

文章编号:1007-2780(2009)03-0333-07

双轴向列相液晶中 Landau 点的确定

李 策, 郑桂丽, 张志东

(河北工业大学 理学院, 天津 300401, E-mail: licehao@163.com)

摘 要: 引入双轴向列相液晶分子模型, 采用分叉理论和二粒子集团理论来确定双轴向列相液晶中的 Landau 点, 分别得出了液晶各向同性相向单轴向列相转变对分子双轴性参数的依赖曲线。在 Landau 点处, 分叉理论、二粒子集团理论和平均场理论得到的分子双轴性参数 λ 取值是相同的, 而约化温度 t 的取值不同, 由二粒子集团理论得到的约化温度值更为精确。二粒子集团理论考虑了近邻分子间的短程关联, 由此可知在双轴向列相液晶的研究中考虑近邻分子间的短程关联是非常必要的。

关 键 词: 双轴向列相; Landau 点; 分叉理论; 二粒子集团理论

中图分类号: O753⁺.2 **文献标识码:** A

1 引 言

早在 1980 年, 人们就在溶致液晶中发现了双轴向列相^[1], 并对此进行了探讨^[2]。2004 年, Madsen 等人在热致液晶中发现了双轴向列相^[3], 这一发现引起了人们的极大关注, 由此可能会使液晶的研究进入新的领域, 例如在多极介质下的新液晶态等^[4]。

双轴向列相的稳定性依赖于液晶分子本身的双轴特性(通常可以使用一个参数来描写, 并称之为双轴性参数)。在分子双轴性最大的一点上, 最有可能出现双轴向列相。该点在双轴性参数-温度二维相图上, 位于双轴向列相-单轴向列相 N(+) - 单轴向列相 N(-) - 各向同性相的交汇处, 称为 Landau 点。在研究双轴向列相, 特别是寻找双轴向列相材料时, 总是努力使分子本身具有尽可能大的双轴性, 因此人们对 Landau 点特别关注, 并产生了专门用来确定 Landau 点的分叉理论, Kaser 和 Raveché^[5] 将分叉理论方法引入到液晶取向的有序-无序转变之中。本文将利用分叉理论来研究各向同性相的稳定性, 即研究各向同性相向单轴向列相和双轴向列相的转变, 并且求出双轴向列相中的 Landau 点。

Maier 和 Saupe^[6] 基于各向异性色散力建立了

向列型液晶的分子场理论。他们假定液晶分子具有轴对称性, 这一假定大幅简化了实验分析和理论处理。然而, 向列型液晶的有关实验表明, 分子取向两体势并不具有这样高的对称性^[7,8]。Luckhurst 等人^[9] 提出了通过色散力作用的双轴分子系统的分子场理论, 但这一理论和后来发展的双轴分子系统的统计理论^[10,11] 都忽略了分子短程关联。

集团变分理论是一种新的分子统计理论, 这一理论主要以液体统计理论为基础, 其中所用的数学方法可以追溯到合作现象理论。在最低级近似, 即单体近似下, 集团变分理论回到平均场近似; 在高一级近似下, 集团变分理论给出的是二粒子集团理论。在二粒子集团近似下, 本文考虑了两两邻近分子间的短程关联, 不用任何函数展开, 通过迭代方法求解平衡态方程, 得到精确的取向分布函数^[12]。文中将利用二粒子集团理论求出各向同性相向单轴向列相的转变曲线以及双轴向列相中的 Landau 点。

2 分叉理论方法

图 1 为刘红等^[13] 提出的双轴向列相液晶分子的示意图。其中 l, m, n 表示双轴分子沿 3 个相互垂直方向的单位矢量, l, m, n 为沿 l, m, n 的棒长。下面的研究均以该双轴向列相液晶分子模型为基础。

根据刘红等人的研究^[13],本文采用如下两体势形式:

$$V_{12} = -\nu_{l_1 l_2} P_2(\cos\theta_{l_1 l_2}) - \nu_{l_1 m_2} P_2(\cos\theta_{l_1 m_2}) - \nu_{l_1 n_2} P_2(\cos\theta_{l_1 n_2}) - \nu_{m_1 l_2} P_2(\cos\theta_{m_1 l_2}) - \nu_{m_1 m_2} P_2(\cos\theta_{m_1 m_2}) - \nu_{m_1 n_2} P_2(\cos\theta_{m_1 n_2}) - \nu_{n_1 l_2} P_2(\cos\theta_{n_1 l_2}) - \nu_{n_1 m_2} P_2(\cos\theta_{n_1 m_2}) - \nu_{n_1 n_2} P_2(\cos\theta_{n_1 n_2}) \quad (1)$$

其中

$$\begin{aligned} \nu_{l_1 l_2} &= \frac{\kappa l^2}{N}, \nu_{m_1 m_2} = \frac{\kappa m^2}{N}, \nu_{n_1 n_2} = \frac{\kappa n^2}{N}, \\ \nu_{l_1 m_2} &= \nu_{m_1 l_2} = \frac{\kappa lm}{N}, \nu_{l_1 n_2} = \nu_{n_1 l_2} = \frac{\kappa nl}{N}, \\ \nu_{m_1 n_2} &= \nu_{n_1 m_2} = \frac{\kappa mn}{N} \end{aligned} \quad (2)$$

P_2 为二阶勒让德多项式, κ 为比例系数。

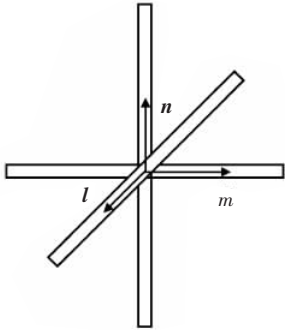


图 1 三维刚性液晶分子示意图。 l, m, n 为沿 3 个相互垂直方向的单位矢量, l, m, n 为沿 l, m, n 的棒长。

Fig. 1 Diagrammatic sketch of three-dimensional rigid liquid crystal molecular. l, m, n are unit vectors across three orthogonal directions, l, m, n are the rod lengths along the directions of l, m, n .

设两个液晶分子 1,2。分子 1,2 的两体势 V_{12} 只与两分子的相对位形有关。将液晶分子 1 固定,则分子 2(位形为 l_2, m_2, n_2)与分子 1(位形为 l_1, m_1, n_1)的相对位形可以用欧勒角 $\Omega = (\alpha, \beta, \gamma)$ 表示:

$$\begin{bmatrix} l_2 \\ m_2 \\ n_2 \end{bmatrix} = R(\alpha, \beta, \gamma) \begin{bmatrix} l_1 \\ m_1 \\ n_1 \end{bmatrix} \quad (3)$$

其中 $R(\alpha, \beta, \gamma)$ 为转动矩阵。附录式(A3)给出用欧勒角描写的两体作用势形式。

按照 Bela Mulder 提出的分叉理论,相互作用势 $K(\tilde{\Omega})$ 按照 $\Delta_{m,n}^{(l)}(\tilde{\Omega})$ 展开的表达式为[本文中 $K(\tilde{\Omega}) = V_{12}(\tilde{\Omega})$]:

$$K(\tilde{\Omega}) = \sum_{l,m,n} \frac{(2l+1)}{8\pi^2} K_{l,mm} \Delta_{m,n}^{(l)}(\tilde{\Omega}) \quad (4)$$

这里只考虑 $l=2$ 时的情况。此时对应的 $m, n = \{0, 2\}$ 。

$l=2$ 时, 4 个取向函数的具体表达式为^[14]:

$$\begin{cases} \Delta_{0,0}^{(2)}(\Omega) = \frac{1}{2}(3\cos^2\beta - 1) \\ \Delta_{0,2}^{(2)}(\Omega) = \frac{1}{2}\sqrt{3}\sin^2\beta\cos 2\gamma \\ \Delta_{2,0}^{(2)}(\Omega) = \frac{1}{2}\sqrt{3}\sin^2\beta\cos 2\alpha \\ \Delta_{2,2}^{(2)}(\Omega) = \frac{1}{2}(1 + \cos^2\beta)\cos 2\alpha\cos 2\gamma - \cos\beta\sin 2\alpha\sin 2\gamma \end{cases} \quad (5)$$

求出对应的系数 $K_{l,mm}$ 表达式为:

$$K_{2,00} = \int K(\tilde{\Omega}) \Delta_{0,0}^{(2)}(\tilde{\Omega}) d\tilde{\Omega} = \frac{2\kappa\pi^2}{5N}(-l^2 - m^2 - 4n^2 - 2lm + 4nl + 4mn) \quad (6)$$

$$K_{2,02} = K_{2,20} = \int K(\tilde{\Omega}) \Delta_{0,2}^{(2)}(\tilde{\Omega}) d\tilde{\Omega} = \frac{2\sqrt{3}\kappa\pi^2}{5N}(l^2 - m^2 - 2nl + 2mn) \quad (7)$$

$$K_{2,22} = \int K(\tilde{\Omega}) \Delta_{2,2}^{(2)}(\tilde{\Omega}) d\tilde{\Omega} = \frac{6\kappa\pi^2}{5N}(2lm - l^2 - m^2) \quad (8)$$

由分叉理论可知, $N(+)$ (棒状分子)与 $N(-)$ (盘状分子)交叉部分满足以下两个式子:

$$K_{2,02} = 0, K_{2,00} - K_{2,22} > 0 \quad (9)$$

$$K_{2,00} - K_{2,22} = \frac{-|K_{2,02}|}{\frac{1}{2}\sqrt{3}} \quad (10)$$

将上面求出的 4 个系数分别代入式(9)、式(10)可得:

$$l + m = 2n, \text{ 且 } \frac{l}{n} \cdot \frac{m}{n} < 1 \quad (11)$$

$$\begin{cases} m + n = 2l \\ l + n = 2m \end{cases} \quad (12)$$

将式(11)、(12) 画图得到图 2。

将玻尔兹曼常数记为 k , 相变点处约化温度的倒数记为 G_0 。由文献[14]可知, 约化温度为 kT , 此时 $G_0 = \frac{1}{kT}$, 分叉点由以下方程给出:

$$G_0 = -\frac{8\pi^2}{k_*} \quad (13)$$

其中:

$$k_* = \frac{1}{2}(K_{2,00} + K_{2,22}) - \frac{1}{2}[(K_{2,00} - K_{2,22})^2 + 4K_{2,02}^2]^{\frac{1}{2}} \quad (14)$$

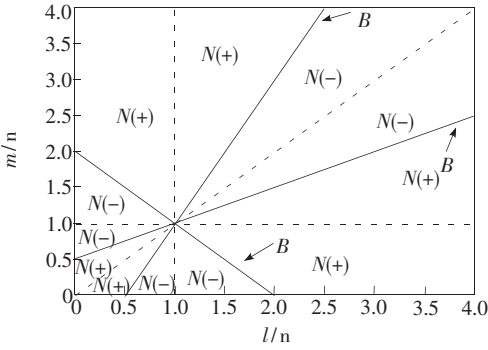


图 2 在长度 n 固定时,随着 m, l 的变化, $N(+), N(-)$ 相之间的转变. 其中实线为双轴向列相 B, 虚线为单轴对称系统.

Fig. 2 Transition between $N(+)$ phase and $N(-)$ phase as a function of the length m and length l at fixed length n . Solid lines; biaxial nematic liquid crystals B; dash lines; uniaxially symmetry systems.

令系统的约化温度为 $t^{[13]}$,

$$t = \frac{4NkT}{\kappa(2n - l - m)^2} \quad (15)$$

在约化温度 t 下决定分叉点的方程为:

$$G_0 = -\frac{8\pi^2}{k_*} = \frac{5}{1 + 3\lambda^2} \quad (16)$$

式(16)中 λ 为与分子非轴对称性有关的结构参数,即双轴性参数,其表达式为:

$$\lambda = \frac{l - m}{3(n - \bar{n})} \quad (17)$$

其中 $\bar{n} = (l + m + n)/3$ 为棒长的平均值.

式(10) 给出分叉点:

$$\lambda = \frac{1}{3} \text{ 和 } \lambda = -\frac{1}{3} \quad (18)$$

由上式可知,在从液晶的各向同性相开始研究的分叉理论中, $N(+), N(-)$ 交叉部分(即双轴向列相)满足式(18), 即当 $\lambda = \frac{1}{3}$ 和 $\lambda = -\frac{1}{3}$ 时, $I, N(+)$ 与 $N(-)$ 三相交于一点(Landau 点)。这里所研究的 λ 取值范围为 $(0, 1)$, 所以取 $\lambda = \frac{1}{3}$ 。

即当 $\lambda = \frac{1}{3}$ 时, $I, N(+)$ 与 $N(-)$ 三相交于一点(Landau 点), 此时 $G_0 = \frac{15}{4}$ 。

通过式(16) 可以利用分叉理论得到向列相液晶在分子双轴性参数 λ -约化温度 t 平面内的相图, 如图 3 所示。

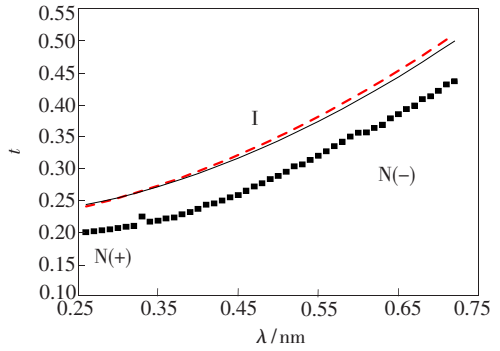


图 3 向列相液晶在分子双轴性参数 λ , 约化温度 t 平面内的相图. 实线: 平均场理论; 虚线: 分叉理论; 方块: 二粒子集团理论.

Fig. 3 Phase diagram of nematic liquid crystals on the basis of molecular biaxial parameter λ vs. the reduced temperature. Solid line; mean field theory; dash line; bifurcation theory; squares; two-particle cluster theory

3 二粒子集团理论方法

考虑一个由 N 个液晶分子组成的系统。引入 3 个欧勒角 α, β 和 γ , 并用 $\Omega = (\alpha, \beta, \gamma)$ 来描述液晶分子的取向。 Ω_1, Ω_2 分别为分子 1 和分子 2 的取向。把单体分布函数和两体分布函数分别定义为 $g(\Omega_1)$ 和 $g(\Omega_1, \Omega_2)$, 它们满足如下条件:

$$\int g(\Omega_1) d\Omega_1 = 1 \quad (19)$$

$$\int g(\Omega_1, \Omega_2) d\Omega_2 = g(\Omega_1) \quad (20)$$

这里 $d\Omega = \sin\beta d\alpha d\beta d\gamma$, 积分区域为:

$$0 \leq \alpha \leq 2\pi, 0 \leq \beta \leq \pi, 0 \leq \gamma \leq 2\pi$$

两体势模型同样采用文献[13]中的形式, V_{12} 的表达式由式(1)、(2)给出。在附录中, V_{12} 表示为分子双轴性参数 λ 的函数, 并在实验室坐标系中写出。由于在形式上它是两分子取向 Ω_1 和 Ω_2 的显函数, 所以记 $V_{12} \equiv V(\Omega_1, \Omega_2)$ 。

根据二粒子集团理论, 系统的自由能^[12, 15] 表示为:

$$F = \frac{1}{2} N \iint \{ zV(\Omega_1, \Omega_2) + zkT \ln g(\Omega_1, \Omega_2) - (z-1)kT \ln g(\Omega_1)g(\Omega_2) \} g(\Omega_1, \Omega_2) d\Omega_1 d\Omega_2 \quad (21)$$

其中 z 为最近邻粒子数, k 为玻尔兹曼常数。上式在式(19)和式(20)的条件约束下求变分, 得到

分子取向分布函数所满足的平衡态方程：

$$zV(\Omega_1,\Omega_2)+zkT\ln g(\Omega_1,\Omega_2)-$$
$$(z-1)kT\ln g(\Omega_1)g(\Omega_2)-\eta=0\quad (22)$$

这里 η 是变分参数,式(22) 可以改写为如下等价形式：

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

$$\exp\left\{-\frac{1}{kT}V(\Omega_1,\Omega_2)\right\}\quad (23)$$

其中 $A=\exp\left(\frac{\eta}{zkT}\right)$ 。式(23) 给出了两体分布函数。因此,在式(19)和式(20) 的条件下得到单体分布函数所满足的方程为：

$$g(\Omega_1)=\frac{\left\{\int[g(\Omega_2)]^{1-1/z}\exp\left[-\frac{1}{kT}V(\Omega_1,\Omega_2)\right]d\Omega_2\right\}^z}{\int\left\{\int[g(\Omega_2)]^{1-1/z}\exp\left[-\frac{1}{kT}V(\Omega_1,\Omega_2)\right]d\Omega_2\right\}^zd\Omega_1}\quad (24)$$

把式(23) 代入式(21),得到平衡态自由能的表现式为：

$$F=\frac{1}{2}NzkT\ln A\quad (25)$$

即： $F=-\frac{1}{2}NzkT\ln\int\int\{g(\Omega_1)\}^{1-1/z}\{g(\Omega_2)\}^{1-1/z}.$

$$\exp\left\{-\frac{1}{kT}V(\Omega_1,\Omega_2)\right\}d\Omega_1d\Omega_2\quad (26)$$

采用函数迭代的方法求解式(24) 。对于单轴向列相,分布函数 $g(\Omega)$ 只依赖于 β 和 γ 。因此可以把 $g(\Omega)$ 定义在 $n\times n$ (二维) 个分立点上,由于对称性,分立点的数值范围定义为：

$$0\leq\cos\beta\leq1,\;0\leq\gamma\leq2\pi$$

为了与积分计算相衔接,选择高斯型点序：

对于 $\cos\beta$ 取点序：

$$h_\beta(1-1/\sqrt{3}+2k),h_\beta(1+1/\sqrt{3}+2k)$$

对于 γ 取点序：

$$h_\gamma(1-1/\sqrt{3}+2k),h_\gamma(1+1/\sqrt{3}+2k)$$

其中 $k=0,1,2,\cdots,n/2-1$; $h_\beta=1/n,h_\gamma=\pi/n$ 。

定义四维矩阵如下：

$$K(i_1,j_1;i_2,j_2)=\int_0^{2\pi}\exp\left[-\frac{1}{kT}V(\Omega_1,\Omega_2)\right]d\alpha_2,$$
$$(i_1,j_1;i_2,j_2=1,2,\cdots,n)\quad (27)$$

其中 $K(i_1,j_1;i_2,j_2)$ 是由式(27) 给出的 $\cos\beta_1,\gamma_1,\cos\beta_2,\gamma_2$ 分别在第 i_1 、第 j_1 、第 i_2 、第 j_2 点时的取值,且不失一般性地取 $\alpha_1=0$ 。

这样式(24) 就可以改写为：

$$g_{m+1}(\cos\beta_{i_1},\gamma_{i_1})=\frac{\left\{h_\beta h_\gamma\sum_{i_2,j_2}K(i_1,j_1;i_2,j_2)[g_{m+1}(\cos\beta_{i_2},\gamma_{i_2})]^{1-1/z}\right\}^z}{h_\beta h_\gamma\sum_{i_1,j_1}\left\{h_\beta h_\gamma\sum_{i_2,j_2}K(i_1,j_1;i_2,j_2)[g_{m+1}(\cos\beta_{i_2},\gamma_{i_2})]^{1-1/z}\right\}^z}\quad (28)$$

如果迭代收敛,即当 $l\geq m$ 时, $g_{l+1}(\cos\beta,\gamma)=g_l(\cos\beta,\gamma)$,那么 $g_m(\cos\beta,\gamma)$ 就是方程式(24) 的解。之后据此可进一步计算出一定温度时的平衡态自由能以及其它热力学量的值。

与分叉理论方法相对应,本文用二粒子集团理论方法也得出了向列相液晶在 $\lambda-t$ 平面内的相图。每个分子的最近邻粒子数 $z=6$,取 $n=32$ 的一个四维矩阵,得到图 3 中的结果。为了进行比较,图 3 中同时给出平均场理论的结果曲线^[13]。

图 3 中,I 为各向同性相,N(+),N(-) 分别为正、负单轴向列相,各向同性相向正、负单轴向列相的转变为一级相变。由于 Landau 点处的变

化异于其它点,所以二粒子集团理论得到的曲线中 $\lambda=0.33$ (Landau 点) 处为一跳跃点。

由分叉理论得出在 $\lambda=1/3$ 处,系统直接由各向同性相经二级相变进入双轴向列相,所以此点为 Landau 点。由文献[13] 可知,利用平均场理论得出的 Landau 点也在 $\lambda=1/3$ 处。本文由二粒子集团理论通过判断序参数的取值,得到的 Landau 点在 $\lambda=0.33$ 处。由此可以看出:二粒子集团理论得到 Landau 点处的 λ 数值与分叉理论、平均场理论得到的数值是相同的,而二粒子集团理论得到 Landau 点处的 t 值比分叉理论、平均场理论得到的数值要小。

在分叉理论中,将 $\lambda=0$ 代入式(16),可以得

到对应的约化温度为 $t=0.2$ 。由平均场理论可得出: 当 $\lambda=0$ 时, $t=0.220\ 19$ 。

4 结 论

采用分叉理论方法和二粒子集团理论方法来确定双轴向列相中的 Landau 点。分叉理论和平均场理论分别是对单分子取向分布函数和单分子有效势做函数展开, 并做了截断近似。二粒子集团理论考虑了分子间的短程关联, 其数值计算中没有对取向分布函数做任何展开, 而是将取向分布函数定义在实空间的分立点上, 通过平衡态方程的迭代求解, 从而得到精确的取向分布函数。利用二粒子集团理论得到的 Landau 点处的分子

双轴性参数 λ 值与分叉理论、刘红等^[13] 的平均场理论所得到的 λ 值是相同的, 约化温度 t 的值则比分叉理论、平均场理论的 t 值要小且更为精确。比较上述 3 种理论得到的各向同性相向单轴向列相的转变曲线, 二粒子集团得到的结果更令人满意。由此得出结论: 在研究双轴分子构成的单轴向列相时, 考虑分子间的短程关联是十分必要的。本文的研究证明了二粒子集团理论处理双轴分子构成液晶单轴向列相的可行性, 也为该理论应用于其它问题的研究提供了依据。

附 录

转动矩阵的具体表示为:

$$R(\alpha, \beta, \gamma) = \begin{pmatrix} \cos\alpha\cos\beta\cos\gamma & \sin\alpha\cos\beta\cos\gamma + \cos\alpha\sin\gamma & -\sin\beta\cos\gamma \\ -\cos\alpha\cos\beta\sin\gamma - \sin\alpha\cos\gamma & -\sin\alpha\cos\beta\sin\gamma + \cos\alpha\cos\gamma & \sin\beta\sin\gamma \\ \cos\alpha\sin\beta & \sin\alpha\sin\beta & \cos\beta \end{pmatrix} \quad (A1)$$

将它用来描写两个分子的相对取向位形, 有:

$$\begin{cases} l_1 \cdot l_2 = \cos\alpha\cos\beta\cos\gamma - \sin\alpha\sin\gamma \\ m_1 \cdot l_2 = \sin\alpha\cos\beta\cos\gamma + \cos\alpha\sin\gamma \\ n_1 \cdot l_2 = -\sin\beta\cos\gamma \\ l_1 \cdot m_2 = -\cos\alpha\cos\beta\sin\gamma - \sin\alpha\cos\gamma \\ m_1 \cdot m_2 = -\sin\alpha\cos\beta\sin\gamma + \cos\alpha\cos\gamma \\ n_1 \cdot m_2 = \sin\beta\sin\gamma \\ l_1 \cdot n_2 = \cos\alpha\sin\beta \\ m_1 \cdot n_2 = \sin\alpha\sin\beta \\ n_1 \cdot n_2 = \cos\beta \end{cases} \quad (A2)$$

代入文中式(1)和式(2), 得到用欧勒角描写的两体作用势:

$$V_{12}(\tilde{\Omega}) = -\frac{\kappa l^2}{N} \left[\frac{3}{2} (\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma - \sin\alpha\sin\gamma)^2 - \frac{1}{2} \right] - \frac{\kappa l m}{N} \left[\frac{3}{2} (\cos\alpha\cos\beta\sin\gamma + \sin\alpha\cos\gamma)^2 - \frac{1}{2} \right] - \frac{\kappa m n}{N} \left[\frac{3}{2} (\cos\alpha\sin\beta)^2 - \frac{1}{2} \right] -$$

$$\begin{aligned} & \frac{\kappa l m}{N} \left[\frac{3}{2} (\sin\alpha\cos\beta\cos\gamma + \cos\alpha\sin\gamma)^2 - \frac{1}{2} \right] - \\ & \frac{\kappa m^2}{N} \left[\frac{3}{2} (-\sin\alpha\cos\beta\sin\gamma + \cos\alpha\cos\gamma)^2 - \frac{1}{2} \right] - \\ & \frac{\kappa m n}{N} \left[\frac{3}{2} (\sin\alpha\sin\beta)^2 - \frac{1}{2} \right] - \\ & \frac{\kappa n l}{N} \left[\frac{3}{2} (-\sin\beta\cos\gamma)^2 - \frac{1}{2} \right] - \\ & \frac{\kappa m n}{N} \left[\frac{3}{2} (\sin\beta\sin\gamma)^2 - \frac{1}{2} \right] - \frac{\kappa n^2}{N} \left[\frac{3}{2} (\cos\beta)^2 - \frac{1}{2} \right] \end{aligned} \quad (A3)$$

若将 e_1, e_2, e_3 取为实验室坐标系, 且假定分子 i 长轴单位矢量 l_i, m_i, n_i 在实验室坐标系中的欧勒角 $\Omega_i = (\alpha_i, \beta_i, \gamma_i)$, 则:

$$\begin{pmatrix} l_i \\ m_i \\ n_i \end{pmatrix} = R(\alpha_i, \beta_i, \gamma_i) \begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ e_3 \end{pmatrix} \quad (A4)$$

将两体作用势写为分子双轴性参数 λ 的显函数, 并在实验室坐标系写出, 有:

$$\begin{aligned} V_{12} \equiv V(\Omega_1, \Omega_2) = & -\frac{\kappa}{N} \frac{9}{4} (n - \bar{n})^2 \left[\left(\frac{3}{2} n_{13}^2 - \frac{1}{2} \right) + \frac{3}{2} \lambda (l_{13}^2 - m_{13}^2) \right] \left[\left(\frac{3}{2} n_{23}^2 - \frac{1}{2} \right) + \frac{3}{2} \lambda (l_{23}^2 - m_{23}^2) \right] - \\ & \frac{\kappa}{N} \frac{3}{4} (n - \bar{n})^2 \left[\frac{3}{2} (n_{11}^2 - n_{12}^2) + \frac{3}{2} \lambda (l_{11}^2 - l_{12}^2 - m_{11}^2 + m_{12}^2) \right] \left[\frac{3}{2} (n_{21}^2 - n_{22}^2) + \frac{3}{2} \lambda (l_{21}^2 - l_{22}^2 - m_{21}^2 + m_{22}^2) \right] - \\ & \frac{27\kappa}{N} (n - \bar{n})^2 \left[\left(\lambda l_{11} l_{12} + \frac{1}{2} \lambda n_{11} n_{12} + \frac{1}{2} n_{11} n_{12} \right) \times \left(\lambda l_{21} l_{22} + \frac{1}{2} \lambda n_{21} n_{22} + \frac{1}{2} n_{21} n_{22} \right) + \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &\left(\lambda l_{12} l_{13} + \frac{1}{2} \lambda n_{12} n_{13} + \frac{1}{2} n_{12} n_{13}\right) \left(\lambda l_{22} l_{23} + \frac{1}{2} \lambda n_{22} n_{23} + \frac{1}{2} n_{22} n_{23}\right) + \\ &\left(\lambda l_{11} l_{13} + \frac{1}{2} \lambda n_{11} n_{13} + \frac{1}{2} n_{11} n_{13}\right) \left(\lambda l_{21} l_{23} + \frac{1}{2} \lambda n_{21} n_{23} + \frac{1}{2} n_{21} n_{23}\right) \end{aligned} \tag{A5}$$

在上式中 l, m 和 n 的第一个下角标取 1 和 2 标记两个分子;第二个下角标取 1~3 标记矢量的分量。

参 考 文 献:

[1] Yu L J, Saupe A. Observation of a biaxial nematic phase in potassium laurate-1-decanol-water mixture [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1980, 45(12):1000-1003.

[2] Luckhurst G R. Biaxial nematic liquid crystals: factor fiction[J]. *Thin Solid Films*, 2001, 393:40-52.

[3] Luckhurst G R. Liquid crystals: A missing phase found at last [J]. *Nature*, 2004, 22(430):413-414.

[4] Yue W Z, Tao G, Zhu K Q. Investigation of resistivity of saturatal porous medin with lattice Boltzmanm method [J]. *Chin. Phys. Lett.*, 2004, 21(10):2059-2072.

[5] Kayser J, Richard F, Raveché Harold J. Bifurcation in Onsager's model of the isotropic-nematic transition [J]. *Phys. Rev. A*, 1978, 17(6):2067-2072.

[6] Maier W, Saupe A. Eine einfache molecular-statistische theorie der nematischen kristallinflüssigen Phase[J]. *Teil II Z. Naturforsch*, 1960, 15A:287-292.

[7] Emsley J W, Luckhurst G R, Gray G W, *et al.* Determination of the ordering matrix for 4-cyano-4'-pentyl-d-11-2', 3', 5', 6'-d 4-biphenyl from proton dipolar couplings[J]. *Mol. Phys.*, 1978, 35(5):1499-1503.

[8] Luckhurst G R, Zannoni C, Nordio P L, *et al.* A molecular field theory for uniaxial nematic liquid crystals formed by non-cylindrically symmetric molecules [J]. *Mol. Phys.*, 1975, 30(394):1345-1358.

[9] Remler D K, Haymet A D J. Phase transitions in nematic liquid crystals; a mean-field theory of the isotropic, uniaxial, and biaxial phases[J]. *J. Phys. Chem.*, 1986, 90(21):5426-5430.

[10] Bergersen B, Palffy-Muhoray P, Dunmur D A. Uniaxial nematic phase in fluids of biaxial particies [J]. *Liq. Cryst*, 1988, 3(3):347-352.

[11] Zannoni C. *In the Molecular Physics of Liquid Crystals* [M]. Edited by Luckhurst G R, Gray G W. London: Oxford Science Publications, 1979.

[12] Zhang Zhidong, Huang Ximin. A two-particle cluster theory for uniaxial nematic liquid crystals formed by biaxial molecules[J]. *Acta. Phys. Sinica(Overseas Edition)*, 1997, 6(9):671-676.

[13] 刘红, 王慧. 双轴性向列相液晶的相变理论 [J]. *物理学报*, 2005, 54(3):1036-1037.

[14] Bela Mulder. Isotropic-symmetry-breaking bifurcations in a class of liquid-crystal models [J]. *Phys. Rev. A*, 1989, 39(1):360-369.

[15] Zhang Zhidong. A study of two particle cluster approximation for liquid crystal films [J]. *Mod. Phys. Lett. B*, 1995, 9(21):1361-1367.

Determination of Landau Point in Biaxial Nematic Liquid Crystals

LI Ce, ZHENG Gui-li, ZHANG Zhi-dong
(School of Science, Hebei University of Technology, Tianjin 300130, China, E-mail: licehao@163.com)

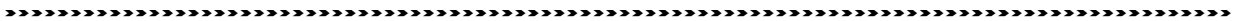
Abstract

Based on the model of biaxial nematic liquid crystals, the Landau point in the biaxial nematic

liquid crystals was determined by using bifurcation theory and two-particle cluster theory. The molecular biaxial parameter dependent curves transiting from isotropic phase to uniaxial nematic phase were obtained. At the Landau point, the results of molecular biaxial parameter λ obtained from bifurcation theory, two-particle cluster theory and mean field theory were the same, but the results of reduced temperature t were different. The reduced temperature obtained from two-particle cluster theory was more accurate. The result of two-particle cluster theory was more reasonable than those obtained from the other two theories. The results demonstrate that it is necessary to consider the short range correlation between each pair of neighbor molecules.

Key words:biaxial nematics;Landau point;bifurcation theory;two-particle cluster theory

作者简介:李策(1984—),女,河北正定人,硕士研究生,从事液晶物理研究。



《液晶与显示》诚征广告

《液晶与显示》是中国科学院长春光学精密机械与物理研究所和中国光学光电子行业协会液晶专业分会主办的综合性学术期刊。主要报道国内外液晶学科和显示技术领域中最新科研成果和创新技术,及时反映国内外本学科领域及产业信息动态。刊登的内容包括液晶和各类显示材料及制备方法、各类显示器件物理和制作技术、各类显示新型模式和驱动技术、显示技术应用、显示材料和器件的测试方法与技术等方面,是国内外从事液晶和显示技术工作及相关的广大科技人员必读期刊。本刊不仅是我国专业学术期刊发行量最大的期刊之一,而且参与国内外相关科技展会和交流活动。

《液晶与显示》设有广告专栏,真诚欢迎国内外科研单位、企业、商家来此发布产品、技术和服务信息,刊登仪器、设备、材料等方面的广告。本刊有精美彩页和黑白插页可供选择。

需要刊登广告的客户可电话告知您的 Fax,我们会立即将报价单传真给您,洽商确定后即与您签定正式刊登合同。

联系方式:

地 址:长春市东南湖大路 3888 号 中国科学院长春光学精密机械与物理研究所

《液晶与显示》编辑部

邮 编:130033

传 真:(0431)84695881

http://www.yjyxs.com

E-mail: yjxs@ciomp.ac.cn

电 话:0431-86176059 0431-84613406

联系人:付国柱