

双轴向列相液晶在外场中的周期性形变

章其林, 刘 红

(南京师范大学物理科学与技术学院, 江苏 南京 210097)

[摘要] 利用双轴向列相液晶的弹性能公式, 研究在外场中双轴向列相液晶的周期性形变. 利用数值计算得到外场阈值与系统弹性系数间的关系, 并得到发生周期性形变的系统弹性系数间所满足的解析关系. 结果表明在给定的 Saupé 弹性系数 C_{bc}^2/K_{ba} , K_{cc}/K_{ba} 下, 发生周期性形变的 K_{bb}/K_{ba} 值必须小于某一临界值 k_c . 当 C_{bc}^2/K_{ba} 值增加, k_c 值增加, 当 K_{cc}/K_{ba} 减少, k_c 增加. 这里 K_{bb}/K_{cc} 分别为指向矢 a , c 绕 b , a , b 绕 c 的扭曲弹性系数, K_{ba} 是 a 展曲、 b 弯曲的耦合系数, C_{bc} 是 b , c 弯曲的耦合弹性系数.

[关键词] 双轴向列相液晶, 周期性形变, 弹性系数

[中图分类号] O 753⁺. 2 [文献标识码] A [文章编号] 1001-4616(2007) 02-0047-04

Periodic Distortion of Biaxial Nematics Liquid Crystal Induced by External Magnetic Field

Zhang Qilin, Liu Hong

(School of Physical Science and Technology, Nanjing Normal University, Nanjing 210097, China)

Abstract The elastic theory of biaxial nematics was used to study the periodic distortion in an external field. Numerical results of threshold field are obtained for given elastic constants, and an analytic relation among elastic constants for the system where a periodic distortion can occur is derived. Results show that for these systems, at given values of Saupé's elastic constants C_{bc}^2/K_{ba} , K_{cc}/K_{ba} , K_{bb}/K_{ba} must be smaller than a critical value k_c . When C_{bc}^2/K_{ba} increases, k_c increases; when K_{cc}/K_{ba} decreases, k_c increases. Here, K_{bb}/K_{cc} are the twist elastic constants of directors a , c around b , a , b around c respectively. K_{ba} is coupled constant of a splay, b bend. C_{bc} is a coupled elastic term for b , c bend.

Key words biaxial nematic liquid crystal, periodic distortion, elastic constants

0 引言

单轴向列相液晶在外场中可发生静态展曲 Fredericks 转变^[1]. 考虑在两平行板间的液晶, 上下表面指向矢水平锚泊, 在垂直于表面的方向 (z 方向) 加一外场. 当外场强度增加且超过某一临界值, 指向矢偏离 xy 平面, 产生 Fredericksz 转变. 由于其夹角与 x , y 无关, 此形变被称为均匀形变. 理论计算和实验^[2-5] 表明, 当弹性系数满足一定条件时, 系统不产生均匀形变, 而进入周期性形变. 在此形变中, 指向矢的极角和方位角沿表面某一方向周期性变化. Lonberg 等^[2] 指出此形变的产生是由于扭曲弹性系数与展曲弹性系数比 K_{22}/K_{11} 较小 ($K_{22}/K_{11} < 0.303$). 当展曲形变发生时, 由于展曲形变能较大, 指向矢绕 z 轴发生扭曲形变, 形成沿水平方向某一轴的周期性形变. 自从 Saupé^[6] 等在溶致液晶中发现双轴相液晶以来, 人们一直在寻找和研究双轴相液晶的性质. 实验发现^[7], 与单轴相相同, 在外场中双轴相可出现动态周期性形变. 理论推导表明^[7] 双轴相指向矢所满足的动力学方程与单轴相相同. 文献 [2-5] 指出在单轴相中, 静态周期性形变与液晶的弹性系数有关. 本文将上述单轴相静态形变推广到双轴相中, 讨论形变产生的条件与液晶弹性系数间的关系. 计算结果表明在由 Landau 理论导出的双轴相弹性系数下, 发生周期性形变的条件

收稿日期: 2006-07-19 修回日期: 2006-09-20

作者简介: 章其林 (1982-), 硕士研究生, 主要从事理论物理的学习与研究. E-mail: asdzhangqilin@tom.com

通讯联系人: 刘 红 (1958-), 女, 教授, 主要从事凝聚态物理的教学与研究. E-mail: liuhong@njnu.edu.cn

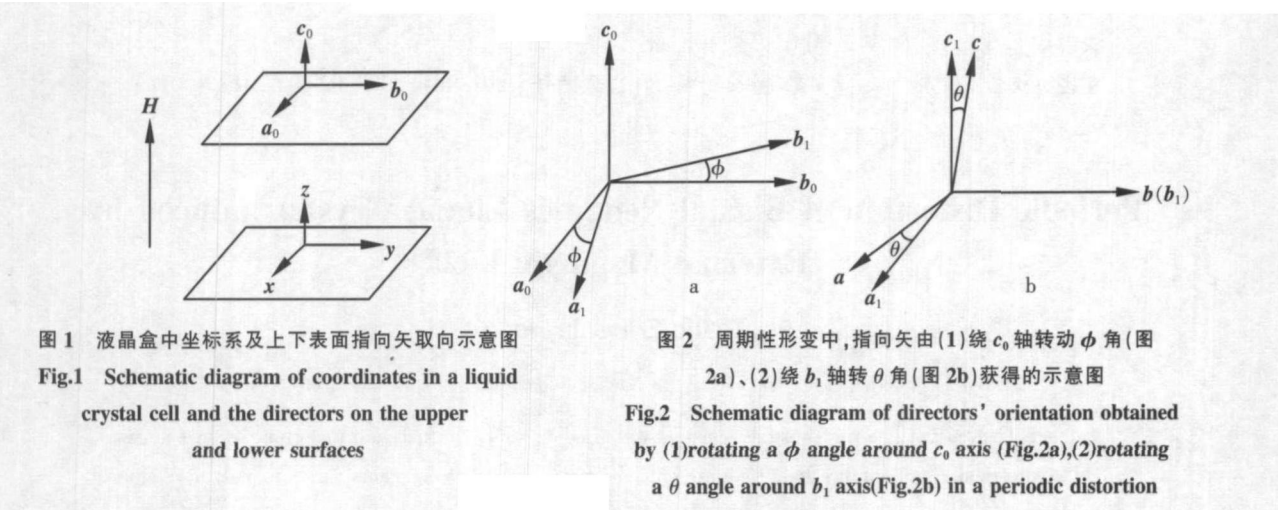
与单轴相完全相同. 在由 Saup^e理论给出的弹性系数下, 周期性形变与弹性系数 K_{bb} 、 K_{ba} 、 C_{bc}^2 、 K_{ba} 、 K_{cc} 、 K_{ba} 有关, 其中 K_{bb} 是双轴相指向矢 a 、 c 绕 b 的扭曲弹性系数, K_{cc} 是 a 、 b 绕 c 的扭曲弹性系数, K_{ba} 是 a 展曲、 b 弯曲的耦合系数, C_{bc} 是 b 、 c 弯曲的耦合系数.

1 理论推导

考虑如图 1所示的液晶盒. 双轴向列相液晶指向矢在上下平板表面取向如图, 分别由 a_0 、 b_0 、 c_0 (即易取向轴) 表示. 取坐标系 $x = a_0$, $y = b_0$, $z = c_0$. 当沿 z 轴加上外场后, 指向矢 a 、 b 、 c 的取向可由图 2中方位角 ϕ 、极角 θ 表示:

$$\begin{aligned} a &= a_0 \cos \theta \cos \phi + b_0 \cos \theta \sin \phi + c_0 \sin \theta \\ b &= -a_0 \sin \phi + b_0 \cos \phi \\ c &= -a_0 \sin \theta \cos \phi - b_0 \sin \theta \sin \theta + c_0 \cos \theta \end{aligned}$$

(1)



为明确起见, 假设 a 为双轴向列相液晶主要优先取向, b 为次优先取向. 当双轴性减弱并消失, 系统就进入沿 a 的单轴相.

Saup^e给出双轴向列相液晶弹性自由能密度为^[6]:

$$\begin{aligned} f = \sum_a \frac{1}{2} \{ &K_{aa} [c \cdot (a \cdot \nabla b)]^2 + K_{ab} [b \cdot (a \cdot \nabla a)]^2 + K_{ac} [c \cdot (a \cdot \nabla a)]^2 \\ &+ 2C_{ab} (a \times \nabla \times a) \cdot (b \times \nabla \times b) \}, \end{aligned}$$

(2)

其中对 a 求和是对 a 、 b 、 c 进行 3 次循环置换. K_{aa} 、 K_{bb} 、 K_{cc} 项分别为 b 和 c 绕 a 、 c 和 a 绕 b 、 a 和 b 绕 c 的扭曲形变, K_{ab} 、 K_{bc} 、 K_{ca} 、 K_{ac} 、 K_{ba} 、 K_{cb} 项对应 6 个简单形变模式^[8].

在外场 H 中液晶自由能密度为 $F_m = - \int \mathbf{M} \cdot \mathbf{H}^{[1]}$, 利用在指向矢坐标系中磁化强度 $\mathbf{M} = \chi_{aa} H_a \mathbf{a} + \chi_{bb} H_b \mathbf{b} + \chi_{cc} H_c \mathbf{c}$ 和 (1) 式指向矢 a 、 b 、 c 的取向可得在小角度近似下 (θ 、 $\phi \ll 1$) 液晶与外场的相互作用能体密度为 $-\Delta H^2 \theta^2 / 2$ 其中 $\Delta \chi = \chi_{aa} - \chi_{cc}$ 为磁化率各向异性.

将 (1) 式代入 (2) 式, 并利用小角度近似, 可得液晶体弹性能密度为

$$f = \frac{1}{2} K_{bb} \theta_y^2 + \frac{1}{2} K_{cc} \phi_z^2 + \frac{1}{2} K_{ca} \theta_z^2 + \frac{1}{2} K_{ba} \phi_y^2 + C_{bc} \phi_y \theta_z - \frac{1}{2} \Delta H^2 \theta^2.$$

(3)

利用变分原理, 可得在平衡态下体弹性能密度 $f(\theta$ 、 ϕ 、 θ_y 、 ϕ_y 、 θ_z 、 $\phi_z)$ 所满足的欧拉 - 拉格朗日方程为:

$$\begin{aligned} K_{bb} \theta_{yy} + K_{ca} \theta_{zz} + C_{bc} \phi_{yz} + \Delta H^2 \theta &= 0 \\ K_{ba} \phi_{yy} + C_{bc} \theta_{yz} + K_{cc} \phi_{zz} &= 0 \end{aligned}$$

(4)

将 (4) 式无量纲化, 令 $\eta = y/d$, $\zeta = z/d$, $k_{bb} = K_{bb} / K_{ca}$, $k_{ba} = K_{ba} / K_{ca}$, $k_{cc} = K_{cc} / K_{ca}$, $c_{bc} = C_{bc} / K_{ca}$, $h^2 = \Delta H^2 d^2 / K_{ca}$, 得

$$\begin{aligned} \theta_{\zeta\zeta} + k_{bb} \theta_{\eta\eta} + c_{bc} \phi_{\eta\zeta} + h^2 \theta &= 0 \\ k_{cc} \phi_{\zeta\zeta} + k_{ba} \phi_{\eta\eta} + c_{bc} \theta_{\zeta\eta} &= 0 \end{aligned}$$

(5)

由于 a 为双轴相主要优先取向, 在周期性形变中, θ 随 η 方向周期性变化. 令

$$\theta = f(\zeta) \cos(p\eta), \quad \phi = g(\zeta) \sin(p\eta),$$

代入 (5) 式, 有

$$\begin{aligned} f'' + c_{bc} p g' - k_{bb} p^2 f + h^2 f &= 0 \\ k_{cc} g'' - c_{bc} p f' - k_{ba} p^2 g &= 0 \end{aligned} \quad (6)$$

设试探解为 $f = A_1 \operatorname{ch}(q_1 \zeta) + A_2 \cos(q_2 \zeta)$, $g = A_1 B_1 \operatorname{sh}(q_1 \zeta) + A_2 B_2 \sin(q_2 \zeta)$, 将其代入 (6) 式, 考虑到在边界上 $\theta|_{\zeta=\pm 1} = 0$, $\phi|_{\zeta=\pm 1} = 0$ 得到 q_1 , q_2 和 h^2 所满足的方程为:

$$\begin{aligned} k_{cc} q_1^4 + (h^2 k_{cc} - k_{ba} p^2 - k_{bb} k_{cc} p^2 + c_{bc}^2 p^2) q_1^2 + k_{ba} k_{bb} p^4 - h^2 k_{ba} p^2 &= 0 \\ k_{cc} q_2^4 + (k_{bb} k_{cc} p^2 + k_{ba} p^2 - h^2 k_{cc} - p^2 c_{bc}^2) q_2^2 + k_{bb} k_{ba} p^4 - h^2 k_{ba} p^2 &= 0 \\ -\frac{q_1 (k_{ba} p^2 + k_{cc} q_2^2)}{q_2 (k_{ba} p^2 - k_{cc} q_1^2)} &= \frac{\tan(q_2)}{\operatorname{th}(q_1)}, \end{aligned} \quad (7)$$

由此可解出 h^2 随波数 p 、弹性系数 k_{bb} , k_{ba} , k_{cc} , c_{bc} 的变化函数.

2 结果与讨论

式 (7) 表明 h^2 为波数 p 、弹性系数 k_{bb} , k_{ba} , k_{cc} , c_{bc} 的函数. 在 Saupé 理论中, 这 4 个弹性系数彼此独立. 为简化问题的讨论, 本文考虑利用 Landau 理论所得出的弹性系数公式^[8]:

$$\begin{aligned} K_{bb} &= 2L_1 / (2L_1 + L_2), \\ K_{ba} &= \left[\frac{3S - P}{3S + P} \right]^2, \\ C_{bc} &= \frac{L_2}{2L_1 + L_2} \left[\frac{3S - P}{3S + P} \right], \\ K_{cc} &= \frac{L_2}{2L_1 + L_2} \left[\frac{3S - P}{3S + P} \right]^2, \end{aligned} \quad (8)$$

其中 L_1 , L_2 为 Landau 理论中所用的两独立系数, S , P 为单、双轴相序参数. 根据 (8) 式, 令 $k_{bb} \equiv k$ 有 $c_{bc}^2 = (1 - k)k_{ba}$, $k_{cc} = k k_{ba}$. 将此代入 (7) 式, 得到 h^2 为 k 和 p 的函数, 与单轴相所得公式完全相同^[2].

由于在一般情况下, 弹性系数 k_{bb} , k_{ba} , k_{cc} , c_{bc} 应彼此独立, 本文将 Landau 理论所得的弹性系数做一推广, 即假设 $c_{bc}^2 = (1 - k)k_{ba} \sigma_1$, $k_{cc} = k k_{ba} \sigma_2$. 将其代入 (7) 式, 推导表明外场 h^2 与 k_{ba} 无关, 是 k , σ_1 , σ_2 , p 的函数.

图 3 为在给定 k 和参数 $\sigma_1 = \sigma_2 = 1$ 情况下, $h^2(p)$ 的函数曲线. 图中 $k = 0.29$ 所对应的曲线在 $p \equiv p_0 = 0.5$ 处有一极小值. 此极小值对应的外场 h_{\min}^2 (由此可求出 H_{\min}) 即为发生周期性形变的外场阈值 h_p^2 . 随着 k 的增加, h_{\min}^2 所在处 p_0 值减少, 当 k 等于临界值 $k_c \approx 0.30$, $p_0 = 0$ 这对应均匀形变, 此时相变阈值 $h_p^2 = h_F^2$, 即 Freedericksz 转变阈值. 当 $k > k_c$ 时, 增加外场并不能使系统进入周期性形变, 这表明周期性形变的产生与弹性系数取值有关. 根据文献 [8], 弹性系数 K_{bb} 为指向矢 c 和 a 绕 b 的扭曲弹性系数, K_{ca} 为 c 弯曲、 a 展曲弹性系数. 当 $K_{ca} > 3.3 K_{bb}$, 即 K_{ca} 远大于 K_{bb} , a 展曲能太大, 指向矢 a 转而绕 b 扭曲而产生周期性形变.

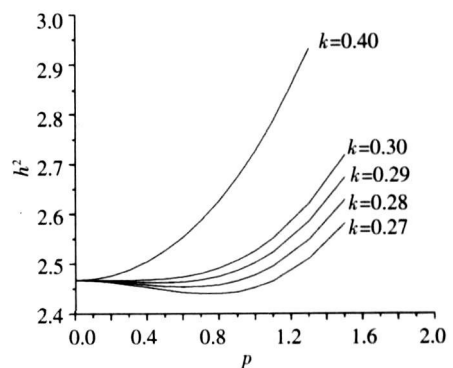


图 3 外场 h^2 随周期性形变波数 p 变化的函数

Fig.3 The external field function h^2 versus wave number p

图 4 给出在不同的 σ_1 值下, k_{cc}/k_{ba} 随临界值 k_c 的变化. 由文献 [8], K_{cc} 为指向矢 a , b 绕 c 的扭曲形变系数. 由于周期性形变是因指向矢 a 逃逸展曲, c 逃逸弯曲, 进入扭曲 (包括 a , c 绕 b 扭曲和 a , b 绕 c 扭曲) 所产生的, 当增加 k_c 值, 即 K_{bb} 增加, a , c 绕 b 扭曲弹性能增加, 这时需要降低 K_{cc} 值, 即降低 a , b 绕 c 扭曲弹性能, 才可产生周期性形变.

图 5 给出在不同的 σ_2 值下, c_{bc}^2/k_{ba} 随临界值 k_c 的变化. 由文献 [7], C_{bc} 为指向矢 b 和 c 弯曲变形的耦合系数. 由于在外场中, a 发生展曲, 随之有 b 和 c 弯曲的耦合, 因此 C_{bc} 增加, 使得由 a 展曲产生的 b 和 c 弯曲形变耦合的弹性能增加, 这时系统要逃逸至周期性形变. C_{bc} 值越大, 产生周期性形变的临界值 k_c 就相应的提高.

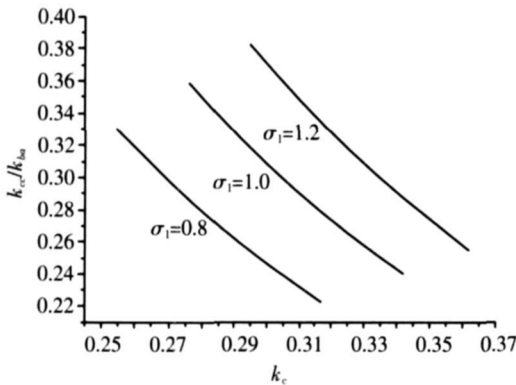


图 4 在 σ_1 给定时, 周期性形变临界值 k_c 与弹性系数 k_{ca}/k_{ba} 的关系曲线

Fig.4 The curve of periodic distortion critical value k_c as a function of elastic constant k_{ca}/k_{ba} at given value of σ_1

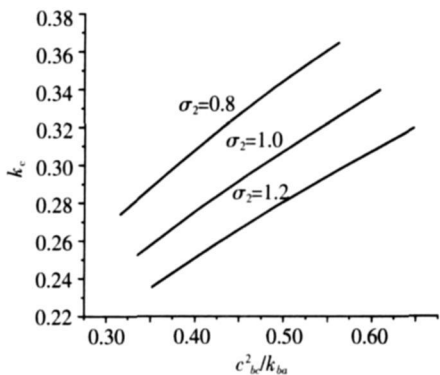


图 5 在 σ_2 给定时, 周期性形变临界值 k_c 与弹性系数 c_{bc}^2/k_{ba} 的关系曲线

Fig.5 The curve of periodic distortion critical value k_c as a function of elastic constant c_{bc}^2/k_{ba} at given value of σ_2

3 结语

在单轴相, 由于弯曲弹性系数与展曲弹性系数的比值 (K_{11}/K_{22}) 较大, 系统在外场中可发生周期性形变. 在双轴相, 产生周期性形变的条件亦与弹性系数有关. 在 Landau 理论给出的双轴相弹性系数下, 双轴相发生周期性形变的条件与单轴相完全相同, 即出现周期性形变的弹性系数临界值 $(K_{bb}/K_{aa})_c \equiv k_c \approx 0.30$ 当 $k < k_c$ 系统出现周期性形变. 在一般情况下, 本文数值计算了周期性形变弹性系数临界值 k_c 与其余弹性系数 c_{bc}^2/k_{ba} 和 k_{cc}/k_{ba} 间的关系. 计算表明当 k_{cc}/k_{ba} 增加, k_c 减小, 即系统必须在较小的 k 值 ($k < k_c$) 下, 才可出现周期性形变. 当 c_{bc}^2/k_{ba} 增加, k_c 也增加, 这表明系统可在较大的 k 值或较大的范围内 ($k < k_c$) 即可出现周期性形变.

[参考文献]

[1] de Gennes P G, Prost J. The Physics of Liquid Crystal[M]. Oxford Clarendon Press, 1993

[2] Lonberg F, Meyer R B. New ground state for the splay-Fredericksz transition in a polymer nematic liquid crystal[J]. Phys Rev L, 1985, 55(7): 718-721.

[3] K i n i U D. Effect of weak anchoring on the generalized Fredericksz transition in nematics[J]. Phsique, 1986, 47(4): 1829-1842

[4] Barbero G, Evangelista L R, Lelidis I. Spontaneous periodic distortions in nematic liquid crystals: Dependence on the tilt angle [J]. Phys Rev E, 2003, 67(5): 051708-1-051708-4.

[5] Miraldi E, Olano C, Strigazzi A. Periodic Fredericksz transition for nematic liquid-crystal cells with weak anchoring[J]. Phys Rev A, 1986, 34(5): 4348-4352.

[6] Saupe A. Elastic and flow properties of biaxial nematics[J]. J Chem Phys, 1981, 75(10): 5118-5124.

[7] Palangana A J, Simoes M, dos Santos O R, et al. Periodic structures in a biaxial nematic phase[J]. Phys Rev E, 2003, 67(3): 030701-1-030701-4.

[8] 刘红. 弹性形变对丝状相液晶相变的影响 [J]. 物理学报, 2000, 49(5): 931-935.

[责任编辑: 丁 蓉]