第37卷 第4期
1988年4月

物 理 学 报
ACTA PHYSICA SINICA

Vol. 37, No. 4
Apr., 1988

研究简报

向列型液晶分子理论中的短程关联

杨国琛　张志东
(河北工学院基础课部)

1987年1月16日收到

提　　要

本文提出了向列型液晶的格胞理论,为研究分子短程关联提供一个可计算的理论模型.对PAA作了数值计算. 理论值较其他理论有不同程度的改进. 讨论了分子关联对计算结果的影响以及格胞理论与其他理论的联系.

一、引　　言

沈平和 Wojtowicz[1], 吴家玮及其合作者[2-5]的一系列工作都注意到分子短程关联的重要性. 但前者只考虑短程取向关联, 后者在计算中忽略了短程取向关联. 而 Maier-Saupe 理论[6]及其改进[7]中,这种短程关联都没有考虑.

本文具体讨论短程关联. 先要有一个可计算的理论方案. 我们建立了向列型液晶的格胞理论,分别得到关于空间分布函数和取向分布函数的方程. 前者与通常液体理论有相同的形式. 讨论了具体的解,并对PAA作数值计算. 得到的理论值较其他理论有不同程度的改进.

我们对短程关联的影响作了详细的讨论. 如不考虑短程取向关联, 理论计算值大致与 Rajan 和吴家玮[3]的结果相同. 不考虑空间关联及其与取向关联的耦合, 理论值与文献[1]一致. 两者都不考虑,则得文献[6]的结果. 讨论了对热力学量理论值的影响.

二、向列型液晶的格胞理论

液体格胞理论的统计物理基础已为 Kirkwood[8] 及吴杭生和杨国琛[9]所证明. 今推广于向列型液晶. 设液晶由N个分子构成. 设想它分为N个格胞,每一格胞装一分子. 格胞的位形用分子质心$\boldsymbol{r}$和取向Ω表示. 记 $\boldsymbol{x}\equiv(\boldsymbol{r},\ \Omega)$. 只须将文献[9]中$\boldsymbol{r}$换成 $\boldsymbol{x}$, 就能平行地建立液晶的格胞理论. 推广是直接的,不再重复.

设仅有二体力, $v_{12}=v(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2)$. 按文献[9],只需考虑$(n)=(b)$的图形. 设分布函数为 $P(\boldsymbol{x})$, $P(\boldsymbol{x}_1,\ \boldsymbol{x}_2)$, 它们满足

$$\int^{\Delta} P(\boldsymbol{x})d\boldsymbol{x}=\int_{\Delta}\int_{(4\pi)} P(\boldsymbol{r},\ \Omega)d\boldsymbol{r}d\Omega=1, \tag{1}$$

$$\int^{\Delta} P(\boldsymbol{x}_1,\ \boldsymbol{x}_2)d\boldsymbol{x}_2 = P(\boldsymbol{x}_1). \tag{2}$$

上述归一条件和自符条件中，积分限 $\boldsymbol{r}$ 对整个格胞体积，Ω 对整个立体角．以后作同样理解．系统的自由能为

$$\boldsymbol{F} = \frac{N}{2}\int^{\Delta}\int^{\Delta}\{zv(\boldsymbol{x}_1,\ \boldsymbol{x}_2) + zkT\ln P(\boldsymbol{x}_1,\ \boldsymbol{x}_2) - (z - 1)kT\ln P(\boldsymbol{x}_1)P(\boldsymbol{x}_2)\}P(\boldsymbol{x}_1,\ \boldsymbol{x}_2)d\boldsymbol{x}_1 d\boldsymbol{x}_2, \tag{3}$$

其中 z 为配位数．(3)式在(1)，(2)式条件下求变分得

$$zv(\boldsymbol{x}_1,\ \boldsymbol{x}_2) + zkT\ln P(\boldsymbol{x}_1,\ \boldsymbol{x}_2) - (z - 1)kT\ln P(\boldsymbol{x}_1)P(\boldsymbol{x}_2) - \lambda = 0, \tag{4}$$

式中 λ 为变分参数．

按通常做法，设

$$v(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2) = v_0(r_{12}) + v_2(r_{12})p_2(\cos\theta_{12}), \tag{5}$$

$$P(\boldsymbol{x}_1,\ \boldsymbol{x}_2) = f(\boldsymbol{r}_1,\ \boldsymbol{r}_2)g(\Omega_1,\ \Omega_2), \tag{6}$$

$$P(\boldsymbol{x}) = f(\boldsymbol{r})g(\Omega), \tag{7}$$

其中空间分布函数 $f(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)$ 与 $f(\boldsymbol{r})$，取向分布函数 $g(\Omega_1,\ \Omega_2)$ 与 $g(\Omega)$，应满足相应的归一条件和自符条件．

(4)式考虑(5)—(7)式并用归一条件和自符条件可得

$$z[v_0(r_{12}) + \tau v_2(r_{12})] + zkT\ln f(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2) - (z - 1)kT\ln f(\boldsymbol{r}_1)f(\boldsymbol{r}_2) - \lambda_1 = 0, \tag{8}$$

$$z[\bar{v}_0 + \bar{v}_2 P_2(\cos\theta_{12})] + zkT\ln g(\Omega_1,\ \Omega_2) - (z - 1)kT\ln g(\Omega_1)g(\Omega_2) - \lambda_2 = 0, \tag{9}$$

其中

$$\tau = \int_{(4\pi)}\int_{(4\pi)} p_2(\cos\theta_{12})g(\Omega_1,\Omega_2)d\Omega_1 d\Omega_2, \tag{10}$$

$$\bar{v}_i = \int_{\Delta}\int_{\Delta} v_i(r_{12})f(\boldsymbol{r}_1,\ \boldsymbol{r}_2)d\boldsymbol{r}_1 d\boldsymbol{r}_2.\quad (i = 0,\ 2), \tag{11}$$

τ 称为短程取向序参数[1]．λ_1，λ_2 为与 $\boldsymbol{x}_1$，$\boldsymbol{x}_2$ 无关的常量．(8)和(9)式是关于分布函数的联立方程．其中空间分布函数满足的方程(8)与液体理论中相应方程[9]有相同形式，可用液体理论方法求解．(5)—(7)式代入(3)式得

$$\begin{aligned} F = \frac{1}{2}NE(\bar{v}_0 + \tau\bar{v}_2) + \frac{1}{2}NzkT\Big\{&\int_{\Delta}\int_{\Delta} f(\boldsymbol{r}_1,\ \boldsymbol{r}_2)\ln f(\boldsymbol{r}_1,\ \boldsymbol{r}_2)d\boldsymbol{r}_1 d\boldsymbol{r}_2 \\ &+ \int_{(4\pi)}\int_{(4\pi)} g(\Omega_1,\ \Omega_2)\ln g(\Omega_1,\ \Omega_2)d\Omega_1 d\Omega_2\Big\} \\ &+ N(1 - z)kT\Big\{\int_{\Delta} f(\boldsymbol{r}_1)\ln f(\boldsymbol{r}_1)d\boldsymbol{r}_1 \\ &+ \int_{(4\pi)} g(\Omega_1)\ln g(\Omega_1)d\Omega_1\Big\}. \end{aligned} \tag{12}$$

(8)，(9)，(12)式是格胞理论的基本方程，是以下几节讨论的基础．

三、方程的解与数值结果

现在解方程(8)和(9)．先研究(8)式．原则上可以考虑短程空间关联到任意级近

似[9]. 本文作最低级近似: 液体理论中 LJD 近似[10]. 按文献[8]设

$$f(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = f(\boldsymbol{r}_1)f(\boldsymbol{r}_2). \tag{13}$$

此时短程空间关联通过(8)式中 $v_0(r_{12})$, $v_2(r_{12})$ 体现. (13)式代入(8)式,解得

$$f(\boldsymbol{r}_1) = \frac{1}{Z_f}\exp\left\{-\frac{z}{kT}\left[\int_\Delta v_0(r_{12})f(\boldsymbol{r}_2)d\boldsymbol{r}_2 + \tau\int_\Delta v_2(r_{12})f(\boldsymbol{r}_2)d\boldsymbol{r}_2\right]\right\}, \tag{14}$$

$$Z_f = \int_\Delta \exp\left\{-\frac{z}{kT}\left[\int_\Delta v_0(r_{12})f(\boldsymbol{r}_2)d\boldsymbol{r}_2 + \tau\int_\Delta v_2(r_{12})f(\boldsymbol{r}_2)d\boldsymbol{r}_2\right]\right\} d\boldsymbol{r}_1. \tag{15}$$

为计算上述两式指数因子中积分,采用铺展平均 (smearing average) 近似[11]. 设

$$z\int_\Delta v_i(r_{12})f(\boldsymbol{r}_2)d\boldsymbol{r}_2 = \Sigma_l\int_\Delta v_i(r_{1l})f(\boldsymbol{r}_l)d\boldsymbol{r}_l \equiv \Phi_i(\boldsymbol{r}_1),$$

其中 $i = 0, 2$. l 求和对所有 1 分子的最近邻. 如按文献[3],设

$$v_0(r_{12}) = 4\varepsilon_0\left[\left(\frac{a_0}{r_{12}}\right)_l^{12} - \left(\frac{a_0}{r_{12}}\right)^6\right],$$

$$v_2(r_{12}) = -4\varepsilon_2\left(\frac{a_2}{r_{12}}\right)^6, \tag{16}$$

则,按文献[11]

$$\Phi_0(r) = 4z\varepsilon_0\left[\left(\frac{a_0}{R}\right)_l^{12}\left(\frac{r^2}{R^2}\right) - \left(\frac{a_0}{R}\right)^6 m\left(\frac{r^2}{R^2}\right)\right],$$

$$\Phi_2(r) = -4z\varepsilon_2\left(\frac{a_2}{R}\right)^6 m\left(\frac{r^2}{R^2}\right), \tag{17}$$

其中函数 $l(x)$, $m(x)$ 见文献[11]; R 为两相邻格胞中心距离. 于是空间分布函数确定.

再解方程(9)可得

$$g(\Omega_1, \Omega_2) = A\{g(\Omega_1)\}^{1-\frac{1}{z}}\{g(\Omega_2)\}^{1-\frac{1}{z}}$$

$$\times\exp\left\{-\frac{1}{kT}\bar{v}_2 p_2(\cos\theta_{12})\right\}, \tag{18}$$

$$g(\Omega_1) = A^z\left\{\int_{(4\pi)}[g(\Omega_2)]^{1-\frac{1}{z}}\exp\left[-\frac{1}{kT}\bar{v}_2 p_2(\cos\theta_{12})\right]d\Omega_2\right\}^z, \tag{19}$$

其中常量 A 可由(19)式用 $g(\Omega)$ 的归一条件确定. 而 $\bar{v}_i(i = 0, 2)$ 为

$$\bar{v}_i = \int_\Delta\int_\Delta v_i(r_{12})f(\boldsymbol{r}_1)f(\boldsymbol{r}_2)d\boldsymbol{r}_1 d\boldsymbol{r}_2$$

$$= \frac{1}{z}\int\phi_i(\boldsymbol{r})f(\boldsymbol{r})d\boldsymbol{r} = \frac{1}{z}\phi_i. \tag{20}$$

现在用文献[1]中的方法作近似. 设 $g(\Omega)$ 可表为

$$g(\Omega) \approx \exp\left\{-\frac{1}{kT}z\bar{v}_2\sum_{L=\text{偶}}\sigma_L P_L(\cos\theta)\right\}.$$

预期 $\sigma_2 \gg \sigma_L(L \geqslant 4)$. 作截断近似,只取 $L = 2$, 则

$$g(\Omega) = \frac{1}{Z_1}\exp\left\{-\frac{1}{kT}z\bar{v}_2\sigma_2 P_2(\cos\theta)\right\},$$

$$Z_1 = \int_{(4\pi)}\exp\left\{-\frac{1}{kT}z\bar{v}_2\sigma_2 P_2(\cos\theta)\right\}d\Omega. \tag{21}$$

(21)与(19)式应得同一 $P_2(\cos\theta)$ 平均值，σ_2 满足

$$S=\frac{1}{Z_1}\int_{(4\pi)}P_2(\cos\theta_1)\exp\left\{-\frac{1}{kT}z\bar{v}_2\sigma_2P_2(\cos\theta_1)\right\}d\Omega_1$$
$$=\frac{1}{Z_2}\int_{(4\pi)}P_2(\cos\theta_1)\left\{\int_{(4\pi)}\exp\left[-\frac{1}{kT}(z-1)\bar{v}_2\sigma_2P_2(\cos\theta_2)\right.\right.$$
$$\left.\left.-\frac{1}{kT}\bar{v}_2P_2(\cos\theta_{12})\right]d\Omega_2\right\}^z d\Omega_1, \tag{22}$$

其中 S 为长程取向序参数，而

$$Z_2=\int_{(4\pi)}\left\{\int_{(4\pi)}\exp\left[-\frac{1}{kT}(z-1)\bar{v}_2\sigma_2P_2(\cos\theta_2)\right.\right.$$
$$\left.\left.-\frac{1}{kT}\bar{v}_2P_2(\cos\theta_{12})\right]d\Omega_2\right\}^z d\Omega_1. \tag{23}$$

(21)式代入(18)式得

$$g(\Omega_1,\Omega_2)=A'\exp\left\{-\frac{1}{kT}(z-1)\bar{v}_2\sigma_2\left[P_2(\cos\theta_1)\right.\right.$$
$$\left.\left.+P_2(\cos\theta_2)\right]-\frac{1}{kT}\bar{v}_2P_2(\cos\theta_{12})\right\}, \tag{24}$$

A' 为归一因子．于是取向分布函数也确定．

由(19)，(21)，(23)式知

$$A=Z_1(Z_1Z_2)^{-\frac{1}{2}}. \tag{25}$$

把以上结果代入(12)式，得

$$F=-\frac{1}{2}NkT\ln Z_2+\frac{1}{2}NkT(z-1)\ln Z_1$$
$$-NkT\ln Z_f-\frac{1}{2}N\bar{\Phi}_0-N\tau\bar{\Phi}_2. \tag{26}$$

空间分布函数(14)，取向分布函数(21)，(24)式，序参数S(22)式，短程序参数τ(10)式，自由能(26)式以及等效势 $\phi_i(r)$ (17) 式等，构成了理论计算的基本方程．可对具体液晶物质的热力学量进行数值计算．如相变点的序参数 S_c，熵的变化 $\Delta S/N_k$，体积变化 $\Delta v/v$ 以及参量Γ．这些量的定义和表示式见文献[3]．

选液晶物质 PAA 为例．设 $z=6$．计算过程如下：先确定势的参数 ε_0，ε_2，a_0，a_2，这些参数的选择要保证相变点 $T_c=408$ K，$\rho_c=0.002667$ Å^{-3}．然后用自洽法计算相变点两相的短程序参数 $\tau_c^{(N)}$ 与 $\tau_c^{(I)}$ (上标N指向列相，I 指各向同性相)．方法如下：选择一对可能的 τ_c，记为 $[\tau_c^{(N)}]_{in}$ 和 $[\tau_c^{(I)}]_{in}$，作为输入．由(14)，(15)，(17)，(20)式计算 $\bar{\Phi}_2^{(N)}$ 和 $\bar{\Phi}_2^{(I)}$；进一步由(22)，(24)和(10)式计算出一对新的τ_c(输出)，记为 $[\tau_c^{(N)}]_{out}$ 和 $[\tau_c^{(I)}]_{out}$ (在 I 相，$S=0$，$\sigma_2=0$)．如输出和输入相同，则实现了自洽．如果不同，应重新选择一对可能的 τ_c 作输入．实现 τ_c 自洽后，用相应的 $\bar{\Phi}_2^{(N)}$，由(22)式求S．再由(26)式计算自由能 $F^{(N)}$ 和 $F^{(I)}$．在相变点二者应相等．如果不能实现 τ_c 的自洽或自洽后得到 $F^{(N)}$ 和 $F^{(I)}$不相等，则重新选定势参数，重复以上过程．以上过程可在计算机上完成．

用以上方法确定的势参数为

表1 $\rho = 0.002667$ Å^{-3} 时，不同 T 的 S 等值

T(K)	$\tau^{(N)}$	$\tau^{(I)}$	S	$\Delta F(Nk\mathrm{K})$
408	0.3397	0.1793	0.447	0.00
407	0.3790	0.1797	0.499	−0.242
406	0.3948	0.1801	0.519	−0.485
405	0.4083	0.1806	0.535	−0.749
404	0.4193	0.1811	0.547	−1.033

表2 $T = 408$K 时，不同 ρ 的 S 等值

ρ(Å^{-3})	$\tau^{(N)}$	$\tau^{(I)}$	S	$\Delta F(Nk\mathrm{K})$
0.002667	0.3397	0.1793	0.447	0.00
0.002670	0.3700	0.1795	0.488	−0.185
0.002673	0.3825	0.1798	0.504	−0.373
0.002676	0.3908	0.1801	0.514	−0.583
0.002679	0.3994	0.1804	0.524	−0.783

表3 各热力学量的实验值和理论值

量	实验值[12]	本文结果	M-S 理论值[6]	吴家玮等人[3]	沈平等人[1]	GVDW 理论值[12]
S_c	0.36	0.447	0.429	0.495	0.382	0.476
$\Delta S/Nk$	0.17	0.25	0.417	0.52	0.282	0.599
$\Delta v/v$	0.0035	0.00497	-----	0.00714	-----	0.012
Γ	4.0	1.63	1	1.45	-----	3.53

$$\varepsilon_0 = 127.000\,k\mathrm{K},\quad \varepsilon_2 = 404.797k\,\mathrm{K},\quad a_0 = a_2 = 5.0.$$

求得相变点短程序参数和长程序参数为

$$\tau_c^{(N)} = 0.3397,\quad \tau_c^{(I)} = 0.1793,\quad S_c = 0.447.$$

为计算 $\Delta S/Nk$，$\Delta v/v$ 和 Γ，用上述势参数，通过自洽过程计算了 ρ 一定下不同 T 的 $\tau^{(N)}$, $\tau^{(I)}$, S 及 $\Delta F = F^{(N)} - F^{(I)}$ 值．结果见表 1． 并计算了 T 一定下不同 ρ 的上述各量．结果见表 2．

计算得到的理论结果见表 3．表 3 中还列出了实验值和其他理论结果．

由表 3 可以看出，与文献[3]相比有明显的改善． 而文献[1]和[6]的 S_c 较好另有原因，下节将讨论．文献[12]的 Γ 较好是由于点作用势为基础的理论中没有考虑分子形状．但总的说来，结果有明显的改善．

四、短程关联的影响

本节讨论短程关联对理论结果的影响．目的是考察格胞理论与其他理论的联系以及具体讨论影响的大小．大致可以从两方面研究： 取向关联；空间关联及其与取向关联的耦合．

如不考虑短程取向关联，则由上节可知

$$g(\Omega_1,\ \Omega_2) = g(\Omega_1)g(\Omega_2), \tag{27}$$

表 4　PAA 相变点的热力学量

	S_c	$\Delta S/Nk$	$\Delta v/v$	Γ
实验值[12]	0.36	0.17	0.0035	4.0
本文结果	0.491	0.66	0.0092	0.97
文献[3]结果	0.495	0.52	0.00714	1.45

表 5　$z=6$

	$kT_c/z\bar{v}_2$	S_c	$\tau_c^{(N)}$	$\tau_c^{(I)}$	$\Delta S/Nk$
本文结果	0.1935	0.379	0.296	0.188	0.279
文献[1]结果	0.1933	0.382	0.298	0.189	0.282

$$\tau = S^2, \tag{28}$$

$$g(\Omega) = \frac{1}{Z_g}\exp\left[-\frac{1}{kT}\ z\bar{v}_2 S P_2(\cos\theta)\right], \tag{29}$$

$$Z_g = \int_{(4\pi)} \exp\left[-\frac{1}{kT}\ z\bar{v}_2 S P_2(\cos\theta)\right]\ d\Omega. \tag{30}$$

空间分布函数为(14),(15)式(其中 $\tau = S^2$). 自由能为

$$F = -\ \frac{1}{2}N\psi_0 - \frac{3}{2}\ N\psi_2 S^2 - NkT\ln Z_f - NkT\ln Z_g. \tag{31}$$

对 PAA 进行计算. 为保证相变点 T_c, ρ_c 为实验值,可取势的参数为 $\varepsilon_0 = 935.2k$K, $\varepsilon_2 = 852.0\ k$K, $a_0 = a_2 = 4.2$. 配位数 $z = 6$. 通过自洽计算所得结果见表 4. 表 4 中还列出实验值和文献[3]的结果. 由表 4 可以看出,理论结果大致与文献[3]相同. 说明在忽略短程取向关联的条件下,格胞理论可以得到 Rajan 和吴家玮[3]的结果.

如不考虑短程空间关联及其与取向关联的耦合,则 $f(\boldsymbol{r})$ 与 τ 无关, $z\bar{v}_2$ 与 τ 无关. 取向分布函数由(21)—(24)式确定. 此时自由能

$$F = -\ \frac{1}{2}\ NkT\ln Z_2 + \frac{1}{2}\ NkT(z-1)\ln Z_1 + 常量, \tag{32}$$

式中常量与 τ 及 S 无关.

理论结果见表 5. 由表 5 可看出,结果与文献[1]一致. 可见在忽略短程空间关联及其与取向关联耦合的条件下,格胞理论与沈平等人[1]的理论一致.

最后,如两者都不考虑,则易知能得 Maier-Saupe[6] 的结果.

因此可由第三节的表 3 讨论短程关联的影响. 就 S_c 说,不考虑短程取向关联将使它变大,幅度约为实验值的 12%; 不考虑空间关联及其与取向关联耦合会使它变小,幅度约为实验值的 18%. Maier-Saupe 理论[6]预言 S_c 的成功,是由于两种效应大部相消.这是文献[1]和[6]所得 S_c 值较好的真实原因. 这样做并不妥当,曾受到批评[2,13].短程关联对 $\Delta S/Nk$ 的影响也有类似倾向,但较充分考虑后,结果明显改善. $\Delta v/v$ 与 Γ 也有改善.

五、讨　论

以上各节说明了格胞理论是成功的. 能得到比较合理的结果. 它与其他理论联系的

讨论从另一角度作了肯定．可以作为分析短程关联的基础．

短程取向关联的重要性还可以用 $(\tau - S^2)$ 这个量来衡量．PAA 在相变点

$$\tau_c^{(N)} - S_c^2 = 0.14, \quad \tau_c^{(I)} - 0 = 0.18,$$

其值约为 S_c^2 本身大小．可见是重要的．

空间关联及其与取向关联耦合的重要性还可以从相变点 $f^{(N)}(0)/f^{(I)}(0)$ 来衡量．$f(0)$表示格胞中心的分布函数值．对 PAA，

$$\frac{f^{(N)}(0)}{f^{(I)}(0)} = \frac{Z_f^{(I)}}{Z_f^{(N)}} \exp\left\{-\frac{1}{kT_c}[\tau_c^{(N)} - \tau_c^{(I)}]\Phi_2(0)\right\}$$
$$\approx 0.68,$$

可见是重要的．

一个认真的微观理论应当较全面考虑分子短程关联．

参 考 文 献

[1] P. Sheng and P. J. Wojtowicz, Phys. Rev., **A14** (1976), 1883.
[2] Y. M. Shih, H. M. Hung and C. -W. Woo, *Mol. Cryst. Liq. Cryst. (Letters)*, **34**(1976), **7**.
[3] V. T. Rajan and C. -W. Woo, *Phys. Rev.*, **A17**(1978), 382.
[4] L. Feijoo, V. T. Rajan and C. -W. Woo, *Phys. Rev.*, **A19**(1979), 1266.
[5] J. Shen, L. Lin, L. Yu and C. -W. Woo, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, **70**(1981), 301.
[6] W. Maier and A. Saupe, *Z. Naturforsch.*, **A14**(1959), 882.
[7] R. L. Humphries, P. G. James and G. R. Luckhurst, *J. Chem. Soc. Faraday Trans. II*, **68** (1972), **1031**.
[8] J. G. Kirkwood, *J. Chem. Phys.*, **18**(1950), 380.
[9] 吴杭生、杨国琛，物理学报，**16**(1960)，143.
[10] J. E. Lennard-Jones and A. F. Devonshire, *Proc.Roy. Soc.*, **A163** (1937), 53.
[11] T. L. Hill, Statistical Mechannics, McGray-Hill, (1956).
[12] M. A. Cotter, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, **97**(1983), 29.
[13] M. Nakagawa and T. Akahane, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, **90**(1982), 53.

SHORT-RANGE CORRELATIONS IN MOLECULAR THEORIES OF NEMATIC LIQUID CRYSTALS

YANG GUO-CHEN ZHANG ZHI-DONG

(Department Of Basic Science, Hebei Institute Of Technology, Tianjin)

ABSTRACT

A cell theory of nematic liquid crystals is presented, which provides a calculable theoretical model for investigation of molecular short-range correlations. Numerical calculations are made for PAA. The theoretical values are improved in compared with the other theories'. The effects of molecular correlations on calculated results and relations between the cell theory and the other theories are discussed.