

基于混合液晶分子动力学模拟比较液晶分子旋转黏度大小

王启东 彭增辉 刘永刚 姚丽双 任淦 宣丽

Rotational viscosity comparison of liquid crystals based on the molecular dynamics of mixtures

Wang Qi-Dong Peng Zeng-Hui Liu Yong-Gang Yao Li-Shuang Ren Gan Xuan Li

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 126102 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.126102

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.126102>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I12>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

一种自适应光学系统响应矩阵的直接计算方法

Direct computation of the interaction matrix of adaptive optical system

物理学报.2014, 63(14): 149501 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.149501>

自适应光学系统倾斜校正回路的最优闭环带宽

Optimal closed-loop bandwidth of tip-tilt correction loop in adaptive optics system

物理学报.2014, 63(6): 069502 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.069502>

大气湍流三维波前探测模式层析算法分析

Analysis of modal tomography for three-dimensional wavefront sensing of atmosphere turbulence

物理学报.2013, 62(16): 169501 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.169501>

快速响应的硅基纯相位液晶器件对动态大气湍流波前的校正能力研究

Dynamic wavefront correction with a fast liquid-crystal on silicon device of pure phase

物理学报.2012, 61(8): 089501 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.089501>

相位差波前检测方法应用于平移误差检测的实验研究

Experimental study on phase diversity wavefront sensing technology in piston error detection

物理学报.2012, 61(6): 069501 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.069501>

专题: 液晶光学及应用

基于混合液晶分子动力学模拟比较液晶分子旋转黏度大小*

王启东¹⁾²⁾ 彭增辉¹⁾ 刘永刚¹⁾ 姚丽双¹⁾ 任淦³⁾ 宣丽^{1)†}

1) (中国科学院长春光学精密机械与物理研究所, 应用光学国家重点实验室, 长春 130022)

2) (中国科学院大学, 北京 100039)

3) (中国科学院理论物理研究所, 理论物理国家重点实验室, 北京 100190)

(2015年1月19日收到; 2015年5月5日收到修改稿)

提高液晶波前校正器的响应速度是增加液晶自适应光学系统校正带宽的关键, 而研究设计低旋转黏度的液晶分子是提高液晶波前校正器响应速度的根本方法. 利用原子水平上的分子动力学方法获得了目标分子的液相、向列相以及近晶相, 给出了理论计算液晶分子序参数以及旋转黏度的方法. 与此同时, 结合实验方法, 提出利用混合液晶分子动力学模拟来比较液晶分子旋转黏度的大小, 通过多次模拟、多起始点数据处理最大限度消除了因边界尺寸效应带来的数据波动, 最后给出了两种高性能液晶分子的具体比较结果. 这种分子动力学模拟方法能够探查分子结构细微差别对液晶相态以及旋转黏度的影响, 为设计低旋转黏度的液晶分子提供了理论支持, 必将为快速响应液晶材料的设计提供帮助.

关键词: 液晶, 响应速度, 分子动力学模拟, 旋转黏度

PACS: 61.30.Cz, 95.75.Qr, 02.70.Ns, 51.20.+d

DOI: 10.7498/aps.64.126102

1 引言

液晶波前校正器是液晶自适应光学系统的关键器件之一, 它的响应速度往往能够决定整个液晶自适应光学系统的动态性能^[1-3]. 尽管人们提出了很多办法来提高液晶波前校正器的响应速度, 比如过压驱动法^[4]、最佳盒厚法等^[5,6], 但是通过改进液晶材料的性能来提高液晶波前校正器的响应速度是最根本的方法之一. 从液晶波前校正器响应时间的简单公式 $\tau_{\text{off}} = \gamma_1 d^2 / (\pi^2 K)$ ^[7] 可以看出, 想要提高液晶波前校正器的响应速度, 计算并设计出常温下具有低旋转黏度的液晶分子是一项重要的内容.

微观看来, 液晶分子通过自组装实现了有序排列, 分子结构的细微差别往往带来宏观相态

以及旋转黏度的巨大差异, 探究这种微观结构影响宏观状态的过程往往能够帮助研究人员设计出目标分子, 而液晶分子动力学模拟就能很好地做到这一点. 相应的点阵模型 (lattice based models)^[8]、粗粒度模型 (coarse-grained models)^[9] 以及原子级模型 (atomistic resolution models)^[10] 相继被提出. 尽管点阵模型以及粗粒度模型能够定性说明液晶的一些性质, 但是它们都很难用来探究分子结构细微差别对宏观性质的影响, 而显然, 原子级模型能够达到这一目的. Wilson 和 Allen^[11] 首次尝试利用全原子势模拟液晶分子 CCH5 (trans-4-cyclohexylcarbonitrile) 的性质, 随后 Cook 和 Wilson^[12] 实现了上千个 PCH5 (4-(trans-4-n-pentylcyclohexyl) benzonitrile) 液晶分子的全原子模拟, Berardi 等^[13] 利用全原子模拟

* 国家自然科学基金 (批准号: 61205021, 61475152, 61377032, 61378075, 61405194) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: lc_ciomp@163.com

验证了实验上的奇偶效应, Cheung 等^[14] 利用原子模拟计算了向列相液晶的挠曲电系数, 文献^[15, 16] 也都通过模拟呈现了液晶分子的各个相态. 然而, 他们都未能进一步给出向列相下液晶分子旋转黏度计算的方法. 文献^[17—19] 虽然较为细致的研究了液晶分子的旋转黏度, 也推导出了计算公式, 但他们都未能考虑液晶分子的相态, 而实际大多数液晶波前校正器都必须利用向列相液晶. 从实验来看, 对于高性能(高双折射率、低黏度)液晶分子来说, 常温附近它们都呈现出近晶相, 或者呈现不同的相态^[20—22], 这样我们就无法直接通过计算比较它们的旋转黏度, 即便是在同一温度(中温段或者高温段)下分别获得了它们的旋转黏度, 将它们放到常温下比较也是没有多大实际意义的. 针对以上问题, 本文提出了利用混合液晶分子动力学模拟来比较液晶分子旋转黏度大小的方法, 即将常温下为近晶相的高性能液晶分子以一定比例掺入到常温下为向列相的液晶分子中, 通过计算混合后的向列相液晶的旋转黏度来比较掺入的含近晶相液晶的旋转黏度大小.

2 模型与方法

2.1 势能模型

势能模型(力场)是分子力学的基石, AMBER 以及 GAFF^[23] (a general AMBER force field) 全原子力场能够很好地模拟蛋白质、核酸以及大部分有机分子的性质. 因此本文采用两者相结合的方式描述原子之间的相互作用:

$$\begin{aligned}
 V = & \sum_{\text{bond}} \frac{1}{2} K_l (l - l_0)^2 + \sum_{\text{angle}} \frac{1}{2} K_\theta (\theta - \theta_0)^2 \\
 & + \sum_{\text{dihedrals}} \frac{V_n}{2} [1 + \cos(n\phi - \gamma)] \\
 & + \sum_{i,j} \frac{1}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \frac{q_i q_j}{r_{ij}} \\
 & + \sum_{i,j} 4\epsilon_{ij} \left[\left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right], \quad (1)
 \end{aligned}$$

式中, l , θ 以及 ϕ 分别为键长、键角和二面角, 下标 0 代表它们在平衡位置的值; K_l , K_θ 以及 V_n 分别为键长伸缩、键角弯曲以及二面角扭转时的力常数; n 为多重度; γ 为相位角. (1) 式中的原子电荷 q 采用的是限制性拟合静电势电荷 (restrained electrostatic potential charge).

2.2 计算细节

对任何一种液晶分子的模拟, 不论是单体还是混合物, 都应将其分为两部分内容: 退火 (annealing) 寻找到合适的液晶相态和在指定相态下进行模拟计算. 因此, 本文首先是在气相密度下构建具有完美晶体结构的液晶盒子, 该盒子包含了 200 个单体液晶分子或者混合液晶分子; 接着, 我们利用 1000 bar (1 bar = 10^5 Pa) 的压强将其密度压缩到 1 g/cm^3 左右; 然后让其在 600 K 的高温下运行大概 10 ns, 当我们确信盒子内液晶分子已经处于完全混乱状态时, 我们就把它作为初始的盒子来进行退火. 在整个分子动力学模拟中, 静电作用的长程受力部分采用 PME (particle mesh Ewald) 方法计算, 短程范德华力采用截断 (cut-off) 处理, 其截断半径都设定为 1 nm, 温度以及压力都利用 Berendsen 控制, 为了克服边界效应的影响, 还采用了立方周期性边界条件, 模拟主要利用了 Gromacs 的并行版本^[24,25].

2.3 旋转黏度 γ_1 的计算

根据线性响应理论, 液晶分子的旋转黏度可以利用下面公式计算:

$$\gamma_1 = \lim_{t \rightarrow \infty} \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{2k_B T t}{V \langle |n(t) - n(0)|^2 \rangle}, \quad (2)$$

式中, k_B 为玻尔兹曼常数, T 为温度, V 为液晶盒体积, $\langle |n(t) - n(0)|^2 \rangle$ 为指向矢均方根位移. 当模拟时间足够长时, 指向矢均方根位移随时间会呈现出线性变化, 所以只要求出指向矢均方根位移随时间变化的斜率就可以得到旋转黏度 γ_1 .

为了求出 (2) 式中的指向矢均方根位移, 必须先求出在每一时刻下的指向矢, 因此我们首先计算了每一时刻下的序参数张量 Q :

$$Q_{\alpha\beta} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \frac{3}{2} a_{j\alpha} a_{j\beta} - \frac{1}{2} \delta_{\alpha\beta}, \quad (3)$$

式中, N 为液晶分子的数目; a_j 为分子 j 的长轴; 下标 α 以及 β 代表坐标轴 x , y 和 z ; 这里的分子长轴取的是液晶分子的转动惯量主轴. 序参数张量对角化之后最大本征值即为有序度 S , 而其对应的本征矢即为指向矢 n .

整个理论计算过程可以概括为: 利用 (1) 式描述的分子力学参数, 通过 Gromacs 软件进行分子动

力学模拟, 在这个过程中记录下每个原子位置随时间的变化; 接着利用(3)式求出每个时刻下200个液晶分子的指向矢及有序度, 从而可以求出指向矢均方根位移随时间的变化; 最终通过(2)式就能计算出液晶分子的旋转黏度.

3 结果与讨论

3.1 液晶分子的相态

图1是两种比较典型的液晶分子, 不同的颜色代表了不同的带电电荷, 它们的中心基团都为联苯, 极性基团为异硫氰酸酯基(—NCS), 侧链都为氢原子, 惟一不同是, 第一个分子DPP的柔性尾链

为饱和烷基链(—C₂H₅), 而第二个分子XPP的柔性尾链为烯基(—C₂H₃).

经过上述的模拟退火之后, 我们分别获得了这两种液晶分子的各项同性相(也即液相)、向列相和近晶相, 如图2所示. 从图2可以明显看出: 高温段时液晶分子混乱排列, 没有出现一致的取向; 当温度降低时, 液晶分子的长轴会大致沿一个方向排列, 这时液晶分子呈现一维有序, 即出现了向列相; 当温度接近常温时, 液晶分子出现了层结构, 每一层的分子长轴方向基本相互平行, 且此长轴的方向或垂直于层平面、或有一倾斜角, 这时便是液晶分子的近晶相.

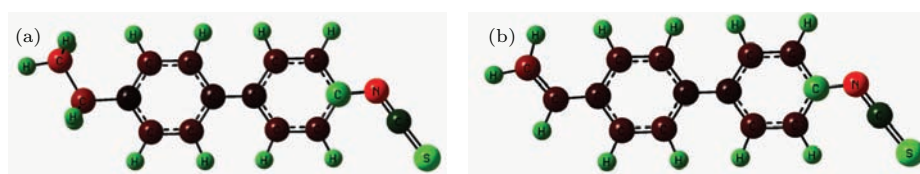


图1 液晶分子结构 (a) 液晶分子DPP; (b) 液晶分子XPP

Fig. 1. Optimized geometries of liquid crystals: (a) the molecular structure of DPP; (b) the molecular structure of XPP.

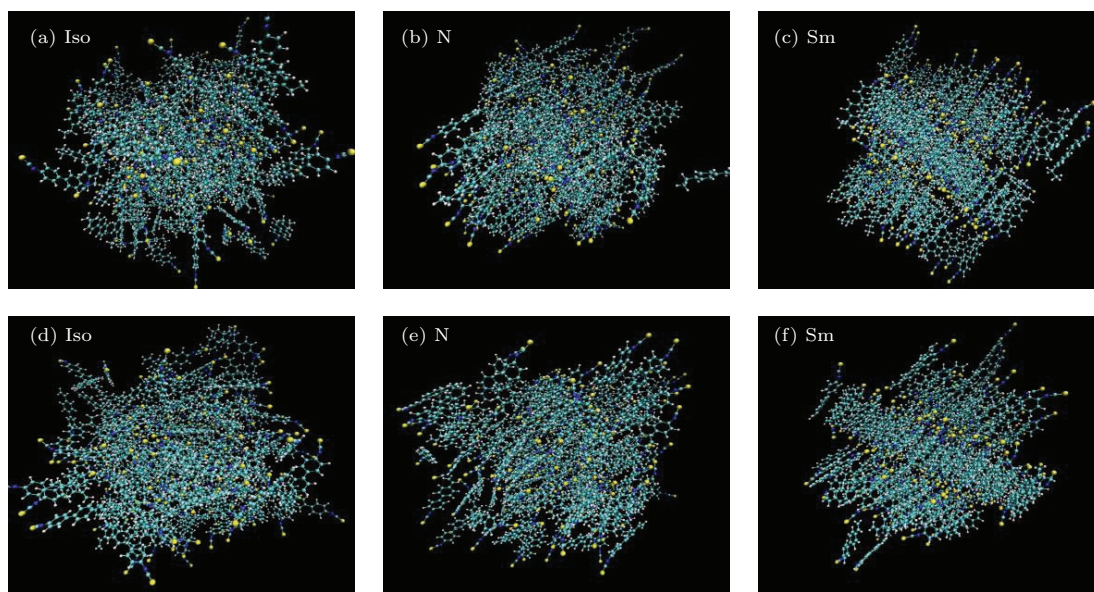


图2 液晶分子DPP以及XPP的各种相态 (a) DPP, 同性相; (b) DPP, 向列相; (c) DPP, 近晶相; (d) XPP, 同性相; (e) XPP, 向列相; (f) XPP, 近晶相

Fig. 2. The various states of DPP and XPP: (a) DPP, a liquid state; (b) DPP, a nematic state; (c) DPP, a smectic state; (d) XPP, a liquid state; (e) XPP, a nematic state; (f) XPP, a smectic state.

有序度是最能体现液晶性质的参数, 图3给出了两种液晶分子有序度随模拟时间(即温度)的变化. 从图3可以看出: 高温段液晶分子处于液相时有序度很小, 接近于零; 而当液晶处于向列相时, 有序度在0.4—0.8范围内变动, 温度越低, 有序度

越高; 近晶相时, 液晶分子的有序度就处于0.9左右, 接近于1. 特别需要指出的是, 尽管两种液晶分子在结构上差别不大, 但从模拟结果可以看出, 液晶分子XPP的向列相温度范围较宽, 而DPP分子的向列相温度范围特别窄, 本文模拟方法成功

地将这种微观细小差别对宏观性质的影响呈现出来, 为设计宽向列相温度范围的液晶分子提供了理论支持.

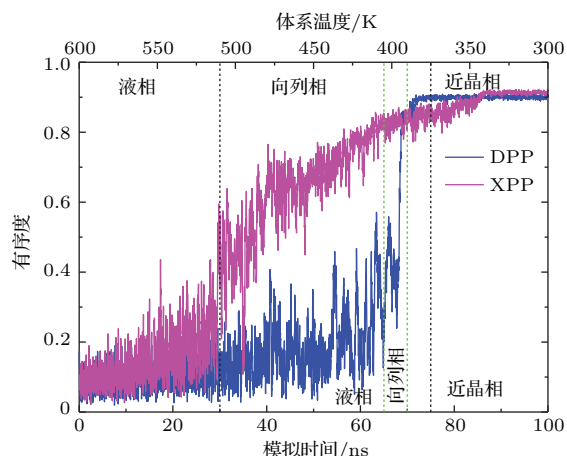


图3 液晶分子DPP以及XPP有序度随时间(温度)的变化, 两种液晶从左到右依次出现各向同性相、向列相以及近晶相

Fig. 3. Time (temperature) evolution of the instantaneous liquid crystal order parameters during the growth of a liquid state, a nematic state and a Sm state from the isotropic phase.

另外, 从图3可以更清晰地看到, 对于像DPP, XPP这样的液晶分子, 常温下它们都处于近晶相, 无法直接计算比较它们的旋转黏度, 因为液晶波

前校正器工作时要求所用的液晶材料必须为向列相. 即便是在两种液晶都处于向列相的中温段(约400 K)获得了它们的旋转黏度, 由于我们不知道旋转黏度随温度变化的确切关系, 所以也无法比较两者常温下的旋转黏度大小. 正是基于以上问题, 本文提出了利用混合液晶分子动力学模拟来比较液晶分子旋转黏度的方法.

3.2 混合液晶比较旋转黏度

为了与文献结论对比, 我们选择了两种实验室所用液晶分子2FP, 2FT进行计算. 如图4所示, 液晶分子2FP是三联苯结构, 而液晶分子2FT是苯-二苯乙炔结构, 极性端基都为异硫氰酸酯基, 末端都为烷基链, 侧链都为双氟取代, 图中颜色代表了原子电荷的大小. 我们将这两种液晶按质量分数20%(参照实验)的比例掺到常见商用液晶5CB(4-Cyano-4'-pentylbiphenyl, 见图4(c))中, 掺杂的分子数列于表1, 总分子数为200.

对这两种混合液晶进行10次模拟, 退火温度是从600 K降到了313 K, 图5显示了其中一次典型的结果, 图中5CB_2FP(5CB_2FT)代表的是5CB和2FP(2FT)的混合物, 5CB[2FP]或者5CB[2FT]

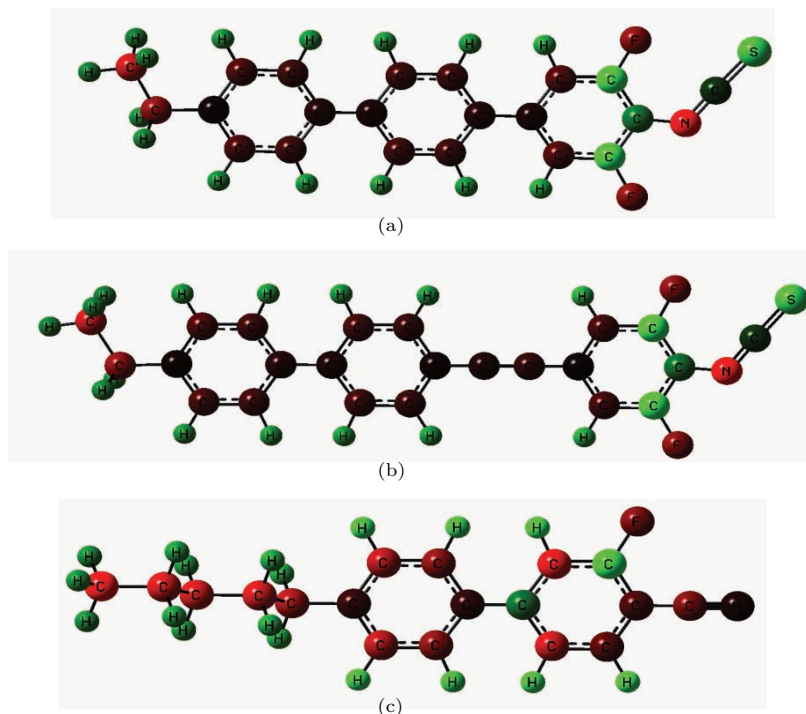


图4 液晶分子结构 (a) 液晶分子2FP; (b) 液晶分子2FT; (c) 液晶分子5CB

Fig. 4. Optimized geometries of liquid crystals: (a) the molecular structure of 2FP; (b) the molecular structure of 2FT; (c) the molecular structure of 5CB.

表1 混合液晶各项参数的计算结果

Table 1. The related calculation results of various parameters of liquid crystal mixtures.

液晶分子	分子数	指向矢均方根位移斜率/ 10^{-5}	旋转黏度/mPa·s	$\gamma_1, \eta/\text{mPa}\cdot\text{s}^{(a)}$
5CB[2FT]	172	9.39	1117.73	
5CB_2FT	200	7.51	1397.53	1467.48, 1.66 ^(a)
5CB[2FP]	170	9.40	1101.28	
5CB_2FP	200	8.75	1183.09	1203.54, 1.25 ^(a)

注: (a) 这里给出的动力学黏度 η ^[26,27] 分别是联苯以及二苯乙炔的数值, 旨在说明趋势, 逗号前的数值是推导得到的 2FP 或 2FT 旋转黏度的大小.

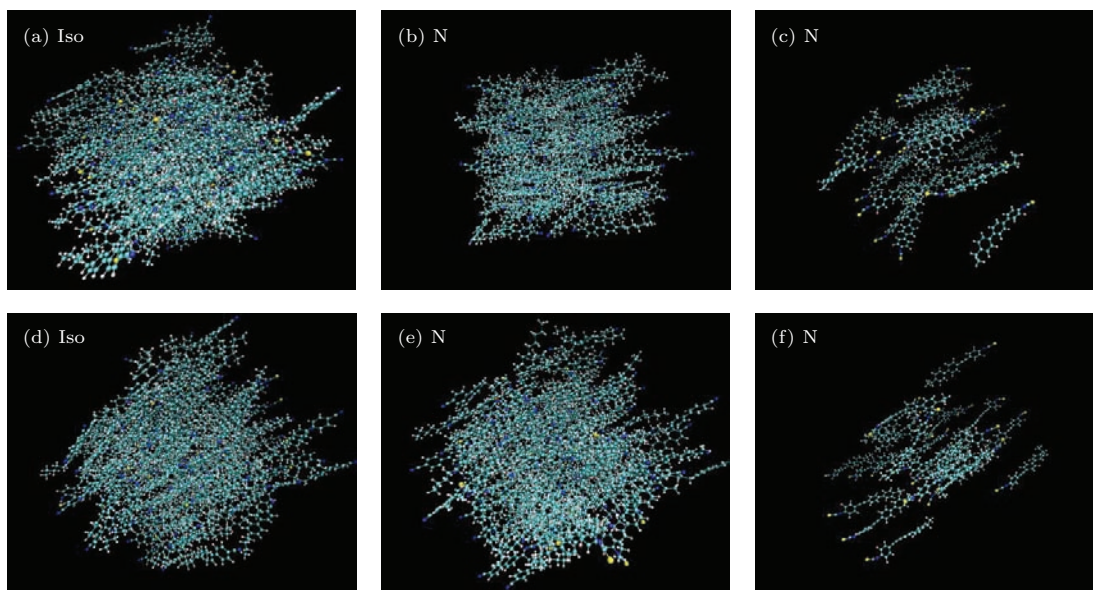


图5 混合液晶 5CB_2FP 以及 5CB_2FT 的向列相 (a) 混合液晶 5CB_2FP; (b) 5CB; (c) 2FP; (d) 混合液晶 5CB_2FT; (e) 5CB; (f) 2FT

Fig. 5. The nematic states of 5CB_2FP and 5CB_2FT: (a) liquid crystal mixtures 5CB_2FP; (b) 5CB; (c) 2FP; (d) liquid crystal mixtures 5CB_2FT; (e) 5CB; (f) 2FT.

代表的是 5CB 单体, 而不包括 2FP 或者 2FT. 从图 5 可以清楚看到, 无论是混合液晶还是 5CB 单体都未出现近晶相, 且两者实现了充分混合, 这就符合了本文计算对相态的要求. 图 6 给出了混合液晶 5CB_2FP 以及 5CB_2FT 有序度随时间(温度)的变化, 可以看出, 低温段混合液晶的有序度 S 约为 0.7, 且基本没有再发生变化, 这进一步验证了 313 K 时混合液晶处于最低能量状态-向列相的结论.

在每次退火之后, 继续在 313 K 下运行 100 ns 的平衡分子动力学并取值分析. 图 7 给出了某一次平衡过程液晶分子有序度随时间的变化, 图中分别显示的是混合液晶有序度以及 5CB 单体的有序度变化过程. 从图 7 可以看出, 液晶分子在平衡动力学模拟过程中有序度基本不会发生太大波动, 5CB_2FP 混合液晶的有序度维持在 0.75 左右,

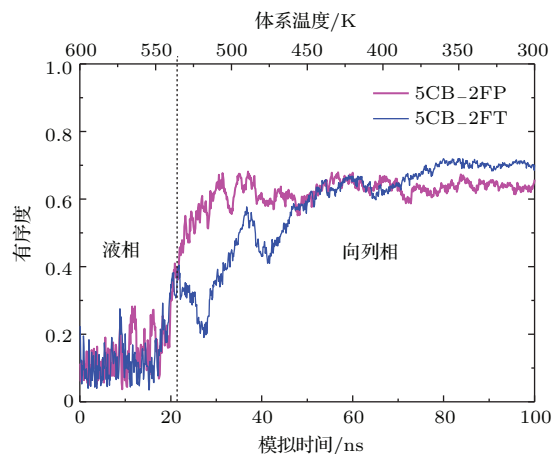


图6 混合液晶 5CB_2FP 以及 5CB_2FT 有序度随时间(温度)的变化, 两种混合液晶从左到右依次出现各向同性相和向列相

Fig. 6. Time (temperature) evolution of the instantaneous liquid crystal order parameters during the growth of a liquid state and a nematic state from the isotropic phase.

5CB_2FT 混合液晶的有序度维持在 0.8 左右, 且还可以看出, 2FP 以及 2FT 液晶分子的掺入并没有增加液晶分子 5CB 的有序度. 在计算液晶指向矢均方根位移时, 每次模拟我们都取了不同的起始时间(每隔 5 ns)、相同的时间间隔(20 ns)进行计算, 即多起始点计算方法, 然后 17 组数据进行平均得到此次模拟最终的指向矢均方根位移. 图 8 显示的是混合液晶以及 5CB 单体指向矢均方根位移随时间的变化, 左边两幅图分别是混合液晶以及 5CB 单体的 17 组数据图, 右边的图是平均之后的曲线. 从图 8 我们至少可以看出两点: 一是指向矢均方根位移随着时间的增加大致呈线性关系, 这符合前面理论公式的要求; 二是无论是 2FP 还是 2FT 液晶分子, 当它们掺入到液晶分子 5CB 中后都会使整个体系的指向矢均方根位移斜率降低, 根据前面 (2) 式分析来看, 这意味着 2FP 以及 2FT 单体掺入

到 5CB 中后使得整个体系的旋转黏度增加, 也可以说, 2FP 以及 2FT 单体的旋转黏度要大于液晶分子 5CB 的旋转黏度, 这符合我们模拟前的期望.

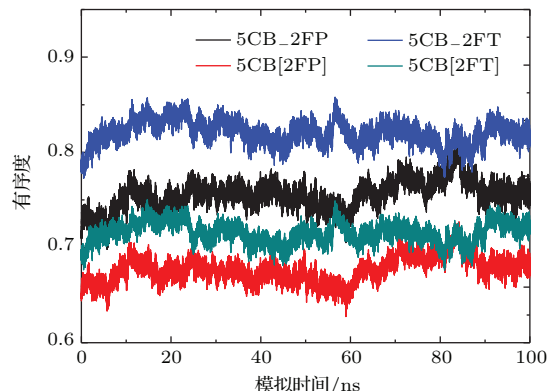


图 7 平衡状态下, 液晶分子有序度随时间的变化
Fig. 7. Time evolution of the instantaneous liquid crystal order parameter during the equilibrium molecular dynamics at $T = 313$ K.

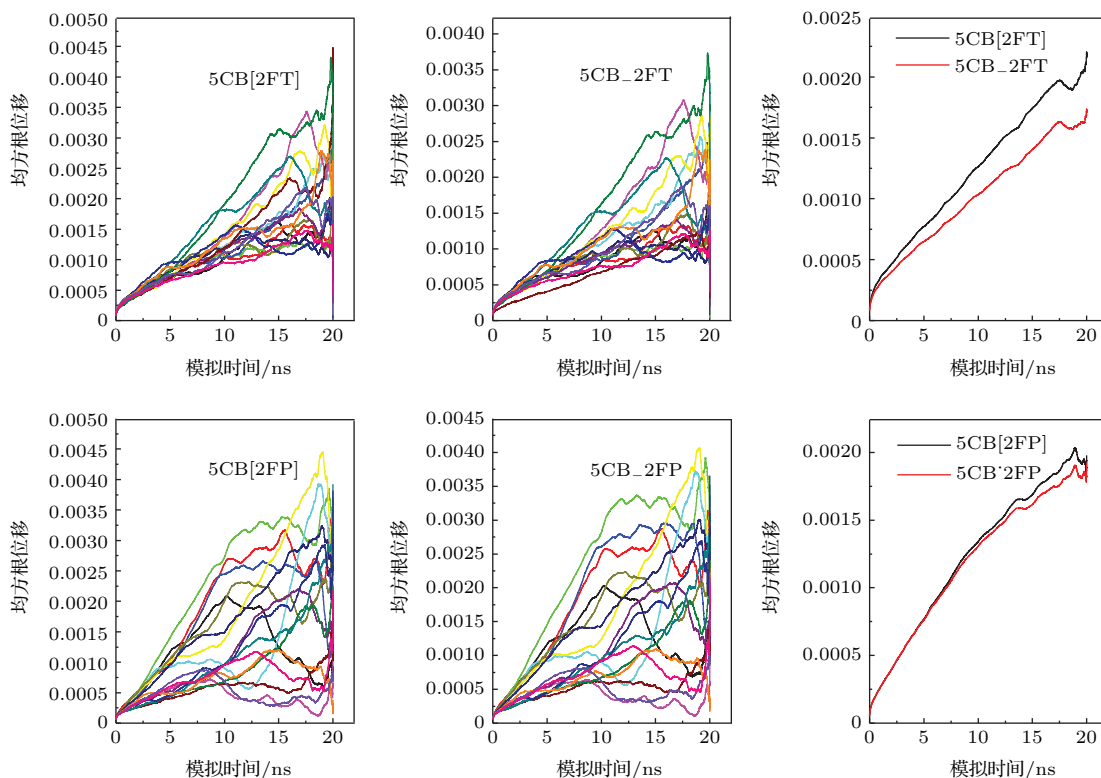


图 8 混合液晶指向矢均方根位移随时间的变化

Fig. 8. Time evolution of the director mean squared displacement of liquid crystals.

当我们将 5CB[2FT], 5CB_2FT, 5CB[2FP] 以及 5CB_2FP 的指向矢均方根位移曲线放到同一张图(图 9)中后发现, 尽管模拟采用的分子数不够多, 但是平均之后得到的 5CB 的指向矢均方根位移曲线基本重合, 这为进一步推导获得

2FT 以及 2FP 单体的旋转黏度奠定了基础. 直线拟合后, 这四种液晶的指向矢均方根位移斜率分别为 9.39×10^{-5} , 7.51×10^{-5} , 9.40×10^{-5} , 8.75×10^{-5} , 最终得到的旋转黏度分别为 1117.73, 1397.53, 1101.28, 1183.09 mPa·s. 利用简单的线

性叠加公式 $\gamma_1 x_1 + \gamma_2 x_2 = \gamma$ 计算, 2FT 和 2FP 液晶单体在 313 K 下的旋转黏度分别为 1467.48 和 1203.54 mPa·s (表 1). 文献 [26, 27] 中曾分析二苯乙炔结构的旋转黏度要大于联苯结构的旋转黏度, 这与本文计算得到的结论一致, 且利用上述方法得到的旋转黏度大小也与我们实验测得的黏弹系数的结果一致, 说明利用这种混合液晶分子动力学模拟比较旋转黏度大小的方法是切实可行的.

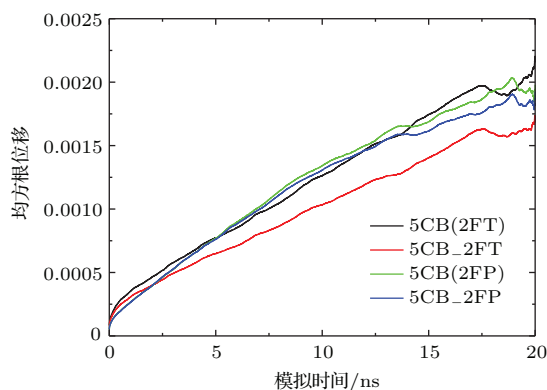


图 9 混合液晶指向矢均方根位移随时间的变化

Fig. 9. Time evolution of the director mean squared displacement of liquid crystals.

4 结 论

本文利用液晶分子 DPP 以及 XPP 详细阐述了液晶分子各种相态的模拟, 指出通过分子力学中的退火算法可以分别获得液晶分子的液相、向列相以及近晶相. 进一步明确了液晶分子序参数以及旋转黏度的计算, 指出了在实际比较液晶分子旋转黏度时存在着相态的问题, 针对以上问题首次提出了利用混合液晶分子动力学模拟方法来比较液晶分子旋转黏度的大小. 通过对液晶分子 2FP_5CB 以及 2FT_5CB 模拟分析, 最终计算出了 2FP 以及 2FT 液晶分子的旋转黏度, 与文献以及实验结果对比发现, 两种分子旋转黏度大小的趋势是一致的, 证明了上述方法的可行性, 为设计低旋转黏度的液晶分子提供了理论支持, 必将进一步促进液晶波前校正器响应速度的提高. 当然, 由于尺寸效应、力场参数限制等因素, 上述方法的可靠性可能还需要进一步验证, 加之实验测试液晶分子旋转黏度精确性等因素, 利用上述模拟方法精确定量化液晶分子旋转黏度需要更深入的工作.

参考文献

- [1] Kotova S P, Kvashnin M Y, Rakhmatulin M A, Zayakin O A, Guralnik I R, Klimov N A, Clark P, Love G D, Naumov A F, Saunter C D, Loktev M Y, Vdovin G V, Toporkova L V 2002 *Opt. Express* **10** 1258
- [2] Cao Z L, Mu Q Q, Hu L F, Liu Y G, Xuan L 2010 *Opt. Commun.* **283** 946
- [3] Zhang Z, You Z, Chu D 2014 *Light-Sci. Appl.* **3** 213
- [4] Hu H B, Hu L F, Peng Z H, Mu Q Q, Zhang X Y, Liu C, Xuan L 2012 *Opt. Lett.* **37** 3324
- [5] Wang Q D, Peng Z H, Fang Q Q, Li X P, Qi M J, Liu Y G, Yao L S, Cao Z L, Mu Q Q, Xuan L 2013 *Opt. Commun.* **305** 236
- [6] Peng Z H, Liu Y G, Yao L S, Cao Z L, Mu Q Q, Hu L F, Xuan L 2011 *Opt. Lett.* **36** 3608
- [7] Wu S T, Wu C S 1988 *Appl. Phys. Lett.* **53** 1794
- [8] Lebowitz P A, Lasher G 1971 *Phys. Rev. A* **6** 426
- [9] Yan F, Hixson C, Earl D 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 157801
- [10] Wilson M R 2007 *Chem. Soc. Rev.* **36** 1881
- [11] Wilson M R, Allen M P 1992 *Liq. Cryst.* **12** 157
- [12] Cook M J, Wilson M R 2001 *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **363** 181
- [13] Berardi R, Muccioli L, Zannoni C 2004 *Chem. Phys. Chem.* **5** 104
- [14] Cheung D L, Clark S J, Wilson M R 2004 *J. Chem. Phys.* **121** 9131
- [15] Lansac Y, Glaser M A, Clark N A, Lavrentovich O D 1999 *Nature* **398** 54
- [16] Cacelli I, De Gaetani L, Prampolini G, Tani A 2007 *J. Phys. Chem. B* **111** 2130
- [17] Zakharov A, Komolkin A, Maliniak A 1999 *Phys. Rev. E* **59** 6802
- [18] Ilk Capar M, Cebe E 2005 *Chem. Phys. Lett.* **407** 454
- [19] Zhang R, He J, Peng Z H, Xuan L 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 5560 (in Chinese) [张然, 何军, 彭增辉, 宣丽 2009 物理学报 **58** 5560]
- [20] Gauza S, Li J, Wu S T, Spadlo A, Dabrowski R, Tzeng Y N, Cheng K L 2005 *Liq. Cryst.* **32** 1077
- [21] Gauza S, Wen C H, Wu B, Wu S T, Spadlo A, Dabrowski R 2006 *Liq. Cryst.* **33** 705
- [22] Peng Z H, Yao L S, Mu Q Q, Zhao J L, Liu Y G, Li D Y, Yan D M 2013 *Chin. J. Liq. Cryst.* **28** 479 (in Chinese) [彭增辉, 姚丽双, 穆全全, 赵晶丽, 刘永刚, 李大禹, 闫冬梅 2013 液晶与显示 **28** 479]
- [23] Wang J, Wolf R M, Caldwell J W, Kollman P A, Case D A 2004 *J. Comput. Chem.* **25** 1157
- [24] Van Der Spoel D, Lindahl E, Hess B, Groenhof G, Mark A E, Berendsen H J C 2005 *J. Comput. Chem.* **26** 1701
- [25] Hess B, Kutzner C, van der Spoel D, Lindahl E 2008 *J. Chem. Theory Comput.* **4** 435
- [26] Matsushita T, Koseki S 2005 *J. Chem. Phys. B* **109** 13493
- [27] Zhang R 2009 *Ph. D. Dissertation* (Changchun: Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics, Chinese Academy of Sciences) (in Chinese) [张然 2009 博士学位论文 (长春: 中国科学院长春光学精密机械与物理研究所)]

SPECIAL ISSUE — Liquid crystal photonics and applications

Rotational viscosity comparison of liquid crystals based on the molecular dynamics of mixtures*

Wang Qi-Dong¹⁾²⁾ Peng Zeng-Hui¹⁾ Liu Yong-Gang¹⁾ Yao Li-Shuang¹⁾
Ren Gan³⁾ Xuan Li^{1)†}

1) (*State Key Laboratory of Applied Optics, Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics, Chinese Academy of Sciences, Changchun 130022, China*)

2) (*University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100039, China*)

3) (*State Key Laboratory of Theoretical Physics, Institute of Theoretical Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China*)

(Received 19 January 2015; revised manuscript received 5 May 2015)

Abstract

It is critical to improve the response speed of a liquid crystal wavefront corrector in order to increase the bandwidth of a liquid crystal adaptive optics system. The design of liquid crystal molecules with small rotational viscosity becomes a basic method of increasing the response speed of a liquid crystal wavefront corrector. Various phases of liquid crystal from molecular dynamics simulation are given in this paper, and the detailed computational methods of order parameter and rotational viscosity are also presented. Rotational viscosities of liquid crystals are compared based on the molecular dynamics of mixtures. The data fluctuation is reduced effectively through several simulations and the multiple analysis of original data. A detailed process of molecular dynamics of mixtures is given in this paper and the result is greatly satisfactory. We believe that one can perform a better molecular design using this process and obtain a better understanding of molecular interactions of LCs.

Keywords: liquid crystal, response speed, molecular dynamics simulation, rotational viscosity

PACS: 61.30.Cz, 95.75.Qr, 02.70.Ns, 51.20.+d

DOI: [10.7498/aps.64.126102](https://doi.org/10.7498/aps.64.126102)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 61205021, 61475152, 61377032, 61378075, 61405194).

† Corresponding author. E-mail: lc_ciomp@163.com