

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشگاه الزهراء  
دانشکده علوم پایه

پایان نامه  
برای دریافت درجه کارشناسی ارشد در رشته

فیزیک

گرایش حالت جامد

عنوان

بررسی جهت گیری و نظم بلورهای  
مایع نماتیک در حضور کلونئیدها و  
نانو ذرات

استاد راهنما

دکتر سعیده شعاری نژاد

استاد مشاور

دکتر فرهاد شهبازی

دانشجو

دولت ناصری

اسفند ۱۳۹۰

تقدیم به

آن تموج لطیفی که خرد را آفرید تا در او

بنگرد و تقدیم به مادر طبیعت که از

زیبایی او در شگفتی همواره ام . تقدیم

به آنان که زاینده من بودند و حیات را

در پیکرم جاری کردند تا به نیروی آن ،

در آسمان و زمین بنگرم و از زندگانی ،

اندیشیدن

و

مبهوت شدن ، لذت برم

# سپاس گزاری

سپاس می گزارم نخستین آموزگار را که تفاوت هستی و نیستی به من آموخت و مرا هست کرد.  
سپاس می گزارم آن آموزگار را که نخستین کلام به من آموخت و مرا نیرو بخشید به این قدرت.  
سپاس می گزارم آن آموزگار را که نخستین گام به من آموخت و مرا پویا و رویش بخشید.  
سپاس می گزارم آن آموزگار را که نخستین قلم در دست من نهاد و دستم گرفت تا بنگارم .  
سپاس می گزارم از آموزگاران که پس از آن ، نگاشتن از روی اندیشه را به من آموختند.  
آنان که هم دانش آموزش دادند و هم بینش ، هم خط آموختند و هم معنای خط را .  
آنان که اینک مرا تعلیم می دهند و آنان که پس از این مرا تعلیم خواهند داد.

و سپاس می گزارم آن استاد را که وقتی از وی پرسیدم :

آیا پیمودن راه برایم سخت خواهد بود ؟ پاسخ داد :

آری و بار نادانی من بر شانه دانایی خویش نهاد

اینک در انتهای راه پرسشی دیگر دارم:

سختی راه از آن که بود؟

آن بار یا آن شانه

؟

## چکیده

موضوع اصلی این پایان نامه بررسی خواص و ویژگی های بلور مایع نماتیک در حضور ذرات ناخالصی است. در این پژوهش سعی بر آن است که برخی ویژگی های بلور مایع در حضور ذرات کلونیدی و نانو ذرات مورد بررسی قرار گیرد. در سالهای اخیر به دلیل کاربردهای وسیع بلورهای مایع آمیخته به ناخالصی ها، پیشرفتهای گسترده ای در این زمینه در هر دو بعد نظری و تجربی صورت گرفته است. سمت گیری و نظم بلورهای مایع شدیداً تحت تاثیر عوامل مختلف ناشی از حضور ناخالصی ها قرار می گیرد. از جمله مهم ترین آنها تغییر شکل های کشسانی و چنگ زدگی ها در سطوح می باشد. به علاوه ابعاد و شکل ذره نقش مهمی در خواص مختلف فیزیکی این نوع ترکیبات دارند. در این کار پژوهشی با مد نظر قرار دادن نوع، اندازه و شکل ذرات وارد شده در بلور مایع، اثرات آشکار شده در ترکیب، از جمله عیوب ایجاد شده در محیط و تغییرات به وجود آمده در برخی ویژگی های بحرانی آنها مورد بررسی قرار خواهد گرفت. در این پژوهش با استفاده از دو مدل شبیه سازی بلور مایع گرون-هس و لبول-لاشر انرژی کشسانی و برهم کنشی بین مولکول های بلور مایع و نانو ذرات مغناطیسی محاسبه شده و واپیچش های سیستم بلور مایع آمیخته به کلونیدهای مغناطیسی بررسی شده است.

# فهرست مطالب

۱	چکیده	۱
۱	تاریخچه	۱
۲	<b>۱ بلورهای مایع</b>	۲
۲	۱.۱ مقدمه	۲
۳	۲.۱ طبقه بندی	۳
۴	۳.۱ اجزای سازنده	۴
۴	۱.۳.۱ مولکول های کشیده آلی کوچک	۴
۷	۲.۳.۱ مولکول های دیسکی شکل آلی کوچک	۷
۸	۳.۳.۱ مولکول های میله ای بلند مارپیچ	۸
۸	۴.۳.۱ پلیمرها	۸
۱۰	۵.۳.۱ ساختارهای مرکب	۱۰
۱۰	۴.۱ فازهای بلور مایع ترموتروپیک	۱۰
۱۰	۱.۴.۱ فاز نماتیک	۱۰
۱۲	۲.۴.۱ فاز اسمکتیک	۱۲
۱۳	۳.۴.۱ فازهای کایرال	۱۳
۱۵	۴.۴.۱ فازهای دیسکی شکل	۱۵
۱۵	۵.۱ بررسی نظری بلورهای مایع	۱۵
۱۶	۱.۵.۱ پارامتر نظم و جهت نما	۱۶
۱۸	۲.۵.۱ نظریه میدان میانگین مایر - سُب	۱۸
۱۹	۳.۵.۱ نظریه پیوستگی کشسانی	۱۹
۲۰	۶.۱ انرژی آزاد سیستم	۲۰
۲۲	۱.۶.۱ جهت گیری بلور مایع	۲۲
۲۳	۲.۶.۱ چنگ زدگی و انرژی سطحی	۲۳
۲۴	۳.۶.۱ انرژی الکتریکی	۲۴
۲۵	۴.۶.۱ انرژی مغناطیسی	۲۵
۲۵	۷.۱ گذار فردریکز	۲۵
۲۶	۸.۱ کاربردها	۲۶
۲۸	<b>۲ ناخالصی ها در بلور مایع</b>	۲۸
۲۸	۱.۲ مقدمه	۲۸
۲۸	۲.۲ عیوب در بلور مایع خالص	۲۸
۲۸	۱.۲.۲ تعریف	۲۸
۲۹	۲.۲.۲ طبقه بندی	۲۹
۲۹	۳.۲.۲ عیوب خطی	۲۹

۳۰	.....	۴.۲.۲	عیوب نقطه ای
۳۲	.....	۳.۲	کلوئیدها
۳۲	.....	۴.۲	امولسیون نماتیک معکوس
۳۳	.....	۵.۲	پیکربندی در حضور ناخالصی کروی شکل
۳۳	.....	۶.۲	انرژی آزاد سیستم
۳۵	.....	۷.۲	گذار بین دو نوع پیکربندی
۳۵	.....	۱.۷.۲	تاثیر میدان خارجی
۳۶	.....	۲.۷.۲	تاثیر قدرت چنگ زدگی و اندازه ذرات
۳۶	.....	۸.۲	پیکربندی در حضور ناخالصی میله ای شکل
۳۸	.....	۹.۲	جمع بندی
۳۹	<b>۳ نانو کلوئیدهای مغناطیسی در بلور مایع</b>		
۳۹	.....	۱.۳	مقدمه
۴۱	.....	۲.۳	بررسی نظری بلورهای مایع آمیخته به کلوئیدهای مغناطیسی
۴۳	.....	۳.۳	بر هم کنش مجموعه ذرات و نماتیک
۴۵	.....	۴.۳	آرایش کلوئیدهای مغناطیسی وارد شده در بلور مایع
۴۵	.....	۱.۴.۳	ذرات کاملا تک محور میله ای
۴۶	.....	۲.۴.۳	ذرات تقریبا تک محور
۴۷	.....	۵.۳	گذار فردریکز در یک فرونماتیک با چنگ زدگی قوی
۴۷	.....	۱.۵.۳	چگالی انرژی آزاد
۴۸	.....	۲.۵.۳	آستانه گذار
۵۰	.....	۶.۳	گذار فردریکز در یک فرونماتیک با چنگ زدگی ضعیف
۵۰	.....	۱.۶.۳	چگالی انرژی آزاد
۵۱	.....	۲.۶.۳	آستانه گذار
۵۴	.....	۷.۳	بررسی گذار فردریکز در یک حالت خاص
۵۵	.....	۱.۷.۳	فرمول بندی مسئله
۵۸	.....	۸.۳	ساختار واپیچیده و میدان آستانه گذار
۶۱	.....	۹.۳	نتایج و بحث
۶۱	.....	۱.۹.۳	تغییرات میدان گذار و اثر حضور نانوذرات
۶۲	.....	۲.۹.۳	میدان جهت نما و اثر نانوذرات
۶۴	.....	۳.۹.۳	تغییرات بیشینه واپیچش، $\theta_m$ ، در حضور نانوذرات
۶۵	.....	۱۰.۳	نتیجه گیری
۶۶	.....	۱۱.۳	جمع بندی
۶۷	<b>۴ شبیه سازی بلور مایع آمیخته به نانو کلوئیدهای مغناطیسی</b>		
۶۷	.....	۱.۴	مقدمه
۶۸	.....	۲.۴	دو مدل شبیه سازی بلور مایع
۶۸	.....	۱.۲.۴	مدل لیول - لاشر
۶۹	.....	۲.۲.۴	مدل گرون - هس
۷۳	.....	۳.۴	شبیه سازی سلول بلور مایع آمیخته به نانو کلوئیدهای مغناطیسی
۷۶	.....	۴.۴	روند شبیه سازی
۷۶	.....	۱.۴.۴	مقدمه
۷۶	.....	۲.۴.۴	مرحله نخست تولید ذرات
۷۷	.....	۳.۴.۴	مرحله دوم کمیته کردن انرژی
۷۹	.....	۴.۴.۴	پاسخ های سیستم
۸۳	.....	۵.۴	بررسی سیستم در حضور چنگ زدگی صفحه ای

۸۴	.....	چنگ زدگی ضعیف	۱.۵.۴
۸۵	.....	چنگ زدگی متوسط	۲.۵.۴
۸۶	.....	چنگ زدگی قوی	۳.۵.۴
۸۷	.....	بررسی سیستم در حضور چنگ زدگی هوموتروپیک	۶.۴
۸۸	.....	چنگ زدگی ضعیف	۱.۶.۴
۸۹	.....	چنگ زدگی متوسط	۲.۶.۴
۹۰	.....	چنگ زدگی قوی	۳.۶.۴
۹۱	.....	بررسی تغییرات میدان مغناطیسی در حالت چنگ زدگی قوی	۷.۴
۹۵	.....	نتیجه و جمع بندی	
۹۶			<b>پیوستها</b>
۹۶	.....	محاسبات	
۹۶	.....	شبیه سازی مونت کارلو	
۹۹	.....	مراجع و منابع	



# فهرست شکلها

۳	.....	مقایسه ای بین فازها	۱.۱
۴	.....	ساختار شیمیایی مولکول PAA	۲.۱
۵	.....	ساختار شیمیایی مولکول MBBA	۳.۱
۵	.....	انواع ساختارهای کشیده	۴.۱
۶	.....	مولکول های فاز نماتیک یا اسمکتیک	۵.۱
۶	.....	بلور مایع بر مبنای کلسترول استر	۶.۱
۷	.....	مولکول های دیسکی شکل	۷.۱
۹	.....	پلیمر زنجیر اصلی	۸.۱
۹	.....	پلیمر زنجیره کناری	۹.۱
۱۰	.....	ساختارهای مرکب	۱۰.۱
۱۱	.....	نماتیک	۱۱.۱
۱۲	.....	فاز اسمکتیک A	۱۲.۱
۱۳	.....	اسمکتیک C	۱۳.۱
۱۴	.....	فازهای کایرال	۱۴.۱
۱۵	.....	فاز نماتیک دیسکوتیک و دیسکوتیک ستونی	۱۵.۱
۱۶	.....	بردار جهت نما	۱۶.۱
۱۷	.....	پارامتر نظم	۱۷.۱
۲۰	.....	انواع واپیچش در بلورهای مایع	۱۸.۱
۲۳	.....	جهت گیری بردار جهت نما	۱۹.۱
۲۳	.....	موقعیت بردار جهت نما	۲۰.۱
۳۰	.....	عیوب خطی	۱.۲
۳۱	.....	هج هوگ های شعاعی و هذلولی	۲.۲
۳۱	.....	تبدیل عیوب نقطه ای به عیوب خطی حلقوی	۳.۲
۳۶	.....	تاثیر اندازه ذره بر نوع عیوب ایجاد شده در سیستم	۴.۲
۳۷	.....	سه نوع جهت گیری حول ذرات میله ای شکل	۵.۲
۴۹	.....	بافت اولیه گذار در مدل بروچارد و دژن	۱.۳
۵۲	.....	گذار در حضور چنگ زدگی ضعیف	۲.۳
۵۵	.....	طرح شماتیک سلول	۳.۳
۵۶	.....	زاویه محور مولکول با محورها	۴.۳
۶۲	.....	میدان بر حسب ضخامت	۵.۳
۶۲	.....	میدان بر حسب کسر حجمی	۶.۳
۶۳	.....	جهت نما بر حسب ضخامت، بلور مایع خالص	۷.۳
۶۳	.....	جهت نما بر حسب ضخامت، فرونماتیک	۸.۳

۶۴	جهت نما در بلور مایع خالص	۹.۳
۶۵	جهت نما در فرونماتیک	۱۰.۳
۶۹	گذار فردریکز در شبکه $15 \times 15$ بر اساس مدل لبول - لاشر	۱.۴
۶۹	دانه بندی بلور مایع به صورت یک شبکه مربعی	۲.۴
۷۳	گذار فردریکز بر اساس مدل گرون هس	۳.۴
۷۴	زاویه مولکول ها با محور مختصات	۴.۴
۷۴	سلول بلور مایع نماتیک آمیخته به کلئیدهای مغناطیسی	۵.۴
۷۷	حالت ابتدایی سیستم	۶.۴
۷۹	فلوچارت برنامه	۷.۴
۸۰	حالت تعادلی سیستم بدون اعمال میدان خارجی	۸.۴
۸۱	حالت تعادلی سیستم در حضور میدان بایاس	۹.۴
۸۲	حالت تعادلی سیستم در حضور میدان مغناطیسی	۱۰.۴
۸۳	حالت تعادلی سیستم و گذار فردریکز	۱۱.۴
۸۵	بررسی اثر چنگ زدگی ضعیف در سیستم	۱۲.۴
۸۶	بررسی اثر چنگ زدگی متوسط در سیستم	۱۳.۴
۸۷	بررسی اثر چنگ زدگی قوی در سیستم	۱۴.۴
۸۸	شرایط اولیه سلول برای حالت چنگ زدگی هوموتروپیک	۱۵.۴
۸۹	بررسی اثر چنگ زدگی ضعیف در سلول هوموتروپیک	۱۶.۴
۹۰	بررسی اثر چنگ زدگی متوسط در سلول هوموتروپیک	۱۷.۴
۹۱	بررسی اثر چنگ زدگی قوی در سلول هوموتروپیک	۱۸.۴
۹۲	واپیچش ها به ازای $h = 0.2$	۱۹.۴
۹۳	واپیچش ها به ازای $h = 0.6$	۲۰.۴
۹۴	واپیچش ها به ازای $h = 1$	۲۱.۴

## تاریخچه

کشف فاز میانی، بلور مایع گون، به فردریک راینیتزر<sup>۱</sup> نسبت داده می شود. عنوان بلور مایع نخستین بار توسط یک فیزیکدان آلمانی به نام اتو لهمان<sup>۲</sup> پیشنهاد شد و طبقه بندی ویژگی های ساختاری آنها نیز نخست توسط معدن شناس فرانسوی جرج فریدل<sup>۳</sup>، در سال ۱۹۲۲ صورت گرفت. تحقیقات تجربی توسط لهمان و فریدل به علاوه نظریه ارائه شده درباره بلورهای مایع توسط فیزیکدان سوئدی کارل اوسن<sup>۴</sup>، مبانی علمی تحقیق در مورد بلورهای مایع را تشکیل داد. تا دهه ۱۹۵۰ که پیشرفت بیشتر در درک بلورهای مایع توسط فرانک<sup>۵</sup> صورت گرفت، کار خاصی در این مورد انجام نشده بود. پس از آن در اواسط ۱۹۶۰ پیشرفت تجربی و نظری کاملی توسط یک فیزیکدان فرانسوی به نام پیر ژیل دوژانس<sup>۶</sup> صورت گرفت. در سالهای اخیر دانشمندان از آمیختن بلورهای مایع با ذرات کلوئیدی با اشکال و ابعاد مختلف، نانو ذرات و دیگر ناخالصی ها به بلورهای مایع، به خواص متمایز و جالبی دست یافته اند که کاربردهای گسترده ای از جمله در صنایع نظامی، ساخت حسگرها و نمایشگرهای انعطاف پذیر و غیره دارند. پژوهش های انجام شده نشان داده اند که در این نوع مواد حضور ناخالصی ها منجر به شکست تقارن ها، اغتشاش در میدان های جهت نما و ایجاد عیوب خاصی می گردد. نتایج بدست آمده نشان می دهند که حضور چنین ناخالصی هایی، حتی به ازای درصدهای تراکم پایین، شدیداً سیستم های بلور مایع را تحت تاثیر قرار می دهند و پارامترهای مختلفی در نوع و میزان این تاثیرات اهمیت دارند. در این میان نوع ذرات، شکل و اندازه آنها و نیز میزان چنگ زدگی ها در سطوح از پارامترهای تعیین کننده می باشند. اما به دلیل وجود برهم کنش های دوربرد، پاسخ های غیر خطی به میدان های خارجی و پیچیدگی های موجود در حل مسئله مربوطه، اکثر پژوهش های انجام شده در این زمینه به کارهای تجربی محدود شده اند. لذا در این کار پژوهشی ما بر آن شدیم که به بررسی تئوری و محاسبات شبیه سازی اثر حضور این ذرات در نظم و میدان های جهت نما، با در نظر گرفتن چنگ زدگی ها و میدان های خارجی بپردازیم.

---

<sup>۱</sup> Friedrich Reinitzer

<sup>۲</sup> Otto Lehmann

<sup>۳</sup> Georges Friedel

<sup>۴</sup> Carl Oseen

<sup>۵</sup> F.C Frank

<sup>۶</sup> Pierre-Gilles de Gennes

# فصل ۱

## بلورهای مایع

### ۱.۱ مقدمه

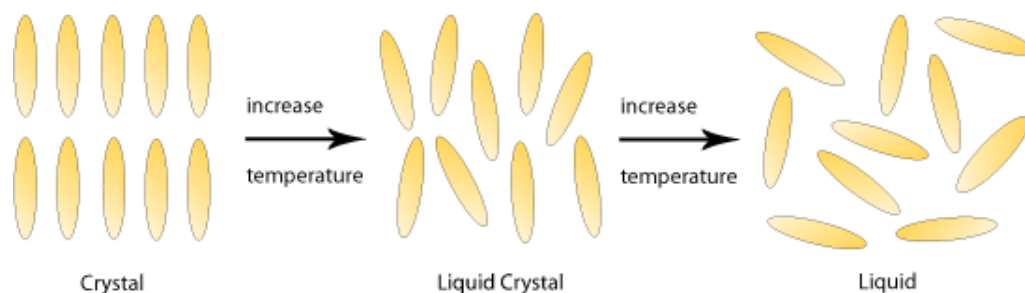
همانطور که می دانیم فازهای اصلی ماده عبارتند از جامد ، مایع و گاز. این فازها می توانند در شرایط مناسب به یکدیگر تغییر یابند. در فاز جامد ، اجزای سازنده همچون اتم ها ، مولکول ها یا خوشه های مولکولی به شکل منظم یک شبکه بلوری را می سازند. پراش اشعه  $X$  الگوی پراش بسیار منظمی را برای جامدات نشان می دهد. ناهمسانگردی خواص فیزیکی بلورها از ویژگی اساسی آنهاست. بلورها (به استثنای جامدات بی شکل<sup>۱</sup>) دمای ذوب ثابتی دارند. با افزایش دما، جابه جایی اتم ها یا مولکول ها آقدر شدید می شود که شبکه بلوری ذوب و تبدیل به شاره می شود. در این دما ماده نمی تواند شکل منظم و یا ویژگی های ناهمسانگردی خود را حفظ کند. در فاز مایع اتم ها یا مولکول ها به صورت منظم مرتب نمی شوند اما هنوز به یکدیگر مقیدند البته نه به صورت به هم پکیده. در حالت کلی، با افزایش دما ماده ای که در ابتدا جامد است به مایع و سپس به گاز تبدیل می شود. تعداد کمی از مواد استثناً می توانند در اثر گرما طی فرایند تصعید از جامد به گاز تبدیل شوند. با افزایش درک ما از فازهای مختلف ماده ، دریافتیم که علاوه بر حالت های مذکور، حالت های دیگری از ماده نیز در طبیعت وجود دارد از جمله پلاسما، جامدات بی شکل، بلورهای مایع<sup>۲</sup> ، ابررسانا و غیره. از این میان بلورهای مایع، در این پژوهش مورد توجه ما هستند. موادی که فاز بلور مایع نشان می دهند در

---

<sup>۱</sup>Amorphous

<sup>۲</sup>Liquid crystals ( LCs)

واقع هنگام ذوب شدن از جامد به مایع دو نقطه ذوب نشان می دهند، در نقطه ذوب اول ماده از فاز جامد وارد فاز بلور مایع می شود و در این حالت ماده هنوز کدر است و در نقطه ذوب دوم که نقطه شفافیت نیز نامیده می شود ماده از فاز بلور مایع وارد فاز مایع همسانگرد شفاف می گردد. در جامدات نظم بلندبرد مکانی و جهتی وجود دارد در حالی که در مایعات نظم بلندبرد مکانی یا جهتی وجود ندارد. در بلورهای مایع نظم جهتی و نظم مکانی دوربرد فقط در یک یا دو بعد داریم. شکل ۱.۱ مقایسه ای بین جامد، مایع و بلورمایع را نشان می دهد.



شکل ۱.۱: مقایسه ای بین فازهای جامد، مایع و بلور مایع

بلورهای مایع در ابتدا به عنوان حالتی کمیاب در طبیعت شناخته می شدند اما امروزه بیش از هشتاد هزار ترکیب بلور مایع یافت شده است و به این ترتیب این فاز خانواده بزرگی از مواد را شامل می شود. بلورمایع را مزو فاز<sup>۳</sup> نیز می نامند، در واقع این اصطلاح برای ترکیبی به کار می رود که می تواند حالت بلور مایع را از خود نشان دهد. هم چنین بیش از بیست فاز بلور مایع تاکنون کشف شده است.

## ۲.۱ طبقه بندی

فازهای بلورمایع را می توان به دو دسته تقسیم کرد. فازهای بلورمایع ترموتروپیک<sup>۴</sup> که توسط ملکولهای آلی در یک گستره دمایی خاص، تشکیل می شوند. پیشوند ” ترمو ”، اشاره به گذارهای فاز حاصل از تغییر دما دارد. حدود یک درصد از تمام مولکول های آلی که از فاز بلور جامد ذوب می شوند پیش از آنکه در دماهای بالاتر تبدیل به مایع همسانگرد شوند، به فاز بلور مایع می روند. در

<sup>۳</sup> Mesophase

<sup>۴</sup> Thermotropic

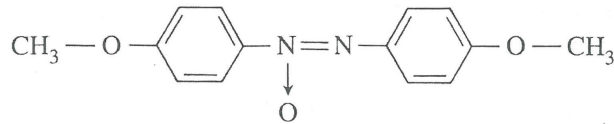
مقابل، فازهای بلور مایع لیوتروپیک<sup>۵</sup> یک محلول را تشکیل می دهند و بنابراین علاوه بر دما، غلظت نیز در گذار فاز اهمیت می یابد. پیشوند ” لیو ”، در اینجا به غلظت اشاره می کند. مولکول های آلی ترموتروپیک برای تشکیل فاز بلور مایع نیاز به حلال ندارند. بلورهای مایع لیوتروپیک توسط مولکول ها آمفی فیلک<sup>۶</sup> در محلول تشکیل می شوند [۱].

## ۳.۱ اجزای سازنده

تشکیل یک بلور مایع نیاز به اجزای سازنده ناهمسانگرد میله ای یا دیسکی شکل دارد. این اجزا می توانند شامل مولکول های کوچک، پلیمر ها، مولکول های میله ای مارپیچ و یا میله ای شکل موجود در طبیعت و یا ساخته شده در آزمایشگاه و یا واحدهای پیچیده تری از مولکول ها و یونها باشند.

### ۱.۳.۱ مولکول های کشیده آلی کوچک

مثال این مورد مولکول PAA<sup>۷</sup> با ساختمان مولکولی نشان داده شده در شکل ۲.۱ است .



شکل ۲.۱: ساختار شیمیایی مولکول PAA [۱].

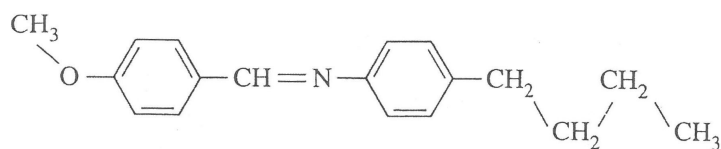
این مولکول را می توان میله ای صلب به طول تقریباً  $20 \text{ \AA}$  و عرض  $5 \text{ \AA}$  فرض کرد. مثال دیگر مولکول MBBA<sup>۸</sup> با ساختمان مولکولی نشان داده شده در شکل ۳.۱ می باشد.

<sup>۵</sup>Lytotropic

<sup>۶</sup>Amphiphilic

<sup>۷</sup>p-azoxyanisole

<sup>۸</sup>N-(p-methoxybenzylidene)-p-butylaniline



شکل ۳.۱: ساختار شیمیایی مولکول MBBA [۱].

بخش وسیعی از مولکول های آلی با ساختمان مولکولی نشان داده شده در شکل ۴.۱ می توانند فاز نematیک یا اسمکتیک تشکیل دهند.

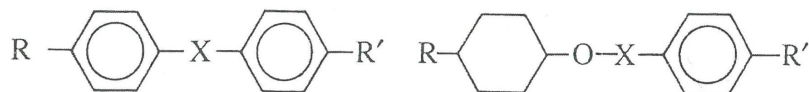
R	X	R'
$C_nH_{2n+1} -$		R
$C_nH_{2n+1} O -$	$-CH=N-$	$-C \equiv N$
$C_nH_{2n+1} COO -$	$-COO-$	$-Cl$
$C_nH_{2n+1} O COO -$		$-Br$ $-F$
	$-COO - \text{C}_6\text{H}_4 - COO$	$-NO_2$
	$-CH=CH-$	
	$-C \equiv C-$	
	$-OOC - \text{C}_6\text{H}_4 - COO -$	
	$-COO - \text{C}_6\text{H}_4 - COO -$	

شکل ۴.۱: انواع ساختارهای کشیده مولکولی که فاز بلور مایع تشکیل می دهند [۱].

این مجموعه دارای دو حلقه آروماتیک<sup>۹</sup> است که توسط عامل های گوناگونی که محور طولی مولکول ها را حفظ می کنند بهم متصل شده اند و یا شامل یک حلقه آروماتیک و یک ساختار

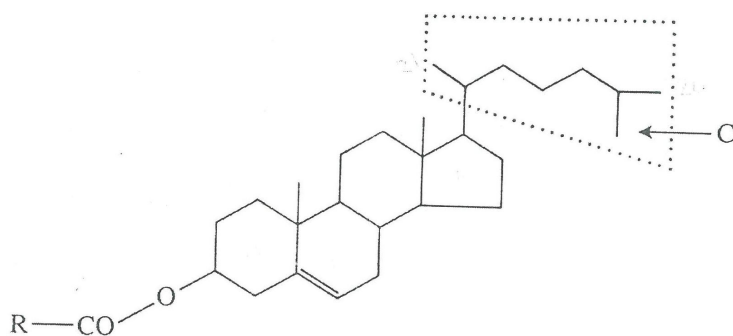
<sup>۹</sup>Aromatic

سیکلوهگزان<sup>۱۰</sup> است که با عواملی مشابه حالت قبلی به هم مرتبط شده اند.  $R$  و  $R'$  می توانند قطبی یا غیر قطبی باشند. انواع اصلی گونه هایی که در این مجموعه طبقه بندی می شوند در شکل ۵.۱ نشان داده شده است.



شکل ۵.۱: مولکول های آلی که می توانند فاز نماتیک یا اسمکتیک تشکیل دهند [۱].

مجموعه دیگر بلورهای مایع توسط کلسترول استرها<sup>۱۱</sup> با فرمول عمومی شکل ۶.۱ بوجود می آید. در این مجموعه حلقه ها آروماتیک نیستند و ساختار تخت نیست اما سیستم حلقه صلب است. در حالی که حلقه اشباع شده  $C$  و رادیکال  $R$  که به بخش سخت متصل شده است مانند دو دم انعطاف پذیر عمل می کنند و بنابراین از نظر استقرار اتم ها در فضا با گروه قبلی شباهت وجود دارد.



شکل ۶.۱: بلورهای مایع تشکیل شده توسط کلسترول استرها [۱].

در تمام سیستم هایی که تا اینجا بررسی شدند، ساده ترین راه برای گذار فاز تغییر دما است، به همین دلیل چنین سیستم هایی معمولاً ترموتروپیک هستند.

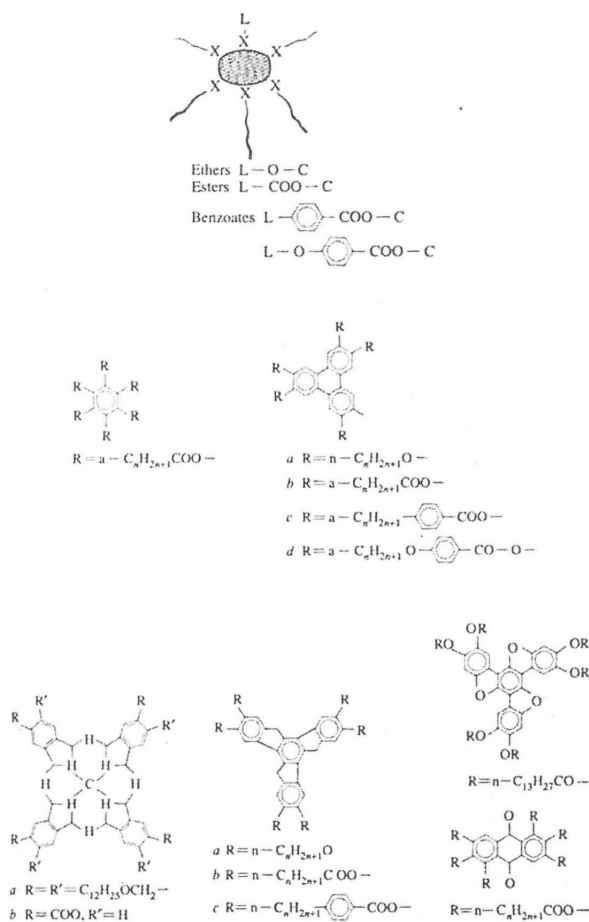
<sup>۱۰</sup>cyclohexane

<sup>۱۱</sup>cholesterol ester



## ۲.۳.۱ مولکول های دیسکی شکل آلی کوچک

ساده ترین مثال های این نوع مولکول ها پلی استر هایی<sup>۱۲</sup> با شش مکان اتصال هستند، شکل ۷.۱. این نوع مولکول ها نخستین فاز ستونی ترموتروپیک را که از اجزای کوچک ساخته شده اند، نشان دادند. اجزای عمومی سازنده آنها، شامل هسته های تخت صلب با تقارن های متفاوت و تعدادی (معمولاً شش) زنجیره چربی<sup>۱۳</sup> هستند که با یک پیوند مناسب به هسته می چسبند. هسته ها و زنجیره ها تمایل دارند از هم جدا شوند و زنجیره ها حرکت روان بین ستونها را موجب می گردند.



شکل ۷.۱: شکل کلی مولکول های دیسکی شکل که فازهای بلورمایع می سازند [۱].

<sup>۱۲</sup>phenylester

<sup>۱۳</sup>Aliphatic

### ۳.۳.۱ مولکول های میله ای بلند مارپیچ

تعدادی از پلی پپتید<sup>۱۴</sup> های مصنوعی و دیگر پلیمرهای صلب، در حلال های مناسب دارای ترکیبی میله مانند با طول متوسطی از مرتبه  $300 \text{ \AA}$  و عرض  $20 \text{ \AA}$  هستند. در محلولهای غلیظ این سیستم ها می توانند فازهای میانی تشکیل بدهند. فازهای مشابهی نیز با  $DNA$ <sup>۱۵</sup> و نیز ویروسهای خاصی بوجود می آیند، مثال استاندارد  $TMV$ <sup>۱۶</sup> با طول  $3000 \text{ \AA}$  و عرض  $200 \text{ \AA}$  است. یک مزیت چنین ویروس هایی از نقطه نظر آزمایشات فیزیکی آن است که تمامی میله های یک نوع ویروس اندازه دقیقاً یکسان دارند.

در مقیاس های بزرگتر، سیستم های مدلی ساخته شده با فیبرهای شیشه ای یا پلاستیکی با قطر  $10 \mu m$  که در آب معلق هستند نیز مورد توجه می باشند. در این سیستم ها آسانترین راه برای مشاهده گذار، تغییر غلظت میله ها است نه تغییر دما. به همین دلیل این سیستم ها لیوتروپیک هستند.

### ۴.۳.۱ پلیمرها

پلیمرهای صلب می توانند در حلال های مناسب فازهای میانی تشکیل بدهند چرا که شبیه میله های صلب عمل می کنند. وضعیت بهتر زمانی بوجود می آید که بخشهایی انعطاف پذیر به ماکرو مولکول ها اضافه شود.

دو مجموعه اصلی قابل بررسی است: ۱. پلیمرهای زنجیره اصلی<sup>۱۷</sup> که از بخش هایی در مقیاس متوسط<sup>۱۸</sup> تشکیل شده اند که با رابط هایی انعطاف پذیر به یکدیگر متصل اند، شکل ۸.۱.

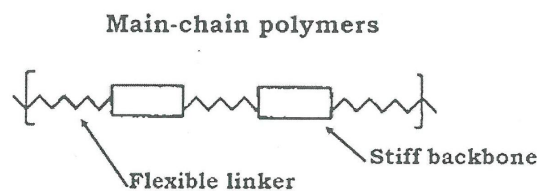
<sup>۱۴</sup> Polypeptide

<sup>۱۵</sup> Deoxyribonucleic Acid

<sup>۱۶</sup> Tobacco Mosaic Virus

<sup>۱۷</sup> Main-chain Polymers

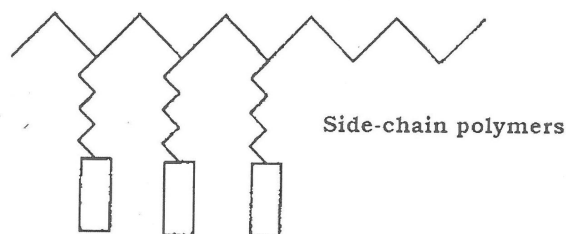
<sup>۱۸</sup> Mesogenic



شکل ۸.۱: پلیمر زنجیر اصلی [۱].

با تغییر ماهیت مزوژن ها، بخش های انعطاف پذیر و طول آنها می توان تنوع وسیعی از این ساختارها را به وجود آورد. همچنین استفاده از پلیمرهایی که از بیش از یک نوع واحد تکرار شدنی تشکیل شده اند<sup>۱۹</sup> و دارای زنجیره های متفاوتی به صورت مرتب یا کاتوره ای هستند، می تواند درجه پلیمریزاسیون را تغییر دهد.

۲. پلیمرهای زنجیره کناری<sup>۲۰</sup>. در پلیمرهای کلاسیکی همچون پلی سیلوگزان<sup>۲۱</sup> گروه های مزوژنی از طریق رابطهایی انعطاف پذیر - زنجیره های نوعی آلکیل- به هم مرتبط شده اند، شکل ۹.۱.



شکل ۹.۱: پلیمر زنجیره کناری [۱].

در اینجا نیز تنوع وسیعی از سیستم ها قابل دسترسی اند: می توان زنجیره اصلی، رابط ها، مزوژن ها و درجه پلیمریزاسیون را تغییر داد و از مزوژنهای مختلف (با تغییرات منظم یا نامنظم) استفاده کرد. برای هر دو مجموعه ۱ و ۲ ساختارهایی ترموتروپیک بدست می آید. این سیستم ها بسیار پایدارند و درجات ساختاری بسیار بزرگی را نشان می دهند و به سادگی حالت شیشه ای پیدا می کنند.

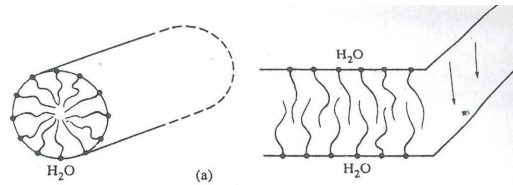
<sup>۱۹</sup> Copolymer

<sup>۲۰</sup> Side-chain Polymer

<sup>۲۱</sup> Polysiloxane

## ۵.۳.۱ ساختارهای مرکب

مثال های نوعی از چنین ساختارهایی در سیستم های مرکب آب-صابون یافت می شود. در این سیستم ها یک آنیون  $CH_3 - (CH_2)_{n-2} - CO_2^-$  و یک یون مثبت  $(Na^+, K^+, NH_4^+, \dots)$  وجود دارد. سر قطبی اسید ( یعنی گروه  $-CO_2^-$  ) تمایل دارد در تماس نزدیک با مولکول های آب باشد در حالی که زنجیره غیر قطبی غیر حلقوی آب گریز است. این دو یون متفاوت یک ساختار آبدوست را تشکیل می دهند. یک مولکول تنها در محلول نمی تواند به طور هم زمان پاسخ گوی این دو تمایل باشد، اما یک خوشه از مولکول ها قادر به انجام این کار هستند، شکل ۱۰.۱. ساختارهای نهایی ( میله مانند یا ورقه مانند ) می توانند اجزای تشکیل دهنده ساختارهای بزرگتر باشند و فازهای نماتیک<sup>۲۲</sup>، اسمکتیک<sup>۲۳</sup> و ستونی<sup>۲۴</sup> را ایجاد کنند.



شکل ۱۰.۱: ساختارهای مرکب [۱].

## ۴.۱ فازهای بلور مایع ترموتروپیک

### ۱.۴.۱ فاز نماتیک

شکل ۱۱.۱ نمای شماتیک نظم مولکول ها در فاز نماتیک را نشان می دهد.

<sup>۲۲</sup>Nematic

<sup>۲۳</sup>Smectic

<sup>۲۴</sup>Columnar