

# 空间各向异性两体势向列相液晶形变研究\*

张志东 张艳君

(河北工业大学理学院, 天津 300130)

(2003 年 10 月 27 日收到 2004 年 1 月 9 日收到修改稿)

基于分子两体势研究向列相液晶的形变. 该两体势是空间各向异性的并且依赖于液晶的弹性常数. 理论处理中假定具有理想向列序, 这意味着分子长轴取向方向与液晶指向矢是重合的, 而总自由能等于总相互作用能. 以解析形式研究了三种基本的 Fréedericksz 转变并对混合排列向列相液晶盒中的指向矢分布进行了数值计算. 检查了文献中最近提出的两种从弹性能到两体作用势的映射方案, 发现只有一种方案给出的结果与连续体理论一致.

关键词: 空间各向异性两体势, 理想向列序, 液晶形变, Fréedericksz 转变

PACC: 6130, 3420, 6470M

## 1. 引言

Maier 和 Saupe<sup>[1,2]</sup>通过分子间色散作用力, 首先建立了向列相液晶的分子场理论. Lebowl 和 Lasher<sup>[3]</sup>将分子质心固定在简单立方晶格的格点上, 假定邻近分子间存在色散作用, 实现了液晶向列相的 Monte-Carlo 模拟. 随后人们发现液晶向列相的分子两体作用势可以通过唯象方法来建立, 它只需要考虑液晶分子的对称性以及向列相的对称性, 不涉及分子间相互作用的量子力学本质<sup>[4,5]</sup>. 由于液晶分子通常是有机大分子, 它们的相互作用十分复杂, 这种唯象处理至少在目前的研究阶段是合理的.

最近, Gruhn 和 Hess<sup>[6]</sup>基于向列相的宏观弹性自由能密度公式, 提出了一种两体作用势形式. 这一两体作用势有两个特点, 一是它不仅依赖于两分子长轴取向, 而且依赖于连接两分子质心连线的单位矢量, 即是空间各向异性的; 二是两体作用的势参数直接依赖于液晶的宏观弹性常数  $K_1$ ,  $K_2$  和  $K_3$ . 随后人们对这种两体势进行了 Monte-Carlo 模拟<sup>[7,8]</sup>, 证明它的确可以描写均匀向列相. 本文从另外的角度研究该两体作用势, 即在理想有序的条件下, 研究液晶的形变性质, 从而揭示出它的内禀特性. 在理想有序条件下, 分子取向始终沿着液晶指向矢(分子优先取向方向的单位矢量)<sup>[9,10]</sup>.

## 2. 基本方程

### 2.1. 两体作用势

按照文献[6], 分子质心固定在简单立方晶格的格点上, 近邻分子间存在如下两体作用:

$$\Phi_{ik} = \epsilon \left\{ \lambda [P_2(a_i) + P_2(a_k)] + \mu \left( a_i a_k b_{ik} - \frac{1}{9} \right) + v P_2(b_{ik}) + \rho [P_2(a_i) + P_2(a_k)] \times P_2(b_{ik}) \right\}, \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{r} &= \mathbf{p}_i - \mathbf{p}_k, \\ s &= \mathbf{r} / |\mathbf{r}|, \\ a_i &= \mathbf{u}_i \cdot \mathbf{s}, \\ a_k &= \mathbf{u}_k \cdot \mathbf{s}, \\ b_{ik} &= \mathbf{u}_i \cdot \mathbf{u}_k. \end{aligned} \quad (2)$$

这里  $\mathbf{p}_i$  和  $\mathbf{p}_k$  分别为液晶分子  $i$  和  $k$  的质心位矢,  $\mathbf{u}_i$  和  $\mathbf{u}_k$  分别为沿两分子长轴的单位矢量.

目前存在两种从弹性能到两体势的映射方案<sup>[7,8]</sup>. 文献[7]给出一个方案(模型一)(1)式中的势参数通过下式与弹性常数相联系:

$$\lambda = \frac{1}{3} \Lambda (2K_1 - 3K_2 + K_3), \quad (3a)$$

$$\mu = 3\Lambda (K_2 - K_1), \quad (3b)$$

$$\nu = \frac{1}{3} \Lambda (K_1 - 3K_2 - K_3), \quad (3c)$$

\* 河北省自然科学基金(批准号:103002)资助的课题.

$$\rho = \frac{1}{3}\Lambda(K_1 - K_3), \quad (3d)$$

式中因子  $\Lambda$  的作用是可以取  $\nu = -1$ . 当三个弹性常数相等时,  $\lambda = \mu = \rho = 0$  (1) 式退化为 Lebwohl-Lasher 模型. 文献 [8] 给出另一个方案(模型二), 它给出

$$\lambda = \frac{2}{3}\Lambda(K_1 - K_2), \quad (4a)$$

$$\mu = 3\Lambda(-K_1 + 2K_2 - K_3), \quad (4b)$$

$$\nu = -\frac{2}{3}\Lambda K_2, \quad (4c)$$

$$\rho = 0. \quad (4d)$$

## 2.2. 液晶分子层

假定有  $n$  层液晶分子, 分子层平行于  $XY$  平面. 分子排列在  $XY$  平面上是均匀的, 但沿  $Z$  轴方向(层法线方向)变化. 以上假定与通常的液晶盒条件相符合, 即盒厚上的线度远远小于盒面上的线度. 进一步假定分子取向在  $XZ$  平面内变化, 极角为  $\theta$ , 即有

$$\mathbf{u}_i = (\sin\theta_i, 0, \cos\theta_i). \quad (5)$$

为方便起见, 我们用角标  $j$  表示分子所在的分子层,  $j = 1, 2, \dots, m$ . 当  $i$  分子在第  $j$  分子层时,  $i$  分子和它的同层邻近分子均具有取向  $\theta_j$ , 而它下一层和上一层的邻近分子分别具有取向  $\theta_{j-1}$  和  $\theta_{j+1}$ . 对  $i$  分子的 4 个同层邻近分子, 有

$$\begin{aligned} s_{i1} &= (-1, 0, 0), \\ s_{i2} &= (1, 0, 0), \\ s_{i3} &= (0, -1, 0), \\ s_{i4} &= (0, 1, 0). \end{aligned} \quad (6a)$$

对两个邻层邻近分子, 有

$$\begin{aligned} s_{i5} &= (0, 0, -1), \\ s_{i6} &= (0, 0, 1). \end{aligned} \quad (6b)$$

将 (5) 和 (6) 式代入 (1) 和 (2) 式, 得到  $j$  分子层上一个分子与邻近分子的相互作用

$$\begin{aligned} \Phi(j) &= \sum_{k=1}^6 \Phi_k \\ &= 2\varepsilon \left\{ (\lambda + \rho) [3\sin^2\theta_j - 1] + \mu \left( \sin^2\theta_j - \frac{1}{9} \right) \right. \\ &\quad \left. + \nu \right\} + 2\varepsilon \left( -\frac{1}{9}\mu + \nu - \lambda - \rho \right) + \varepsilon(1 - \delta_{j1}) \\ &\quad \times \left\{ \left[ \lambda + \frac{3}{2}\rho \cos^2(\theta_j - \theta_{j+1}) - \frac{1}{2}\rho \right] \right. \\ &\quad \times \left[ \frac{3}{2}(\cos^2\theta_j + \cos^2\theta_{j+1}) - 1 \right] \\ &\quad \left. + \mu \left[ \cos\theta_j \cos\theta_{j+1} \cos(\theta_j - \theta_{j+1}) - \frac{1}{9} \right] \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &\quad \left. + \nu \left[ \frac{3}{2}\cos^2(\theta_j - \theta_{j+1}) - \frac{1}{2} \right] \right\} + \varepsilon(1 - \delta_{j1}) \\ &\quad \times \left\{ \left[ \lambda + \frac{3}{2}\rho \cos^2(\theta_j - \theta_{j-1}) - \frac{1}{2}\rho \right] \right. \\ &\quad \times \left[ \frac{3}{2}(\cos^2\theta_j + \cos^2\theta_{j-1}) - 1 \right] \\ &\quad \left. + \mu \left[ \cos\theta_j \cos\theta_{j-1} \cos(\theta_j - \theta_{j-1}) - \frac{1}{9} \right] \right. \\ &\quad \left. + \nu \left[ \frac{3}{2}\cos^2(\theta_j - \theta_{j-1}) - \frac{1}{2} \right] \right\}. \quad (7) \end{aligned}$$

在 (7) 式中, 出现了两个因子  $(1 - \delta_{j1})$  和  $(1 - \delta_{jm})$ , 是因为对于第 1 层上的分子, 它没有下一层上的邻近液晶分子, 而对第  $n$  层上的分子, 它没有上一层上的邻近液晶分子.

## 2.3. 界面作用和磁场作用

$n$  层分子构成的液晶薄层, 可以具有自由表面, 也可以受到基板作用. 若存在弱锚泊作用, 可以假定基板与表面层上的分子  $i$  具有作用能<sup>[11]</sup>

$$g_s(\mathbf{u}_i, \boldsymbol{\pi}) = -\eta_w(\mathbf{u}_i \cdot \boldsymbol{\pi})^2, \quad (8)$$

式中  $\eta_w$  为大于零常数,  $\boldsymbol{\pi}$  为基板易取向方向. 若下基板和上基板处易取向方向的极角分别为  $\theta_0$  和  $\theta'_0$ , 即

$$\boldsymbol{\pi} = (\sin\theta_0, 0, \cos\theta_0), \quad (9a)$$

$$\boldsymbol{\pi}' = (\sin\theta'_0, 0, \cos\theta'_0), \quad (9b)$$

则 (8) 式给出

$$g_{s1} = -\eta_w \cos^2(\theta_1 - \theta_0), \quad (10a)$$

$$g_{sn} = -\eta_w \cos^2(\theta_n - \theta'_0). \quad (10b)$$

若存在磁场作用, 在磁场作用下液晶单轴分子受到的取向作用势为<sup>[12]</sup>

$$f_m = -\frac{1}{2}\eta_a(\mathbf{H} \cdot \mathbf{u}_i)^2, \quad (11)$$

式中  $\eta_a = \eta_{\parallel} - \eta_{\perp}$  为分子磁化率各向异性. 当  $i$  分子处于第  $j$  分子层时 (11) 式给出

$$f_m(j) = -\frac{1}{2}\eta_a(H_x \sin\theta_j + H_z \cos\theta_j)^2. \quad (12)$$

## 2.4. 平衡态方程

假定分子层上的液晶分子数密度为  $\sigma$ , 我们可以写出单位面积液晶层上的自由能,

$$F = \sigma \sum_{j=1}^n \left[ \frac{1}{2}\Phi(j) + f_m(j) \right] + \varepsilon(g_{s1} + g_{sn}). \quad (13)$$

在理想有序的近似条件下 (13) 式中没有熵的贡献项.

在平衡态下,  $F$  应对  $\theta_j$  取最小, 必要条件是

$$\frac{\partial F}{\partial \theta_j} = 0 \quad (j = 1, 2, \dots, n). \quad (14)$$

将(13)式代入(14)式得到平衡态方程,

$$\begin{aligned} & \epsilon(3\lambda + 3\rho + \mu) \sin 2\theta_j - (1 - \delta_{jn}) \epsilon \left\{ \frac{3}{2} \rho \right. \\ & \times \sin \alpha (\theta_j - \theta_{j+1}) \left. \left[ \frac{3}{2} (\cos^2 \theta_j + \cos^2 \theta_{j+1}) - 1 \right] \right. \\ & \left. + \frac{3}{2} \left[ \lambda + \frac{3}{2} \rho \cos^2 (\theta_j - \theta_{j+1}) - \frac{1}{2} \rho \right] \right. \\ & \times \sin 2\theta_j + \mu \cos \theta_{j+1} \sin (2\theta_j - \theta_{j+1}) + \frac{3}{2} \nu \\ & \times \sin \alpha (\theta_j - \theta_{j+1}) \left. \right\} - (1 - \delta_{j1}) \epsilon \left\{ \frac{3}{2} \rho \sin \alpha (\theta_j - \theta_{j-1}) \right. \\ & \times \left[ \frac{3}{2} (\cos^2 \theta_j + \cos^2 \theta_{j-1}) - 1 \right] + \frac{3}{2} \left[ \lambda + \frac{3}{2} \rho \right. \\ & \times \cos^2 (\theta_j - \theta_{j-1}) - \frac{1}{2} \rho \left. \right] \sin 2\theta_j + \mu \cos \theta_{j-1} \sin (2\theta_j - \theta_{j-1}) \\ & \left. + \frac{3}{2} \nu \sin \alpha (\theta_j - \theta_{j-1}) \right\} - \eta_a (H_x \sin \theta_j + H_z \cos \theta_j) \\ & \times (H_x \cos \theta_j - H_z \sin \theta_j) + \delta_{j1} \eta_w \sin \alpha (\theta_j - \theta_0) \\ & + \delta_{jn} \eta_w \sin \alpha (\theta_j - \theta'_0) = 0 \quad (j = 1, 2, \dots, n). \quad (15) \end{aligned}$$

自由能(13)式和平衡态方程(15)是我们以下两节讨论问题的基本方程.

### 3. Fréedericksz 转变

本节研究三种基本的 Fréedericksz 转变.

#### 3.1. 从垂面排列状态到沿面排列的转变

当不加外磁场时, 液晶分子垂直于基板表面排列, 即关于易取向方向有  $\theta_0 = \theta'_0 = 0$ . 外磁场方向沿  $X$  轴方向, 即有  $H_x = H, H_z = 0$ . 只研究强锚泊边界条件, 在(15)式给出的方程组中, 当  $j = 1$  和  $j = n$  时, 由于  $\eta_w \rightarrow \infty$  而分别给出  $\theta_1 = \theta_0 = 0$  和  $\theta_n = \theta'_0 = 0$ . 因此(15)式给出的方程组退化为  $n - 2$  个方程.

可以通过线性化分析方法, 给出 Fréedericksz 转变的阈值磁场. 假定  $\theta_j$  是小量(15)式给出

$$-\epsilon(6\rho + 3\nu + \mu) \chi (\theta_{j-1} - 2\theta_j + \theta_{j+1}) + \eta_a H^2 \theta_j = 0. \quad (16)$$

将模型一的(3)式代入(16)式并除以晶格常数  $a$ , 得到

$$K_3^* \frac{\theta_{j-1} - 2\theta_j + \theta_{j+1}}{a^2} + \chi_a H^2 \theta_j = 0, \quad (17)$$

式中

$$\chi_a = \eta_a / a^3, \quad (18)$$

$$K_3^* = 3\epsilon \Delta K_3 / a.$$

在理想有序的假定下, 公式中  $\chi_a$  是液晶的磁化率各向异性. 进一步注意到, 因子  $(\theta_{j-1} - 2\theta_j + \theta_{j+1}) / a^2$  是二阶导数  $d^2 \theta / dz^2$  的差分形式(17)式转换到连续函数, 给出

$$K_3^* \frac{d^2 \theta}{dz^2} + \chi_a H^2 \theta = 0. \quad (19)$$

由于已经做了理想有序的假定, 分子取向和液晶指向矢方向是重合的. 按照液晶连续体理论的同步骤<sup>[13]</sup>(19)式给出阈值磁场,

$$H_c^{(3)} = \frac{\pi}{d} \sqrt{\frac{K_3^*}{\chi_a}}, \quad (20)$$

式中  $d$  是液晶层的厚度, 即液晶盒的盒厚.(20)式与弹性理论的结果具有相同形式. 我们注意到, 若将模型二的(4)式代入(16)式(19)式中  $d^2 \theta / dz^2$  的系数不仅依赖于  $K_3$ , 而且依赖于  $K_1$ , 与转变发生时只有弯曲变形的几何图像不一致.

#### 3.2. 从沿面排列状态到垂面排列的转变<sup>[14]</sup>

当没有外磁场时, 液晶分子沿着基板表面平行排列. 关于易取向方向有  $\theta_0 = \theta'_0 = \frac{\pi}{2}$ . 外磁场方向沿  $Z$  轴方向, 即  $H_x = 0, H_z = H$ . 在(15)式给出的方程组中, 当  $j = 1$  和  $j = n$  时, 强锚泊边界条件分别给出  $\theta_1 = \theta_0 = \frac{\pi}{2}$  和  $\theta_n = \theta'_0 = \frac{\pi}{2}$ . (15)式给出的方程组, 同样退化为  $n - 2$  个方程.

为了通过线性化分析方法求 Fréedericksz 转变的阈值磁场, 令  $\theta_j = \frac{\pi}{2} - \alpha_j$ , 并把  $\alpha_j$  当作小量来处理(15)式给出

$$\epsilon(3\rho - 3\nu - \mu) \chi (\alpha_{j-1} - 2\alpha_j + \alpha_{j+1}) + \eta_a H^2 \alpha_j = 0. \quad (21)$$

把(3)式代入(21)式得到

$$3\epsilon \Delta K_1 (\alpha_{j-1} - 2\alpha_j + \alpha_{j+1}) + \eta_a H^2 \alpha_j = 0. \quad (22)$$

同样可以得到阈值磁场,

$$H_c^{(1)} = \frac{\pi}{d} \sqrt{\frac{K_1^*}{\chi_a}}, \quad (23)$$

式中

$$K_1^* = 3\epsilon \Delta K_1 / a. \quad (24)$$

同样是模型一可以给出正确的结果, 而模型二不能给出正确结果.

### 3.3. 纯扭曲形变

在 2.2—2.4 节的讨论中,我们假定液晶分子取向在  $XZ$  平面内变化.同样可以假定分子取向在  $XY$  平面内变化.设分子长轴与  $X$  轴间的夹角为  $\phi$ .当  $i$  分子处于第  $j$  分子层时,有  $\mathbf{u}_i = (\cos\phi_j, \sin\phi_j, 0)$ .这时磁场也在  $XY$  平面内,即  $\mathbf{H} = (H_x, H_y, 0)$ .与 (15) 式类似,我们有平衡态方程

$$-\frac{3}{2}\epsilon(\nu - \rho)\{ (1 - \delta_{jn})\sin\chi(\phi_j - \phi_{j+1}) + (1 - \delta_{j1}) \times \sin\chi(\phi_j - \phi_{j-1})\} - \eta_a(H_x \cos\phi_j + H_y \sin\phi_j) \times (-H_x \sin\phi_j + H_y \cos\phi_j) + \delta_{j1}\eta_w \sin\chi(\phi_j - \phi_0) + \delta_{jn}\eta_w \sin\chi(\phi_j - \phi'_0) = 0 \quad (j = 1, 2, \dots, n). \quad (25)$$

无论对于模型一还是模型二 ( $\nu - \rho$ ) 都只依赖于弹性常数  $K_2$ , 与扭曲形变的几何图像相符.

为了研究扭曲形变下的 Fréedericksz 转变,假定基板处的液晶分子沿  $X$  轴方向形成强锚泊,即有  $\phi_1 = \phi_0 = 0$  和  $\phi_n = \phi'_0 = 0$ .外磁场沿  $y$  轴方向,即  $H_x = 0, H_z = H$ . (25) 式给出的方程组退化为  $n - 2$  个方程,当  $\phi_j$  是小量时给出

$$3\epsilon(\nu - \rho)\{\phi_{j-1} - 2\phi_j + \phi_{j+1}\} - \eta_a H^2 \phi_j = 0. \quad (26)$$

将模型一的 (3) 式代入 (26) 式,得到阈值磁场

$$H_c^{(2)} = \frac{\pi}{d} \sqrt{\frac{K_2^*}{\chi_a}}, \quad (27)$$

式中

$$K_2^* = 3\epsilon\Delta K_2/a. \quad (28)$$

若将模型二的 (4) 式代入 (26) 式,也可以给出正确结论.即纯扭曲形变中的 Fréedericksz 转变只依赖于弹性常数  $K_2$ .

## 4. 指向矢分布

本节研究无外磁场作用时的指向矢分布.

### 4.1. 具有自由表面的液晶层

当没有外磁场作用 ( $H_x = H_z = 0$ ) 和基板锚泊作用 ( $\eta_w = 0$ ) 时,平衡态方程 (15) 有解析解.容易看出,  $\theta_{j-1} = \theta_j = \theta_{j+1} = \theta$  ( $j = 2, 3, \dots, n - 1$ ) 是  $n - 2$  个方程的解,当  $j = 1$  和  $j = n$  时,方程简化为

$$(3\lambda + 3\rho + \mu)\sin 2\theta = 0. \quad (29)$$

把  $\theta_{j-1} = \theta_j = \theta_{j+1} = \theta$  代入 (13) 式(去掉磁场作用项和基板锚泊作用项),可得

$$F = \sigma\epsilon\left[ (n - 2)\left(\frac{2}{3}\mu + 3\nu\right) + (3\lambda + 3\rho + \mu)\sin^2\theta + \left(5\nu + \frac{4}{9}\mu\right) - \chi(\lambda + \rho) \right]. \quad (30)$$

对于模型一,由于  $3\lambda + 3\rho + \mu = 0$ ,因此液晶指向矢在空间是各向同性的,在这一点上与 Lebwohl-Lasher 模型相同.

对于模型二,  $3\lambda + 3\rho + \mu = \Delta(K_1 - K_3)$  (29) 式要求  $\theta = 0$  或  $\theta = \pi/2$ ,即液晶分子垂直于自由表面或沿着自由表面排列.若  $3\lambda + 3\rho + \mu > 0$  (30) 式要求(平衡态自由能取最小)  $\theta = 0$ ,即分子垂直于自由表面排列;若  $3\lambda + 3\rho + \mu < 0$  (30) 式要求  $\theta = \pi/2$ ,即分子沿着自由表面排列.例如,对于处于  $120^\circ\text{C}$  的液晶 PAA,它的三个弹性常数的数值为<sup>[15]</sup>

$$K_1 = 7 \times 10^{-12} \text{ N},$$

$$K_2 = 4.3 \times 10^{-12} \text{ N},$$

$$K_3 = 17 \times 10^{-12} \text{ N}.$$

经过简单代数运算,它的  $3\lambda + 3\rho + \mu < 0$ ,因此分子沿着自由表面排列,与实验观测<sup>[16]</sup>相符合.

### 4.2. 基板弱锚泊定向作用

液晶在信息显示方面具有重要应用,一个重要的原因是它可以在基板作用下定向排列.假定上、下基板的易取向方向相同,即  $\theta_0 = \theta'_0$ .当没有外磁场作用时,平衡态方程 (15) 有均匀解.像 4.1 节一样,令  $\theta_{j-1} = \theta_j = \theta_{j+1} = \theta$  ( $j = 2, 3, \dots, n - 1$ ),  $n - 2$  个方程得到满足,而  $j = 1$  和  $j = n$  的两个方程均简化为如下形式:

$$\epsilon(3\lambda + 3\rho + \mu)\sin 2\theta + 2\eta_w \sin\chi(\theta - \theta_0) = 0. \quad (31)$$

对于模型一,由于  $3\lambda + 3\rho + \mu = 0$ ,因此解为  $\theta = \theta_0$ ,即液晶分子完全沿基板易取向方向  $\theta_0$  排列.

对于模型二 (31) 式给出解

$$\tan 2\theta = \frac{2\eta_w \sin 2\theta_0}{2\eta_w \cos 2\theta_0 + \epsilon(3\lambda + \mu)}. \quad (32)$$

由于液晶具有内禀易取向方向<sup>[9,10]</sup>,液晶的实际取向  $\theta$  与基板易取向方向  $\theta_0$  将有区别.对于强锚泊,即当  $\eta_w \rightarrow \infty$  时 (32) 式给出  $\theta = \theta_0$ .引入无量纲的参数  $\alpha$ ,

$$\alpha = \epsilon(3\lambda + \mu)(2\eta_w) = \epsilon\Delta(K_1 - K_3)(2\eta_w).$$

在图 1 中,我们给出了  $\theta$  随  $\theta_0$  的变化曲线.

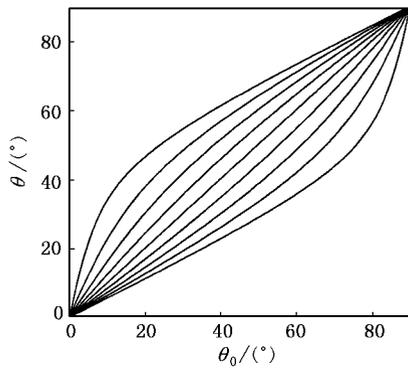


图1 模型二,液晶取向方向  $\theta$  随基板易取向方向  $\theta_0$  变化.中间一条直线对应于参数  $\alpha = 0$ ,向下  $\alpha$  依次取值 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 向上  $\alpha$  依次取值 -0.2, -0.4, -0.6, -0.8

#### 4.3. 混合排列向列相 (HAN) 液晶盒

只研究强锚泊的情况.可以令  $\theta_1 = 0, \theta_n = \pi/2$ .对两种模型分别进行讨论.

##### 4.3.1. 模型一

将(3)式代入平衡态方程(15),将含有  $K_2$  的项提出,记为  $A$ ,

$$A = \frac{3}{2} \epsilon \Delta K_2 \sin 2\theta_j - 3 \epsilon \Delta K_2 \cos \theta_{j+1} \sin(2\theta_j - \theta_{j+1}) + \frac{3}{2} \epsilon \Delta K_2 \sin \alpha (\theta_j - \theta_{j+1}) + \frac{3}{2} \epsilon \Delta K_2 \sin 2\theta_j - 3 \epsilon \Delta K_2 \cos \theta_{j-1} \sin(2\theta_j - \theta_{j-1}) + \frac{3}{2} \epsilon \Delta K_2 \sin \alpha (\theta_j - \theta_{j-1}). \quad (33)$$

将(33)式中的三角函数展开后,容易验证  $A = 0$ ,即分子取向分布与弹性常数  $K_2$  无关,只与  $K_1$  及  $K_3$  有关.这与连续体理论的结论一致.

若假定  $K_1 = K_3$ ,平衡态方程(15)可以化简为

$$\sin \alpha (\theta_j - \theta_{j+1}) + \sin \alpha (\theta_j - \theta_{j-1}) = 0. \quad (34)$$

将  $\theta_j - \theta_{j+1}$  及  $\theta_j - \theta_{j-1}$  看成是小量(34)式过渡到连续函数(类似于对(17)式的讨论)给出

$$\frac{d^2 \theta}{dz^2} = 0. \quad (35)$$

(35)式满足边界条件的解为线性解  $\theta = \pi z / (2d)$ .

当  $K_1$  与  $K_3$  不相等时,取  $n = 31$ ,通过平衡态方程(15)进行数值计算,结果见图2.结果与连续体理论一致<sup>[13]</sup>.

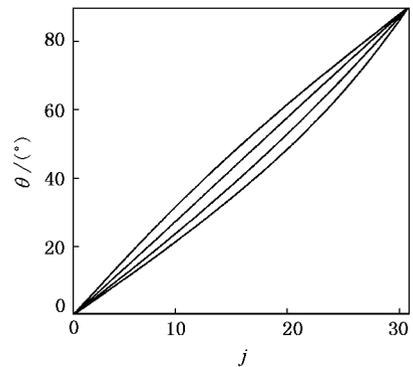


图2 模型一, HAN 液晶盒中的分子取向分布.分子层数  $n = 31$ .图中曲线自上向下分别对应于  $K_3/K_1 = 0.5, 1, 2, 4$

##### 4.3.2. 模型二

将(4)式代入(15)式,平衡态方程可化简为

$$\epsilon \Delta \left( \frac{3}{2} K_1 - 2K_2 + \frac{3}{2} K_3 \right) [ \sin \alpha (\theta_j - \theta_{j+1}) + \sin \alpha (\theta_j - \theta_{j-1}) ] = 0. \quad (36)$$

将  $\theta_j - \theta_{j+1}$  及  $\theta_j - \theta_{j-1}$  看成小量(36)式过渡到连续函数,给出

$$-2a^2 \epsilon \Delta \left( \frac{3}{2} K_1 - 2K_2 + \frac{3}{2} K_3 \right) \frac{d^2 \theta}{dz^2} = 0, \quad (37)$$

即不论弹性常数的取值如何,始终给出线性解.这与连续体理论的结果相矛盾.

## 5. 讨论及结论

第2节研究了 Fréedericksz 转变.由(18)(24)和(28)式可以看出,基于分子间两体作用势研究阈值磁场时,对液晶弹性常数的确定只能精确到一个常数因子.这与通过分子理论研究液晶弹性常数的结论是一致的<sup>[17,18]</sup>.我们特别注意到,对于模型一,在给出正确的阈值磁场形式的基础上,对于  $i = 1, 2, 3, K_i^*/K_i$  给出同一个常数.

本文基于空间各向异性两体作用势,在分子取向完全有序的条件下研究向列相液晶的形变性质,并有如下结论:第一,模型一可以给出三种基本 Fréedericksz 转变阈值磁场的正确形式,而模型二不能.第二,模型一可以描写 HAN 液晶盒中发生的指向矢形变,模型二不能.第三,对于具有自由表面的液晶层,模型一没有内禀易取向方向,而模型二具有内禀易取向方向.

- [ 1 ] Maier W , Saupe A 1959 *Z. Naturforsch. A* **14** 882
- [ 2 ] Maier W , Saupe A 1960 *Z. Naturforsch. A* **15** 287
- [ 3 ] Lebwohl P A , Lasher G 1972 *Phys. Rev. A* **6** 426
- [ 4 ] Stone A J 1979 *The Molecular Physics of Liquid Crystals* Luckhurst G R , Gray G W ed ( London : Academic Press ) p31
- [ 5 ] Sheng P , Wojtowicz P J 1976 *Phys. Rev. A* **14** 1883
- [ 6 ] Gruhn T , Hess S 1996 *Z. Naturforsch. A* **51** 1
- [ 7 ] Romano S 1998 *Int. J. Mod. Phys. B* **12** 2305
- [ 8 ] Luckhurst G R , Romano S 1999 *Liq. Cryst.* **26** 871
- [ 9 ] Barbero G , Evangelista L R , Ponti S 1996 *Phys. Rev. E* **53** 1265
- [ 10 ] Skačej G , Pergamenschik V M , Alexe-Ionescu A L *et al* 1997 *Phys. Rev. E* **56** 571
- [ 11 ] Zhang Z D , Yu H , Li L 2001 *Chin. Phys.* **10** 645
- [ 12 ] Zhang Z D , Zhang D X , Sun Y B 2000 *Chin. Phys. Lett.* **17** 749
- [ 13 ] Barberi R , Barbero G 1991 *Physics of Liquid Crystalline Materials* Khoo I C , Simoni F ed ( Philadelphia : Gordon and Breach Science Publishers ) p215
- [ 14 ] Guan R H , Yang G C 2003 *Chin. Phys.* **12** 1283
- [ 15 ] De Gennes P G , Prost J 1995 *The Physics of Liquid Crystals* ( 2nd ed ) ( Oxford : Oxford University Press )
- [ 16 ] Bouchiat M A , Langevin-Cruchon D 1971 *Phys. Lett. A* **34** 331
- [ 17 ] Priest R G 1973 *Phys. Rev. A* **7** 720
- [ 18 ] Osipov M A , Hess S 1993 *Mole. Phys.* **78** 1191

## Study of distortions in nematic liquid crystals based upon spatially anisotropic pair potential<sup>\*</sup>

Zhang Zhi-Dong Zhang Yan-Jun

( School of Sciences , Hebei University of Technology , Tianjin 300130 , China )

( Received 27 October 2003 ; revised manuscript received 9 January 2004 )

### Abstract

Distortions of nematic liquid crystals are studied based upon the molecular pair potential model which is spatially anisotropic and dependent on elastic constants of liquid crystals. The perfect nematic order is assumed in the theoretical treatment , which means the orientation of the molecular long axis coincides with the director of liquid crystal and the total free energy equals to the total interaction energy. Three kinds of the basic Fréedericksz transition are investigated analytically and numerical calculations are made for the director profiles in a hybrid nematic cell. Two mapping schemes from the elastic energy to the pair potential , proposed recently in the literature , are checked. Only one scheme can give the result consistent with the continuum theory.

**Keywords** : spatially anisotropic pair potential , perfect nematic order , distortion of liquid crystal , Fréedericksz transition

**PACC** : 6130 , 3420 , 6470M

<sup>\*</sup> Project supported by the Natural Science Foundation of Hebei Province , China ( Grant No. 103002 ).