研究工作简报

向列相液晶清亮点两边的比热

林　磊

(中国科学院物理研究所)

1981年6月2日收到

液晶的向列相 (N)—各向同性液相 (I) 相变点 T_c 称为清亮点. 在接近 T_c 的 I 相,由于 N 相序参数涨落的影响,产生相变前效应[1]. 相变前效应表现为一些物理量在趋近 T_c 时的异常增大,其中包括比热等等. 有关 I 相比热异常的理论解释,最先由 Imura 和 Okano (IO)[2] 于 1972 年提出. IO 通过 deGennes 的涨落理论,得出 I 相(与涨落有关的)比热为(见文献[2]的(7),(8)式)

$$\bar{c} = C_0 T^2 (T - T^*)^{-1/2}, \tag{1}$$

$$C_0 = (g k_B / 32\pi)(a/L)^{3/2}, \tag{2}$$

其中 T^*, a, L 为自由能密度对序参数 Q_{ij} 展开时的系数(见文献[2]的(1)式或本文(3)式). 在(1)式的推导中,g 作为参数出现,在数字计算中[2,3]选取 $g = 10$, 并无任何解释或根据. IO 理论用于 I 相的热膨胀系数[2],超声的吸收与色散[3]等都相当成功. 在这些计算中,都用了 $g = 10$ 的数值. 直至目前,IO 理论已被推广至液晶其他相变[4],是一个简单而有效的理论. 可是,近十年来,$g = 10$ 的来源还是一个谜.

本文推广了最近有关 Landau-deGennes (LdG) 模型高斯近似的一个工作[5],计算了 I 相和 N 相的比热,所得 I 相比热发散部分与(1),(2)式相符,并直接得到 $g = 10$ 这个结果.

LdG 模型的哈密顿量(参看文献[6])

$$H = \int dr \left[\frac{1}{2} A Q_{ij} Q_{ji} - \frac{1}{3} B Q_{ij} Q_{jk} Q_{ki} + \frac{1}{4} C (Q_{ij} Q_{ji})^4 + \frac{1}{2} L \partial_i Q_{jk} \partial_i Q_{jk} \right]. \tag{3}$$

这里分别略去了一个四次项和一个梯度项,$A = a(T - T^*)$.

1. I 相

在高斯近似下的 I 相,H 简化为

$$\begin{aligned} H_I = & \frac{1}{2} \sum_{k<\Lambda} (E_1 + Lk^2) S_k S_{-k} \\ & + \frac{1}{2} \sum_{k<\Lambda} (E_2 + Lk^2)(P_k P_{-k} + R_k^0 R_{-k}^0) \\ & + \frac{1}{2} \sum_{k<\Lambda} (E_3 + Lk^2)(R_k^+ R_{-k}^+ + R_k^- R_{-k}^-), \end{aligned} \tag{4}$$

其中 Λ 为截止波矢,S_k, P_k, R_k^0, R_k^+, R_k^- 为 Q_{ij} 矩阵傅氏变换的五个独立分量(见文献[6]的(3)式). 在 I 相,有 $E_1 = E_2 = E_3 = A$. 仿照文献[5]的做法,即得 I 相单位体积自由能 F_I 为

$$F_I V = -\frac{5}{2} k_B T \sum_k \ln[(2\pi k_B T / V) / (A + Lk^2)], \tag{5}$$

V 为系统体积. 这里的 F_I 是文献[5]的(18)式中的 F 的五倍([5]中 D, C 相当于本文的 C, L),这是由于(4)式右边有五个独立分量,而文献[5]只保留了 S_k 单个分量的缘故. 通过

$$\bar{c} = -T \partial^2 F_I / \partial T^2,$$

得

$$\bar{c} = A_0 + A_1 T + A_2 T^2 + A_3 T^2 (T - T^*)^{-1/2}, \tag{6}$$

其中系数 A_0—A_3 与 T 无关,是文献[5]的(12)式所定义的五倍. 当 T 沿着亚稳态接近 T^*(或 T_c,因为液晶的 T_c 与 T^* 相差很少)时[5],

$$A_3 \simeq (5 k_B / 16\pi)(a/L)^{3/2}. \tag{7}$$

比较(1),(6)式,可知 IO 理论的 $\bar{c}$ 就是本文 $\bar{c}$

的发散部分，$C_0 = A_3$，因此 $g = 10$. 上述结果说明 IO 理论事实上就是 LdG 模型的高斯近似，本文的推导比 IO 的来得自然合理.

2. *N* 相

在 N 相，(3) 式的 H 在高斯近似下变为

$$H_N = H_I + V\left(\frac{A}{2}S_N^2 - \frac{B}{3}S_N^3 + \frac{C}{4}S_N^4\right), \quad (8)$$

其中 S_N 为平均场近似下 N 相的序参数 (见文献[5] 的 (7) 式)，H_I 与 (4) 式相同，但此时

$$\left.\begin{aligned} &E_1 = \bar{A} \equiv A - 2BS_N + 3CS_N^2,\\ &E_2 = 3BS_N,\\ &E_3 = 0.\end{aligned}\right\} \quad (9)$$

所以，

$$F = F_0 + \Delta F, \quad (10)$$

这里 F_0 为文献 [5] 中 (26) 式的 F，

$$(\Delta F)V = -k_BT\sum_k \ln[(2\pi k_BT/V)/(3BS_N + Lk^2)] - k_BT\sum_k \ln[(2\pi k_BT/V)/(Lk^2)]. \quad (11)$$

因此，比热为

$$\begin{aligned}\bar{c} = A_0 &+ \bar{A}_1T + \bar{A}_2T^2 + \bar{A}_3(T^+ - T)^{-1/2}\\ &+ \bar{A}_4(T^+ - T)^{-1} + \bar{A}_5(T^+ - T)^{-3/2}\\ &+ \bar{A}_6,\end{aligned} \quad (12)$$

其中系数 A_0, $\bar{A}_1$, $\bar{A}_2$, $\bar{A}_6$ 与文献 [5] 中 (21) 式和 (28) 式的相同，$\bar{A}_3$—$\bar{A}_5$ 则需在文献 [5](28) 式的右边分别加上 $\Delta\bar{A}_3$, $\Delta\bar{A}_4$, $\Delta\bar{A}_5$，其中

$$\Delta\bar{A}_3 = \Delta\bar{A}_5 = \frac{3k_BT\alpha_0a}{\pi^2L}[\Lambda - \xi^{-1} + g^{-1}(\Lambda\xi)], \quad (13)$$

$$\Delta\bar{A}_4 = k_BT^2\left(\frac{3a\alpha_0}{2\pi L}\right)^2\left[\frac{(\Lambda\xi)^2}{1+(\Lambda\xi)^2}\cdot\frac{1}{\Lambda} - \xi^{-1} + g^{-1}(\Lambda\xi)\right], \quad (14)$$

$$\xi \equiv (L/3BS_N)^{1/2} = \xi(T), \quad (15)$$

$$T^+ \equiv T^* + B^2/4aC,$$

$$\alpha_0 \equiv (T^+ - T^*)^{1/2}. \quad (16)$$

与文献[5]不一样，在本文(3)式的情况中，高斯近似下的 T_c 不再等于平均场近似时的 T_c. 关于潜热等由于计算比较复杂，此处不作讨论.

最后，应该指出，IO 理论给出的 $\bar{c}$ 虽然是定压比热 c_p，但从文献[1]的推导来看，只要把 Gibbs 自由能换作 Helmholtz 自由能，即可得定容比热 c_v. 所以，(1) 式的 $\bar{c}$ 可以理解为 c_p 或 c_v. 当然，常数 a, L 在定压和定容两种情况下会有所不同.

作者去年应 K. Okano 教授邀请访问日本东京大学，对其友好的款待和有益的讨论，谨致谢忱.

参 考 文 献

[1] P. G. deGennes, The Physics of Liquid Crystals, Clarendon, Oxford, (1974).
[2] H. Imura, K. Okano, *Chem, Phys. Lett.*, **17** (1972), 111.
[3] H. Imura, K. Okano, *Chem, Phys. Lett.*, **19** (1973), 387.
[4] S. Candau, S. V. Letcher, in Advances in Liquid Crystals, Vol. 3, ed., G. H. Brown, Academic, New York, (1978); F. Kiry, P. Martinoty, *J. Physique*, **39** (1978), 1019.
[5] 林磊、王心宜，物理学报，**29** (1980), 1427; Lin Lei (林磊), Wang Xinyi (王心宜), in Recent Developments in Condensed Matter Physics, Vol. 5, Plenum, New York, (1981).
[6] R. G. Priest, in Liquid Crystals, ed. S. Chandrasekhar, Heyden, London, (1980).

(上接 209 页)

活动名称	预计		活动名称	预计	
	时间(月)	地点		时间(月)	地点
新实验方法和技术讨论会	7	长春	量子力学讲习班	8	北京
高能应用讨论会	7	北京	特级中学物理教师会议	8	上海
电镜技术学习班(扫描两期，探讨一期)	7	北京	中国物理学会年会	8	北京
质谱技术学习班(两期)	7	北京	重离子反应讨论会	8	北京
全国电镜学术交流会	8	成都	1982 年液晶科普报告会	8	待定
国内外电镜展览及技术交流	8	大连	粒子物理理论会议	9	杭州
穆斯堡尔谱学在化学和生物学上的应用	8	福州	强流束讨论会	9	成都
非平衡态统计物理学术会议	8	昆明	第三次全国质谱学术交流会	9	石家庄

(下转 226 页)