

흐름효과를 고려한 액정의 시뮬레이션

Simulation of Liquid Crystals Considering Flow Effect

김 훈¹, 박우상^{1,a}

(Hoon Kim¹ and Woo-Sang Park^{1,a})

Abstract

In this paper, We coupled fluid balance and director balance equation from Ericksen-Leslie's continuum theory and observed the motion of Liquid Crystal molecular. We simulated flow velocity and director distribution in which flow effect is considered in switching on and switching off state. We interpreted the dynamic response characteristic caused by the flow. As the result of the simulation, We could see the flow effect. In the case of Twisted Nematic(TN) cell, this flow caused abnormal twist temporarily 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. In addition, We analyzed the mechanism of the fast response due to flow in the case of Optically Compensated Bend(OCB) cell.

Key Words : Flow effect, Twisted nematic(TN), Optically compensated bend(OCB), Dynamic response

1. 서 론

최근 들어, TFT(Thin Film Transistor)를 이용한 액정표시장치(LCD : Liquid Crystal Displays)는 표시품질, 해상도, 색상, 명암대비비 등에서 CRT에 필적하며, 정보화시대에 요구되는 경량박형, 저소비전력, 고해상도, 높은 색재현성 등을 만족시키는 표시장치로서 가장 각광을 받고 있다. 이러한 TFT-LCD는 현재 광범위한 연구가 활발히 진행중이며, 연구의 효율성을 높이기 위한 컴퓨터 시뮬레이션의 중요성은 한층 부각되고 있다.

초고정세 디스플레이의 경우, 일반적으로 사용되는 Twisted Nematic(TN) mode는 1971년 M. Schadt에 의해 제안되었고[1] 1974년 D. W. Bereman은 액정의 시간에 따른 운동을 연구하기 위한 방법으로 시뮬레이션 기법을 제시하였으며[2] 이를 바탕으로 학문적 혹은 실용적 목적으로 다양한 기법의 시뮬레이션이 수행되어 왔다. 특히 흐름효과는 1975년 C. Z. Van Doorn[3]과 D. W. Bereman[4]이 흐름

으로 인하여 switching off 상태 이후에 응답은 optical bounce 현상을 보임을 시뮬레이션하였다. 하지만 대부분의 시뮬레이터는 흐름효과를 고려하지 않고 있다. 그 이유로는 복잡한 모델링 식과 이로 인한 늦은 계산시간[5], 모델링 식에 대한 명확한 논증이 없기 때문이다.

본 연구에서는 Ericksen-Leslie 연속체 이론으로부터 fluid balance 식과 director balance 식을 동시에 고려하여 모델링 하였다. switching on, off 상태에서 시간에 따른 흐름속도 분포와 흐름효과가 고려된 분자배열 분포를 시뮬레이션함으로써 모델링 식을 명확히 논증하고 TN의 과도상태(dynamic state) 응답에서의 optical bounce의 원인을 해석하였다. 또한 Optically Compensated Bend(OCB) cell[6,7]에 적용하여 흐름으로 인하여 응답속도가 가속되는 메카니즘을 해석하였다.

2. 시뮬레이션

2.1 흐름효과를 고려한 과도상태 모델링

액정에 있어서, 미소 체적 내에 존재하는 액정분자의 평균 방향으로 기술되는 방향자 $\hat{n} = (n_x, n_y, n_z)$

1. 인하대학교 전자공학과
(인천시 남구 용현4동 253)
a. Corresponding Author : wspark@inha.ac.kr
접수일자 : 2005. 10. 25
심사완료 : 2006. 1. 23

은 단위 벡터로서 시간과 공간의 함수이다. 액정의 운동과 방향자의 분포를 해석하기 위하여, 본 연구에서 적용된 이론적 모델은 액정의 내부 관성(inertial momentum)을 무시한 Ericksen-Leslie 연속체 이론에 기초한다. 이 연속체 이론으로부터 1차원적 해석을 하기 위한 모델링 식을 유도하였다. 액정내에 전기장은 z축 방향으로 작용하므로, 상대적으로 z축 방향의 흐름은 매우 작다고 할 수 있다. 따라서 흐름은 x-y 평면에서만 발생한다고 가정하고, 흐름속도성분 v_z 성분은 고려하지 않는다. 또한 계산의 용이성을 위해 표면의 anchoring 에너지에 의한 효과는 고려하지 않는다. 경계조건으로서는 cell 간격을 d 라 했을 때, cell의 경계면은 상, 하판 각각 $z=0$, $z=d$ 이며, 유체의 착벽조건(no slip condition)에 의해 경계에서의 흐름속도성분 v_x, v_y 은 0이다. 즉, 위와 같은 가정과 경계조건을 적용하여, Ericksen-Leslie의 fluid balance 식을 tensor 계산을 통해 1차원적으로 풀면 다음과 같은 흐름과 관련된 식을 얻을 수 있다.

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

$$+ (\alpha_3 + \alpha_6) n_x^2 \frac{\partial v_x}{\partial z} = c_1$$

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

$$+ (\alpha_3 + \alpha_6) n_y^2 \frac{\partial v_y}{\partial z} = c_2$$

여기서, $\alpha_1 \sim \alpha_6$ 는 viscosity coefficients, c_1, c_2 는 유도과정에서 파생되는 적분상수이다.

같은 방법으로 방향자 성분에 관한 식을 유도하는데 있어서, 과도상태에 적합한 자유에너지의 정의가 필요하다. 과도상태 계산방법은 단위 화소 내의 전위 분포를 계산한 뒤, 계산된 전위분포를 일정 시간 동안 동일하게 두고, 이 전위 분포에 적합한 분자 배열 분포를 계산하는 방법이기 때문에, 고정 전위 모델에서의 전기 에너지 밀도가 적용되어야 한다. 따라서, 과도상태 해석법의 경우에는 전기에너지 밀도가 음의 부호로 되기 때문에, 결과적으로 액

정의 자유에너지 밀도가 탄성에너지 밀도와 전기에너지 밀도의 차($f_s - f_e$)로 표현되며, 이 경우를 Gibbs 자유 에너지 밀도라 하고 f_g 로 표현한다[8]. 또한, 방향자 \hat{n} 을 적용한 f_g 의 Euler-Lagrange 식을 $[f_g]_{n_i}$ 라 한다면, 1차원적으로 다음과 같이 표현된다.

$$\frac{\partial f_g}{\partial n_i} - \frac{\partial}{\partial z} \frac{\partial f_g}{\partial n_{i,z}} = [f_g]_{n_i}, \quad i = \{x, y, z\} \quad (3)$$

식 (3)을 이용하여, 풀면 다음과 같이 3개의 방향자 성분에 관한 식이 유도된다.

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

$$\gamma \frac{\partial n_y}{\partial t} = -[f_g]_{n_y} + \lambda n_y - \alpha_2 n_y \frac{\partial v_y}{\partial z} \quad (5)$$

$$\gamma \frac{\partial n_z}{\partial t} = -[f_g]_{n_z} + \lambda n_z - \alpha_3 n_x \frac{\partial v_x}{\partial z} - \alpha_3 n_y \frac{\partial v_y}{\partial z} \quad (6)$$

여기서 γ 는 rotational viscosity, λ 는 $|\hat{n}|=1$ 과 같이 \hat{n} 을 단위벡터로 만들어 주기 위한 lagrange multiplier이다. 자유 에너지 밀도 계산에 있어서, 기존에 주로 사용하였던 등방탄성계수 벡터표현으로 근사한 식 대신에 결과의 정확성과 2차원, 3차원 시뮬레이션으로의 확장성의 용이성을 고려하여 이방탄성계수 텐서 모델[8]을 사용하였으며, Gibbs 자유 에너지 밀도의 Euler-Lagrange 식은 다음과 같이 유도된다.

$$-[f_g]_n = \frac{1}{3} (-K_{11} + 3K_{22} + K_{33})(n_j Q_{j,i,d}) + (K_{11} - K_{22})n_j (Q_{i,l,y} + Q_{j,l,d}) + \left(\frac{K_{33} - K_{11}}{2} \right) n_j (2Q_{lm,m} Q_{j,l,i} + 2Q_{jm} Q_{j,l,m} - Q_{lm,i} Q_{lm,j}) + 2q_0 K_{22} n_j (e_{im} Q_{0,m} + e_{jm} Q_{0,m}) + \epsilon_0 (\epsilon_l - \epsilon_s) n_j \phi_{,j} \phi_{,i} \quad (7)$$

여기서 K_{11}, K_{22}, K_{33} 는 각각 splay, twist, bend 탄성계수이며, q_0 는 액정의 chirality 이다. 위 식의 아래 첨자는 아인슈타인 표기법(Einstein notation)에 따른 것으로 반복되는 첨자는 x, y , 그리고 z 에 대한 합으로 계산된다. Q_{ij} 는 방향자 \hat{n} 에 대해 다음과 같이 정의 된다.

$$Q_{ij} = n_i n_j - \frac{1}{3} \delta_{ij} \quad (8)$$

e_{ijk} 와 δ_{ij} 는 각각 순열 기호(permutation symbol)과 Kronecker's delta를 나타낸다[9]. 위와 같은 tensor notation을 이용하여, 식 (7)을 각각의 성분 즉, x, y, z 에 대해 1차원적으로 풀어 시뮬레이션 하였다. 또한 전위분포함수 $\phi(x, y, z)$ 는 Maxwell 방정식으로부터 유도되는 다음의 Laplace 방정식에 경계조건을 적용하여 시뮬레이션 함으로서 얻을 수 있다.

$$(\epsilon_{ij} \phi_{,ij})_{,i} = 0 \quad (9)$$

2.2 모델링식의 시뮬레이션을 위한 수치해석

과도상태의 분자 배열 분포와 흐름 속도 분포를 얻기위한 수치해석적 방법으로는 유한차분법(FDM : Finite Difference Method)의 Explicit 방법을 사용하였다. 시간과 공간에 대한 차분은 다음과 같다.

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} = \frac{n_i^{t+1} - n_i^t}{\Delta t} \quad (10)$$

$$Q_{ij,z} = \frac{Q_{ij}^{i+1} - Q_{ij}^{i-1}}{2h} \quad (11)$$

$$Q_{ij,zz} = \frac{Q_{ij}^{i+1} - 2Q_{ij}^i + Q_{ij}^{i-1}}{h^2} \quad (12)$$

$$V_{,z} = \frac{V_{i+1} - V_{i-1}}{2h} \quad (13)$$

액정층을 z 축을 따라 n 개의 sublayer로 나누고, 각 sublayer의 간격이 h 이다. 특히 전위분포를 계산함에 있어서 Voltage에 대한 Euler-Lagrangian을 풀면 V_z 의 이차 미분방정식이 유도된다. 이 미분방정식을 차분방정식으로 근사시켜 정리하면, 다음과 같다.

$$\begin{aligned} & - \left(\frac{\epsilon_{z,i+1} - \epsilon_{z,i-1}}{4h^2} - \frac{\epsilon_{z,i}}{h^2} \right) V_{i-1} - \frac{2\epsilon_{z,i}}{h^2} V_i \\ & + \left(\frac{\epsilon_{z,i+1} - \epsilon_{z,i-1}}{4h^2} - \frac{\epsilon_{z,i}}{h^2} \right) V_{i+1} = 0 \end{aligned} \quad (14)$$

표 1. 시뮬레이션에 필요한 물질 상수 값.

Table 1. Values of material constants for simulation.

Quantity (unit)	Value	
	TN	OCB
K_{11} (pN)	13.9	14
K_{22} (pN)	6.5	0
K_{33} (pN)	13.9	14
α_1 (mPa s)	6.5	5
α_2 (mPa s)	-79.0	-100
α_3 (mPa s)	-1.2	-1
α_4 (mPa s)	83.2	80
α_5 (mPa s)	46.3	66
α_6 (mPa s)	-34.0	-35
n_e	1.59	1.668
n_o	1.5	1.5
$\epsilon_{ }$	8.3	13.06
ϵ_{\perp}	3.1	4.12
Cell Gap (μm)	5.2	5.2
Pretilt (degree)	2	5
Twist (degree)	90	180

식 (14)는 $n+1$ 개의 미지수를 가지는 반면, 방정식은 $n-1$ 개 존재하기 때문에, pixel 전극과 공통전극에 대한 추가적인 두 개의 정보를 초기조건으로 사용하여 Thomas algorithm을 사용하여 시뮬레이션 하였다.

이와 같이 얻은 전위분포를 이용하여 앞 절의 모델링식을 시뮬레이션 하기 위해 먼저, 식 (4)~(6)을 식 (1), (2)식에 대입하여, 시간에 대한 미분항을 소거하였다. 다음은 cell gap에 대해 즉, $z=0$ 에서 $z=d$ 까지 앞서 설명한 유체의 경계조건(착벽조건)을 적용하여 적분함으로서, 적분상수 c_1, c_2 를 구할 수 있다. 따라서 c_1, c_2 는 z 에 대해서 일정하며, 매 시간(t) 마다 다시 계산되어 진다. 본 연구에서는 시간 차분의 간격(Δt)을 $0.1 \mu sec$ 로 하였다.

과도상태 응답해석을 위한 광투과율을 계산함에 있어서 각 sublayer를 균일한 비등방 매질로 간주한 뒤, 각 층에 대한 고유값과 고유벡터를 이용하여 전파행렬을 해석적으로 풀이하는 Berreman의 4 by 4

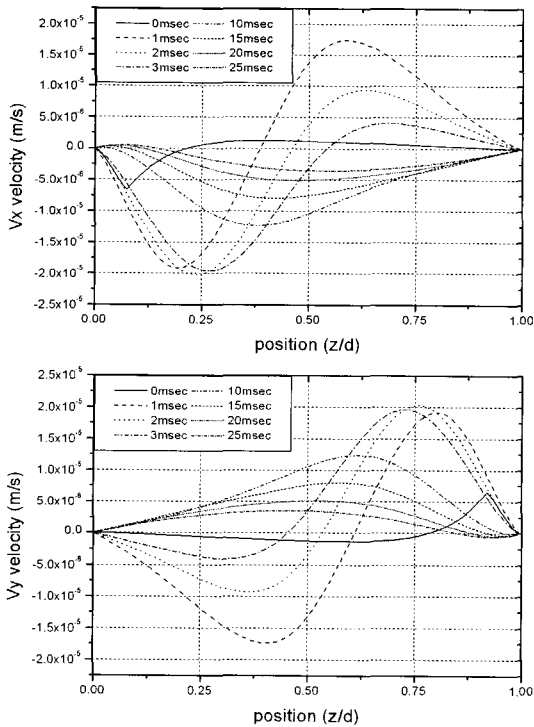


그림 1. Switching off 상태에서 시간에 따른 v_x, v_y 분포.

Fig. 1. Calculated transient velocity distribution in switching off state.

matrix 방법[10]을 사용하였다. 시뮬레이션에 필요한 각 파라미터값은 표 1과 같다.

위 표에서 OCB cell의 twist 각은 cell의 중간 ($d/2$)을 기준으로 아래쪽과 위쪽을 각각 0° 와 180° 로 twist 시켜 적용함으로써 tilt 각을 항상 양의 값을 갖도록 설정하였다. 이러한 모델링은 액정의 대칭성, 즉 $\vec{n} = -\vec{n}$ 조건에도 부합하는 것으로서 물리적 당위성을 확보 할 수 있다.

3. 시뮬레이션 결과 및 해석

3.1 TN cell의 결과 및 해석

시뮬레이션 결과 switching on 상태에서는 흐름 속도가 최대 수 $\mu\text{m/s}$ 로서, 분자배열 분포에 매우 작은 영향을 주게 된다. 응답 또한 그 영향력이 매우 작으며, 흐름효과를 고려하지 않을 때와의 차이가 거의 없는 결과를 보였다. 또한 흐름분포는 10msec 이후 saturation되었다. saturation 이후 인

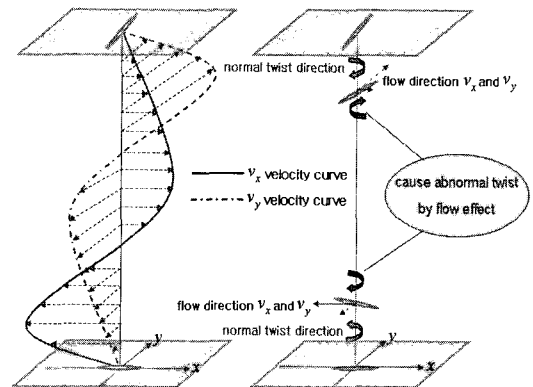


그림 2. Switching off 이후 1 msec 에서의 v_x, v_y 분포와 그에 따른 분자거동의 모식도.

Fig. 2. Schematic figure of flow and twist direction at 1 msec after switching off.

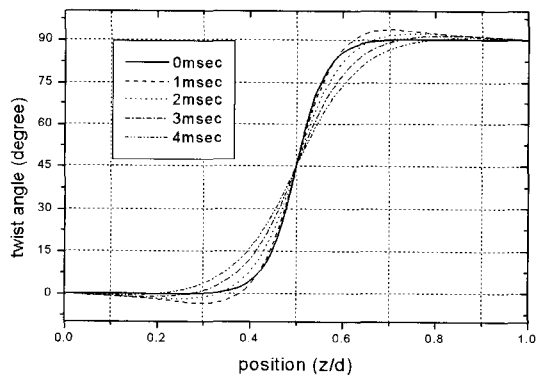


그림 3. Switching off 상태에서 시간에 따른 twist 분포.

Fig. 3. Calculated transient twist distribution in switching off state.

가된 전압을 제거하여, switching off 상태를 시뮬레이션 하였다. 그림 1은 switching off 상태에서 시간에 따라 cell내의 각 위치에서의 흐름속도 분포를 나타낸다. Off 상태가 되자마자 최대 속도가 수십 $\mu\text{m/s}$ 로 증가하였다가 시간이 지남에 따라 흐름은 점점 소멸되는 결과를 보였다.

이와 같은 흐름 분포는 switching off 상태에서 분자 배열 분포에 가시적인 영향을 주게 된다. 그림 2에서는 switching off 이후 1 msec 에서의 흐름으로 인한 분자거동의 모식도를 나타낸다. 그림 2와

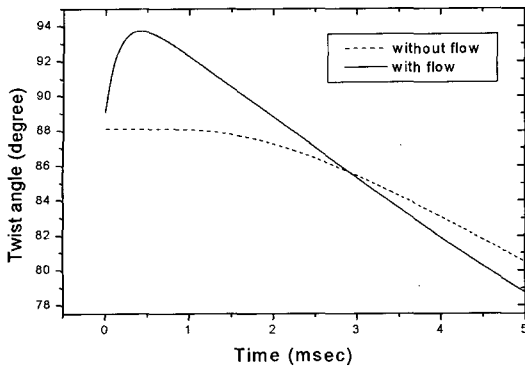


그림 4. 130번째 sublayer에서의 시간에 따른 twist 각.

Fig. 4. Calculated transient twist angle at 130th sublayer.

같은 작용에 의해 흐름이 급격히 증가하였다가 감소하는 0 ~ 4 msec 시간의 twist 각 분포는 그림 3와 같이 abnormal twist를 야기하는 결과를 나타내었다.

그림 3에서 abnormal twist 현상이 가장 크게 나타나는 위치를 찾아 시간에 따른 twist 각 변화를 시뮬레이션 함으로서 abnormal twist 현상을 보다 명확히 할 수 있었다. 그 위치는 $z/d=0.65$ 지점으로서, 200개의 sublayer로 나누어 시뮬레이션 했을 때 130번째 sublayer 이다.

그림 4는 130번째 sublayer에서의 시간에 따른 twist 각의 변화를 시뮬레이션 한 결과이다. 흐름을 고려했을 경우, 그렇지 않았을 때와 비교하였을 때 액정분자의 회전방향이 일시적으로 반대방향임을 알 수 있다.

이와 같은 abnormal twist 현상은 off 상태가 되자마자 일시적으로 발생하였다. 그림 5는 시간에 따른 광투과율을 시뮬레이션 한 결과이며, abnormal twist 현상이 optical bounce 현상의 직접적인 원인이 됨을 명확히 논증 할 수 있다.

3.2 OCB cell의 결과 및 해석

OCB cell에 적용하기 위해서 bend cell의 동작을 가정하고 그림 5와 같은 좌표설정을 하였다.

그림 6에서 알 수 있듯이 액정분자는 $x-z$ 평면 위에서 동작한다. 또한 twist는 앞서 설명했듯이 초기조건 뿐만 아니라 전압인가 후에도 0° 와 180° 값만 갖게 되므로 n_y 성분은 전체 영역에 대해서 0이 되고, 흐름 성분은 u_x 성분만 존재하게 된다.

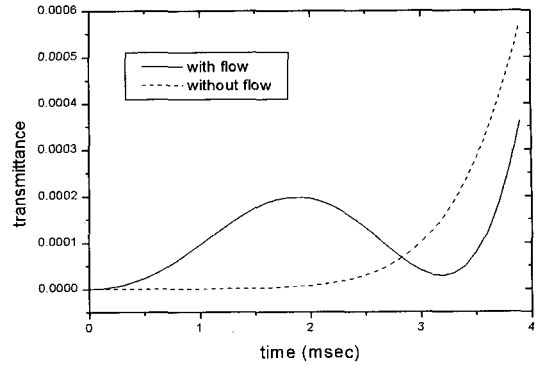


그림 5. Switching off 상태에서 시간에 따른 투과율 분포.

Fig. 5. Calculated transient transmittance distribution in switching off state.

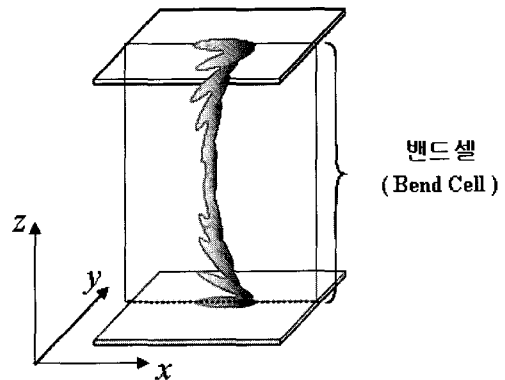


그림 6. 시뮬레이션을 위한 OCB cell의 좌표설정.

Fig. 6. Setting coordinate for simulation of OCB cell.

시뮬레이션 결과 TN cell과 마찬가지로 switching on 상태에서는 흐름을 고려하지 않을 때와 거의 차이가 없는 결과를 나타내었다. 또한 switching off 상태가 되자마자 흐름은 급격히 증가하였으나, 그 분포는 TN cell의 경우와 다른 형태의 결과를 보였다. 그림 7은 switching off 상태에서의 시간에 따른 분자배열 분포를 시뮬레이션 한 결과이다.

그림 8은 switching off 이후 3 msec 에서의 흐름 속도 분포를 시뮬레이션 한 결과이다. 시뮬레이션 결과 흐름분포는 모두 한쪽방향($-x$ 방향)으로 나타

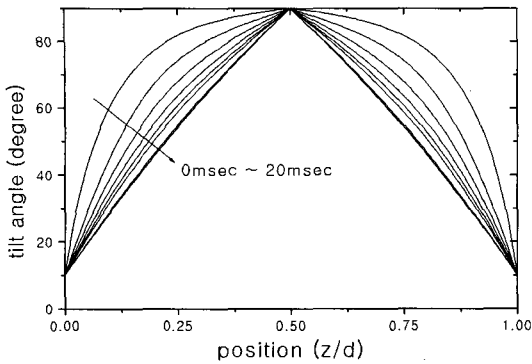


그림 7. Switching off 상태에서 시간에 따른 분자 배열분포.

Fig. 7. Calculated transient tilt distribution in switching off state.

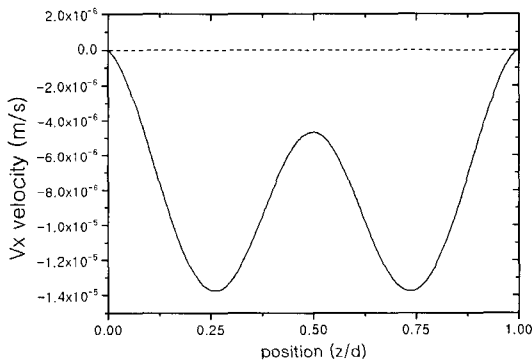


그림 8. Switching off 이후 3 msec 에서 v_x 분포.

Fig. 8. Calculated transient velocity distribution at 3 msec after switching off.

나며 위치(z/d)값이 0.25와 0.75 부근이 상대적으로 큰 결과를 나타내었다. 이는 그림 6에서 위치(z/d)값이 0.25와 0.75 부근이 상대적으로 빨리 움직이는 것과 연관지어 생각할 수 있다.

그림 9는 cell을 3부분 즉, 중간층을 중심으로 그 윗부분과 아랫부분으로 나누어 off 상태이후 3 msec에서의 흐름과 분자움직임의 메커니즘을 나타내었다.

OCB cell에서의 흐름은 off 상태이후 분자거동을 더욱 가속화 시킴으로써, 빠른 응답의 메커니즘을 시뮬레이션 결과 확인 할 수 있었다.

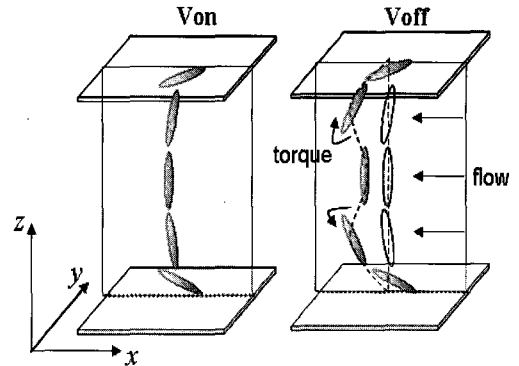


그림 9. Switching off 이후 3 msec 에서 v_x 분포와 분자거동의 모식도.

Fig. 9. Schematic figure of flow and tilt distribution at 3 msec after switching off.

4. 결론

본 연구에서는 액정에서의 흐름 효과를 해석하기 위해 연속체 이론으로부터 fluid balance 식과 director balance식을 동시에 고려하여 시뮬레이션 하였다. 시뮬레이션 결과, TN cell, OCB cell 모두 switching on 상태에서는 흐름효과를 고려하지 않을 때와 그 차이가 매우 적었으며, 흐름의 영향이 매우 미약하였다. 반면, switching off 상태가 되자, 일시적으로 흐름속도가 급격히 증가하게 되었다. 이것에 대한 영향은 TN cell의 경우, 일시적으로 abnormal twist 현상이 나타났으며 이것이 광투과율을 시뮬레이션 했을 때, optica bounce 현상의 직접적인 원인이 됨을 논증 할 수 있었다. OCB cell의 경우, 한쪽방향으로 나타나는 흐름은 off상태에서의 분자거동을 더욱 가속화하여, 빠른 응답을 나타내는 메커니즘을 설명 할 수 있었다.

기존에 개발된 시뮬레이터가 고려하지 않는 부분을 고려하여 시뮬레이션 함으로써, 여러 가지 특성을 파악할 수 있었으며, 앞에서 제시한 모델링 식을 명확히 논증할 수 있었다.

감사의 글

이 결과물은 정보통신부에서 지원하는 정보처리단말기용 영상신호 구동 및 입력 IC개발 과제로 수행되었습니다.

참고 문헌

- [1] M. Schadt and W. Helfrich, "Voltage dependence optical activity of a twisted nematic liquid crystal", *Appl. Phys. Lett.*, Vol. 18, No. 4, p. 127, 1971.
- [2] D. W. Berreman, "Dynamics of liquid crystal twist cells", *Appl. Phys. Lett.*, Vol. 25, No. 1, p. 12, 1974.
- [3] C. Z. van Doorn, "Dynamic behavior of twisted nematic liquid crystal layer in switched fields", *J. Appl. Phys.*, Vol. 46, No. 9, p. 3738, 1975.
- [4] D. W. Berreman, "Liquid crystal twist cell dynamics with backflow", *J. Appl. Phys.*, Vol. 46, No. 9, p. 3746, 1975.
- [5] J. Kelly, S. Jamal, and M. Cui, "Simulation of the dynamics of twisted nematic devices including flow", *J. Appl. Phys.*, Vol. 86, No. 8, p. 4091, 1999.
- [6] Y. Yamaguchi, T. Miyashita, and T. Uchida, "Wide viewing angle display mode for the active-matrix LCD using bend-alignment liquid crystal cell", *Proc. SID '93 Digest*, Seattle, USA, p. 277, 1993.
- [7] S. Onda, T. Miyashita, and T. Uchida, "Dynamic behavior of OCB-cell with fast response for a color sequential liquid crystal display", *Asia Display Proc. '98 IDRC*, Seoul, Korea, 1993.
- [8] S. Dickmann, J. Eschler, O. Cossalter, and D. A. Mlynski, "Simulation of LCDs including elastic anisotropy and inhomogeneous field", *Proc. SID '93 Digest*, Seattle, USA, p. 638, 1993.
- [9] P. G. de Gennes, "The Physics of Liquid Crystal", Clarendon, Oxford, U. K., 1974.
- [10] D. W. Berreman, "Optics in stratified and anisotropic media: 4×4 matrix formulation", *J. Opt. Soc. Am.*, Vol. 62, No. 4, p. 502, 1972.