

河北工业大学 2019 届本科毕业论文前期报告

毕业论文题目：柱状腔向列相液晶 Monte Carlo 模拟研究

专业（方向）：应用物理学

学生信息：学 号：150067

姓名：常雨珂

班级：物理 152

指导教师信息：教师号：05122

姓名：张艳君

职称：副教授

报告提交日期：2019.3.5

1. 进度完成情况

张老师下达任务书后，我利用寒假时间查阅相关资料、文献，了解了几种两体势模型，整理总结几种模型之间的差异，并结合 Monte Carlo 模拟相关程序学习 Fortran 编程语言。3 月上旬完成撰写毕设前期报告，计划 4 月上旬实现柱状腔向列相液晶 Monte Carlo 程序模拟。

2. 内容介绍

液晶显示器作为平板显示器的主流产品，已渗透到国民生产和日常生活的方方面面，近期有关液晶学科的更多基础和应用研究也转向了非显示领域^[1]。由于液晶分子的取向及有序度易受到边界限定性效应、外场、温度等因素的影响，使得柱状液晶系统有着丰富的物理现象，存在着潜在的应用价值，引起人们极大的兴趣^[2]，对液晶的研究也越来越深入。

液晶分子理论把液晶态解释为凝聚态分子之间相互作用的结果，该理论的基础是平衡态的统计热力学。由于液晶分子为有机大分子，通常通过模型两体势描写其相互作用。1972年，Lebwohl和Lasher将分子质心固定在简单立方晶格的格点上，假定邻近分子间存在色散作用，实现了向列相液晶的Monte Carlo模拟^[3]（通常称为Lebwohl-Lasher模型，如图1所示）。Lebwohl-Lasher模型是第一个成功用计算机模拟的模型，模拟中只考虑最近邻的相互作用，近邻分子的相互作用势表示为：

$$V_{ij}(\mathbf{l}_i, \mathbf{l}_j) = -\epsilon \left[\frac{3}{2} (\mathbf{l}_i \cdot \mathbf{l}_j)^2 - \frac{1}{2} \right] = -\epsilon P_2(\cos \theta_{ij}) \quad (1)$$

其中 ϵ 为势能参数，和 $\mathbf{l}_i, \mathbf{l}_j$ 为液晶分子 i 和 j 的长轴取向， θ_{ij} 为液晶分子 i 和 j 的夹角， P_2 为二阶勒让德多项式。

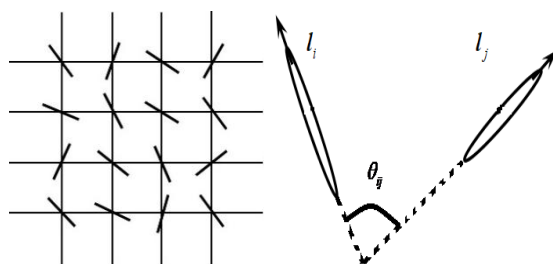


图 1 \mathbf{l}_i 和 \mathbf{l}_j 为液晶分子 i 和 j 的长轴取向, θ_{ij} 为液晶分子 i 和 j 的夹角

Fig.1 \mathbf{l}_i and \mathbf{l}_j are the long axis orientation of liquid crystal molecule, and θ_{ij} is the angle between the liquid crystal molecules i and j

此模型为空间各向同性的两体势模型, 在研究均匀向列相时十分成功^[4]。但是Lebwohl-Lasher格点模型不考虑分子之间的实际距离, 只考虑最近邻作用, 由于液晶分子具有空间各向异性, 所以Lebwohl-Lasher格点模型与实际情况不相符合。

1996年, Gruhn和Hess基于向列相宏观弹性自由能密度公式提出了一种空间各向异性两体势模型, 即Gruhn-Hess模型, 如图2所示。这种模型具有的特点: 一是它不仅依赖于两分子长轴取向, 而且依赖于连接两分子质心连线的单位矢量, 即空间各向异性的, 二是它的势参数直接依赖于液晶宏观弹性常数 K_{11}, K_{22}, K_{33} 。

随后, 将液晶两体势理论与液晶弹性理论相结合, 将势参数与弹性常数 K_{13} 联系起来, 建立了新的模型Gruhn-Hess两体势修正模型, 修正模型的序参数依赖于液晶的弹性常数 K_{11}, K_{22}, K_{33} , 以及表面弹性常数 K_{13} 。

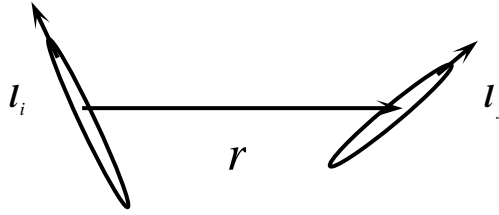


图 2 \mathbf{l}_i 和 \mathbf{l}_j 为液晶分子 i 和 j 的长轴取向, \mathbf{r} 为液晶分子 i 和 j 的质心连线

Fig. 2 \mathbf{l}_i and \mathbf{l}_j are the long axis orientation of the liquid crystal molecule, and \mathbf{r} is the center-of-body line of the liquid crystal molecules i and j

两体作用势表示为:

$$\begin{aligned} \phi_{ik} = & \lambda [P_2(a_i) + P_2(a_k)] + \mu \left(a_i a_k a_{ik} - \frac{1}{9} \right) \\ & + \nu P_2(a_{ik}) + \rho [P_2(a_i) + P_2(a_k)] P_2(a_{ik}) \end{aligned} \quad (2)$$

其中, 标量 a_i 和 a_j 被定义为 $a_i = \mathbf{l}_i \cdot \mathbf{s}$, $a_j = \mathbf{l}_j \cdot \mathbf{s}$, 其中 $\mathbf{s} = \mathbf{r}/|\mathbf{r}|$, $\mathbf{r} = \mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j$, 其中 \mathbf{x}_i 和 \mathbf{x}_j 是无量纲的。

两体势的势参数与弹性常数的关系有三种, 分别为模型一、模型二及模型三, 分别用 (3) (4) (5) 式表示:

$$\begin{cases} \lambda = \frac{1}{3} \Lambda(2k_{11} - 3k_{22} + k_{33}) \\ \mu = 3\Lambda(k_{22} + k_{11}) \\ \nu = \frac{1}{3} \Lambda(k_{11} - 3k_{22} - k_{33}) \\ \rho = \frac{1}{3} \Lambda(k_{11} - k_{33}) \end{cases} \quad (3)$$

$$\begin{cases} \lambda = \frac{2}{3} \Lambda(k_{11} - k_{22}) \\ \mu = \Lambda(-k_{11} + 2k_{22} - k_{33}) \\ \nu = -\frac{2}{3} \Lambda k_{22} \\ \rho = 0 \end{cases} \quad (4)$$

$$\begin{cases} \lambda = \frac{1}{3} \Lambda(2k_{11} - 3k_{22} + k_{33} + 6k_{13}) \\ \mu = 3\Lambda(k_{22} - k_{11}) \\ \nu = \frac{1}{3} \Lambda(k_{11} - 3k_{22} - k_{33}) \\ \rho = \frac{1}{3} \Lambda(k_{11} - k_{33}) \end{cases} \quad (5)$$

近年来,有人通过依赖于分子之间距离的两体势进行 Monte Carlo 模拟^[8,9],它能更为真实的反应液晶分子之间的相互作用。比较典型且较为简单的作用势形式为非格点类 Lebwohl-Lasher 模型,此模型考虑了分子间的相互作用距离,较格点模型具有积极的作用。其相互作用式表示为^[10]:

$$V_{ij} = V_{iso}(r_{ij}) + V_{aniso}(r_{ij}, l_i, l_j) \quad (6)$$

$$V_{iso}(r_{ij}) = 4\varepsilon_{iso} \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (7)$$

$$V_{aniso}(r_{ij}, l_i, l_j) = -\varepsilon_{aniso} \left[\frac{3}{2} (l_i \cdot l_j)^2 - \frac{1}{2} \right] \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \quad (8)$$

σ 是分子间相互作用的特征范围, ϵ_{iso} 和 ϵ_{aniso} 分别表示各向同性和各向异性相互作用强度。对于 $\epsilon_{aniso} > 0$, V_{aniso} 有利于分子自旋在同一个方向排列; 对于 $\epsilon_{aniso} < 0$, V_{aniso} 有利于分子自旋在相互垂直的方向上的排列。

柱状腔向列相液晶系统是把向列相液晶注入圆柱腔内所构成的液晶系统, 如图3所示。本课题我们考虑分子之间的相互作用距离, 采用依赖于分子之间距离的两体势模型对柱状腔向列相液晶系统的分子取向分布进行Monte Carlo模拟计算^[11], 执行Monte Carlo模拟过程, 通常建立一个马尔可夫过程, 采用Metropolis方法, 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的位形, 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。一个模拟过程通常被划分为平衡阶段和计算结果阶段, 平衡阶段可能包含数十万至上百万个周期, 实际操作中得出一个结果需要更多的周期。

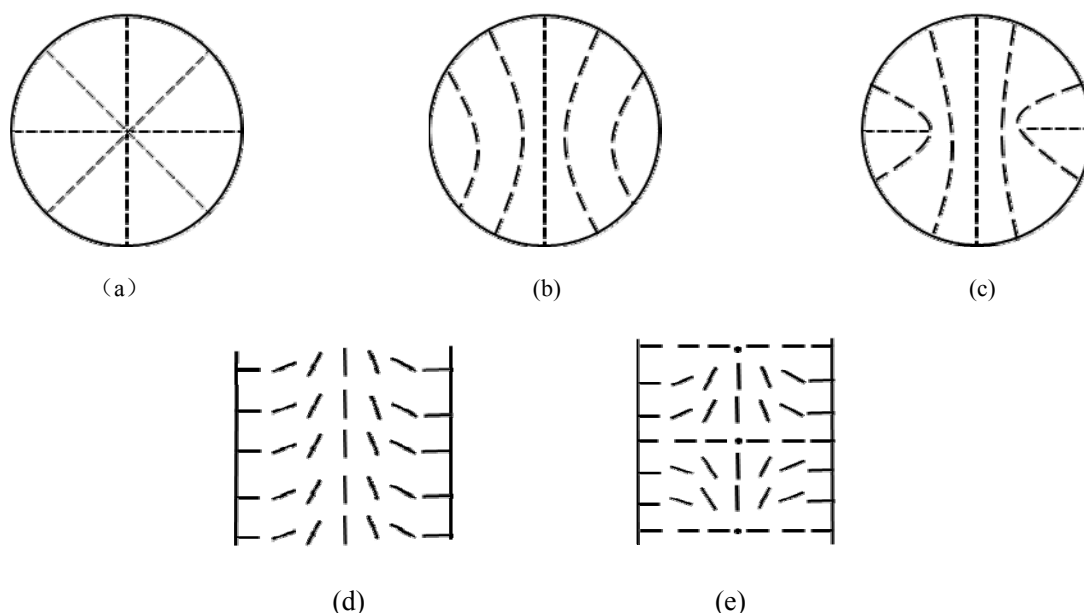


图3 指向矢结构示意图。(a) 平面径向结构 (PR), (b) 平面极性结构 (PP), (c) 平面极性两线缺陷结构 (PPLD), (d) 逃逸径向结构 (ER), (e) 具有点缺陷的逃逸径向结构 (ERPD)

Fig.3 Schematic representation of a director field. (a) Planar radial structure (PR). (b) Planar polar structure (PP).

(c) Planar polar structure with lined defects (PPLD). (d) Escaped radial structure (ER). (e) Escaped radial structure point defects (ERPD)

参考文献

- [1] 杨傅子. 近期液晶研究中的几个新方向——液晶非显示应用基础研究的进展[J]. 物理学进展, 2008, 28(2):107-129.
- [2] Zhang R. Complex Liquid Crystal Phases in Cylindrical Confinement[D]. Sheffield: University of Sheffield,

2012.

- [3] Lebwohl P A, Lasher G. Nematic-liquid-crystal order-a Monte Carlo calculation [J]. Phys. Rev. A., 1972, 6(1): 426~429 .
- [4] Luckhurst G R, Gray G W. The Molecular Physics of Liquid Crystals[M]. London: Academic Press, 1977:191~220
- [5] Giura S, Schoen M. Density-functional theory and Monte Carlo simulations of the phase behavior of a simple model liquid crystal[J]. Phys. Rev. E., 2014, 90(2): 022507.
- [6] Wand C R, Bates M A. Monte Carlo simulations of nematic and chiral nematic shells[J]. Phys. Rev. E., 2015,91(1): 012502 .
- [7] Mirantsev L V, Sonnet A M, Virga E G. Geodesic defect anchoring on nematic shells[J]. Phys. Rev. E., Stat Nonlin & Soft Matter Phys, 2012, 86(1): 020703.
- [8] Chiccoli C, Pasini P, Evangelista L R, Teixeira De Souza R and Zannoni C. Nematics in Hybrid Cylindrical Cells[J]. Mol. Cryst. Liq. Cryst., 2013, 576(1): 42~52.
- [9] Chiccoli C, Pasini P, Teixeira de Souza R, Evangelista L R and Zannoni C. Computer Simulations of the Ordering in a Hybrid Cylindrical Film of Nematic Liquid Crystals[J]. Phys. Rev. E., 2011,84(1): 041705.
- [10] Sai Preeti G, Vijay Kumar V, Sastry V S S and Murthy K P N. Monte Carlo study of radial and axial ordering in cylindrical films of liquid crystal[J]. Comp Mater Sci, 2008, 44 (1): 180~184.
- [11] Luckhurst G R, Romano S. Computer Simulation Studies of Anisotropic Systems IV. The Effect of Translational Freedom[J]. P Roy Soc A-Math Phy, 1980, 373(1752):111-130.