دانشکده علوم

پایان‌نامه کارشناسی ارشد در رشته‌ی فیزیک – حالت جامد

شبیه‌سازی و بررسی خواص ساختاری، انتقالی و ترمودینامیکی کریستال‌های مایع دو بعدی با مولکول‌های بیضی شکل سخت

به وسیله:

سمیه فروزان

استاد راهنما:

دکتر سعید دعوت الحق

دی ماه ۱۳۹۰

به نام خدا

اظهارنامه

اینجانب سمیه فروزان (۸۸۰۵۱۱) دانشجوی رشته‌ی فیزیک گرایش حالت جامد دانشکده‌ی علوم پایه اظهارمی‌کنم که این پایان‌نامه حاصل پژوهش خودم بوده و در جاهایی که از منابع دیگران استفاده کرده‌ام، نشانی دقیق و مشخصات کامل آن را نوشته‌ام. همچنین اظهارمی‌کنم که تحقیق و موضوع پایان‌نامه‌ام تکراری نیست و تعهد می‌نمایم که بدون مجوز دانشگاه دستاوردهای آن را منتشر ننموده و یا در اختیار غیر قرار ندهم. کلیه حقوق این اثر مطابق با آیین‌نامه مالکیت فکری و معنوی متعلق به دانشگاه شیراز است.

نام و نام خانوادگی: سمیه فروزان

تاریخ و امضا: ۹۰/۱۰/۲۱

به نام خدا

شبیه سازی و بررسی خواص ساختاری، انتقالی و ترمودینامیکی بلورهای مایع دو بعدی با مولکول های بیضی شکل سخت

به کوشش:

سمیه فروزان

پایان نامه

ارائه شده به تحصیلات تکمیلی دانشگاه شیراز به عنوان بخشی از فعالیت های تحصیلی لازم برای اخذ درجه کارشناسی ارشد

در رشته ی:

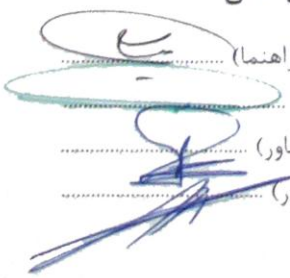
فیزیک (حالت جامد)

از دانشگاه شیراز

شیراز

جمهوری اسلامی ایران

ارزیابی شده توسط کمیته ی پایان نامه، با درجه ی: عالی



دکتر سعید دعوت الحق، استادیار بخش فیزیک (استاد راهنما) .....

دکتر محمود مرادی، استاد بخش فیزیک (استاد مشاور) .....

دکتر غلام حسین بردبار، استاد بخش فیزیک (استاد مشاور) .....

دکتر افشین منتخب استادیار بخش فیزیک (استاد مشاور) .....

دی ماه ۱۳۹۰

تقدیم

به پاس تعبیر عظیم و انسانی‌شان از کلمه ایثار و از خود گذشتگان

به پاس عاطفه سرشار و گرمای امید بخش وجودشان که در این سردترین روزگاران

بهترین پشتیبان است

به پاس قلب‌های بزرگشان که فریادرس است و سرگردانی و ترس در پناهشان به

شجاعت می‌گراید

و به پاس محبت‌های بی‌دریغشان که هرگز فروکش نمی‌کنم

این مجموعه را به پدر و مادر و همسر عزیزم تقدیم می‌کنم.

سپاسگزاری

حدیث امام سجاد علیه السلام :

أمّا حَقُّ ذِی المَعروفِ عَلَیکَ فَأن تَشکُرَهُ وتَذکُرَ مَعروفَهُ، وَ تُکسِبَهُ المَقالَةَ الحَسَنَةَ وَتُخلِصَ لَهُ الدُّعاءَ فیما بَینَکَ وَ بَینَ اللّه عَزَّوَجَلَّ، فَإذا فَعَلتَ ذلِکَ کُنتَ قَد شَکَرتَهُ سِرّا وَ عَلانیَةً ، ثُمَّ إن قَدَرتَ عَلی مُکافاتِهِ یَوما کافَیتَهُ؛

حق کسی که به تو نیکی کرده، این است که از او تشکر کنی و نیکیش را به زبان آوری و از وی به خوبی یاد کنی و میان خود و خدای عزوجل برایش خالصانه دعا کنی، هرگاه چنین کردی بی‌گمان پنهانی و آشکارا از او تشکر کرده‌ای. سپس اگر روزی توانستی نیکی او را جبران کنی، جبران کن.

(خصال: ۵۶۸)

با سپاس ازسه وجود مقدس:

آنان که ناتوان شدند تا ما به توانایی برسیم...

موهایشان سپید شد تا ماروسفید شویم...

و عاشقانه سوختند تا گرمابخش وجود ما و روشنگر راهمان باشند...

پدرانمان

مادرانمان

استادانمان

نگارنده بر خود می‌داند که از زحمات بی‌دریغ، تلاش‌های بی‌وقفه و راهنمایی‌های ارزشمند استاد گرامی جناب آقای دکتر سعید دعوت‌الحق در راستای انجام این پروژه تشکر و قدردانی نماید.

چکیده

شبیه سازی و بررسی خواص ساختاری، انتقالی و ترمودینامیکی کریستال-های مایع دو بعدی با مولکول‌های بیضی شکل سخت

به کوشش:

سمیه فروزان

در این پایان‌نامه با استفاده از شبیه‌سازی مونت کارلو به محاسبه و بررسی خواص ساختاری، انتقالی و ترمودینامیکی بلورهای مایع پرداخته‌ایم.محاسبه چگالی جهتی و پارامتر نظم بلورهای مایع محدود بین دو دیواره نشان داد که حضور دیوار باعث تجمع و نیز هم راستا شدن مولکول-ها در کنار دیوارها می‌شود. مطالعات ما روی سیستم‌های کپه‌ای نشان داد که گذار فاز در کسر بهم پکیدگی ϕ=۰.۵۹ اتفاق می افتد. محاسبه فشار بلورهای مایع در حالت محدود بین دیوار در مقایسه با حالت کپه‌ای نشان داد که اثر محدودیت باعث افزایش فشار سیستم می شود. نتایج به دست آمد در این محاسبه خواص انتقالی بلورهای مایع نشان داد که پخش مولکول‌ها در محیط را می‌توان به سه ناحیه زمانی تقسیم کرد، در قسمتی دیگر از محاسبات ناهمسانگردی در پخش مولکول‌ها در راستای قطر بزرگ و کوچک بیضی را نشان دادیم. مقایسه نتایج حاصل از مطالعه خواص انتقالی سیستم شبیه‌سازی شده در این پایان‌نامه با نتایج آزمایشگاهی به دست آمده توافق رضایت بخشی را نشان می‌دهد.

فهرست مطالب

عنوان صفحه

فصل اول: مقدمه

۱-۱- مقدمه ۲

۱-۲- مروری بر کارهای انجام شده بر مولکول های سخت محدود شده ۳

۱-۳- تولید بلور مایع ۴

۱-۴- انواع مختلف بلور مایع ۴

۱-۴-۱- فاز نماتیک ۵

۱-۴-۲- فاز سمکتیک ۵

۱-۴-۳- فاز ستونی ۵

۱-۴-۴- فاز کلستریک ۶

۱-۵- خلاصه ای از کارهای انجام شده در این پروژه ۸

عنوان صفحه

فصل دوم: روش های مورد استفاده در بررسی مایعات بلوری

۲-۱- روش های مورد استفاده در بررسی مایعات بلوری ۱۵

۲-۱-۱- تئوری لاندائو ۱۵

۲-۱-۲- تئوری مایر- سوپ ۱۶

۲-۱-۳- تئوری انساگر ۱۷

۲-۱-۴- نظریه تابعی چگالی ۱۸

۲-۱-۵- شبیه سازی کامپیوتری ۱۸

۲-۲- پتانسیل های مورد استفاده در سیستم¬های بلور مایع ۲۱

۲-۲-۱- مدل پتانسیل سخت ۲۲

۲-۲-۲- مدل پتانسیل گی- برن ۲۲

۲-۳- اثر میدان های خارجی ۲۳

۲-۴- اثرهای محدودیت ۲۴

۲-۵- نزدیک ترین فاصله در مولکول های ناهمسانگرد ۲۵

فصل سوم: خواص ساختاری

۳-۱- چگالی ۳۰

۳-۲- توابع همبستگی زاویه ای و مکانی ۳۳

۳-۲-۱- گذار فاز ایزوتروپیک- نماتیک ۳۹

فصل چهارم: خواص ترمودینامیکی

۴-۱- پارامتر نظم..... ۴۵

۴-۲- فشار ۴۹

۴-۲-۱- معادله حالت و ضرایب ویریال..... ۵۴

۴-۲-۲- ضریب تراکم ناپذیری (یا مدول حجمی) ۵۶

فصل پنجم: خواص دینامیکی

۵-۱- میانگین مربع جابجای..... ۶۰

۵-۲- ضرایب پخش ۶۶

۵-۳- ناهمسانگردی در ضرایب پخش ۶۸

فصل ششم: نتایج و پیشنهادات ۷۵

منابع ۸۱

فهرست جدول ها

عنوان صفحه

جدول (۳-۱): نتایج حاصل از محاسبه شبی نمودار تابع همبستگی زاویه ای و ثابت فرانک ۴۳

جدول(۵-۱): مقایسه ضرایب مرتبه ۱، ۲ و۳ چند جمله ای مرتبه سوم مربوط به ضرایب انتقال حاصل از نتایج شبیه سازی و آزمایشگاهی..... ۷۱

فهرست شکل ها

عنوان صفحه

شکل(۱-۱): فازهای مختلف مواد ۷

شکل(۱-۲): تصاویری از سیستم شبیه سازی شده در غلظت¬های مختلف..... ۹

شکل (۱-۳): تقسیم¬بندی سیستم به جعبه های کوچکتر و در نظر گرفتن نزدیکترین همسایه ۱۲

شکل (۲-۱): اثر اعمال میدان خارجی ۲۴

شکل(۲-۲): نمونه هایی از بلورهای مایع محدود شده ۲۵

شکل(۳-۱): چگالی بیضی هایی با ۹ =k در جهت گیری های مختلف ۳۱

شکل(۳-۲): چگالی زاویه ای بیضی های موازی با دیواره در ۰.۶۸= ۳۲

شکل(۳-۳): چگالی زاویه ای برای بیضی هایی با ۹ =k در راستای موازی و عمود بر دیواره در ϕ=۰.۴۹..... ۳۳

شکل(۳-۴): تابع توزیع شعاعی برای بیضی هایی با ۹ =K در سیستم کپه ای ۳۶

شکل(۳-۵): نمودار همبستگی زاویه ای برای بیضی هایی با ۹ =k در شرایط کپه ای..... ۳۷

شکل(۳-۶): نمودار همبستگی زاویه ای برای بیضی های نزدیک به یک دیوار با ۹ =k..... ۳۸

شکل(۳-۷): نمودار لگاریتمی همبستگی زاویه ای بیضی هایی با ۹ =k در شرایط کپه ای در ϕ=۰.۴۹ ..... ۴۱

شکل(۳-۸): نمودار لگاریتمی همبستگی زاویه ای بیضی هایی با k= ۹ در شرایط کپه ای در ϕ=۰.۵۹..... ۴۲

شکل(۳-۹): نمودار لگاریتمی همبستگی زاویه ای بیضی هایی با k= ۹ در شرایط کپه ای در ϕ=۰.۶۸ ..... ۴۳

شکل(۴-۱): پارامتر نظم برای بیضی های با کشیدگی k=۹، محدود بین دو دیواره..... ۴۷

شکل(۴-۲): پارامتر نظم برای بیضی های با کشیدگی k=۹، محدود بین دو دیواره در ϕ=۰.۶۸ ۴۸

شکل(۴-۳): پارامتر نظم برای سیستم کپه ای شامل بیضی های سخت با k=..... ۴۹

شکل(۴-۵): نمودار فشار سیستم کپه ای شامل بیضی هایی با k= ۹ در غلظت های مختلف بر حسب گام مونت کارلو..... ۵۲

شکل(۴-۶): معادله حالت سیستم برای سیستم شامل بیضی های سخت با k= ۹ در شرایط محدود و کپه ای..... ۵۳

شکل(۴-۷): معادله حالت سیستم کپه ای شامل بیضی های سخت با کشیدگی های متفاوت .. ۵۴

شکل (۴-۸): تابع حالت سیستم کپه ای حاصل از شبیه سازی و برازش آن با معادله حالت ویریال ۵۶

شکل(۵-۱): میانگین مربع جابجایی انتقالی در غلظت های مختلف برای بیضی هایی با k= ۹ در شرایط نزدیک به دیوار ۶۲

شکل(۵-۲): میانگین مربع جابجایی زاویه ای در غلظت های مختلف برای بیضی هایی با k= ۹در شرایط نزدیک به دیوار ۶۳

شکل(۵-۳): میانگین مربع جابجای در مختصات جسمی در راستای قطر بزرگ بیضی برای بیضی هایی با k=۹ در شرایط نزدیک به دیوار ۶۴

شکل(۵-۴): میانگین مربع جابجایی در مختصات جسمی راستای قطر کوچک بیضی برای بیضی هایی با k= ۹ در شرایط نزدیک به دیوار ۶۵

شکل(۵-۵): ضرایب پخش نرمالیزه شده در غلظت های مختلف در ناحیه زمانی سوم ۶۷

شکل (۵-۶): ضرایب پخش نرمالیزه شده انتقالی در ناحیه زمانی اول ۶۸

شکل(۵-۷): ناهمسانگردی در پخش انتقالی در ناحیه زمانی سوم ۷۰

شکل(۵-۸): ناهمسانگردی در پخش انتقالی در ناحیه زمانی اول ۷۱

شکل(۵-۹): مقایسه ضرایب پخش انتقالی و زاویه ای در غلظت های مختلف ۷۲

شکل(۵-۱۰): مقایسه میانگین مربع جابجای انتقالی بین دو حالت ذرات نزدیک به دیوار و ذرات در سیستم کپه ای ۷۳

شکل(۵-۱۱): مقایسه میانگین مربع جابجای زاویه¬ای بین دو حالت ذرات نزدیک به دیوار و ذرات در سیستم کپه ای ۷۴

شکل (۶-۱): نتایج آزمایشگاهی محاسبه میانگین مربع جابجایی در راستای قطر بزرگ بیضی هایی با k= ۹ در نزدیک دیوار ۷۷

شکل (۶-۲): نتایج آزمایشگاهی محاسبه میانگین مربع جابجایی در راستای قطر کوچک بیضی با k= ۹ در نزدیک دیوار ۷۷

شکل (۶-۳): نتایج آزمایشگاهی محاسبه میانگین مربع جابجایی زاویه ای برای بیضی هایی با ۹ =k در نزدیک دیوار ۷۸

شکل (۶-۴): نتایج آزمایشگاهی حاصل از محاسبه ضرایب پخش بهنجار شده برای بیضی وارهایی با k= ۹ در ناحیه زمانی سوم ۷۸

شکل (۶-۵): نتایج آزمایشگاهی حاصل از محاسبه ضرایب پخش بهنجار شده برای بیضی¬وارهایی با k= ۹ در ناحیه زمانی اول ۷۹

فصل اول

مقدمه

۱- ۱ مقدمه

آموخته‌ایم که ماده سه حالت جامد، مایع و گاز دارد که اخیراً حالت دیگری به آن اضافه شده است. جامدات شکل خاصی دارند، یعنی مولکول‌های آن‌ها موقعیت خاصی نسبت به یکدیگر داشته و نمی‌توانند آزادانه به هر سو حرکت کنند و نظم بلند بردی بین آن‌ها حاکم است. در مایعات مولکول‌ها چنان آهسته حرکت می‌کنند که نیروهای جاذبه بین مولکولی می‌توانند آن‌ها را در حجم معینی نگه دارند. با این حال جنبش مولکول‌ها هنوز سریع‌تر آز آن است که نیروهای جاذبه بین مولکولی بتوانند آن‌ها را در مواضع مشخص از شبکه بلورین ثابت نگه دارند. از این رو مایعات حجم معینی دارند اما شکل مشخصی ندارند. مولکول‌های گاز می‌توانند آزادانه به هر سو حرکت کنند و چه از نظر مکانی و چه از نظر جهتی نامنظم هستند. بلورهای مایع موادی هستند که ظاهر مایع دارند، اما مولکول‌های آن‌ها آرایش خاصی نسبت به یکدیگر دارند، درست مانند جامدات. به همین دلیل بلور مایع خصوصیاتی شبیه به مایع و جامد داشته وبه همین دلیل با چنین اسم به ظاهر متناقضی خوانده می‌شوند.

این مواد به شدت به دما حساس‌اند و اندکی حرارت لازم است تا آن‌ها را به مایع همسانگرد درآورد و یا اندکی سرما تا به جامد معمولی تبدیل شود. انواع مختلفی از مواد شناخته شده‌اند که در دمای معمولی چنین خصوصیاتی دارند. اما دسته‌ای از آن‌ها هستند که به جریان الکتریسیته هم حساس هستند و مولکول‌های آن متناسب با جریان برق ورودی می‌چرخند و تغییر زاویه می‌دهند. این خصوصیت عجیب اثر جالبی هم دارد. وقتی نور از درون یک بلور مایع

این چنینی عبور کند، پلاریزاسیون یا قطبش آن هم جهت با مولکول‌های بلور می‌شود. این خاصیت بلورهای مایع در تولید نمایشگرها کاربرد دارد. بلورهای مایع با توجه به نامشان هم برخی از خواص مایعات را مانند سیال بودن، شکل‌پذیری و بی‌نظمی ذرات درون آن را دارا هستند و هم از نظر ناهمسانگرد بودن در ویژگی‌های اپتیکی، الکتریکی و مغناطیسی شبیه جامدات عمل می‌کنند[۱].

کریستال مایع را یک گیاه‌شناس اتریشی در سال ۱۸۸۸ برای اولین بار در حین ذوب جامدی از مشتقات آلی کشف کرد. تاکنون عناوین زیادی برای این حالت از ماده پیشنهاد شده است مانند: حالت میان فاز، پاراکریستال، مایعات منظم، سیالات... اما نام بلور مایع اولین بار در سال ۱۸۸۹ توسط لمان[1] برای این حالت از ماده انتخاب شد.

۱-۲ مروری بر کارهای انجام شده بر مولکول‌های سخت محدود شده

در بسیاری از کاربردهای بلورهای مایع در تکنولوژی و صنعت، مانند: نمایشگرهای بلورمایع، دماسنج‌ها و طراحی تصاویر اپتیکی و...، نیاز به محدود کردن بلورهای مایع است. برای اطلاع از چگونگی ساختار این وسایل و ساخت وسایل و تجهیزات نوین اطلاع از تئوری‌هایی که قادر به توجیه سیستم‌های بلورمایع محدود شده باشند امری مهم و الزامی است.

از زمان کشف بلور مایع تا کنون بررسی خواص دینامیکی، ترمودینامیکی، اپتیکی و ساختاری بلورهای مایع[۲،۳]، یکی از موضوعات مورد توجه محققان چه از نظر تئوری[۴،۵] و چه از نظر شبیه‌سازی[۶،۷] می‌باشد. محدود کردن بلور مایع توسط سطوح سبب شکسته شدن تقارن می‌شود، چگونگی خواص بلور مایع در نزدیکی سطوح محدود کننده یکی از خواص مهم طراحی نمایشگرهای بلور مایع است[۸]. این نوع سیستم‌ها هم از لحاظ نظری مانند نظریه تابعی چگالی[۹]و یا تقریب میدان میانگین[۱۰] و هم از لحاظ آزمایشگاهی و شبیه-

[1] Lehmone

سازی[۱۱،۱۲] مورد بررسی قرار گرفته‌اند. اخیراً نیز ضرایب انتقال تک لایه‌ای از بیضی‌های کشیده به روش ویدیو ماکروسکوپی مورد بررسی قرار گرفته‌اند[۱۳].

۱-۳ تولید بلور مایع

بطور کلی تولید بلور مایع به دو صورت امکان‌پذیر است:

۱. بلورهای مایعی که از طریق تغییرات دمایی حاصل می‌شوند، بطور کلی از طریق افزایش دما در گونه‌ای از جامدات گذار فاز از حالت جامد به مایع اتفاق می‌افتد و در این میان حالت بلور مایع را هم می‌توان مشاهده کرد. به بلورهای مایعی که از این طریق حاصل می‌شوند ترموتراپیک[۲] می‌گویند. پارامتر کلیدی در کنترل خواص ساختاری و ترمودینامیکی این نوع از بلورهای مایع دما و در درجه دوم فشار می‌باشند. لازم به ذکر است که این نوع از فرآیندها برگشت‌پذیر بوده و با افزایش دما می‌توان به ماده اولیه رسید. مولکول‌های بلورمایع ترموتراپیک را بر اساس شکل هندسی‌شان می‌توان به دو گروه اصلی: میله‌ای شکل و دیسک شکل[۳] یا ستونی تقسیم کرد[۱۴].

۲. علاوه بر روشی که در بالا برای تولید بلورهای مایع اشاره شد برخی از پلیمرها و محلول‌های آبی نیز وجود دارند که از خود خواص بلور مایعی نشان می‌دهند این نوع از بلورهای مایع را لایوتراپیک[۴] می‌نامند که عامل کنترل در این سیستم‌ها غلظت یا چگالی محیط می‌باشد[۱]. سیستم مورد بررسی ما از این نوع بلورهای مایع می‌باشند.

[2] thermotropic liquid crystal
[3] Discotic
[4] Lyotropic liquid crystsl

۱-۴ انواع مختلف بلور مایع

بلورهای مایع بسته به چگونگی پاسخ به اختلالات و نحوه آرایش مولکول‌ها بـه گـروه‌هـای مختلفی تقسیم می‌شوند. جهت‌گیری مولکول‌ها در آن‌ها از الگوی خاصی پیروی می‌کند و اغلب یک منشا خارجی جهت دهنده دارند. ناهمسانگردی در خواص فیزیکی مانند ضـریب شکسـت، گذردهی دی الکتریکی و پذیرفتاری مغناطیسی نشان دهنده وقوع فازهای بلورمایع است[۱۵]. در این بخش به معرفی فازهای مختلف بلور مایع می‌پردازیم.

۱-۴-۱ فاز نماتیک[5]

در این نوع از بلورهای مایع مولکول‌ها نظم مکانی خاصی ندارند اما به طور تقریبی می‌توان دید که تمامی مولکول‌ها در راستای خاصی جهت‌گیری کرده‌اند به این جهت اصطلاحاً راستار[6] ($\hat{n}$) می‌گویند. به بیان دیگر می‌توان گفت که فاز نماتیک توسط نظم بلند برد زاویه‌ای اش مشخص می‌شود. برای تعیین میزان نظم زاویه‌ای در چنین فازهایی کمیتی به نام پارامتر نظم تعریف شده که چگونگی محاسبه آن در بخش‌های آتی ذکر شده است. این فاز از بلورهای مایع شامل سه نوع همسانگرد، تک محوری و دو محوری است که بر اساس خواص اپتیکی آن‌ها مشخص می شود. فاز همسانگرد از نظر اپتیکی مانند مایع معمولی رفتار می‌کند، فاز تک محوری تنها یک محور اپتیکی است. و فاز دو محوری شامل دو محور اپتیکی دارد. در شکل (۱-۱) فاز بلورمایع نماتیک نشان داده شده است.

۱-۴-۲ فاز سمکتیک[7]

تفاوت بارز فاز سمکتیک با فاز نماتیک در لایه‌ای بودن ساختار فاز سمکتیک است. در این فاز علاوه بر این که مولکول‌ها در راستای خاصی جهت‌گیری کرده‌اند، در لایه‌های موازی هم قرار گرفته‌اند که علاوه بر نظم جهتی تا حدودی نظم مکانی را هم به مولکول‌های این فاز از بلورهای مایع می‌دهد. در این فاز بسته به این که مولکول‌ها در چه راستایی جهت‌گیری کرده-

[5] Nematic Phases
[6] Director
[7] Smectic Phases