

## محاسبه ضرایب فلکسوالکتریسیته سهم دوقطبی در بلور مایع با مولکول‌های گلابی شکل سخت

صدرالله فتحی، مریم عبدی پور، ابوالقاسم عوض پور\*

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه یاسوج، یاسوج، ایران

دریافت: 1396/07/12 ویرایش نهائی: 1397/07/28 پذیرش: 1397/09/07

### چکیده

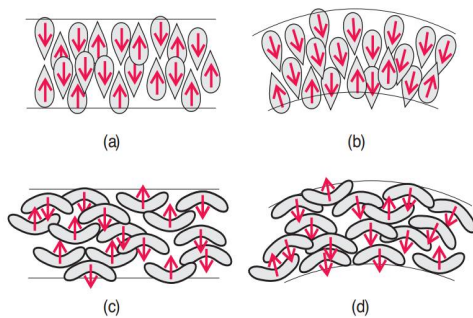
در بلورهای مایع، مولکول‌های گلابی و موزی شکل به دلیل عدم تقارن، به ترتیب آرایش گسترده (*Splay*) یا خمیده (*Bend*) پیدا می‌کنند. در این بلورها انحراف بردار راستار از حالت تعادلی، تولید قطبش خالص می‌نماید. این خاصیت فلکسوالکتریسیته نامیده می‌شود. ضرایب فلکسوالکتریسیته در مایعات بلوری از روش‌های شبیه‌سازی و تجربی محاسبه گردیده‌اند. در نظریه تابعی چگالی این ضرایب به تابع همبسته مستقیم بین مولکول‌ها و تابع توزیع زاویه‌ای مولکول‌ها بستگی دارند. در کار حاضر با استفاده از روش پارامتری گائوسی سخت، تابع کمترین تماس بین مولکول‌های گلابی شکل محاسبه می‌شود. با استفاده از این تابع تماس عبارت تقریبی برای تابع همبسته مستقیم مولکول‌های گلابی شکل سخت به دست می‌آید. با استفاده از این تابع همبسته و تابع توزیع جهتی مناسب محاسبه شده، ضرایب فلکسوالکتریسیته سهم دوقطبی، برای بلور مایع با مولکول‌های گلابی شکل سخت با طول به پهنای 3 و 5 محاسبه شده‌اند. نتایج کار حاضر با نتایج شبیه‌سازی سازگاری کیفی دارند.

واژه‌های کلیدی: ضرایب فلکسوالکتریسیته، بلور نماتیکی، تابع همبسته مستقیم، تابع توزیع جهتی، مولکول گلابی شکل

فلکسوالکتریسیته در بلور مایع شباهت زیادی به خاصیت پیزوالکتریسیته در بلورهای جامد دارد [2].

### مقدمه

بلور مایع برای اولین بار توسط رنیتزر گیاه شناس اتریشی هنگام ذوب جامدی از مشتقات مولی کشف شد. واژه بلور مایع اولین بار توسط لمان برای این حالت از ماده انتخاب شد [1]. بر اساس نظریه فرانک، مایعات بلوری دارای خواص کشسانی هستند. در مایعات با مولکول‌های تک محور که دارای شکل مخروطی (انواع گلابی شکل‌ها) یا خمیده (موزی شکل) هستند یا مولکول‌های آنها قطبیده می‌باشند بین خاصیت کشسانی و قطبش الکتریکی جفت‌شدگی ایجاد می‌شود (شکل 1). این جفت‌شدگی فلکسوالکتریسیته نام دارد.



شکل 1. مولکول‌های تک محور دارای شکل‌های گلابی و موزی. (a) و (b) گلابی و (c) و (d) خمیده (موزی شکل) هستند. (b) و (d) به ترتیب آرایش‌های گسترده و خمیده یافته‌اند.

\* نویسنده مسئول: avazpour@yu.ac.ir

برای بلور مایع قطبیده با بردار راستار  $\vec{n}$ ، قطبش خالص فلکسوالکتریسیته از رابطه زیر به دست می آید [3]،

$$\vec{P}_f = e_{11}\vec{n}(\vec{\nabla}\cdot\vec{n}) + e_{33}\vec{n} \times (\vec{\nabla} \times \vec{n}) \quad 1$$

که  $e_{11}$  و  $e_{33}$  ضرایب فلکسوالکتریسیته مربوط به حالت گسترده<sup>1</sup> و حالت خمیده<sup>2</sup> مولکولها می باشند. در رابطه  $\vec{n}(\vec{\nabla}\cdot\vec{n})$  و  $\vec{n} \times (\vec{\nabla} \times \vec{n})$  به ترتیب بردارهای حالت گسترده و خمیده می باشند. در بلورهای مایع با مولکولهای نامتقارن معمولاً بردار قطبش دارای مؤلفه‌های موازی با این دو بردار می باشد. خاصیت فلکسوالکتریسیته در مایعات مولکولی با مولکولهای متقارن قطبیده اتفاق نمی افتد [3]. در بلورهای مایع با مولکولهای قطبیده بیضی گون، سهم دوقطبی حذف و سهم چهارقطبی الکتریکی در ضرایب فلکسوالکتریسیته باقی می ماند. محاسبه این ضرایب مقدار قطبش را به دست می دهد. فهم این ثابت‌ها از دو لحاظ اهمیت دارد: اولاً شناخت این ضرایب به بهبود خواص الکترواپتیکی بلورهای مایع و بهینه‌شدگی عملکرد نمایشگرهای نوری کمک می نمایند. دوماً آنها کمیت‌های ماکروسکوپی مرتبط با پارامترهای میکروسکوپی همانند پارامترهای نظم بلور مایع هستند. روش‌های تجربی، شبیه‌سازی و نظری در محاسبه این ضرایب مورد استفاده قرار گرفته‌اند. اولین نظریه‌ها برای محاسبه ضرایب فلکسوالکتریسیته در بلور مایع نماتیک توسط مایر پیشنهاد شد [3]. سپس اسپیف [4] نظریه مولکولی فلکسوالکتریسیته را پیشنهاد نمود. پروست و مارسرو [5] نشان دادند که علاوه بر عدم تقارن و شکل دوقطبی دائمی مولکولها، گشتاورهای چهارقطبی مولکولها نیز می توانند قطبش ماکروسکوپی ایجاد نمایند. در بلورهایی که چگالی چهارقطبی‌های الکتریکی صفر نمی شوند اثر فلکسوالکتریسیته مشاهده می شود.

اولین نظریه آماری اثر فلکسوالکتریسیته دو قطبی در بلور نماتیک با مولکولهای میله‌ای شکل قطبی توسط استرالی به کار برده شد [6]. مطالعه نظری این اثر بر اساس تقریب میدان مولکولی [7]، میدان متوسط [8] و نظریه تابعی چگالی [9-11] انجام شده است. مدل‌های مولکولی گلابی شکل و موزی شکل با استفاده از نظریه تابعی چگالی [10] و شبیه‌سازی کامپیوتری مطالعه شده‌اند [13 و 12، 2]. در مایعات بلوری اسمکتیک نیز اثر فلکسوالکتریسیته بررسی شده است [14]. ضرایب فلکسوالکتریسیته و مجموع آنها به روش تجربی اندازه‌گیری شده‌اند [15-18]. مجموع این ضرایب نیز با شبیه‌سازی محاسبه گردیده‌اند [19]. در نظریه تابعی چگالی، محاسبه عبارت تحلیلی تابع همبسته مستقیم مولکولهای غیر متقارن از مشکلات اصلی می باشد. براساس بررسی‌های انجام شده در کارهای پژوهشی پیشینان عبارت تحلیلی برای تابع همبسته مستقیم مولکولهای گلابی شکل یافت نشد. در کار حاضر عبارت تحلیلی تقریبی برای تابع همبسته مستقیم مولکولهای گلابی شکل سخت (مدل مخروطی<sup>3</sup> شکل<sup>2</sup> به دست آمده است. با توجه به اهمیت تابع همبسته مستقیم به عنوان ورودی در محاسبه ضرایب فلکسوالکتریسیته، تابع به دست آمده را برای محاسبه این ضرایب در بلور نماتیک به کار می‌بریم. در بخش 2 با استفاده از نظریه تابعی چگالی عبارتی برحسب تابع همبسته مستقیم و تابع توزیع جهتی برای ضرایب فلکسوالکتریسیته به دست می‌آید. در بخش 3 تابع همبسته پیشنهادی و توابع توزیع مولکولهای گلابی شکل محاسبه شده، مورد استفاده قرار می‌گیرند و ضرایب فلکسوالکتریسیته سهم دوقطبی محاسبه می‌شوند. در ادامه نتایج مورد بحث قرار گرفته و با کارهای دیگران مقایسه می‌شوند.

<sup>3</sup> Tapered Molecule

<sup>1</sup> Splay

<sup>2</sup> Bend

چهارقطبی بلور هستند. در بلور مایع تغییر شکل یافته تابع توزیع جهتی  $f(\hat{u}, \hat{n})$ ، به اندازه  $\delta f$  تغییر می‌نماید که این تغییر با  $\nabla_\alpha n_\beta$  متناسب می‌باشد.

$$\delta f = f_0(\hat{u}, \hat{n}) \nabla_\alpha n_\beta \quad 5$$

$f_0(\hat{u}, \hat{n})$  تابع توزیع جهتی حالت اولیه و  $n_\beta$  مؤلفه‌های بردار راستار بلور می‌باشند.

برای محاسبه  $\langle \vec{d} \rangle$  در بلور نماتیک تک محور با استفاده از نظریه تابعی چگالی با لحاظ کردن اختلال ناشی از تغییر جزئی بردار راستار در کار استرالی [6] و استفاده از  $\delta f(\hat{u})$ ، رابطه مناسبی برای محاسبه ضرایب فلکسوالکتریسیته سهم دوقطبی‌ها به دست می‌آید. قطبش القایی ناشی از دو قطبی‌های آرایش مولکولی در بلور نماتیک تک محور با گشتاور دوقطبی الکتریکی مولکولی  $\vec{P}_i = P \hat{u}_i$  عبارت است از [2]:

6

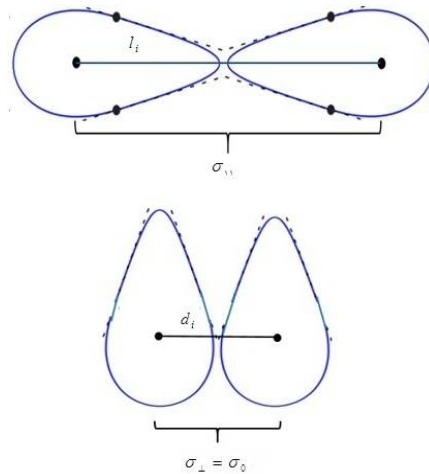
$$\langle \vec{d} \rangle = \rho_0 P \int d\hat{u}_i f(\hat{u}_i) \hat{u}_i = \rho_0 P \int d\hat{u}_i f_0(\hat{u}_i) \delta f(\hat{u}_i) \hat{u}_i$$

که  $\hat{u}_i$  بردار جهت محور طولی مولکول و  $f_0(\hat{u}_i)$  تابع توزیع جهتی تعادلی بلور می‌باشد. مشابه کار استرالی [6] و استفاده از تابعی چگالی انرژی آزاد در بلور نماتیک و مشتقات انرژی آزاد کل، مقدار  $\delta f(\hat{u}_i)$  به رابطه زیر تبدیل می‌شود:

7

$$\delta f(\hat{u}_i) = \rho_0 P \int d\vec{r}_{ij} d\hat{u}_j C(\vec{r}_{ij}, \hat{u}_i, \hat{u}_j) (\vec{r}_{ij} \cdot \vec{\nabla}) f_0(\hat{u}_j)$$

که  $\vec{r}_{ij}$  فاصله بین مولکولی و  $C(\vec{r}_{ij}, \hat{u}_i, \hat{u}_j)$  تابع همبسته مستقیم بین مولکول‌های با جهت‌های  $\hat{u}_i$  و  $\hat{u}_j$  می‌باشند. برای حالتی که بردار راستار موازی محور z باشد، با جای گذاری رابطه 7 در معادله 6 و مقایسه  $\langle \vec{d} \rangle$  با رابطه 1 برای  $e_{11}$  و  $e_{33}$  عبارات زیر به دست می‌آیند [2 و 12]:



شکل 2: نمایش فاصله تماس مولکول‌های گلابی شکل در دو حالت سر به سر و پهلو به پهلو

## عبارات میکروسکوپی ضرایب

### فلکسوالکتریسیته سهم دوقطبی

برای بلور مایع نماتیک تک محور با مولکول‌های ناهمسانگرد با محورهای بزرگ و کوچک a و b، قطبش از رابطه زیر به دست می‌آید [7]:

$$\vec{P}(\vec{r}) = \rho_0 \langle \vec{d} \rangle + \vec{\nabla} \cdot \langle \vec{Q}(\vec{r}) \rangle \quad 2$$

که  $\rho_0$  چگالی کپه‌ای عددی مولکول‌ها، جمله اول میانگین دوقطبی‌های مولکولی  $\langle \vec{d} \rangle$  و جمله دوم گرادیان میانگین تانسور چگالی چهارقطبی بلور و به صورت زیر هستند [7].

$$\langle \vec{d} \rangle = \int \vec{P} f(\hat{u}, \hat{n}) d\vec{b} d\hat{u} \quad 3$$

$$\langle Q_{\alpha\beta} \rangle = \rho_0 \int Q_{\alpha\beta} f(\hat{u}, \hat{n}) d\vec{b} d\hat{u} \quad 4$$

$\vec{P}$  دوقطبی دائمی،  $d\hat{u} = \sin \theta d\theta d\varphi$  و  $\hat{n}$  بردار راستار بلور می‌باشند.  $f(\hat{u}, \hat{n})$  تابع توزیع جهتی بلور نماتیک تک محور و  $d\vec{b}$  انتگرال روی جهت عرضی مولکول‌هاست. همچنین عناصر تانسور

8

توجه به عدم تقارن مرکزی مولکول‌های گلابی شکل، تابع کمترین تماس این مولکول‌ها عبارت پیچیده‌ای می‌گردد. برای رفع این مشکل از روش پارامتری گائوسی سخت<sup>3</sup> پیشنهادی بارمس و همکاران [22] برای تابع کمترین تماس مولکول‌های با نیم طول متغیر  $l_i$  و نیم پهنای متغیر  $d_i$  (شکل 2) استفاده می‌شود. این تقریب اجازه می‌دهد که به جای شکل‌های مشابه گلابی، بیضی‌وارهای با طول به پهنای مؤثر وابسته به جهت نسبی و محوری مولکول‌ها انتخاب شوند.

11

$$\sigma^{HGO}(\bar{r}_{ij}, \hat{u}_i, \hat{u}_j) = \sigma_0 \left( 1 - \frac{AC(\bar{r}_{ij}, \hat{u}_i)^2 + BD(\bar{r}_{ij}, \hat{u}_j)^2 - 2AB(\bar{r}_{ij}, \hat{u}_i)(\bar{r}_{ij}, \hat{u}_j)(\hat{u}_i, \hat{u}_j)}{CD - AB(u_i, u_j)^2} \right)$$

که در آن

$$\sigma_0 = 2 * \sqrt{\frac{d_i^2 + d_j^2}{2}} \quad 12$$

$$A = (l_i^2 - d_i^2) \text{ و } B = (l_j^2 - d_j^2) \quad 13$$

$$C = (l_j^2 + d_i^2) \text{ و } D = (l_i^2 + d_j^2) \quad 14$$

و نیم طول‌های وابسته به جهت مولکول‌ها عبارتند از:

$$d_i(\bar{r}_{ij}, \hat{u}_j) = \sum_{n=0}^N a_{d,n} (\bar{r}_{ij}, \hat{u}_i)^n \quad 15$$

$$l_i(\bar{r}_{ij}, \hat{u}_j) = \sum_{m=0}^{N'} a_{l,m} (\bar{r}_{ij}, \hat{u}_i)^m \quad 16$$

$m$  و  $n$  مرتبه بسط،  $N$  و  $N'$  عدد قطع مناسب برای محاسبه کمترین تماس گلابی‌های سخت می‌باشند. بهترین مقادیر عددی ضرایب بسط  $a_{d,n}$  و  $a_{l,m}$  به دست آمده از روش کمینه‌سازی کمترین

$$e_{11} = \rho_0^2 P \int d\bar{r}_{ij} d\hat{u}_i d\hat{u}_j f_0(\cos\theta_i) \hat{u}_{iz} \times f_0'(\cos\theta_j) \hat{u}_{jx} r_{ij,x} C(r_{ij}, \hat{u}_i, \hat{u}_j)$$

9

$$e_{33} = \rho_0^2 P \int d\bar{r}_{ij} d\hat{u}_i d\hat{u}_j f_0(\cos\theta_i) \hat{u}_{ix} \times f_0'(\cos\theta_j) \hat{u}_{jx} r_{ij,z} C(r_{ij}, \hat{u}_i, \hat{u}_j)$$

این عبارات شباهت زیادی به معادلات پونیورسکی - استیککی در محاسبه ثابت‌های کشسانی بلورهای مایع [20] دارند. چنانچه دیده می‌شود برای محاسبه این ضرایب نیاز به تابع توزیع تعادلی و تابع همبسته مستقیم بلور نماتیک می‌باشد. این عبارات در ادامه برای بلور مایع با مولکول‌های گلابی شکل محاسبه می‌شوند.

### محاسبات

چنانچه روابط 8 و 9 نشان می‌دهند برای محاسبه  $e_{11}$  و  $e_{33}$  سهم دو قطبی‌ها، به تابع همبسته مستقیم و تابع توزیع  $f_0(\hat{u}_i, \hat{n})$  برای مولکول‌های گلابی شکل نیاز می‌باشد. برای محاسبه تابع همبسته از تابع استفاده شده در مرجع [21] برای مولکول‌های همپوشان گائوسی سخت<sup>1</sup> استفاده می‌شود. این تابع عبارتست از:

10

$$C^{HGO}(\bar{r}_{12}, \hat{u}_1, \hat{u}_2) = C \left( \frac{\bar{r}_{12}}{\sigma_{12}(\hat{u}_1, \hat{u}_2, \bar{r}_{12})} \right)$$

که در آن  $\sigma_{12}(\hat{u}_1, \hat{u}_2, \bar{r}_{12})$  تابع کمترین تماس مولکول‌های گائوسی سخت می‌باشد. با توجه به شباهت تقریبی مولکول‌های گلابی شکل با مولکول‌های بیضی‌گون، در صورتی که فاصله کمترین تماس بین مولکول‌های گلابی شکل سخت<sup>2</sup> را داشته باشیم و آنرا به جای  $\sigma$  در رابطه 10 قرار دهیم تابع همبسته تقریبی برای مولکول‌های گلابی شکل سخت به دست می‌آید. با

<sup>3</sup> Parameterized HGO

<sup>1</sup> (HGO) Hard Gaussian Overlap

<sup>2</sup> Hard Pear(HP)

- 17 مربعات برای کمترین تماس مولکول‌های سخت گلابی شکل با  $N = 10$  و  $N' = 2$  در جدول 1 توسط بارمس و همکاران [22] برای طول به پهنای 3، 4 و 5 به دست آمده است.
- جدول 1. ضرایب بسط نیم طول و نیم پهنای مولکول‌های گلابی شکل برای نسبت طول به پهنای 3، 4 و 5 و زاویه راس که  $\alpha = \tan^{-1}(1.0/(k/\sigma_0))$  از مرجع [22].
- 18

$$C^{HPair}(r/\sigma^{PHGO}, \rho_0) = -\lambda_1 + \lambda_2 (r/\sigma^{PHGO}(\bar{r}_{ij}, \hat{u}_i, \hat{u}_j)) - \lambda_3 (r/\sigma^{PHGO}(\bar{r}_{ij}, \hat{u}_i, \hat{u}_j))^3 \text{ if } r \leq \sigma^{PHGO} \\ = 0.0 \text{ if } r > \sigma^{PHGO}$$

	$k = 3$	$k = 4$	$k = 5$
$a_{d,0}$	0.501852454	0.501377232	0.497721868
$a_{d,1}$	-0.141145314	-0.129608758	-0.123155821
$a_{d,2}$	-0.060542359	-0.074219217	0.024405876
$a_{d,3}$	0.225813650	0.484166441	0.723627215
$a_{d,4}$	0.832274021	0.923492941	0.389831429
$a_{d,5}$	-1.015039575	-1.987232902	-3.018638148
$a_{d,6}$	-2.504045172	-2.943008017	-1.951629076
$a_{d,7}$	1.375313426	2.808075172	4.413215403
$a_{d,8}$	3.196830129	3.815344782	2.998417509
$a_{d,9}$	-0.699241457	-1.426641750	-2.241573216
$a_{d,10}$	-1.430400139	-1.682476460	-1.416614353
$a_{l,0}$	1.498259615	1.995906501	2.493069403
$a_{l,1}$	-0.002027616	-0.004518187	-0.008067236

$$\lambda_1 = (1/3)(3 + 12\eta + 10\eta^2 - 4\eta^3)/(1-\eta)^4$$

$$\lambda_2 = 2((2 + 2\eta + 17\eta^2 - (21/4)\eta^3) / (3(1-\eta)^4) + (2\log(1-\eta)) / (3\eta)) \quad 19$$

$$\lambda_3 = (12 - 39\eta + 64\eta^2 - 16\eta^3)/(6(1-\eta)^4) + (2\log(1-\eta))/\eta \quad 20$$

بارمس و همکاران این تابع تماس را برای شرط همپوشانی مولکول‌ها در شبیه‌سازی کامپیوتری استفاده کرده‌اند. ما با جاگذاری این مقادیر در روابط 11 تا 14 و جای‌گذاری تابع تماس حاصل در رابطه 10، تابع همبسته تقریبی برای مولکول‌های گلابی شکل سخت به دست آورده‌ایم. تابع همبسته پیشنهادی برای مولکول‌های گلابی شکل به صورت زیر نوشته می‌شود:

با قرار دادن رابطه 22 در 21 و استفاده از تابع توزیع 21 در رابطه 23، پارامتر نظم به دست می آید.

یک انتخاب مناسب برای محاسبه تابع توزیع که مشتق گیری آن دسترس پذیرتر از رابطه 21 می باشد تابع زیر است:

$$f_0(\hat{u}_i, \hat{n}) = \sum_l \frac{2l+1}{4\pi} \langle P_l \rangle P_l(\cos \theta_i) \quad 24$$

با توجه به هندسه مولکول های گلابی شکل،  $l$  می تواند مقادیر فرد و زوج را بپذیرد. لذا در محاسبه  $f_0(\cos \theta_i)$  مورد نیاز برای محاسبه ضرایب فلکسوالکتریسیته،  $l = 1, 2, 4$  انتخاب شده است.

$$f_0(\hat{u}_i, \hat{n}) \approx \frac{3}{4\pi} \langle P_1 \rangle P_1(\cos \theta_i) + \frac{5}{4\pi} \langle P_2 \rangle P_2(\cos \theta_i) + \frac{9}{4\pi} \langle P_4 \rangle P_4(\cos \theta_i) \quad 25$$

$\langle P_1 \rangle$  و  $\langle P_2 \rangle$  به ترتیب پارامترهای نظم قطبی و نماتیک می باشند که از قرار دادن تابع توزیع 25 در رابطه 23 به دست آمده اند. در ادامه توابع روابط 17 و 25 در معادلات 8 و 9 قرار داده شدند و با استفاده از ورودی های قدرت قطبش  $P$  و مقدار کسر فشردگی های مختلف، مقادیر  $e_{11}$  و  $e_{33}$  برای اندازه های مولکولی مختلف محاسبه شدند.

چنانچه معادلات 8 و 9 نشان می دهند برای محاسبه  $e_{11}$  و  $e_{33}$  نیاز به حل انتگرال های 7 گانه می باشد. محاسبه این انتگرال ها از روش های معمول بسیار زمان بر است. لذا برای حل این انتگرال های متشکل از شش انتگرال زاویه ای و یک انتگرال روی  $dr_{12}$ ، از روش مونت کارلو [24] استفاده شد. برنامه به زبان فرترن [25] کد نویسی و برای گشتاور  $P = 0.524$  مقادیر ضرایب فلکسوالکتریسیته مایع با مولکول های گلابی شکل سخت با  $k = 3.0$  و  $k = 5.0$  محاسبه گردیدند.

### بحث و نتیجه گیری

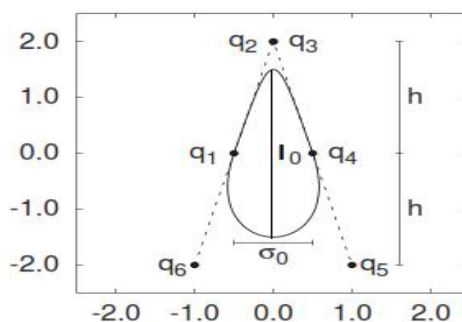
در روابط بالا  $\eta = \rho_0 \times v_{Molecule}$  کسر فشردگی بلور می باشد. نقاط کنترلی لازم برای محاسبه تابع کمترین تماس و همچنین حجم مولکول در شکل 3 نشان داده شده اند. با تغییر انحنای نیمه بالایی مولکول، زاویه رأس و مقدار  $h$  تغییر می نماید [22].

شکل 3. نقاط کنترلی مناسب برای محاسبه فاصله کمترین تماس مولکول های گلابی شکل  $k = (l_0/\sigma_0) = 3.0$  (قتباس از مرجع [22]).

کمیت بعدی که مورد نیاز می باشد تابع توزیع جهتی  $f_0(\hat{u}_i, \hat{n})$  می باشد. برای حالتی که  $\hat{u}_i \cdot \hat{n} = \cos \theta_i$  باشد از روش تابعی انزاگر [23]، تابع توزیع نماتیک تک محور از حل معادله خودسازگار زیر به دست می آید:

$$f(\cos \theta_i) = C_1 \exp[-2\rho_0 \int d\hat{u}_j f(\hat{u}_j) B_2(\hat{u}_i, \hat{u}_j)] \quad 21$$

که  $C_1$  ضریب بهنجارش و  $B_2(\hat{u}_1, \hat{u}_2)$  ضریب ویريال مرتبه دوم وابسته به جهت می باشد. ضریب ویريال با استفاده از تابع کمترین تماس مولکول های

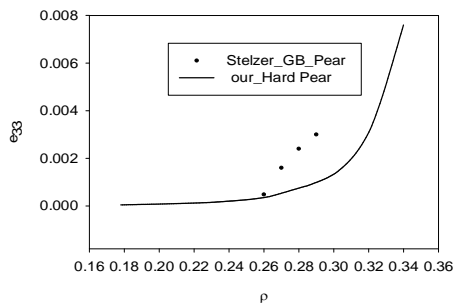


گلابی شکل از رابطه زیر به دست آمد:

$$B_2(\hat{u}_1, \hat{u}_2) = \frac{1}{6} \int d\hat{r}_{12} (\sigma^{PHGO}(\hat{r}_{12}, \hat{u}_1, \hat{u}_2))^3 \quad 22$$

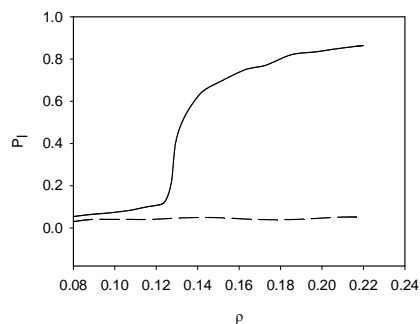
پارامتر نظم  $\langle P_l \rangle$  عبارت است از:

$$\langle P_l \rangle = 2\pi \int f_0(\cos \theta) P_l(\cos \theta) \sin \theta d\theta \quad 23$$



شکل 5. ضریب فلکسوالکتریسیته نماتیک خمیده به‌ازای گشتاور دوقطبی  $P = 0.524$  برای مایع مولکولی گلابی شکل سخت با  $k = 3.0$ . خط پر کار حاضر و نقاط مربوط به شبیه سازی مرجع [12] با برهمکنش گی-برن می‌باشند.

برای مایع با مولکول‌های گلابی شکل سخت با  $k = 5$  پارامترهای نظم  $\langle P_1 \rangle$  و  $\langle P_2 \rangle$  در شکل 6 برحسب چگالی تک‌ذره‌ای نشان داده شده‌اند. برای محاسبه  $\langle P_4 \rangle$  از تقریب  $\langle P_4 \rangle \approx \langle P_2 \rangle^2$  استفاده شده است. نمودار  $\langle P_2 \rangle$  نشان می‌دهد که مولکول‌های سخت با  $k = 5$  در چگالی‌های  $\rho \geq 0.13$  نظم بلوری نماتیک می‌یابند لذا اثر انحراف بردار راستار و ضرایب فلکسوالکتریسیته آنها قابل توجه می‌باشند.

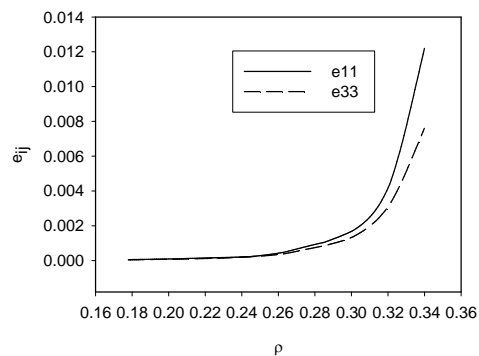


شکل 6: تغییرات پارامترهای نظم قطبی و نماتیک برحسب چگالی تک‌ذره‌ای برای مایع با مولکول‌های سخت گلابی شکل  $k = 5$ . خط پر  $\langle P_2 \rangle$  و خط چین  $\langle P_1 \rangle$  هستند.

در شکل 7 نمودارهای  $e_{11}$  و  $e_{33}$  این بلور برحسب چگالی کپه‌ای رسم شده‌اند. در این حالت ضریب

مقادیر محاسبه شده ضرایب فلکسوالکتریسیته در شکل‌های 4، 5، 7 و 8 نشان داده شده‌اند. چنانچه شکل 4 نشان می‌دهد این ضرایب برای مایع مولکولی گلابی شکل سخت با  $k = 3$  مقادیر بسیار کوچکی دارند. لازمه وجود ضرایب فلکسوالکتریسیته  $e_{11}$  و  $e_{33}$  قابلیت هم خط شدن مولکول‌ها و تشکیل حالت بلوری و انحراف بردار راستار بلور می‌باشد.

مولکول‌های گلابی شکل سخت با طول به‌پهنای 3 و 4 نمی‌توانند حالت نماتیک داشته باشند [22]. لذا در چگالی‌های نشان داده شده در شکل 4 عملاً ضرایب فلکسو الکتریسیته سهم دوقطبی، مقادیر قابل توجهی ندارند. به دلیل در دسترس نبودن اطلاعات برهم‌کنش سخت، در شکل 5 ضریب حالت خمیده برای مایع با مولکول‌های گلابی شکل سخت با نتایج شبیه سازی در دسترس با برهم‌کنش گی-برن [12] مقایسه شده است.



شکل 4. ضرایب فلکسوالکتریسیته به‌ازای گشتاور دوقطبی  $P = 0.524$  با پارامترهای کار حاضر برای مایع مولکولی گلابی شکل سخت با  $k = 3.0$ . خط پر  $e_{11}$  و خط چین  $e_{33}$  هستند.

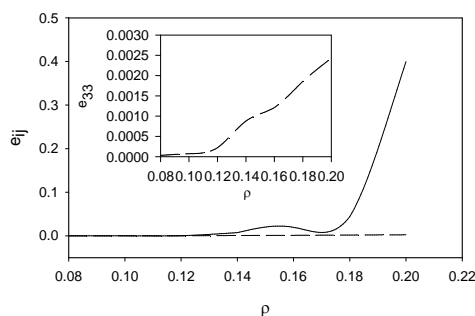
$k=5.0$ . خط پر کار حاضر و نقاط مربوط به شبیه‌سازی مرجع [26] می‌باشند.

رفتار کیفی مناسب ضرایب فلکسوالکتریسیته مایعات با مولکول‌های گلابی شکل سخت، نشانگر مناسب بودن تابع همبسته مستقیم پیشنهادی برای محاسبه خواص ترمودینامیکی و ساختاری اینگونه مایعات مولکولی می‌باشد. با توجه به در دسترس نبودن رابطه تابع همبسته برای بلورهای مایع با مولکول‌های گلابی شکل و پیچیدگی محاسبات، در کار حاضر از تقریب استفاده شده است. در کارهای بعدی با استفاده از این تابع همبسته، خواص ترمودینامیکی و کشسانی مایعات با مولکول‌های گلابی شکل سخت و نرم محاسبه می‌شوند. همچنین ضرایب فلکسوالکتریسیته مایعات بلوری با مولکول‌های گلابی شکل با تحذب‌ها و برهم‌کنش‌های بین مولکولی مختلف و بستگی آنها به خواص کشسانی را می‌توان محاسبه نمود.

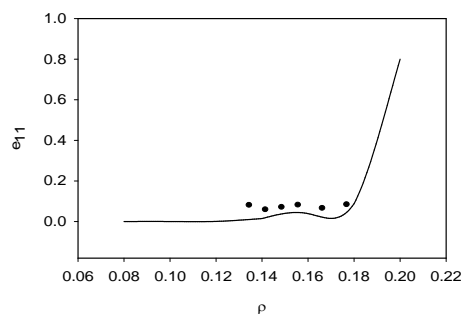
### مرجع‌ها

- [1] F.C. Frank, On the theory of liquid crystals, *Discuss. Faraday Soc.* **25** (1958) 19-28.
- [2] J. Stelzer, R. Berardi, C. Zannoni, Flexoelectric Coefficients for Model Pear Shaped Molecules from Monte Carlo Simulations, *Molecular Crystals and Liquid Crystals* **352** (2000) 187- 194.
- [3] R.B. Meyer, Piezoelectric Effects In Liquid Crystals, *Physical Review Letters* **22** 18 (1969) 918-921.
- [4] M.A. Osipov, The order parameter dependence of the flexoelectric coefficients in nematic liquid crystals, *Journal de Physique Letters* **45** 16 (1984) 823-826.
- [5] J. Prost, J.P. Marcerou, On the microscopic interpretation of flexoelectricity, *Le. J. De. Physique*, **38** (1977) 315-324.
- [6] J.P. Straley, Theory of piezoelectricity in nematic liquid crystals, and of the cholesteric ordering, *Physical Review A* **14** 5 (1976) 1835-1841.

فلکسوالکتریسیته  $e_{11}$  مقدار قابل توجهی گردیده است. همان‌طور که قبلاً گفته شده، مولکول‌های گلابی شکل قطبیده تمایل به تبدیل شدن به آرایش گسترده دارند لذا ضریب  $e_{11}$  برای این مایع بلوری مولکولی مقادیر قابل توجهی یافته و مقدار  $e_{33}$  همچنان خیلی کوچک است. چنانچه شکل‌های 4 و 7 نشان می‌دهند در حالات مختلف برای مایعات با مولکول‌های گلابی شکل سخت همواره  $e_{11} > e_{33}$  می‌باشد.



شکل 7. ضرایب فلکسوالکتریسیته به‌ازای گشتاور دوقطبی  $P=0.524$  با پارامترهای کار حاضر برای مایع مولکولی گلابی شکل سخت با  $k=5.0$ . خط پر  $e_{11}$  و خط چین  $e_{33}$  هستند. در شکل 8 ضریب فلکسوالکتریسیته حالت گسترده با نتایج در دسترس شبیه‌سازی دینامیک مولکولی [26] برای  $k=5$  مقایسه شده‌اند. به‌خوبی دیده می‌شود که رفتار  $e_{11}$ ها در دو حالت سازگاری کیفی دارند.



شکل 8. ضریب فلکسوالکتریسیته نماتیک گسترده به‌ازای گشتاور دوقطبی  $P=1.0$  برای مایع مولکولی گلابی شکل سخت با



- [18] C.C. Tartan, S.J. Elston. Hybrid aligned nematic based measurement of the sum ( $e_1+e_3$ ) of the flexoelectric coefficients, *Journal of Applied Physics* **117** (2015) 064107/1-7
- [19] L. Jianfei, Y. Huairui, Y. Zhang, D. Shizhuo and L. Xuan Flexoelectric effect in cylindrical hybrid aligned nematic liquid crystals cell, *Liquid Crystals*, Published online: 28 Sep 2018.
- [20] A. Poniewierski, J. Stecki, Statistical theory of the elastic constants of nematic liquid crystals, *Molecular Physics* **38** (1979) 1931-1940.
- [21] A. Avazpour, M. Moradi, The direct correlation functions of hard Gaussian overlap and hard ellipsoidal fluids, *Physica B* **392** (2007) 242-250.
- [22] F. Barmes, M. Ricci, C. Zannoni, D.J. Cleaver, Computer simulations of hard pear-shaped particles, *Physical Review E* **68** (2003) 021708/1-11.
- [23] L. Onsager, The Effects of Shape on the Interaction of Colloidal Particles. *Annals of the New York Academy of Sciences* **51** (1949) 627-659.
- [24] G.P. Lepage, A new algorithm for adaptive multidimensional integration, *Journal of Computational Physics* **27** (1978) 192-203.
- [25] W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, B.P. Flannery, *Numerical Recipes in Fortran 77*, (Cambridge University Press, second edition, Cambridge (1997).
- [26] L.J. Ellison, Computer simulations of tapered particles. Ph.D. thesis, Sheffield Hallam University, (2008).
- [7] M.A. Osipov, Molecular theory of flexoelectric effect in nematic liquid crystals, *Soviet Physics JETP* **58** 6 (1983) 1167-1171.
- [8] A. Ferrarini, Shape model for the molecular interpretation of the flexoelectric effect, *Physical Review E* **64** 2 (2001) 021710/1-11.
- [9] A. Ferrarini, C. Greco, G.R. Luckhurst, On the flexoelectric coefficients of liquid crystal monomers and dimers: a computational methodology bridging length-scales, *Journal of Material Chemistry* **17** 11 (2007) 1039-1042.
- [10] Y. Singh, U.P. Singh, density functional theory of the flexoelectric effects in nematic liquids, *Physical Review A* **39** 8 (1989) 4254-4262.
- [11] A.M. Somoza, P. Tarazona, Density functional theory of the elastic constants of a nematic liquid crystal, *Molecular Physics* **72** 4 (1991) 911-926.
- [12] J. Stelzer, R. Berardi, C. Zannoni, Flexoelectric effects in liquid crystals formed by pear-shaped molecules. A computer simulation study, *Chemical Physics Letters* **299** (1999) 9-16.
- [13] D.L. Cheung, S.J. Clark, M.R. Wilson, Calculation of flexoelectric coefficients for a nematic liquid crystal by atomistic simulation, *Journal of Chemical Physics* **121** 18 (2004) 9131-9139.
- [14] A.V. Emelyanenko, M.A. Osipov, Theoretical model for the discrete flexoelectric effect and a description for the sequence of intermediate smectic phases with increasing periodicity, *Physical Review E* **68** 5 (2003) 051703/1-16.
- [15] N.V. Madhusudana, Chapter 2. *Flexoelectro-optics and measurements of flexoelectric coefficients*. In eds. A. Buka and N. Eber, *Flexoelectricity in Liquid Crystals. Theory, Experiments and applications*, Imperial College Press, London, (2012) 33-60.
- [16] P.S. Salter, C. Tschierske, S.J. Elston, E.P. Raynes, Flexoelectric measurements of a bent-core nematic liquid crystal, *Physical Review E* **84** 3 (2011) 031708/1-5.
- [17] B. Kundu, A. Roy, R. Pratibha, N.V. Madhusudana, Flexoelectric studies o made of rod like and bent-core molecules, *Applied Physics Letters* **95** 8 (2009) 081902/1-3.