

The Explicitly Quasi-linear Relation Between the Order Parameter and Normalized Birefringence of Aligned Uniaxially Anisotropic Molecules Determined Using a Numerical Method

Sang Youl Kim[†]

Department of Physics, Ajou University 206 Worldcup-ro, Yeongtong-gu, Suwon 16499, Korea

(Received October 11, 2016; Revised manuscript November 28, 2016; Accepted November 29, 2016)

The birefringence of distributed, uniaxially anisotropic molecules like liquid crystals is calculated as the degree of ordering is varied. The relation between the normalized birefringence Δn_{rel} and the orientational order parameter S is investigated. The distribution function, which enables one to monitor the degree of ordering of liquid crystals including randomly distributed ones, is introduced. Using this distribution function, a series of distributed liquid crystals with order parameters ranging from 0 to 1 are generated, and Δn_{rel} and S of the correspondingly distributed liquid crystals are calculated. Based on the calculated data, it is revealed that Δn_{rel} and S satisfy the quasi-linear relation of $S = (1+a) \Delta n_{rel} - a \Delta n_{rel}^2$, where a can be approximated as $n_o \frac{\Delta n}{4}$. The anisotropy of molecular polarizability is also calculated, using the birefringence, and separately following Vuks' method and Neugebauer's method, and it is shown that the relations between S and the molecular-polarizability anisotropy are also quasi-linear.

Keywords: Order Parameter, Birefringence, Uniaxial Anisotropy, Alignment of Liquid Crystal, Molecular Polarizability Anisotropy
OCIS codes: (260.1440) Birefringence; (160.1190) Anisotropic optical materials; (230.3720) Liquid-crystal devices

수치해석적인 방법으로 규명한 정렬된 단축이방성 분자들의 질서변수와 상대 복굴절의 준선형 관계식

김상열[†]

아주대학교 물리학과
Ⓢ 16499 경기도 수원시 영통구 월드컵로 206

(2016년 10월 11일 받음, 2016년 11월 28일 수정본 받음, 2016년 11월 29일 게재 확정)

액정과 같은 단축 이방성 분자들의 정렬 정도에 따라 달라지는 복굴절로부터 상대 복굴절 Δn_{rel} 를 구하고 Δn_{rel} 과 방향질서 변수(orientational order parameter) S 의 관계를 탐색하였다. 무질서한 분포를 하고 있는 경우를 포함하여 액정의 정렬정도를 달리 표현할 수 있는 분포함수를 도입하고 이 분포함수를 사용하여 질서변수 S 가 0부터 1까지 변화도록 액정분자들의 정렬정도를 달리하며 Δn_{rel} 과 S 를 수치계산 하였다. 이 계산 결과로부터 S 와 Δn_{rel} 는 $S = (1+a) \Delta n_{rel} - a \Delta n_{rel}^2$ 와 같이 준선형적인 관계를 만족하며 a 는 $n_o \frac{\Delta n}{4}$ 으로 근사할 수 있음을 확인하였다. 또한 복굴절로부터 Vuks의 방법에 따라 구한 분자분극의 이방성과 Neugebauer의 방법에 따라 구한 분자분극의 이방성이 각각 질서변수 S 와 또 다른 준선형 관계식들을 따름을 보였다.

Keywords: 질서변수, 복굴절, 단축 이방성, 액정의 배열, 분자분극의 이방성
OCIS codes: (260.1440) Birefringence; (160.1190) Anisotropic optical materials; (230.3720) Liquid-crystal devices

[†]E-mail: sykim@ajou.ac.kr

Color versions of one or more of the figures in this paper are available online.

I. 서 론

액정과 같이 단축 이방성을 가지고 있는 분자들의 정렬 정도를 나타내는 방법은 여러 가지가 있다. 미시적인 관점에서 정렬 정도를 나타내는 상수인 방향질서변수(orientational order parameter) S 는 특정 방향으로 정렬한 액정분자의 수가 평균 이상일 때 그 방향의 단위벡터인 방향자(director) \hat{n} 과 액정의 장축이 이루는 각도를 사용하여 통계적인 평균을 취하여 구한다.^[1-3] 모든 액정이 한 방향으로 나란하게 배열하고 있을 경우 $S=1$ 이며 액정들이 무질서하게 분포하고 있는 경우 $S=0$ 이다. 한편 액정분자들이 나란하게 정렬되면 복굴절 특성을 가진다. 이 때 복굴절의 크기는 액정분자들이 정렬하는 정도에 따라 달라지는데 모든 액정분자들이 나란하게 정렬하고 있을 경우($S=1$) 복굴절은 최대값을 가지고 액정분자들이 무질서하게 분포하고 있는 경우($S=0$) 복굴절은 사라진다. 복굴절이 최대가 될 때 전기장이 액정의 정렬방향과 나란한 방향으로 진동하는 빛의 굴절률인 이상굴절률 n_e 와 전기장이 이에 수직한 방향으로 진동하는 빛의 굴절률인 정상굴절률 n_o 차이로써 배열된 액정의 복굴절이 $\Delta n = n_e - n_o$ 와 같이 정의되는데 측정되는 복굴절은 액정분자들의 정렬 정도에 따라 Δn 보다 작거나 비슷한 크기를 가진다. 한편 거시적인 관점에서의 질서변수가 근사적으로 S 와 비례하는 것으로 간주하여 질서변수를 측정된 복굴절의 Δn 에 대한 상대값으로 대개 정의한다.^[2-8] 그러나 이웃하는 분자들에 의한 국지적 전기장의 효과로 인해 이들의 관계가 완벽한 선형식으로 표현되지는 않을 것으로 추정되고 있다.^[9,10] 한편 Vuks의 방법에 따라 측정된 복굴절로부터 분자 분극(molecular polarizability)의 이방성을 계산하고 이로부터 거시적인 관점에서의 질서변수를 정의하거나^[6-8,10-14] 또는 근사하여 분자 분극 이방성으로부터 미시적인 질서변수 S 를 정의하기도 하며^[6,11] Neugebauer의 방법으로 구한 분자 분극 이방성으로부터 질서변수를 정의하기도 한다.^[14-16] 그러나 액정분자들이 어떤 상태로 정렬되어 있을 때 미시적인 관점에서의 질서변수인 S 와 거시적 변수인 복굴절 또는 분자 분극 이방성을 각각 독립적으로 구하고 이들의 관계를 밝힌 연구결과는 아직 보고된 바가 없다. 본 연구에서는 단 하나의 변수만으로 S 가 0부터 1까지 연속적으로 바뀌도록 하는 분포함수를 도입하고 정렬의 정도를 달리하는 액정분자의 여러 분포에 대하여 S 와 복굴절을 각각 수치계산한 뒤 이들의 관계를 간단한 수식으로 나타내었다. 또한 복굴절로부터 분자분극의 이방성을 계산하고 분자분극의 이방성을 사용하여 질서변수 S 를 표현하는 관계식들도 제시하였다.

온도나 조성비의 변화에 따라, 또는 배향막의 존재와 외부에서 인가한 전자기장에 따라 달라질 수 있는 액정분자들의 질서변수 S 를 대응되는 위치에서 측정되는 복굴절 값으로부터 결정할 수 있게 하는 이 관계식은 액정 분자의 정렬 정도와 관련된 연구에 기여할 수 있을 것으로 기대한다.

II. 단축 이방성 분자의 분포함수 및 질서변수

미시적인 관점에서 단축이방성 액정분자들이 정렬하는 정도를 방향질서변수 S 로 나타내는데 이는 액정분자들이 방향자와 이루는 각 θ 의 함수로 정의된다. 액정분자들의 θ 의존성은 분포함수를 사용하여 나타낼 수 있는데 Maier-Saupe 이론에 따른 분포함수는 온도변화와 관련되는 상전이 현상을 잘 설명한다. 흔하지는 않지만 $f(\theta) = \frac{35}{16} \left(\cos^4\theta + \frac{1}{35} \right)$ 와 같은 함수꼴로 액정의 각도 분포를 나타내기도 하는 데 이 경우 액정분자들의 질서변수 S 는 0.5이다.^[3] 이에 비해 외부에서 인가된 전자기장 등에 의한 효과는 대개 에너지 최소화 조건을 적용하여 수치해석적인 방법으로 구한 분포곡선을 사용한다.^[1,3] 본 연구에서는 액정분자들의 분포를 변화시키는 요인과 분포 변화와의 인과관계 보다는 주어진 각각의 분포에 따른 액정분자들의 정렬의 정도 즉 질서변수 S 와 복굴절의 관계를 관심의 대상으로 하므로 다음과 같이 접근하였다. 즉 단 하나의 변수 ξ 만으로 0부터 1까지 S 가 연속적으로 바뀔 수 있도록 액정의 각도분포를 간편하게 나타낼 수 있는 분포함수를 도입하고 이 분포함수를 이용하여 액정의 정렬의 정도를 달리하며 S 와 복굴절을 수치계산하였다. 구체적으로는 다음과 같다.

방향자가 z 축과 나란하도록 좌표축을 설정하고 액정분자의 장축(long axis)이 z 축과 이루는 각도를 θ 라고 둔 다음 식 (1)과 같은 분포함수를 도입한다. 여기에서 액정분자들은 θ 의존성은 식 (1)의 분포함수를 따르지만 방위각 의존성은 없는 분포 즉 z 축 주위 회전대칭성 분포를 가지고 있으며 액정은 nematic 상으로써 $f(\theta) = f(\pi - \theta)$ 의 각도대칭성을 가지고 있는 것으로 설정하였다.

$$f_{\xi}(\theta) = \frac{(\xi+1)}{4\pi} |\cos^{\xi}(\theta)| \quad (\xi \geq 0) \tag{1}$$

식 (1)의 분포함수는 전 공간에 대해 입체각 적분할 경우 적분값이 1.0이 되는 조건, 즉 식 (2)의 정규화 조건을 만족한다.

$$\iint d\Omega f_{\xi}(\theta) = 1.0 \tag{2}$$

식 (2)에서 $\iint d\Omega$ 는 전 공간에 걸친 입체각 적분을 의미하는데 $\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta$ 와 같이 풀어 쓸 수 있다. 한편 식 (1)의 분포함수는 다음과 같은 특성을 가지고 있다.^[3]

$$\lim_{\xi \rightarrow 0} f_{\xi}(\theta) \rightarrow \frac{1}{4\pi} \tag{3a}$$

$$\lim_{\xi \rightarrow \infty} f_{\xi}(\theta) \rightarrow \frac{1}{2\pi} \delta(\theta) \tag{3b}$$

즉 이 $f_\xi(\theta)$ 는 ξ 가 0이 되면 θ 와 무관하게 일정한 값이 되어 액정분자가 무질서하게 분포함을 나타낸다. 액정분자 같은 단축이방성 분자들이 무질서하게 분포할 때 거시적 물리량은 등방성을 나타낸다. 즉 $\xi=0$ 일 때 액정분자들은 광학적으로 등방성을 띠어 복굴절은 0이 된다. 이와 반대로 ξ 가 매우 커지면 θ 가 0으로부터 벗어남에 따라 $f_\xi(\theta)$ 가 급격히 0에 가까워져 모든 액정분자가 z축과 나란하게 배열하고 있음을 나타내며 복굴절은 최대가 된다. ξ 가 0에서 시작하여 점점 증가하면 액정분자가 z축과 나란하게 정렬하는 정도도 이에 따라 증가함을 나타내므로 식 (1)은 액정분자가 정렬하는 정도를 간편하게 표현할 수 있게 한다.

단축 이방성을 가지는 액정분자들이 정렬하는 정도를 미시적인 관점에서 표현하는 질서변수 S 는 다음과 같이 정의된다.^[1,3]

$$S = \left\langle \frac{1}{2}(3 \cos^2 \theta - 1) \right\rangle \quad (4)$$

액정분자들이 식 (1)과 같은 분포함수를 따를 경우 식 (4)의 통계적 평균을 취하는 수학적 표현은 아래식과 같다.

$$S = \iint d\Omega f_\xi(\theta) \frac{(3 \cos^2 \theta - 1)}{2} \quad (5)$$

분포함수의 모양이 ξ 에 따라 어떻게 달라지는가를 보여주기 위해 $\xi = \frac{1}{16}, \frac{1}{4}, 1, 4, 16$ 일 때 각각 계산한 분포함수들을 최대값이 1이 되도록 규격화하여 그림 1에 나타내었다. 또한 각 분포함수에 대응되는 S 를 분포함수의 모양과 대응시켜 검토할 수 있도록 그림 1의 설명으로 추가하였다.

한편 ξ 의 함수로 S 를 그린 그림 2에서 확인할 수 있듯이 ξ 가 증가하면 S 는 급격히 증가하다가 매우 완만하게 1.0으로 접근한다.

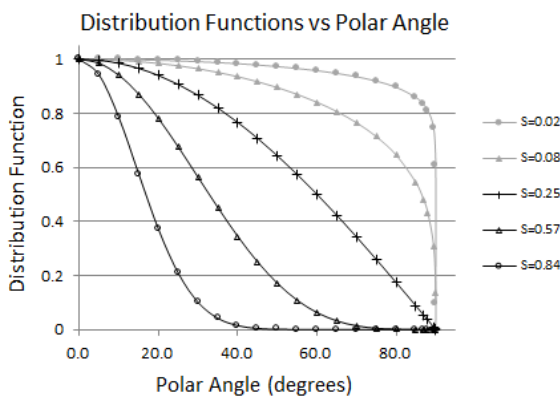


Fig. 1. A series of distribution function when ξ is 1/16, 1/4, 1, 4 and 16, respectively. The corresponding order parameters are 0.02, 0.08, 0.25, 0.57 and 0.84, respectively, from top.

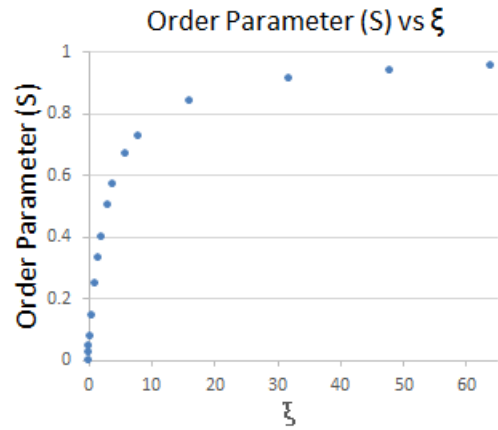


Fig. 2. Variation of the order parameter S vs ξ for a series of uniaxial molecules distributed as given in Eq. (1).

III. 복굴절의 계산 및 질서변수와의 관계

액정분자들이 어떤 형태로 분포하고 있을 때 x,y,z축 방향으로의 굴절률들을 구하기 위해 정상굴절률이 n_o 이고 이상굴절률이 n_e 인 단축이방성 액정들의 장축이 공간의 어떤 방향(각도는 θ, ϕ)으로 향하고 있을 때 x,y,z축 방향으로의 굴절률 $n_x(\theta, \phi)$, $n_y(\theta, \phi)$, $n_z(\theta, \phi)$ 을 알아보자. 이들은 각각 다음과 같이 쓰여진다.^[17]

$$\frac{1}{n_x^2(\theta, \phi)} = \frac{\sin^2 \theta \cos^2 \phi}{n_e^2} + \frac{1 - \sin^2 \theta \cos^2 \phi}{n_o^2} \quad (6a)$$

$$\frac{1}{n_y^2(\theta, \phi)} = \frac{\sin^2 \theta \sin^2 \phi}{n_e^2} + \frac{1 - \sin^2 \theta \sin^2 \phi}{n_o^2} \quad (6b)$$

$$\frac{1}{n_z^2(\theta, \phi)} = \frac{\cos^2 \theta}{n_e^2} + \frac{\sin^2 \theta}{n_o^2} \quad (6c)$$

만약 액정분자들이 방위각 ϕ 에 대한 고른 분포를 가지고 있다면 $n_x(\theta, \phi)$ 와 $n_y(\theta, \phi)$ 는 각각 $n_x(\theta)$, $n_y(\theta)$ 와 같이 쓸 수 있고 식 (6a)와 식 (6b)에 $\frac{1}{2\pi} \int d\phi$ 와 같이 평균을 취하면 식 (7)과 같이 된다.

$$\frac{1}{n_x^2(\theta)} = \frac{1}{n_y^2(\theta)} = \frac{1}{2} \left(\frac{\sin^2 \theta}{n_e^2} + \frac{1 + \cos^2 \theta}{n_o^2} \right) \quad (7)$$

액정분자들이 어떤 분포함수에 따라 분포하고 있을 때 x,y,z축 방향으로의 굴절률은 이 결과를 이용하면 쉽게 계산할 수 있는데 액정분자들이 식 (1)의 분포함수와 같은 θ 의 존성을 가진다면 z축과 나란한 방향의 굴절률인 n_{\parallel} 과 z축에 수직인 방향의 굴절률인 n_{\perp} 는 각각 다음과 같이 구한다.

$$\frac{1}{n_{\parallel}^2} = \iint d\Omega \left(\frac{\cos^2 \theta}{n_e^2} + \frac{\sin^2 \theta}{n_o^2} \right) f_\xi(\theta) \quad (8a)$$

$$\frac{1}{n_{\xi\perp}^2} = \iint d\Omega \left(\frac{\sin^2\theta}{n_e^2} + \frac{1 + \cos^2\theta}{n_o^2} \right) \frac{f_{\xi}(\theta)}{2} \quad (8b)$$

만약 $\xi=0$ 이면 $f_{\xi}(\theta) = \frac{1}{4\pi}$ 으로 일정한 값을 가져 액정분자들이 무질서한 분포를 하고 있는 것을 나타내는데 이 때는 $S=0$ 이고 $n_{0\parallel} = n_{0\perp}$ 가 되어 광학적으로 등방성을 가지므로 이 때의 굴절률을 평균굴절률 n_{av} 이라고 정의할 수 있다. 평균굴절률 n_{av} 는 다음과 같다.

$$\frac{1}{n_{av}^2} = \frac{1}{3} \left(\frac{1}{n_e^2} + \frac{2}{n_o^2} \right) \quad (9)$$

한편 복굴절 Δn_{ξ} 와 상대 복굴절 Δn_{rel} 을 다음과 같이 정의한다.

$$\Delta n_{\xi} = n_{\xi\parallel} - n_{\xi\perp} \quad (10a)$$

$$\Delta n_{rel} \equiv \frac{\Delta n_{\xi}}{n_e - n_o} = \frac{\Delta n_{\xi}}{\Delta n} \quad (10b)$$

복굴절 Δn_{ξ} 은 액정분자의 분포 즉 액정분자들이 정렬하는 정도에 따라 0과 Δn 사이의 값을 가지며 상대 복굴절 Δn_{rel} 은 0과 1 사이의 값을 가진다. 즉 $\xi=0$ 이면 $S=0$, $\Delta n_{\xi}=0$ ($\Delta n_{rel}=0$)가 되고 ξ 가 증가하면 S 는 1에 가까워지며 Δn_{ξ} 는 Δn 에(Δn_{rel} 은 1에) 가까워진다. $n_e = 1.6307$, $n_o = 1.4984$ (MDA-99-3996, Merck Co. Ltd)인 액정분자에 대하여 ξ 를 바꾸어가며 복굴절과 상대 복굴절 Δn_{rel} 을 계산한 뒤 Δn_{rel} 과 S 의 관계를 그림 3에 나타내었다. 이 그림들에서 확인할 수 있듯이 S 는 Δn_{rel} 에 따라 거의 선형적으로 변하며 이들의 관계는 다음과 같은 2차식으로 잘 표현된다.

$$S = (1+a) \Delta n_{rel} - a \Delta n_{rel}^2 \quad (11)$$

식 (11)의 2차항의 계수의 크기 a 가 1.0보다 매우 작으면 식 (11)을 준선형 관계식이라고 할 수 있다. a 의 크기로부터 Δn_{rel} 과 S 가 선형관계식으로부터 벗어나는 정도를 대략 가늠할 수 있는데 a 의 크기는 복굴절의 크기에 거의 비례하여 증가한다. 복굴절이 작은 네마틱 액정으로부터 복굴절이 큰 네마틱 액정에 이르기까지 4가지의 네마틱 액정에 대하여 S 와 Δn_{rel} 을 수치계산하고 이들의 관계식을 2차함수의 형태로 표 1에 정리하였다. 수치계산에 사용된 액정의 굴절률들의 유효숫자가 소수점 이하 4째 자리인 점을 감안한다면 표 1에 나타나 있는 S 와 Δn_{rel} 간의 2차식의 상수항은 0.0으로 간주할 수 있겠다. 표 1에 제시된 S 와 Δn_{rel} 간의 관계식에서 2차항의 계수의 크기 즉 식 (11)의 a 는 근사적으로 액정의 정상굴절률 n_o 과 액정의 복굴절 Δn 으로 아래와 같이 나타낼 수 있다.

Order Parameter (S) vs Normalized Birefringence (Δn_{rel})

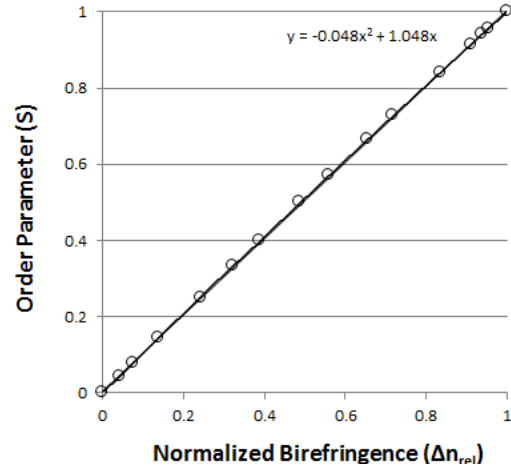


Fig. 3. A typical graph showing the quasi-linear relation between the normalized birefringence Δn_{rel} and the orientational order parameter S of distributed liquid crystal molecules, where $n_e = 1.6306$, $n_o = 1.4984$ are used as the refractive indices of the liquid crystal molecules.

$$a \approx n_o \frac{\Delta n}{4} \quad (12)$$

식 (11) 또는 식 (12)의 관계식은 액정분자들의 분포를 나타내는 분포함수의 종류와는 무관하게 성립하는 보편적인 관계식으로 식 (1)과 같은 $|\cos^{\xi}(\theta)|$ 형태의 분포함수 대신 Maier-Saupe 이론에 기반한 $e^{-V(\theta)/k_B T}$ [단 $V(\theta) = -C(3\cos^2\theta - 1)$] 형태의 분포함수를 사용할 때에도 표 1에 정리된 바와 동일한 수치값들을 얻었다.

한편 복굴절 대신 Vuks의 방법에 따라 아래식과 같이 정의되는 분자분극의 이방성을 사용하여 질서변수를 기술하는 시도도 있다.^[6-8,10-14]

$$\frac{4\pi N \alpha_{e,o}}{3} = \frac{n_{e,o}^2 - 1}{n^2 + 2} \quad (13)$$

여기서, α_e 와 α_o 는 각각 z축과 나란한 방향과 z축과 수직인 방향의 분자분극을, 그리고 n 은 평균굴절률을 말하는데 대개 $n^2 = (n_o^2 + 2n_e^2)/3$ 을 사용한다.^[7,8,14,15] 식 (13)의 우측항에 $n_e = n_{\xi\parallel}$, $n_o = n_{\xi\perp}$ 와 같이 대입하여 분자분극 $\alpha_{\xi\parallel}$, $\alpha_{\xi\perp}$ 을 각각 구하고 상대 분자분극 이방성인 $\Delta \alpha_{rel}$ 을 식 (14a)과 같이 정의할 수 있는데 이 상대 분자분극 이방성은 굴절률만을 사용하여 식 (14b)와 같이 표현할 수도 있다. 식 (14b)는 단위부피당 액정분자의 갯수 N 이나 평균굴절률 n 을 사용하지 않고도 상대 분자분극 이방성을 구할 수 있게 한다.

$$\Delta \alpha_{rel} = \frac{\alpha_{\xi\parallel} - \alpha_{\xi\perp}}{\alpha_e - \alpha_o} \quad (14a)$$

Table 1. The calculated quasi-linear relations between the orientational order parameter(S) and either the normalized birefringence(Δn_{rel}) or the normalized polarizabilities($\Delta\alpha_{rel}$, $\Delta\alpha'_{rel}$) using four selected liquid crystal molecules whose birefringence ranges from weak to strong, are presented

	MLC-9200-000 (ref. 18)	MDA-99-3996 (Merck Co. Ltd)	TL-216 (ref. 18)	E44 (ref. 18)
n_e	1.5634	1.6307	1.7412	1.8652
n_o	1.4793	1.4984	1.5268	1.5509
$n_e - n_o$	0.0841	0.1323	0.2144	0.3143
n_{av}	1.5058	1.5389	1.5892	1.6374
S vs Δn_{rel}	$y = -0.0302x^2 + 1.0302x - 0.0000$	$y = -0.0481x^2 + 1.0482x - 0.0001$	$y = -0.0796x^2 + 1.0798x - 0.0001$	$y = -0.1191x^2 + 1.1194x - 0.0002$
S vs $\Delta\alpha_{rel}$	$y = -0.0408x^2 + 1.0409x - 0.0001$	$y = -0.0657x^2 + 1.0659x - 0.0001$	$y = -0.1098x^2 + 1.1099x - 0.0001$	$y = -0.1657x^2 + 1.1657x - 0.0000$
S vs $\Delta\alpha'_{rel}$	$y = -0.0229x^2 + 1.0230x - 0.0001$	$y = -0.0384x^2 + 1.0387x - 0.0001$	$y = -0.0680x^2 + 1.0685x - 0.0002$	$y = -0.1080x^2 + 1.1086x - 0.0004$

$$\Delta\alpha_{rel} = \frac{n_{\xi\parallel}^2 - n_{\xi\perp}^2}{n_e^2 - n_o^2} \quad (14b)$$

$$b \approx n_o \frac{\Delta n}{3} \quad (18a)$$

$$b' \approx n_o \frac{\Delta n}{5} \quad (18b)$$

또한 Neugebauer의 방법에 따르면 분자분극은 다음 식과 같이 쓰여진다.^[14-16]

$$\frac{4\pi N\alpha'_{e,o}}{3} = \frac{n_{e,o}^2 - 1}{n_{e,o}^2 + 2} \quad (15)$$

식 (15)의 우측 항에 $n_e = n_{\xi\parallel}$, $n_o = n_{\xi\perp}$ 와 같이 대입하여 분자분극들을 구하고 상대 분자분극 이방성인 $\Delta\alpha'_{rel}$ 를 식 (16)과 같이 정의할 수 있다.

$$\Delta\alpha'_{rel} = \frac{\alpha'_{\xi\parallel} - \alpha'_{\xi\perp}}{\alpha'_e - \alpha'_o} = \frac{\left(\frac{n_{\xi\parallel}^2 - 1}{n_{\xi\parallel}^2 + 2} - \frac{n_{\xi\perp}^2 - 1}{n_{\xi\perp}^2 + 2}\right)}{\left(\frac{n_e^2 - 1}{n_e^2 + 2} - \frac{n_o^2 - 1}{n_o^2 + 2}\right)} \quad (16)$$

S 가 식 (11)에서와 같이 Δn_{rel} 의 준선형 관계식으로 표현 되는 것과 비슷하게 S 와 $\Delta\alpha_{rel}$ 또는 S 와 $\Delta\alpha'_{rel}$ 의 관계도 식 (17)과 같이 준선형 관계식으로 표현할 수 있다. S 를 $\Delta\alpha_{rel}$ 또는 $\Delta\alpha'_{rel}$ 의 2차함수로 표현한 결과도 표 1에 함께 정리하였다.

$$S = (1+b) \Delta\alpha_{rel} - b \Delta\alpha_{rel}^2 \quad (17a)$$

$$S = (1+b') \Delta\alpha'_{rel} - b' \Delta\alpha'_{rel}^2 \quad (17b)$$

식 (17)의 2차항의 계수인 b 또는 b' 의 크기도 식 (12)의 2차항의 계수인 a 와 마찬가지로 복굴절의 크기에 비례하여 증가하는데 이들은 근사적으로 다음과 같은 관계를 만족한다.

IV. 결 론

단축 이방성을 가지는 액정분자들이 정렬하는 정도를 하나의 변수를 사용하여 간편하게 기술할 수 있도록 분포함수를 제시하고 액정분자들의 여러 정렬상태에 대하여 복굴절과 상대 복굴절인 Δn_{rel} 그리고 방향질서변수 S 를 수치계산 하였으며 이 결과를 이용하여 S 와 Δn_{rel} 는 $S = (1+a) \Delta n_{rel} - a \Delta n_{rel}^2$ 와 같이 준선형 관계를 만족하며 a 는 $n_o \frac{\Delta n}{4}$ 으로 근사할 수 있음을 밝혔다. 또한 복굴절으로부터 구한 상대 분자분극 이방성도 S 와 준선형 관계를 가지고 있음을 보였다.

감사의 글

본 논문을 꼼꼼하게 검토하여 주신 아주대학교의 안성혁 교수님께 감사드립니다.

References

1. P. Yeh and C. Gu, *Optics of Liquid Crystal Display* (John Wiley & Sons, Inc., New York, 1999) chap. 1 & chap. 5.
2. P. G. de Gennes, "Short range order effects in the isotropic phase of nematics and cholesterics," *Molecular Crystals and Liquid Crystals* **12**, 193-214 (1971).
3. D.-K. Yang and S.-T. Wu, *Fundamentals of Liquid Crystal Devices* (John Wiley & Sons, Ltd., 2006) chap.1 & chap. 5-7.
4. M. Simoes, D. S. Simeao, A. de Campos, and A. J. Palangana, "Corresponding states of nematic birefringence: an order

- parameter universality,” *Philosophical Magazine* **87(33)**, 5237-5247 (2007).
5. V. G. K. M. Pisipati, D. Madhavi Latha, P. V. Datta Prasad, and G. Padmaja Rani, “Order parameter studies from effective order geometry in a number of liquid crystals of different homologous series,” *J. Molecular Liq.* **174**, 1-4 (2012).
 6. H. Ozbek, S. Ustunel, E. Kutlu, and M. C. Cetinkaya, “A simple method to determine high-accuracy refractive indices of liquid crystals and the temperature behavior of the related optical parameters via high-resolution birefringence data,” *J. Molecular Liq.* **199**, 275-286 (2014).
 7. Sangita Patari, T. K. Devi, and Aparna Nath, “Studies of optical texture, birefringence, order parameter, normalized polarizability and validation of the four-parameter model of a thermotropic mesogen 7OAOB,” *J. Molecular Liq.* **215**, 244-252 (2016).
 8. A. Kumar, “Calculation of optical parameters of liquid crystals,” *Acta Physica Polonica A* **112(6)**, 1213-1221 (2007).
 9. P. G. de Gennes, *The Physics of Liquid Crystals* (2nd ed., Oxford Science Publications, Oxford 1993).
 10. M. G. Robinson, J. Chen and G. D. Sharp, *Polarization Engineering for LCD Projection* (John Wiley & Sons, Ltd., 2005) Chapter 5.
 11. M. N. Akimov, O. F. Bezrukov, M. F. Vuks, and A. V. Struts, “The study of birefringence and orientational order in plastic tert-butyl bromide,” *Molecular Cryst. and Liq. Cryst. Inc. Nonlinear Opt.* **192(1)**, 197-201 (1990).
 12. M. F. Vuks, “Determination of the optical anisotropy of aromatic molecules from the double refraction of crystals,” *Opt. Spectrosc.* **20**, 361-364 (1966).
 13. M. F. Vuks, N. B. Rozhdestvenskaya, and K. Eidner, “Determination of the optical anisotropy of the molecules of various liquid crystals based on tolan and benzylidene-aniline,” *Opt. Spectrosc.* **45(5)**, 768-769 (1978).
 14. M. Mitra, S. Paul, and R. Paul, “Optical birefringence and order parameter of three nematogens,” *J. Physics* **29(4)**, 409-417 (1987).
 15. V. S. Chandel, R. Manohar, and J. P. Shukla, “Refractive indices, order parameter and density study of BKS/B07 nematic liquid crystal,” *Anal. Univ. Bucuresti-Chimie* **20(2)**, 155-163 (2011).
 16. A. Kanwar, “Measurement of order parameter, birefringence and polarizability of liquid crystals,” *J. Optics* **42(4)**, 311-315 (2013).
 17. S. Y. Kim, “Ellipsometric expressions for two uniaxially anisotropic layers coated on a multilayered substrate,” *Korean J. Opt. Photon.* **26(2)**, 115-120 (2015).
 18. Jun Li, “Refractive Indices of Liquid Crystals and Their Applications in Display and Photonics Devices,” Ph.D. Thesis, University of Central Florida, Orlando, USA (2005), chap. 4.