

УДК 532.783

Ю. В. БАШТИК<sup>1</sup>, О. В. БОЙКО<sup>2</sup>, А. В. ФЕЧАН<sup>1</sup>, О. В. ЧАБАН<sup>1</sup>

## **МОДЕЛЮВАННЯ ВПЛИВУ ПОВЕРХНЕВИХ УМОВ ТА ЗОВНІШНІХ ПОЛІВ НА ПАРАМЕТР ПОРЯДКУ РІДКИХ КРИСТАЛІВ**

<sup>1</sup>*Львівська політехніка, 79013,  
вул. С. Бандери, 12, Львів, Україна  
e-mail: zmykytyuk@polinet.lviv.ua*

<sup>2</sup>*Львівський національний медичний університет ім. Д.Галицького  
79010, вул. Пекарська, 69, Львів, Україна*

**Анотація.** Робота присвячена моделюванню розподілу директора рідкокристалічного зразка методами молекулярної динаміки. Робота виконувалась з використанням пакета прикладних програм GBMOLD. Отримано розподіли поля директора під впливом поверхневих орієнтаційних ефектів та зовнішніх полів. Показано вплив цих факторів на ступінь упорядкованості рідкокристалічного матеріалу.

**Ключові слова:** рідкий кристал, комп'ютерне моделювання, молекулярна динаміка

**Abstract.** Our paper is dedicated by computer simulation of director distribution of liquid crystal sample by means of molecular dynamics methods. Computer simulation is provided by using of GBMOLD software. We are obtained the field director distributions at influence of surface orientation effects and external fields. Influences of these factors at the degree of orientational ordering of liquid crystals are shown in paper.

**Keywords:** liquid crystal, computer simulation, molecular dynamic

### **ВСТУП**

Сьогодні крім експериментальних методик досліджень рідкокристалічних (РК) матеріалів широко використовується моделювання процесів в РК середовищах. Для моделювання РК систем можна скористатись методами, які використовуються для дослідження властивостей рідин, з урахуванням взаємодії між мезогенними молекулами. В основі комп'ютерного моделювання лежить потенціал взаємодії, який описує мікроскопічну енергетику, характерну для системи. Для моделювання РК систем на основі двочастинкових незв'язних взаємодій застосовуються переважно класичні потенціали, які прямо не враховують квантово-механічних ефектів. Сума всіх потенціалів формує загальну потенціальну енергію системи.

### **ТЕОРЕТИЧНІ ВІДОМОСТІ**

Насамперед детально зупинимось на особливостях молекулярних моделей, із якими спроможний працювати програмний пакет GBMOLDD. Це моделі гібридного типу, в яких молекулярна структура може містити два типи частинок  $LJ$  типу, які взаємодіють через потенціал Леннард-Джоунса, та  $GB$  типу, які взаємодіють через потенціал Гей-Берне, наприклад, біфеніл, азобензин тощо. Можливий розгляд і окремих незв'язаних частинок одного чи другого типу, наприклад, для опису низькомолекулярного розчинника, відповідно ізотропного чи анізотропного. Кількість різних типів топології, які одночасно можна використовувати під час моделювання необмежена, така особливість дає змогу описувати розчини, суміші, молекули тощо.

Молекулярні моделі розглядаються на класично-механічному рівні та описуються за допомогою силових полів [1, 2]. Зв'язуючі взаємодії в молекулі мають такий вигляд.

$$E_m^{\text{bon}} = \sum_{i=1}^{n_b} \frac{1}{2} k_i^{(b)} (l_i - l_i^{(0)})^2 + \sum_{i=1}^{n_a} \frac{1}{2} k_i^{(a)} (\theta_i - \theta_i^{(0)})^2 + \sum_{i=1}^{n_z} \frac{1}{2} k_i^{(z)} (\zeta_i - \zeta_i^{(0)})^2 + \sum_{i=1}^{n_t} U_i^{(\text{tors})}.$$

де,  $n_b$  — кількість зв'язків,  $n_a$  — кутів, а  $n_z$  — додаткових кінцевих кутів у місцях приєднання мезогенів у молекулі  $m$ .  $l_i, \theta_i, \zeta_i$  — відповідно біжучі індекси цих величин, а  $l_i^{(0)}, \theta_i^{(0)}, \zeta_i^{(0)}$  — їхні рівноважні значення. Коефіцієнти пружності відповідних гармонічних сил —  $k_i^{(b)}, k_i^{(a)}$  і  $k_i^{(z)}$ .  $\zeta_i$  вимірюються як кут між довгою віссю мезогена та зв'язком між його центром та сусіднім  $LJ$  псевдоатомом.

Торсійні взаємодії враховуються у формі Рикаерта-Беллеманса [3]

$$U_i^{(\text{tors1})} = \sum_{n=1}^5 c_i^{(n)} \cos^n \phi_i,$$

або у формі обірваних рядів Фур'є

$$U_i^{(\text{tors2})} = \frac{1}{2} [V_i^{(1)}(1 + \cos \phi_i) + V_i^{(2)}(1 - \cos 2\phi_i) + V_i^{(3)}(1 + \cos 3\phi_i)].$$

Усі інші пари взаємодіють за допомогою незв'язних потенціалів залежно від типу псевдоатомів. Пара  $LJ$  атомів взаємодіє через факторизований потенціал Леннарда-Джонса

$$U_{ij}^{(LJ)} = \left[ \frac{A_i^{(LJ)} A_j^{(LJ)}}{r_{ij}} \right]^{12} - \left[ \frac{C_i^{(LJ)} C_j^{(LJ)}}{r_{ij}} \right]^6$$

Аналогічно пара  $GB$  псевдоатомів взаємодіє через потенціал Гей-Берне.

Програмний засіб GBMOLDD дає змогу отримувати розподіл напрямку директора в комірі, а відповідно і величину параметра порядку, яка безпосередньо пов'язана зі значенням показника заломлення у псевдошарі

Базовими вхідними даними для програми є:

$n_x, n_y, n_z$  — кількість молекул, відповідно, по осі  $x, y$  та  $z$ ;

$srf\text{-}fstr$  — величина сили зчеплення приповерхневих шарів;

$T$  — температура моделювання;

$fld\text{-}str$  — величина поля, яка діє на молекули РК в одному з напрямків ( $x, y$  або  $z$ );

### АНАЛІЗ ФАЗОВОЇ ДІАГРАМИ МОДЕЛЬНОГО РІДКОГО КРИСТАЛА

Перед проведенням моделювання необхідно було визначити зміну величини параметра порядку від кількості ітерацій, тобто модельного часу існування системи. Такі дослідження дуже важливі, оскільки кожна ітерація системи вимагає значних комп'ютерних ресурсів. На рис. 1 наведено залежність параметра порядку системи від кількості ітерацій.

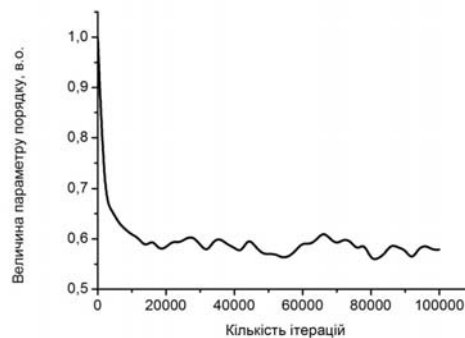


Рис. 1. Залежність параметра порядку системи від кількості ітерацій

Як видно з залежності, в діапазоні 0–10000 ітерацій спостерігається різке зниження значення параметра порядку від 1 (ідеальне розташування молекул) до 0.6 (нематична мезофаза). Подальше зростання кількості ітерацій не приводить до істотної зміни параметра порядку. Це дозволяє зробити висновок, що для вибраних вихідних параметрів модельного рідкого кристала достатньою кількістю ітерацій для встановлення рівноваги системи є 20000.

Початкова гомеотропна текстура модельного зразка, з якої починається моделювання, наведена на рис. 2 а. На рис. 2 б представлено розташування молекул у смектичній А-фазі, де спостерігається пошарове розташування молекул як у приміжових областях, так і в середній області. Параметр порядку для такої структури  $S = 0,82$ .

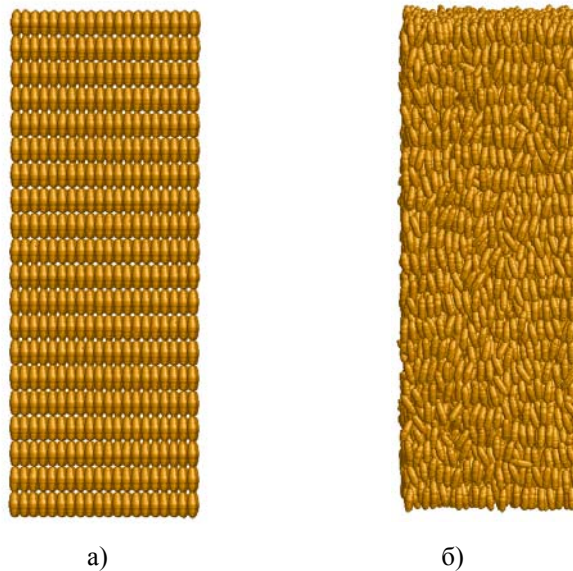


Рис. 2. Змодельовані текстури: а) початкова гомеотропна текстура; б) текстура смектика,  $T = 400 \text{ K}$

З підвищенням температури (рис. 3 а) відбувається розупорядкування смектичної фази внаслідок виходу молекул із шарів. З подальшим збільшенням температури (рис. 3 б) молекули, розташовані близько до обмежуючих поверхонь, зберігають гомеотропний стан, а з віддаленням від поверхні починається розупорядкування молекул, що приводить до переходу в нематичну фазу. Параметр порядку при цьому зменшується і дорівнює  $S = 0,6$ .

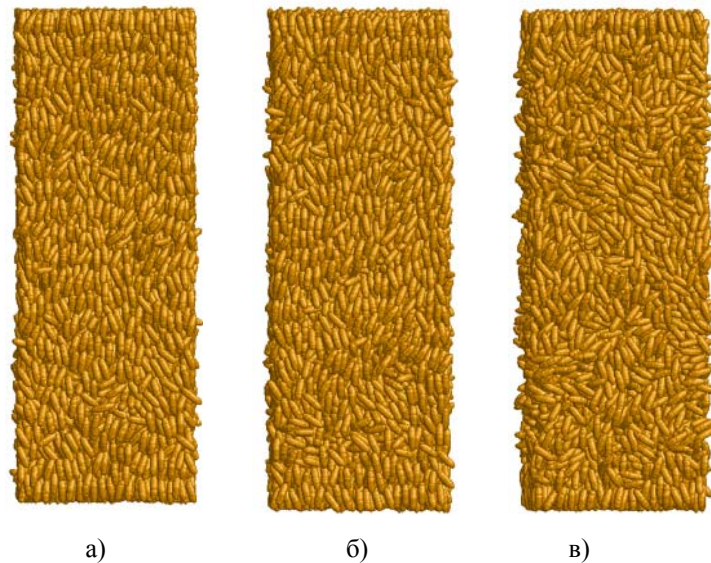
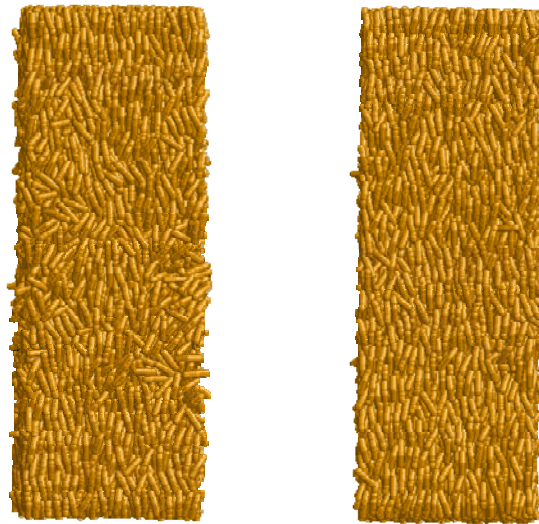


Рис. 3. Змодельовані текстури: а) початкова фаза нематика,  $T = 450 \text{ K}$ ; б) текстура нематика,  $T = 500 \text{ K}$ ; в) ізотропна рідина,  $T = 600 \text{ K}$ .

Після фазового переходу в ізотропну рідину (рис. 3 в) відбувається повне розупорядкування в розташуванні молекул. Параметр порядку при цьому дорівнює  $S = 0,2$ .

### МОДЕЛЮВАННЯ ВПЛИВУ ЗОВНІШНІХ ФАКТОРІВ НА ПАРАМЕТР ПОРЯDKУ МОДЕЛЬНОГО РІДКОГО КРИСТАЛА

Під час моделювання ми розглядали два типи зовнішнього впливу на розподіл поля директора модельного рідкого кристала, а саме, вплив поверхні та зовнішнього поля. На рис. 4 зображено текстури РК зразка для різних значень прикладеного зовнішнього поля.



а)

б)

Рис. 4. Текстури РК зразка для різних значень прикладеного зовнішнього поля при  $T = 500$  К та силі зчеплення 10: а) без прикладеного поля; б) величина поля 0,6.

На рис. 5—6 зображено залежність величини параметра порядку від сили зчеплення з поверхнею та температури.

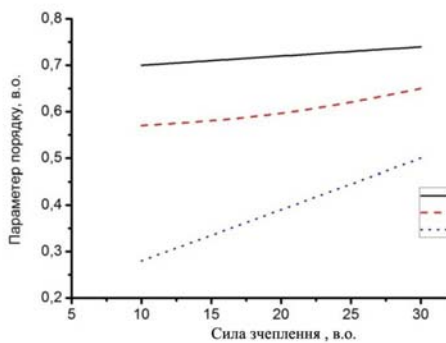


Рис. 5. Залежність величини параметра порядку від сили зчеплення з поверхнею при різних значеннях температури

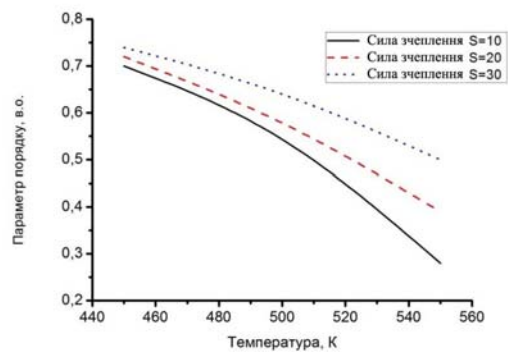


Рис. 6. Залежність величини параметра порядку від температури при різних значеннях сили зчеплення з поверхнею

Як видно з залежностей, зростання величини сили зчеплення з поверхнею приводить до зростання параметра порядку, причому вплив поверхні зростає зі збільшенням температури. Така поведінка пояснюється зменшенням власного параметра порядку модельного зразка зі збільшенням температури при постійному значенні сили зчеплення, а зростання величини зовнішнього поля приводить до зростання параметра порядку, причому вплив поверхні зростає зі збільшенням температури. Така поведінка пояснюється зменшенням власного параметра порядку модельного зразка зі збільшенням температури при постійному значенні сили зчеплення.

Моделювання впливу зовнішнього поля на параметр порядку привело до аналогічних результатів. Ріст величини зовнішнього поля приводить до зростання параметра порядку дослідного зразка. Однак істотні відмінності дає аналіз розподілу поля директора в об'ємі модельного рідкого кристала. Результати цих досліджень наведені на рис. 7—8.

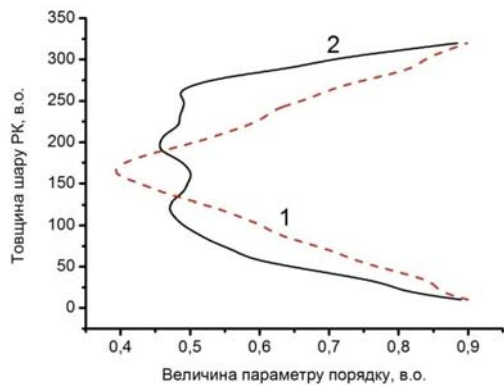


Рис. 7. Розподіл поля директора в напрямку, перпендикулярному до підкладок, для різних значень величини сили зчеплення: 1)  $S = 30$ ; 2)  $S = 10$

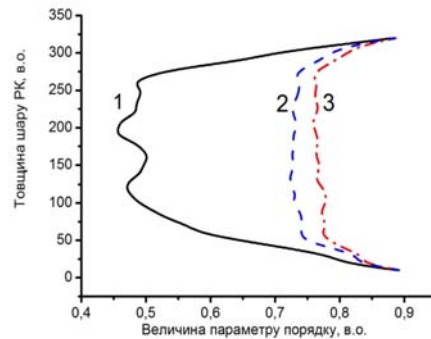


Рис. 8. Розподіл поля директора в напрямку, перпендикулярному до підкладок, для різних значень величини прикладеного поля: 1) 0; 2) 0.2; 3) 0.6

Як видно з залежностей, зовнішнє поле має більш рівномірний вплив на впорядкованість РК зразка, а вплив сили зчеплення істотно спадає в напрямку до центра зразка.

### ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНІ ДОСЛІДЖЕННЯ ФАЗОВИХ ПЕРЕХОДІВ У НЕМАТИЧНИХ РІДКИХ КРИСТАЛАХ

Температура фазового переходу нематичний рідкий кристал — ізотропна рідина визначалась як значення температури, при якому величина діелектричної анізотропії зразка дорівнювала 0. Дослідження діелектричної анізотропії проводились у комірці типу “сандвіч”, провідні покриття якої мають форму квадрата зі стороною 10 мм і містяться в центрі підкладки (для однорідного заповнення полем об'єму зразка). Товщина РК становить 100 мкм для зменшення впливу поверхні на орієнтацію молекул рідкого кристала. Вимірювання діелектричної проникності проводилось за допомогою моста ємностей Е8-2 на частоті 1 кГц. Однорідна орієнтація РК щодо електродів комірки досягалась дією магнітного поля з індукцією  $B = 10$  кГс. Температура задається величиною напруги живлення нагрівача і контролюється за допомогою диференційної термопари хромель — алюмель.

На рис. 9—10 зображено температурні залежності величини діелектричної проникності в напрямках, паралельному ( $\epsilon_{\parallel}$ ) та перпендикулярному ( $\epsilon_{\perp}$ ) до довшої осі молекули, та анізотропії нематичної матриці на основі СЖК-1 та МББА.

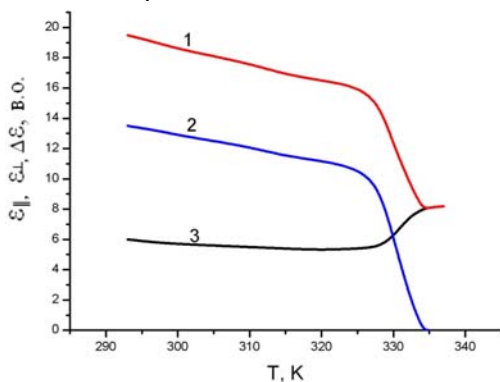


Рис. 9. Залежність діелектричної проникності та діелектричної анізотропії для СЖК-1 матриці від температури: 1— $\epsilon_{\parallel}$ , 2— $\Delta\epsilon$ , 3— $\epsilon_{\perp}$

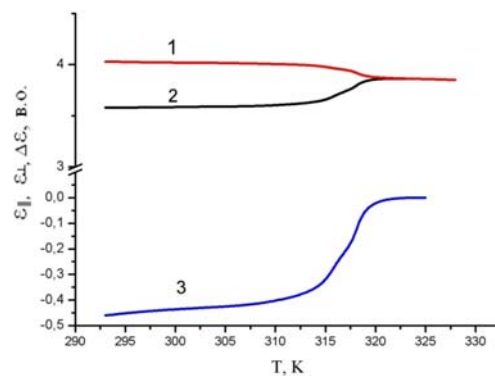


Рис. 10. Залежність діелектричної проникності та діелектричної анізотропії для МББА матриці від температури: 1— $\epsilon_{\perp}$ , 2— $\epsilon_{\parallel}$ , 3— $\Delta\epsilon$

Як бачимо, на рисунках спостерігається типова залежність вказаних величин від температури. Нелінійна залежність цих величин спостерігається перед переходом нематичної матриці в ізотропну речовину, що є наслідком передперехідних явищ. Однак температура, при якій діелектрична анізотропія  $\Delta\epsilon = 0$  ( $\Delta\epsilon = \epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}$ ), перевищує температуру переходу в ізотропний стан відповідно на  $4^{\circ}$  для СЖК-1 і  $3^{\circ}$  для МББА, що є наслідком впливу зовнішнього магнітного поля (додаткове впорядкування нематичної системи).

### ВИСНОВКИ

Проведені дослідження показали, що:

- 1) моделювання методами молекулярної динаміки уможливує доволі точний опис процесів, які відбуваються в нематичних РК;
- 2) зростання величини сили зчеплення з поверхнею приводить до зростання параметра порядку, причому вплив поверхні зростає зі збільшенням температури. Така поведінка пояснюється зменшенням власного параметра порядку модельного зразка зі збільшенням температури за постійного значення сили зчеплення;
- 3) зовнішнє поле має рівномірніший вплив на впорядкованість РК зразка порівняно з силою зчеплення, вплив якої істотно спадає в напрямку до центра зразка. Така поведінка пояснюється тим, що поле має абсолютно однаковий вплив на всі молекули зразка незалежно від їхнього розташування;
- 4) отримані результати моделювання добре узгоджуються з експериментальними.

### REFERENCES

1. Leach A. Molecular modeling: principles and applications / A. Leach. — Har-low : Pearson, 2001.
2. Israelachvili J. Intermolecular and surface forces / J. Israelachvili. — San Di-ego: Academic Press, 1992.
3. Ryckaert J. Molecular dynamics of liquid n-butane near its boiling point / J. Ryckaert, A. Bellemans // Chem. Phys. Lett. — 1990. — Vol. 30, no. 1. — Pp. 123—125.

Надійшла до редакції 15.06.2015 р.

**БАШТИК ЮРІЙ ВОЛОДИМИРОВИЧ** — аспірант кафедри «Електронні прилади», Національний університет «Львівська політехніка», м. Львів, Україна.

**БОЙКО ОКСАНА ВАСИЛІВНА** — к.т.н., доцент, завідувач кафедри медичної інформатики, Львівський національний медичний університет, м. Львів, Україна.

**ФЕЧАН АНДРІЙ ВАСИЛЬОВИЧ** — д.т.н., доцент, професор кафедри «Електронні прилади», Національний університет «Львівська політехніка», м. Львів, Україна.

**ЧАБАН ОСТАП ВОЛОДИМИРОВИЧ** — аспірант кафедри «Електронні прилади», Національний університет «Львівська політехніка», м. Львів, Україна.