参 考 文 献

[1] W. Barlsly, B. Cockayne, G. W. Green et al., *J. Crystal Growth* **24/25** (1974), 369.

[2] 南京大学物理系晶体物理教研室晶体生长科研组，南京大学学报，**3**(1978)，38.

[3] K. Takagi, T. Iheda et al., *J. Crystal Growth*, **38**(1977), 206.

[4] J. R. Carruthers and A. F. Witt, in "Crystal Growth and Characterization", Eds. R. Ueda and J. B. Mullin, 1975, North-Holland, p. 107.

液晶自由能的简单推导*

林 磊

（中国科学院物理研究所）

描述液晶向列相和胆甾相弹性性质的自由能密度，其形式为

$$F = F(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{2}K_1(\mathrm{div}\boldsymbol{n})^2 + \frac{1}{2}K_2(\boldsymbol{n}\cdot\mathrm{curl}\boldsymbol{n}+q_0)^2 + \frac{1}{2}K_3(\boldsymbol{n}\times\mathrm{curl}\,\boldsymbol{n})^2, \quad (1)$$

其中 $\boldsymbol{n}(\boldsymbol{r})$ 为空间 $\boldsymbol{r}$ 处之指向 (director)，代表分子的平均取向，$|\boldsymbol{n}|=1$.* $2\pi/q_0$ 为胆甾相的螺距．在向列相中，$q_0=0$．K_1—K_3 为弹性常数．有关这些物理量的进一步讨论，参看文献[1—4].

这个简单的自由能的具体形式（从 1933 年起 Oseen[1] 和 Zöcher[2] 初步考虑，其后 1958 年 Frank[3] 比较完备的处理，以至后人的进一步工作）经过漫长三十多年的时间，才以 (1) 式的通用形式固定下来．目前常用的推导方法，除了 Frank 本人所提出的方案外，还有 de Gennes 在他《液晶物理》这本经典著作里的一个方法[4] 以及 Nehring 和 Saupe[5] 分别从分子观点和唯象观点的推导等．这些方法都比较繁琐，初入门的人可能觉得比较难懂．

鉴于(1)式 Frank 自由能在液晶理论，包括具有应用价值的各种效应中的重要性，我们在这里给出一个简明、系统的新的推导方法．

一般而言[6]，$F=F(n_i,n_{ij})$，其中 $n_{ij}\equiv\partial n_i/\partial r_j$.

1. 向列相

液晶的向列相具有下列对称性质：

(i) $\boldsymbol{n}\to-\boldsymbol{n}$ 不变性；

(ii) 对 $\boldsymbol{n}$ 的转动不变性；

(iii) 对垂直于 $\boldsymbol{n}$ 的平面的反射不变性；

(iv) 对包含 $\boldsymbol{n}$ 的平面的反射不变性．

在向列相的自由状态，$\boldsymbol{n}$ 与空间坐标无关，$n_{ij}=0$．因此，其自由能不包含 n_{ij} 的线性项．到二阶为止，

$$F = a_{ijkm}n_{ij}n_{km}. \quad (2)$$

显然，

$$a_{ijkm} = a_{kmij}. \quad (3)$$

我们的方法是先在空间各点选择一个方便的局域坐标系，利用晶体弹性理论中的一个熟知方法[7]，把符合 (ii)—(iv) 对称的弹性常数写出来，再把自由能还原为与坐标系无关的形式．最后，利用 (i)把多余的项除去．

我们取 $\boldsymbol{n}(\boldsymbol{r})$ 为 $\boldsymbol{r}$ 点局域坐标系的 z 轴，则有 $\boldsymbol{n}=(0,0,1)$．$\boldsymbol{n}^2=1$ 给出

$$n_in_{ij}=n_{zj}=0,\ i,j=x,y,z. \quad (4)$$

同项中重复的下标表示迭加．

定义：$\xi\equiv x+iy$，$\eta\equiv x-iy$．通过 (x,y,z) 到 (ξ,η,z) 的坐标变换，(2)式中的下标取 ξ，η 和 z 等值．对 z（即 $\boldsymbol{n}$）轴转动角度 ϕ，则 $\xi\to\xi e^{i\phi}$，$\eta\to\eta e^{-i\phi}$，$z\to z$．所以对称 (ii) 要求 a_{ijkm} 的四个下标包含相同数目的 ξ 和 η，

* 1979 年 7 月 13 日收到.

不符合这个要求的系数都等于零.

相对于对称(iii)的变换为 $x\to x$, $y\to y$, $z\to -z$, 亦即 $\xi\to\xi$, $\eta\to\eta$, $z\to -z$. 所以 a_{ijkm} 的下标应含有偶数的 z.

同样地,相对于对称(iv)的变换为 $x\to x$, $y\to -y$, $z\to z$, 或 $\xi\to\eta$, $\eta\to\xi$, $z\to z$. 所以 $a_{\xi z\eta z}=a_{\eta z\xi z}$, 余此类推.

从对称(ii)—(iv)和(3),(4)式的结果,可见 F 中只有四个独立的不等于零的系数:

$$A_1\equiv a_{\xi\xi\eta\eta}, \tag{5}$$

$$A_2\equiv a_{\xi\eta\xi\eta}=a_{\eta\xi\eta\xi}, \tag{6}$$

$$A_3\equiv a_{\xi\eta\eta\xi}, \tag{7}$$

$$A_4\equiv a_{\xi z\eta z}. \tag{8}$$

注意 A_1—A_4 可以是复数. 从(2),(5)—(8)式,得

$$F=A_1n_{\xi\xi}n_{\eta\eta}+A_2(n_{\xi\eta}^2+n_{\eta\xi}^2)+A_3n_{\xi\eta}n_{\eta\xi}+A_4n_{\xi z}n_{\eta z}. \tag{9}$$

利用张量 $n_{\xi\eta}$ 与 $\xi\eta$ 有相同的坐标变换性质这个事实,从

$$\xi\eta=(x+iy)(x-iy)=xx+yy+i(yx-xy), \tag{10}$$

可得

$$n_{\xi\eta}=n_{xx}+n_{yy}+i(n_{yx}-n_{xy})=n_{\eta\xi}^*. \tag{11}$$

同样地

$$n_{\xi\xi}=n_{xx}-n_{yy}+i(n_{xy}+n_{yx})=n_{\eta\eta}^*, \tag{12}$$

$$n_{\xi z}n_{\eta z}=n_{xz}^2+n_{yz}^2. \tag{13}$$

所以,(9)式可改写为

$$F=A_1[(n_{xx}-n_{yy})^2+(n_{xy}+n_{yx})^2]+2A_2[(n_{xx}+n_{yy})^2-(n_{yx}-n_{xy})^2]+A_3[(n_{xx}+n_{yy})^2+(n_{yx}-n_{xy})^2]+A_4[n_{xz}^2+n_{yz}^2], \tag{14}$$

或

$$F=\frac{1}{2}K_1(n_{xx}+n_{yy})^2+\frac{1}{2}K_2(n_{yx}-n_{xy})^2+\frac{1}{2}K_3(n_{xz}^2+n_{yz}^2)+K(n_{xy}n_{yx}-n_{xx}n_{yy}), \tag{15}$$

其中

$$\frac{1}{2}K_1\equiv A_1+2A_2+A_3,$$

$$\frac{1}{2}K_2\equiv A_1-2A_2+A_3,$$

$$\frac{1}{2}K_3\equiv A_4,\quad K\equiv 4A_1.$$

(15)式中最后一项

$$n_{xy}n_{yx}-n_{xx}n_{yy}=\frac{1}{2}(n_{ij}n_{ji}-n_{ii}n_{jj})=\frac{1}{2}(n_{ij}n_j-n_{jj}n_i)_{,i}. \tag{16}$$

在 $\int d\boldsymbol{r}F(\boldsymbol{r})$ 中通过 Gauss 定理变为面积分,在 Euler-Lagrange 方程中不起作用,故可略去. 通过

$$\begin{aligned}n_{xx}+n_{yy}&=\operatorname{div}\boldsymbol{n}\\ n_{yx}-n_{xy}&=\boldsymbol{n}\cdot\operatorname{curl}\boldsymbol{n}\\ n_{xz}^2+n_{yz}^2&=[(\boldsymbol{n}\cdot\operatorname{grad})\boldsymbol{n}]^2\\ &=(\boldsymbol{n}\times\operatorname{curl}\boldsymbol{n})^2\end{aligned} \tag{17}$$

等关系,(15)式也就马上还原为(1)式 ($q_0=0$).

2. 胆甾相

与向列相比较,(a)在胆甾相的自由态,$\boldsymbol{n}$ 与 $\boldsymbol{r}$ 有关. (b)胆甾相只具有对称(i)—(iii),缺少了对称(iv).

根据(a)的特点,胆甾相的自由能可以包含 n_{ij} 的线性项,亦即

$$F=F_1+F_2, \tag{18}$$

其中 $F_1=a_{ij}n_{ij}$, F_2 具有(2)式的形式. 利用对称(ii),(iii)和(4)式的结果,在 F_1 中只有两个独立的系数: $a_{\xi\eta}(\equiv a_1)$ 和 $a_{\eta\xi}(\equiv a_2)$, 所以,

$$\begin{aligned}F_1&=a_1[n_{xx}+n_{yy}+i(n_{yx}-n_{xy})]+a_2[n_{xx}+n_{yy}-i(n_{yx}-n_{xy})]\\ &=(a_1+a_2)(n_{xx}+n_{yy})+i(a_1-a_2)\cdot(n_{yx}-n_{xy})=(a_1+a_2)(\operatorname{div}\boldsymbol{n})\\ &\quad+i(a_1-a_2)(\boldsymbol{n}\cdot\operatorname{curl}\boldsymbol{n}),\end{aligned} \tag{19}$$

$\operatorname{div}\boldsymbol{n}$ 一项显然不符合对称(i),故有 $a_1=-a_2$. 所以

$$F_1=Kq_0(\boldsymbol{n}\cdot\operatorname{curl}\boldsymbol{n}), \tag{20}$$

其中 $K_2q_0\equiv 2ia_1$. 由于 F_1 为实数,所以 a_1 应为虚数,q_0 为实数.

根据(b)中的对称(ii)和(iii),(5),(7)和(8)式仍然成立，但 $B_1 \equiv a_{\xi\eta\xi\eta} \neq a_{\eta\xi\eta\xi} \equiv B_2$，即(6)式不再成立．在这个情况，(9)式中的 A_2 项应改为 $B_1 n_{\xi\eta}^2 + B_2 n_{\eta\xi}^2$．(14)式中的 A_2 项变作

$$
\begin{aligned}
(B_1 + B_2)[(n_{xx} + n_{yy})^2 - (n_{yx} - n_{xy})^2] \\
+ 2i(B_1 - B_2)[(n_{xx} + n_{yy}) \\
\cdot (n_{yx} - n_{xy})]. \qquad (21)
\end{aligned}
$$

在这里，(9)，(14)和(15)式的 F 应理解为(18)式中的 F_2．

(21)式中的后一项相当于 $(\mathrm{div}\boldsymbol{n})(\boldsymbol{n}\cdot\mathrm{curl}\boldsymbol{n})$，含有三个 $\boldsymbol{n}$，不符合对称(i)，所以 $B_1 = B_2$．因此，只要在(14)和(15)式中把 A_2 换作 B_2，即可应用于胆甾相．

把(20)和(15)式相加，得胆甾相的自由能，与(1)式只差一个常数 $\frac{1}{2}K_2q_0^2$，两者当然等价．当 $\boldsymbol{n}$ 作螺旋变化时，亦即 $\boldsymbol{n} = (\cos q_0z, \sin q_0z, 0)$，这个附加常数保证了 $F = 0$．

上述自由能的推导方法，亦适用于向列相和胆甾相的耗散函数[6]方面．有关自由能(1)式各项的物理内容与几何图象，可参看文献[8]．

参 考 文 献

[1] C. W. Oseen, *Trans. Faraday Soc.*, **29**(1933), 883.

[2] H. Zöcher, *Trans. Faraday Soc.*, **29**(1933), 945.

[3] F. C. Frank, *Disc. Faraday Soc.*, **25**(1958), 19.

[4] P. G. de Gennes, The Physics of Liquid Crystals, Oxford U. P., (1974).

[5] J. Nehring and A. Saupe, *J. Chem. Phys.*, **54** (1971), 337.

[6] L. Lam (林磊), *Z. Physik B*, **27**(1977), 349.

[7] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, Theory of Elasticity, Pergamon Press, (1959), §10.

[8] 谢毓章，物理，9(1980)，51.

用于电视显示的胆甾相—向列相相转变电光效应的研究*

赵静安　童寿生　阮亮

（清华大学基础部液晶物理研究组）

液晶用于电视的研究，意义是显而易见的．若能解决，对电视工业将是一个很大的冲击，就象液晶用于全电子手表工业那样或更甚．当前在显示方面常用的液晶电光效应主要有两种，即动态散射效应和扭曲效应，它们的响应速度（上升时间>几毫秒，下降时间有上百毫秒）均不能满足电视要求．

另外还有一种液晶电光效应，即相转变效应[1]，已被人们所重视，最近几年对这种电光效应的研究逐渐增多起来了．但对其弛豫时间其说不一．如1972年Jakeman[2]等人对电感应的胆甾相—向列相相转变电光效应（以下简称Ch-N相变效应）进行了研究，得到了几十微秒的响应时间，并给出理论分析及电光响应速度公式：

$$\tau_{上升} = \eta/(\varepsilon_a E^2/4\pi - Kq^2),$$

$$\tau_{下降} = \eta/Kq^2,$$

式中 η 是扭曲粘滞系数，K 是扭曲弹性系数，q $(=\pi/p$，p 为螺距）是胆甾相螺旋线的波矢，$\varepsilon_a(=\varepsilon_{\parallel} - \varepsilon_{\perp} > 0)$ 是介电各向异性，E 是所加的电场．他们的实验结果与其理论分析基本相符，但由于未对液晶响应的过渡过程作全面的分析，因此未能控制快速响应的条件，其应用少有报道．

为了把液晶用于投影大屏幕电视，我们以胆甾相液晶和正介电各向异性的向列相液晶的

* 1978年12月24日收到．