

垂直定向液晶光阀中液晶电光特性的理论分析

章岳光 李海峰 刘旭 顾培夫 唐晋发

(浙江大学现代光学仪器国家重点实验室, 杭州 310027)

摘 要 采用 4×4 矩阵法模拟计算了垂直定向液晶光阀的电光特性, 从理论上分析了影响液晶光阀电光特性的因素。根据向列液晶的弹性连续体理论及边界力矩平衡方程, 求出了垂直定向向列液晶在液晶-界面之间相互作用锚泊能为有限值时的液晶指向矢分布。根据指向矢分布计算了一定外加电场下液晶光阀的电光特性, 并和锚泊能为无限大时的特性进行了比较和分析。

关键词 液晶光阀, 4×4 矩阵法, 锚泊能, 电光特性。

1 引 言

计算夹在两偏振片之间的液晶(LC)器件的光学特性是液晶光电应用中的一个重要课题。对于各向异性介质(如排列一致的液晶)中光的传播, 通常有三种方法可用来计算光学特性: 1) 归一化几何光学计算^[1]; 2) 扩展琼斯矩阵法^[2]; 3) 4×4 矩阵法^[3]。几何光学近似只能用于垂直入射情形, 后两种方法可用于倾斜入射的情况, 这一点在评估液晶器件视角特性时很重要。 4×4 矩阵法由 Berreman^[3] 首先引入到液晶器件计算中, 随后 Wohler 等^[4] 提出用快速 4×4 矩阵法以提高计算速度和精度。但当液晶排列不一致时(如在液晶盒上的电压超过阈值电压的情况下), 对这种不均匀介质的分析, 则没有直接的解析法, 但可以用 4×4 矩阵法近似地计算。

Montgomery 等^[5, 6] 用 4×4 矩阵法计算了垂直入射下反射式水平定向器件液晶图像换能器(LCIT)的光电特性。

由于垂直定向液晶的应用越来越多, 而上述 4×4 矩阵法都是应用于水平定向的, 因此本文将根据快速 4×4 矩阵法计算垂直定向液晶光阀(LCLV)的电光特性, 计算时采用 Merck 公司生产的液晶 ZLI-4788-000 的数据。液晶光阀的结构和原理见图 1。所用液晶为负性液晶, 长棒状液晶分子垂直于基板排列。表征分子定向的是指向矢 \mathbf{n} , 它代表液晶分子的平均取向。通常反射式液晶光阀由透明导电膜、液晶、介质高反射镜、光阻隔层和光导层夹在二玻璃板间组成, 并且在两电极间

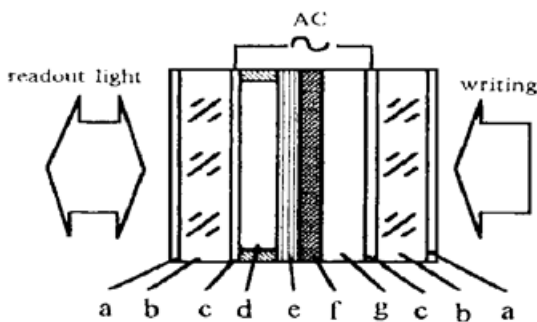


Fig. 1 The schematic of liquid crystal light valve. a: Ar coating, b: substrate, c: ITO film, d: LC layer, e: dielectric mirror, f: light blocking layer, g: photoconductive film

加上频率为 1 kHz、峰值约 10 V 的交流电压。当光导膜上没有光照时，加在 ITO 膜上的电压大部分降落在光导膜上，液晶层上的电压低于其阈值电压，不产生双折射现象。一束线偏振光二次通过液晶后偏振态与入射光相同，这时经与起偏器正交的检偏器后，光强输出为零，光阀处于暗态。当写入光照在光导层上时，由于光导作用，光导膜的电阻率下降，其上电压降减小，相应的液晶层上的电压上升。当超过阈值电压时，液晶分子重新排列成趋向于平行于表面的排列。这时液晶的双折射效应使一束线偏振光变成椭圆偏振光，经检偏器后将有光输出，称为亮态，从而得到一幅与写入图像对应的读出图像。

显然，计算垂直定向液晶光阀电光特性就是要求出输出光强与液晶上所加电压的关系。

2 计算和分析

首先表征液晶的定向。如图 2 所示，取 xy 平面平行于基板，液晶的单位指向矢为 n ， θ 、 φ 为液晶的倾角和方位角，则 n 可写为

$$n = \sin \theta \cos \varphi i + \sin \theta \sin \varphi j + \cos \theta k \quad (1)$$

在水平定向扭曲向列型液晶或垂直定向液晶上施加电场时，液晶的指向矢随着位置发生连续的变化，说明 θ 和 φ 为位置 z 的函数。4 × 4 矩阵法的核心是求出联系入射面和出射面电磁场切向矢量之间关系的传输矩阵 D ，而 D 与液晶指向矢的分布有关。有关 4 × 4 矩阵法的推导可参见文献[3]。

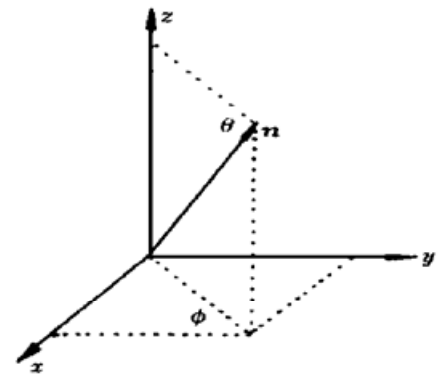


Fig. 2 Coordinate system

2.1 暗态时液晶光阀光学特性计算

如前所述，液晶光阀中包括许多各向同性介质层，容易求出其 p 矩阵，在计算中将把反射膜等介质层包括在内，具体处理可参考文献[5]。实际液晶光阀中反射膜由 9 层 ZnS 和 MgF₂ 交替蒸镀而成，外加一层 SiO₂ 层，ZnS、MgF₂ 的光学厚度为 158 nm，SiO₂ 的光学厚度为了 216 nm，计算中采用的液晶光阀参数见表 1。

Table 1. Parameters of LCLV

ϵ_1	ϵ_2	k_1/N	k_2/N	n_o	n_e	glass refractive index	readout light wavelength/nm	LC thickness / μm
4.5	10.2	1.4×10^{-11}	9.4×10^{-12}	1.485	1.650	1.516	632.8	5

在实际液晶光阀中，为了避免因完全垂直定向导致的亮态下的向错缺陷及提高响应速度，常使液晶分子定向带有一定预倾角。本文中预倾角为 0°的情况实际上对应于预倾角无限接近于 0°的情形，用上述方法计算分析了液晶预倾角对暗态反射光强的影响，表 2 给出了在

Table 2. Effects of pretilt angle (θ) on the contrast ratio of LCLV

pretilt angle/($^\circ$)	incident angle/($^\circ$)			
	0	5	10	20
3	800 ·1	700 ·1	600 ·1	75 ·1
5	300 ·1	280 ·1	250 ·1	50 ·1
7	80 ·1	75 ·1	75 ·1	26 ·1
10	20 ·1	18 ·1	17 ·1	11 ·1

不同预倾角下不同入射角时的输出光对比度, 预倾角为 0° 时因值很大而没有列出。从表中可以看出, 预倾角不能取得太大, 一般以 $2^\circ \sim 4^\circ$ 为宜, 否则会影响对比度。

2.2 锚泊能与亮态时的指向矢分布

在液晶器件制作中, 需对液晶盒表面进行定向处理以获得一致的液晶排列, 定向质量的好坏及稳定性对液晶器件的性能有很大的影响。在液晶器件的实际制作中常会发现, 尽管其结构完全一样, 但仍会产生器件之间特性的明显差异。其中一个很重要的因素就是液晶和其定向表面之间的相互作用可能会因工艺条件的差异而有很大不同, 而且不同的定向材料的定向效果一般总是不同的。定向作用力的强弱一般以锚泊能(anchoring strength)来表征。

如图3所示, 水平定向的液晶指向矢为 \mathbf{n} , 在外电场作用下, 会发生两种耦合作用: 极向耦合和方位角方向的耦合, 其耦合能近似为^[7]

$$E_p = \frac{1}{2} C_p \sin^2(\theta - \theta_0) \quad (2)$$

$$E_a = \frac{1}{2} C_a \sin^2(\phi - \phi_0) \quad (3)$$

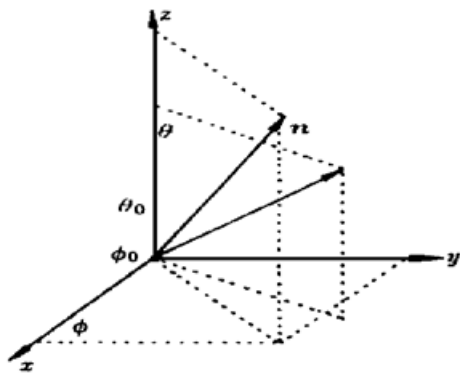


Fig. 3 Schematic of director deformation

其中 C_p 和 C_a 分别为极向和方位角方向的锚泊能系数, 简称锚泊能。

当无外电场时, 因无指向矢变化, 故耦合能为 0。当有外电场时, 指向矢可能发生变化。在同样外电场下, C_p 和 C_a 越大, 边界上指向矢的变化就越小, 这必定会反映在液晶器件的特性上。

对垂直定向液晶光阀而言, 在外电场作用下指向矢从垂直于基板(或与基板法线成一预倾角)趋向于平行于基板。这时只有极向耦合, 容易求出指向矢的分布。

为了简便, 在不影响普遍性的情况下, 设液晶指向矢在 xz 平面内, 基板法线方向为 z 轴方向, 液晶层对应于 $z = 0$ 到 $z = d$ 的这个区域。在坐标 z 处指向矢与 z 轴夹角为 $\theta(z)$ 。并假定空间电荷、电流等可忽略, 则根据奥森(Oseen)和弗朗克(Frank)弹性连续体理论, xz 平面内单位面积的系统相对自由能 F 为

$$F = \int_0^d f(z) dz \quad (4)$$

其中 $f(z)$ 为相对自由能密度, 可以表述为

$$f(z) = \frac{1}{2} (k_1 \sin^2 \theta + k_3 \cos^2 \theta) \left(\frac{d\theta}{dz} \right)^2 + \frac{1}{2} \frac{D}{\epsilon_1 (1 - \alpha \sin^2 \theta)} + \frac{1}{2} C [\sin^2(\theta_0 - \theta_{00}) \delta(z) + \sin^2(\theta_0 - \theta_{00}) \delta(z - d)] \quad (5)$$

式中 $\alpha = (\epsilon_1 - \epsilon_2)/\epsilon_1$, ϵ_1 和 ϵ_2 分别为平行和垂直于液晶指向矢的介电常数, k_1 和 k_3 分别为液晶的展曲、弯曲弹性常数, D 为电位移矢量, C 为界面锚泊能系数, $\delta(z)$ 为狄拉克函数, θ_{00} 为边界处的预倾角, θ_0 为加有电场时边界上的倾角。

另外在边界处根据力矩平衡有

$$(k_1 \sin^2 \theta_0 + k_3 \cos^2 \theta_0) (d\theta/dz)_0 - C \sin(\theta_0 - \theta_{00}) \cos(\theta_0 - \theta_{00}) = 0 \quad (6)$$

化简后, 可得到以下三式

$$\sin(\theta_0 - \theta_{00}) \cos(\theta_0 - \theta_{00}) = \frac{2k_3}{Cd} \left(\frac{(\sin^2 \theta_m - \sin^2 \theta_0)(1 - \gamma \sin^2 \theta_0)}{1 - \alpha \sin^2 \theta_0} \right)^{1/2} \int_{\theta_0}^{\theta_m} B d\theta \quad (7)$$

$$U = 2 \left[\frac{k_3(1 - \alpha \sin^2 \theta_m)}{\epsilon_2 - \epsilon_1} \right]^{1/2} \int_{\theta_0}^{\theta_m} \frac{1 - \gamma \sin^2 \theta}{(1 - \alpha \sin^2 \theta)(\sin \theta - \sin \theta_m)} d\theta \quad (8)$$

$$\frac{z}{d} = \frac{1}{2} \frac{\int_{\theta_0}^{\theta} \beta d\theta}{\int_{\theta_0}^{\theta_m} \beta d\theta} \quad (9)$$

式中， θ_m 为液晶层中心 ($z = \frac{d}{2}$ 处) 的倾角。(7)~(9) 式表明，对于给定的液晶，知道了界面锚泊能，就可以求出在外场下液晶指向矢的分布。当锚泊能为无穷大时，由(7)式得到 $\theta_0 = \theta_{00}$ ，即界面处指向矢保持不变，一般模拟计算时都假定这一点。

2.3 亮态时液晶光阀的电光特性模拟结果和讨论

2.3.1 锚泊能为无穷大

液晶指向矢的变化即折射率随位置的变化，决定了液晶光阀的光学特性。液晶指向矢变化又取决于外加电压，故直接计算光学特性与液晶上电压之间的关系。首先计算不同电压下的倾角分布，见图 4。从图中可以看到，随着液晶上所加电压的增加，液晶指向矢倾角越趋向于 90° 。

知道了一定电压下液晶的倾角分布，就可以用 4×4 矩阵法来计算其电光特性。图 5 给出了从液晶光阀出射的光强随液晶上所加电压的变化，五条曲线分别对应于液晶厚度为 $4.6 \mu\text{m}$ 、 $4.8 \mu\text{m}$ 、 $5.0 \mu\text{m}$ 、 $5.2 \mu\text{m}$ 、 $5.4 \mu\text{m}$ 。液晶指向矢的方位角定为与 x 轴成 45° ，计算中包括了液晶-基板界面反射的影响，起偏器定为 x 轴，检偏器定为 y 轴。可以看出，液晶光阀有光输出时的电压一致。当电压逐渐增大时，液晶指向矢逐渐趋向于与基板平行，引起双折射增大，达到输出极大后又单调下降。与扭曲排列水平定向液晶图像换能器不同的是，厚度差异引起的垂直定向液晶光阀的输出响应曲线的偏差要小得多。由于实际液晶光阀中电极的光学厚度为读出光波长的一半，所以它对读出单色光没有影响。

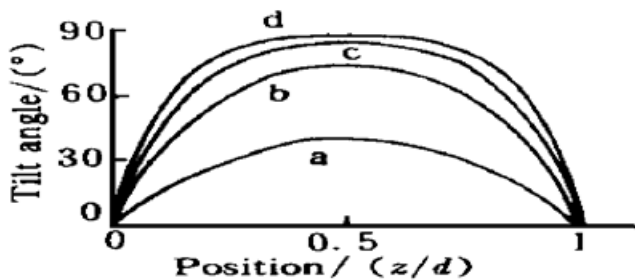


Fig. 4 The tilt angle distribution when different voltage is applied across the LC layer. a: 2 V, b: 3 V, c: 4 V, d: 5 V

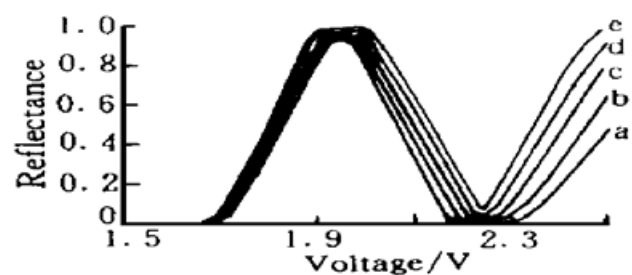


Fig. 5 Relative intensity of output light from LCLV verse voltage across the LC for different LC thickness. a: $4.6 \mu\text{m}$, b: $4.8 \mu\text{m}$, c: $5.0 \mu\text{m}$, d: $5.2 \mu\text{m}$, e: $5.4 \mu\text{m}$

图 6 表示入射角对液晶电光特性的影响，实际所用液晶光阀的入射角一般都小于 10° 。从计算结果看，入射角对输出特性的影响很小。图 7 表示预倾角对液晶电光特性的影响，图中给出了 0° 、 2° 、 4° 、 6° 时的情况，可以看到，与水平定向扭曲排列不同，预倾角对垂直定向液晶光阀的影响很大。其影响主要有两点：一是阈值电压的降低；另一个就是响应曲线的分

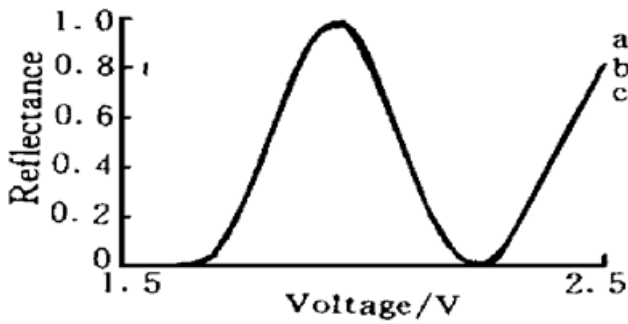


Fig. 6 Relative intensity of output light from LCLV versus voltage across the LC for different incident angle. a: 0°, b: 5°, c: 10°

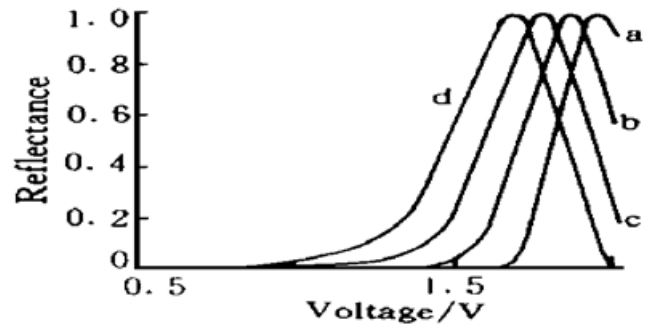


Fig. 7 Relative intensity of output light from LCLV versus voltage across the LC for different pretilt angle. a: 0°, b: 2°, c: 4°, d: 6°

离。阈值电压降低使响应的线性度变差；响应曲线的分离使得液晶光阀中预倾角的微小变化会破坏输出图像与写入图像的对应性，造成输出图像的不均匀。因此实际定向时应很好地控制预倾角的一致性。

2.3.2 锚泊能为有限时

图 8 给出了不同锚泊能下外加 2 V 电压时液晶指向矢的分布。图 9 表示当 $C = 10^{-4} \text{ J/m}^2$ 和 C 取无穷大时边界和液晶层中间处的倾角随外电压的变化。这里预倾角都取为无限接近于零。与 C 取无穷大的情况相比，可以看出有以下区别：当锚泊能比较小时，边界上液晶指向矢偏离原来的方向，并且整个液晶层内倾角变化都比较大，因而可以预见液晶光阀有输出时及达到输出极大时所需电压比较小。

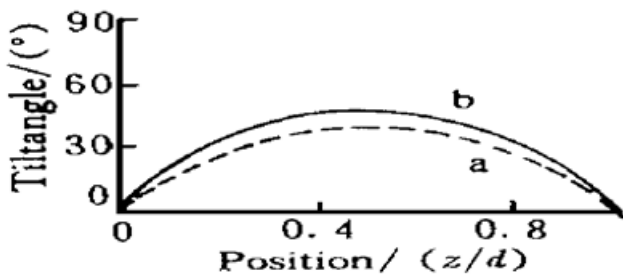


Fig. 8 The tilt angle distribution at 2 V. a: $C = \text{infinity}$, b: $C = 10^{-4} \text{ J/m}^2$

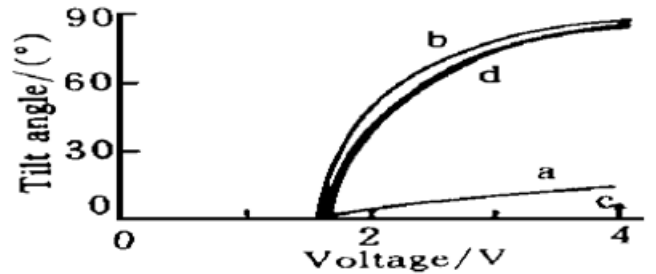


Fig. 9 Tilt angle at $z = d/2$ (b, d) and $z = 0$ (a, c). (a, b): $C = 10^{-4} \text{ J/m}^2$, (c, d): $C = \text{infinity}$

图 10 表示不同锚泊能下液晶光阀的输出光强与所加电压的关系。可以看出液晶光阀的电光响应特性强烈地依赖于锚泊能的值。锚泊能越小，液晶光阀的阈值电压就越低。当锚泊能大于 10^{-3} J/m^2 时，液晶光阀的电光特性与 C 取无穷大时的特性相差无几，这时精确测定



Fig. 10 Relative intensity of output light from LCLV versus voltage across the LC for different anchoring energy. (a) $\theta_{00} = 0^\circ$, (b) $\theta_{00} = 3^\circ$. a: $C = 5 \times 10^{-5} \text{ J/m}^2$, b: $C = 2 \times 10^{-4} \text{ J/m}^2$, c: $C = 1 \times 10^{-3} \text{ J/m}^2$, d: $C = \text{infinity}$

锚泊能的值已很困难, 所以一般也把锚泊能大于 10^{-3} J/m^2 定义为无穷大。在实际定向中, 方位角方向的锚泊能的值在 10^{-6} J/m^2 到无穷大之间, 极向的锚泊能值在 10^{-5} J/m^2 到无穷大之间^[7], 所以本文的模拟计算也有实际意义。计算表明当锚泊能从无穷大减小为 $5 \times 10^{-4} \text{ J/m}^2$ 时, 液晶光阀达到输出极大所需电压相应地也减小了 0.25 V 。

预倾角的主要作用除了保证一致的定向方向外, 还可提高响应速度, 降低阈值电压。由图 10 可以看出由于预倾角的引入而降低的电压大于 0.2 V 。但是预倾角的引入会破坏光阀的对比度, 并且线性度也相应地变差。从对比度和线性度角度考虑, 预倾角应接近 0° 。

综上所述, 当液晶材料、厚度和预倾角等参数一样时, 锚泊能的大小会直接影响液晶光阀的电光响应特性, 具体表现为阈值电压的降低和响应线性陡度的变化。理论上有可能从电光响应曲线推出液晶的锚泊能, 只是液晶光阀中有太多的膜层, 不能测出直接加在液晶上的电压。但是如果整个器件简化为液晶夹在两电极之间的透射式器件, 测量器件的位相延迟, 就能得出液晶的锚泊能。从整个液晶光阀的角度考虑, 应把光导层、写入光强跟液晶的参数结合起来, 以求较好的匹配。液晶层上电压的变化主要由光导层的亮暗电导变化引起。在光导层、介质层和写入光特性固定的情况下, 改变液晶层的定向工艺以改变锚泊能或改变液晶层的厚度都可以改善液晶光阀的匹配情况。图 11 给出了液晶层厚度减小到 $3 \mu\text{m}$ 时不同锚泊能对应的光电特性的变化。可以看到, 阈值电压增加了, 输出达到极大所需的电压变化也增大了。

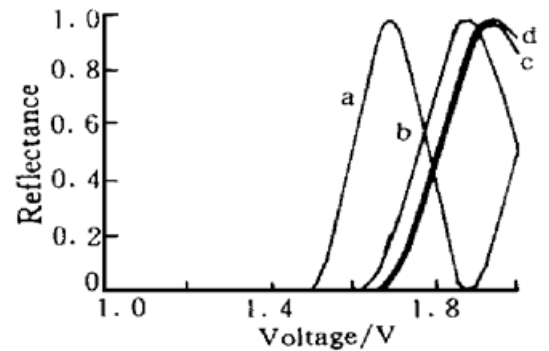


Fig. 11 Relative intensity of output light from LCLV verse voltage across the LC when the thickness is $3 \mu\text{m}$. a: $C = 5 \times 10^{-5} \text{ J/m}^2$, b: $C = 2 \times 10^{-4} \text{ J/m}^2$, c: $C = 1 \times 10^{-3} \text{ J/m}^2$, d: $C = \text{infinity}$

结 论 从理论上计算分析了向列液晶在不同锚泊能下在外电场作用下的指向矢分布, 并且计算了垂直定向液晶光阀的电光响应特性。计算表明液晶与界面的锚泊能、预倾角等对液晶光阀的特性都有明显的影响, 通过改变锚泊能或液晶层的厚度能使液晶光阀的电光特性发生显著变化。说明在液晶光阀的实际制作中应优化工艺条件以达到整个器件的最佳匹配。

参 考 文 献

- [1] Ong H L. Origin and characteristics of the optical properties of general twisted nematic liquid crystal displays. *J. Appl. Phys.*, 1988, **64**(2): 614~ 628
- [2] Lien A. Extended Jones matrix representation for the twisted nematic liquid crystal display at oblique incidence. *Appl. Phys. Lett.*, 1990, **57**(26): 2767~ 2769
- [3] Berreman D W. Optics in stratified and anisotropic media: 4×4 -matrix formulation. *J. Opt. Soc. Am.*, 1972, **62**(4): 502~ 510
- [4] Wohler H, Hass G, Fritsch M *et al.*. Faster 4×4 matrix method for uniaxial inhomogeneous media. *J. Opt. Soc. Am. (A)*, 1988, **5**(9): 1554~ 1557
- [5] Montgomery P G, Jr. Optical properties of a liquid crystal image transducer at normal incidence: Mathematical analysis and application to the off- state. *J. Opt. Soc. Am.*, 1980, **70**(3): 287~ 300
- [6] Montgomery P G, Jr. Optical properties of a liquid crystal image transducer at normal incidence: on state. *J. Opt. Soc. Am.*, 1980, **70**(7): 843~ 856

- [7] Kobayashi S, Imura Y. Surface liquid crystal molecular alignment in LCDs and their electrooptical performance. *Proc. SPIE*, 1994, **2175** : 122~ 131

Simulation of Electric-Optical Properties of Hometropic Aligned Liquid Crystal Light Valves

Zhang Yueguang Li Haifeng Liu Xu Gu Peifu Tang Jinfa

(*State Key Lab of Modern Optical Instrumentation, Zhejiang University, Hangzhou 310027*)

(Received 18 October 1996; revised 10 July 1998)

Abstract The electric-optical performance of a hometropic aligned liquid crystal light valve (LCLV) as the function of light valve parameters and operating conditions is simulated numerically. This simulation is based on the 4×4 matrix formalism which is the exact numerical solution of Maxwell's equation. The effects of liquid crystal (LC) thickness, incident angle and the pretilt angle on the electric-optical performance of LCLV are discussed. Based on the Oseen and Frank's continuum theory of nematic liquid crystal, and generalized torque balance equation at the interfaces, the director configuration and the electric-optical performance of a hometropic aligned liquid crystal light valve as the function of light valve parameters and operating conditions are calculated. The effects of anchoring strength of Nematic Liquid Crystal (NLC)-wall and the pretilt angle on the director configuration and then the electric-optical performance of LCLV are discussed.

Key words liquid crystal light valve, 4×4 matrix method, anchoring energy, electric-optical performance.