جهت تهیه فایل WORD این مقاله به سایت DaneshResan.com مراجعه نمایید و عنوان مقاله را جستجو کنید
بیش از ۲ میلیون مقاله فارسی در این سایت موجود میباشد

هم خط شدن مولکولها در بلورهای مایع بر اثر حضور سطح محدود کننده

عوض‌پور، ابوالقاسم[۱]: مرادی، محمود[۲]

۱ بخش فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه یا سوج، یاسوج، ، کد پستی -۷۵۹۱۹.

۲ بخش فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شیراز، شیراز، کد پستی -۷۱٤٥٤.

چکیده

تمایل مولکولهای بلورهای مایع برای سمت گیری در جهت خاص، هنگامی که در تماس با دیواره ظرف یا فصل مشترک قرارمی گیرند، آنکورینگ نام دارد. بسته به جهت گیری غالب مولکولهای مایع، این پدیده صفحه ای، مایل و عمود بر فصل مشترک نامیده می شود. نظریه تابعی چگالی تصحیح شدهٔ ریکیزن موسوم به مدل جهت دار محدود(ROM)[1] رابرای مطالعه نظری پدیده آنکورینگ مولکولهای مدل هم پوشانی گائوسی سخت (HGO)[2] با طول به پهنای k=3 به کاربرده و پروفیل چگالی مایع را با نتایج شبیه سازی مونت کارلو مقایسه کرده ایم.

Alignment of molecules in confined liquid crystals under influence of the confinement surfaces.

Avazpour A. [1]: Moradi. M [2]:

[1] Department of Physics, College of Science, Yasooj University, Yasooj, 75919, Iran.
[2]Department of Physics, College of Science, Shiraz University, Shiraz, 71454, Iran.

Abstract

The tendency of liquid crystals to orient in a particular direction when in contact with the container wall is called the anchoring phenomenon. The anchoring induced by an interface is known as planar, tilted or homeotropic depending on the direction of molecules with respect to the interface. Here we extended the Rickayzen restricted orientation model(ROM) based on density functional theory to study the anchoring transition in the hard Gaussian overlap(HGO) fluids for elongation k=3. The obtained number density are compared with the Monte Carlo simulation results.

PACS No. 60

ساختمان بلور مایع محدوده شده نقش مهمی در صنعت نمایشگرهای بلوری مایع ایفا می کند[۱]. هنگامی که بلور مایع مجاور فاز دیگری قرارگیرد تقارن سیستم شکسته می شود. شکستن این تقارن دو اثر عمده دارد. اولی لایه بندی مولکولها در مجاورت فصل مشترک و دومی تصحیح نظم جهت گیری سطح در مجاورت ناحیه فصل مشترک است . تمایل بلورهای مایع برای جهت گیری در جهت خاص، هنگامی که در تماس با دیوارهٔ ظرف یا فصل مشترک قرارمی گیرند، آنکورینگ نام دارد[۲]. نظریه آنکورینگ همانند نوعی فاز برای حالت ماده می باشد. آنکورینگ القاء شدهٔ ناشی از اثر سطح روی بلورهای مایع، بسته به جهت گیری غالب مولکولهای مایع، صفحه ای، مایل و عمود بر فصل مشترک نامیده می شود. مطالعه این اثربا نظریات تابعی چگالی، جهت بررسی گذار فاز بلورهای مایع از حالات ایزوتروپیک به نماتیک و نماتیک به اسمکتیک مورد استفاده قرار گرفته است [۳].

بیشترین کارهای نظری انجام شده در این زمینه استفاده از نظریه تابعی چگالی سادهٔ انزاگر[٤] بوده است. آلن [۲]این نظریه را به کاربرده و نتایج را با شبیه سازی های کامپیوتری انجام شدهٔ خودش مقایسه نموده است. بارمس و کلیور بااستفاده از شبیه سازی کامپیوتری مونت کارلو[٥] گذار آنکورینگ از حالت صفحه ای به حالت عمودی را برای مولکولهای هم پوشان گائوس‌ـی سخت HGO [٦] با نسبت طول به پهنای ۳ بررسی نمودند.

باتوجه به نارسائیهای تقریب انساگر، ما نظریه تابعی چگالی

1- Restricted Orientation Model
2- Hard Gaussian Overlap

جهت تهیه فایل WORD این مقاله به سایت DaneshResan.com مراجعه نمایید و عنوان مقاله را جستجو کنید
بیش از ۲ میلیون مقاله فارسی در این سایت موجود میباشد

ROM منسوب به ریکیزن را با افزایش درجات آزادی مولکولها تعمیم داده[۷] و آنرا برای مطالعه نظری پدیده آنکورینگ مولکولهای HGO با طول به پهنای k=3 به کاربرده و پروفیل چگالی مایع را با کارهای شبیه سازی مونت کارلو در مرجع [۵] مقایسه کرده ایم. برای بررسی گذار ناشی از نفوذ سطح در بلورهای مایع، مایع محدود بین دو دیواره را در نظر می گیریم. ابتدا برهم کنش بین مولکولهای مایع و دیواره جامد را پتانسیل سوزن - دیوارهٔ سخت HNW (Hard Needle- Wall) [۵] در نظر می گیریم .

$$V_\alpha(z_i,\theta_\alpha)=\begin{cases}0 & if \quad |z_\alpha - z_i|\ge\sigma_w\\ \infty & if \quad |z_\alpha - z_i|\le\sigma_w\end{cases} \qquad (۱)$$

با :

$$\sigma_w=|bk_s\cos\theta_\alpha|, \qquad (۲)$$

که z_i موقعیت دیواره ، z_α موقعیت مولکول در امتداد α ، 2b پهنای واحد مولکول، k_s برابر طول سوزن و θ زاویه بین محور هر مولکول و بردار عمود بر سطح می باشد. در شکل ۱ شکل بندی HNW برای یک مولکول با نسبت طول به پهنای k نشان داده شده است . دیده می شود که $0\le k_s\le k$ می باشد.

به هر مولکول ، $N=2m^2$ درجه آزادی نسبت می دهیم. جهت هر مولکول با

$$\omega_{\alpha\beta}\equiv(\theta_\alpha,\varphi_\beta) \qquad (۳)$$

و

$$\cos\theta_\alpha=-1+\frac{2\alpha+1}{m},\ \alpha=0,1,\ldots,m-1 \qquad (٤)$$

$$\varphi_\beta=\frac{\beta\pi}{m},\ \beta=0,1,\ldots,2m-1 \qquad (٥)$$

نشان داده می شود. برای ا ین مایع محدود شده بین دی‌واره های عمود بر z وبفاصله h ، پروفیل چگالی ρ(z) به صورت زیر در میآید

$$\sum_{\alpha\beta}\rho_{\alpha\beta}(z)=\int d\omega\rho(\vec{r},\omega) \qquad (٦)$$

و تابعی چگالی انرژی پتانسیل بزرگ [ρ] Ω در واحد مساحت در مدل پیشنهادی ما [۷] عبارتست از :

$$\frac{\beta\Omega[\rho_{\alpha\beta}]}{A}=\sum_{\alpha\beta}\int_{-h\alpha/2}^{h_\alpha/2}dz\,\rho_{\alpha\beta}(z)\left[\ln\frac{N\rho_{\alpha\beta}(z)}{\rho_B}-1\right]$$
$$+\sum_{\alpha\beta}\beta\int_{-h_\alpha/2}^{h_\alpha/2}dzV(z,\theta_\alpha)\rho_{\alpha\beta}(z)$$
$$-\frac{1}{2}\sum_{\alpha,\beta}\sum_{\gamma,\delta}\int_{-h_\alpha/2}^{h_\alpha/2}dz_1\int_{-h_\gamma/2}^{h\lambda/2}dz_2\left(\rho_{\alpha\beta}(z_1)-\frac{\rho_B}{N}\right)$$

(۷)

$$\times\underset{\alpha\beta\gamma\delta}{C}(z_1-z_2)(\rho_{\gamma\delta}(z_2)-\frac{\rho_B}{N})$$

که A مساحت دیواره و

$$\frac{h_\alpha}{2}=\frac{h}{2}-\sigma_w \qquad (۸)$$

و

$$C_{\alpha\beta\gamma\delta}(z_1-z_2)\equiv C(z_1,\omega_{\alpha\beta},z_2,\omega_{\lambda\delta};\rho_B)$$
$$=\frac{1}{A}\int dx_1dy_1dx_2dy_2C(\vec{r}_1,\omega_1,\vec{r}_2,\omega_2;\rho_B) \qquad (۹)$$

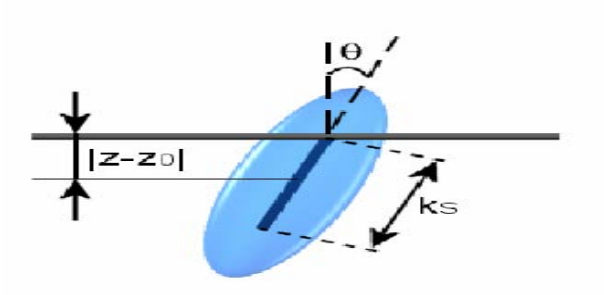
تابع هم‌بستهٔ مستقیم مایع هم‌گن می باشد.

در تقریب HNC (Hyper-Netted Chain) ، با در نظرگرفتن تقارن روی φ_β ، پروفیل چگالی برای امتداد معین با $\varphi_\beta=0$ از کمینه کردن معادله ۷ بدست می آید .

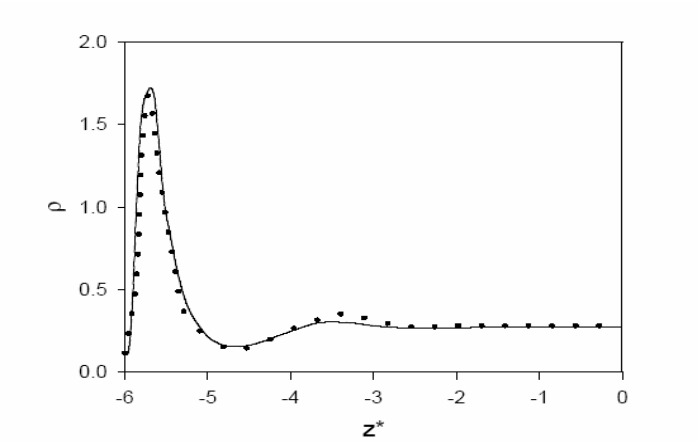
$$\rho_{\alpha0}(z)=\frac{\rho_B}{N}\exp\left[\sum_{\gamma=0}^{m-1}\sum_{\delta=0}^{2m-1}\right.$$
$$\left.\times\int dz_1\underset{\alpha0\gamma\delta}{C}(z_1-z)(\rho_{\gamma0}(z_1)-\frac{\rho_B}{N})\right] \qquad (۱۰)$$

جهت تهیه فایل WORD این مقاله به سایت DaneshResan.com مراجعه نمایید و عنوان مقاله را جستجو کنید
بیش از ۲ میلیون مقاله فارسی در این سایت موجود میباشد

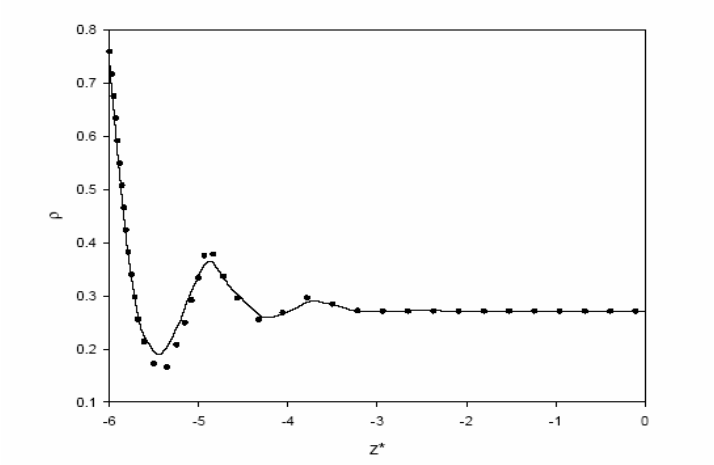
با استفاده از تابع هم‌بستهٔ مستقیم مولکولهای با بر همکنش HGO [٦] به عنوان ورودی معادله انتگرالی (۱۰) ، پروفیل چگالی را بدست آورده ایم. در محاسبات حالت N =۱۲۸ ، k = a/b =۳ ، k_s=0.8k و k_s= 0.2k را برای h=12 با ρ_B= 0.246 در نظر گرفته ایم. معادله انتگرالی دربرنامه کامپیوتری به زبان فرترن و با روش تکرار حل شده است. مقایسه های انجام شده در شکل های ۲ و۳ نشاندهندهٔ تغییرات پروفیل چگالی از حالت صفحه ای به حالت عمود بر دیواره ها با تغییر طول سوزن مربوط به برهم کنش HNW، و انطباق آن ها با نتایج شبیه سازی های مرجع [٥] می باشد.



شکل ۱ : شکل بندی HNW ، Z_0 موقعیت دیواره و Z موقعیت مولکول می باشد.



شکل ۲ : پروفیل چگالی عددی بر حسب فاصلهٔ کاهش یافتهٔ Z^* از یک دیواره ، برای k =۳ ، ρ_B = 0.246 ، k_s= 0.2k , h=12. خط پر کار ما و نقاط شبیه سازی های مرجع [٥] می باشند.



شکل ۳ : پروفیل چگالی عددی بر حسب فاصلهٔ کاهش یافتهٔ Z^* از یک دیواره ، برای k =۳ ، ρ_B = 0.246 ، k_s= 0.8k , h=12. خط پر کار ما و نقاط شبیه سازی های مرجع [٥] می باشند

مراجع

[1] Jerome. B, *Rep . Prog, phys*. **54**, 391 (1991).
[2] Allen. M. P, *Mole , phys*. **96**, 1391 (1999) .
[3] Velsco, E and Mederos. L. *J. Chem. phys*, **109**, 2361 (1998) .
[4] Onsager. L, *Ann. N. Y. Acad. sci*, **51**, 627 (1949) .
[5] Barmes. F and cleaver. D. *J, phys. Rev*. **E 69**, 61705 (2004)
[٦] مرادی ، محمود . عوض پور ، ابوالقاسم . مقاله نامه یازدهمین کنفرانس ماده چگال خرداد ۱۳۸٤ زنجان .
[7] Moradi, M, Wheatley. R. J and Avazpour. A, *Phys.Rev.E* **72**, 061706 (2005).