Vol. 21, No. 2 Apr. ,2006

文章编号:1007-2780(2006)02-0107-06

# 多维液晶指向矢的数值模拟计算

崔宏青<sup>1,2</sup>,宋玉龙<sup>1,2</sup>,刘绍锦<sup>1,2</sup>,张俊瑞<sup>1,2</sup>,冯亚云<sup>1,2</sup>,凌志华<sup>1</sup>

(1.中国科学院长春光学精密机械与物理研究所激发态物理国家重点实验室,吉林长春 130033, E-mail; cuihq1020@126, com;
 2.中国科学院研究生院,北京 100039)

摘 要:从 Oseen-Frank 弹性连续体理论出发,用有限差分和张弛法详细地介绍了求解三维 液晶指向矢的方法,并给出程序流程图,程序运行过程中发现具有速度快、稳定性好、精确度 高的特点,适合于求解复杂的液晶结构。文章最后基于此方法针对 LCoS 中指向矢的分布进 行了简单的模拟,给出了两相邻显示像素的指向矢分布图形,网格划分为 50×50×20 个节 点,在 Pentium 4, 2.8 GHz 的计算机上求解需 564.36 s。

**关 键 词:**液晶;指向矢;欧拉-拉格朗日方程;LCoS **中图分类号:**O753.2 **文献标识码:**A

1引言

对于液晶显示的数值模拟计算可分为两步: 第一步,首先根据初始条件计算液晶分子在外电 场作用下的指向矢在空间的分布[1~3]。第二步, 使用 Berreman 4×4 矩阵或扩展琼斯矩阵计算液 晶盒的电光特性。现代高档的液晶显示器件要求 有很高的光电显示特性,比如高对比度、高亮度、 大视角、快速响应等特点,特别是为了实现广角, 像素的多畴(multi-domain)化应运而生,也就是 说通常一个显示像素包含着不同液晶取向的若干 子像素,这一效果可以通过几种技术来实现:对显 示像素电极图形进行结构化设计[4],或让电极在 基板表面形成凸起<sup>[5]</sup>以及利用光控取向形成不同 取向的液晶层<sup>[6]</sup>。但是模拟优化这种多畴结构是 一种比较困难的事情,因为,通常这种多畴结构会 有畴壁(通常指畴与畴之间形成的向错回线)的存 在,从而使显示效果恶化。对于相对简单的电极 结构而言,一般来说,当液晶层的厚度远小于液晶 像素电极尺寸时,使用一维模拟已经足够了。但 是,如果当液晶层的厚度与液晶像素电极的长度 可比拟时,横向电场的作用与垂直电场相比越来 越显著。由于液晶分子本身的各向异性,这时在 相邻像素间液晶分子取向很容易产生畸变,从而

对于以上提到的几种情况,必须计算二维或 三维液晶分子指向矢的分布,以帮助我们用各种 方法求解液晶器件的电光响应曲线,从而达到优 化设计的目的。所以本文针对这种需要着重研究 了用于多维液晶指向矢的数值模拟方法。

2 模拟方法

#### 2.1 求解液晶指向矢的基本原理及方法比较

根据 Oseen-Frank 液晶连续体弹性形变理 论<sup>[8]</sup>,在外加电场作用下,液晶指向矢通过展曲、 扭曲和弯曲 3 种形变,从原先的平衡状态到达另 一个平衡状态,伴随这一过程的是液晶吉布斯自 由能趋向最小值,液晶指向矢模拟计算是根据这 一原理求解的。

液晶指向矢的求解有各种各样的方法:牛顿 法、有限差分迭代法、张驰法、有限元法等等。牛 顿法对于计算简单的扭曲丝状液晶比较方便,但

也会产生向错回线,使对比度降低,从而图像显示 变得模糊,这就是所谓的"边缘场效应"。这种现 象在微投影显示,例如硅基液晶微投影显示<sup>[7]</sup> (LCoS:Liquid Crystal on Silicon)和为了增大液 晶显示视角而采用的面内转换液晶显示(IPS:In plane Switching Liquid Crystal Display)中尤为 严重。

收稿日期: 2005-09-02;修订日期: 2005-11-06 基金項目: 国家"973"计划资助项目(No. 2003CB314704)

示

是对于各种新的、复杂的液晶盒则显得复杂、繁 琐,并难于给出稳定解。差分迭代法虽然具有稳 定、快速、简便和通用性好等优点,但是与牛顿法 -样,采用倾角 $\theta$ (液晶分子长轴与基板的夹角) 和扭曲角 φ(液晶分子长轴在基板上的投影与基 板锚定取向方向的夹角)来描述指向矢在空间的 分布,但是在数值模拟计算中采用这种表示方法 存在一个缺点,当液晶分子站立起来,即倾角  $\theta=$  $\pi/2$ 时,扭曲角 $\varphi$ 可以取任意角度值,使得计算结 果不稳定。张弛法是用指向矢的3个分量来描述 液晶指向矢的空间取向,在液晶的二维和三维计 算中用得比较普遍。张弛法和差分迭代法一样解 决了牛顿法的通用性问题,而且稳定性更好,能方 便地求解各种不同液晶盒的指向矢空间分布问 题,但是张弛法引入了时间参量和旋转黏滞系数。 为了求解液晶指向矢的空间分布,需要调整时间 参量、旋转黏滞系数和空间间隔的关系。但调整 其中一个参数,又往往要重新调整另外两个参数, 以使计算收敛。这点我们将在下面详细介绍。

# 2.2 三维液晶指向矢的计算方法

液晶吉布斯自由能有两种表示方法:矢量 (vector)表示法和 O 张量(tensor)表示方法。两 种方法各有优缺点,矢量表示方法不识别液晶分 子在空间某一确定点具有相同自由能时,n 和-n等价,这种等价性在物理上是已经证实的,即当液 晶分子在空间某一点处转过180°时,矢量法给出 不同的液晶自由能密度,而0张量表示方法不存 在这一问题,但是在某些情况下,使用Q张量表 示方法不仅不会得到精确的数值解,而且有些时 候得到的结果出现与物理实际不相符的情形[9]。 这种方法主要用于对有液晶缺陷存在的模拟计算 中。现在很多商业化的软件都使用矢量法,而且 矢量法具有数学表达简单,在同等误差精度条件 下所需划分的空间格点数少,以及计算耗时少等 优点。本文的计算采用通常使用的矢量表示 方法。

液晶吉布斯自由能由 3 部分组成:弹性形变 自由能 fs、电场能量 f。和液晶与基板两侧的锚定 能 fa,由于在许多液晶显示中使用强锚定,因此 对指向矢在电场作用下的形变自由能变化没有贡 献,所以在这里的计算中暂不予考虑。

用矢量法表示液晶弹性形变自由能密度为:

$$f_{\rm S} = \frac{1}{2} k_{11} (\nabla \cdot \boldsymbol{n})^2 + \frac{1}{2} k_{22} (\boldsymbol{n} \cdot \nabla \times \boldsymbol{n} + q_0)^2 + \frac{1}{2} k_{33} (\boldsymbol{n} \times \nabla \times \boldsymbol{n})^2 \qquad (1)$$

$$|\mathbf{n}| = 1 \quad \mathbf{n} = (n_r, n_y, n_z) \tag{2}$$

其中  $k_{11}$ ,  $k_{22}$ ,  $k_{33}$  是展曲、扭曲、弯曲弹性常数; n是单位指向矢。 $q_0 = \frac{2\pi}{p}$ , p 是螺距。外加电场施 加给液晶的电场自由能密度为:

$$f_{\rm e} = \frac{1}{2} E \times \boldsymbol{D} \tag{3}$$

其中,

$$E = -\nabla \cdot V \tag{4}$$

$$\boldsymbol{D} = \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \boldsymbol{E} \tag{5}$$

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} & \varepsilon_{32} & \varepsilon_{33} \end{pmatrix}$$
$$= \begin{pmatrix} \varepsilon_{\perp} + \Delta \varepsilon n_{x}^{2} & \Delta \varepsilon n_{x} n_{y} & \Delta \varepsilon n_{x} n_{z} \\ \Delta \varepsilon n_{y} n_{x} & \varepsilon_{\perp} + \Delta \varepsilon n_{y}^{2} & \Delta \varepsilon n_{y} n_{z} \\ \Delta \varepsilon n_{z} n_{y} & \Delta \varepsilon n_{z} n_{y} & \varepsilon_{\perp} + \Delta \varepsilon n_{z}^{2} \end{pmatrix}$$
(6)

其中 *E* 是外加电场强度, *D* 是电位移矢量, *V* 是 电压,  $\Delta \epsilon \approx \epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}, \epsilon_{\parallel}, \epsilon_{\perp}$  分别是平行和垂直于液 晶分子光轴方向的电介质常数。

总的液晶吉布斯自由能为:

$$W_{\rm G} = \int_{\Omega} F_{\rm G} \mathrm{d}\nu = \int_{\Omega} (f_{\rm S} - f_{\rm e}) \mathrm{d}\nu \qquad (7)$$

液晶指向矢在外加电压下达到平衡状态时, W<sub>G</sub>取最小值,这可以根据欧拉-拉格朗日方程求 解。式(7)的欧拉方程可表示为:

$$0 = -[F_G]_V \tag{8}$$

$$0 = - [F_G]_{n_i} + \lambda n_i \qquad (9)$$

其中

$$[F_{G}]_{V} = \frac{\partial F_{G}}{\partial V} - \frac{d}{dx} \left( \frac{\partial F_{G}}{\partial \left( \frac{dV}{dx} \right)} \right) - \frac{d}{dy} \left[ \frac{\partial F_{G}}{\partial \left( \frac{dV}{dy} \right)} \right] - \frac{d}{dz} \left[ \frac{\partial F_{G}}{\partial \left( \frac{dV}{dz} \right)} \right]$$
(10)

$$\begin{bmatrix} F_G \end{bmatrix}_{n_i} = \frac{\partial F_G}{\partial n_i} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \left[ \frac{\partial F_G}{\partial \left( \frac{\mathrm{d}n_i}{\mathrm{d}x} \right)} \right] - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}y} \left[ \frac{\partial F_G}{\partial \left( \frac{\mathrm{d}n_i}{\mathrm{d}y} \right)} \right] - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z} \left[ \frac{\partial F_G}{\partial \left( \frac{\mathrm{d}n_i}{\mathrm{d}z} \right)} \right] \quad i = x, y, z \quad (11)$$

式中 λ 是拉格朗日因子以保证 n 是单位矢量。式 (8)用来计算空间格点每一点的电压值的变化,在

第3部分详细介绍;对于式(9)引入时间参量和黏 滞系数:

$$\gamma \, \frac{\mathrm{d}n_i}{\mathrm{d}t} = -\left[F_g\right]_{n_i} + \lambda n_i \tag{12}$$

但是使用式(12),当计算循环数据更新时我们不可能同时调整拉格朗日因子λ和液晶指向矢随时间的变化,因此可以舍弃拉格朗日因子项,在每次循环后使液晶分子指向矢长度归一化。用有限差分代替微分使式(12)离散化得到:

$$\gamma \frac{\Delta n_i}{\Delta t} = - [F_G]_{n_i} \Rightarrow \Delta n_i = - \frac{\Delta t}{\gamma} [F_G]_{n_i} \Rightarrow$$
$$n_i^{\text{new}} = n_i^{\text{old}} - \frac{\Delta t}{\gamma} [F_G]_{n_i} \qquad (13)$$

然后,使 ninew长度归一化:

$$n_i = \frac{n_i}{\sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2}} \quad i = x, y, z \quad (14)$$

# 2.3 空间格点的划分和电压分布的模拟计算

对于三维模拟计算,空间网格点要划分成立 体方格形式的,这就使得节点数比一维和二维的 大大增加,划分的空间格点数的多少直接影响到 计算的精度和运算的时间,通常每一单元格的长 度应小于可见光波长,如果光学介电张量(也就是 指向矢)变化更快,那就需把它划分得更细。

空间每一格点处的电压的变化分布求解一般 有两种方法:一种是迭代张弛法(iterative relaxation method<sup>[10]</sup>),这种方法和上面介绍的指向矢的求解 方法类似,即对式(8)进行求解。需要在求解指向矢 的主程序当中单独拿出一块来求解电压分布的张弛 循环,这样就增加了计算的时间,所以这种计算电压 的方法很少采用。另外一种是利用高斯定理直接求 解法:取空间某一格点及其周围格点,如图1所示。

由高斯定理,

$$\nabla \cdot \boldsymbol{D} = 0 \tag{15}$$

将式(4),(5),(6)代入式(15)得:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{11.x}V_x + \varepsilon_{11}V_{xx} + \varepsilon_{12.x}V_y + \varepsilon_{12}V_{yx} + \varepsilon_{13.x}V_z + \\ \varepsilon_{13}V_{zx} + \varepsilon_{21.y}V_x + \varepsilon_{21}V_{yx} + \varepsilon_{22.y}V_y + \varepsilon_{22}V_{yy} + \\ \varepsilon_{23.y}V_z + \varepsilon_{23}V_{zy} + \varepsilon_{31.z}V_x + \varepsilon_{31}V_{zx} + \varepsilon_{32.z}V_y + \\ \varepsilon_{32}V_{zy} + \varepsilon_{33.z}V_z + \varepsilon_{33}V_{zx} = 0 \end{aligned}$$

其中

$$V_{k} = \frac{\partial V(x, y, z)}{\partial k}; \quad V_{ij} = \frac{\partial^{2} V(x, y, z)}{\partial i \partial j};$$
$$\epsilon_{ql.y} = \frac{\partial \epsilon_{ql}(x, y, z)}{\partial \gamma}$$
(16)

$$i, j, k, \gamma = x, y, z; \quad \alpha, \beta = 1, 2, 3$$



图1 空间某一格点(*i*,*j*,*k*)处电压和周围格点电压分布 关系示意图。

Fig. 1 Sketch of the position relation between the voltage value at the point (i, j, k) of the space and those of its adjacent points.

# 用有限差分替换式(16)的微分使其线性化

$$V_{x} = \frac{1}{2} \frac{\nu_{i+1,j,k} - \nu_{i-1,j,k}}{\Delta x}$$

$$V_{y} = \frac{1}{2} \frac{\nu_{i,j+1,k} - \nu_{i,j-1,k}}{\Delta y}$$

$$V_{z} = \frac{1}{2} \frac{\nu_{i,j,k+1} - \nu_{i,j,k-1}}{\Delta z}$$

$$V_{zx} = \frac{\nu_{i+1,j,k} + \nu_{i-1,j,k} - 2\nu_{i,j,k}}{(\Delta x)^{2}}$$

$$V_{yy} = \frac{\nu_{i,j+1,k} + \nu_{i,j-1,k} - 2\nu_{i,j,k}}{(\Delta y)^{2}}$$

$$V_{zz} = \frac{\nu_{i,j,k+1} + \nu_{i,j,k-1} - 2\nu_{i,j,k}}{(\Delta x)^{2}}$$

$$V_{yz} = \frac{1}{4} \frac{\nu_{i+1,j+1,k} + \nu_{i-1,j-1,k} - \nu_{i-1,j+1,k} - \nu_{i+1,j-1,k}}{(\Delta x)(\Delta y)}$$

$$V_{yz} = \frac{1}{4} \frac{\nu_{i+1,j,k+1} + \nu_{i-1,j-1,k-1} - \nu_{i,j-1,k+1} - \nu_{i,j+1,k-1}}{(\Delta y)(\Delta z)}$$

$$V_{zz} = \frac{1}{4} \frac{\nu_{i+1,j,k+1} + \nu_{i-1,j,k-1} - \nu_{i-1,j,k+1} - \nu_{i+1,j,k-1}}{(\Delta x)(\Delta z)}$$
(17)

 $\Delta x$ ,  $\Delta y$ ,  $\Delta z$  分别是沿 x, y, z 方向把要求解的区 域划分成 m, n, l 等份相邻格点之间的间隔, 将式 (17)代入式(16)求解  $\nu_{i,j,k}$ ,这样空间每一格点处 新的电压值  $\nu_{i,j,k}$ 都可以用其周围的格点处的电压 值表示出来。

#### 2.4 指向矢和电压在边界处的处理

在程序运行过程中,因为计算的是一个有限 的区域,区域内部的格点处指向矢和电压的微分

第 21 卷

都可以由周围的格点处的值来表示,而边界处的 格点缺少有效的格点计算该处的微分,通常情况 下可以用周期性边界条件来处理。假如计算区域 具有周期性(比如胆甾相液晶结构,或由电极阵列 引起的液晶分子在边界处周期性排列),我们以一 个二维周期性排列来简单说明,如图2所示,图中 所画的是一个二维周期性单元节点图,指向矢在 x=0(y=0)处的形状和 x=6(y=4)处的形状相 同。圆所圈的点表示要求解微分的点,正方形所 圈的点代表求解微分用到的点,区域内部的点 (x=3,y=3)对 x 的微分可以直接由点(2,3)和 (4,3)求解,而在边界处点(0,1)可以认为是和点 (6,1)是等价的,因此点(0,1)对 x 的微分可以由 点(1,1)和(5,1)来求解即,f'(x=0)=f'(x=N)f(x=1)-f(x=N-1),其中,N+1 代表 x 方  $2\Lambda x$ 向上一个周期长度上的节点数,f表示指向矢或 电压在 x 方向上的分量。





Fig. 2 Calculating derivatives using periodic boundary conditions

#### 2.5 液晶指向矢的三维模拟流程图

三维液晶指向矢的模拟计算流程图如图 3 所示。

# 2.6 二维液晶指向矢的模拟计算

在某些液晶显示模式中,指向矢在某一方向 上基本保持不变,这时不必使用三维模拟,二维的 模拟就可以满足要求。IPS显示模式是典型的二 维模拟计算的实例,因为它的电极只排布在下基 板,上基板没有电极,液晶分子受横向电场控制而 平躺在基板表面变化,沿 IPS 梳形电极方向指向 矢均匀排列,在垂直于基板方向上垂直电场存在 梯度分布。这样我们便可以只考虑垂直于梳形电 极的二维平面内的指向矢分布。二维液晶指向矢



#### 图 3 液晶 3-D 指向矢数值模拟计算流程图

Fig. 3 Flow chart of numerical calculation for three dimensional liquid crystal director simulation

的计算可以由三维指向矢计算通过降维处理得到,通常情况下我们认为液晶指向矢沿 y 轴方向的变化率为零。而观看其在 x-z 平面的变化情况。即,令 $\frac{\partial g}{\partial y}=0$ ,g=V(x,y,z),n(x,y,z), $\epsilon(x, y,z)$ ,这样便实现了二维液晶指向矢的模拟计算。

# 3 LCoS 模拟计算

以 90 °扭曲向列相液晶 LCoS 微投影显示为 例,我们选择大小为 15  $\mu$ m×15  $\mu$ m 的显示像素 电极,取其下基板相邻的两块显示像素电极来进 行模拟,如图 3 所示。这里我们采用 Merck ZLI-4792 型液晶,参量为  $k_{11}$ =13.2 pN,  $k_{22}$ =6.5 pN,  $k_{33}$ =18.3 pN,  $\gamma$ =0.111 Pa • s,  $\epsilon_{//}$ =8.3, $\epsilon_{\perp}$ = 3.1。液晶盒的扭曲角度为  $\varphi = \frac{\pi}{2}$ ,预倾角  $\theta_p$ =3°, 盒厚 d=5  $\mu$ m。从图 4 和图 5 我们可以形象和直 观地观察到指向矢分布模拟计算结果。图 4 是液 晶盒中间层分子指向矢在 x-y 平面的俯视图形,



- 图 4 灰色部分为 LCoS 下基板两块显示像素电极图样,
   左边电极加 5 V 电压,右边像素电极加-3 V 电
   压;上基板是一块 36 μm×19 μm 的电极,电压为
   0 V。基板所在平面为 x-y 平面。
- Fig. 4 Gray parts are two electrode graphics in the bottom substrate of LCoS, with 5 V on left electrode, and -3 V on right one. The top plane is a 36  $\mu$ m  $\times$  19  $\mu$ m electrode, with 0 V on it. The substrate is on the x-y plane.

5	- 54	- 54	-	-	- 5	- 2	- 2		с.	-		-	-	-	-	-	-	- 24	-	-	-	-	-	•	· .	•	۰.	۰.	۰.	•	۰.	•	۰.	-				-	c
-	-		-	•	۰.	•				•			-		-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	•	•	-	•	•	•	•	•	-	•			-		
-	-	-	•	۰.									۰.			۰.	•	-	-	~	-	-	•	•	۰.	۰.					•		•	ε.	e. •	••		۰.	
•		-					•							•	•			•	-	-	•	-	-								-						• •		-
-	-	-	-	•	٠		٠	٠	٠	٠		٠	٠					-	~	-	•	-			,							1				• •	• •	• •	
٠	-	-	~				٠		٠									-	~	-	-	-	-	-					•						•		• •		
-	-	-	~														-	-	-	-	-	-	-									2				- 2			
-	-	-	-			٠								-		2	-	-	-	-	-	-	-	۰.	2	ъ.	2	2	ъ.	5	5	•	2						-
÷.	-	- 22	- 24	-		-		-		-	-	-		-		÷.	-	- 22	-	-	=	-	-	-	•	•	τ.	ъ.	•	•	•	•	•	5.					-
-	-	- 22	-	-	- 21				а.							Ξ.	5	-	=	Ξ.	Ξ.	-	۰.	۰.	۰.	۰.	۰.	۰.	۰.	۰.	۰.	٠.	۰.	5	- 1		-		-
_	-	-	•	•				•	۰.	•				•		-	-	-	_	-	-	-	•	•	÷.	•	•	۰.	•		•	•	•						-
-	-	-		-	•	۰.	•	٠		•	•			•	٠	•	-	-	-	-	-	-	•		۶.		٠.	•	•			۰.	•	•		•		•	
	-	۰		•			•	•	•		•		•	•	•	•	-	-	-	-	-	-		₽.	٤.	۰.		۰.	•	-		۰.	۰.	•			•••	•	
-	-		~		٠	•	٠	•	•	٠	٠		٠	٠	٠	•	-	-	-	•	••	-	ø		2			•	•		•		•	•		• •		• •	
-	-	-		•	٠	•	٠	•	•	•	•		•	٠	٠	٠	-	٠	-	-	-	-	•	۰						٠			•	۰.	•	• •	۰.		
-	-	-			٠								٠		٠	٠	٠		-0		-	-	-	0		2											۰.		-
-	-	-	-						٠	٠		٠			٠		-	٠	-	-	-	-		2				۰.							•	- 1	• •	-	
	10		-			•					•						-	- 22	-	-	-	-		6	~					-				•					
-	-	-	-									•					-	- 64	-	-	-	-	2	2	2		2					2	2						-
-	-		-	-									-		-	-	-		-	÷-	-	-	-	-	-		•		-	-	-	ъ.	-	ъ.					-
-	=	- 2	- 24	-	- 2		÷.				- 2		-	-	-	-	-	-	-	-	Ξ.	-	-	۰.	•	•	5	5		5.	ъ.	Ξ.	-	2				- 1	-
-	-	-	-	-				-			-			-		-	_		_	_	-	-	•	•	÷.	•	•	۰.	•	- 5-	5	5	5	-			_		-
=	-	-	-	- 51				•									•	- 72	-	-	-	-			٠.	۰.	۰.	۰.	٠.		۰.	٠.	۰.	•					•
~	~	-	-	- 5				•	•					•		•	•	-	Ξ.	-	•	•	•	•	4	٩.		۰.	۰.	•		۰.	۰.	•	•	• •		•	-
-	-	-	-		٠	•		•	•		•		•	٠	٠	-	•	-	-	-	-	-	•		۰.		•		•		•		•	•			• •		
-	-	-	•	•	٠	•	٠	•			٠	٠	•	٠	٠	-			-	-	-		-		ε.	e			•		•	•	•	•	•	•.	۰.	• •	-
-	-	-				•	•	•		٠		•	•	•		-	-	•	-	-	-	~	~					•					•	•			••		
-	-	-						٠					٠	٠	٠	٠		-	-		-	~			2		2								• •				
C <sup>2</sup>	-	-	-														-		-	-	-		-																
-	-		-													-	÷		-	-	-	-			ъ.									۰.					-
-	-														- 2	-	-	-	-	-	-	-	-	- 5					-	- 2	-	ъ.	ъ.	÷.,	-			_	-
-	-		-	- 24											-	-	-	-	-	-	-	-	-	•			-		-	- 24	-	÷.	-	ъ.	- 1		-		-
-	-	- 24	- 24	-					- 2							-	- 2	-	-	=	-	-	-	•	2	•	2	5	-	-	5	۰.	Ξ.	х.	Ξ.	-	5.3		
-	-	-		- 24									- 21		-		-		-	-	-	-	•	•	•	×.	•	5.	-	•	•	•	-	5.1					-
-	-		- 5	- 5	- 2				•					•				-	-	~	-	- 5			۰.	۰.	۰.	۰.	۰.	•	۰.	•	۰.	•	-				-
-	-	-	۰.	•							- 2						~	-	- 22	Ξ.	-	-	•		۰.	٠.	۰.	۰.	۰.	•	•	۰.	Ξ.	•				-	-
-	-	-					•		•			•	•	•	•	•	•	-	-	-	-	•	•				•	•	•	-	-	-	-	-	-			-	
-	-	•			٠.	•	٠	۰.	٠	٠	•	•	•	•	٠	•	•	~	-	•	-	-	,			€.	e		,	•	•		-	•	•				~
,	-	-	-	•			•	٠	٠	٠	٠	•	•	•	٠	٠	~	-	-	~	-	0	ø					•	•	-	~	-	~	-					-
-		-			- 2	٠	•	٠	٠	٠	•	٠	٠	٠	٠	•	•	-	-	-	-			2	1		0						~	•	•	• •		• •	-
-	-	- 2			2			٠	٠	٠	٠		٠	٠	•	٠	-	-	-	-	-	~		ò	1	0	0		1			2	-	~ .	۰.	-			
-	-	-	- 20								•	-		-			÷	-		-	÷	-					æ.		e	2				•		• 3			
~	-	-	-	2											-	-	-					-	2	2	٠.	2					2	*	٠.				۰.	- 7	-
			~			×.																		÷.,	•	÷.	•	-	×.	×.	٠.	-		-					

- 图 5 液晶盒中间层液晶分子在 z=2.5 μm, x-y 面上投 影的指向矢分布。
- Fig. 5 Distribution of mid-cell liquid crystal director on the projection of x-y plane when z=2, 5  $\mu$ m.

从中我们可以看到方形电极区域上方的液晶分子 不再是一个完整的方形分布,而是和四周的分子 取向相区分,4个边角处的液晶分子产生畸变,这 部分的横向电场分布比较复杂,对液晶分子的取 向影响比较大,如果加电压表示暗态的话,对显示 的直接影响表现为暗态漏光比较严重,从而降低 对比度。这就是边角效应(corner effect)。图 5 表示的是液晶分子指向矢在 x-z平面的投影分 布。从中我们可以看到电极和电极间隙处的指向 矢变化比较明显,形成一个近似"S"形的向错回 线,也会像边角处一样降低 LCoS 的对比度。从 而验证了边缘场效应(lateral field effect)的存在。



- 图 6 液晶分子在 y=9.5 μm, x-z 平面的投影处指向矢 的分布。
- Fig. 6 Distribution of liquid crystal director on the projection of x-z plane when  $y=9.5 \ \mu m$ .

# 4 结 语

通过比较求解液晶指向矢的各种方法的特 点,我们采用了有限差分和张弛法计算了三维液 晶指向矢分布,其中指向矢每次循环后归一化处 理,避免参数调整的复杂性,电压采用高斯定理直 接求解的方法提高了程序的运算速度,通过对 LCoS 中液晶指向矢的模拟,很好地验证了边缘 场效应的存在。

过去,通常采用2×2扩展琼斯矩阵和 Berreman 4×4 矩阵进行液晶的光学模拟,但这两种方 法都是针对一维的沿基板垂直方向变化的指向矢 进行分层计算的。现在我们能够模拟三维指向矢 的分布,为了相应地进行三维的光学模拟,我们可 以在将液晶层分层的基础上沿垂直方向均匀划分 成若干柱状单元,每一柱状单元可以看成是一个 一维分层光学结构,再将一维方法应用于每一柱 状单元,从而得到液晶盒的光电特性。但是这种 一维技术在处理两维或三维问题时不能有效地考 虑到光在液晶中传播时引起的侧面散射,同时不 能够精地计算倾斜入射的光在液晶中的传播。近 几年来,人们又发展了光束传播法(Beam Propagation Method)和时域有限差分法(Finite Difference Time Domain Method),用这种更加精确的 计算方法计算高分辨率和复杂的液晶结构,这是 我们今后工作的重点。

## 参考文献:

[1] Berreman D W. Numerial modelling of twisted nematic device [J]. Phil. Trans. R. Soc. Lond., 1983, A(309):

维普资讯 h	ttp://www	.cavip.com
--------	-----------	------------

112	液	間	与	亚	示	第 21 卷

203-216.

- [2] Lien A. Application of computer simulation to improve the optical performance of liquid crystal display [J]. Opt. Eng., 1993,32(8):1762-1768.
- [3] 邵喜斌,黄锡珉.有限元法求解液晶层中的指向失的分布 [J]. 液晶与显示,2001,16(3);163-169.
- [4] Yamamoto T, Hirose S, Clerc J F, et al. Full cone wide viewing angle multicolor CSH-LCD [C]//SID'91 Digest. 1991:762-765.
- [5] Koike Y, Kataoka S, Sasaki T, et al. A vertically aligned LCD providing super-high image quality [C]//IDW'97 Digest. 1997:159-162.
- [6] Schadt M, Schmitt K, KozinkovV, et al. Surface induced parallel alignment of liquid crystals by linearly polymerized photopolymers [J]. Jpn. J. Appl. Phys., 1992,31(7):2155.
- [7] 欧毅,宋玉龙,刘明,等. LCoS 反射层的实验研究 [J]. 液晶与显示,2005,20(5):554-557.
- [8] 李伯符. 液晶物理——电场对液晶的作用与液晶的光学性质 [J]. 液晶与显示,2001,16(3):227-233.
- [9] Anderson J E. Shortcomings of the Q-tensor method for modeling liquid crystal devices [C]//SID'99 Digest. 1999: 198-201.
- [10] Lien A. Simulation of three-dimensional director structure in twisted nematic liquid crystal displays [J]. Appl. Phys. Lett., 1993,62(10):1079-1081.

# Multi-dimensional Numerical Modeling of Liquid Crystal Director

CUI Hong-qing<sup>1,2</sup>, SONG Yu-long<sup>1,2</sup>, LIU Shao-jin<sup>1,2</sup>,

ZHANG Jun-rui<sup>1,2</sup>, FENG Ya-yun<sup>1,2</sup>, LING Zhi-hua<sup>1</sup>

(1. Key Laboratory of Excited State Processes, Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics,

Chinese Academy of Sciences, Changchun 130033, China, E-mail: cuihq1020@126.com;

2. Graduate School of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100039, China)

#### Abstract

From the theory of Oseen-Frank, using finite difference and over-relaxation method, the numerical model of multi-dimensional liquid crystal director deformation profile is introduced, and the flow chart of the program is given. The program has the features of quick speed, stability and high-accuracy, and it is suitable for solving any complicated liquid crystal structure. The liquid crystal director distribution in LCoS is simply calculated, and the picture of LC director structure between two adjacent display pixels inside the cell is given. The spacing grid is  $50 \times 50 \times 20$ , the solving time is 564, 36 s by the computer of Pentium 4, 2.8 GHz.

Key words: liquid crystal; director; Euler-Lagrange equation; LCoS

作者简介:崔宏青(1981一),男,山东德州人,博士研究生,主要从事液晶显示器件设计与模拟计算的研究。