

液晶指向矢分布的模拟和比较研究

王 谦 何赛灵

(浙江大学光电系现代光学仪器国家重点实验室光与电磁波研究中心 杭州 310027)

(2000 年 8 月 25 日收到, 2000 年 11 月 13 日收到修改稿)

用差分迭代法计算了扭曲、超扭曲以及混合排列丝状液晶在电场中指向矢的空间分布, 与牛顿法和张弛法的计算作了比较, 并应用于液晶电光特性的模拟计算.

关键词: 液晶, 指向矢, 差分迭代

PACC: 6130

1 引 言

液晶显示在显示行业中, 占有重要的地位. 许多液晶工作者通过对液晶显示光学的模拟计算提出各种显示模式. 为了对液晶显示的电光特性进行模拟计算, 首先要解决的问题是如何正确计算液晶在外加电场作用下指向矢的空间分布^[1-3]. 在液晶整个模拟计算过程中, 指向矢的计算是计算量最大的一个步骤.

根据液晶连续体弹性形变理论^[4,5], 在外加电场作用下, 液晶指向矢通过展曲、扭曲和弯曲等三种形变, 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来求解的. 在液晶指向矢分布计算中, 牛顿法^[6]用指向矢的倾角和扭曲角来描述液晶指向矢的空间取向. 牛顿法对于计算简单的扭曲丝状液晶比较方便, 但对于各种新的、复杂的液晶盒, 则显得复杂、繁琐, 并且难于给出稳定的解. 张弛法^[7]是用指向矢的三个分量来描述液晶指向矢的空间取向. 张弛法解决了牛顿法的通用性问题, 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, 往往要重新调整另外两个参数, 以使计算收敛.

牛顿法与张弛法各有优点, 同时也有一定的局限性. 在液晶显示模拟计算过程中, 我们提出的差分迭代法具有稳定、快速、简便和通用性好等优点. 差

分迭代法与牛顿法一样, 采用倾角和扭曲角来描述液晶指向矢的空间取向. 在通用性上, 差分迭代法与张弛法一样, 对于不同的液晶盒能够方便地求出液晶指向矢空间取向. 本文通过对扭曲丝状和超扭曲丝状, 以及混合排列丝状三种实际液晶盒的具体计算对三种方法进行了比较, 并将差分迭代法计算的结果应用于液晶的电光特性的模拟计算.

2 指向矢求解原理与方法

牛顿法、张弛法和差分迭代法的求解依据都是建立在液晶连续体弹性形变理论的基础上. 液晶指向矢形变自由能密度为^[1,4]

$$F_s = \frac{1}{2} K_{11} (\nabla \cdot \hat{n})^2 + \frac{1}{2} K_{22} (\hat{n} \cdot \nabla \hat{n})^2 + \frac{1}{2} K_{33} (\hat{n} \times \nabla \hat{n})^2 + q_0 K_{22} (\hat{n} \cdot \nabla \hat{n}), \quad (1)$$
$$|\hat{n}| = 1, \quad (2)$$

其中 K_{11} , K_{22} , K_{33} 是展曲, 扭曲, 弯曲弹性参量; \hat{n} 是单位指向矢. $q_0 = \frac{2\pi}{p}$, $q_0 > 0$ 是右旋, $q_0 < 0$ 是左旋; p 是螺距.

外加电场给液晶带来的电场自由能密度为

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

$$\mathbf{E} = -\text{grad}(U), \quad (4)$$

$$\mathbf{D} = \epsilon \cdot \mathbf{E}, \quad (5)$$

$$\epsilon = \begin{bmatrix} \epsilon_{\perp} + \Delta\epsilon n_x^2 & \Delta\epsilon n_x n_y & \Delta\epsilon n_x n_z \\ \Delta\epsilon n_x n_y & \epsilon_{\perp} + \Delta\epsilon n_y^2 & \Delta\epsilon n_y n_z \\ \Delta\epsilon n_x n_z & \Delta\epsilon n_y n_z & \epsilon_{\perp} + \Delta\epsilon n_z^2 \end{bmatrix}, \quad (6)$$

其中 E 是外加电场强度, D 是电位移, ϵ_{\perp} , ϵ_{\parallel} 是介电系数, $\Delta\epsilon = \epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}$. 总的吉布斯自由能为(考虑一维情况)

$$W_G = \int_0^d F_G dz = \int_0^d (F_s - F_e) dz. \quad (7)$$

液晶指向矢在外加电压下达到平衡状态时, W_G 达到最小值; 为求解出在不同电压作用下液晶指向矢的空间取向, 牛顿法、张弛法和差分迭代法均采用变分法以得到各个欧拉方程, 再以不同的方法求解欧拉方程以得到平衡状态下的液晶指向矢空间分布. 以液晶指向矢的倾角和扭曲角来表示液晶指向矢的空间取向时^[8],

$$\hat{n} = (\cos\theta \cdot \cos\varphi, \cos\theta \cdot \sin\varphi, \sin\theta). \quad (8)$$

液晶吉布斯自由能成为

$$F_G = \frac{1}{2} \left[f(\theta) \left(\frac{d\theta}{dz} \right)^2 + g(\theta) \left(\frac{d\varphi}{dz} \right)^2 \right] - K_{22} \frac{2\pi}{P} \cos^2\theta \frac{d\varphi}{dz} - \frac{1}{2} \left(-\frac{dU}{dz} \right) (\epsilon_{\parallel} \sin^2\theta + \epsilon_{\perp} \cos^2\theta), \quad (9)$$

其中

$$f(\theta) = K_{11} \cos^2\theta + K_{33} \sin^2\theta, \quad (10)$$

$$g(\theta) = (K_{22} \cos^2\theta + K_{33} \sin^2\theta) \cos^2\theta. \quad (11)$$

根据变分原理, 可以得到下列三个方程:

$$\frac{\partial F_G}{\partial \theta} - \frac{d}{dz} \left[\frac{\partial F_G}{\partial \left(\frac{d\theta}{dz} \right)} \right] = 0, \quad (12)$$

$$\frac{\partial F_G}{\partial \varphi} - \frac{d}{dz} \left[\frac{\partial F_G}{\partial \left(\frac{d\varphi}{dz} \right)} \right] = 0, \quad (13)$$

$$\frac{\partial F_G}{\partial U} - \frac{d}{dz} \left[\frac{\partial F_G}{\partial \left(\frac{\partial U}{\partial z} \right)} \right] = 0. \quad (14)$$

传统的牛顿法通过降低方程的阶进行积分可以得到:

在 $0 \leq z < d/2$ 时,

$$z = \int_0^{\theta} \sqrt{N(\theta)} d\theta, \quad (15)$$

$$\varphi = \int_0^{\theta} \frac{B + K_{22} \frac{2\pi}{P} \cos^2\theta}{g(\theta)} \sqrt{N(\theta)} d\theta; \quad (16)$$

在 $d/2 \leq z \leq d$ 时,

$$z = d/2 + \int_{\theta}^{\theta_m} \sqrt{N(\theta)} d\theta, \quad (17)$$

$$\varphi = \frac{\varphi_0}{2} + \int_{\theta}^{\theta_m} \frac{B + K_{22} \frac{2\pi}{P} \cos^2\theta}{g(\theta)} \sqrt{N(\theta)} d\theta, \quad (18)$$

其中

$$N(\theta) = f(\theta) \left[\frac{(B + K_{22} \frac{2\pi}{P} \cos\theta_m)^2}{g(\theta_m)} - \frac{(B + K_{22} \frac{2\pi}{P} \cos\theta)^2}{g(\theta)} - \frac{D_z^2}{\epsilon_{\parallel} \sin^2\theta_m + \epsilon_{\perp} \cos^2\theta_m} + \frac{D_z^2}{\epsilon_{\parallel} \sin^2\theta + \epsilon_{\perp} \cos^2\theta} \right]^{-1}.$$

牛顿法对于对称型扭曲丝状液晶能否解得正确的液晶指向矢空间取向, 与积分常数 (B, D_z) 的初始值的选取很有关系. 在计算过程中, 牛顿法的局限性表现在液晶盒的限制, 比如对于液晶盒表面预倾角不相同(对称性条件不满足)及混合排列^[9]等复杂的液晶盒, 上述计算公式需要作修改, 并且整个求解过程更复杂. 针对这些问题, 近年来液晶显示光学模拟计算中张弛法比较通行.

张弛法以指向矢各分量来描述液晶指向矢的空间取向, 在液晶指向矢的二维和三维计算^[10,11]中用的较为普遍. 对于液晶的吉布斯自由能密度, 如果用 $n(n_x, n_y, n_z)$ 代入, 则可以得到如下具体形式:

$$F_G = \frac{1}{2} K_{11} (n_z)_{,z}^2 + \frac{1}{2} K_{22} (n_y \cdot n_x)_{,z}^2 - n_x \cdot n_y)_{,z}^2 + \frac{1}{2} K_{33} ((n_z n_x)_{,z}^2 + (n_z, n_y)_{,z}^2 + (n_x n_x)_{,z}^2 + n_y n_y)_{,z}^2) + q_0 K_{22} (n_y \cdot n_x)_{,z}^2 - n_x \cdot n_y)_{,z}^2 - \frac{1}{2} (\epsilon_{\perp} + \Delta\epsilon n_z^2) \cdot U_{,z}^2, \quad (19)$$

其欧拉方程为

$$0 = -[F_G]_U, \quad (20)$$

$$0 = -[F_G]_{n_i} + \lambda n_i, \quad (21)$$

其中

$$[F_G]_U = \frac{\partial F_G}{\partial U} - \frac{d}{dz} \left(\frac{\partial F_G}{\partial U_{,z}} \right),$$

$$[F_G]_{n_i} = \frac{\partial F_G}{\partial n_i} - \frac{d}{dz} \left(\frac{\partial F_G}{\partial n_{i,z}} \right), \quad i = x, y, z,$$

式中 λ 是拉格郎日因子以保证 \hat{n} 是单位矢量. 对于(21)式引入黏滞系数和时间参量,

$$\gamma \frac{\partial}{\partial t} n_i = -[F_G]_{n_i} + \lambda n_i. \quad (22)$$

求解时, 先给定一个指向矢的初始分布, 然后求解在这个初始分布下的电场分布, 通过电场分布确定下一时刻的指向矢分布, 再由新的指向矢分布求解电

场分布. 这样不断循环, 最后收敛于平衡状态下的指向矢空间分布. 在用张弛法求解液晶指向矢空间分布时, 对于不同的液晶盒需要调整黏滞系数、时间与空间步长的关系以保证计算的收敛.

牛顿法与张弛法各自都存在一定的局限性. 因此为了正确求解液晶指向矢的空间分布, 需要一种通用性强, 计算稳定, 方法简单的算法.

我们提出的差分迭代法可以用指向矢的倾角和扭曲角 (θ, φ) 来描述液晶指向矢的空间取向. 将 (9)–(11) 式代入 (12)–(14) 式, 可以得到一组非线性偏微分方程:

$$2f(\theta) \frac{d^2 \theta}{dz^2} + f'(\theta) \left(\frac{d\theta}{dz} \right)^2 - g'(\theta) \left(\frac{d\varphi}{dz} \right)^2 - K_{22} \frac{8\pi}{p} \cos\theta \sin\theta \frac{d\varphi}{dz} + 2 \left(\frac{dU}{dz} \right)^2 \Delta \varepsilon \sin\theta \cos\theta = 0, \quad (23)$$

$$g(\theta) \frac{d^2 \varphi}{dz^2} + g'(\theta) \frac{d\varphi}{dz} \frac{d\theta}{dz} + 2K_{22} \frac{2\pi}{p} \cos\theta \sin\theta \frac{d\theta}{dz} = 0, \quad (24)$$

$$\frac{d^2 U}{dz^2} (\varepsilon_{//} \sin^2 \theta + \varepsilon_{\perp} \cos^2 \theta) + 2 \frac{dU}{dz} \Delta \varepsilon \sin\theta \cos\theta \frac{d\theta}{dz} = 0. \quad (25)$$

对于这组偏微分方程, 采用中心差分直接离散并转换形式如下:

$$\begin{aligned} \theta_i^{(n+1)} = & \left\{ 2f(\theta_i^{(n)}) \frac{\theta_{i+1}^{(n)} + \theta_{i-1}^{(n)}}{h^2} + f'(\theta_i^{(n)}) \left(\frac{\theta_{i+1}^{(n)} - \theta_{i-1}^{(n)}}{2h} \right)^2 \right. \\ & - g'(\theta_i^{(n)}) \left(\frac{\varphi_{i+1}^{(n)} - \varphi_{i-1}^{(n)}}{2h} \right)^2 - K_{22} \frac{8\pi}{p} \cos\theta_i^{(n)} \\ & \cdot \sin\theta_i^{(n)} \left(\frac{\varphi_{i+1}^{(n)} - \varphi_{i-1}^{(n)}}{2h} \right) + 2 \left(\frac{U_{i+1}^{(n)} - U_{i-1}^{(n)}}{2h} \right)^2 \\ & \left. \cdot \Delta \varepsilon \sin\theta_i^{(n)} \cos\theta_i^{(n)} \right\} h^2 (4f(\theta_i^{(n)})), \quad (26) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \varphi_i^{(n+1)} = & \left\{ g(\theta_i^{(n)}) \left(\frac{\varphi_{i+1}^{(n)} + \varphi_{i-1}^{(n)}}{h^2} \right) + g'(\theta_i^{(n)}) \right. \\ & \cdot \left(\frac{\varphi_{i+1}^{(n)} - \varphi_{i-1}^{(n)}}{2h} \right) \left(\frac{\theta_{i+1}^{(n)} - \theta_{i-1}^{(n)}}{2h} \right) + 2K_{22} \frac{2\pi}{p} \cos\theta_i^{(n)} \\ & \left. \cdot \sin\theta_i^{(n)} \frac{\theta_{i+1}^{(n)} - \theta_{i-1}^{(n)}}{2h} \right\} h^2 (2g(\theta_i^{(n)})), \quad (27) \end{aligned}$$

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

$$(X \varepsilon_{//} \sin^2 \theta_i^{(n)} + \varepsilon_{\perp} \cos^2 \theta_i^{(n)})). \quad (28)$$

(26)–(28) 式是一组迭代方程组, 对于该迭代方程组, 以液晶表面强锚泊为边界条件, 选取以未加电压时的指向矢分布作为求解为上述方程的初始值, 通过计算机直接迭代计算便可求得液晶指向矢在外加电场作用下的液晶指向矢的空间分布. 这种方法可以不受液晶盒类型的限制, 对于混合液晶盒等复杂的液晶盒可以像对待简单的对称扭曲丝状液晶盒一样处理. 经过多次的实际计算, 证实此法求解的结果与牛顿法得出的结果完全吻合.

牛顿法、张弛法以及差分迭代法的理论依据都是变分原理中的欧拉方程, 但是变分法求出来的是液晶吉布斯自由能的极值, 并不是最小值. 有人试着用全局优化的方法 (如模拟退火法^[12]) 来求解液晶在平衡状态下的指向矢分布. 但是由于求解速度非常慢, 在实际液晶模拟计算中并不可行. 因此现在一般的液晶模拟计算中仍然采用变分法, 而牛顿法、张弛法以及差分迭代法的差别也就存在于对欧拉方程的不同处理上. 下面通过三个实际的液晶盒计算, 对三种不同方法进行比较.

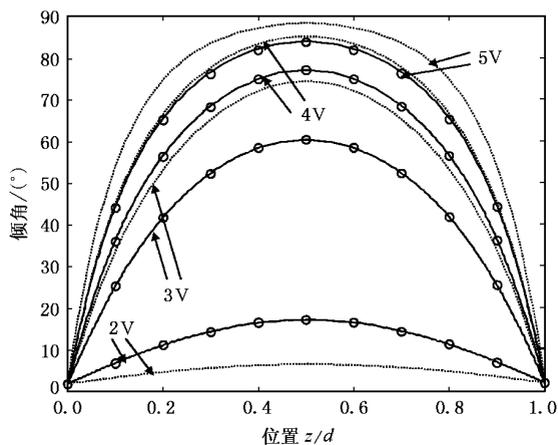
3 指向矢计算结果比较

为了对三种计算方法进行比较, 我们选取了三种液晶盒: 扭曲丝状液晶盒、超扭曲丝状液晶盒、混合排列丝状液晶盒.

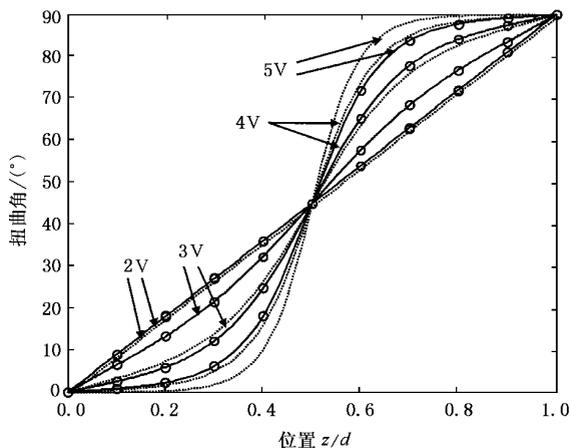
3.1 扭曲丝状液晶盒 (TN-LCC)

在液晶显示中, 扭曲对称丝状液晶盒用的最为普遍. 对于该液晶盒的指向矢求解计算, 三种方法均可较容易地求得结果. 以 90°ZLI-3771 对称丝状扭曲型 (TN) 液晶盒为例, 其参数为 $K_{11} = 13.7 \times 10^{-12} \text{ N}$, $K_{22} = 7.0 \times 10^{-12} \text{ N}$, $K_{33} = 16.8 \times 10^{-12} \text{ N}$, $\varepsilon_{//} = 7.3\varepsilon_0$, $\varepsilon_{\perp} = 3.6\varepsilon_0$, ε_0 是真空介电常数. 取 $V = 2, 3, 4, 5$ 四个电压点, 图 1(a) 和 (b) 分别是该液晶盒在外加电场作用下倾角和扭曲角的空间分布图. 图中虚线是用张弛法算出的结果, 实线是用差分迭代法算出的结果, 圆圈是用牛顿法算出的结果.

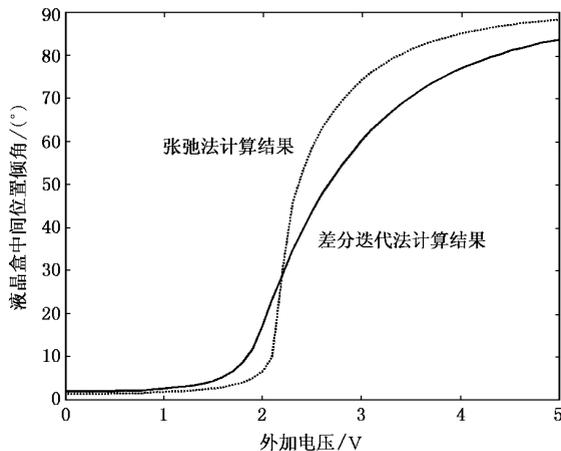
从图 1(a) (b) 的指向矢分布可以看出, 牛顿法和差分迭代法计算的结果几乎完全一样, 而张弛法的结果则有较大出入. 牛顿法和差分迭代法对于指向矢空间取向的描述是用倾角与扭曲角, 而张弛法则是用单位指向矢的三个空间分量. 可见不同的指向矢描述方法也会给结果带来不同的影响.



(a) 90°ZLI-3771 对称丝状扭曲型液晶指向矢在外加电压作用下倾角与空间位置的关系



(b) 90°ZLI-3771 对称丝状扭曲型液晶指向矢在外加电压作用下扭曲角与空间位置的关系



(c) 90°ZLI-3771 对称丝状扭曲型液晶中间层指向矢倾角与外加电压的关系

根据扭曲丝状液晶的阈值电压公式^[13]

$$V_T = \frac{\pi \sqrt{K_{11}}}{\sqrt{\epsilon_{//} - \epsilon_{\perp}}} \sqrt{1 + \frac{K_{33} - 2K_{22}}{K_{11}} \frac{\Phi^2}{\pi^2}}, \quad (29)$$

针对上述液晶盒,得到该液晶盒的阈值电压 $V_T = 2.08V$.在液晶外加电压低压区($U < V_T$),用牛顿法和差分迭代法求解的指向矢形变要大于用张弛法得出的结果,而在液晶外加电压高压区($U > V_T$)刚好相反.关于这一点,可以从液晶盒中间层倾角与外加电压的关系更为明显地看出(图 1(c)).

3.2 超扭曲丝状液晶盒 (STN-LCC)

为实现多行多列的大信息量显示,液晶显示驱动要求的开电压和关电压很接近,这就要求陡峭的液晶盒电光特性曲线.而超扭曲丝状液晶盒(扭曲角 $> 90^\circ$)正以其陡峭的电光特性曲线,在大信息量显示中,显得很有优势.液晶盒的超扭曲是通过在液晶材料中添加手征性分子实现的.下面用差分迭代法和张弛法对其指向矢分布和电光特性分别进行模拟.液晶的材料参数和液晶盒的结构参数如下: $K_{11} = 12.6 \times 10^{-12} N$, $K_{22} = 6.1 \times 10^{-12} N$, $K_{33} = 18.65 \times 10^{-12} N$, $\epsilon_{//} = 12.23\epsilon_0$, $\epsilon_{\perp} = 4.75\epsilon_0$, $\theta_0 = 5^\circ$, $\varphi_0 = 270^\circ$, $d/p = 0.75$.通过上述不同的方法计算,可以分别得到图 2(a)的中间层倾角和外加电压的关系曲线图.

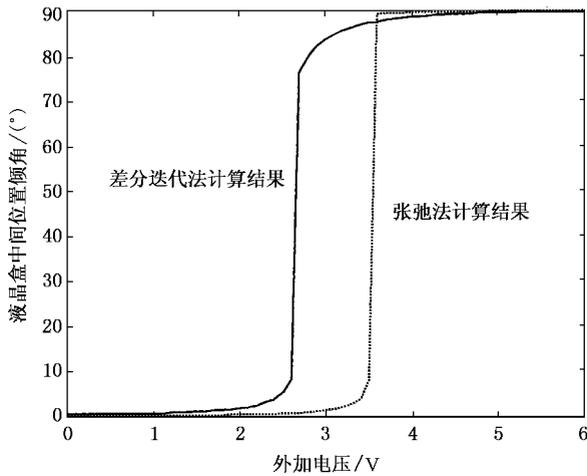
从图 2(a)可以看出,两种不同方法算出的结果有较大的区别.用差分迭代法算出的中间层倾角在外加电压 $U = 2.5V$ 时就开始发生偏转,而用张弛法算出的结果则要在电压 $U = 3.5V$ 时才开始偏转.根据超扭曲丝状液晶盒的阈值电压公式^[13]

$$V_T = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_{//} - \epsilon_{\perp}}} \cdot \sqrt{4\pi K_{22} \frac{d}{p} \varphi_0 - \varphi_0^2 [K_{33} - \chi K_{33} - K_{22}] \cos^2 \theta_0}, \quad (30)$$

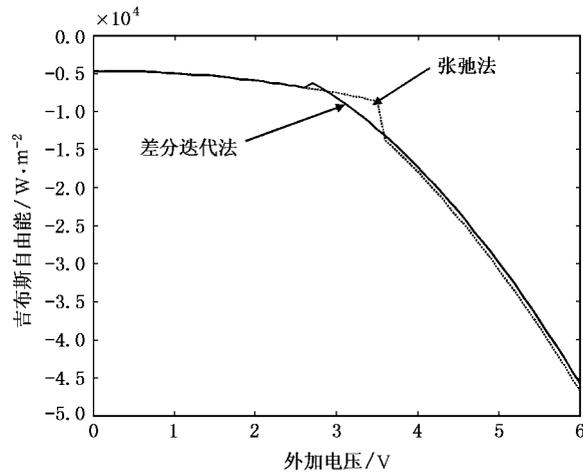
应用上面给出的 STN 参数,求得阈值电压 $V_T = 2.5V$.可见用差分迭代法可以精确地表达这一阈值电压,而用张弛法则有较大出入.根据计算的指向矢分布,可以计算出此超扭曲液晶盒在不同电压点下的吉布斯自由能(图 2(b)).

从吉布斯自由能图(图 2(c))中可以看出,差分迭代法与张弛法计算的结果在外加电压 2.5 - 3.5V 区间内有较大区别.应用差分迭代法得到的吉布斯自由能要比张弛法的计算结果更低,这也说明了差

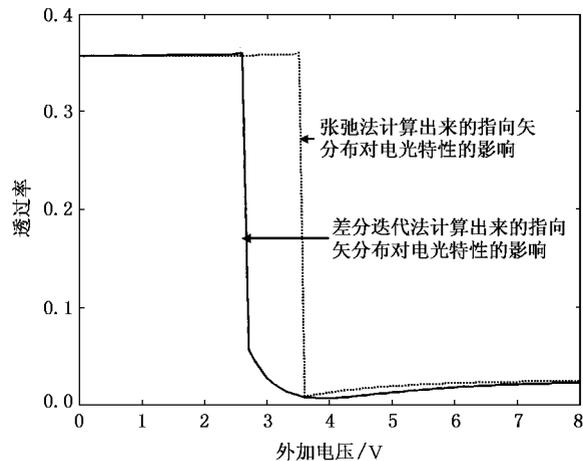
图 1



(a) 270°超扭曲液晶盒中间位置指向矢倾角与外加电压的关系



(b) 超扭曲液晶盒在两种计算方法下的各自吉布斯自由能图



(c) 常白型超扭曲液晶盒显示电光特性曲线

图 2

分迭代法的计算在该区域要优于张弛法. 液晶指向矢在平衡状态下分布的不同会导致液晶电光特性模拟结果的差别, 尤其在阈值电压附近. 对于该超扭曲液晶盒, 我们模拟构建一个超扭曲液晶盒, 实现透射式常白型显示模式. 图 2(c) 是相对应的电光特性模拟结果. 从电光特性曲线图中可以看出在外加电压 2.5—3.5V 区间内, 由差分迭代法算出的指向矢分布结果, 相应的显示状态已经是由亮态转入暗态, 而用张弛法算出的指向矢分布结果, 相应的电光特性曲线有所迟滞, 即相应的显示状态尚处于亮态. 根据两种不同的方法得到的指向矢分布结果对液晶显示器模拟电光特性作出的判断相差甚大. 从图 2(b) 2.5—3.5V 区间吉布斯自由能可以看出, 差分迭代法作出的电光特性判断更为可靠.

3.3 混合排列丝状液晶盒

混合排列丝状液晶盒的液晶指向矢在两个表面的预倾角不相同. 我们选取的混合排列丝状液晶盒^[9] 其中一个表面上的指向矢是垂直表面排列, 而另一个是平行表面排列. 在这样的结构中, 牛顿法中边界条件就无法应用. 而应用本文的差分迭代法, 则可以方便地求解出其指向矢的空间分布. 选取与前面的扭曲丝状液晶盒相同的材料, 通过计算可以得到如下液晶指向矢倾角的空间分布.

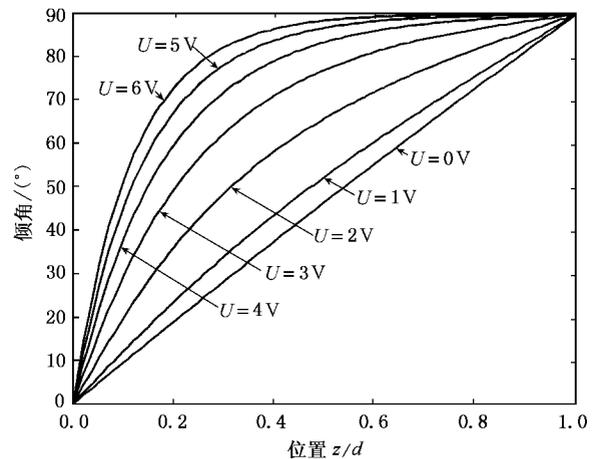


图 3 混合排列丝状液晶盒在外加电场作用下指向矢的分布

4 液晶电光特性的模拟及其与实验结果的比较

运用本文提出的差分迭代法求解指向矢分布, 可以应用于液晶电光特性的模拟计算中. 本文分别

列举了透射式、反射式液晶盒的电光特性模拟计算. 采用差分迭代法求解出液晶指向矢在外加电场作用下的空间分布问题, 以及在液晶电光特性研究中提出的无奇异快速 2×2 矩阵法^[14], 可以作如下液晶电光特性的计算模拟.

透射式液晶显示: 90°TN 透射式液晶显示在液晶显示模式中应用最为广泛. 为了计算模拟其电光特性, 并与实验值相比较, 这里取 ZLI-3651 液晶材料, 其参数为 $K_{11} = 12.8 \times 10^{-12} \text{ N}$, $K_{22} = 7.4 \times 10^{-12} \text{ N}$, $K_{33} = 15.5 \times 10^{-12} \text{ N}$, $\epsilon_{\perp} = 3.6$, $\epsilon_{\parallel} = 7.3$, $n_o = 1.4923$, $n_e = 1.593$; 盒子结构参数是 $\theta_0 = 2^\circ$, $\varphi = 90^\circ$, 盒厚 $5.2 \mu\text{m}$. 该液晶盒的常黑型液晶显示模式在正入射情况下的电光特性计算值如图 4 中的实线所示. 相应的实验值^[15]在图中以实心圆表示.

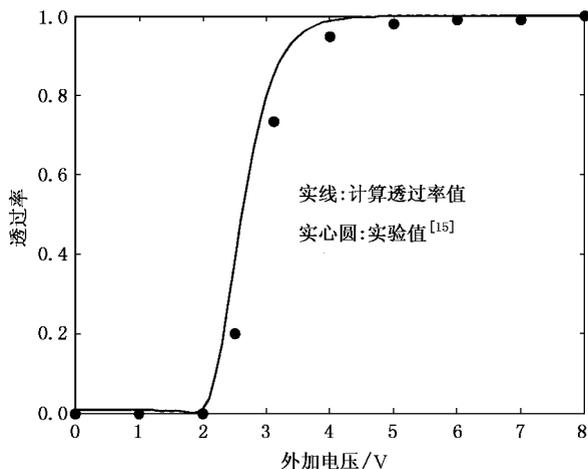


图 4 90°TN 液晶盒常黑型显示模式, 透过率与外加电压的关系

反射式液晶显示: 反射式液晶显示模式是指无后偏振片的液晶盒, 以前面计算中的超扭曲丝状液晶为材料, 通过调整前偏振片与相邻液晶层指向矢之间的夹角, 构建常白型反射式液晶盒. 盒子的结构参数为: $\theta_0 = 2^\circ$, $\varphi = 52^\circ$, 盒厚 $5.2 \mu\text{m}$. 该液晶盒在正入射情况下的电光特性计算值如图 5 中的实线所示. 相应的实验值^[16]在图中以实心方块表示.

从图 4 与图 5 中, 可以看出透射式、反射式两种显示方式的模拟计算结果与实验值符合得较好. 至于实验值与计算值的偏离除了实验误差等因素外,

与液晶电光特性的计算方法也有关系. 指向矢分布的正确程度直接影响到计算液晶电光特性的模拟, 因为液晶显示器的透过率(反射率)随外加电压的变化是由于液晶指向矢在外加电压作用下发生了形变. 从上述计算结果来看, 本文的差分迭代算法为液晶的电光特性的模拟计算提供了比较可靠的指向矢空间分布.

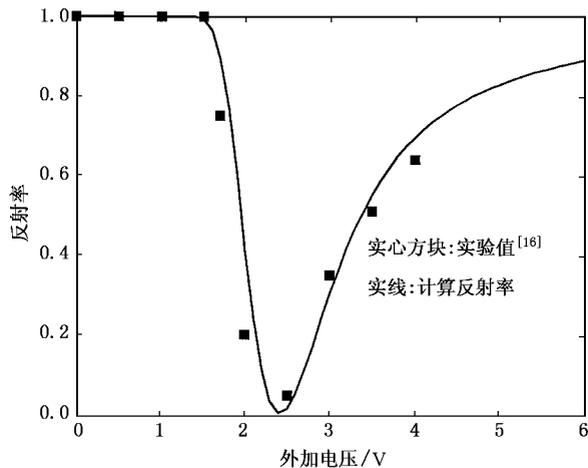


图 5 常白型反射式液晶显示电光特性曲线图

5 结 论

计算表明差分迭代法和传统的牛顿法能得出相一致的结果, 而与张弛法计算的结果有所不同. 大量计算结果(本文只选取了三个液晶盒)表明牛顿法在计算简单液晶盒时比较方便, 但对复杂液晶盒, 其求解显得复杂、繁琐, 因此通用性较差. 张弛法虽然在高压区, 能得到吉布斯能更低的指向矢空间分布, 并且能较方便地模拟液晶指向矢的二维、三维分布情况, 但在阈值电压附近, 其精确性却不如差分迭代法和牛顿法, 并且在应用过程中需要手工调整时间参量、旋转黏滞系数和空间间隔的关系以保证计算的收敛性. 本文的差分迭代法在液晶指向矢空间分布计算上具有简便、稳定的优点, 而且通用性也比较强.

目前我们正在研究把差分迭代算法推广到模拟多维情况.

[1] D.W. Berreman, *Phil. Trans. R. Soc. Lond.*, **A309**(1983) 203.

[2] A. Lien, *Opt. Eng.*, **32**(8)(1993) 1762.

- [3] R. B. Lu, *Acta Physica Sinica*, **48**(12)(1999), 2289(in Chinese)
[吕瑞波 物理学报 **48**(1999) 2289].
- [4] Y. Z. Xie, *Physics of Liquid Crystals*(Science press, Beijing, 1988)(in Chinese) [谢毓章 液晶物理学(科学出版社, 北京, 1988)].
- [5] H. Liu, *Acta Physica Sinica* **49**(5)(2000) 931(in Chinese) [刘红, 物理学报 **49**(2000) 931].
- [6] H. J. Deuling, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **27**(1975) 81.
- [7] S. Dickmann, J. Eschier, O. Cossalfer, D. A. Mlynski, *SID 93 Digest* (1993) 638.
- [8] Y. Xiang, *Optoelectronic Technology* **13**(2)(1993) 52(in Chinese)
[项颖 光电子技术 **13**(1993) 52].
- [9] C. J. Chen, A. Lien, M. L. Nathan, *J. Appl. Phys.* **81**(1)(1997), 70.
- [10] M. Kitamura, *SID 95 Digest*(1995) 540.
- [11] H. Mori, E. C. Gartland Jr., Jack R. Kelly, P. J. Bos, *Jpn. J. Appl. Phys.* **38**(1999) 135.
- [12] I. Heynderickx, H. De Raedt, *Phys. Rev.* **A37**(5)(1988) 1725.
- [13] P. A. Breddels, H. A. Sprang, *J. Appl. Phys.* **60**(3)(1986) 968.
- [14] Q. Wang, F. H. Yu, *Acta Photonica Sinica*, accepted(in Chinese)
[王谦等 光子学报 **29**(2000) 1113].
- [15] L. O. Hiap, *Jap. J. Appl. Phys.* **30**(6A)(1991) 1028.
- [16] F. H. Yu, J. Chen, S. T. Tang, H. S. Kwork, *J. Appl. Phys.* **82**(11) (1997) 5287.

SIMULATION AND COMPARISON STUDY OF LIQUID CRYSTAL DIRECTOR DISTRIBUTIONS

WANG QIAN HE SAI-LING

(Centre for Optical and Electromagnetic Research, State Key Laboratory for Modern Optical Instrumentation, Zhejiang University, Hangzhou 310027, China)

(Received 25 August 2000 ; revised manuscript received 13 November 2000)

ABSTRACT

A new finite-difference iterative method is used to calculate the distribution of the liquid crystal directors under an applied voltage. Numerical results for twisted nematic, super twisted nematic, and hybrid nematic cells are given. In comparison with Newton's method and the relaxation method, it is shown that the new method is simpler, more stable to give accurate results for various types of liquid crystal cells.

Keywords : liquid crystal, director, finite-difference iterative method

PACC : 6130