

액정의 3차원적 전기광학 시뮬레이션에서 vector 와 tensor 모델링방법의 비교

정성민, 박우상
인하대학교 전자·전기·컴퓨터공학부

Comparison between the Vector and Tensor Approaches
for the 3-dimensional Electro-optical Simulations of Liquid Crystal Displays

Sung-Min Jung, Woo-Sang Park
School of Electrical & Computer Engineering, Inha University, Korea

Abstract - 본 연구에서는 액정디스플레이의 전기광학 특성 분석에 사용되고 있는 두 가지 모델링 방법인 벡터 접근법과 텐서접근법에서, 각각의 지배방정식을 시뮬레이션 함으로써 두 접근법의 결과를 비교 및 분석하였다. 이를 위하여, 1차원적 시뮬레이션과 함께 측면전장효과 및 disclination line등의 영향을 모두 고려하기 위해 3차원적 액정분자배열 분포를 동일한 조건에 대하여 시뮬레이션 하였다. 두 접근방법에 대한 동적 특성은 단위화소 내의 국부 점에서 많은 차이를 보임을 확인하였으며, 이에 따라 네마틱액정의 방향자에 대한 네마틱 대칭성이 고려된 텐서접근법이 물리적으로 의미가 있으며, 실제 현상도 명확하게 설명할 수 있음을 확인하였다.

1. 서 론

액정표시소자(Liquid Crystal Displays)에 있어서 액정의 방향자 분포를 예측하기 위해, 수치 해석적 모델링 및 시뮬레이션은 액정표시소자의 개발과 최적화에 있어 매우 중요한 방법으로 평가되고 있다. 특히, 이러한 시뮬레이션은 기존 액정표시소자의 전기광학적 특성을 분석하는데 방대한 양의 실험과 노력을 절감해 줄뿐만 아니라, 새로운 모드에 대한 설계 및 평가를 용이하게 해주는 등의 장점이 있다.

최근 액정의 전기광학적 시뮬레이션은 1차원적인 계산뿐만 아니라, 유한한 전극의 크기에 따른 측면전장의 영향과 동시에 disclination을 평가할 수 있는 2혹은 3차원적인 시뮬레이션 등으로 확대되는 등, 많은 노력이 기울여 지고 있다[1~4]. 특히, 보다 정확한 시뮬레이션을 위해서, 최근 액정의 모델링에는 서로 다른 두 가지 방법으로 나뉘어 소개되어 왔으며, 두 방법이 서로 상이한 동특성을 보임이 확인되었다[5, 6]. 물론, 이러한 차이는 1차원적 시뮬레이션이나 간단한 결과 등을 통하여 확인된 바 있으나, 아직 이에 대한 정확한 물리 및 수학적 분석 및 3차원적인 시뮬레이션 결과를 통한 비교연구는 거의 찾아볼 수 없다.

본 연구에서는 이러한 모델링 방정식들을 1차원적 및 3차원적으로 시뮬레이션 함으로써, 각각의 방법에 있어 액정 분자배열 분포의 동특성을 비교하고 물리적으로 타당한 모델링 방정식을 검토하였다. 비교에 적용된 모델링 방정식으로는, 액정 분자의 평균방향으로 정의되는 방향자 n 을 이용한 벡터접근법과 네마틱액정의 대칭성을 고려하여 order 텐서 Q_{ij} 를 이용한 텐서접근법에 대해 각각 탄성 에너지밀도를 적용하여 기술하였다. 수치 해석적 방법으로는 다소 복잡한 비선형 방정식에도 비교적 적용이 쉬운 유한차분법(Finite Difference Method)이 적용되었다.

계산된 결과를 통하여, 두 접근방법의 시뮬레이션 결과로부터 단위화소 내에 국부 점에서 많은 차이를 보임을 확인하였으며, 네마틱 액정의 방향자에 대한 네마틱 대칭성이 고려된 텐서접근법이 물리적으로 의미가 있고, 실제 현상도 명확하게 설명할 수 있음을 확인하였다.

2. 본 론

2.1 이론

액정에서 전기광학적특성을 계산하기 위한 방향자 분포의 계산에 있어서는 주어진 전위 분포와 액정 분자간의 탄성관계에 의한 방향자 field의 계산과 주어진 방향자 분포에 대한 전위분포 계산의 두 가지 단계를 서로 교대로 시뮬레이션 함으로써 얻을 수 있다.

본 연구에서는 시간에 따른 방향자 $n(x, y, z, t)$ 을 계산하기 위한 운동방정식으로 Ericksen-Leslie 이론을 적용하였다. Gibbs 자유 에너지밀도를 적용함으로써 다음과 같은 동적 운동방정식을 얻을 수 있다[3].

$$\gamma \frac{\partial n_i}{\partial t} = \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial F_G}{\partial n_{i,t}} \right) - \frac{\partial F_G}{\partial n_i} + \lambda n_i \quad (1)$$

여기서, γ 는 액정의 회전점성계수를 의미하며, n_i 는 액정 방향자 n 의 직교성분을 의미한다. λ 는 방향자가 항상 단위벡터 $|n|=1$ 을 만족하기 위해 적용되는 라그랑지 승수이다. Gibbs 자유에너지 밀도 $F_G = F_S - F_E$ 로 주어지며, 여기서 F_S 는 액정의 strain 에너지밀도를, 그리고 F_E 는 전기에너지밀도를 각각 의미한다.

액정의 strain 에너지밀도에 대하여, 벡터 접근법에서는 액정의 방향자 n 에 대해 다음과 같이 표현한다[4].

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

여기서, K_{11} , K_{22} 그리고 K_{33} 는 각각 splay, twist 그리고 bend 탄성계수를, q_0 는 액정의 chirality를 의미한다. 이에 반하여, 액정의 strain 에너지밀도를 표현하는 또 다른 방법으로는 방향자의 네마틱 대칭성을 고려하여 order 텐서 Q_{ij} 를 이용한, 텐서접근법이다[3].

$$F_S = \left(\frac{-K_{11}}{12} + \frac{K_{22}}{4} + \frac{K_{33}}{12} \right) G_1^{(2)} + \left(\frac{K_{11} - K_{22}}{2} \right) G_2^{(2)} + \left(\frac{K_{33} - K_{11}}{2} \right) G_6^{(3)} + q_0 K_{22} G_4^{(2)} \quad (3)$$

$$G_1^{(2)} = Q_{ij,k} Q_{ij,k}, \quad G_2^{(2)} = Q_{ij,i} Q_{jk,k}, \\ G_4^{(2)} = e_{ijk} Q_{ij} Q_{kl,k}, \quad G_6^{(3)} = Q_{ij} Q_{kl,i} Q_{kl,j}, \\ Q_{ij} = n_i n_j - \delta_{ij}/3$$

한편, 주어진 화소내의 전극에 인가되는 전압에 의하여 형성되는 전기에너지밀도는 액정의 단축방향 유전율 ϵ_{\perp} 와 유전율 이방성 $\Delta\epsilon$ 과 방향자 분포에 대하여 다음과 같이 표현된다.

$$F_E = \frac{1}{2} \epsilon_0 \phi_{,i} (\epsilon_{\perp} \delta_{ij} + \Delta\epsilon n_i n_j) \phi_{,j} \quad (4)$$

이때, $\phi(x, y, z)$ 는 화소 내부의 전위분포함수로서, 이는 주어진 계산영역 내의 전극에 인가된 전압과 적절한 경계조건에 대해 다음의 Laplace 방정식을 시뮬레이션 함으로써 얻을 수 있다.

$$[(\epsilon_{\perp} \delta_{ij} + \Delta \epsilon n_i n_j) \phi_{,j}]_{,i} = 0 \quad (5)$$

2.2 시뮬레이션

본 연구에서는 앞 절에서 설명한 벡터접근법과 텐서접근법을 모두 공식화하였으며, 두 방법의 시뮬레이션 된 결과를 비교하기 위하여 동일한 초기조건과 경계조건, 물성 및 인가전압조건 등을 적용하였다.

수치 해석적 방법으로는 유한차분법을 적용하였다. 시간에 따른 방향자분포를 얻기 위해, 시간에 따른 차분화는 복잡한 비선형방정식에도 적용이 용이한 explicit한 방법을 적용하였다.

우선, 두 접근법의 시뮬레이션에 있어서, 1차원적인 시뮬레이션을 적용함으로써, 특수한 초기조건에 대해 벡터접근법과 텐서접근법을 비교하였으며, 이와 함께 Optically compensated bend(OCB) 모드의 splay-bend 천이에서의 두 접근법에 대한 시뮬레이션 결과의 차이를 확인하기 위하여, 동일한 splay 초기조건으로 적용한 뒤, 시뮬레이션 하였다.

또한, 3차원적인 액정의 방향자 분포 시뮬레이션에 있어서 경계조건으로, 러빙 막의 표면에서는 strong anchoring을 가정하여 고정된 액정방향자 분포를 가정하였고, 수평한 방향으로 반복된 화소를 가진다는 가정으로 주기경계조건을 설정하였다. 특히 전위분포를 계산하기 위해서 수직방향은 유한한 크기로 계산영역을 제한하기 위해 투명경계조건을 적용하였다.

2.3 결과 및 고찰

우선, 두 접근법의 시뮬레이션에 있어서, 1차원적인 시뮬레이션을 적용함으로써, 특수한 초기조건에 대해 벡터접근법과 텐서접근법을 비교하였다. 그림 1에 나타난 바와 같이 벡터접근법에서 하단의 방향자가 시계방향으로 회전하여 벡터장의 평형을 보이는 반면, 텐서접근법에서는 반시계 방향으로 방향자가 약간 회전하여, 방향자의 네마틱 대칭성을 보여줄 수 있었다. 또한, 두 경우 모두 포화상태의 분포는 동일하지만, 과도 특성에 있어서 시간의 차이가 대단히 많이 남으로써, 벡터접근법이 동적 분자배열 분포 결과를 정확히 예측하지 못하는 것으로 확인되었다.

다음으로, splay-bend 천이 메커니즘을 규명하기 위하여, 본 연구에서는 두 접근법을 통한 시뮬레이션을 수행하였으며, 그 결과를 Figure 2에 나타내었다. 벡터접근법에서 중간층 액정 방향자가 flipping된 뒤에 중간층의 위쪽과 아래쪽 부분의 액정 방향자들은 그림과 같이 서로 맞대어 있다. 이러한 방향자분포의 불연속성 때문에, 매우 큰 왜곡 에너지가 중심층 방향자에 내장되어 있다. 따라서, 중심층 액정 분자를 flipping하기 위해서, 왜곡 에너지에 상응하는 매우 큰 전기에너지가 공급되어야 한다. 이 시뮬레이션 결과에 있어, 천이가 가능한 인가전압은 45V로 확인되었다.

만약, 전압이 제거되면 가장 큰 변형에너지가 집중되어 있는 중심층에서부터 방향자의 relaxation이 시작되며, 위쪽과 아래쪽 표면으로 전파되어 나간 뒤, 최종적으로 splay 변형상태로 되돌아간다.

반면, 텐서접근법에서는 splay-bend 천이가 가능하도록 중간층 방향자가 형성되는 flipping이 이루어지는 데, 변형에너지는 방향자의 네마틱 대칭성인 $n_i n_j$ 에 따라 중심층에서의 변형을 거의 찾을 수 없게 된다. 다만, 위쪽과 아래쪽 주변에서의 변형만 존재한다. 이러한 이유로, 전압이 제거되면 방향자의 relaxation은 두 표면에서부터 중심층으로 전파되어가며, 따라서 최종적으로

로 중심층에서부터 양쪽 표면까지의 선형적 경사각 분포로 안정되어 진다.

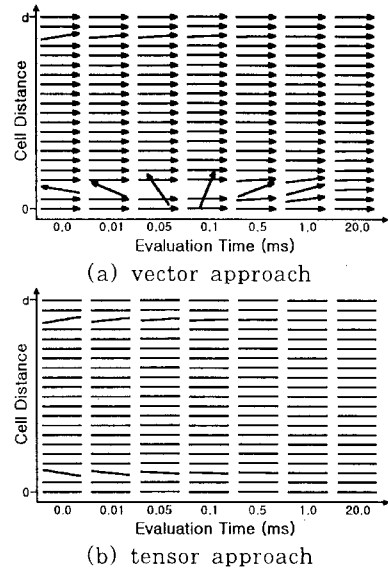


Figure 1. Relaxation of the directors from special initial conditions.

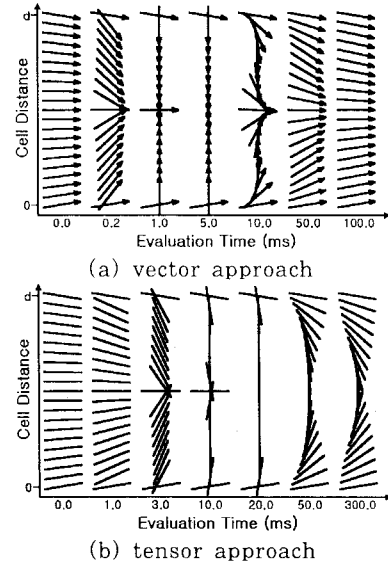


Figure 2. Splay-to-bend transition of OCB modes.

액정의 3차원적 시뮬레이션을 통하여, 벡터 접근법과 텐서접근법에 의해 계산된 방향자 분포를 비교하였다. 고려된 바와 같이, 네마틱 대칭성을 만족하는 텐서접근법의 모델링 방식은 벡터접근법과 비교할 때, 액정의 거동에 있어서 서로 상이한 결과를 보이는 것으로 확인되었다. 특히, 이러한 액정 방향자의 거동은 disclination line 부근에서 가장 큰 차이를 보이기 때문에, 본 연구에서는 TN-LCD cell에서 전압을 인가하였을 때의 disclination line의 형성 및 전압을 제거하였을 때의 붕괴과정을 비교하였다. Figure 1에서는 인가전압에 대해, 안정상태에 액정의 3차원적 분자배열 분포 및 전위

분포를 나타낸다.

5V의 화소전압과 0.1V의 데이터전압, 그리고 -8V의 게이트 전압을 인가하였을 때, 액정 방향자의 벡터 및 텐서접근법에서의 과도특성은 disclination line의 형성 과정이나, 방향자 분포 등에서 거의 같은 결과로 나타났으며, 특히 disclination line은 동일한 위치에서 형성되었다.

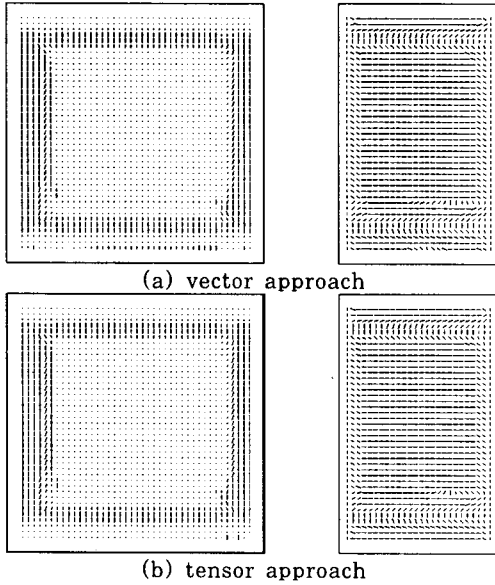


Figure 3. Comparisons of director profiles between the vector and tensor approach. Top and side view.

Figure 3에 나타난 바와 같이, cell에 전압을 인가하였을 때, 두 접근법에 있어서 disclination line은 의 위치는 동일하게 계산되었는데, 이는 disclination line의 형성과정에서 네마틱 대칭성에 대한 모델링이 그리 큰 문제가 되지 않는다는 것을 의미한다. 즉, 동일한 전계의 영향에 의해 형성된 정상영역과 반전영역이 disclination line 방향으로 확장되면서, 공간적으로 연속적인 벡터장이 형성되어 과도기적인 bend 변형을 만들어 내기 때문인 것으로 확인되었다. 이때, 방향자 분포의 움직임이 충분히 포화되면, disclination line이 격자 내부로 들어가게 되는데, 이는 disclination line 근방의 방향자들이 전기력에 의해, 변형이 깨지면서, 불연속적인 벡터장으로 변형되기 때문인 것으로 확인할 수 있다. 이는 물론 텐서접근법에서도 동일하게 나타나지만, 여기서 주요한 점은 텐서접근법의 관점에서 이러한 변형은 벡터 접근법에서의 불연속적인 방향자 분포가 아니라, 막대모양 방향자의 splay 변형으로 간주된다는 것이다.

Figure 4에서는 disclination line의 형성과정을 설명하기 위해, 시간의 경과에 따른 disclination line 근방의 방향자 회전 방향을 단순화하여 표현하였다.

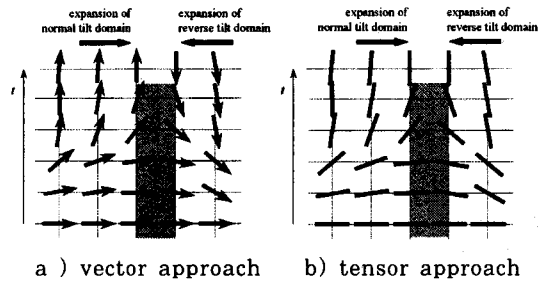


Figure 4. Comparison of the behaviors of director rotation and formation of disclination line between vector and tensor approach for applied electric field

3. 결 론

본 연구에서는 액정디스플레이의 전기광학특성 분석에 사용되고 있는 두 가지 모델링 방법인 벡터접근법과 텐서접근법에서, 각각의 지배방정식을 시뮬레이션 함으로써 두 접근법의 결과를 비교 및 분석하였다. 1차원적인 특수한 형태의 분자배열 분포를 초기조건으로 적용한 뒤 시뮬레이션 함으로써, 방향자의 동적 특성을 우선적으로 예측하였으며, 측면전장효과 및 disclination line등의 영향을 모두 고려하기 위해 3차원적 액정분자배열 분포를 동일한 조건에 대하여 시뮬레이션 하였다. 두 접근방법에 대한 동적 특성은 단위 화소 내의 국부 점에서 많은 차이를 보임을 확인하였으며, 이에 따라 네마틱액정의 방향자에 대한 대칭성이 고려된 텐서접근법이 물리적으로 의미가 있으며, 실제 현상도 명확하게 설명할 수 있음을 확인하였다.

[참 고 문 헌]

- [1] G. Haas, S. Siebert, D. A. Mlynski, "Simulation of Inhomogeneous Electric Field Effects in Liquid Crystal Displays", JAPAN DISPLAY'89, p524, 1989.
- [2] G. Haas, M. W. Fritsch, H. Wohler, D. A. Mlynski, "Simulation of Reverse-Tilt Disclinations in LCDs", SID'90 DIGEST, p102, 1990.
- [3] S. Dickmann, J. Escher, O. Cossalter, D. A. Mlynski, "Simulation of LCDs Including Elastic Anisotropy and Inhomogeneous Fields", SID'93 DIGEST, p638, 1993.
- [4] M. Kitamura, "Computer Simulation of Director Profile in Three-Dimensional Electric Field", SID'95 DIGEST, p540, 1995.
- [5] J. E. Anderson, P. Watson, P. J. Bos, "Shortcomings of the Q Tensor Method for Modeling Liquid Crystal Devices", SID'99 DIGEST, p198, 1999.
- [6] J. H. Woo, S. M. Jung, W. S. Park, "Simulation of Dynamic Behavior of Liquid Crystal Molecules in OCB Modes", JLCC2001, p525, 2001.