Twisted Nematic(TN) 액정에서의 흐름효과 해석

김 훈, 박우상
인하대학교

Analysis on the Flow Effect of the Twisted Nematic Liquid Crystals

Hoon Kim, Woo-Sang Park
Inha Univ.

Abstract : We coupled fluid balance equation and director balance equation from Ericksen-Leslie's continuum theory and observed the motion of Twisted Nematic (TN) Liquid Crystals. We simulated flow velocity distribution and director distribution. We interpreted the dynamic response characteristic caused by the flow. As the result of the simulation, We could see the flow effect. And this flow caused abnormal twist to 4msec in switching off state. We could prove that this abnormal twist is a direct cause of optical bounce phenomenon known well until now with the result of simulation.

Key Words : flow effect, Twisted Nematic, dynamic state response

1. 서 론

TFT(Thin Film Transistor)를 이용한 액정표시장치(LCD : Liquid Crystal Displays)는 표시품질, 해상도, 색상, 명암대비 비 등에서 CRT에 필적하며, 최근들어 정보화시대에 요구하는 경량박형, 저소비전력, 고해상도, 높은 색재현성 등을 만족시키는 표시장치로서 가장 각광을 받고 있다. 이러한 TFT-LCD는 현재 광범위한 연구가 활발히 진행중이며, 특히 효율적인 컴퓨터 시뮬레이션에 의한 연구는 정확한 현상파악이 필수조건이라 할 수 있다.

여러 LCD mode 중에서 대표적인 Twisted nematic(TN)에서의 과도상태 응답은 수 십년간 연구되어왔다. 특히 흐름효과는 30년전 van Doorn[1] 과 Berreman[2]이 그 중요성을 제기하였으며, switching off 상태 이후에 응답은 지금까지 잘 알려진 optical bounce 현상을 보인다. 하지만 오늘날 대부분의 시뮬레이터는 흐름효과를 고려하지 않고 있다. 그 이유로는 복잡한 모델링 식과 이로인한 늦은 계산시간, 모델링 식에 대한 명확한 논증이 없기 때문이다.

본 연구에서는 Ericksen-Leslie의 연속체 이론으로부터 fluid balance 식과 director balance 식을 동시에 고려하여 모델링 하였다. switching on 상태와 switching off 상태에서 흐름 효과가 고려된 흐름속도분포 와 분자배열분포를 시뮬레이션함으로써 모델링식을 명확이 논증하고, 흐름으로 인한 dynamic response 특성을 해석하였다.

2. 시뮬레이션

2.1 흐름효과를 고려한 과도상태 모델링

흐름효과를 고려한 과도상태를 1차원적으로 해석하기 위하여 먼저, 다음과 같은 경계조건 및 제한조건을 적용하였다.

- 흐름은 cell 내의 $x-y$ 평면상에서만 발생하며 v_z성분은 고려하지 않는다.
- 표면의 anchoring 에너지에 의한 효과는 고려하지 않는다.
- cell의 경계면은 각각 $z=0, z=d$ (d는 cell gap) 이며, 경계에서의 흐름성분 v_x, v_y은 0 이다.

즉, 위 조건에 의해 v_z 성분은 0으로 간주되며, 5개의 미지수 n_x, n_y, n_z, v_x, v_y를 구하기 위하여 Ericksen-Leslie의 연속체 이론으로부터 $\hat{n} = (n_x, n_y, n_z)$ 과 같이 방향자의 직각좌표계 표현을 적용하여, 다음과 같은 식들을 얻을 수 있다.

$$\alpha_2 n_z \frac{\partial n_x}{\partial t} + \alpha_3 n_x \frac{\partial n_z}{\partial t} + \frac{1}{2}\alpha_3 n_x n_y \frac{\partial v_y}{\partial z} + \frac{1}{2}\{2\alpha_1 n_x^2 n_y^2 + (\alpha_5 - \alpha_2) n_z^2 + \alpha_4 + (\alpha_3 + \alpha_6) n_x^2\} \frac{\partial v_x}{\partial z} = c_1 \quad (1)$$

$$\alpha_2 n_z \frac{\partial n_y}{\partial t} + \alpha_3 n_y \frac{\partial n_z}{\partial t} + \frac{1}{2}\alpha_3 n_x n_y \frac{\partial v_x}{\partial z} + \frac{1}{2}\{2\alpha_1 n_y^2 n_z^2 + (\alpha_5 - \alpha_2) n_z^2 + \alpha_4 + (\alpha_3 + \alpha_6) n_y^2\} \frac{\partial v_y}{\partial z} = c_2 \quad (2)$$

$$\gamma \frac{\partial n_x}{\partial t} = -[f_g]_{n_x} + \lambda n_x - \alpha_2 n_z \frac{\partial v_x}{\partial z} \quad (3)$$

$$\gamma \frac{\partial n_y}{\partial t} = -[f_g]_{n_y} + \lambda n_y - \alpha_2 n_z \frac{\partial v_y}{\partial z} \quad (4)$$

$$\gamma \frac{\partial n_z}{\partial t} = -[f_g]_{n_z} + \lambda n_z - \alpha_3 n_x \frac{\partial v_x}{\partial z} - \alpha_3 n_y \frac{\partial v_y}{\partial z} \quad (5)$$

여기서 (1,2)식은 흐름에 관련된 식이며, (3~5)식은 방향자 성분에 관한 식이다. γ는 rotational viscosity, λ는 $|\hat{n}|=1$과 같이 $\hat{n}$을 단위벡터로 만들어 주기 위한 lagrange multiplier 이며, $\alpha_{1\sim6}$는 viscosity coefficients, v_x, v_y는 흐름속도성분 이며, c_1, c_2는 유도과정에서 파생되는 적분상수이다. 또한, $[f_g]_{n_i}$는 Gibbs 자유 에너지 밀도 의 Euler-Lagrangian식 이며, strain 에너지 밀도(f_s)와 electric 에너지 밀도(f_e) 의 차($f_s - f_e$)로서 기존에 주로 사용하였던 등방탄성계수 벡터표현으로 근사한 식 대신 결과의 정확성을 위하여 이방탄성계수 텐서표현[3,4]을 사용하였으며 식 (6)과 같다.

$$-[f_g]_{n_i} = \frac{1}{3}(-K_{11}+3K_{22}+K_{33})(n_j Q_{ji,ll}) + (K_{11}-K_{22})n_j(Q_{il,lj}+Q_{jl,li}) + \left(\frac{K_{33}-K_{11}}{2}\right)n_j(2Q_{lm,m}Q_{ji,l}+2Q_{jm}Q_{jl,lm}-Q_{lm,i}Q_{lm,j}) + 2q_0K_{22}n_j(e_{iml}Q_{j,m}+e_{jml}Q_{il,m})+\epsilon_0(\epsilon_{\parallel}-\epsilon_{\perp})n_j\phi_{,j}\phi_{,i} \quad (6)$$

여기서, K_{11}, K_{22}, K_{33}는 각각 splay, twist, bend 탄성계수이며, q_0는 액정의 chirality 이다. 또한 전위분포 $\phi(x,y,z)$는 Maxwell의 식으로부터 유도된 Lapalce 식이며, 다음과 같은 식 (7)의 계산에 의해 얻을 수 있다.

$$(\epsilon_{ij}\phi_{ij})_{,i}=0 \quad (7)$$

2.1 시뮬레이션을 위한 수치해석

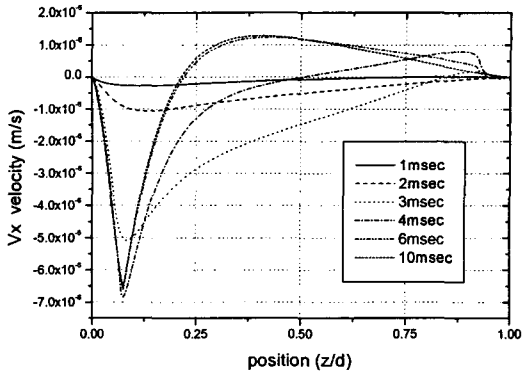
앞절의 modeling 식을 시뮬레이션 하기 위해, (3~5)식을 (1,2)식에 대입하여, 시간에 대한 미분항을 소거하였다. 다음은 cell gap에 대해 즉, $z=0$ 에서 $z=d$까지 경계조건을 적용하여 적분함으로서, 적분상수 c_1, c_2를 구할 수 있다. 따라서, c_1, c_2는 z에 대해서 일정하며, 매 시간(t) 마다 다시 계산되어 진다. 과도상태의 분자배열 분포와 흐름속도 분포를 얻기위한 수치해석적 방법으로는 유한차분법 (Finite Difference Method)의 Explicit 방법을 사용하였다. 이때의 각 간격은 $\triangle z = 0.026\mu m, \triangle t = 0.1\mu sec$로 하였다. 과도상태 응답해석을 위한 광투과율은 Berreman의 4 by 4 matrix 방법[5]을 사용하였다. 시뮬레이션에 필요한 각 파라미터값은 표 1과 같다.

표 1. Values of material constants of MBBA for simulation

Quantity	Value	Quantity	Value
K_{11}	13.9×10^{-12} (N)	α_1	6.5 $(mPa\,s)$
K_{22}	6.5×10^{-12} (N)	α_2	-79.0 $(mPa\,s)$
K_{33}	18.3×10^{-12} (N)	α_3	-1.2 $(mPa\,s)$
n_e	1.59	α_4	83.2 $(mPa\,s)$
n_o	1.5	α_5	46.3 $(mPa\,s)$
Cell Gap	5.2 (μm)	α_6	-34.0 $(mPa\,s)$
Pretilt	2°	$\epsilon_{\parallel}$	8.3
Twist	90°	$\epsilon_{\perp}$	3.1

3. 결과 및 검토

그림 1은 switching on 상태에서 시간에 따라 cell 내의 각 위치에서의 흐름속도 분포를 나타낸다. 양쪽 substrate 근방에서 흐름의 최대 속도가 수 $\mu m/s$ 로서, 분자배열 분포에 매우 작은 영향을 주게 된다. 응답 또한 그 영향력이 매우 작으며, 흐름효과를 고려하지 않을 때와의 차이가 매우 적은 결과를 보였다. 흐름분포는 10 msec이후 saturation 되었다.



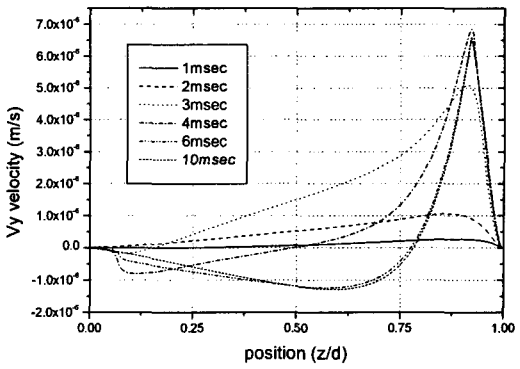
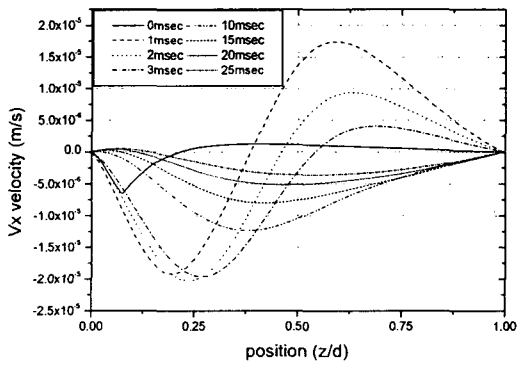


그림 1. switching on 상태에서 시간에 따른 v_x, v_y분포

그림 2는 switching off 상태에서 시간에 따라 cell 내의 각 위치에서의 흐름속도 분포를 나타낸다. switching off 상태가 되자마자 최대 속도가 수십 $\mu m/s$ 로 증가하였다가 시간이 지남에 따라 흐름은 점점 소멸되는 결과를 보인다.



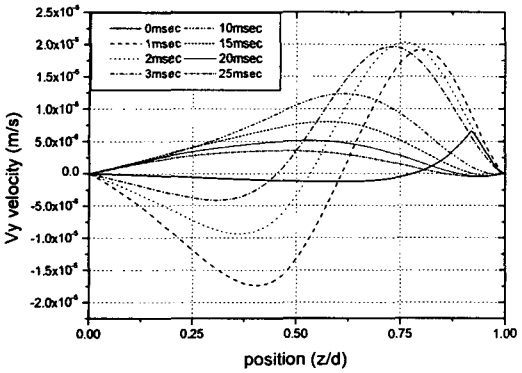


그림 2. switching off 상태에서 시간에 따른 v_x, v_y분포

이와 같은 흐름 분포는 switching off 상태에서 분자배열 분포에 가시적인 영향을 주게 된다. 특히 흐름이 급격히 증가하였다가 감소하는 (0~4msec) 시간의 twist 각 분포는 그림 3과 같이 abnormal twist를 야기하게 된다.

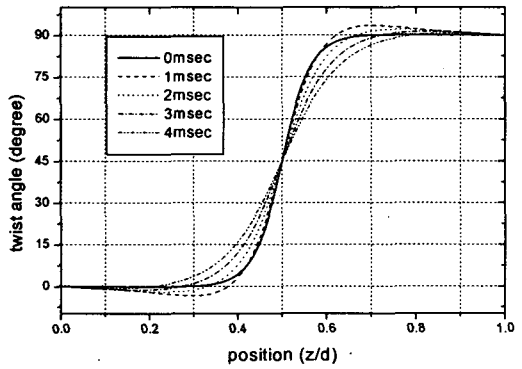


그림 3. switching off 상태에서 시간에 따른 twist 분포

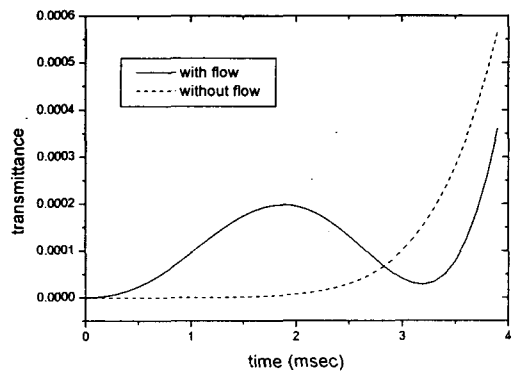


그림 4. switching off 상태에서 시간에 따른 투과율 분포

이와 같은 abnormal twist 현상은 off 상태가 되자마자 일시적으로 발생한다. 그림 4는 시간에 따른 광투과율을 시뮬레이션 한 결과이며, abnormal twist 현상이 optical bounce 현상의 원인이 됨을 알 수 있다.

4. 결 론

본 연구에서는 TN 액정에서의 흐름효과를 해석하기 위해 연속체 이론으로부터 fluid balance 식과 director balance 식을 동시에 고려하여 시뮬레이션 하였다. 시뮬레이션 결과 흐름효과를 고려하지 않을 때와 비교했을 때, switching on 상태에서는 twist 각 분포에서만 약간의 가시적인 차이를 보일 뿐, tilt 각 분포와 광투과율 에서는 그 차이가 매우 적었으며, 흐름의 영향이 매우 미약하였다. 하지만 switching off 상태가 되자, 일시적으로 급격히 흐름속도가 증가하게 되고, 이것에 대한 영향은 tilt 각과 twist 각 분포에서 흐름을 고려하지 않았을 때와 그 차이가 확연히 나타났다. 특히 twist 각 분포에서는 abnormal twist 현상을 관찰할 수 있었다. 이 현상은 광투과율을 시뮬레이션 했을 때, optical bounce 현상의 원인이 됨을 증명할 수 있다.

흐름효과를 고려하여 시뮬레이션 했을 때, 고려하지 않을 때와 비교하여 그 특성이 명확하므로, 보다 정확한 현상파악을 할 수 있었으며, 앞에서 제시한 modeling 식을 명확히 논증할 수 있었다.

참고 문헌

[1] C. Z. van Doorn, J. Appl. Phys. Vol. 46, No. 9, p. 3738, 1975.

[2] D. W. Berreman, J. Appl. Phys. Vol. 46, No. 9, p. 3746, 1975.

[3] D. W. Berreman, S. Meiboom, J. Amer. Phys. Soc. Vol. 30, No. 4, p. 1955, 1984.

[4] S. Dickmann, J. Eschler, O. Cossalter, D. A. Mlynski, SID Digest, p. 638, 1993.

[5] D. W. Berreman, J. Opt. Soc. Amer. Vol. 64, No. 4, p. 502, 1971.

[6] J. Kelly, S. Jamal, M. Cui, J. Appl. Phys. Vol. 86, No. 8, p. 4091, 1999.