文章编号: 0253-2239(2010)02-0562-05

基于时域有限差分法的液晶光学特性模拟

方 运 张 健 吴丽莹

(哈尔滨工业大学超精密光电仪器工程研究所, 黑龙江 哈尔滨 150001)

摘要 研究了模拟光在液晶中传播的时域有限差分(FDTD)法。该方法采用完全匹配层吸收边界条件来截断计算区域,通过独立计算总场区域与散射场区域的左连接边界和右连接边界上的入射场场值来实现非周期结构的平面波波源引入,并提出了分裂场一维辅助 FDTD 方法来计算含有非均匀各向异性介质的边界上的入射场场值。实现了平面波源入射下具有非周期结构的液晶器件光学特性计算。对开态下扭曲向列相液晶盒的仿真结果表明,30°入射时散射区透射率的最大泄漏误差小于 3%,可知该方法对非周期、非均匀各向异性介质光学特性分析是有效的。

关键词 液晶光学;非周期结构;时域有限差分法;总场/散射场技术

中图分类号 O753^{+}.2 **文献标识码** A **doi:** 10.3788/AOS20103002.0562

Optical Property Simulation of Liquid Crystal Based on Finite-Difference Time-Domain Method

Fang Yun Zhang Jian Wu Liying

(*Institute of Ultra-Precision Opto-Electronic Instrument Engineering*, *Harbin Institute of Technology*, *Harbin*, *Heilongjiang* 150001, *China*)

Abstract Finite-difference time-domain (FDTD) method is used to simulate the light propagation through liquid crystals. The computation window is truncated by the perfectly matched layer absorbing boundary conditions. The incident fields on left connecting boundary and right connecting boundary between total-field region and scattered-field region are calculated independently to introduce plane wave for non-periodic structures. A split-field 1-D auxiliary FDTD method is proposed to calculate incident fields on those boundaries, where the medium are inhomogeneous and anisotropic. Combined these techniques together, plane waves are applicable for non-periodic liquid crystal devices. The simulation results show that the maximum leakage of transmissivity into scattered-field region is less than 3% for twisted nematic cell in on state at 30° incidence. The approach is proved effective for the analysis of optical properties of non-periodic inhomogeneous anisotropic medium.

Key words liquid crystal optics; non-periodic structure; finite-difference time-domain method (FDTD); total-field/scattered-field techniques

1 引 言

液晶是一种双折射率可电控的非均匀各向异性介质,它广泛应用于显示、自适应光学和光束控制等领域[1~3]。光学模拟是分析液晶器件光学特性的有效工具之一。传统的矩阵方法如 4×4 矩阵法是一种使用最广泛的方法[4,5],它采用层状近似理论,即认为液晶只在垂直于玻璃基板的方向上存在不均匀性,而在横向上是均匀的。如果将液晶层 M 等分,只要 M 足够大或者子层的层厚足够小,那么每个子层可以看作是均匀的,求解光在一维变化液晶中传

收稿日期: 2009-04-09; **收到修改稿日期:** 2009-06-19

基金项目: 国家自然科学基金(60878048)资助课题。

作者简介: 方 运(1983—),男,博士研究生,主要从事液晶光学、计算电磁场和液晶光学相控阵等方面的研究。
E-mail: hit_fangyun@yahoo.com.cn

导师简介: 张 健(1944—),男,教授,博士生导师,主要从事光电信息处理和光电检测等方面的研究。
E-mail: zjlab@hit.edu.cn

播的问题转化为求解每层光学参数为常数的分层各向异性介质问题。矩阵方法仅适合于一维结构问题的求解，而诸如几何光学近似法[6]、光栅法[7]和光束传播法[8]等虽然能够处理多维结构问题，但是这些方法在数学层面引入了近似，导致了其在应用时存在一定的限制（如入射角有限或者精度低等）。时域有限差分（FDTD）法[9]作为一种严格求解麦克斯韦（Maxwell）方程组的数值方法而备受关注。

目前，基于 FDTD 方法的液晶光学特性模拟研究大都集中在折射率分布为周期结构的器件上，需同时采用周期边界条件和总场/散射场（TF/SF）技术来引入平面波[10,11]，从而避免计算含有非均匀各向异性介质的连接边界上的入射场场值。然而，非周期结构的双折射率分布常在液晶光学相控阵光束偏转、全息波前变换和具有缺陷的液晶织构中出现[1,12,13]。此时，周期边界条件已不再适用。

本文致力于解决用于非周期结构液晶器件光学特性模拟的 FDTD 方法的平面波激励问题。

2　时域有限差分法的实现

光在任意各向异性介质中传播的 Maxwell 方程组的通用形式可以表述为

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \boldsymbol{D}}{\partial t} = \nabla \times \boldsymbol{H} \\ \dfrac{\partial \boldsymbol{H}}{\partial t} = -\dfrac{1}{\mu_0} \nabla \times \boldsymbol{E} \\ \boldsymbol{D} = \varepsilon_0 \boldsymbol{\varepsilon}_r \boldsymbol{E} \end{cases}, \tag{1}$$

式中 $\boldsymbol{D}$ 为电位移矢量，$\boldsymbol{H}$ 为磁场强度，$\boldsymbol{E}$ 为电场强度，μ_0 为自由空间的磁导率，ε_0 为自由空间的介电常数，$\boldsymbol{\varepsilon}_r$ 为相对介电张量。

FDTD 方法采用 Yee 格式来离散 Maxwell 方程组，并采用基于（$\boldsymbol{D}$，$\boldsymbol{H}$）的完全匹配层（PML）吸收边界条件来终止计算区域[14]。而入射平面波则通过 TF/SF 技术引入到 FDTD 网格中。二维 FDTD 方法计算区域如图 1(a)所示，虚线代表 TF/SF 连接边界。在 Yee 格式 FDTD 方法中，如图 1(b)所示 $\boldsymbol{D}$ 的分量和 $\boldsymbol{H}$ 的分量位于空间不同位置并以交错方式排列，$\boldsymbol{D}$ 和 $\boldsymbol{H}$ 在时域则采用交替前进的时间步进方式，空间微分和时间微分均采用二阶精度的中心差分求解。$\boldsymbol{E}$ 与 $\boldsymbol{D}$ 对应分量位于同一空间位置。为了避免数值不稳定，时间步长与空间网格大小必须满足 Courant 条件。此外，FDTD 计算中还存在数值色散，减小网格尺寸可以提高 FDTD 计算的精度。

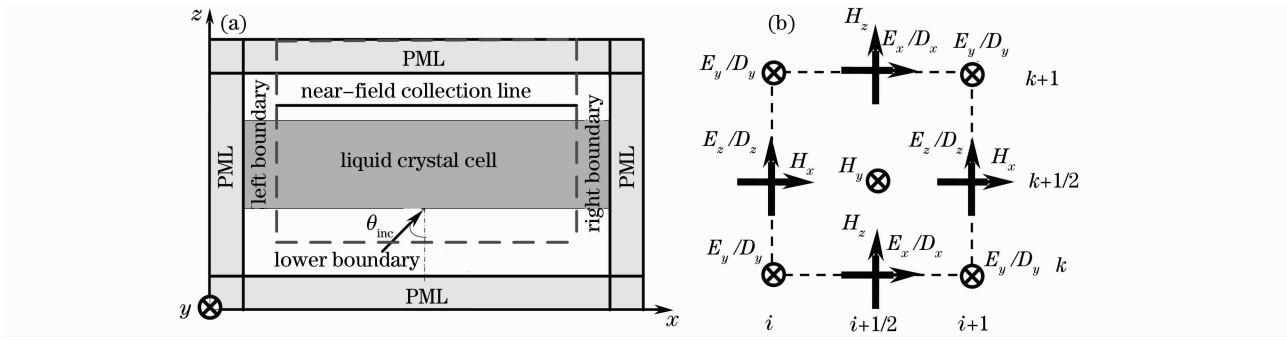

图 1　二维 FDTD 方法计算空间与计算元胞原理示意图。(a)计算空间；(b)计算元胞

Fig. 1　Schematic diagram of 2-D computational space and computational cell for FDTD method. (a) Computational space; (b) computational cell

由于关注透（反）射率、偏振特性和衍射效率等技术指标，因此在液晶器件光学特性模拟时，将 TF/SF 连接边界的上边界扩展到了计算区域的上边界。此外，在大多数实际情形中，TF/SF 连接边界的下边界位于均匀各向同性介质中，但是 TF/SF 左或右连接边界则位于非均匀各向异性介质中。因而 TF/SF 技术的关键在于计算 TF/SF 左（右）连接边界上的入射场场值。

对于左（右）连接边界上的入射场场值，由于计算时不能考虑它与 x 方向上相邻介质之间的相互作用，所以很难获得精确值。但是考虑到液晶的粘滞特性，边界附近介质的介电张量变化平缓，非周期结构中虽然 TF/SF 左右连接边界上的材料特性可能相差很大，但是 TF/SF 左连接边界或右连接边界附近各自的变化仍然可以认为很小。因此左（右）边界上入射场场值的计算问题可以简化为层状各向异性介质中入射场场值的计算问题。

计算层状介质的入射场场值的诸多方法[15~17]中，利用材料边界处电磁场切向分量连续的一维辅助 FDTD 网格是一种相对简单的方法[15]。但由于

任意各向异性介质中横电(TE)波和横磁(TM)波之间相互耦合，所以不能采用与各向同性介质中相同的离散方法去离散那些既沿 x 方向传播又沿 z 方向传播的电磁场分量 D_y 和 H_y。借鉴在完全匹配层吸收边界条件中广泛应用的分裂场技术，对 x 方向传播的子分量和 z 方向传播的子分量单独处理来获得 D_y 和 H_y 的更新方程。

基于材料边界处电磁场切向分量连续理论，对空间变量 x 的空间导数与对时间 t 的时间导数满足

$$\partial/\partial x = -(\sin\theta_{\mathrm{inc}}/c_0)(\partial/\partial t), \tag{2}$$

式中 θ_{inc} 为入射角，c_0 为自由空间中的光速。

由(2)式一维辅助网格上的 Maxwell 方程组可以表述为如下分裂场的分量形式：

$$\begin{cases} \dfrac{\partial D_x}{\partial t} = -\dfrac{\partial H_y}{\partial z} \\ \dfrac{\partial D_{yz}}{\partial t} = \dfrac{\partial H_x}{\partial z} \\ D_{yx} = \dfrac{\sin\theta_{\mathrm{inc}}}{c_0} H_z \\ D_z = -\dfrac{\sin\theta_{\mathrm{inc}}}{c_0} H_y \end{cases}, \tag{3}$$

和

$$\begin{cases} \dfrac{\partial H_x}{\partial t} = \dfrac{1}{\mu_0}\dfrac{\partial E_y}{\partial z} \\ \dfrac{\partial H_{yz}}{\partial t} = -\dfrac{1}{\mu_0}\dfrac{\partial E_x}{\partial z} \\ H_{yx} = -\dfrac{\sin\theta_{\mathrm{inc}}}{c_0\mu_0} E_z \\ H_z = \dfrac{\sin\theta_{\mathrm{inc}}}{c_0\mu_0} E_y \end{cases}. \tag{4}$$

假定 D_y(或 H_y)可分解为两个相加的子分量 D_{yx} 和 D_{yz}(或 H_{yx} 和 H_{yz})，通过离散方程组(3)式和(4)式获得更新方程。以 D_y 为例说明：

$$D_{yz}\big|_k^{n+1} = D_{yz}\big|_k^n + \frac{\Delta t}{\Delta z}\left(H_x\big|_{k+1/2}^{n+1/2} - H_x\big|_{k-1/2}^{n+1/2}\right), \tag{5}$$

$$D_{yx}\big|_k^{n+1} = -D_{yx}\big|_k^n + (2\sin\theta_{\mathrm{inc}}/c_0) H_z\big|_k^{n+1/2}, \tag{6}$$

式中 n 为时间步数，k 为网格点的标号，Δt 为时间步长，Δz 为 z 方向上的网格尺寸。

一维辅助 FDTD 同主网格的 FDTD 一样也需要考虑稳定性、吸收边界条件和波源引入等问题。由于各向同性介质的稳定条件通常是各向异性介质稳定条件的上确界[18]，所以采用这个上确界来避免数值不稳定性[15]。为了防止出射波被反射回计算空间，需要在一维网格两端引入吸收边界条件。对于那些沿 z 方向传播的子分量的吸收可以通过 PML 实现，而对 x 方向传播的子分量的吸收则通过在方程右边乘以一个指数衰减因子实现。一维辅助 FDTD 的平面波激励通过在网格下端采用一维 TF/SF 技术引入。

3 数值验证

为验证本文 FDTD 方法能否解决非周期结构的平面波激励问题，构造了一个具有两个离散电极的扭曲向列相液晶盒，其结构和尺寸如图 2 所示。液晶材料参数分别为

$K_1 = 12.5\times10^{-12}\,\mathrm{N}$，$K_2 = 7.3\times10^{-12}\,\mathrm{N}$，

$K_3 = 17.9\times10^{-12}\,\mathrm{N}$，$\varepsilon_{\mathrm{p}} = 14.1$，

$\varepsilon_{\mathrm{n}} = 4.09$，$n_0 = 1.5$ 和 $n_{\mathrm{e}} = 1.6$

玻璃的折射率为 1.5。x 方向和 z 方向上的 PML 的厚度均为 20 个网格。网格尺寸为 $\Delta x = \Delta z = \Delta = \lambda/20$。时间步长采样间隔为 $\Delta t = \Delta/(3c_0)$。

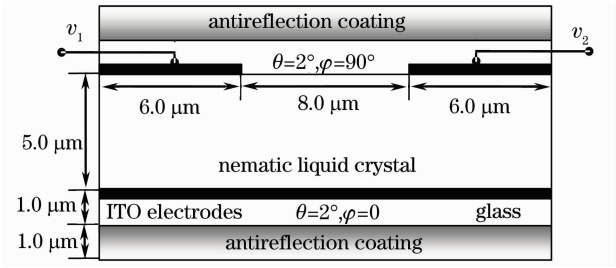

图 2 扭曲向列相液晶盒的几何结构

Fig. 2 Geometric of twist nematic liquid crystal cell

当控制电压 $v_1 \neq v_2$ 时，表示折射率分布的指向矢分布将呈现非周期结构。但由于指向矢计算软件 LC3D (LCI,KSU)只适用于周期边界条件，如果在计算时设控制电压 $v_1 \neq v_2$，将得到错误的指向矢计算结果[19]。为满足该软件的使用条件，在控制电压 $v_1 = v_2 = v$ 条件下计算指向矢分布，然后截取周期指向矢分布的一半来构造一个非周期结构，其指向矢分布如图 3 所示。

光通过图 3 所示的指向矢分布将导致入射光波强度和相位的改变。一束 $\lambda = 632.8$ nm 的 TE(E_y)偏振光从液晶盒底部正入射后的 E_y 分布如图 4(a)所示。当光从图 3 右边的扭曲结构透过时，对应的 E_y 强度逐渐减弱，这是由于扭曲织构对偏振光的导向效应引起的能量从 TE(E_y)耦合到 TM(E_x)。当光从图 3 左半部分透过时，对应的 E_y 能量转移并不明显，但是相位比右边超前，这是由于外加电场使得液晶分子向 z 方向倾斜所致。同时，由于边缘场效应，电极边缘处的液晶指向矢沿相反方

向倾斜，形成了一个如图 3 中间部分所示缺陷。在缺陷区域附近可以看到由缺陷引起的散射和两边的干涉现象。图 4(b)还给出了光线 30°入射时的 E_y 分布，也具有类似的现象。

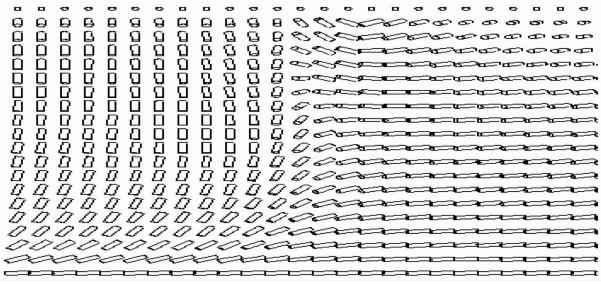

图 3　开态(v=3 V)时只有一个电极和半个间隔的左半像素的指向矢分布

Fig. 3　Director distribution profile of left half pixel with only one electrode and half gap on state (v=3 V)

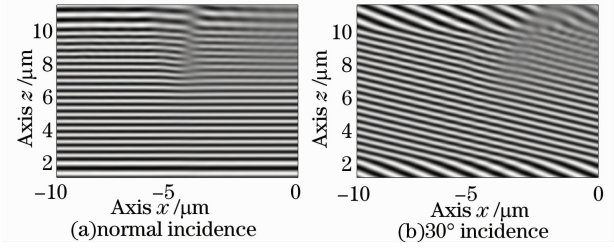

图 4　开态(v=3 V)时扭曲向列相液晶盒中电场的近场图像

Fig. 4　Near-filed electric field images of twist nematic liquid crystal cell in on state (v=3 V)

为了定量了解光通过液晶盒后产生的能量耦合和散射情况，设想在液晶盒顶部光线出射的近场收集线上存在一个透光轴沿 y 方向的理想检偏器，求解光通过该理想检偏器时的透射率分布，并将该透射率曲线与 Berreman 方法的计算结果进行比较，结果如图 5 所示。可见 FDTD 方法给出了更多由电极边缘处缺陷导致的衍射和散射而引起的能量波动细节。Berreman 方法由于计算时忽略了相邻像素之间的衍射和散射效应而缺少这些信息，如图 5(a)中 FDTD 计算的透射率在缺陷区域高于 Berreman 方法计算得到的透射率，它反映了 FDTD 方法考虑了散射效应。

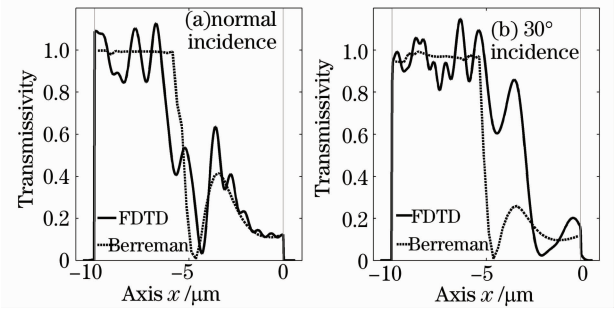

图 5　开态(v=3 V)时光穿过扭曲向列相液晶盒后沿着 x 轴方向的透射率

Fig. 5　Transmissivity along x axis for light propagation through twist nematic liquid crystal cell in on state (v=3 V)

从 FDTD 算法实现的角度，更加关注 TF/SF 连接边界上波源引入所带来的误差及其对计算结果的影响。理想情况下希望散射区的散射越小越好，因而可以通过测量散射区的透射率来评价误差。从图 5 可以看出，正入射时散射场区域透射率的最大泄漏误差小于 0.3%，30°入射时透射率最大泄漏误差小于 3%，这对于光学特性分析是可以接受的。

4　结　　论

根据材料边界处电磁场切向分量连续理论将对 x 的偏微分转化为对时间 t 的偏微分，并采用分裂场技术解决了各向异性介质中既沿 x 方向传播又沿 z 方向传播的电磁场分量 D_y 和 H_y 的离散化问题，使得分裂场一维辅助 FDTD 方法可用来来计算层状各向异性介质中的入射场场值。进而在左(右)边界上的材料特性变化很小的前提下，利用分裂场一维辅助 FDTD 方法分别计算 TF/SF 左右边界处的入射场场值，从而解决了在具有非周期折射率分布的器件中用 FDTD 模拟光传播特性时的平面波源引入问题。对具有非周期折射率分布的扭曲向列相液晶盒数值模拟结果显示，正入射时散射区透射率的最大泄漏误差小于 0.3%，30°入射时透射率最大泄漏误差小于 3%，证明了本文提出的方法能够有效地分析非周期非均匀各向异性介质的光学传输特性。

参　考　文　献

1 L. Vicari. Optical Applications of Liquid Crystals [M]. Institute of Physics Publishing, Bristol and Philadelphia. 2003

2 Cao Zhaoliang, Mu Quanquan, Hu Lifa *et al.*. Design on liquid crystal adaptive optical system for 600 mm telescope [J]. *Acta Optica Sinica*, 2008, **28**(6): 1147～1150
曹召良，穆全全，胡立发 等. 600 mm 望远镜液晶自适应系统成像光路设计 [J]. 光学学报，2008，**28**(6)：1147～1150

3 Zhang Hongxin, Zhang Jian, Wu Liying. Phase modulation of liquid crystal spatial light modulator measured by a Twyman-Green interferometer [J]. *Chinese J. Lasers*, 2008, **35**(9): 1360～1364
张洪鑫，张　健，吴丽莹. 泰曼-格林干涉仪测量液晶空间光调制器的相位调制特性[J]. 中国激光，2008，**35**(9)：1360～1364

4 D. W. Berreman. Optics in stratified and anisotropic media: 4×4-matrix formulation [J]. *J. Opt. Soc. Am.*, 1972, **62**(4): 502～510

5 Chen Ting, Feng Shimeng. Study of the complex number-matrix

method on the optical properties of cholesteric liquid crystal [J]. *Acta Optica Sinica*, 2008, **28**(9): 1805～1811
陈 婷，冯仕猛. 复指数矩阵法研究螺旋液晶光学传播特性[J]. 光学学报，2008，**28**(9)：1805～1811

6 G. Panasyuk, J. R. Kelly, P. Bos. The geometrical optics approach for multidimensional liquid crystal cells [J]. *Liq. Cryst.*, 2004, **31**(11): 1503～1515

7 D. Olivero, C. Oldano. Numerical methods for light propagation in large LC cells: a new approach [J]. *Liq. Cryst.*, 2003, **30**(3): 345～353

8 E. E. Kriezis, S. J. Elston. Wide-angle beam propagation method for liquid-crystal device calculations [J]. *Appl. Opt.*, 2000, **39**(31): 5707～5714

9 A. Taflove, S. C. Hagness. Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method [M]. Artech House Publishers, Boston. 2000

10 E. E. Kriezis, S. J. Elston. Light wave propagation in liquid crystal displays by the 2-D finite-difference time-domain method [J]. *Opt. Commun.*, 2000, **177**(1～6): 69～77

11 C. Oh, M. J. Escuti. Time-domain analysis of periodic anisotropic media at oblique incidence: an efficient FDTD implementation [J]. *Opt. Express*, 2006, **14**(24): 11870～11884

12 I. Dierking. Textures of Liquid Crystals [M]. WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim. 2003

13 A. G. Georgiou, M. Komarcevic, T. D. Wilkinson *et al.*. Hologram optimisation using liquid crystal modelling [J]. *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, 2005, **434**: 183/[511]～198/[526]

14 A. P. Zhao. Application of the material-independent PML absorbers to the FDTD analysis of electromagnetic waves in nonlinear media [J]. *Microw. Opt. Technol. Lett.*, 1998, **17**(3): 164～168

15 I. R. Capoglu, G. S. Smith. A total-field/scattered-field plane-wave source for the FDTD analysis of layered media [J]. *IEEE Trans. Antennas Propag.*, 2008, **56**(1): 158～169

16 K. Abdijalilov, J. B. Schneider. Analytic field propagation TFSF boundary for FDTD problems involving planar interfaces: lossy material and evanescent fields [J]. *IEEE Antennas Wirel. Propag. Lett.*, 2006, **5**(1): 454～458

17 C. D. Moss, F. L. Teixeira, J. A. Kong. Analysis and compensation of numerical dispersion in the FDTD method for layered, anisotropic media [J]. *IEEE Trans. Antennas Propag.*, 2002, **50**(9): 1174～1184

18 S. G. Garcia, T. M. HungBao, R. G. Martin *et al.*. On the application of finite methods in time domain to anisotropic dielectric waveguides [J]. *IEEE Trans. Microw. Theory Tech.*, 1996, **44**(12): 2195～2206

19 J. E. Anderson, P. E. Watson, P. J. Bos. LC3D: Liquid Crystal Display 3-D Director Simulation Software and Technology Guide [M]. Artech House Publishers, Boston. 2001