gamma}{d}\int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}}\left(\int_{-\frac{d}{2}}^{y'} \nu(y'',t)dy''\right)dy'\right] - \gamma\frac{U_0}{d} - \frac{\gamma-1}{\varepsilon_\perp}\sigma_1 q \quad (2.8)$$

где $\gamma = 1/[1 + 2(\lambda\varepsilon_\perp/d\varepsilon_S)$ представляет собой параметр, который зависит от диэлектрических свойств поверхностного слоя; U_0 – напряжение, приложенное к ячейке; σ_1 – поверхностная плотность ионов, адсорбированных на поверхности подложки с координатой $y = -d/2$.

2.4 Кинетика адсорбции ионов в жидкокристаллической ячейке с блокирующими электродами

При термодинамическом равновесии, в отсутствие внешнего поля, ионы равномерно распределены в объеме жидкого кристалла с концентрацией $\nu_{0+}(y,0) = \nu_{0-}(y,0) = \nu_0$. Ионная рекомбинация не рассматривается, даже в том случае, когда ее можно легко учесть. Это предположение подтверждается экспериментальными данными, приведенными в [41]. В этой работе показано, что концентрация ионов не зависит от температуры.

Рассмотрим случай, когда существует адсорбция ионов на поверхностях ориентирующих слоев. Тогда должно сохраняться общее количество ионов. Математически это выражается следующей системой уравнений:

$$\begin{cases} \sigma_{1+}(t) + \sigma_{2+}(t) + \int\limits_{-d/2}^{d/2} \nu_+(y,t)dy = \nu_0 d + \sigma_{1+}(0) + \sigma_{2+}(0) \\ \sigma_{1-}(t) + \sigma_{2-}(t) + \int\limits_{-d/2}^{d/2} \nu_-(y,t)dy = \nu_0 d + \sigma_{1-}(0) + \sigma_{2-}(0) \end{cases} \tag{2.9}$$

где $\sigma_{1\pm}$ и $\sigma_{2\pm}$ — это поверхностные плотности положительных и отрицательных ионов, адсорбированных на поверхностях с координатами $y = \mp d/2$, соответственно. А также должен выполняться закон сохранения заряда[42]:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \nu_+}{\partial t} - \mu_+ \dfrac{\partial}{\partial y}\left(\nu_+ \dfrac{\partial p}{\partial y} + \dfrac{kT}{q}\dfrac{\partial \nu_+}{\partial y}\right) = 0 \\ \dfrac{\partial \nu_-}{\partial t} + \mu_- \dfrac{\partial}{\partial y}\left(\nu_- \dfrac{\partial p}{\partial y} - \dfrac{kT}{q}\dfrac{\partial \nu_-}{\partial y}\right) = 0 \end{cases} \tag{2.10}$$

В случае, когда существует адсорбция на поверхностях ориентирующих слоев, следует переписать граничные условия (2.7), учитывая этот эффект. Они примут следующий вид [43]:

$$\begin{cases} j_{\pm}\left(-\frac{d}{2},t\right) = \pm q\frac{d\sigma_{1\pm}}{dt} = \pm q(K_{S\pm}\nu_{\pm} - \frac{1}{\tau_{S\pm}}\sigma_{1\pm}) \\ j_{\pm}\left(\frac{d}{2},t\right) = \pm q\frac{d\sigma_{2\pm}}{dt} = \pm q(K_{S\pm}\nu_{\pm} - \frac{1}{\tau_{S\pm}}\sigma_{2\pm}) \end{cases} \quad (2.11)$$

где $K_{S\pm}$ и $\tau_{S\pm}$ — это параметры, описывающие процесс адсорбции на подложках и определяемые из уравнения (1.77). С учетом граничных условий (2.11) и условия сохранения общего количества ионов (2.9) можно переписать систему (2.10) следующим образом:

$$\begin{cases} \frac{\partial\nu_+}{\nu_0\partial t} = \mu_+\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\nu_+}{\nu_0}\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{kT}{\nu_0 q}\frac{\partial\nu_+}{\partial y}\right) \\ \frac{\partial\nu_-}{\nu_0\partial t} = \mu_-\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\nu_-}{\nu_0}\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{kT}{\nu_0 q}\frac{\partial\nu_-}{\partial y}\right) \end{cases} \quad (2.12)$$

При $t \to \infty$ система достигнет равновесного состояния, процесс адсорбции прекратится, т.е. $d\sigma_{\pm}/dt = 0$, тогда поверхностные плотности адсорбированных на подложках ионов:

$$\begin{cases} \sigma_{1\pm}(t \to \infty) = \tau_{S\pm}K_{S\pm}\nu_{\pm}(-\frac{d}{2}, t \to \infty) \\ \sigma_{2\pm}(t \to \infty) = \tau_{S\pm}K_{S\pm}\nu_{\pm}(\frac{d}{2}, t \to \infty) \end{cases} \quad (2.13)$$

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе были детально рассмотрены эффекты, возникающие в сегнетоэлектрических жидких кристаллах. Были приведены методы численного расчета электрических и оптических свойств жидкокристаллических ячеек, заполненных сегнетоэлектрическими жидкими кристаллами.

В результате была создана модель численного расчета времени отклика сегнетоэлектрической жидкокристаллической ячейки, учитывающая концентрацию ионов как в объеме, так и адсорбированных на поверхностях ориентирующих слоев. Данная модель включает в себя:

1. Метод расчета прохождения поляризованного светового пучка через слой поверхностно стабилизированного сегнетоэлектрического жидкого кристалла, заключенного между стеклянными подложками;

2. Метод расчета динамики переключения поля директора поверхностно стабилизированного сегнетоэлектрического жидкого кристалла в ячейке с блокирующим электродом во внешнем знакопеременном электрическом поле;

3. Метод расчета динамики пространственного распределения концентрации ионов.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Мигранова Д.Н., Кондратьев Д.В., Мигранов Н.Г. Исследование устойчивости равновесных состояний наноматериалов на основе сегнетоэлектрических жидких кристаллов во внешнем электрическом поле // Жидкие кристаллы и их практическое использованиеЖидкие кристаллы и их практическое использование. 2015. Т. 15, № 3. С. 125–133.
2. А.В. К. Раскрутка спирального сегнетоэлектрического жидкого кристалла граничными поверхностями // Жидкие кристаллы и их практическое использованиеЖидкие кристаллы и их практическое использование. 2015. Т. 14, № 1. С. 22–27.
3. Lowe A.C., Yang D. Fundamentals of Liquid Crystal Devices. 2006.
4. Dierking I. Handbook of liquid crystals // Liq. Cryst. Today. 2015. Т. 24, № 1. С. 25–27.
5. Palffy-Muhoray P., Lee M.A., Petschek R.G. Ferroelectric nematic liquid crystals: Realizability and molecular constraints // Phys. Rev. Lett. 1988. Т. 60, № 22. С. 2303–2306.
6. Sengupta A. 2013 Topological Microfluidics. 2013. 153 с.
7. Stannarius R. Structures and properties of liquid crystals , by Lev M. Blinov // Liquid Crystals Today. 2012. Т. 21, № 4. 79-80 с.
8. Meyer R.B. и др. Ferroelectric liquid crystals, // J. Phys. Lettres. 1975. Т. 36, № Ferroelectric liquid crystals. С. 69–71.
9. C.K. I. Liquid Crystals. 2007. 383 с.
10. Sonin A.A. The Surface Physics of Liquid Crystals. 1995.
11. Dierking I. A review of polymer-stabilized ferroelectric liquid crystals // Materials (Basel). 2014. Т. 7, № 5. С. 3568–3587.
12. Тракимус Ю.В. Основы вариационного исчисления. Новосибирск, 2016. 73 с.
13. Ge Z., Wu T.X. Modeling of Liquid Crystal Display and Photonic Devices // M.S.

Electr. Eng. 2002.

14. Algorri J.F. и др. Modeling electro-optical response of nematic liquid crystals by numerical methods // Opt. Pura y Apl. 2013. Т. 46, № 4. С. 327–336.
15. Algorri J.F. и др. Modeling electro−optical response of nematic liquid crystals by numerical methods. Т. 46, № 4. С. 327−336.
16. Jiao M. и др. Alignment layer effects on thin liquid crystal cells // Appl. Phys. Lett. 2008. Т. 92, № 6. С. 061102.
17. Do Y.R., Bae J.W., Introduction I. The Liquid Crystal Display Story. 2014. Т. 88. 4660-4665 с.
18. Heilmeier G.H., Zanoni L.A., Barton L.A. Dynamic scattering in nematic liquid crystals // Appl. Phys. Lett. 1968. Т. 13, № 1. С. 46–47.
19. Naemura S. Electrical Properties of Liquid-Crystal Materials for Display Applications // J. Chem. Inf. Model. 2013. Т. 53. С. 1689–1699.
20. Barnik M.I. и др. Electrohydrodynamic instability in nematic liquid crystals. 1975. Т. 42, № 3. С. 550–553.
21. Schadt M., Helfrich W. Voltage-dependent optical activity of a twisted nematic liquid crystal // Appl. Phys. Lett. 1971. Т. 18, № 4. С. 127–128.
22. Shukla R.K., Raina K.K., Haase W. Fast switching response and dielectric behaviour of fullerene/ferroelectric liquid crystal nanocolloids // Liq. Cryst. 2014. Т. 41, № 12. С. 1726–1732.
23. Korniychuk P.P. и др. Transient and steady electric currents through a liquid crystal cell // Liq. Cryst. 2010. Т. 37, № 9. С. 1171–1181.
24. Briere G., Gaspard F., Herino R. such as: 1. 1970. Т. 9. С. 285–288.
25. Hung H.-Y. и др. Analysis of metal ion impurities in liquid crystals using high resolution inductively coupled plasma mass spectrometry // Anal. Methods. 2012. Т. 4, № 11. С. 3631.
26. Naemura S., Sawada A. Ionic Conduction in Nematic and Smectic a Liquid Crystals // Mol. Cryst. Liq. Cryst. 2003. Т. 400, № December 2012. С. 79–96.
27. Murakami S., Naito H. Electrode and Interface Polarizations in Nematic Liquid

Crystal Cells // Jpn. J. Appl. Phys. 1997. Т. 36, № Part 1, No. 4A. С. 2222–2225.

28. Yasuda Y. и др. Observation of adsorption and desorption processes of impurity ions in nematic liquid crystal cells // Mol. Cryst. Liq. Cryst. Sci. Technol. Sect. A. Mol. Cryst. Liq. Cryst. 1995. Т. 263, № 1. С. 559–565.
29. Савицкая Т.А., Д.А. К., Т.А. Ш. Коллоидная химия: строение двойного электрического слоя, получение и устойчивость дисперсных систем: пособие. 2011. 82 с.
30. Garbovskiy Y. Switching between purification and contamination regimes governed by the ionic purity of nanoparticles dispersed in liquid crystals // Appl. Phys. Lett. 2016. Т. 108, № 12. С. 121104.
31. Garbovskiy Y. Kinetics of Ion-Capturing/Ion-Releasing Processes in Liquid Crystal Devices Utilizing Contaminated Nanoparticles and Alignment Films // Nanomaterials. 2018. Т. 8, № 2. С. 59.
32. Garbovskiy Y. Time-dependent electrical properties of liquid crystal cells: unravelling the origin of ion generation // Liq. Cryst. Taylor & Francis, 2018. Т. 00, № 00. С. 1–9.
33. Garbovskiy Y. Adsorption/desorption of ions in liquid crystal nanocolloids: the applicability of the Langmuir isotherm, impact of high electric fields and effects of the nanoparticle’s size // Liq. Cryst. 2016. Т. 43, № 6. С. 853–860.
34. Garbovskiy Y. The purification and contamination of liquid crystals by means of nanoparticles. The case of weakly ionized species // Chem. Phys. Lett. Elsevier B.V., 2016. Т. 658. С. 331–335.
35. Pereira M.S.S. и др. A molecular dynamics study of ferroelectric nanoparticles immersed in a nematic liquid crystal. // Eur. Phys. J. E. Soft Matter. 2010. Т. 31, № 1. С. 81–87.
36. Garbovskiy Y., Glushchenko I. Nano-Objects and Ions in Liquid Crystals: Ion Trapping Effect and Related Phenomena // Crystals. 2015. Т. 5, № 4. С. 501–533.
37. Kravchuk R., Yaroshchuk O. FILLING INITIATED ION TRANSPORT PROCESSES 2 . EXPERIMENTAL PART. 2002. Т. 384, № Lcd. С. 111–119.

38. Hurwitz H., Jones R.C. A New Calculus for the Treatment of Optical SystemsII Proof of Three General Equivalence Theorems // J. Opt. Soc. Am. 1941. T. 31, № 7. C. 493.
39. Sprokel G.J. Resistivity, Permittivity and the Electrode Space Charge of Nematic Liquid Crystals // Mol. Cryst. Liq. Cryst. 1973. T. 22, № 3–4. C. 249–260.
40. Evangelista L.R., Group F. T H E L I Q U I D C R Y S TA L S B O O K S E R I E S ADSORPTION PHENOMENA AND ANCHORING ENERGY IN NEMATIC LIQUID CRYSTALS Giovanni Barbero. 2006.
41. Lin F.-C. и др. Dopant Effect and Cell-Configuration-Dependent Dielectric Properties of Nematic Liquid Crystals // Adv. Condens. Matter Phys. 2013. T. 2013. C. 1–5.
42. Trufanov A.N. и др. Electrohydrodynamic instability in homeotropically oriented layers of nematic liquid crystals. 1981. T. 53, № July 1980. C. 355–361.
43. Maximus B. и др. Ion transport in SSFLCD’s // Ferroelectrics. 1991. T. 121, № 1. C. 103–112.