

文章编号:1007-2780(2012)02-0144-09

## 双轴向列相 Fréedericksz 转变的 Monte Carlo 模拟

王英涛, 周 璇, 张志东\*

(河北工业大学 理学院, 天津 300401, E-mail: yingtao\_wang@126.com)

**摘 要:** 通过 Monte Carlo 方法研究了在磁场诱导下的双轴向列相液晶的 Fréedericksz 转变, 在模拟的过程中采用了 London 色散力近似。考虑 3 种不同的排列方式, 通过改变 3 个分子轴的磁化率和磁场方向, 讨论了 9 种不同的 Fréedericksz 转变并分别给出了相应的阈值磁场, 通过计算机的模拟实现了短轴  $u$  和  $v$  的转变, 长轴  $w$  和短轴  $u$  的转变以及长轴  $w$  和短轴  $v$  的转变。模拟结果表明, 在给定假设的情况下满足单一弹性常数近似。研究结果对发展双轴液晶显示器件有一定的理论指导意义。

**关 键 词:** 双轴; Fréedericksz 转变; Monte Carlo 模拟

中图分类号: O753+.2 文献标识码: A DOI: 10.3788/YJYXS20122702.0144

## Monte Carlo Simulation of Fréedericksz Transitions in Biaxial Nematic Liquid Crystals

WANG Ying-tao, ZHOU Xuan, ZHANG Zhi-dong\*

(School of Science, Hebei University of Technology, Tianjin 300401, China, E-mail: yingtao\_wang@126.com)

**Abstract:** With Monte Carlo simulation, this paper investigated Fréedericksz transitions of biaxial nematics induced by an external magnetic field. In the simulation process, the pair potential in London's dispersion forces approximation was used. With three different orientations, nine different Fréedericksz transitions were discussed by changing the molecular magnetic susceptibility and the directions of magnetic field. The transition of two short axes  $u$  and  $v$ , the transition of long axis  $w$  and short axis  $u$ , and the transition of long axis  $w$  and short axis  $v$  were all simulated. With the result of simulations, relations of the nine elastic constants can be discussed and they are fit with one elastic constant approximation. The result is practical in the sense that it works as a theoretical basis for developing biaxial display device.

**Key words:** biaxial; Fréedericksz transition; Monte Carlo simulation

### 1 引 言

1970 年 Freiser 的理论预言了双轴向列相的存在, 无论从理论还是实验都倍受研究者的关注<sup>[1]</sup>。10 年后, Yu 和 Saupe 通过实验证实了溶

致液晶中双轴向列相的存在<sup>[2]</sup>。由于双轴向列相次指向矢  $l$  和次指向矢  $m$  可以绕主指向矢  $n$  转动, 并且次指向矢的转动可能要快于主指向矢<sup>[3-4]</sup>, 它的这种性质对实际应用, 例如, 开发快速响应液晶显示器和快速相位调制器件等, 有着极

收稿日期: 2011-09-23; 修订日期: 2012-01-07

基金项目: 国家自然科学基金(No. 60736042); 河北省自然科学基金(No. A2010000004); 河北省重点学科资助项目

作者简介: 王英涛(1984—), 男, 河北武安人, 硕士研究生, 从事液晶物理方面的研究。

\* 通讯联系人, E-mail: zhidong\_zhang@yahoo.cn

其重要的作用,所以用 Monte Carlo 方法来研究 Fréedericksz 转变显得极其重要,它是实验和理论的有力补充。

双轴向列相液晶理论一直在得到逐步的完善,Saupe 采用与固体弹性理论相似的方法,导出了双轴向列相液晶弹性密度公式,其中包含 12 个独立的弹性常数(包括 9 个体弹性常数),其值由实验测量决定;刘红<sup>[5]</sup>从理论上推导出了双轴向列相液晶 9 个体弹性常数的关系。

本文根据阈值磁场与弹性常数之间的关系,考虑 3 种不同的初始排列方式,通过改变分子磁化率和磁场方向,以计算机模拟实现了 9 种不同的 Fréedericksz 转变,模拟结果表明,满足单一弹性常数近似。

## 2 分子理论基础

### 2.1 两体势模型<sup>[6]</sup>

双轴向列相液晶分子的结构示意图可通过图 1 来描述,我们用长轴  $w$  来区别两个短轴  $u$  和  $v$ ,通过两个无迹张量来描写双轴分子的各向异性部分,它们定义为:

$$\begin{aligned} \mathbf{q} &:= \mathbf{w} \otimes \mathbf{w} - \frac{1}{3}I \\ \mathbf{b} &:= \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} - \mathbf{v} \otimes \mathbf{v} \end{aligned} \quad (1)$$

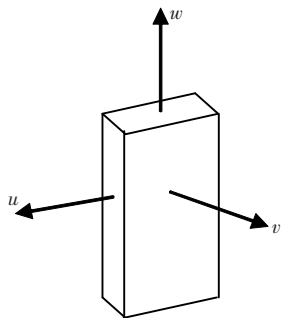


图 1 双轴向列相液晶分子的结构示意图

Fig. 1 Schematic description of a biaxial molecule

张量  $\mathbf{q}$  具有单轴性,张量  $\mathbf{b}$  具有双轴性。如果我们解释  $w$  作为分子的长轴,那么  $\mathbf{q}$  代表分子单轴性的主要几何特征, $\mathbf{b}$  代表分子的双轴特征。在两体势中,如果把张量  $\mathbf{q}$  和  $\mathbf{b}$  描述成分子的单轴和双轴部分,那么它们有了更多的物理意义。两个分子可通过两对张量  $(\mathbf{q}, \mathbf{b})$  和  $(\mathbf{q}', \mathbf{b}')$  来描述。在两个分子之间,截断到 2 阶项最一般的两体势形式为:

$$V = -U_0 \{ \mathbf{q}\mathbf{q}' + \gamma(\mathbf{q}\mathbf{b}' + \mathbf{b}\mathbf{q}') + \lambda\mathbf{b}\mathbf{b}' \} \quad (2)$$

其中  $U_0 > 0$  是典型的相互作用能量参数, $\gamma$  和  $\lambda$  是两个无量纲参数。当  $\gamma = \lambda = 0$  时,方程(2)简化成 Maier-Saupe 两体势模型。在式(2)所描写的两体势模型中值得注意的是,当  $\lambda = \gamma^2$  时给出:

$$V = -U_0 (\mathbf{q} + \gamma\mathbf{b})(\mathbf{q}' + \gamma\mathbf{b}') \quad (3)$$

在 London 色散力近似下等式(3)能够得以很好的解释。在本文中,我们采用等式(3)进行模拟。

### 2.2 分子在磁场作用下的能量形式

我们假设磁场方向为  $\mathbf{H} = (H_x, 0, 0)$  或  $\mathbf{H} = (0, H_y, 0)$  或  $\mathbf{H} = (0, 0, H_z)$ ,分子在磁场作用下的能量形式为<sup>[7]</sup>:

$$W_i = - \int_0^H \mathbf{M} \cdot d\mathbf{H} = - \frac{1}{2} \eta_i H_i^2 \quad (4)$$

( $i = x, y, z$ , 角标重复但不求和)

其中  $\mathbf{M}$  是分子磁化强度, $\mathbf{H}$  为磁场, $\boldsymbol{\eta}$  是分子磁化率张量。我们分别用 3 个正交的单位矢量  $\mathbf{u}$ ,  $\mathbf{v}$  和  $\mathbf{w}$  来定义分子坐标系,其中  $\mathbf{w}$  是沿着分子的长轴方向, $\mathbf{u}$  和  $\mathbf{v}$  分别沿着短轴方向。主轴系中分子的磁化率张量形式为:

$$\boldsymbol{\eta} = \begin{pmatrix} \eta_u & 0 & 0 \\ 0 & \eta_v & 0 \\ 0 & 0 & \eta_w \end{pmatrix} \quad (5)$$

在实验室坐标系下则有:

$$\eta_i = \eta_u u_i^2 + \eta_v v_i^2 + \eta_w w_i^2 \quad (6)$$

其中 3 个单位矢量可通过欧拉角来表示

$$\begin{aligned} u_x &= \cos\varphi \cos\theta \cos\psi - \sin\varphi \sin\psi \\ u_y &= \sin\varphi \cos\theta \cos\psi + \cos\varphi \sin\psi \\ u_z &= -\sin\theta \cos\psi \end{aligned} \quad (7a)$$

$$\begin{aligned} v_x &= -\cos\varphi \cos\theta \sin\psi - \sin\varphi \cos\psi \\ v_y &= -\sin\varphi \cos\theta \sin\psi + \cos\varphi \cos\psi \\ v_z &= \sin\varphi \sin\psi \end{aligned} \quad (7b)$$

$$\begin{aligned} w_x &= \cos\varphi \sin\theta \\ w_y &= \sin\varphi \sin\theta \\ w_z &= \cos\theta \end{aligned} \quad (7c)$$

那么式(4)给出:

$$W_i = - \frac{1}{2} H_i^2 (\eta_u u_i^2 + \eta_v v_i^2 + \eta_w w_i^2) \quad (8)$$

( $i = x, y, z$ , 角标重复但不求和)

## 3 Monte Carlo 模拟

当我们知道了两体势模型和分子在磁场作用下的能量形式,我们就可以对双轴向列相液晶进

行 Monte Carlo 模拟了。在模拟过程中采用  $14 \times 14 \times 14$  的格点模型,在  $x$  和  $y$  两个方向上使用周期性边界条件,而在  $z$  方向液晶层(12 层)的上、下边界处各加一个外推层描写基板作用,我们给定上、下边界层的预倾角都为  $2^\circ$ 。在数值计算中引进约化温度  $T^* = K_B T / U_0$  (计算中取  $T^* = 0.2$ ) 和相对磁场  $h = H / \sqrt{U_0}$ ,其中  $K_B$  是波尔兹曼常数, $T$  是温度。模拟过程中建立一个马尔科夫过程,采用 Metropolis 方法<sup>[8]</sup>,按照打字机的方式依次走过每一个格点,在每一个格点处选取一个随机位形  $(\varphi_i, \theta_i, \psi_i)$ ,然后计算此随机位形的能量  $E_n$ ,并与初始态此格点的能量  $E_p$  进行比较,若  $E_n < E_p$ ,则接受此位形的选取,若  $E_n \geq E_p$ ,则此位形按照  $p = e^{-(E_n - E_p) / K_B T}$  的几率被接受。系统达到平衡态的步数为  $P_0$  (本文  $P_0 = 590\ 000$ ),对

于各个格点的各量求和平均步数  $P_1 = 10\ 000$ 。

3 个对称无迹向列相序参数张量可通过式(9)来描述<sup>[9]</sup>:

$$S_{ab}^{AB} = \frac{1}{2} \langle 3l_{aA}l_{bB} - \delta_{AB} \rangle \quad (9)$$

其中  $\langle \dots \rangle$  表示对每一层进行  $P_0$  步 Monte Carlo 循环后然后再进行取平均, $A$  和  $B$  表示实验室坐标系下的  $x, y$  和  $z$ ,  $a$  表示分子坐标系的 3 个单位矢量  $u, v$  和  $w$ 。通过对 3 个张量分别进行对角化,可分别得到 3 个张量的最大本征值,而 3 个最大本征值分别又对应 3 个本征矢,各张量最大本征值分别所对应的 3 个本征矢就是对应指向矢在实验坐标系下的表示。

在模拟过程中,假设双轴向列相液晶分子 3 种理想的初始排列方式如图 2 所示。

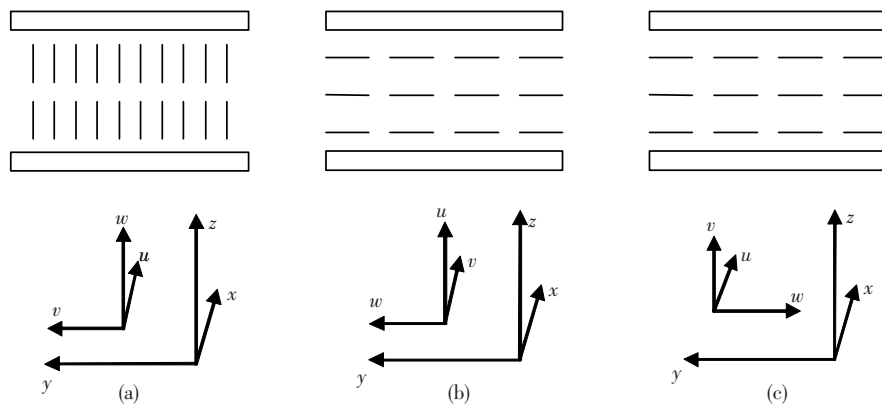


图 2 双轴向列相液晶分子理想的初始排列方式; $x-y-z$  表示实验室坐标, $u-v-w$  表示分子坐标系。

Fig. 2 Ideal initial arrangement of the biaxial nematics;  $x-y-z$  represent laboratory coordinate system and  $u-v-w$  represent molecular coordinate system.

所谓理想排列方式是指在忽略熵的影响并不考虑预倾角影响的排列;而初始排列是指在未加外场时的排列方式。

(I) 如果  $\eta_v > \eta_u > \eta_w$ , 在图 2(a) 和 2(c) 中向  $x$  轴施加磁场, 在 2(b) 图中向  $z$  轴上施加磁场, 可以实现两个短轴  $u$  和  $v$  的转变; (II) 如果  $\eta_v < \eta_u < \eta_w$ , 在 2(a) 和 2(c) 图中向  $x$  轴施加磁场, 在 2(b) 图中向  $z$  轴方向施加磁场, 那么就可以实现长轴  $w$  和短轴  $u$  的转动; (III) 如果  $\eta_u < \eta_v < \eta_w$ , 在 2(a) 图中向  $y$  轴施加磁场, 在 2(b) 图中向  $x$  轴施加磁场, 在 2(c) 图中向  $z$  轴上施加磁场, 就可以实现长轴  $w$  和短轴  $v$  的转变。本文中分别给出 3 种情况中一种情况的详细模拟结果。

### 3.1 两个短轴 $u$ 和 $v$ 的转变

在本节中给出第 (I) 种情况图 2(a) 的模拟结果。在模拟过程中, 我们取双轴向列相液晶分子的磁化率分别为  $\eta_u = 0.10$ ,  $\eta_v = 0.15$ ,  $\eta_w = 0.05$ , 向  $x$  轴方向施加磁场。对于等式(3), 假设  $\lambda = 0.3$ , 那么  $\gamma \approx 0.547$ 。在我们的程序中, 分子取向通过  $\varphi_i, \cos\theta_i$  和  $\psi_i$  来描述。这里值得注意的是必须用  $\cos\theta_i$  来描述而不是  $\theta_i$ , 这是为了使系统能够更加精确地达到平衡态<sup>[10]</sup>。在强锚定边界条件下, 分子两个外推层以及中间层的初始状态都为  $\varphi_i = 2^\circ, \cos\theta_i = 1$  和  $\psi_i = 0^\circ$ 。

次指向矢  $l$  和  $m$  在不同磁场下的各个分量分别如图 3 和图 4 所示, 由图 3 和图 4 很容易看出,

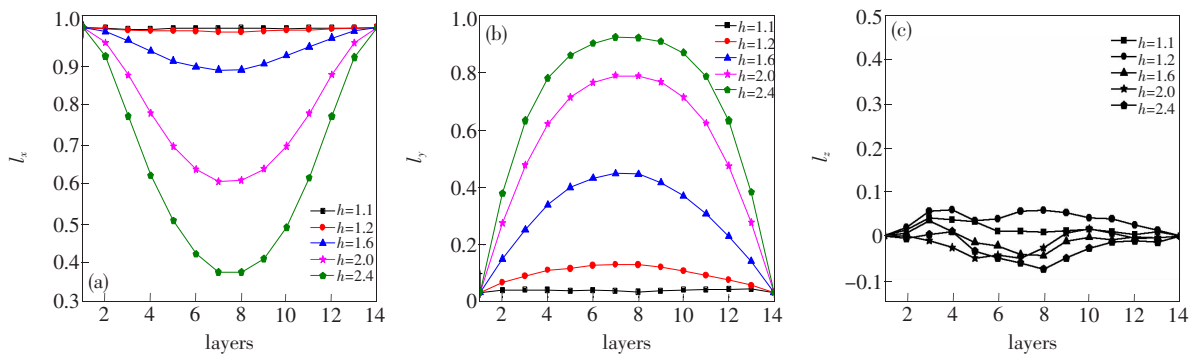


图 3 次指向矢  $l$  在不同的磁场下随层数的分布:  $h$  为相对磁场,  $h$  取值为  $h=1.1, h=1.2, h=1.6, h=2.0, h=2.4$  (方形, 圆形, 三角形, 五角星形, 五边形). (a)  $x$  分量, (b)  $y$  分量, (c)  $z$  分量.

Fig. 3 Distribution of the minor director  $l$  with layers:  $h$  is relative magnetic field,  $h=1.1, h=1.2, h=1.6, h=2.0, h=2.4$  (square, circle, triangular, pentacle, pentagon). (a)  $x$  component, (b)  $y$  component, (c)  $z$  component.

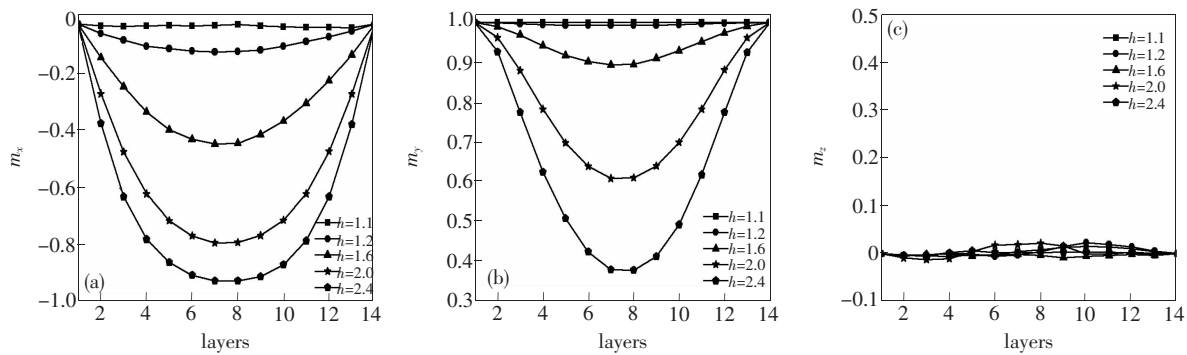


图 4 次指向矢  $m$  在不同的磁场下随层数的分布:  $h$  为相对磁场,  $h$  取值为  $h=1.1, h=1.2, h=1.6, h=2.0, h=2.4$  (方形, 圆形, 三角形, 五角星形, 五边形). (a)  $x$  分量, (b)  $y$  分量, (c)  $z$  分量.

Fig. 4 Distribution of the minor director  $m$  with layers:  $h$  is relative magnetic field,  $h=1.1, h=1.2, h=1.6, h=2.0, h=2.4$  (square, circle, triangular, pentacle, pentagon). (a)  $x$  component, (b)  $y$  component, (c)  $z$  component.

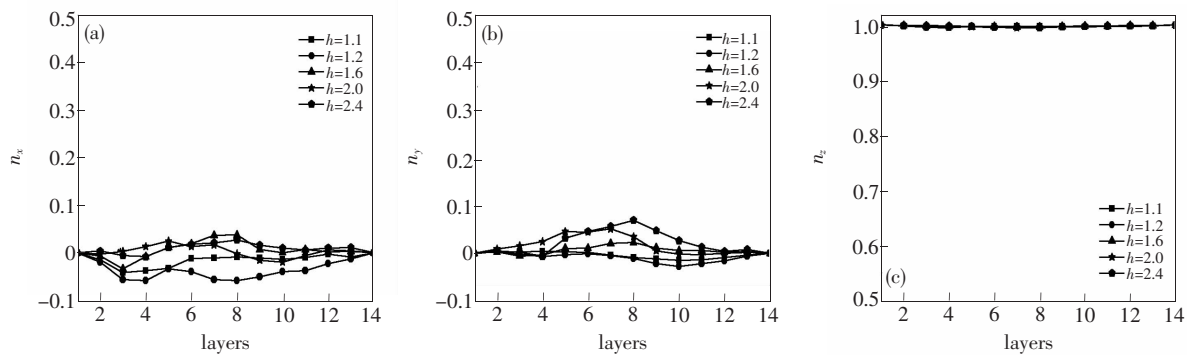


图 5 主指向矢  $n$  在不同的磁场下随层数的分布.  $h$  为相对磁场,  $h$  取值为  $h=1.1, h=1.2, h=1.6, h=2.0, h=2.4$  (方形, 圆形, 三角形, 五角星形, 五边形). (a)  $x$  分量, (b)  $y$  分量, (c)  $z$  分量.

Fig. 5 Distribution of the main director  $n$  with layers:  $h$  is relative magnetic field,  $h=1.1, h=1.2, h=1.6, h=2.0, h=2.4$  (square, circle, triangular, pentacle, pentagon). (a)  $x$  component (b)  $y$  component (c)  $z$  component.

在转变过程中次指向矢  $l$  和  $m$  几乎都在  $x$ - $y$  平面内转动, 它们的  $z$  分量相对非常小; 主指向矢  $n$  在不同磁场下的各个分量如图 5 所示, 由图 5 我们很容易看出, 在转变过程中主指向矢  $n$  几乎延着

$z$  轴方向, 它的  $x$  分量和  $y$  分量非常小。

由图 3, 图 4 和图 5 可以得出, 在给定的排列方式下, 实现了双轴液晶分子的两个短轴  $u$  和  $v$  的转变, 通过连续体理论 (见附录) 可以得到其阈

值磁场的具体表达式,而通过图 3(a),3(b)和图 4(a),4(b)可以得到其相对阈值磁场 $h_{NN} \approx 1.1$ (下标 NN 的含义见附录,下文中相关角标含义都不再给出)。对于第(I)种情况图 2(b)和图 2(c)排列方式,我们分别向  $z$  和  $x$  轴方向施加磁场同样可以实现双轴液晶分子的两个短轴  $u$  和  $v$  的转变,他们的相对阈值磁场分别为  $h_{LM} \approx 1.0$  和  $h_{ML} \approx 1.3$ (阈值磁场的具体表达式见附录,在这里这些情况的图像不再给出)。

### 3.2 短轴 $u$ 和长轴 $w$ 的转变

本节中给出第(II)种情况图 2(c)排列的模拟结果,在模拟过程中,取双轴向列相的磁化率分别为  $\eta_u = 0.10, \eta_v = 0.05, \eta_w = 0.15$ ,向  $x$  轴方向施加磁场,其他参数仍和 2.1 节中一样,但分子两个外推层以及中间层的初始状态都为  $\varphi_i = -88^\circ, \cos\theta_i = 0$  和  $\psi_i = 90^\circ$ 。

次指向矢  $l$  和主指向矢  $n$  在不同磁场下的各个分量分别如图 6 和图 8 所示,由图 6 和图 8 很容易看出,在转变过程中次指向矢  $l$  和主指向矢  $n$  几乎在  $x-y$  平面内转动,它们的  $z$  分量相对非常小;次指向矢  $m$  在不同磁场下的各个分量如图 7 所示,由图 7 很容易看出,在转变过程中次指向矢  $m$  几乎延着  $z$  轴方向,它的  $x$  分量和  $y$  分量非常小。

由图 6、图 7 和图 8 可以得出,在给定的排列方式下,我们实现了双轴液晶分子短轴  $u$  和长轴  $w$  的转变,并且通过图 6(a),6(b)和图 8(a),8(b)我们可以得到其相对阈值磁场  $h_{MM} \approx 0.2$ 。对于第(II)种情况图 2(a)和图 2(b),我们分别向  $x$  和  $z$  方向施加磁场同样可以实现双轴液晶分子短轴  $u$  和长轴  $w$  的转变,它们的相对阈值磁场分别为  $h_{NL} \approx 0.3$  和  $h_{LN} \approx 0.4$ (阈值磁场的具体表达式见附录,在这里这些情况的图像不再给出)。

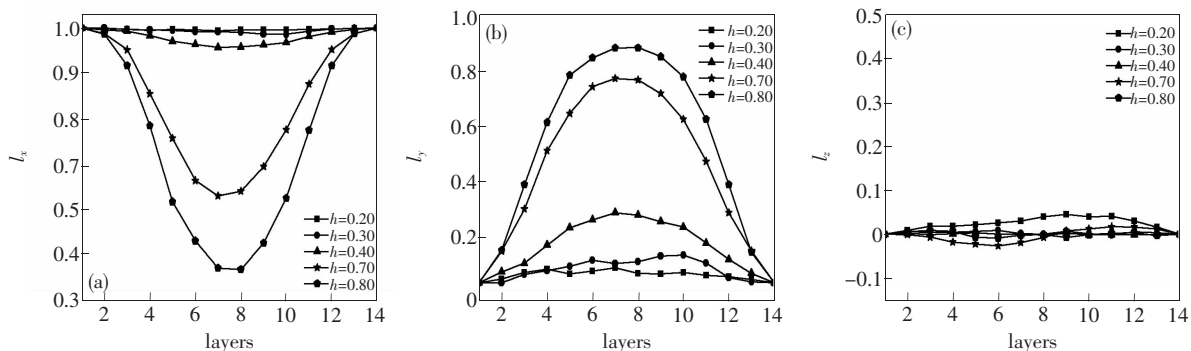


图 6 次指向矢  $l$  在不同的磁场下随层数的分布.  $h$  为相对磁场,  $h$  取值为  $h = 0.5, h = 0.56, h = 0.7, h = 0.8, h = 0.9$ (方形, 圆形, 三角形, 五角星形, 五边形). (a)  $x$  分量, (b)  $y$  分量, (c)  $z$  分量.

Fig. 6 Distribution of the minor director  $l$  with layers;  $h$  is relative magnetic field,  $h = 0.5, h = 0.56, h = 0.7, h = 0.8, h = 0.9$ (square, circle, triangular, pentacle, pentagon). (a)  $x$  component, (b)  $y$  component, (c)  $z$  component.

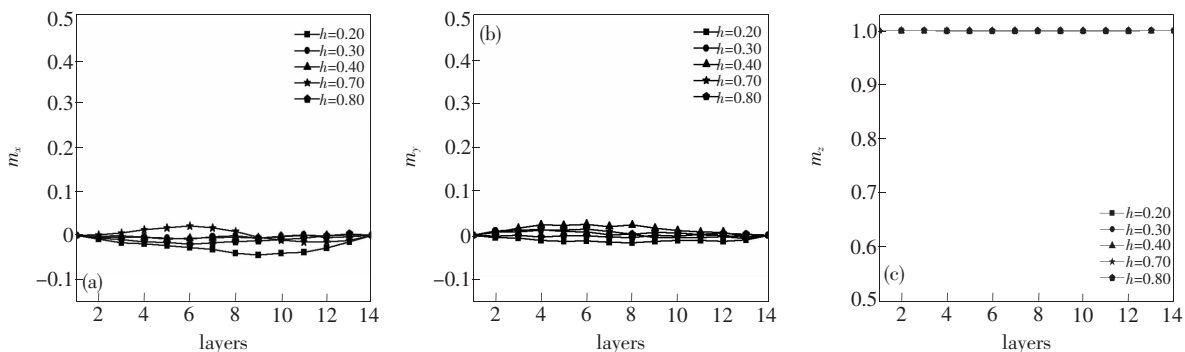


图 7 次指向矢  $m$  在不同的磁场下随层数的分布.  $h$  为相对磁场,  $h$  取值为  $h = 0.5, h = 0.56, h = 0.7, h = 0.8, h = 0.9$ (方形, 圆形, 三角形, 五角星形, 五边形). (a)  $x$  分量, (b)  $y$  分量, (c)  $z$  分量.

Fig. 7 Distribution of the minor director  $m$  with layers;  $h$  is relative magnetic field,  $h = 0.5, h = 0.56, h = 0.7, h = 0.8, h = 0.9$ (square, circle, triangular, pentacle, pentagon). (a)  $x$  component, (b)  $y$  component, (c)  $z$  component.

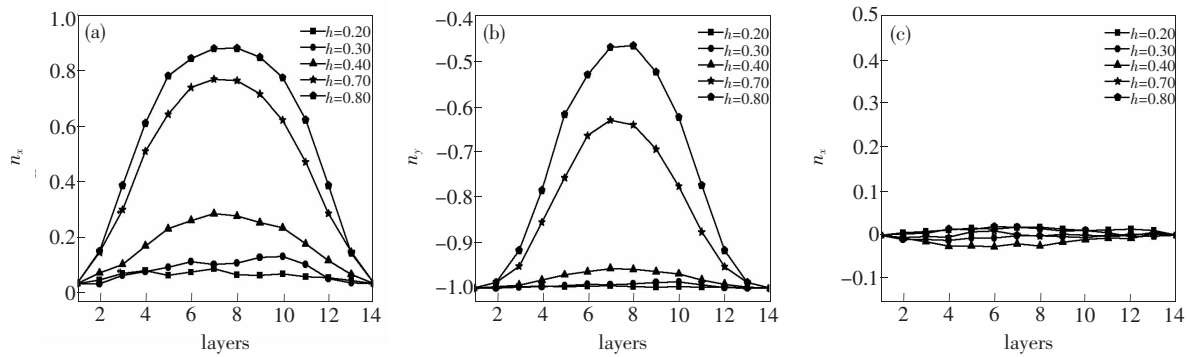


图 8 主指向矢  $\mathbf{n}$  在不同的磁场下随层数的分布:  $h$  为相对磁场,  $h$  取值为  $h=0.5, h=0.56, h=0.7, h=0.8, h=0.9$  (方形, 圆形, 三角形, 五角星形, 五边形). (a)  $x$  分量, (b)  $y$  分量, (c)  $z$  分量.

Fig. 8 Distribution of the main director  $\mathbf{n}$  with layers;  $h$  is relative magnetic field,  $h=0.5, h=0.56, h=0.7, h=0.8, h=0.9$  (square, circle, triangular, pentacle, pentagon). (a)  $x$  component, (b)  $y$  component, (c)  $z$  component.

### 3.3 短轴 $v$ 和长轴 $w$ 的转变

本节给出第(III)种情况图 2(b) 排列的模拟结果, 在模拟过程中, 取双轴向列相的磁化率分别为  $\eta_u=0.05, \eta_v=0.10, \eta_w=0.15$ , 向  $x$  轴方向施加磁场, 两个外推层以及中间层的初始状态都为

$$\varphi_i = 88^\circ, \cos\theta_i = 0 \text{ 和 } \psi_i = 180^\circ.$$

次指向矢  $\mathbf{l}$  在不同磁场下的各个分量如图 9 所示, 由图 9 很容易看出, 在转变过程中次指向矢  $\mathbf{l}$  几乎延着  $z$  轴方向, 它的  $x$  分量和  $y$  分量非常小; 次指向矢  $\mathbf{m}$  和主指向矢  $\mathbf{n}$  在不同磁场下的各

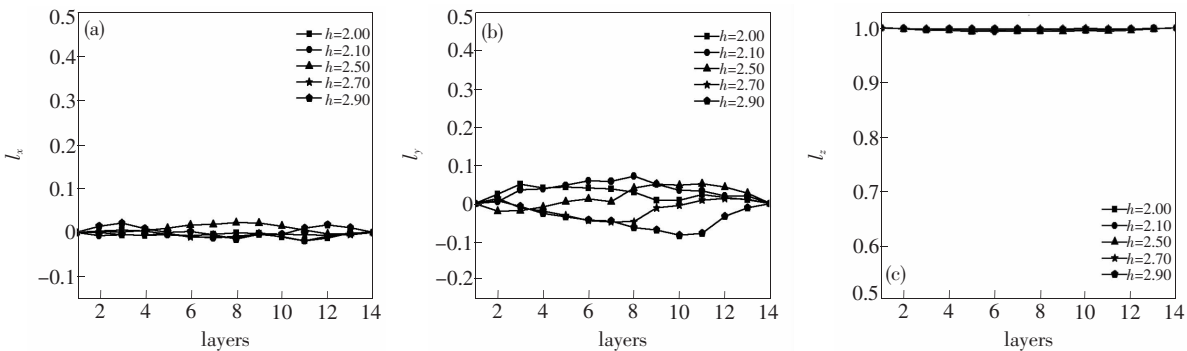


图 9 次指向矢  $\mathbf{l}$  在不同的磁场下随层数的分布.  $h$  为相对磁场,  $h$  取值为  $h=2.0, h=2.1, h=2.5, h=2.7, h=2.9$  (方形, 圆形, 三角形, 五角星形, 五边形). (a)  $x$  分量, (b)  $y$  分量, (c)  $z$  分量.

Fig. 9 Distribution of the minor director  $\mathbf{l}$  with layers;  $h$  is relative magnetic field,  $h=2.0, h=2.1, h=2.5, h=2.7, h=2.9$  (square, circle, triangular, pentacle, pentagon). (a)  $x$  component, (b)  $y$  component, (c)  $z$  component.

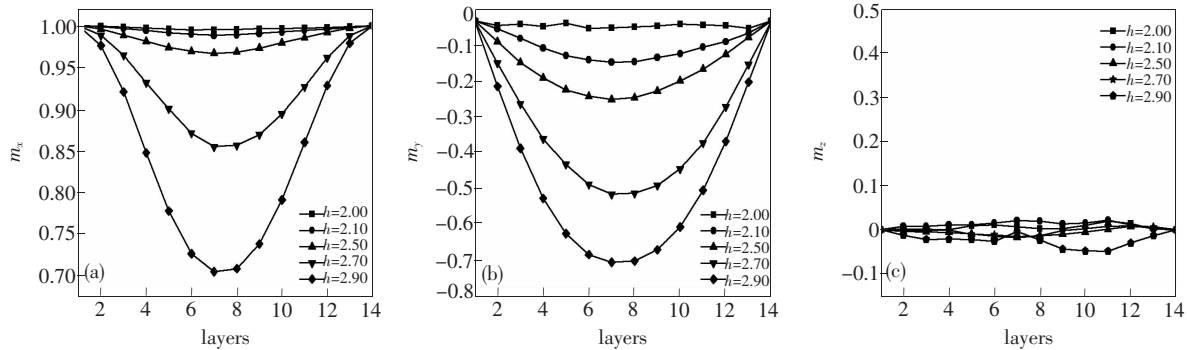


图 10 次指向矢  $\mathbf{m}$  在不同的磁场下随层数的分布:  $h$  为相对磁场,  $h$  取值为  $h=2.0, h=2.1, h=2.5, h=2.7, h=2.9$  (方形, 圆形, 三角形, 五角星形, 五边形). (a)  $x$  分量, (b)  $y$  分量, (c)  $z$  分量.

Fig. 10 Distribution of the minor director  $\mathbf{m}$  with layers;  $h$  is relative magnetic field,  $h=2.0, h=2.1, h=2.5, h=2.7, h=2.9$  (square, circle, triangular, pentacle, pentagon). (a)  $x$  component, (b)  $y$  component, (c)  $z$  component.

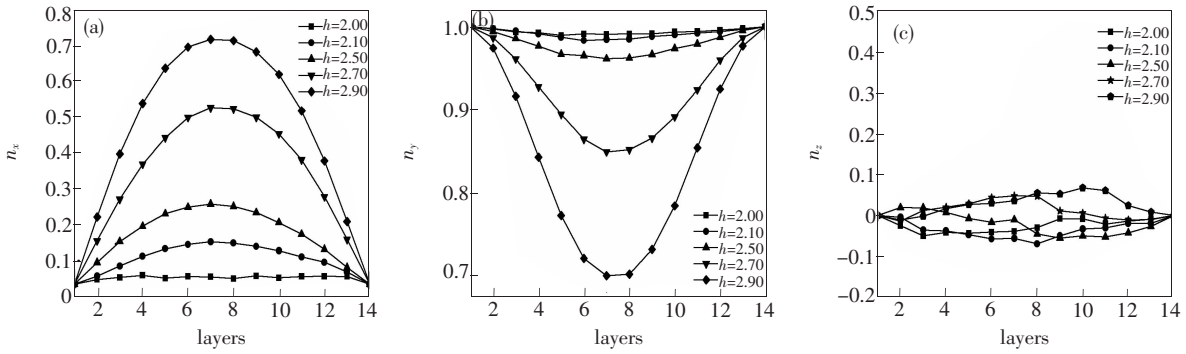


图 11 主指向矢  $\mathbf{n}$  在不同的磁场下随层数的分布:  $h$  为相对磁场,  $h$  取值为  $h=2.0, h=2.1, h=2.5, h=2.7, h=2.9$  (方形, 圆形, 三角形, 五角星形, 五边形). (a)  $x$  分量, (b)  $y$  分量, (c)  $z$  分量.

Fig. 11 Distribution of the main director  $\mathbf{n}$  with layers;  $h$  is relative magnetic field,  $h=2.0, h=2.1, h=2.5, h=2.7, h=2.9$  (square, circle, triangular, pentangle, pentagon). (a)  $x$  component, (b)  $y$  component, (c)  $z$  component.

个分量分别如图 10 和图 11 所示, 由图 10 和图 11 我们很容易看出, 在转变过程中次指向矢  $\mathbf{m}$  和主指向矢  $\mathbf{n}$  几乎都在  $x$ - $y$  平面内转动, 它们的  $z$  分量相对非常小.

由图 9、图 10 和图 11 可以得出, 在给定的排列方式下, 实现了双轴液晶分子短轴  $\mathbf{v}$  和长轴  $\mathbf{w}$  的转变, 并且通过图 10(a)、10(b) 和图 11(a)、11(b) 可以得到其相对阈值磁场  $h_{LL} \approx 2.0$ 。对于第 (III) 种情况的图 10(a) 和图 (c), 我们分别向  $y$  和  $z$  方向施加磁场同样可以实现双轴液晶分子短轴  $\mathbf{u}$  和长轴  $\mathbf{w}$  的转变, 它们的相对阈值磁场分别为  $h_{NM} \approx 2.2$  和  $h_{MN} \approx 2.2$  (阈值磁场的具体表达式见附录, 在这里这些情况的图像不再给出)。

## 4 结 论

用 Monte Carlo 方法研究了双轴向列相在磁场作用下的 Fréedericksz 转变, 这种方法无论是对实验还是理论都是有利的补充, 如果知道双轴向列相液晶参数的实际大小和两体势中参数的真实大小, 就可以模拟出液晶分子在磁场作用下真实的阈值磁场。本文分别讨论了 9 种不同的 Fréedericksz 转变并分别进行了计算机的模拟, 在满足我们假设的情况下, 根据相对磁场与真实磁场关系, 由模拟结果可以得到 9 个阈值磁场满足 (I)  $H_{NN} \approx H_{ML} \approx H_{LM}$ , (II)  $H_{MM} \approx H_{LN} \approx H_{NL}$ , (III)  $H_{LL} \approx H_{NM} \approx H_{MN}$ 。根据阈值磁场与弹性常数之间的关系 (见附录), 可以进一步得到 9 个体弹性常数满足 (I)  $K_{NN} \approx K_{ML} \approx K_{LM}$ , (II)  $K_{MM} \approx K_{LN} \approx K_{NL}$ , (III)  $K_{LL} \approx K_{NM} \approx K_{MN}$ , 即单一

弹性常数近似。

## 附录 连续体理论

双轴向列相通过 15 个弹性常数来描述: 分别为 12 个指向矢形变弹性常数和 3 个表面弹性常数<sup>[11-13]</sup>。弹性自由能密度由文献[11]给出:

$$F = \sum_{a,b,c} \frac{1}{2} [K_{aa} (a \cdot \nabla b \cdot c)^2 + K_{ab} (a \cdot \nabla a \cdot b)^2 + K_{ac} (a \cdot \nabla a \cdot c)^2] + C_{ab} (a \cdot \nabla a) (b \cdot \nabla b) + K_{0,a} \nabla (a \cdot \nabla a - a \nabla \cdot a) \quad (\text{A.1})$$

其中求和符号表示对 3 个指向矢依次求和。为方便起见分别用  $\mathbf{l}, \mathbf{m}$  和  $\mathbf{n}$  来表示 3 个指向矢, 假设 3 个指向矢的一致排列方式为 (见第 (I) 种情况的图 3(a)):

$$\mathbf{l} = (1, 0, 0); \mathbf{m} = (0, 1, 0); \mathbf{n} = (0, 0, 1) \quad (\text{A.2})$$

当一致排列的双轴向列相受到一个小扰动时, 指向矢可写成:

$$\mathbf{l} = (1, l_x, l_y); \mathbf{m} = (m_x, 1, m_z); \mathbf{n} = (n_x, n_y, 1) \quad (\text{A.3})$$

因为  $\mathbf{l}, \mathbf{m}, \mathbf{n}$  相互正交, 所以有

$$m_x = -l_y; n_y = -m_z; l_z = -n_x \quad (\text{A.4})$$

这样, 在等式 (A.3) 中仅有 3 个是独立变量, 根据文献[14]我们可以把弹性自由能密度公式写成如下形式:

$$g_b = \frac{1}{2} K_{LL} (n_{y,x})^2 + \frac{1}{2} K_{MM} (n_{x,y})^2 + \frac{1}{2} K_{NN} (l_{y,z})^2 + \frac{1}{2} K_{LM} (l_{y,x})^2 + \frac{1}{2} K_{MN} (n_{y,y})^2 +$$

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2}K_{NL}(n_{x,z})^2 + \frac{1}{2}K_{ML}(l_{y,y})^2 + \frac{1}{2}K_{NM}(n_{y,z})^2 + \\ & \frac{1}{2}K_{LN}(n_{x,x})^2 + C_{LM}n_{x,x}n_{y,y} - C_{MN}l_{y,y}n_{x,z} - \\ & C_{NL}n_{y,z}l_{y,x} - 2k_{0,a}(l_{y,z}n_{x,y} - l_{y,y}n_{x,z}) + \\ & 2k_{0,b}(l_{y,z}n_{y,x} - l_{y,x}n_{y,z}) + 2k_{0,c}(n_{x,y}n_{y,x} - n_{x,x}n_{y,y}) \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

其中  $L, M, N$  分别表示  $a, b, c$ 。

在有磁场作用的情况下,磁场自由能密度为:

$$F_H = \frac{1}{2}[\chi_l(H \cdot l)^2 + \chi_m(H \cdot m)^2 + \chi_n(H \cdot n)^2] \quad (\text{A.6})$$

如果  $H = (H_x, 0, 0)$ , 则可以得到:

$$F_H = -\frac{1}{2}[(\chi_m - \chi_l)H_x^2 l_y^2 + \chi_l H_x^2 + (\chi_n - \chi_l)H_x^2 n_x^2] \quad (\text{A.7})$$

液晶分子所受到的总的自由能密度为:

$$W = g_b + F_H, \quad (\text{A.8})$$

平衡态方程为:

$$\begin{aligned} & -K_{NN}l_{y,zz} - K_{LM}l_{y,xx} - K_{ML}l_{y,yy} + C_{MN}n_{x,yz} + \\ & C_{NL}m_{z,xx} - (\chi_m - \chi_l)H_x^2 l_y = 0, \\ & -K_{MM}m_{x,yy} - K_{NL}n_{x,zz} - K_{LN}n_{x,xx} + C_{LM}m_{z,xy} + \\ & C_{MN}l_{y,yz} - (\chi_n - \chi_l)H_x^2 n_y = 0, \\ & -K_{NN}l_{y,zz} - K_{LM}l_{y,xx} - K_{ML}l_{y,yy} + C_{MN}n_{x,yz} + \\ & C_{NL}m_{z,xx} - (\chi_m - \chi_l)H_x^2 l_y = 0. \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

为了得出与单轴相似的结论,我们首先将做出一些详细的假设<sup>[15]</sup>。考虑样本厚度为  $z = d$ , 并且液晶分子在  $z = d$  和  $z = 0$  处分别用两个外推层描述。如果  $\chi_m > \chi_l > \chi_n$  当向  $x$  轴施加磁场时,

## 参 考 文 献:

- [1] Freiser M J. Ordered states of a nematic liquid [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1970, 24(19):1041-1043.
- [2] Yu L J, Saupe A. Observation of a biaxial nematic phase in potassium laurate-1-decanol-water mixtures [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1980, 45(12):1000-1003.
- [3] Luckhurst G R. Biaxial nematic liquid crystals: Fact or fiction? [J]. *Thin Solid Films*, 2001, 393(1-2):40-52.
- [4] Berardi R, Muccioli L, Zannoni C. Field response and switching times in biaxial nematics [J]. *J. Chem. Phys.*, 2008, 128(2):024905.
- [5] Liu H. Theory of nine elastic constants of biaxial nematics [J]. *Chin. Phys. B*, 2008, 17(03):1060-1069.
- [6] Sonnet A M, Virga E G, Durand G E. Dielectric shape dispersion and biaxial transitions in nematic liquid crystal [J]. *Phys. Rev. E*, 2003, 67(6):061701.
- [7] Zhang Z D, Zhang D X, Sun Y B. Magnetic-field-induced weak order in bematic liquid crystal formed by biaxial molecules [J]. *Chin. Phys. Lett.*, 2000, 17(10):749-751.
- [8] Metropolis N, Rosenbluth A W, Rosenbluth M N, et al. Equation of State Calculations by Fast Computing Machines [J]. *J. Chem. Phys.*, 1953, 21(6):1087-1092.

因为  $\chi_l > \chi_n$ ,  $l$  将最先沿着  $x$  轴方向排列,随着磁场值的增大,当达到阈值磁场时将发生 Fréedericksz 转变。就像单轴相处理一样,我们假设扰动只依赖于  $z$  轴,那么等式(A.9)将化简为:

$$K_{NM}n_{y,zz} = 0,$$

$$K_{NL}l_{z,zz} + (\chi_n - \chi_l)H_x^2 l_z = 0, \quad (\text{A.10})$$

$$K_{NN}m_{x,zz} + (\chi_m - \chi_l)H_x^2 m_x = 0.$$

考虑到边界条件,可以得到关于  $m_x$  的阈值磁场:

$$H_{NN} = \frac{\pi}{d} \sqrt{\frac{K_{NN}}{\chi_m - \chi_l}} \quad (\text{A.11})$$

那么次指向矢  $m$  可以被驱动了,从而实现了次指向矢  $m$  和次指向矢  $l$  的转变。

同上,对于第(I)种情况的图 3(b)和图(c),

我们可以分别得到其阈值磁场为  $H_{LM} = \frac{\pi}{d} \sqrt{\frac{K_{LM}}{\chi_m - \chi_l}}$

和  $H_{ML} = \frac{\pi}{d} \sqrt{\frac{K_{ML}}{\chi_m - \chi_l}}$ ; 对于第(II)种情况的图 6

(a)、(b)和(c)分别对应的阈值磁场为  $H_{NL} =$

$\frac{\pi}{d} \sqrt{\frac{K_{NL}}{\chi_n - \chi_l}}$ ,  $H_{LN} = \frac{\pi}{d} \sqrt{\frac{K_{LN}}{\chi_n - \chi_l}}$ , 和  $H_{MM} =$

$\frac{\pi}{d} \sqrt{\frac{K_{MM}}{\chi_n - \chi_l}}$ ; 对于第(III)种情况的图 6(a)、(b)和

(c)分别对应的阈值磁场为  $H_{NM} = \frac{\pi}{d} \sqrt{\frac{K_{NM}}{\chi_n - \chi_m}}$ ,

$H_{LL} = \frac{\pi}{d} \sqrt{\frac{K_{LL}}{\chi_n - \chi_m}}$  和  $H_{MN} = \frac{\pi}{d} \sqrt{\frac{K_{MN}}{\chi_n - \chi_m}}$ 。



- [9] 杨培培, 刘红(小), 刘红. 双轴向列相液晶的 Monte Carlo 模拟 [J]. 计算物理, 2009, 26(4):597-602.
- [10] Bac C G, Peredez R, Vasquez C, *et al.* Three-dimensional rotational langevin dynamics and the lebwohl-lasher model [J]. *Phys. Rev. E*, 2001, 63(4 Pt 1):042701.
- [11] Saupe A. Elastic and flow properties of biaxial nematics [J]. *J. Chem. Phys.*, 1981, 75(10):5118-5124.
- [12] Brand H, Pleiner H. Number of elastic coefficients in a biaxial nematic liquid crystal [J]. *Phys. Rev. A*, 1982, 26: 1783-1784.
- [13] Govers E, Vertogen G. Elastic continuum theory of biaxial nematics [J]. *Phys. Rev. A*, 1984, 30(4):1998-2000.
- [14] Zhang Z D, Ye W J. The elastic distortion and stability of biaxial nematic liquid crystal on the surface grooves [J]. *Liq. Cryst.*, 2009, 36(8):885-888.
- [15] Kini U D, Chandrasekhar S. Elastic constants of a biaxial nematic liquid crystal [J]. *Physica A: Statistical and Theoretical Physics*, 1989, 156(1):364-375.

## 《发 光 学 报》

——EI 核心期刊 (物理学类; 无线电电子学、电信技术类)

《发光学报》是中国物理学会发光分会与中国科学院长春光学精密机械与物理研究所共同主办的中国物理学会发光分会的学术会刊。该刊是以发光学、凝聚态物质中的激发过程为专业方向的综合性学术刊物。

《发光学报》于 1980 年创刊, 曾于 1992 年, 1996 年, 2000 年和 2004 年连续四次被《中文核心期刊要目总览》评为“物理学类核心期刊”, 并于 2000 年同时被评为“无线电电子学、电信技术类核心期刊”。2000 年获中国科学院优秀期刊二等奖。现已被《中国学术期刊(光盘版)》、《中国期刊网》和“万方数据资源系统”等列为源期刊。英国《科学文摘》(SA)自 1999 年; 美国《化学文摘》(CA)和俄罗斯《文摘杂志》(AJ)自 2000 年; 美国《剑桥科学文摘社网站》自 2002 年; 日本《科技文献速报》(CBST, JICST)自 2003 年已定期收录检索该刊论文; 2008 年被荷兰“Elsevier Bibliographic Databases”确定为源期刊; 2010 年被美国“EI”确定为源期刊。2001 年在国家科技部组织的“中国期刊方阵”的评定中, 《发光学报》被评为“双效期刊”。2002 年获中国科学院 2001~2002 年度科学出版基金“择重”资助。2004 年被选入《中国知识资源总库·中国科技精品库》。本刊内容丰富、信息量大, 主要反映本学科专业领域的科研和技术成就, 及时报道国内外的学术动态, 开展学术讨论和交流, 为提高我国该学科的学术水平服务。

《发光学报》自 2011 年改为月刊, A4 开本, 144 页, 国内外公开发行。国内定价: 40 元, 全年 480 元, 全国各地邮局均可订阅。《发光学报》欢迎广大作者、读者广为利用, 踊跃投稿。

地 址: 长春市东南湖大路 3888 号

《发光学报》编辑部

邮 编: 130033

电 话: (0431)86176862, 84613407

E-mail: fgxbt@126.com

国内统一刊号: CN 22-1116/O4

国际标准刊号: ISSN 1000-7032

国内邮发代号: 12-312

国外发行代号: 4863BM

http://www.fgxb.org