

# Universality of the Quasi-linear Relation Between the Order Parameter and the Normalized Birefringence of Aligned Uniaxially Anisotropic Molecules

Sang Youl Kim<sup>†</sup>

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

(Received November 8, 2016; Revised manuscript December 21, 2016; Accepted December 23, 2016)

The universality of the quasi-linear relation between the order parameter  $S$  and the normalized birefringence  $\Delta n_{rel}$ ,  $S = (1+a)\Delta n_{rel} - a\Delta n_{rel}^2$  is confirmed. It is verified that the refractive index of liquid crystals distributed with regular polyhedral symmetry is isotropic and it is given as  $\frac{1}{n_{av}^2} = \frac{1}{3} \left( \frac{1}{n_e^2} + \frac{2}{n_o^2} \right)$ .  $S$  and  $\Delta n_{rel}$  of angular weighted liquid crystals that are initially distributed with regular polyhedral symmetry, are numerically calculated. Also  $\Delta n_{rel}$  and  $S$  of liquid crystals that are conically distributed, keeping the rotational symmetry about z-axis are calculated as the apex angle of the cone is varied. Based on these calculated results, it is confirmed that the quasi-linear relation between  $S$  and  $\Delta n_{rel}$  is universal, independent of the details of the distribution function.

Keywords: Order Parameter, Birefringence, Universality of the Quasi-linear Relation, Alignment of Liquid Crystal  
OCIS codes: (260.1440) Birefringence; (160.1190) Anisotropic optical materials; (230.3720) Liquid-crystal devices

## 정렬된 단축이방성 분자들의 질서변수와 상대 복굴절률 준선형 관계식의 보편성

김상열<sup>†</sup>

아주대학교 물리학과  
Ⓣ 16499 경기도 수원시 영통구 월드컵로 206

(2016년 11월 8일 받음, 2016년 12월 21일 수정본 받음, 2016년 12월 23일 게재 확정)

액정과 같은 단축 이방성 분자들의 상대 복굴절률  $\Delta n_{rel}$ 과 질서변수  $S$ 가 만족하는 준선형 관계식인  $S = (1+a)\Delta n_{rel} - a\Delta n_{rel}^2$ 이 보편적인 관계식임을 확인하였다. 액정분자들이 정다면체 대칭분포를 할 경우 굴절률은 등방적이며  $\frac{1}{n_{av}^2} = \frac{1}{3} \left( \frac{1}{n_e^2} + \frac{2}{n_o^2} \right)$ 와 같이 구해짐을 확인하였다. 정다면체 대칭성을 가지는 액정의 기본 분포에 분포함수 가중치를 가하여 액정의 정렬정도를 바꾸며  $\Delta n_{rel}$ 과  $S$ 를 수치계산 하였다. 또한 액정이 z축 주위 회전대칭성을 가지는 깔때기 모양으로 분포하고 있을 때 깔때기의 중심각을 변화시키며  $\Delta n_{rel}$ 과  $S$ 를 수치계산 하였다. 이로부터  $S$ 와  $\Delta n_{rel}$ 의 준선형 관계식이 액정의 분포형태와는 무관한 보편적인 관계식임을 보였다.

Keywords: 질서변수, 복굴절, 준선형 관계식의 보편성, 액정의 정렬  
OCIS codes: (260.1440) Birefringence; (160.1190) Anisotropic optical materials; (230.3720) Liquid-crystal devices

### I. 서 론

액정과 같이 단축 이방성을 가지고 있는 분자들의 정렬정도를 나타낼 때 미시적인 관점에서는 방향자(director)와 액정의 장축이 이루는 각도의 통계적인 평균을 취하는 방향질서변수(orientational order parameter)  $S$ 를 사용한다.<sup>[1-6]</sup> 거시적인 관점에서는 모든 액정분자들이 나란하게 정렬하고 있

을 경우 최대값을 가지고 액정분자들이 무질서하게 분포하고 있는 경우 사라지는 복굴절을 이용하여 이상굴절률  $n_e$ 와 정상굴절률  $n_o$  차이인  $\Delta n$ 에 대한 복굴절의 상대값 또는 복굴절을 사용하여 구한 분자분극 이방성의 상대값으로 질서변수(order parameter)를 정의하기도 한다.<sup>[3-11]</sup> 거시적인 관점에서의 질서변수는 미시적인 관점에서의 질서변수인  $S$ 와 비례하는 것으로 간주되어 왔는데 최근에 무질서한 액정 분포

<sup>†</sup>E-mail: [sykim@ajou.ac.kr](mailto:sykim@ajou.ac.kr)

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

에 각도의존 분포함수 가중치를 가하여 액정의 정렬 정도를 바꾸며 상대 굴절률인  $\Delta n_{rel}$ 과  $S$ 를 수치계산한 결과를 바탕으로 이들이  $S = (1+a)\Delta n_{rel} - a\Delta n_{rel}^2$ 와 같은 준선형 관계식을 만족함을 보고한 바 있다.<sup>[12]</sup> 본 연구에서는 무질서한 액정 분포가 아닌 정다면체 분포에 기반한 액정분포와 깔때기형 대칭성을 가지는 액정 분포에 대한 수치해석적 분석을 통하여 이 준선형 관계식이 액정의 분포 형태와는 무관하게 성립하는 보편적인 관계식임을 보였다. 본 연구결과는 액정과 같은 단축이방성 분자들의 질서변수  $S$ 를 측정된 복굴절로부터 결정할 수 있게 하여 액정의 배열과 관련된 연구에 기여할 수 있을 것으로 기대한다.

**II. 정다면체 대칭성 및 액정의 분포함수와 질서변수**

정다면체는 정4면체, 정6면체, 정8면체, 정12면체, 정20면체의 5가지가 존재하는데 정다면체를 그림 1과 같이 반지름이 1인 단위구에 내접시키면 꼭지점들의 위치는 좌표 원점인 구의 중심에서 정다면체의 각 꼭지점으로 향하는 단위벡터로 표시할 수 있다. 방향자와 정다면체의 한 꼭지점을 z축과 나란하게 하며 액정분자의 장축(long axis)이 z축과 이루는 각도는  $\theta$ , 정다면체의 다른 한 꼭지점이 xz 평면상에 있도록 좌표계를 설정하면 꼭지점의 각도( $\theta_i, \phi_i$ )들은 표 1에 정리된 바와 같이 나타난다. 정다면체의 각 꼭지점 방향으로 액정이 고루 분포할 경우 거시적인 물리량은 등방성을 띠지만 z축과 이루는 각도에 따라 액정이 어떤 가중치를 가지고 정렬하게 되면 z축은 광축이 되며 광학적 이방성이 발현된다.

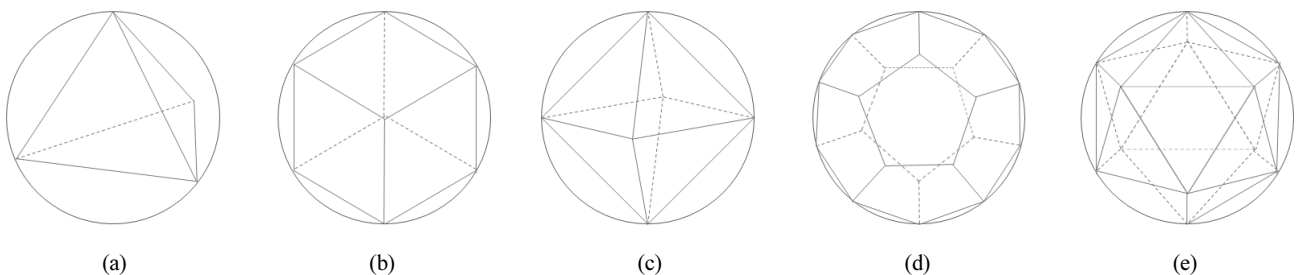
액정의 분포는 온도에 민감한데 온도변화와 관련되는 액정의 상전이 현상을 잘 설명하는 Maier-Saupe에 따르면 액정의 분포함수는  $f(\theta) = \exp^{-uSP_2(\theta-1)/k_B T} / Z$ 와 같이 표현된다. 온도 외에도 외부에서 인가된 전자기장이나 배향막의 존재, 도핑물질의 농도 등에 의해 액정의 분포가 달라지는데 액정분자들이 어떤 형태를 가지고 분포할 때 액정의 정렬도와 액정분자들의 복굴절과의 관계는 분포함수의 종류나 분포형태에 무관한 보편성을 가지고 있음을 확인하는 것이 본 연구의 주 목적이므로 본 연구에서는 이전의 연구에서와 마찬가지로 식 (1)과 같은 분포함수를 사용하여 가중치를 표현하기로 한다.<sup>[12]</sup>

**Table 1.** Type and number of vertex of regular polyhedrons, together with the polar angles and the azimuthal angles of vertexes

type	# of vertex $N_v$	polar angle $\theta_i$ (degree)	azimuthal angle $\phi_j$ (degree)
tetra-hedron	4	0	-
		109.47	0, 120, 240
hexa-hedron	8	0	-
		70.53	0, 120, 240
		109.47	60, 180, 300
		180	-
octa-hedron	6	0	-
		90	0, 90, 180, 270
		180	-
dodeca-hedron	20	0	-
		41.81	0, 120, 240
		70.53	37.76, 82.24, 157.76, 202.24, 277.76, 322.24
		109.47	22.24, 97.76, 142.24, 217.76, 262.24, 337.76
		138.19	60, 180, 300
		180	-
icosa-hedron	12	0	-
		63.43	36, 108, 180, 252, 324
		116.57	0, 72, 144, 216, 288
		180	-

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

이 분포함수는  $\xi$ 가 0이 되면 액정분자들이 각도 의존성없이 분포함을 나타내고  $\xi$ 가 커지면 z축과 나란하게 정렬하는 액정분자의 비중이 증가하며  $\xi$ 가 매우 커지면 대부분의 액정분자가 z축과 나란하게 정렬하고 있음을 나타낸다. 정다면체의 대칭성 따라 액정이 분포할 경우도 분포함수의 가중치가 가해지면  $\xi=0$ 일 때는 등방적이어서 거시적인 물리량인 복굴절이 0이 되지만  $\xi$ 가 증가함에 따라 이방성의 크기 즉 복굴절도 증가한다.



**Fig. 1.** Regular polyhedrons which touch internally to a unit sphere. (a) tetrahedron, (b) hexahedron, (c) octahedron, (d) dodecahedron and (e) icosahedron.

미시적인 관점에서 액정분자들이 정렬한 정도를 나타내는 방향질서변수  $S$ 는 다음과 같이 정의된다.<sup>[1]</sup>

$$S = \frac{1}{2}(3 < \cos^2 \theta > - 1) \quad (2)$$

액정분자들이 식 (1)의 분포함수 가중치를 가지고 정다면체 구조의 대칭성에 따라 분포하고 있을 경우 식 (2)의 통계적 평균을 취하는 수학적 표현은 식 (3)과 같다.

$$S = \frac{1}{N_v} \sum_{i,j} f_{\xi}(\theta_i) \left( \frac{3 \cos^2 \theta_i - 1}{2} \right) \quad (3)$$

여기에서  $N_v$ 는 정다면체의 꼭지점의 수를 가리키며  $\sum_{i,j}$ 는 표 1의 모든  $(\theta_i, \phi_j)$ 쌍에 대한 합을 가리킨다. 식 (3)에 따라 계산한 질서변수  $S$ 들을 몇가지  $\xi$ 값에 대하여 표 2에 정리하였다. 표 2에는 무질서하게 분포하고 있는 액정에 식 (1)의 분포함수 가중치를 가하였을 경우의  $S$ 도 나타내었는데 이 표에서 확인할 수 있듯이  $\xi$ 값이 같더라도 액정분자들의 분포형태에 따라  $S$ 는 크게 달라진다.

### III. 정다면체 분포를 하고 있는 액정분자들의 평균굴절률

액정분자들이 정다면체의 각 꼭지점 방향으로 고루 분포하고 있을 때  $x, y, z$  축 방향으로의 굴절률들을 알아보자. 정상굴절률이  $n_o$ 이고 이상굴절률이  $n_e$ (복굴절은  $\Delta n = n_e - n_o$ )인 단축이방성 액정의 장축이 공간의 어떤 방향(각도는  $\theta, \phi$ )으로 향하고 있을 때  $x, y, z$  축 방향으로의 굴절률들은 각각 다음과 같다.<sup>[12,13]</sup>

$$\frac{1}{n_x^2(\theta, \phi)} = \frac{\sin^2 \theta \cos^2 \phi}{n_e^2} + \frac{1 - \sin^2 \theta \cos^2 \phi}{n_o^2} \quad (4a)$$

$$\frac{1}{n_y^2(\theta, \phi)} = \frac{\sin^2 \theta \sin^2 \phi}{n_e^2} + \frac{1 - \sin^2 \theta \sin^2 \phi}{n_o^2} \quad (4b)$$

$$\frac{1}{n_z^2(\theta, \phi)} = \frac{\cos^2 \theta}{n_e^2} + \frac{\sin^2 \theta}{n_o^2} \quad (4c)$$

따라서 액정분자들이 정다면체의 각 꼭지점 방향으로 고루 분포하고 있을 경우  $x, y, z$  축 방향으로의 굴절률들은 표 1에 정리된 꼭지점의 각도들인  $(\theta_i, \phi_j)$ 를 식 (4a), (4b), (4c)에 대입하여 아래식과 같이 구한다.

$$\frac{1}{n_x^2} = \frac{1}{N_v} \sum_{i,j} \frac{1}{n_x^2(\theta_i, \phi_j)} \quad (5a)$$

$$\frac{1}{n_y^2} = \frac{1}{N_v} \sum_{i,j} \frac{1}{n_y^2(\theta_i, \phi_j)} \quad (5b)$$

$$\frac{1}{n_z^2} = \frac{1}{N_v} \sum_{i,j} \frac{1}{n_z^2(\theta_i, \phi_j)} \quad (5c)$$

액정분자들이 정다면체 꼭지점 따라 고루 분포하고 있을 때 공간상 임의의 방향으로의 굴절률도 동일한 방법으로 계산할 수 있는데 예를 들어 정8면체의 꼭지점 따라( $x, y, z$  축 따라) 액정이 고루 분포하고 있을 때, 공간의 어떤 방향(각도  $\theta, \phi$ )으로의 굴절률  $n(\theta, \phi)$ 는 그 방향이  $x, y, z$  축과 각각 이루는 방향코사인을 각각  $\cos \xi, \cos \eta, \cos \theta$ 라 두면 식 (6)과 같다.

$$\frac{1}{n^2(\theta, \phi)} = \frac{1}{3} \left( \frac{\cos^2 \xi}{n_e^2} + \frac{\sin^2 \xi}{n_o^2} \right) + \frac{1}{3} \left( \frac{\cos^2 \eta}{n_e^2} + \frac{\sin^2 \eta}{n_o^2} \right) + \frac{1}{3} \left( \frac{\cos^2 \theta}{n_e^2} + \frac{\sin^2 \theta}{n_o^2} \right) \quad (6)$$

**Table 2.** The calculated order parameters for a few  $\xi$  using Eq. (3). The distribution function given in Eq. (1) is introduced to control alignment of liquid crystals, which are initially distributed with the regular polyhedral symmetry or are randomly distributed. The angular positions of the vertexes are given in Table 1

$\xi$	$S$						
	tetrahedron	hexahedron	octahedron	dodecahedron	icosahedron	total	random
0	0	0	0	0	0	0	0
1/4	0.073	0.073	1.0	0.049	0.036	0.101	0.078
1/2	0.155	0.155	1.0	0.101	0.076	0.162	0.143
1	0.333	0.333	1.0	0.206	0.171	0.292	0.250
2	0.667	0.667	1.0	0.400	0.400	0.536	0.400
4	0.952	0.952	1.0	0.642	0.800	0.821	0.571
8	1.0	1.0	1.0	0.870	0.991	0.958	0.727

이 식에  $\cos\xi = \sin\theta\cos\phi$ ,  $\cos\eta = \sin\theta\sin\phi$ 를 각각 대입하여 정리하면 굴절률  $n(\theta, \phi)$ 은 식 (7)과 같이 공간의 방향  $(\theta, \phi)$ 에 무관한 값을 가짐을 확인할 수 있다. 이 결과는 정8면체 대칭성에 따라 액정이 분포할 경우 굴절률은 각도 의존성을 가지지 않아 등방적임을 나타낸다. 이러한 측면에서 이 등방적 굴절률을 평균굴절률  $n_{av}$ 이라 정의한다.

$$\frac{1}{n_{av}^2} = \frac{1}{3} \left( \frac{1}{n_e^2} + \frac{2}{n_o^2} \right) \quad (7)$$

이 평균굴절률은 유전율의 산술평균으로 구해지는  $n^2 = \frac{1}{3}(n_e^2 + 2n_o^2)$  [2,10,11,14] 또는 굴절률의 산술평균으로 구해지는  $n = \frac{1}{3}(n_e + 2n_o)$ 와는 다르다. 이 값은 액정이 또 다른 정다면체 대칭성에 따라 고루 분포하는 경우와 액정이 무질서한 분포를 하고 있는 경우에도 동일하게 구해지는 등방적인 굴절률 값을 확인할 수 있는데 예를 들어 액정이 정4면체 대칭성을 따라 고루 분포하는 경우 x, y, z 축 방향의 굴절률은 식 (5a)-(5c)에 따라 구하면 각각

$$\frac{1}{n_x^2} = \frac{1}{n_y^2} = \frac{1}{4} \left( \frac{1}{n_o^2} \right) + \frac{3}{8} \left( \frac{\sin^2 109.47^\circ}{n_e^2} + \frac{1 + \cos^2 109.47^\circ}{n_o^2} \right) \quad (8a)$$

$$\frac{1}{n_z^2} = \frac{1}{4} \left( \frac{1}{n_e^2} \right) + \frac{3}{4} \left( \frac{\cos^2 109.47^\circ}{n_e^2} + \frac{\sin^2 109.47^\circ}{n_o^2} \right) \quad (8b)$$

와 같은데 식 (8a)와 식 (8b)를 수치계산하면 다음과 같다.

$$\frac{1}{n_x^2} = \frac{1}{n_y^2} = \frac{1}{n_z^2} = \left( \frac{0.3333}{n_e^2} + \frac{0.6667}{n_o^2} \right) \quad (9)$$

이 결과는 정4면체 대칭성 따라 액정이 분포할 때 x, y, z 축 방향의 굴절률들은 정8면체 대칭성 따라 분포할 때 구한 식 (7)의  $n(\theta, \phi)$  즉  $n_{av}$ 와 동일한 값으로 정8면체의 대칭성이나 정4면체의 대칭성을 가지고 액정이 분포하고 있을 경우 굴절률은 등방적이며  $n_{av}$ 와 동일함을 보여준다. 정4면체와 정8면체 이외에 정6면체, 정12면체 그리고 정20면체의 대칭성에 따라 액정이 분포할 경우에도 굴절률은 등방적이며 식 (7)과 같은 값을 가짐을 수치해석적으로 확인하였다. 참고로 액정이 무질서한 분포 즉  $\theta$ 와  $\phi$ 에 대해 고른 분포를 하고 있다면 식 (4a)-(4c)에  $\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin\theta d\theta$ 와 같이 평균을 취하여  $n_x(\theta, \phi) = n_y(\theta, \phi) = n_z(\theta, \phi) = n_{av}$ 이 됨을 확인할 수 있다.<sup>[12]</sup>

#### IV. 분포함수 가중치가 있는 정다면체 분포를 하고 있는 액정분자들의 복굴절

정다면체 분포를 하고 있는 액정분자들이 식 (1)과 같은 분포함수 가중치를 가질 경우 다음과 같이 복굴절을 계산하였다. 정다면체 대칭성 분포에 식 (1)과 같은  $\theta$  의존성 가중치가 가해질 경우 z축에 수직인 평면상의 굴절률  $n_{\xi\perp}$ 과 z축과 나란한 방향의 굴절률  $n_{\xi\parallel}$ 는 각각 다음과 같이 구한다.

$$\frac{1}{n_{\xi\perp}^2} = \frac{1}{N_v} \sum_{i,j} \frac{f_\xi(\theta_i)}{n_x^2(\theta_i, \phi_j)} = \frac{1}{N_v} \sum_{i,j} \frac{f_\xi(\theta_i)}{n_y^2(\theta_i, \phi_j)} \quad (10a)$$

$$\frac{1}{n_{\xi\parallel}^2} = \frac{1}{N_v} \sum_{i,j} \frac{f_\xi(\theta_i)}{n_z^2(\theta_i, \phi_j)} \quad (10b)$$

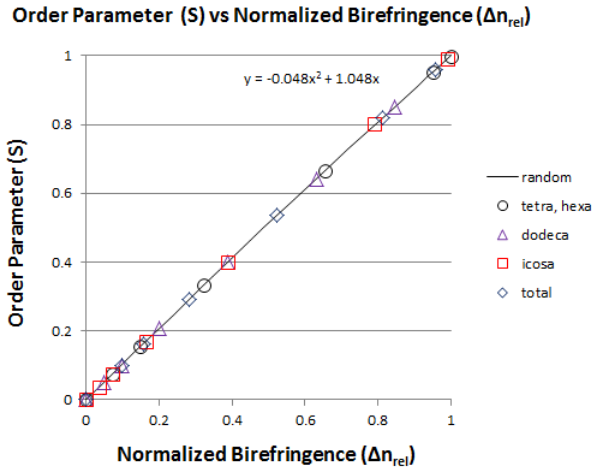
여기에서  $n_x(\theta_i, \phi_j)$ ,  $n_y(\theta_i, \phi_j)$ , 그리고  $n_z(\theta_i, \phi_j)$ 는 식 (4a)-(4c)의  $n_x(\theta, \phi)$ ,  $n_y(\theta, \phi)$ , 그리고  $n_z(\theta, \phi)$ 의  $\theta$ 와  $\phi$ 에 표 1에 정리된 정다면체 꼭지점 각도인  $\theta_i$ 와  $\phi_j$ 를 대입한 것을 말한다. 식 (10a)-(10b)의  $n_{\xi\perp}$ 와  $n_{\xi\parallel}$ 를 이용하여 복굴절  $\Delta n_\xi$ 와 상대 복굴절  $\Delta n_{rel}$ 을 다음과 같이 정의한다.

$$\Delta n_\xi = n_{\xi\parallel} - n_{\xi\perp} \quad (11a)$$

$$\Delta n_{rel} \equiv \frac{\Delta n_\xi}{n_e - n_o} = \frac{\Delta n_\xi}{\Delta n} \quad (11b)$$

액정분자 분포가 정다면체 대칭성을 유지하는 정도에 따라 복굴절  $\Delta n_\xi$ 은 0과  $\Delta n$  사이의 값을 가지며 상대 복굴절  $\Delta n_{rel}$ 은 0과 1 사이의 값을 가진다. 즉  $\xi=0$ 이면 액정분자들은 정다면체 대칭성을 완벽하게 유지하여  $S=0$ ,  $\Delta n_\xi = \Delta n_{rel} = 0$ 가 되며  $\xi$ 가 증가하면 정다면체 대칭성은 깨어지고 z축과 나란하게 정렬한 액정분자들이 많아지므로  $S$ 와  $\Delta n_{rel}$ 은 1에 가까워진다. 표 2에 주어진 몇가지  $\xi$ 와 질서변수  $S$ 에 대응하여 상대 복굴절  $\Delta n_{rel}$ 을 계산하여( $n_e = 1.6307$ ,  $n_o = 1.4984$ 을 사용) 그림 2에 나타내었다. 이 그림에서  $\circ\triangle\square\lozenge$ 의 문자표들은 각각 정4면체와 정6면체, 정12면체, 정20면체 그리고 모든 정다면체의 평균에 대한  $S$ 와  $\Delta n_{rel}$ 의 값들을 가리키며 실선은 무질서한 분포를 하고 있는 액정분자들이 식 (1)의 분포함수에 따라 정렬할 때  $S$ 와  $\Delta n_{rel}$ 가 만족하는 준선형 관계식을 가리킨다.<sup>[12]</sup>  $\circ\triangle\square\lozenge$ 의 문자표들이 모두 실선 위에 놓여 있는 이 그림에서 확인할 수 있듯이  $\Delta n_{rel}$ 과  $S$ 의 관계는 액정분자가 정다면체의 대칭성을 따르거나 무질서하거나 여부에 무관하게 식 (12)와 같이 표현된다.

$$S = (1+a)\Delta n_{rel} - a\Delta n_{rel}^2 \quad (12)$$



**Fig. 2.** The graph showing that the relation between the normalized birefringence  $\Delta n_{rel}$  and the order parameter  $S$  is a universal one ( $n_e = 1.6307$ ,  $n_o = 1.4984$ ). Calculated  $\Delta n_{rel}$  and  $S$  of distributed liquid crystals based on the regular polyhedral symmetries are shown as symbols, which lie exactly on top of the quasi-linear line given as  $y = (1+a)x - ax^2$ .

여기서 2차항의 계수의 크기인  $a$ 는 식 (12)가 선형관계식 으로부터 벗어나는 정도를 가늠하게 하는데 이는 복굴절의 크기와 대략 비례한다. 복굴절의 크기가 다른 4가지 액정에 대하여  $S$ 와  $\Delta n_{rel}$ 를 수치계산하여 이들을 사용하여 구한  $a$  값 들을 표 3에 나타내었다. 표 3에서 제시된 바와 같이 2차 항의 계수의 크기 즉  $a$ 는 근사적으로 식 (13)과 같이 나타낼 수 있음을 확인하였다.<sup>[12]</sup>

**Table 3.** The calculated coefficients of the quasi-linear relation between the orientational order parameter ( $S$ ) and the normalized birefringence ( $\Delta n_{rel}$ ) using four selected liquid crystal molecules with birefringence ranging from weak to strong, are presented. The previously obtained coefficients based on randomly distributed liquid crystal molecules (ref. 12) and  $n_o \frac{\Delta n}{4}$  are presented also for a comparison

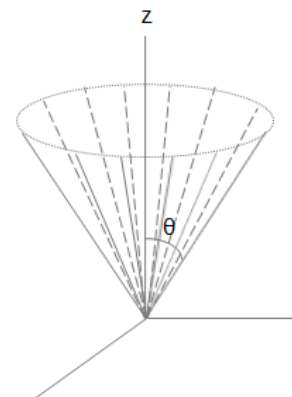
	MLC-9200-000	MDA-99-3996	TL-216	E44
$n_e$	1.5634	1.6307	1.7412	1.8652
$n_o$	1.4793	1.4984	1.5268	1.5509
$n_o \frac{\Delta n}{4}$	0.0311	0.0496	0.0818	0.1219
$a$ (ref. 12)	0.0302	0.0481	0.0796	0.1191
$a$ (this work)	0.0302	0.0481	0.0793	0.1189

$$a \approx n_o \frac{\Delta n}{4} \tag{13}$$

### V. 질서변수와 상대 복굴절이 이루는 관계식의 보편성

액정분자들이 정다면체 대칭성에 따라 분포하고 있거나 무질서한 분포를 하고 있을 경우 질서변수  $S$ 는 0이고 복굴절도 0이다. 액정분자들이 식 (1)의 분포함수와 같은 가중치를 가지고 정렬할 경우에는  $\xi$ 가 같더라도  $S$ 와 복굴절 모두 정다면체의 종류나 무질서한 분포 여부 등 액정분자들의 분포 형태에 따라 달라지지만  $S$ 와  $\Delta n_{rel}$ 과의 관계는 항상 식 (12)를 따르고 있음을 확인하였다.  $S$ 와  $\Delta n_{rel}$ 의 관계식이 가지는 이러한 보편성을 다음과 같은 분석을 통해 재확인하였다.

액정분자들이 그림 3과 같이  $z$ 축을 대칭축으로 한 깔때기 모양의 회전 대칭성을 가지고 있을 경우 깔때기의 꼭지각에 따라  $S$ 와 복굴절은 달라진다. 깔때기의 꼭지각을  $0^\circ$ 부터  $90^\circ$ 까지 증가시키며  $S$ 와  $\Delta n_{rel}$ 을 수치 계산하였다. 꼭지각이  $0^\circ$ 이면  $S = \Delta n_{rel} = 1$ 이 되며 꼭지각이 증가하면  $S$ 와  $\Delta n_{rel}$ 는 감소한다. 꼭지각이  $54.736^\circ$ 가 되면  $S$ 가 0이 되며  $\Delta n_{rel}$ 도 0이 된다. 꼭지각이  $54.736^\circ$  보다 커지면  $S$ 는 음수가 되고 그 절대값은 증가하는데 꼭지각이  $90^\circ$ 가 되면  $S$ 는  $-0.5$ 가 된다. 양수인  $S$ 가 액정분자들이 어떤 축 방향으로 정렬된 정도를 나타낸다면 음수인  $S$ 는 액정이 그 축에 수직인 평면 방향으로 정렬된 정도를 나타내는 것으로  $S = -0.5$ 는 평면상으로 가장 완벽하게 정렬되었음을 가리킨다.<sup>[2,6]</sup>  $S$ 가 음수일 때 이에 대응하는  $\Delta n_{rel}$ 도 음수가 되며  $S$ 가  $-0.5$ 가 되면(꼭지각이  $90^\circ$ 가 되면)  $\Delta n_{rel}$ 은  $-0.468$ 이 된다. 본 연구에서는 양수인  $S$ 만을 관심의 대상으로 하므로 양수영역에서  $S$ 와  $\Delta n_{rel}$ 이 가지는 관계식을 구하였는데 이 또한 식 (12)와 정확하게 일치하였다. 이와 같이  $S$ 와  $\Delta n_{rel}$ 이 가지는 이 준선형 관계식은 액정분자의 분포형태와는 무관하게 보편적인 관계식임을 재확인하였다.



**Fig. 3.** A schematic figure of uniaxial molecules symmetrically distributed around  $z$ -axis. The angle between uniaxial molecules and  $z$ -axis is  $\theta$ .

## VI. 결 론

단축 이방성을 가지는 액정분자들이 정다면체 대칭분포를 할 경우 굴절률은 액정이 무질서한 분포를 하고 있는 경우와 마찬가지로 등방적이며  $\frac{1}{n_{av}^2} = \frac{1}{3} \left( \frac{1}{n_c^2} + \frac{2}{n_o^2} \right)$ 으로 표현됨을 보였다. 정다면체 대칭분포를 하고 있는 액정분자들이 각도에 따른 분포함수 가중치를 가지고 있는 경우와 깔때기 모양의 z축 주위 회전 대칭성을 가지는 경우, 액정분자들의 여러 정렬상태에 대하여 질서변수  $S$ 와 상대 복굴절  $\Delta n_{rel}$ 를 수치계산하여  $\Delta n_{rel}$ 과  $S$ 간의 관계식을 구하고  $S = (1+a)\Delta n_{rel} - a\Delta n_{rel}^2$ 와 같이 나타나는 준선형 관계식이 보편적인 관계식이며 2차항의 계수의 크기  $a$ 를 근사적으로  $a \approx n_o \frac{\Delta n}{4}$ 와 같이 쓸 수 있음을 확인하였다.

## References

1. P. Yeh and C. Gu, *Optics of Liquid Crystal Display* (John Wiley & Sons, Inc., New York, 1999) Chapter 1 & Chapter 5.
2. D.-K. Yang and S.-T. Wu, *Fundamentals of Liquid Crystal Devices* (John Wiley & Sons, Ltd., 2006) Chapter 1 & Chapter 5-7.
3. 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).
4. 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).
5. M. Mitra, S. Paul, and R. Paul, "Optical birefringence and order parameter of three nematogens," *J. Physics* **29(4)**, 409-417 (1987).
6. A. V. Maksimov, T. A. Valkova, and O. G. Maksimova, "Orientation order and birefringence in nanolayers of polymer films," *Bull. Russian Academy of Sciences, Physics* **77(8)**, 1064-1067 (2013).
7. S. Patari, T. K. Devi, and A. 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. 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).
9. 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).
10. 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).
11. A. Kumar, "Calculation of optical parameters of liquid crystals," *Acta Physica Polonica A* **112(6)**, 1213-1221 (2007).
12. S. Y. Kim, "The explicitly quasi-linear relation between the order parameter and normalized birefringence of aligned uniaxially anisotropic molecules determined using a numerical method," *Korean J. Opt. Photon.* **27(6)**, 223-228 (2016).
13. S. Y. Kim, "Ellipsometric expressions for two uniaxially anisotropic layers coated on a multilayered substrate," *Korean J. Opt. Photon.* **26(2)**, 115-120 (2015).
14. M. G. Robinson, J. Chen, and G. D. Sharp, *Polarization Engineering for LCD Projection* (John Wiley & Sons, Ltd., 2005) Chapter 5.