

外电场作用下的液晶指向矢分布求解及液晶盒视角光学特性研究

王 谦 余飞鸿 郭海成*

(浙江大学光电系现代光学仪器国家重点实验室,杭州, 310027)

(香港科技大学电机系显示技术研究中心, 香港, 九龙, 清水湾)

摘要: 根据液晶连续体弹性形变理论, 本文首次提出液晶指向矢在外电场作用下分布的差分迭带求解法, 实践表明该方法具有稳定性好, 速度快, 结果准确等特点, 并适用于各种模式的液晶盒。在运用该方法求得液晶指向矢分布的前提下, 结合消法布里-珀罗干涉快速 4×4 矩阵法, 对液晶显示器的视角光学特性作了研究。

关键词: 指向矢 液晶 4×4 矩阵 光学特性

0 引言

在液晶及其显示应用的研究中, 液晶工作者提出诸多方法解决了液晶的光学传输问题, 如最初的 Berreman 4×4 矩阵法¹, 快速 4×4 矩阵法², 扩展琼斯矩阵法^{3,4,5} 等等。但是要研究液晶电光特性, 首先要解决液晶分子在外加电场作用下的分布问题, 也就是液晶指向矢在外加电场作用下的空间形变和重新排列问题。只有正确求得液晶在外加电场作用下的指向矢分布, 才能保证液晶电光特性研究的可行性与可靠性, 而且在液晶的建模计算工作中, 液晶的指向矢分布计算是计算量最大的一部分, 能否建立一种稳定并且快速的算法是实现液晶电光特性模拟计算及优化设计的关键。在现行的模拟计算中, 液晶指向矢计算的依据液晶的连续体弹性形变理论⁶, 即把液晶作为连续介质来处理的。根据这个理论, 液晶在外电场作用下由原来的平衡状态过渡到另一个平衡状态的过程, 也就是液晶指向矢发生形变和重新排列, 并使吉布斯自由能趋向最小的过程。为了求解吉布斯自由能最小情况下指向矢的分布, 许多液晶研究工作者提出了各种方法, 如牛顿法⁷、模拟退火法⁸、松弛法⁹ 等等。对于对称的无螺距扭曲向列型液晶盒, 应用牛顿法是比较方便的, 随着液

晶显示开发要求的提高,各种新型液晶盒的不断出现,比如对于胆甾型非对称的液晶盒,STN 液晶显示盒,结果表明,应用牛顿法将会很复杂而且计算时间很长¹⁰,而且这种方法很依赖于给定的初始参数。模拟退火法是一种全局优化的方法,虽然能找到在平衡状态下的指向矢分布,但是计算量也非常大,在液晶电光特性模拟工作中并不适合。在现行的方法中,松弛法是根据液晶动力学,动态模拟从一个平衡态到另一个平衡态的过程,适用于各种不同的液晶盒。但是,应用该方法要引入旋转粘滞系数,一般情况下,该系数是较难测定的,而且一般的液晶参数,也并未给出该具体值。所以,液晶研究工作者,在应用该方法时,是通过不断调整该值,以求得较好的收敛效果和收敛速度;而且该方法必须以矢量分量 $\vec{n}(n_x, n_y, n_z)$ 来描述指向矢,因为如果以倾角和扭曲角 (θ, φ) 来描述,则在外加电压增大时,即 $\theta \rightarrow 90^\circ$ 会出现不稳定,给出错误的结果。而以矢量分量来描述,在计算过程中,要引入拉格朗日因子,或在每一步计算过程中,必须归一化以保证 $\vec{n}(n_x, n_y, n_z)$ 为单位矢量。

在本文中,我们首次提出了一种新的指向矢求解方法,该方法算法简单、快速,并能适用于各种取向对称与非对称分布液晶盒,在外加电压很高的情况下或超扭曲 270° 液晶显示模式,这种方法都能给出稳定的结果。在正确求得液晶指向矢分布的前提下,本文引用了消法布里-珀罗干涉的 4×4 矩阵法¹¹,计算了液晶盒在水平、垂直方向上的视角光学特性,并给出了液晶盒在亮、暗态下的亮度等值线分布曲线。

1 液晶指向矢的分布求解

由液晶连续体弹性形变理论可知,在外加电场的作用下,液晶的吉布斯自由能由下述方程给出:

$$W_G = \int_0^d F_G dz = \int_0^d (F_s - F_e) dz \quad (1)$$

上式中, F_G 是吉布斯自由能密度, F_s 是液晶形变自由能密度, F_e 是液晶外加电场带来液晶自由能密度(这里考虑一维情况),它们的具体形式如下⁶:

$$F_s = \frac{1}{2}K_{11}(\nabla \cdot \hat{n})^2 + \frac{1}{2}K_{22}(\hat{n} \cdot \nabla \hat{n})^2 + \frac{1}{2}K_{33}(\hat{n} \times \nabla \hat{n})^2 + \left(\frac{2\pi}{P}\right)K_{22}(\hat{n} \cdot \nabla \hat{n}) \quad (2)$$

$$F_e = \frac{1}{2}\vec{D} \cdot \vec{E} \quad (3)$$

其中， \vec{D} 是电位移， \vec{E} 是电场强度， $\hat{n} = (\cos\theta \cdot \cos\varphi, \cos\theta \cdot \sin\varphi, \sin\theta)$ 是单位矢量指向矢，其倾角和扭曲角表示，如图 1 所示。

由于液晶是可以看成单轴晶体，所以，电位移 \vec{D} 与电场 \vec{E} 的关系如下：

$$\vec{D} = \bar{\epsilon} \cdot \vec{E}, \quad \bar{\epsilon} = \begin{bmatrix} \epsilon_{\perp} + \Delta\epsilon n_x^2 & \Delta\epsilon n_x n_y & \Delta\epsilon n_x n_z \\ \Delta\epsilon n_x n_y & \epsilon_{\perp} + \Delta\epsilon n_y^2 & \Delta\epsilon n_y n_z \\ \Delta\epsilon n_x n_z & \Delta\epsilon n_y n_z & \epsilon_{\perp} + \Delta\epsilon n_z^2 \end{bmatrix} \quad (4)$$

式中的 $n_x = \cos\theta \cdot \cos\varphi$ ， $n_y = \cos\theta \cdot \sin\varphi$ ， $n_z = \sin\theta$ 。应用以上关系，展开吉布斯自由能密度方程，得到吉布斯自由能密度的具体表达式为：

$$F_G = \frac{1}{2} \left[f(\theta) \left(\frac{d\theta}{dz} \right)^2 + g(\theta) \left(\frac{d\varphi}{dz} \right)^2 \right] - K_{22} \frac{2\pi}{P} \cos^2 \theta \frac{d\varphi}{dz} - \frac{1}{2} \left(-\frac{dV}{dz} \right)^2 (\epsilon_{\parallel} \sin^2 \theta + \epsilon_{\perp} \cos^2 \theta), \quad (5)$$

其中：

$$f(\theta) = K_{11} \cos^2 \theta + K_{33} \sin^2 \theta, \quad (6)$$

$$g(\theta) = (K_{22} \cos^2 \theta + K_{33} \sin^2 \theta) \cos^2 \theta \quad (7)$$

所以液晶自由能方程

$$W_G = \int_0^d F_G dz = \int_0^d F_G \left(\theta, \varphi, \frac{d\theta}{dz}, \frac{d\varphi}{dz} \right) dz \quad (8)$$

液晶在外加电场作用下到达平衡态时，液晶的自由能 W_G 趋向最小值，许多液晶建模研究工作者提出各自不同的方法，以求解在平衡态下的指向矢分布。本文应用变分原理，由欧拉方程，可以得到以下三个方程：

$$\frac{\partial F_G}{\partial \theta} - \frac{d}{dz} \left[\frac{\partial F_G}{\partial \left(\frac{d\theta}{dz} \right)} \right] = 0, \quad (9)$$

$$\frac{\partial F_G}{\partial \varphi} - \frac{d}{dz} \left[\frac{\partial F_G}{\partial \left(\frac{d\varphi}{dz} \right)} \right] = 0, \quad (10)$$

$$\frac{\partial F_G}{\partial v} - \frac{d}{dz} \left[\frac{\partial F_G}{\partial \left(\frac{\partial V}{\partial z} \right)} \right] = 0 \quad (11)$$

求解上述三个偏微分方程，可以得到液晶指向矢关于空间位置的分布情况。这里我们提出用差分迭代法来求解平衡态下的液晶指向矢分布，对于上述三个方程，经过整理，可以得到如下迭代方程组：

$$\begin{aligned} \theta_i^{(n+1)} = & \{ 2f(\theta_i^{(n)}) \frac{\theta_{i+1}^{(n)} + \theta_{i-1}^{(n)}}{h^2} + f'(\theta_i^{(n)}) \left(\frac{\theta_{i+1}^{(n)} - \theta_{i-1}^{(n)}}{2h} \right)^2 - g'(\theta_i^{(n)}) \left(\frac{\varphi_{i+1}^{(n)} - \varphi_{i-1}^{(n)}}{2h} \right)^2 \\ & - k_{22} \frac{8\pi}{p} \cos \theta_i^{(n)} \sin \theta_i^{(n)} \left(\frac{\varphi_{i+1}^{(n)} - \varphi_{i-1}^{(n)}}{2h} \right) + 2 \left(\frac{V_{i+1}^{(n)} - V_{i-1}^{(n)}}{2h} \right)^2 \Delta \varepsilon \sin \theta_i^{(n)} \cdot \\ & \cos \theta_i^{(n)} \} h^2 / (4f(\theta_i^{(n)})), \end{aligned} \quad (12)$$

$$\begin{aligned} \varphi_i^{(n+1)} = & \{ g(\theta_i^{(n)}) \left(\frac{\varphi_{i+1}^{(n)} + \varphi_{i-1}^{(n)}}{h^2} \right) + g'(\theta_i^{(n)}) \left(\frac{\varphi_{i+1}^{(n)} - \varphi_{i-1}^{(n)}}{2h} \right) \left(\frac{\theta_{i+1}^{(n)} - \theta_{i-1}^{(n)}}{2h} \right) \\ & + 2k_{22} \frac{2\pi}{p} \cos \theta_i^{(n)} \sin \theta_i^{(n)} \frac{\theta_{i+1}^{(n)} - \theta_{i-1}^{(n)}}{2h} \} h^2 / (2g(\theta_i^{(n)})), \end{aligned} \quad (13)$$

$$\begin{aligned} V_i^{(n+1)} = & \{ \varepsilon_{//} \sin^2 \theta_i^{(n)} + \varepsilon_{\perp} \cos^2 \theta_i^{(n)} \} \frac{V_{i+1}^{(n)} + V_{i-1}^{(n)}}{h^2} + 2 \frac{V_{i+1}^{(n)} - V_{i-1}^{(n)}}{2h} \Delta \varepsilon \sin \theta_i^{(n)} \\ & \cos \theta_i^{(n)} \left(\frac{\theta_{i+1}^{(n)} - \theta_{i-1}^{(n)}}{2h} \right) \} h^2 / (2(\varepsilon_{//} \sin^2 \theta_i^{(n)} + \varepsilon_{\perp} \cos^2 \theta_i^{(n)})). \end{aligned} \quad (14)$$

以未加电压时的指向矢分布为上述方程的初始值，应用直接迭代法便可求得液晶指向矢在外加电场作用下的空间分布。应用这种方法时，可以不受液晶盒类型的限制，也无须像先前的牛顿法，先求解液晶盒中间层倾角和电压的函数关系，再积分求解液晶指向矢与空间位置的函数关系。

本文分别选取了 90° ZLI-3771 对称向列扭曲型(TN)液晶盒³和 90° ZLI3651 非对称胆甾向列型液晶盒¹⁰来具体说明。对于前者对称向列扭曲型液晶盒，材料参数为：三个弹性系数 $K_{11} = 13.7 \times 10^{-12}$ ， $K_{22} = 7.0 \times 10^{-12}$ ， $K_{33} = 16.8 \times 10^{-12}$ ，介电系数 $\varepsilon_{//} = 7.3$ ， $\varepsilon_{\perp} = 3.6$ ，液晶盒结构参数为：预倾角=2°，扭曲角=90°。盒厚 4μm。将以上参数代入求解，图 2(a)、

图 2(b)分别是该液晶盒指向矢在不同电压下的分布情况。对于 ZLI-3651 非对称胆甾向列型液晶，其材料参数为：三个弹性系数 $K_{11} = 14.8 \times 10^{-12}$ ， $K_{22} = 8.0 \times 10^{-12}$ ， $K_{33} = 20.9 \times 10^{-12}$ ，介电系数 $\epsilon_{//} = 10.5$ ， $\epsilon_{\perp} = 3.6$ ，液晶盒结构参数为：两表面预倾角分别为 3° 、 15° ，扭曲角 $= 90^{\circ}$ ，盒厚 $5\mu\text{m}$ ，螺距 $p=160\mu\text{m}$ 。图 3(a)、图 3(b)是其指向矢分布图，从上面的计算结果可以看出，该方法在外加电压很高的情况下，也能给出稳定的结果。

为了加速求解的速度，可以应用数值计算方法中的超松弛因子 ω ，根据计算经验，在本文中取 $\omega = 1.5$ ，图 3(c)给出了具体运算时的收敛过程。在求得液晶指向矢空间分布的基础上，下面就可以研究液晶视角电光特性了。

2 液晶视角电光特性

液晶视角电光特性研究，是计算光在不同方位入射液晶盒时，液晶盒表现出来的光学特性(图 2)，液晶显示器相对于其它显示器视角相对较小，液晶研究工作者努力于提高液晶的宽视角研究，所以研究液晶显示的视角，具有重要的意义。

要正确模拟液晶视角电光特性，须考虑两点内容：其一，液晶显示用的背景光是非相干光源，而非偏振光。对于非相干光源，一般的处理方法是将该光波分成 s 波和 p 波分别予以考虑。

由 4×4 Berreman 矩阵计算可知入射、出射电磁场分量关系¹：

$$\Psi_i = \begin{bmatrix} E_x \\ r_x E_x \\ E_y \\ r_y E_y \end{bmatrix}, \quad \Psi_r = \begin{bmatrix} R_x \\ -r_x R_x \\ R_y \\ -r_y R_y \end{bmatrix}, \quad \Psi_t = \begin{bmatrix} T_x \\ r_x T_x \\ T_y \\ r_y T_y \end{bmatrix} \quad (15)$$

$$\Psi_i + \Psi_r = P \cdot \Psi_t \quad (16)$$

上述式子中， Ψ_i, Ψ_r, Ψ_t 分别对应于入射、反射和透射光，P 是总的液晶盒传输矩阵。假定光的入射面在 x-z 平面内，则 $r_x = n_{air} / \cos(\text{incidence})$ ， $r_y = n_{air} \cdot \cos(\text{incidence})$ ，incidence 是入射角，在计算过程中，分别计算 s 波的透过率

T_s 和 p 波的透过率 T_p ，对于 s 波入射，透过率公式计算为：

$$T_s = \frac{|T_x|^2 / \cos^2(\text{incidence}) + |T_y|^2}{|E_y|^2} \quad (17)$$

对于 p 波入射，相应的透过率计算公式为：

$$T_s = \frac{|T_x|^2 / \cos^2(\text{incidence}) + |T_y|^2}{|E_x|^2 / \cos^2(\text{incidence})} \quad (18)$$

总的光学透过率为：

$$T = (T_s + T_p) / 2 \quad (19)$$

其二，液晶盒是夹在两个偏振片之间，所以给定一个特定波长，会出现平行平板的多光束干涉，即法布里-珀罗干涉效应¹²。而实际应用液晶显示器，所采用的光源基本上都是自然光，即使在实验中或者投影显示采用红、绿、蓝等单色光，在实际上也是有一定宽度的。所以，要正确模拟液晶盒视角电光特性，需要考虑多波长的平均效应。在液晶的光学传输特性研究中， 4×4 Berreman 矩阵被广泛的使用，由于其考虑了液晶层与层之间的多次反射，所以精确的联系了入射光和出射光的电场关系，也正由于这一点，会给液晶模拟计算结果和实际液晶显示结果带来偏差。K. H. Yang 曾提出消法布里-珀罗干涉效应快速 4×4 矩阵法，该方法是将液晶盒两边的空气折算成与偏振片 o 光折射率实部一样的介质，相当于把该平行平板的距离扩大到无穷远处。这样就消除了法布里-珀罗干涉效应，然后分别考虑光波在两个界面（空气 \Rightarrow 偏振片、偏振片 \Rightarrow 空气）上的光反射损失。在这里为了适用于液晶视角电光特性计算，具体给出如下计算公式，

$$n'_{air} = \text{real}(n_{polarizer}) \quad (20)$$

$$\text{incidence}' = \sin^{-1}(\sin(\text{incidence}) / n'_{air}) \quad (21)$$

用折算后的空气折射率和入射角，代入方程(15)~(16)，得到透过率 T_s ， T_p ，考虑在两边界上的反射损失，对得到的结果进行修正，

$$T'_s = T_s \cdot X, \quad T'_p = T_p \cdot Y \quad (22)$$

其中， X ， Y 分别是 s 入射波和 p 入射波的修正系数：

$$X = \frac{\sin^2(2 \cdot incidence') \cdot \sin^2(2 \cdot incidence)}{4 \cdot \sin^4(incidence + incidence')}, \quad (23)$$

$$Y = \frac{\sin^2(2 \cdot incidence') \cdot \sin^2(2 \cdot incidence)}{4 \cdot \sin^4(incidence + incidence') \cos^4(incidence - incidence')} \quad (24)$$

经过修正后的结果，应用（19）式即可求出在不同方位，不同大小入射角下的液晶光学透过率。

这里以前一部分指向矢计算中 90° ZLI-3771 对称向列扭曲型液晶盒为例，应用上述消法布里-珀罗干涉效应 4×4 矩阵法，分别计算了该液晶盒在不同电压下的水平视角曲线图(图 5(a))、垂直视角曲线图(图 5(b))，以及全方位 360° 等值线（亮度）图(图 7(a)、图 7(b))。

3 结束语

本文在液晶电光特性研究中，首次提出了液晶指向矢差分迭代法，该方法算法简单、快速，并能适用于各种取向对称与非对称分布液晶盒。在正确求解液晶指向矢空间分布的基础上，引用消法布里—珀罗干涉效应快速 4x4 矩阵法，给出了液晶视角电光特性曲线图。

参考文献:

- 1 Berreman D W. Optics in stratified and anisotropic media: 4×4 matrix formulation. J. Opt. Soc. Am., 1972, **62**(4): 502-510
- 2 Wöhler H., Hass G., Fritsch M., and Mlynski D. A. Fast 4×4 matrix method for inhomogeneous uniaxial media. J. Opt. Soc. Am. A, 1988, **5**(9): 1551-1557
- 3 Lien A. Extended Jones matrix representation for the twisted nematic liquid-crystal display at oblique incidence. Appl. Phys. Lett., 1990, **57**(26): 2767-2769
- 4 Gu C. Yeh P. Extended Jones matrix method. II. J. Opt. Soc. Am. A, 1993, **10**(5): 966-973
- 5 《扭曲向列型 LCD 电光特性计算的理论研究》光子学报, **29**(4): 330-337
- 6 P. G. de Gennes, *The Physics of Liquid Crystals*, Clarendon Press, Oxford, 1974
- 7 H. J. Deuling, Mol. Cyst. Liq. Cryst. **27**, 81 (1975)
- 8 I. Heynderickx and H. De. Raedt, Phys. Rev. A **37**(5), 1725 (1988)
- 9 S. Dickmann, J. Eschier, O. Cossalfer, and D. A. Mlynski, SID 93 Digest, 638 (1993)
- 10 C. J. Chen, A. Lien and M. L. Nathan, J. Appl. Phys. **81**(1), 70 (1997)
- 11 Yang K. H. Elimination of the Fabry-Perot effect in the 4×4 matrix method for inhomogeneous uniaxial media. J. Appl. Phys. 1990, **68**(4), 1550-1554

Distribution of the Liquid Crystal Director under applied voltage and its viewing characteristics

Qian Wang Feihong YU H S Kwok*

(State Key Laboratory, Optical Engineering Department, Zhejiang University, Hangzhou, 310027)

(Center for Display Research , The Hong Kong University of Science & Technology)

Abstract A new iterative method for calculating the liquid crystal director distribution is presented. This new method is very simple and intuitive, and can give accurate results in much shorter time, and is applicable for various types of liquid crystal displays, such as twist nematic cell, nematic cell with asymmetric pretilt or chiral super twist nematic cell. In the paper, the viewing characteristic of liquid crystal display is also calculated with faster 4x4 matrix method with FP elimination method.

Key Word: liquid crystal director 4×4 matrix optical optical characteristics

图注说明:

图 1 液晶指向矢结构描述.

Fig. 1 The representation of director in coordinate with tilt and twist angle.

图 2(a) 90° ZLI-3771 对称向列扭曲型液晶指向矢在外加电压作用下倾角与空间位置关系

Fig. 2(a) The profile for the tilt angle of 90° ZLI-3771 symmetry twisted nematic LC cell under different applied voltages.

图 2.(b) 90° ZLI-3771 对称向列扭曲型液晶指向矢在外加电压作用下扭曲角与空间位置关系

Fig. 2(b) The profile for the twist angle of 90° ZLI-3771 symmetry twisted nematic LC cell under different applied voltages.

图 3(a) 90° ZLI-3651 非对称胆甾向列型液晶液晶指向矢在外加电压作用下倾角与空间位置关系

Fig. 3(a) The profile for the tilt angle of 90° ZLI-3651 asymmetry twisted nematic LC cell under different applied voltages.

图 3(b) 90° ZLI-3651 非对称胆甾向列型液晶液晶指向矢在外加电压作用下扭曲角与空间位置关系

Fig. 3(b) The profile for the twist angle of 90° ZLI-3651 asymmetry twisted nematic LC cell under different applied voltages.

图 3(c) 以外加电压为 3V 时为例，倾角随着迭代次数增多的收敛过程。

Fig.3(c) The evolution of the tilt angle as the number of iteration increases when the applied voltage is 3V.

图 4 液晶视角电光特性中入射光的位置定义

Fig 4 Geometry of the input light defined as the viewing angle

图 5(a) 90° ZLI-3771 对称向列扭曲型液晶盒在不同电压下的视角与透过率关系(水平方向)

Fig 5(a) Horizontal viewing characteristics of 90° ZLI-3771 symmetric nematic liquid crystal cell at three different applied voltages.

图 5(b) 90° ZLI-3771 对称向列扭曲型液晶盒在不同电压下的视角与透过率关系(垂直方向)

Fig 5(b) Vertical viewing characteristics of 90° ZLI-3771 symmetric nematic liquid crystal cell at three different applied voltages.

图 6(a) 90° ZLI-3771 对称向列扭曲型液晶盒在亮态情况下的亮度等值线图

Fig 6(a) Transmission Contour of 90° ZLI-3771 symmetric nematic liquid crystal cell at ON state.

图 6(b) 90° ZLI-3771 对称向列扭曲型液晶盒在暗态情况下的亮度等值线图

Fig 6(b) Transmission Contour of 90° ZLI-3771 symmetric nematic liquid crystal cell at OFF state.

图 1:

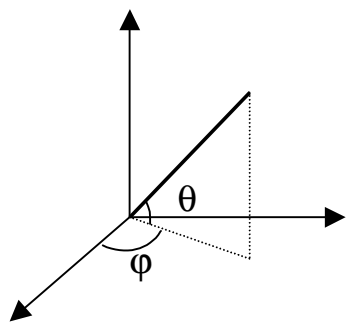


图 2(a)

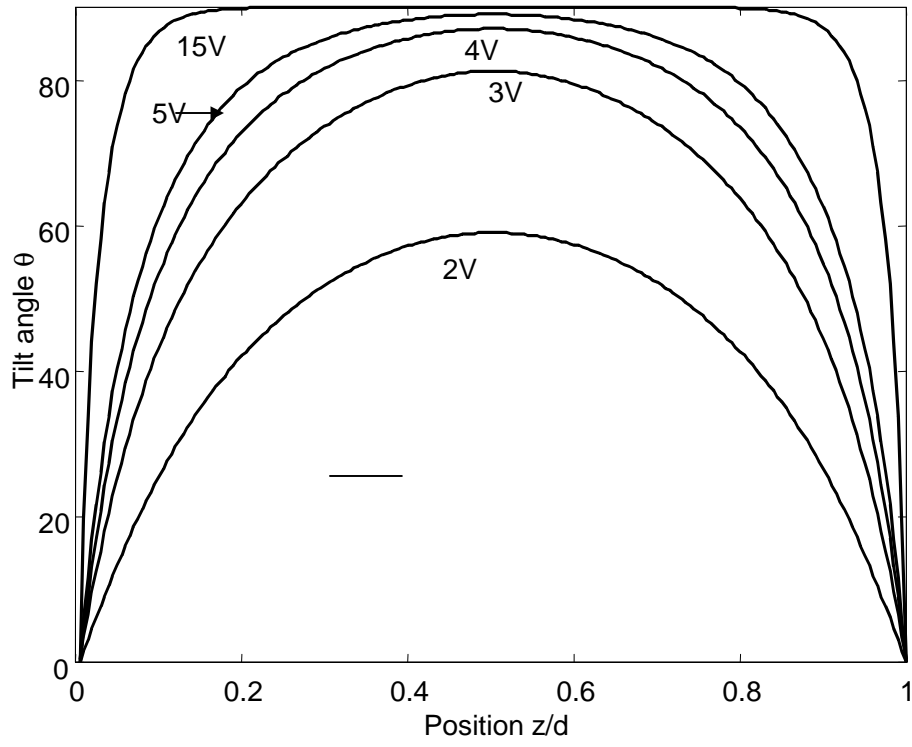


图 2(b)

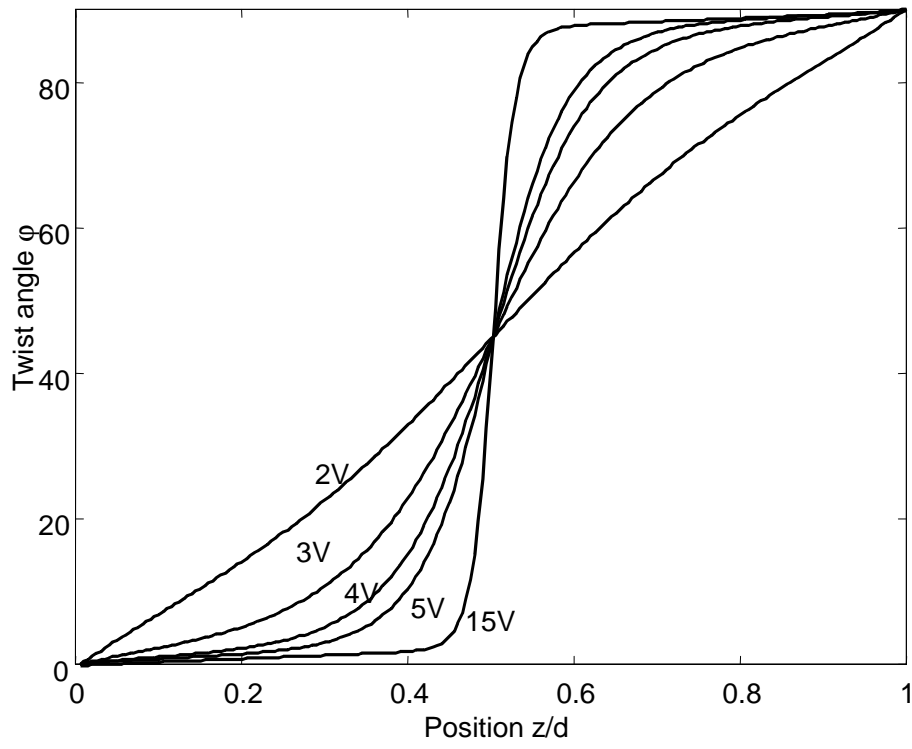


图 3(a)

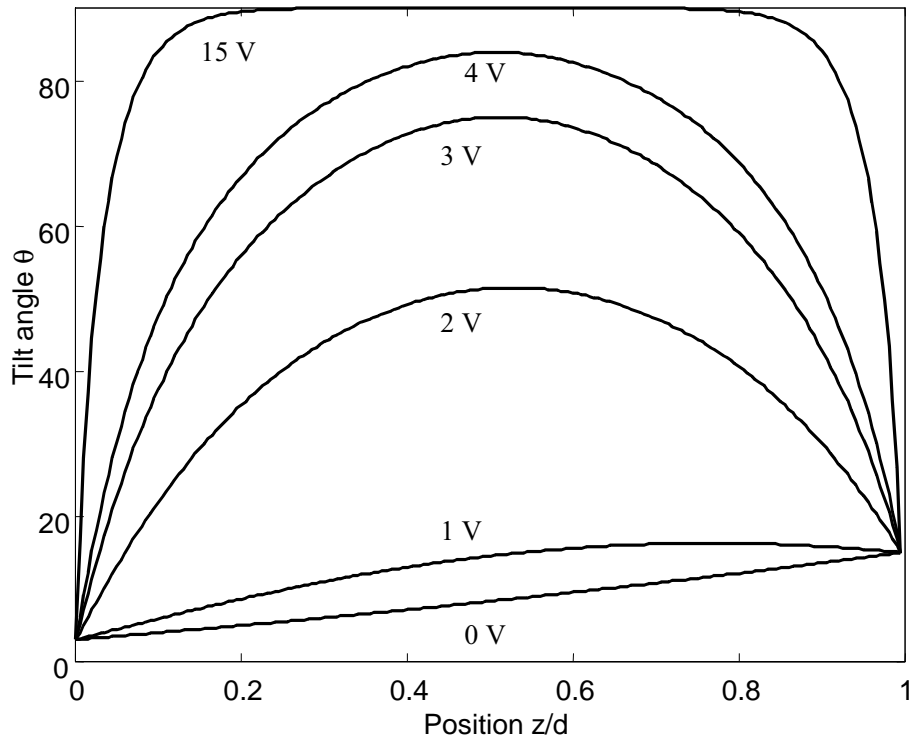


图 3(b)

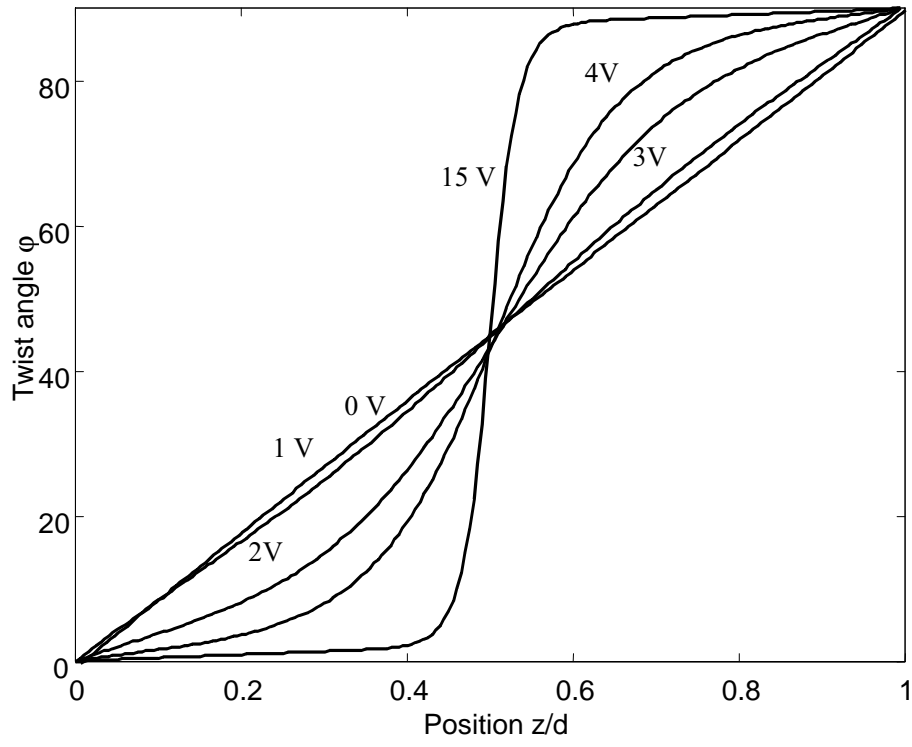


图 3(c):

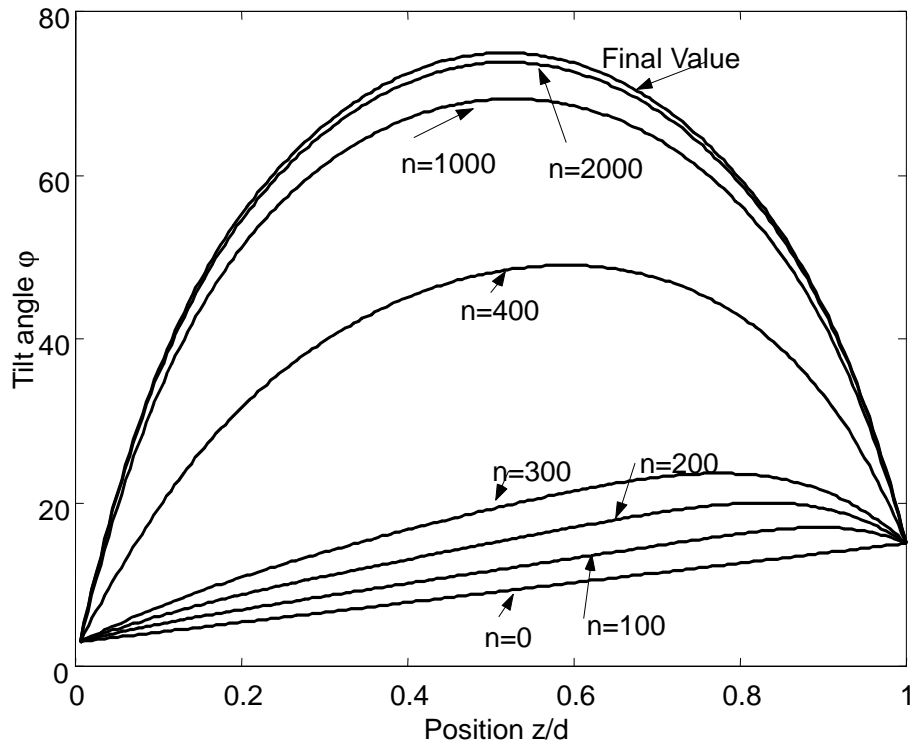


图 4:

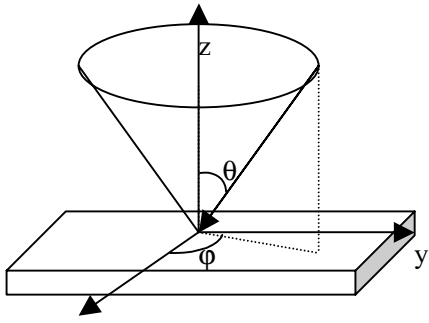


图 5(a)

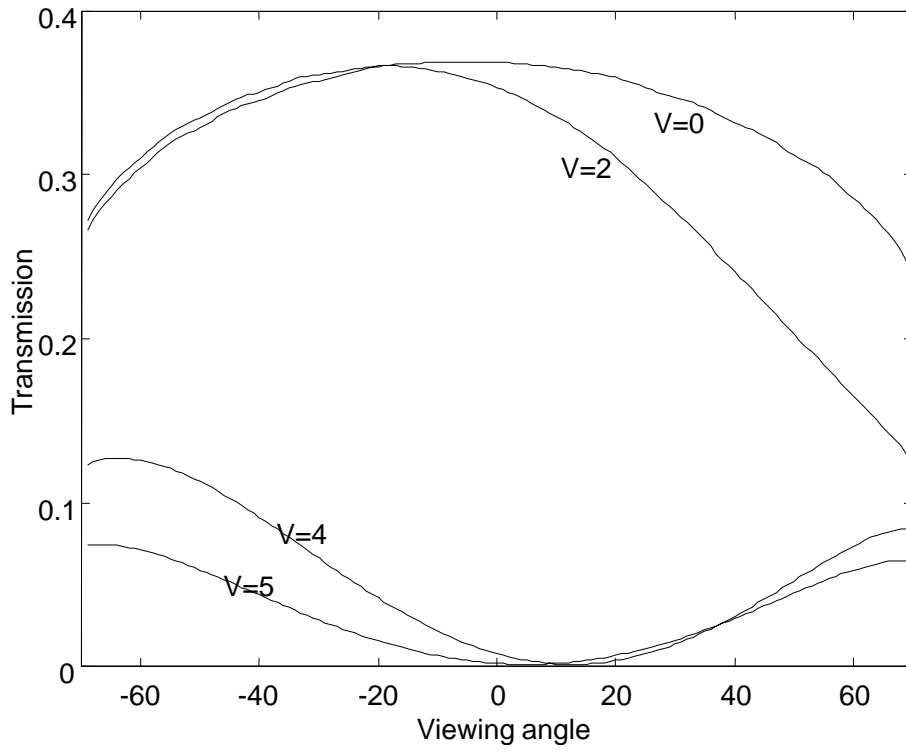


图 5(b)

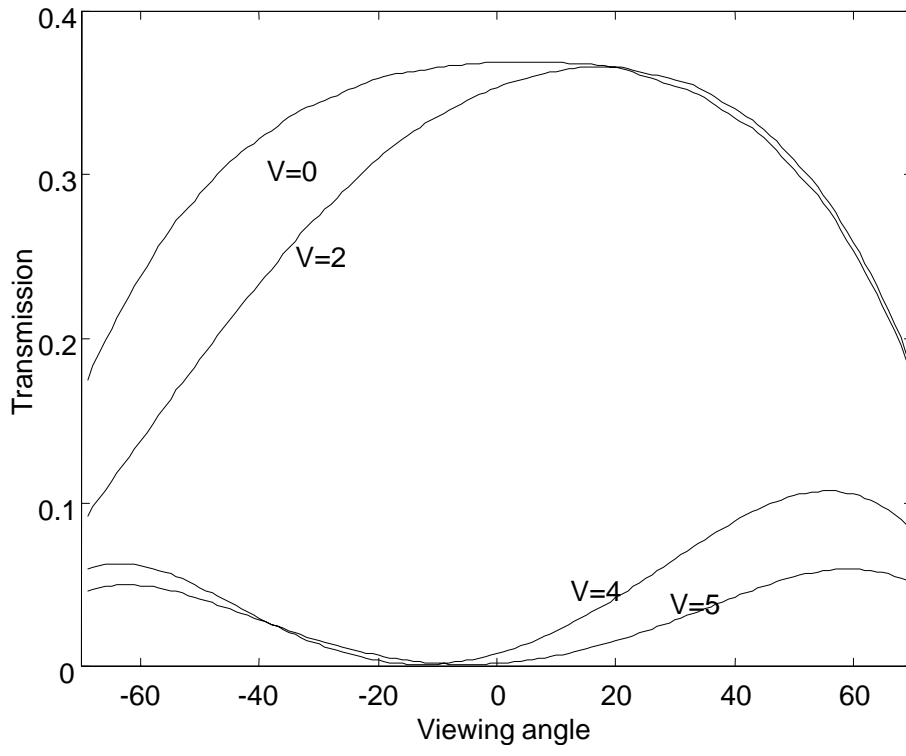


图 6(a):

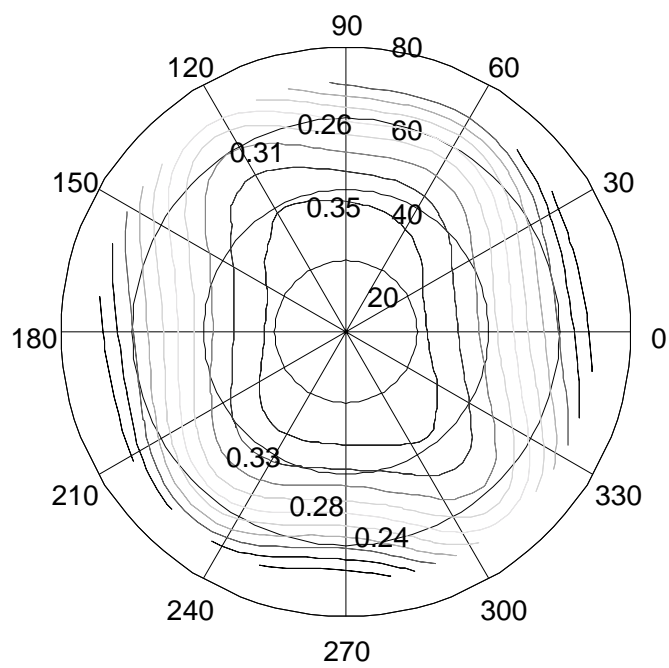


图 6(b):

