

ВКЛАД ПРИМЕСНЫХ ИОНОВ В ПРОСТРАНСТВЕННО-ВРЕМЕННОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЛОКАЛЬНОГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ В НЕМАТИЧЕСКОЙ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ ЯЧЕЙКЕ

А.М. Гавриляк¹, М.В. Гавриляк^{1,2}, В.А. Боронин^{1,2}, Ф.В. Подгорнов¹

¹Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация

²Институт электрофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, Российская Федерация

E-mail: gavriliakam@susu.ru

Аннотация. Исследовано влияние примесных ионов на пространственно-временное распределение локального электрического поля в планарной жидкокristаллической (ЖК) ячейке с блокирующими электродами. Проведено численное моделирование динамики переключения директора нематического жидкого кристалла (НЖК) с использованием системы уравнений Пуассона–Нернста–Планка и нелинейного уравнения Эриксона–Лесли при управляющем электрическом напряжении, превышающем напряжение перехода Фредерикса. Предложен метод учета влияния эффективной диэлектрической проницаемости, связанной с переориентацией директора НЖК на динамику электродиффузии примесных ионов. Спектральный анализ локального электрического поля выявил наличие высших гармоник, обусловленных пространственной неоднородностью распределения ионных примесей. Показано, что наличие данных гармоник в спектральном составе локального электрического поля приводит к нелинейности динамики переключения директора НЖК.

Ключевые слова: нематические жидкие кристаллы; примесные ионы; блокирующие электроды; нелинейные искажения; эффективная диэлектрическая проницаемость; локальное электрическое поле.

Введение

В работе устройств, основанных на электрооптическом переключении жидких кристаллов (ЖК), как правило, предполагается, что электрическое поле внутри слоя жидкого кристалла равно внешнему электрическому полю. Однако примесные ионы в ЖК-слое оказывают существенное влияние на динамику электрооптического переключения и на параметры/характеристики ЖК устройств, а также могут стать причиной различных негативных эффектов (мерцание, залипание изображения, изменение времени электрооптического переключения) [1]. Кроме того, примесные ионы могут приводить к таким нежелательным последствиям для ЖК-устройств, как электрогидродинамическая нестабильность [2–5].

В ряде работ было показано, что необходимо рассматривать электрическое поле внутри ЖК-слоя как результат перераспределения внешнего управляющего поля между компонентами ЖК-ячейки [6, 7]. В данных работах было доказано, что форма, амплитуда и спектральный состав электрического поля внутри ячейки существенно отличается от внешнего приложенного электрического поля, что оказывает влияние на форму электрооптического переключения данных ячеек [8–10].

Для расчета влияния ионов на характеристики ЖК-ячеек [11, 12] была предложена упрощенная дрейфовая модель переноса ионов в ЖК в приближении малого диффузионного тока, и исследовано влияние примесных ионов на динамику переключения ЖК под воздействием постоянного электрического поля. Было доказано перераспределение приложенного напряжения между слоем ЖК, обусловленное накоплением ионов на границе блокирующего полимерного слоя.

В то же время в случае переменного электрического поля исследовано влияние примесных ионов на формирование двойных электрических слоев [13–15], поляризацию пространственного

заряда [16, 17], а также процессы генерации/рекомбинации ионов [18–20]. Основываясь на модели Пуассона–Нернста–Планка, в предположении малого приложенного синусоидального напряжения ($V < \frac{k_B T}{ze}$, e – элементарный заряд, k_B – постоянная Больцмана, z – валентность ионов, T – температура [21]), были рассчитаны комплексные спектры диэлектрической проницаемости с учетом влияния ионных примесей [22, 23]. В рамках данной модели предполагается, что диэлектрическая проницаемость постоянна, так как приложенное электрическое напряжение существенно меньше перехода Фредерикса (V_{th}). Данное упрощение не выполняется в случае больших приложенных электрических напряжений ($V > V_{th}$), так как из-за пространственно-временного переключения директора жидкого кристалла необходимо учитывать анизотропию диэлектрической проницаемости ЖК и ее вклад в нелинейные диэлектрические свойства ЖК-ячеек.

Цель данной работы – моделирование вклада примесных ионов и анизотропии диэлектрической проницаемости нематического жидкого кристалла (НЖК) в пространственно-временное распределение директора и локального электрического поля в ячейке, управляемой синусоидальным электрическим сигналом с амплитудой, превышающей порог Фредерикса.

Теоретическая модель

Расчет локального электрического поля в НЖК-ячейке

В данной работе используется одномерная модель, описывающая планарно-ориентированную ЖК-ячейку, заполненную нематическим жидким кристаллом. Предполагается, что в объеме жидкого кристалла содержатся только одновалентные ионы.

Для построения пространственно-временного распределения концентрации $p(x, t)$ положительных и $n(x, t)$ отрицательных ионов, а также напряженности локального электрического поля $E(x, t)$ применялась система уравнений Пуассона–Нернста–Планка [24–26]:

$$e \frac{\partial p(x, t)}{\partial t} = - \frac{\partial J_p(x, t)}{\partial x}, \quad (1)$$

$$e \frac{\partial n(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial J_n(x, t)}{\partial x}, \quad (2)$$

где $J_p(x, t)$ и $J_n(x, t)$ – плотности потока положительных и отрицательных ионов.

В рамках данного подхода предполагалось отсутствие конвективных течений ЖК, поэтому можно записать, что каждый из токов $J_p(x, t)$ и $J_n(x, t)$ состоит из дрейфового и диффузионного слагаемых:

$$J_p(x, t) = e\mu_p p(x, t)E(x, t) - eD_p \frac{\partial p(x, t)}{\partial x}, \quad (3)$$

$$J_n(x, t) = e\mu_n n(x, t)E(x, t) + eD_n \frac{\partial n(x, t)}{\partial x}, \quad (4)$$

$$\frac{\partial E(x, t)}{\partial x} = \frac{e}{\varepsilon_0 \varepsilon(t)} (p(x, t) - n(x, t)), \quad (5)$$

где D_n, D_p – коэффициенты диффузии отрицательных и положительных ионов, μ_n, μ_p – подвижности отрицательных и положительных ионов, ε – диэлектрическая проницаемость ЖК. Полагается, что коэффициенты диффузии и подвижности ионов являются постоянными и не зависят от приложенного электрического напряжения, а также равны для положительных и отрицательных ионов $D_n = D_p = D_{n,p}$ и $\mu_n = \mu_p = \mu_{n,p}$. Соотношение Эйнштейна между коэффициентами диффузии и подвижностями положительных и отрицательных ионов: $\mu_{n,p} = \frac{D_{n,p}}{k_B T}$.

В качестве начальных и граничных условий предполагается, что начальные концентрации положительных и отрицательных ионов равны между собой и распределены равномерно по ячейке. В данной модели считается, что отсутствуют электрохимические реакции на управляющих электродах, которые являются блокирующими:

$$J_p(0, t) = J_p(d, t) = 0, \quad (6)$$

$$J_n(0, t) = J_n(d, t) = 0, \quad (7)$$

где d – толщина ячейки.

В дальнейших расчетах к электродам приложено синусоидальное электрическое напряжение $V(t) = V_0 \sin(\omega t)$ с амплитудой $V_0 = 2\text{ В}$, превышающей пороговое напряжение Фредерикса для

большинства НЖК (напр. смеси E7 [27]) и частотой $\nu = \frac{\omega}{2\pi} = 1\text{ Гц}$, где ω – циклическая частота.

Выбор синусоидального сигнала обусловлен тем, что в дальнейшем полученные результаты будут использованы для получения комплексного спектра нелинейной диэлектрической проницаемости.

Расчет динамики переключения директора НЖК

В данной работе рассматривается планарно-ориентированный НЖК (анизотропия диэлектрической проницаемости $\Delta\epsilon > 0$), заключенный в ячейку, состоящую из двух стеклянных подложек с нанесенными на них прозрачными электродами (например, индий оловянный оксид – ИТО). Для ориентации НЖК на прозрачные электроды обычно наносится полимерный ориентирующий слой, натертый в одном направлении. Схематическое изображение НЖК ячейки показано на рис. 1, а.

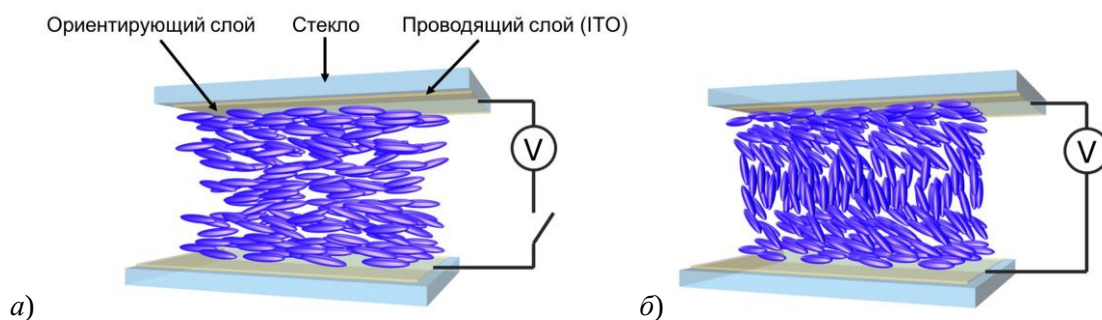


Рис. 1. Схематическое представление ЖК-ячейки, заполненной нематиком: а) приложенное электрическое напряжение $V = 0$, б) $V \neq 0$

При моделировании предполагалось, что энергия сцепления на ориентирующих слоях является бесконечно большой, а угол преднаклона директора НЖК на поверхности ориентирующего слоя полагался равным $\theta_{tilt} = 1^\circ$. В рамках данного предположения во внешнем электрическом поле директор НЖК не меняет своей ориентации около полимерного слоя (см. рис. 1, б).

Для исследования динамики переключения молекул НЖК используется уравнение Эйлера–Лагранжа:

$$\frac{\delta f}{\delta \theta} = \frac{\partial f}{\partial \theta} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial f}{\partial \theta'} \right) = \gamma \frac{\partial f}{\partial t}, \quad (8)$$

где f – плотность свободной энергии, являющаяся суммой электрической и упругой частей: $f = f_{упр} + f_{эл}$, γ – вращательная вязкость ЖК, θ – угол между директором и нормалью к поверхности ячейки.

Ниже приведены формулы для электрической и упругой частей плотности свободной энергии:

$$f_{эл} = -\frac{1}{2} \epsilon_0 \Delta\epsilon E^2 \sin^2(\theta(x)), \quad (9)$$

$$f_{упр} = \frac{1}{2} K_{11} \cos^2(\theta(x)) \left(\frac{d\theta}{dx} \right)^2 + \frac{1}{2} K_{33} \sin^2(\theta(x)) \left(\frac{d\theta}{dx} \right)^2, \quad (10)$$

где K_{11}, K_{33} – модули упругости Франка, ε_0 – электрическая постоянная, $\Delta\varepsilon = \varepsilon_{\parallel} - \varepsilon_{\perp}$ – анизотропия относительной диэлектрической проницаемости.

Минимизация плотности свободной энергии приводит к уравнению Эриксона–Лесли:

$$\left(K_{11} \cos^2(\theta(x)) + K_{33} \sin^2(\theta(x)) \right) \frac{d^2\theta}{dx^2} + \frac{1}{2} (K_{33} - K_{11}) \sin(2\theta(x)) \left(\frac{d\theta}{dx} \right)^2 + \frac{1}{2} \Delta\varepsilon \sin(2\theta(x)) E^2 = \gamma \frac{d\theta}{dt}. \quad (11)$$

В общем случае модули упругости Франка НЖК не равны друг другу, что может привести к нелинейности и отсутствию симметрии при переориентации директора. Уравнение (11) можно упростить, приравняв $K_{33} = K_{11}$, для исключения нелинейного вклада переориентации ЖК.

Определение эффективной диэлектрической проницаемости

Поскольку молекулы НЖК анизотропны, то его диэлектрическая проницаемость вдоль директора ($\varepsilon_{\parallel}$) и в направлении, перпендикулярном к нему ($\varepsilon_{\perp}$), существенно разные. В связи с этим из-за переориентации молекул ЖК под действием внешнего электрического поля происходит изменение диэлектрической проницаемости вдоль направления приложенного поля. Из-за неоднородной по пространству ориентации директора можно ввести эффективную диэлектрическую проницаемость, определенную как среднюю диэлектрическую проницаемость по пространству вдоль выделенного направления [28, 29]:

$$\varepsilon(t) = \frac{1}{d} \int_0^d (\varepsilon_{\perp} + \Delta\varepsilon \sin^2(\theta(x, t))) dx \quad (12)$$

Около ориентирующего слоя предполагается, что ориентации директора НЖК не изменяется под действием приложенного электрического поля из-за бесконечности энергии сцепления. В то же время из-за малости толщины данного приповерхностного слоя его вкладом в эффективную диэлектрическую проницаемость можно пренебречь.

Компьютерное моделирование

Для моделирования динамики пространственно-временного распределения концентрации примесных ионов, электрического поля и угла наклона директора НЖК система уравнений (1)–(5), (11) и (12) численно решалась в пакете MATLAB с использованием итерационного метода конечных разностей.

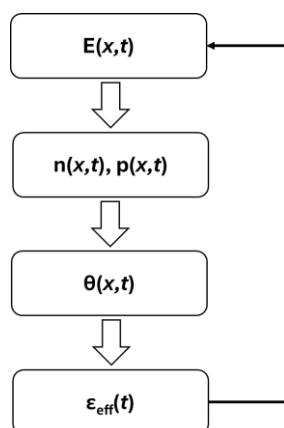


Рис. 2. Блок-схема алгоритма расчета динамики переключения ЖК

Таблица 1 Параметры смеси E7	
K_{11} , пН	11
K_{33} , пН	18
$\Delta\varepsilon$	11
γ , Па·с	0,234
$\varepsilon_{\perp}$	6
$\varepsilon_{\parallel}$	17
$D_{p,n}$, м ² /с	$1 \cdot 10^{-11}$

Графический алгоритм расчета рассматриваемой модели представлен на рис. 2. На первом этапе моделируется распределение электрического поля в ячейке, на втором этапе рассчитывается распределение концентраций положительных и отрицательных ионов, далее следует расчет распределения угла наклона директора молекул НЖК и в конечном итоге рассчитывается временная зависимость эффективной диэлектрической проницаемости ЖК. При расчете использовались материальные параметры НЖК смеси E7 (табл. 1), а толщина ячейки предполагалась равной 6 мкм.

Кроме того, при расчете предполагалось, что отсутствуют какие-либо дефекты текстуры НЖК, а температура оставалась постоянной и равной 298 К, таким образом материальные параметры не меняются.

Результаты и обсуждение

По результатам численного решения систем уравнений (1)–(5), (11) и (12), в приложенном электрическом поле примесные ионы, присутствующие в жидком кристалле, концентрируются около электродов, что влияет на перераспределение напряженности электрического поля внутри ячейки (рис. 3). Из графиков на данном рисунке видно, что увеличение концентрации ионов от $n = p = 1 \times 10^{19} \text{ м}^{-3}$ до $1 \times 10^{21} \text{ м}^{-3}$ приводит к уменьшению напряженности электрического поля в середине ячейки, а в области около электродов она увеличивается более чем на порядок. Так, например, при концентрации $1 \times 10^{21} \text{ м}^{-3}$ значение напряженности электрического поля в центре уменьшилось до $E = 22,1 \text{ кВ/м}$. При концентрации примесных ионов, не превышающей $n = p \leq 1 \times 10^{19} \text{ м}^{-3}$, в центре ячейки не наблюдается пространственное перераспределение электрического поля, а его напряженность равна $E = 32,7 \text{ кВ/м}$.

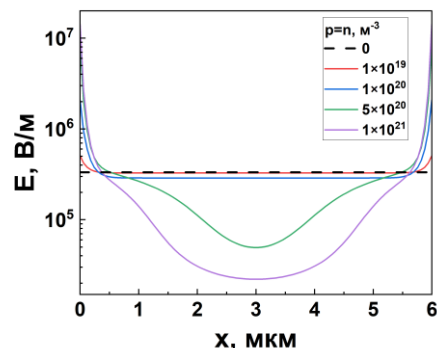


Рис. 3. Пространственное распределение напряженности локального электрического поля в НЖК ячейке при разных значениях концентраций ионов при $t = \tau/4$, где τ – период колебаний; Частота и амплитуда приложенного синусоидального сигнала $\nu = 1 \text{ Гц}$ и $V_0 = 2 \text{ В}$ соответственно

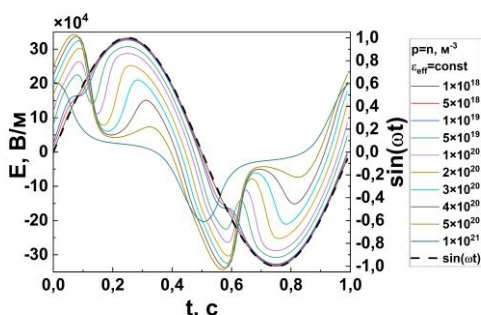


Рис. 4. Временная зависимость напряженности локального электрического поля в середине ячейки $x = d/2$ (в течение одного периода приложенного сигнала) при разных значениях концентрации примесных ионов. Частота и амплитуда приложенного синусоидального сигнала $\nu = 1 \text{ Гц}$ и $V_0 = 2 \text{ В}$ соответственно

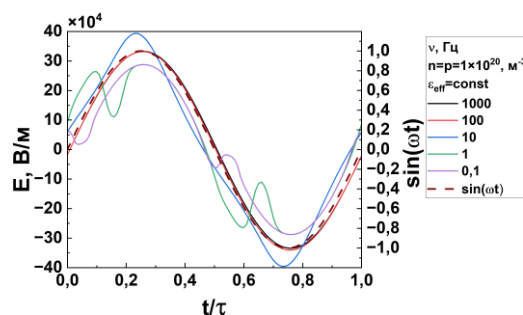


Рис. 5. Зависимость напряженности локального электрического поля (в середине ячейки $x = d/2$) от нормированного на период времени. Данный график взят за один период приложенного поля, концентрация примесных ионов $1 \times 10^{21} \text{ м}^{-3}$, амплитуда приложенного синусоидального напряжения $V_0 = 2 \text{ В}$

При увеличении концентрации ионов временное распределение напряженности поля в середине ячейки принимает несинусоидальный вид (рис. 4), который проявляется в виде дополнительного пика в начале каждого полупериода. Величина пика растет при увеличении концентрации. Также амплитуда напряженности поля начинает уменьшаться при концентрации $5 \times 10^{19} \text{ м}^{-3}$. При концентрации $1 \times 10^{21} \text{ м}^{-3}$ электрическое поле, создаваемое ионами $\vec{E}_{\text{ион}}$, имеет доминирующий вклад в локальное электрическое поле $\vec{E}_{\text{лок}}$ ячейки. Здесь мы предполагаем, что $\vec{E}_{\text{ион}}$, $\vec{E}_{\text{лок}}$ и приложенное электрическое поле $E_{\text{пр}} = V/d$ связаны соотношением

$$\vec{E}_{\text{лок}} = \vec{E}_{\text{пр}} + \vec{E}_{\text{ион}}. \quad (13)$$

Временная зависимость локального электрического поля $\vec{E}_{\text{лок}}$ значительно отличается от формы приложенного сигнала $\vec{E}_{\text{пр}}$.

Отклонение динамики электрического поля в середине ячейки в присутствии большой концентрации ионов имеет частотную дисперсию (рис. 5). Таким образом, для низких частот (0,1 Гц и 1 Гц) сигнал значительно отклоняется от синусоидальной формы, проявляя дополнительные пики, которые отсутствуют при частотах более 100 Гц. Данное поведение электрического поля в ячейке можно объяснить характерным временем электродиффузии ионов, при котором ионы достигают противоположного электрода и начинают накапливаться на нем.

Из рис. 5 также видно, что при низких частотах ($\nu \leq 1$ Гц) максимум напряженности локального электрического поля достигается раньше, чем при высоких частотах, что указывает на существенные различия в динамике перераспределения поля в зависимости от частоты приложенного электрического напряжения.

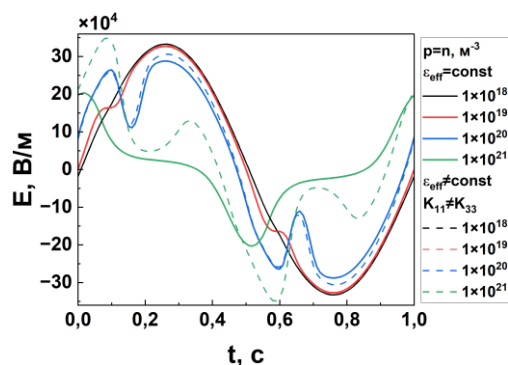


Рис. 6. Сравнение временных зависимостей напряженности локального электрического поля в середине ЖК-ячейки (за один период приложенного электрического синусоидального сигнала) при различных концентрациях примесных ионов, с учетом (пунктирные линии) и без учета (сплошные линии) зависимости эффективной диэлектрической проницаемости от ориентации директора НЖК для $K_{11} \neq K_{33}$

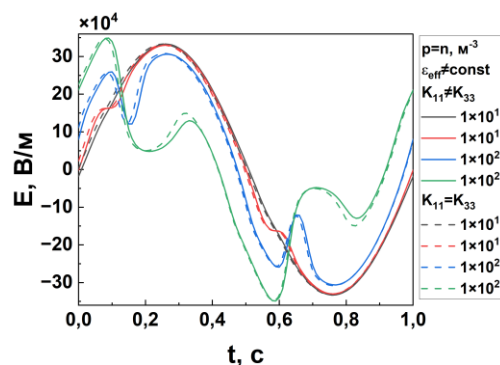


Рис. 7. Сравнение временных зависимостей напряженности локального электрического поля в середине ЖК-ячейки (за один период приложенного сигнала) при разных значениях концентрации примесных ионов с учетом эффективной диэлектрической проницаемости $\epsilon_{eff} \neq \text{const}$ в двух случаях: при различных $K_{11} \neq K_{33}$ и одинаковых $K_{11} = K_{33}$ модулях упругости Франка

На рис. 6 представлено сравнение временных зависимостей напряженности локального электрического поля в центре ЖК-ячейки ($x = d/2$) с учетом и без учета изменения эффективной диэлектрической проницаемости ϵ_{eff} от угла наклона директора НЖК при различных концентрациях примесных ионов. При концентрации ионов $n = p = 1 \times 10^{18} \text{ м}^{-3}$ зависимость напряженности локального электрического поля от времени не отличается от формы приложенного сигнала, но при увеличении концентрации можно наблюдать изменение формы функциональной зависимости кривой напряженности локального электрического поля. Как видно из данного графика, концентрация примесных ионов влияет на спектральный состав локального электрического поля, что должно приводить к нелинейности электрооптического отклика НЖК ячейки.

Учет влияния переориентации директора НЖК на эффективную диэлектрическую проницаемость показал, что при больших концентрациях ионов $n, p \geq 1 \times 10^{21} \text{ м}^{-3}$ происходит увеличение амплитуды первой гармоники при неизменности амплитуд высших гармоник.

Моделирование локального электрического поля в ячейке при различных параметрах жидкого кристалла в случае различных $K_{11} \neq K_{33}$ и одинаковых $K_{11} = K_{33}$ модулях упругости Франка (рис. 7) показало, что в обоих случаях присутствует значительная нелинейность электрического поля. Наибольшее влияние коэффициентов упругости Франка на распределение локального электрического поля происходит при концентрации ионов $n, p \geq 1 \times 10^{21} \text{ м}^{-3}$, что в целом согласуется с результатами, представленными на рис. 6, и связано с перерасчетом эффективной диэлектрической проницаемости.

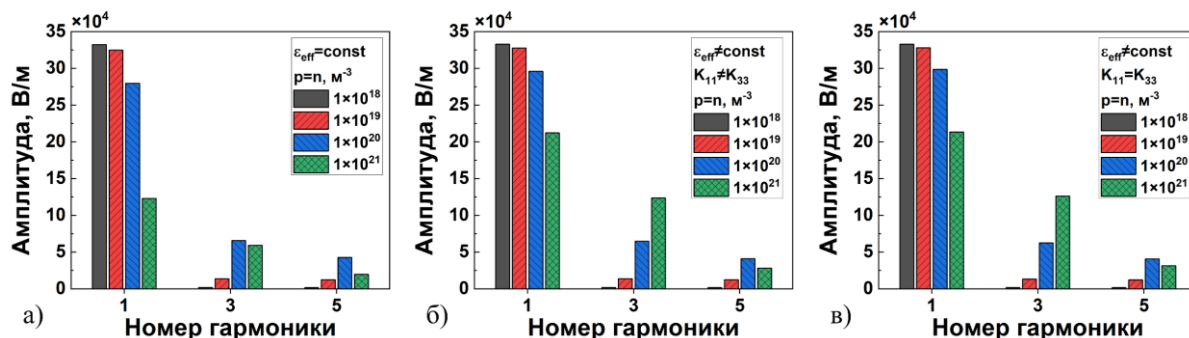


Рис. 8. Зависимость амплитуды локального электрического поля 1-й, 3-й и 5-й гармоник от концентрации примесных ионов в случае а) постоянной эффективной диэлектрической проницаемости $\varepsilon_{eff} = \text{const}$, б) эффективной диэлектрической проницаемости, зависящей от ориентации директора при $K_{11} \neq K_{33}$, в) $K_{11} = K_{33}$

Примесные ионы в ЖК-ячейке вызывают пространственные искажения электрического поля, что приводит к изменению его спектрального состава. Для количественного анализа вклада высших гармоник в локальное электрическое поле удобно использовать диаграммы, полученные с помощью быстрого преобразования Фурье, отражающие зависимость амплитуды высших гармоник от концентрации примесных ионов (рис. 8). Из данных диаграмм следует, что основная гармоника вносит доминирующий вклад во временную зависимость электрического поля. С увеличением концентрации примесных ионов основная гармоника уменьшается, однако в то же время наблюдается рост амплитуды 3-й и 5-й гармоник, что указывает на усиление нелинейных эффектов. Влияние учета анизотропии ЖК на амплитуду электрического поля наиболее значимо при больших концентрациях ($n, p > 1 \times 10^{21} \text{ м}^{-3}$), независимо от того, равны ли друг другу коэффициенты упругости Франка ($K_{11} = K_{33}$) или нет ($K_{11} \neq K_{33}$). Отсутствие четных гармоник свидетельствует о centrosymmetry исследуемой системы относительно знака подаваемого электрического напряжения.

Для количественной оценки отклонения формы локального электрического поля от идеальной синусоиды рассчитаны коэффициенты гармонических искажений (K_Γ):

$$K_\Gamma = \frac{\sqrt{E_2^2 + E_3^2 + E_4^2 + \dots + E_n^2}}{E_1}, \quad (14)$$

где E_n – амплитуда n -й гармоники электрического поля.

Таблица 2
Коэффициенты гармонических искажений при различных концентрациях ионных примесей для случаев постоянной эффективной диэлектрической проницаемости $\varepsilon_{eff} = \text{const}$ и эффективной диэлектрической проницаемости, зависящей от ориентации директора при $K_{11} \neq K_{33}$ и $K_{11} = K_{33}$

	$n, p = 10^{18} \text{ м}^{-3}$	$n, p = 10^{19} \text{ м}^{-3}$	$n, p = 10^{20} \text{ м}^{-3}$	$n, p = 10^{21} \text{ м}^{-3}$
$\varepsilon_{eff} = \text{const}$	0,815 %	6,402 %	29,155 %	50,879 %
$\varepsilon_{eff} \neq \text{const}, K_{11} \neq K_{33}$	0,790 %	6,275 %	26,882 %	60,464 %
$\varepsilon_{eff} \neq \text{const}, K_{11} = K_{33}$	0,767 %	6,132 %	25,943 %	61,414 %

Анализ коэффициентов гармонических искажений показал (см. табл. 2), что при концентрации примесных ионов $n, p \leq 1 \times 10^{20} \text{ м}^{-3}$ отклонение от синусоидального сигнала уменьшается при учете эффективной диэлектрической проницаемости, а также с исключением нелинейностей, вызванных разницей в модулях упругости Франка $K_{11} \neq K_{33}$. Данный эффект отчетливо выражен при концентрации примесных ионов $n, p = 1 \times 10^{20} \text{ м}^{-3}$, где коэффициент гармонических искажений уменьшился более чем на 3 %. Но при больших концентрациях $n, p \geq 1 \times 10^{21} \text{ м}^{-3}$ наблюдается обратный эффект. При учете эффективной диэлектрической проницаемости при больших концентрациях примесных ионов амплитуда основной гармоники также увеличивается.

Моделирование динамики переключения директора НЖК

Результаты моделирования показали, что перераспределение локального электрического поля приводит к изменению динамики переориентации директора ЖК в присутствии ионов. На рис. 9 представлены результаты численного моделирования пространственно-временного распределения угла наклона молекул ЖК, рассчитанные для двух случаев: а) в отсутствие и б) в присутствии примесных ионов. Включение в моделирование ионов приводит к перераспределению электрического поля внутри ячейки и уменьшению максимального угла наклона. Кроме того, наблюдаются изменения в характере пространственно-временной динамики переориентации молекул.

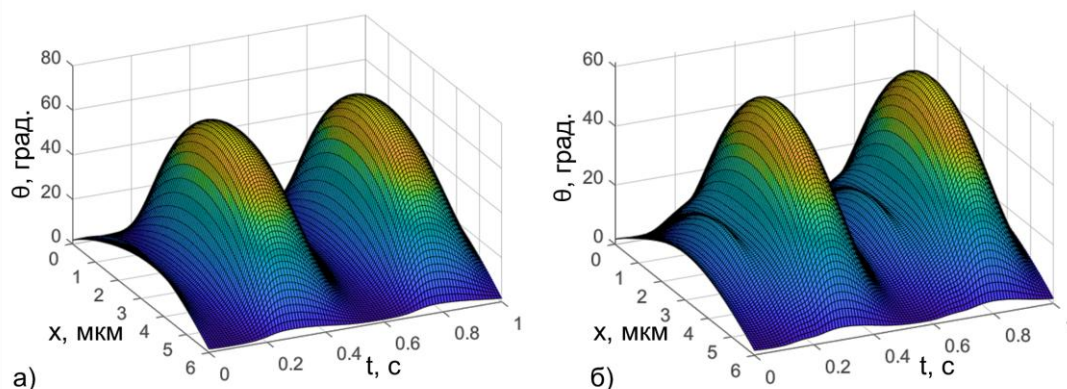


Рис. 9. Пространственно-временное распределение угла наклона директора НЖК: а) без учета ионов и б) при $n, p = 1 \times 10^{20} \text{ м}^{-3}$. Частота и амплитуда приложенного синусоидального сигнала $\nu = 1 \text{ Гц}$ и $V_0 = 2 \text{ В}$ соответственно; $K_{11} \neq K_{33}$

Возникновение дополнительного пика в напряженности электрического поля также отражается и на возникновении дополнительного максимума в распределении угла наклона директора при концентрациях выше $5 \times 10^{19} \text{ м}^{-3}$. Как показано на рис. 10, при увеличении начальной концентрации ионов максимальное значение, до которого переориентируются молекулы ЖК, уменьшается: при $n = p = 1 \times 10^{18} \text{ м}^{-3}$ максимальный угол переориентации директора $\theta_{\max} = 68,2^\circ$, а при $n = p = 1 \times 10^{20} \text{ м}^{-3}$ $\theta_{\max} = 61,5^\circ$. Таким образом, рост концентрации примесных ионов приводит к уменьшению максимального угла переориентации директора, это может быть связано с ослаблением локального электрического поля внутри ячейки.

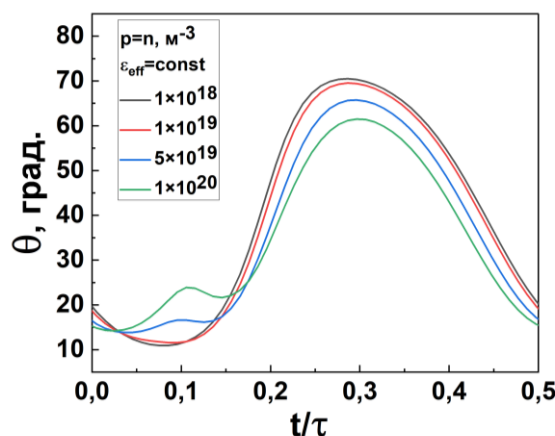


Рис. 10. Динамика переориентации директора НЖК в середине ячейки ($x = d/2$) за половину периода при разных значениях концентраций ионов

Выводы

В данной статье исследованы причины нелинейности локального электрического поля в планарно-ориентированной нематической жидкокристаллической ячейке с блокирующими электродами в присутствии примесных ионов.

Используя систему уравнений Пуассона–Нернста–Планка и нелинейное уравнение Эриксона–Лесли, численно рассчитали влияние ионных примесей и динамики переориентации директора ЖК на локальное электрическое поле в ячейке, заполненной НЖК смесью Е7, при приложении внешнего синусоидального электрического напряжения, амплитуда ($V_0 = 2 \text{ В}$) которого существенно больше перехода Фредерикса ($V_{th} \sim 0,9 \text{ В}$).

Результаты компьютерного моделирования показали, что существуют две причины нелинейности, приводящие к искажению синусоидальной формы локального электрического поля в НЖК: 1) нелинейная динамика переключения директора НЖК, 2) пространственно-временная неоднородность распределения примесных ионов. Было установлено, что учет эффективной диэлектрической проницаемости ЖК вносит дополнительный вклад в нелинейное поведение локального электрического поля, особенно при высоких концентрациях ионов. Частотный анализ временной зависимости локального электрического поля показал, что вклад, вызванный нелинейностью динамики переключения директора ЖК, существенно меньше, чем вклад неоднородности перераспределения примесных ионов в приложенном электрическом поле. Показано, что кривые напряженности принимают нелинейный вид только при низких частотах < 100 Гц, что связано с процессами электродиффузии и перераспределения ионов внутри ячейки.

Также показано влияние нелинейности локального электрического поля в присутствии примесных ионов на динамику переориентации директора ЖК, что позволяет более точно предсказывать возможные отклонения в электрооптическом отклике устройств на основе жидких кристаллов.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда No 23-13-00045, <https://rscf.ru/project/23-13-00045/>.

Литература

1. Garbovskiy, Y. Kinetics of Ion-Capturing / Ion-Releasing Processes in Liquid Crystal Devices utilizing Contaminated Nanoparticles and Alignment Films / Y. Garbovskiy // *Nanomaterials*. – 2018. – Vol. 8, Iss. 59. – P. 1–11.
2. High Contrast Switching of Transmission due to Electrohydrodynamic Effect in Stacked Thin Systems of Liquid Crystals / S.V. Serak, U. Hrozhyk, J. Hwang *et al.* // *Applied Optics*. – 2016. – Vol. 55, Iss. 30. – P. 8506.
3. Numerical Prediction of Transient Electrohydrodynamic Instabilities under an Alternating Current Electric Field and Unipolar Injection / C.-T. Zhou, Z.-Z. Yao, D.-L. Chen *et al.* // *Heliyon*. – 2023. – Vol. 9, Iss. 1. – P. e12812.
4. Nonlinear Electro-Hydrodynamics of Liquid Crystals / E.S. Pikina, A.R. Muratov, E.I. Kats, V. V. Lebedev // *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. – 2023. – Vol. 137, Iss. 1. – P. 114–124.
5. Беляев, В.В. Физические методы измерения коэффициентов вязкости нематических жидких кристаллов / В.В. Беляев // *Успехи физических наук*. – 2001. – Т. 171, № 3. – С. 267.
6. Direct Current Electric Conductivity of Ferroelectric Liquid Crystals–Gold Nanoparticles Dispersion Measured with Capacitive Current Technique / A.R. Karaawi, M.V. Gavriljak, V.A. Boronin *et al.* // *Liquid Crystals*. – 2020. – Vol. 47, Iss. 10. – P. 1507–1515.
7. Mesophase Materials as Smart Media for Emerging Pressure Sensors: Capacitive Method of Measurement of DC Conductivity / F.V. Podgornov, M. Gavriljak, A. Karaawi *et al.* // *Proc. 2018 Global Smart Industry Conference (GloSIC 2018)*. – 2018. – P. 1–5.
8. Hysteresis Inversion Frequency for V-Shape Electrooptical Switching Controlled by Dynamic Impedance of Ferroelectric SmC* Phase / L.M. Blinov, E.P. Pozhidaev, F.V. Podgornov *et al.* // *Ferroelectrics*. – 2002. – Vol. 277. – P. 3–11.
9. Modeling Electrooptical Effects in Ferroelectric Liquid Crystals. 1. Basic Equations and Experimental Tests / S.P. Palto, F.V. Podgornov, W. Haase, L.M. Blinov // *Molecular Crystals and Liquid Crystals*. – 2004. – Vol. 410. – P. 95–104.
10. Modeling Electrooptical Effects in Ferroelectric Liquid Crystals. 2. V-Shape Switching in the SmC* Phase / L.M. Blinov, S.P. Palto, E.P. Pozhidaev *et al.* // *Molecular Crystals and Liquid Crystals*. – 2004. – Vol. 410. – P. 105–115.
11. Molecular Reorientation Dynamics due to Direct Current Voltage-Induced Ion Redistribution in Undoped Nematic Planar Cell / P. Pagliusi, B. Zappone, G. Cipparrone, G. Barbero // *Journal of Applied Physics*. – 2004. – Vol. 96, Iss. 1. – P. 218–223.
12. Palomares, L.O. Optical Response of a Nematic Sample Submitted to a Periodic External Electric Field: Role of the Ionic Impurities / L.O. Palomares, J.A. Reyes, G. Barbero // *Physics Letters A*. – 2004. – Vol. 333, Iss. 1–2. – P. 157–163.

13. Rybakov, D.O. Electrical Double Layers and Their Effect on the Low-Frequency Dielectric Permittivity of 4-n-Pentyl-4'-Cyanobiphenyl (5CB) / D.O. Rybakov, V.V. Belyaev // *Liquid Crystals and Their Applications*. – 2018. – Vol. 18, Iss. 4. – P. 40–47.
14. Беляев, Б.А. Исследование электрофизических характеристик границы электрод – жидкий кристалл методом импедансной спектроскопии / Б.А. Беляев, Н.А. Дрокин // *Физика твердого тела*. – 2015. – Т. 57, № 1. – С. 170–175.
15. Sawada, A. Modeling of Electrode Polarization for Electrolytic Cells with a Limited Ionic Adsorption / A. Sawada // *Physical Review E*. – 2013. – Vol. 88, Iss. 3. – P. 032406.
16. Sawada, A. Electrode Process of Mobile Ions in Generating Space-Charge Polarization / A. Sawada, T. Manaka // *Physical Review E*. – 2024. – Vol. 109, Iss. 3. – P. 034802.
17. Probing Modulated Liquid Crystal Media with Dielectric Spectroscopy / M.P. Rosseto, R.R. Ribeiro de Almeida, E.K. Lenzi *et al.* // *Journal of Molecular Liquids*. – 2023. – Vol. 390. – P. 122943.
18. Ganea, C. P. Effects of the Ionic Association-Dissociation and Adsorption-Desorption on the Space Charge Polarization: A new theoretical approach / C. P. Ganea // *European Physical Journal Plus*. – 2014. – Vol. 129, Iss. 10. – P. 238.
19. Ganea, C. P. New Approach of the AC Electrode Polarization during the Measurements of Impedance Spectra / C.P. Ganea // *Romanian Journal of Physics*. – 2012. – Vol. 57. – P. 664–675.
20. MacDonald, J.R. Utility of Continuum Diffusion Models for Analyzing Mobile-Ion Immittance Data: Electrode Polarization, Bulk, and Generation-Recombination Effects / J. R. MacDonald // *Journal of Physics: Condensed Matter*. – 2010. – Vol. 22, Iss. 49. – P. 495101.
21. Bazant, M.Z. Diffuse-charge Dynamics in Electrochemical Systems / M. Z. Bazant, K. Thornton, A. Ajdari // *Physical Review E*. – 2004. – Vol. 70, Iss. 2. – P. 021506.
22. Frequency-Dependent Dielectric Permittivity in Poisson–Nernst–Planck Model / M.P. Rosseto, L.R. Evangelista, E.K. Lenzi *et al.* // *Journal of Physical Chemistry B*. – 2022. – Vol. 126, Iss. 34. – P. 6446–6453.
23. Khazimullin M.V. Influence of Dielectric Layers on Estimates of Diffusion Coefficients and Concentrations of Ions from Impedance Spectroscopy / M.V. Khazimullin, Y.A. Lebedev // *Physical Review E*. – 2019. – Vol. 100, Iss. 6. – P. 1–15.
24. Barbero, G. Effective Dielectric Constant of Electrolytes / G. Barbero, I. Lelidis // *Journal of Applied Physics*. – 2014. – Vol. 115, Iss. 19. – P. 194101.
25. Derfel, G. Numerical Study of Ionic Current in Dielectric Liquid Layer Subjected to AC Voltage / G. Derfel // *Journal of Molecular Liquids*. – 2009. – Vol. 144, Iss. 1–2. – P. 59–64.
26. Вклад поляризации пространственного заряда в нелинейный спектр диэлектрической проницаемости нематического жидкого кристалла: компьютерное моделирование / М.В. Гавриляк, А.М. Гавриляк, В.А. Боронин, Ф.В. Подгорнов // *Жидкие кристаллы и их практическое использование*. – 2025. – Т. 25, № 1. – С. 62–71
27. Measurement of the Twist Elastic Constant of Nematic Liquid Crystals using Pi-Cell Devices / P. D. Brimicombe, C. Kischka, S. Elston, E.P. Raynes // *Journal of Applied Physics*. – 2007. – Vol. 101, Iss. 4. – P. 1–8.
28. Shcherbinin, D.P. Electric Method for Studying Reorientation Dynamics of the Nematic Liquid Crystal Director / D.P. Shcherbinin, D.A. Vakulin, E.A. Konshina // *Technical Physics*. – 2016. – Vol. 61, Iss. 7. – P. 1039–1045.
29. Chen, H.Y. Electrodynamical Behaviour of Nematic Liquid Crystal in a Relaxation Process / H. Y. Chen, K.X. Yang, Z.Y. Lin // *Journal of Physics D: Applied Physics*. – 2010. – Vol. 43, Iss. 31. – P. 315103.

Поступила в редакцию 14 февраля 2025 г.

Сведения об авторах

Гавриляк Алина Маратовна – аспирант, ассистент, кафедра оптоинформатики, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: gavriliakam@susu.ru, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0001-9179-6945>

Гавриляк Максим Витальевич – ассистент, кафедра оптоинформатики, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация; младший научный сотрудник, лаборатория нелинейной оптики, Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург, Российская Федерация, e-mail: gavriliakmv@susu.ru, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0001-8299-9695>

Боронин Виктор Александрович – младший научный сотрудник, лаборатория нелинейной оптики, Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург, Российская Федерация; ассистент, кафедра оптоинформатики, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: boronin1996vitek@mail.ru, ORCID iD: <https://orcid.org/0009-0003-8227-7635>

Подгорнов Федор Валерьевич – доцент кафедры физики наноразмерных систем, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: fedorpod@yahoo.de, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0002-9926-4799>

CONTRIBUTION OF IMPURITY IONS TO SPATIAL-TEMPORAL DISTRIBUTION OF LOCAL ELECTRIC FIELD IN NEMATIC LIQUID CRYSTAL CELL

A.M. Gavril'yak¹, M.V. Gavril'yak^{1,2}, V.A. Boronin^{1,2}, F.V. Podgornov¹

¹ South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

² Institute of Electrophysics, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, Russian Federation

E-mail: gavril'yakam@susu.ru

Abstract. The influence of impurity ions on the spatiotemporal distribution of the local electric field in a planar nematic liquid crystal (NLC) cell with blocking electrodes has been investigated. Numerical simulation of the switching dynamics of the NLC director has been performed using the Poisson–Nernst–Planck and nonlinear Ericksen–Leslie equations at the driving electrical voltage exceeding the Fredericksz threshold. The authors take into account the influence of the effective permittivity associated with the reorientation of the NLC director on the dynamics of electrodiffusion of impurity ions. Spectral analysis of the local electric field reveals the presence of higher harmonics caused by the spatial inhomogeneity of ionic impurity distribution. It has been proven that the presence of these harmonics in the spectral composition of the local electric field leads to a nonlinearity of the NLC director switching dynamics.

Keywords: Nematic liquid crystals; impurity ions; blocking electrodes; nonlinear distortions; effective permittivity; local electric field.

References

1. Garbovskiy Y. Kinetics of Ion-Capturing / Ion-Releasing Processes in Liquid Crystal Devices utilizing Contaminated Nanoparticles and Alignment Films. *Nanomaterials*, 2018, Vol. 8, no. 59, p. 59. DOI: 10.3390/nano802059.
2. Serak S.V., Hrozhyk U., Hwang J., Tabiryan N.V., Steeves D., Kimball B.R. High Contrast Switching of Transmission due to Electrohydrodynamic Effect in Stacked Thin Systems of Liquid Crystals. *Appl. Opt.*, 2016, Vol. 55, no. 30, p. 8506. DOI: 10.1364/ao.55.008506.
3. Zhou C.-T., Yao Z.-Z., Chen D.-L., Luo K., Wu J., Yi H.-L. Numerical Prediction of Transient Electrohydrodynamic Instabilities under an Alternating Current Electric Field and Unipolar Injection. *Heliyon*, 2023, Vol. 9, no. 1, p. e12812. DOI: 10.1016/j.heliyon.2023.e12812.
4. Pikina E.S., Muratov A.R., Kats E.I., Lebedev V.V. Nonlinear Electro-Hydrodynamics of Liquid Crystals. *J. Exp. Theor. Phys.*, 2023, Vol. 137, no. 1. pp. 114–124. DOI: 10.1134/S1063776123070075.
5. Belyaev V.V. Physical Methods for Measuring the Viscosity Coefficients of Nematic Liquid Crystals. *Physics–Uspekhi*, 2001, Vol. 44, no 3, pp. 255–284. DOI: 10.3367/UFNr.0171.200103b.0267. (in Russ.).
6. Karaawi A.R., Gavril'yak M.V., Boronin V.A., Gavril'yak A.M., Kazachonok J.V., Podgornov F.V. Direct Current Electric Conductivity of Ferroelectric Liquid Crystals–Gold Nanoparticles Disper-

sion Measured with Capacitive Current Technique. *Liq. Cryst.*, 2020, Vol. 47, no. 10, pp. 1507–1515. DOI: 10.1080/02678292.2020.1740951.

7. Podgornov F.V., Gavril'yak M., Karaawi A., Ishmurzina A., Kolmakova N.S., Haase W. Mesophase Materials as Smart Media for Emerging Pressure Sensors: Capacitive Method of Measurement of DC Conductivity. *Proc. 2018 Glob. Smart Ind. Conf. GloSIC 2018*, 2018, pp. 1–5. DOI: 10.1109/GloSIC.2018.8570127.

8. Blinov L.M., Pozhidaev E.P., Podgornov F.V., Sinha A., Haase W. Hysteresis Inversion Frequency for V-Shape Electrooptical Switching Controlled by Dynamic Impedance of Ferroelectric SmC* Phase. *Ferroelectrics*, 2002, Vol. 277, pp. 3–11. DOI: 10.1080/00150190214448.

9. Palto S.P., Podgornov F.V., Haase W., Blinov L.M. Modeling Electrooptical Effects in Ferroelectric Liquid Crystals. 1. Basic Equations and Experimental Tests. *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, 2004, Vol. 410, pp. 95–104. DOI: 10.1080/15421400490436133.

10. Blinov L.M., Palto S.P., Pozhidaev E.P., Podgornov F.V., Haase W., Andreev A.L. Modeling Electrooptical Effects in Ferroelectric Liquid Crystals. 2. V-Shape Switching in the SmC* Phase. *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, 2004, Vol. 410, pp. 105–115. DOI: 10.1080/15421400490436142.

11. Pagliusi P., Zappone B., Cipparrone G., Barbero G. Molecular Reorientation Dynamics due to Direct Current Voltage-Induced Ion Redistribution in Undoped Nematic Planar Cell. *J. Appl. Phys.*, 2004, Vol. 96, no. 1, pp. 218–223. DOI: 10.1063/1.1756693.

12. Palomares L.O., Reyes J.A., Barbero G. Optical Response of a Nematic Sample Submitted to a Periodic External Electric Field: Role of the Ionic Impurities. *Phys. Lett. A*, 2004, Vol. 333, no. 1–2, pp. 157–163. DOI: 10.1016/j.physleta.2004.10.047.

13. Rybakov D.O., Belyaev V.V. Electrical Double Layers and Their Effect on the Low-Frequency Dielectric Permittivity of 4-n-Pentyl-4'-Cyanobiphenyl (5CB). *Liq. Cryst. their Appl.*, 2018, Vol. 18, no. 4, pp. 40–47. DOI: 10.18083/LCAppl.2018.4.40.

14. Belyaev B.A., Drokin N.A. Issledovanie elektrofizicheskikh kharakteristik granitsy elektrod – zhidkiy kristall metodom impedansnoy spektroskopii (Investigation of the Electrophysical Characteristics of the Electrode–Liquid Crystal Interface by the Impedance Spectroscopy Method). *Fizika tverdogo tela*, 2015, Vol. 57, no. 1, pp. 170–175. (in Russ.).

15. Sawada A. Modeling of Electrode Polarization for Electrolytic Cells with a Limited Ionic Adsorption. *Phys. Rev. E*, 2013, Vol. 88, no. 3, p. 032406. DOI: 10.1103/PhysRevE.88.032406.

16. Sawada A., Manaka T. Electrode Process of Mobile Ions in Generating Space-Charge Polarization. *Phys. Rev. E*, 2024, Vol. 109, no. 3, p. 034802. DOI: 10.1103/PhysRevE.109.034802.

17. Rosseto M.P., Ribeiro de Almeida R.R., Lenzi E.K., Evangelista L.R., Zola R.S. Probing Modulated Liquid Crystal Media with Dielectric Spectroscopy. *J. Mol. Liq.*, 2023, Vol. 390, no. PA, p. 122943. DOI: 10.1016/j.molliq.2023.122943.

18. Ganea C.P. Effects of the Ionic Association-Dissociation and Adsorption-Desorption on the Space Charge Polarization: A new theoretical approach. *Eur. Phys. J. Plus*, 2014, Vol. 129, no. 10, p. 238. DOI: 10.1140/epjp/i2014-14238-4.

19. Ganea C.P. New Approach of the AC Electrode Polarization during the Measurements of Impedance Spectra. *Rom. J. Phys.*, 2012, Vol. 57, pp. 664–675.

20. MacDonald J.R. Utility of Continuum Diffusion Models for Analyzing Mobile-Ion Immittance data: Electrode Polarization, Bulk, and Generation-Recombination Effects. *J. Phys. Condens. Matter*, 2010, Vol. 22, no. 49, DOI: 10.1088/0953-8984/22/49/495101.

21. Bazant M.Z., Thornton K., Ajdari A. Diffuse-charge Dynamics in Electrochemical Systems. *Phys. Rev. E*, 2004, Vol. 70, no. 2, p. 021506. DOI: 10.1103/PhysRevE.70.021506.

22. Rosseto M.P., Evangelista L.R., Lenzi E.K., Zola R.S., Ribeiro De Almeida R.R. Frequency-Dependent Dielectric Permittivity in Poisson–Nernst–Planck Model. *J. Phys. Chem. B*, 2022, Vol. 126, no. 34, pp. 6446–6453. DOI: 10.1021/acs.jpcc.2c03663.

23. Khazimullin M.V., Lebedev Y.A. Influence of Dielectric Layers on Estimates of Diffusion Coefficients and Concentrations of Ions From Impedance Spectroscopy. *Phys. Rev. E*, 2019, Vol. 100, no. 6, p. 062601. DOI: 10.1103/PhysRevE.100.062601.

24. Barbero G., Lelidis I. Effective Dielectric Constant of Electrolytes. *J. Appl. Phys.*, 2014, Vol. 115, no. 19, DOI: 10.1063/1.4875837.

25. Derfel G. Numerical Study of Ionic Current in Dielectric Liquid Layer Subjected to AC Voltage. *J. Mol. Liq.*, 2009, Vol. 144, no. 1–2. pp. 59–64. DOI: 10.1016/j.molliq.2008.10.007.
26. Gavrilyak M.V., Gavrilyak A.M., Boronin V.A., Podgornov F.V. Contribution of Space Charge Polarization to Nonlinear Permittivity Spectrum of Nematic Liquid Crystal: Computer Simulation. *Liq. Cryst. and their Appl.*, 2025, Vol. 25, no. 1, pp. 62–71
27. Brimicombe P.D., Kischka C., Elston S.J., Raynes E.P. Measurement of the Twist Elastic Constant of Nematic Liquid Crystals using Pi-CELL devices. *J. Appl. Phys.*, 2007, Vol. 101, no. 4, pp. 1–8. DOI: 10.1063/1.2432311.
28. Shcherbinin D.P., Vakulin D.A., Konshina E.A. Electric Method for Studying Reorientation Dynamics of the Nematic Liquid Crystal Director. *Tech. Phys.*, 2016, Vol. 61, no. 7, pp. 1039–1045. DOI: 10.1134/S1063784216070227.
29. Chen H.Y., Yang K.X., Lin Z.Y. Electrodynamic Behaviour of Nematic Liquid Crystal in a Relaxation Process. *J. Phys. D. Appl. Phys.*, 2010, Vol. 43, no. 31, p. 315103. DOI: 10.1088/0022-3727/43/31/315103.

Received February 14, 2025

Information about the authors

Gavrilyak Alina Maratovna is Post-graduate Student, Assistant, Department of Optoinformatics, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: gavriliakam@susu.ru, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0001-9179-6945>

Gavrilyak Maksim Vitalievich is Assistant, Department of Optoinformatics, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation; Junior Research Fellow, Laboratory of Nonlinear Optics, Institute of Electrophysics, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, Russian Federation, e-mail: gavriliakmv@susu.ru, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0001-8299-9695>

Boronin Viktor Aleksandrovich is Post-graduate Student, Junior Research Fellow, Laboratory of Nonlinear Optics, Institute of Electrophysics, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, Russian Federation; Assistant, Optoinformatics Department, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: boronin1996vitek@mail.ru, ORCID iD: <https://orcid.org/0009-0003-8227-7635>

Podgornov Fedor Valerievich is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Physics of Nanoscale Systems Department, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: fedorpod@yahoo.de, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0002-9926-4799>