

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشگاه الزهراء (س)

دانشکده علوم پایه

پایان نامه

جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد

رشته فیزیک گرایش ماده چگال

عنوان

**بررسی عیوب در نماتیک های آمیخته به**

**رشته های پلیمری**

استاد راهنما

دکتر سعیده شعاری نژاد

دانشجو

ملیحه قربانی

اسفند ۱۳۹۱

کلیه دستاوردهای این تحقیق متعلق به  
دانشگاه الزهراء (س) است.

## این پایان نامه را ضمن تشکر و سپاس بیکران و در کمال افتخار و امتنان تقدیم می نمایم به:

محضر ارزشمند پدر و مادر عزیزم به خاطر همه ی تلاش های محبت آمیزی که در  
دوران مختلف زندگی ام انجام داده اند و با مهربانی چگونه زیستن را به من  
آموخته اند.

به همسر مهربانم که در تمامی لحظات همراه و همگام من بوده است.

به استادان فرزانه و فرهیخته ای که در راه کسب علم و معرفت مرا یاری نمودند.

به آنان که نفس خیرشان و دعای روح پرورشان بدرقه ی راهم بود.

الها به من کمک کن تا بتوانم ادای دین کنم و به خواسته ی آنان جامه ی عمل  
بپوشانم.

پروردگارا حسن عاقبت، سلامت و سعادت را برای آنان مقدر نما.

## سرکار خانم دکتر سعیده شعاری نژاد

شما روشنایی بخش تاریکی جان هستی و ظلمت اندیشه را نور می بخشید. چگونه سپاس گویم مهربانی و لطف شما را که سرشار از عشق و یقین است. چگونه سپاس گویم تأثیر علم آموزی شما را که چراغ روشن هدایت را بر کلبه ی محقر وجودم فروزان ساخته است. آری در مقابل این همه عظمت و شکوه شما، مرا نه توان سپاس است و نه کلام وصف.

## چکیده

نماتیک ها یکی از فازهای بلور مایع هستند که مانند سایر فازهای آن دارای خواص میان فازی می باشند، اما در هیچ یک از ابعاد نظم مکانی دوربرد نداشته و فقط دارای نظم جهتی هستند. عملا اغتشاشاتی نیز در نظم جهتی و مکانی ملکول های آن ها به وجود می آید که منجر به ایجاد عیوب می گردد. همچنین حضور ناخالصی ها باعث به وجود آمدن عیوب مختلفی در این مواد می گردد که دارای اثرات دوربرد بوده و شدیداً خواص فیزیکی آن ها را تحت تاثیر قرار می دهند. از جمله ترکیباتی که مطالعه آن ها هم از جنبه نظری و هم کاربردی جایگاه ویژه ای دارند، بلورهای مایع آمیخته به رشته های پلیمری است. با قرار گرفتن درصد کمی از مونومرها در حجم بلور مایع و استفاده از روش های مختلف پلیمریزاسیون، رشته های پلیمری در بلورهای مایع تشکیل می گیرد. ایده اصلی ساخت چنین ترکیباتی، پایدار کردن نظم ملکولی بلور مایع در اثر برهم کنش های کشسانی بین شاخه های پلیمری و بلور مایع میزبان است. در بسیاری از اسباب الکترواپتیکی از بلورهای مایع ترکیب شده با شبکه های پلیمری استفاده می شود. برای مثال در مورد نمایشگرها، افزایش وضوح تصاویر و کاهش توان مصرفی از جمله مواردی است که با استفاده از این نوع ترکیبات می توان به آن ها دست یافت. با توجه به تاثیر قابل توجه عیوب ایجاد شده در خواص مختلف این مواد، بررسی آن ها ضروری می نماید. لذا هدف ما در این کار پژوهشی مطالعه و بررسی رفتار ملکول های بلور مایع در اطراف عیوب به وجود آمده در نماتیک های آمیخته به رشته های پلیمری می باشد.

از آنجا که پیچیدگی های موضوع از جمله پدیده های غیرخطی، بوجود آمدن عیوب توپولوژیکی و برهم کنش های هیدرودینامیکی در اثر حضور شاخه های پلیمری، بررسی این گونه ترکیبات را مشکل می سازد، در این کار پژوهشی از یک مدل ساده شده برای توصیف شاخه ی پلیمری استفاده شده است که در آن شاخه پلیمری را به صورت استوانه ای با سطحی کاملاً هموار در داخل حجمی از نماتیک در نظر می گیریم و راستای محور استوانه در مختصات کارتزی تعریف شده است. با توجه به نتایج حاصل از یک تحقیق شبیه سازی، در شرایطی که نوع چنگ زدگی در سطح این شاخه هوموتروپیک باشد، همانند یک عیب خطی با شدت  $+1$  رفتار می کند. چنانچه شاخه در حجم همگنی از نماتیک باشد، بنا به پایستگی بار توپولوژیکی، دو عیب خطی با شدت های  $1/2$  - در اطراف شاخه در راستای یکی از قطرهایش تشکیل خواهد شد. در این پژوهش، ما نیز فرض می کنیم که از محور مرکزی شاخه پلیمری با شرایط چنگ

زدگی هوموتروپیک در سطح آن، یک عیب خطی با شدت +۱ می گذرد. به این ترتیب می توانیم نوع برهمکنش شاخه را با عیوب تشکیل شده در اطرافش و همچنین عیوب دیگری که در محیط حضور داشته باشد مورد بررسی قرار دهیم. . ما نتیجه می گیریم که با اعمال یک میدان مغناطیسی خارجی بر شاخه ی پلیمری در محیط نماتیک، عیوب خطی  $1/2$ - به شاخه نزدیک خواهند شد و پس از قطع میدان، شاخه عیوب خطی را در فواصل کوچک دفع می کند در حالی که در فواصل نسبتاً دور آنها را جذب خواهد کرد. همین نوع برهم کنش را برای حالتی که یک عیب خطی خارجی با شدت  $1/2$  در نزدیکی شاخه حضور پیدا می کند نیز مشاهده می کنیم. نتایج به دست آمده در این پژوهش می تواند در شناخت نوع جهت گیری ملکول ها در اطراف شاخه و لذا در بسیاری از کاربردهای این نوع مواد در اسباب الکترواپتیکی مختلف، مفید واقع گردد.

## فهرست مطالب

### ۱ بلورهای مایع

- ۱.۱ بلور مایع چیست؟..... ۱
- ۲.۱ فازهای بلور مایع..... ۲
- ۱.۲.۱ فاز نماتیک..... ۲
- ۲.۲.۱ فاز اسمکتیک..... ۵
- ۳.۲.۱ فاز ستونی..... ۶
- ۴.۲.۱ فاز کلستریک..... ۷
- ۳.۱ پارامتر نظم در نماتیک ها..... ۹
- ۱.۳.۱ رهیافت میکروسکوپی..... ۹
- ۲.۳.۱ رهیافت ماکروسکوپی..... ۱۱
- ۴.۱ نظریه پیوستگی کشسانی..... ۱۱
- ۵.۱ انرژی آزاد اغتشاش..... ۱۲
- ۶.۱ اثرات مرزی..... ۱۴
- ۷.۱ اثرات میدان های خارجی (میدان مغناطیسی و الکتریکی)..... ۱۶
- ۸.۱ کاربردهای بلور مایع..... ۱۷
- ۱.۸.۱ نمایشگرهای بلور مایع..... ۱۷
- ۲.۸.۱ دماسنج های بلور مایع..... ۱۷
- ۳.۸.۱ تصاویر اپتیکی..... ۱۸
- ۴.۸.۱ بلورهای مایع آمیخته به پلیمر..... ۱۸

### ۲ عیوب در بلورهای مایع

- ۱.۲ مقدمه..... ۲۰
- ۲.۲ طبقه بندی عیوب..... ۲۱
- ۳.۲ انرژی آزاد اغتشاش یک عیب خطی..... ۲۸
- ۱.۳.۲ برهم کنش دو عیب خطی..... ۳۰
- ۴.۲ انرژی عیوب نقطه ای..... ۳۴
- ۱.۴.۲ برهم کنش عیوب نقطه ای..... ۳۶



### ۳ پلیمرها و بلورهای مایع

۳۸.....	۱.۳ مقدمه.....
۳۸.....	۲.۳ بلورهای مایع آمخته به شبکه های پلیمری.....
۳۹.....	۱.۲.۳ بلورهای مایع محدود شده به شبکه های پلیمری.....
۴۱.....	۱.۱.۲.۳ انواع پیکربندی قطره های بلور مایع در PDLC.....
۴۳.....	۲.۲.۳ شبکه های پلیمری در محیط های بلور مایع.....
۴۵.....	۱.۲.۲.۳ بررسی نظری سیستم های LCDP.....
۴۶.....	۲.۲.۲.۳ انواع چنگ زدگی در سطح شاخه های پلیمری در LCDP.....
۴۹.....	۳.۳ اثر حضور شبکه های پلیمری در بهبود شناخت میدان جهت نما.....

### ۴ دینامیک عیوب در بلورهای آمیخته به رشته های پلیمری

۵۱.....	۱.۴ مقدمه.....
۵۲.....	۲.۴ دینامیک دو عیب خطی همنام در نماتیک.....
۵۶.....	۱.۲.۴ سرعت حرکت عیب خطی.....
۵۷.....	۳.۴ اثر میدان مغناطیسی خارجی بر یک عیب خطی در مجاورت دیوار.....
۶۴.....	۴.۴ برهم کنش عیب خطی و میله در بلور مایع نماتیک.....
۶۵.....	۱.۴.۴ اثر میدان برسیستم میله و عیب خطی.....
۶۹.....	۲.۴.۴ سرعت حرکت عیب خطی.....
۷۰.....	۵.۴ دینامیک عیوب خطی در حضور شاخه ی پلیمری در نماتیک.....
۷۲.....	۱.۵.۴ تعیین سرعت حرکت عیب خطی.....
۷۷.....	۶.۴ برهم کنش یک شاخه پلیمری با یک عیب خطی در نماتیک.....
۷۸.....	۱.۶.۴ مجموعه ی عیوب خطی برای توصیف شاخه ی پلیمری.....
۸۲.....	۲.۶.۴ محاسبه ی انرژی آزاد کل.....
۸۸.....	نتیجه و جمع بندی.....
۸۹.....	مراجع و منابع.....

# فصل ۱

## بلورهای مایع

### ۱.۱ بلور مایع چیست؟

برای شناختن بلور مایع ابتدا بهتر است بدانیم که اصولاً چرا این نام را بر اینگونه مواد نهاده اند. نام بلور مایع گرچه نامعقول به نظر می آید، اما می توان حدس زد که این مواد حالتی میانی از ماده هستند، حالتی بین مایعات و جامدات. آنها دارای برخی از خواص مایعات (مانند سیال بودن، غیر قابل برش وغیره) و همچنین برخی از خواص جامدات (مانند ناهمسانگردی اپتیکی، الکتریکی و مغناطیسی و جهت گیری دوره ای ملکول ها در یک جهت خاص) هستند. علت اصلی این ناهمسانگردی ها، ناهمسانگردی در شکل ملکول ها است.

از جمله خواص ملکول های این مواد عبارتند از:

۱. ملکول ها شکل ناهمسانگردی دارند، (برای مثال میله ای یا دیسکی). احتمال وجود خواص بلور مایع در ملکول هایی که حلقه های مسطح دارند بیشتر است.
  ۲. دارای دنباله های انعطاف پذیر و یک قسمت نسبتاً صلب شامل پیوندهای دوگانه هستند که امتداد محور بلند ملکولی را مشخص می کنند.
  ۳. وجود دو قطبی های قوی و گروه های قطبش پذیر در ملکول ها
- این میان فازها در دو گروه لیوتروپیک<sup>۱</sup> و ترموتروپیک<sup>۲</sup> طبقه بندی می شوند. ترموتروپیک ها سیستم های یک فازی هستند و رفتار فازی وابسته به دما دارند، در حالی که لیوتروپیک ها شامل محلول هایی می شوند که بلور مایع در حلالی مانند آب حل شده است و رفتار فازی

---

<sup>1</sup>Lyotropic

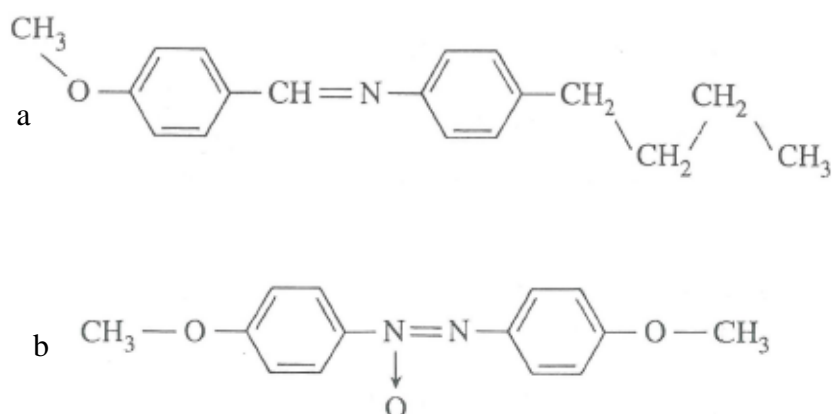
<sup>2</sup>Thermotropic

وابسته به غلظت دارند. فاز های بلور مایع ترموتروپیک شامل نماتیک<sup>۳</sup>، اسمکتیک<sup>۴</sup> و ستونی<sup>۵</sup> می شوند که ساده ترین ترموتروپیک ها بلور مایع نماتیک است.

## ۲.۱ فازهای بلور مایع

### ۱.۲.۱ فاز نماتیک

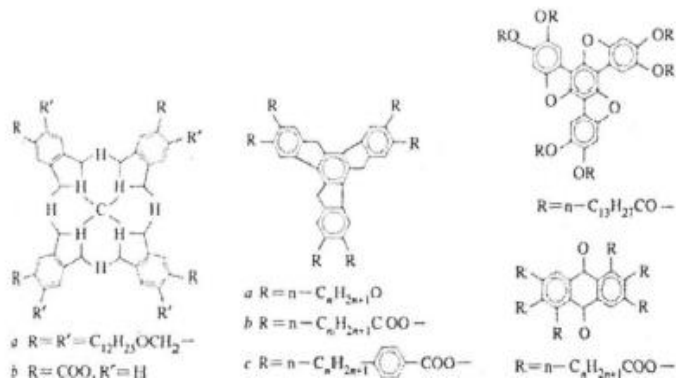
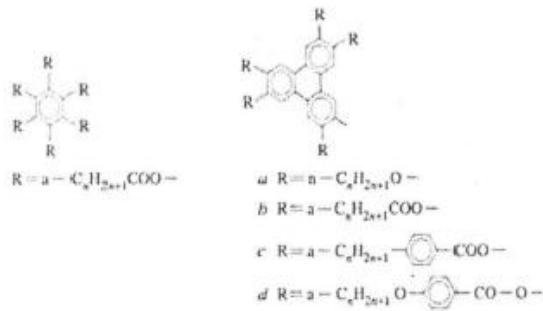
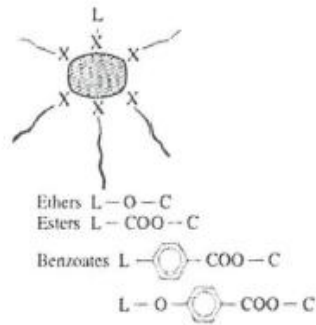
نماتیک ترجمه ی کلمه یونانی "  $\alpha\mu\eta\nu$  " به معنی رشته است . این نام را فریدل<sup>۶</sup> در سال ۱۹۰۰ به دلیل مشاهده ی رشته های سیاه رنگ توسط میکروسکوپ، انتخاب کرد. نماتیک ها اغلب ملکول های میله ای شکلی دارند که بخش صلب آن از دو یا تعداد بیشتری حلقه های آروماتیک<sup>۷</sup> تشکیل شده است در حالی که بخش انعطاف پذیر این ملکول ها را زنجیره های آلکیل<sup>۸</sup> تشکیل می دهند. در شکل زیر دو ساختار ملکولی  $MMBA$  و  $PAA$  نشان داده شده است.



شکل ۱-۱: (a) ساختار شیمیایی ملکول  $MMBA$  ، (B) ساختار شیمیایی ملکول  $PAA$

<sup>3</sup>Nematic  
<sup>4</sup>Smectic  
<sup>5</sup>Columnar  
<sup>6</sup>Friedel  
<sup>7</sup>Aromatic  
<sup>8</sup>Alkyl

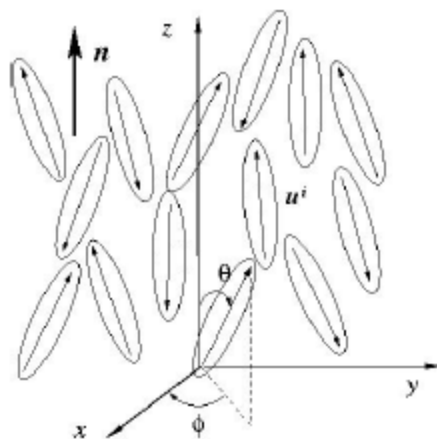
علاوه بر ملکول های میله ای شکل ، ملکول های دیسکی شکل نیز وجود دارند که ساده ترین مثال برای این نوع ملکول ها پلی استرهایی<sup>۹</sup> با شش مکان اتصال هستند. شکل (۲-۱) فرم کلی ملکول های دیسکی شکلی که می توانند فاز های بلور مایع را داشته باشند، نشان می دهد.



شکل ۲-۱ : ساختار های ملکولی دیسکی که می توانند فاز های بلور مایع را بسازند.

<sup>9</sup>Phenylester

از دیدگاه ماکروسکوپی، نماتیک‌ها سیالات منظمی هستند که هیچگونه نظم مکانی در مرکز جرم‌های ملکولی آنها وجود ندارد در حالی که نظم جهتی بلند بردی در جهت گیری محور بلند ملکول‌های میله‌ای آنها وجود دارد. در حجمی از نماتیک، جهت گیری متوسط ملکول‌ها را توسط بردار جهت نما<sup>۱۰</sup> نشان می‌دهند که برداری واحد است و معمولاً آن را با  $\mathbf{n}$  نشان می‌دهند. از لحاظ فیزیکی  $\mathbf{n}$  و  $-\mathbf{n}$  هم‌ارز هستند. شکل (۳-۱) نمای شماتیکی از جهت گیری ملکول‌های نماتیک و بردار جهت نما می‌دهد.

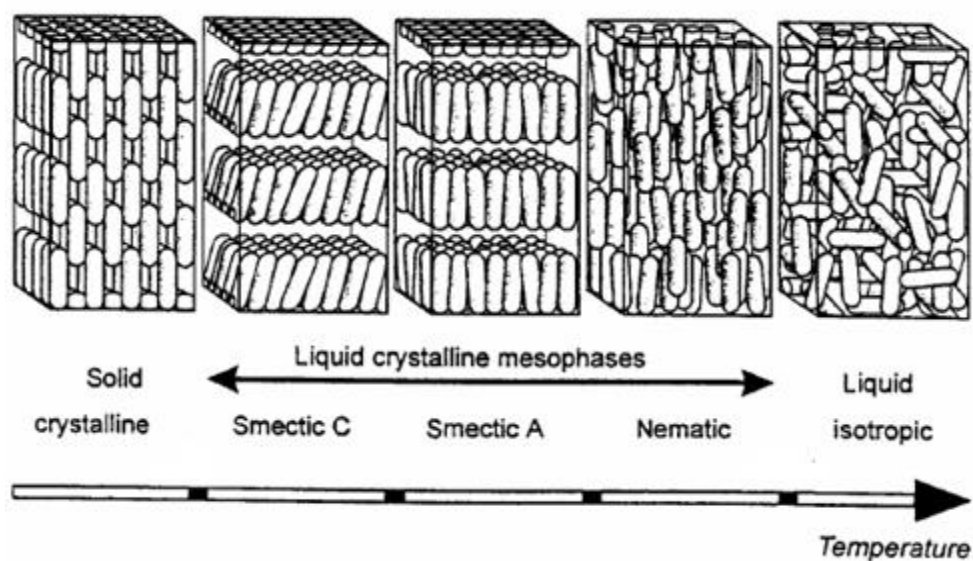


شکل ۳-۱: بردار  $\mathbf{u}^{(i)}$  در امتداد محور بلند ملکولی است که جهت گیری هر ملکول را نشان می‌دهد و بردار  $\mathbf{n}$  متوسط جهت گیری ملکول‌ها است.

میزان نظم در جهت گیری ملکول‌ها با افزایش دما کاهش می‌یابد. هنگامی که دمای یک نمونه ی نماتیک به اندازه کافی افزایش یابد، نظم جهتی بلند برد از بین می‌رود و فاز همسانگرد<sup>۱۱</sup> مایع معمولی حاصل خواهد شد و در صورت کاهش دما گذار مستقیم به فاز جامد یا اسمکتیک (فازی که به صورت لایه لایه منظم است) رخ می‌دهد که بستگی به ویژگی‌های طبیعی بلور مایع دارد. شکل (۴-۱) نشان می‌دهد که با افزایش دما، فاز ماده از حالت جامد که منظم است به ترتیب به فازهای اسمکتیک (بخش (۲.۲.۱))، نماتیک و نهایتاً فاز مایع همسانگرد، گذار می‌کند.

<sup>10</sup>Director

<sup>11</sup> Isotropic

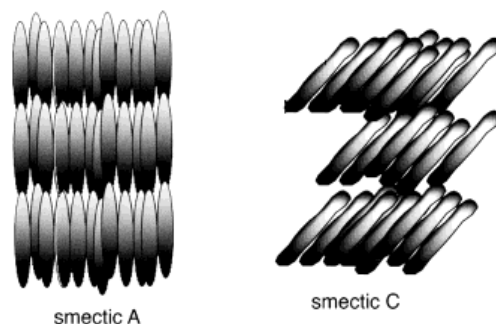


شکل ۱-۴: با افزایش دما میزان نظم جهتی و مکانی ملکول ها کاهش می یابد.

## ۲.۲.۱ فاز اسمکتیک

اسمکتیک از کلمه ی یونانی " $\alpha\mu\gamma\epsilon\mu\sigma$ " به معنی صابون گرفته شده است. ویژگی مهمی که فاز اسمکتیک را از فاز نماتیک متمایز می سازد، لایه بندی آن است. ملکول ها در لایه های منظم قرار گرفته اند و علاوه بر نظم جهتی، یک نوع نظم مکانی از خود نشان می دهند. در فاز اسمکتیک گروه های متفاوتی وجود دارند. در فاز اسمکتیک  $A$ ، ملکول ها عمود بر لایه ها جهت گیری می نمایند، بدون آنکه در هر لایه جهت گیری بلند برد واضحی وجود داشته باشد. هر لایه می تواند آزادانه بر روی لایه ای دیگر بلغزند. در فاز اسمکتیک  $C$  جهت گیری ترجیحی ملکول ها عمود بر لایه ها نیست بلکه این فاز دارای نظم دو محوری<sup>۱۲</sup> است. یعنی بر خلاف نظم تک محوری<sup>۱۳</sup> که ملکول ها تنها در راستای محور بلند ملکولی جهت گیری می کنند، در راستای محوری دیگر نیز جهت گیری دارند (شکل ۱-۵).

<sup>12</sup> Biaxial  
<sup>13</sup> uniaxial



شکل ۵-۱

معمولا هنگامی که یک فاز اسمکتیک بین دو صفحه قرار می گیرد، شکل ساده ای نخواهد داشت. لایه ها ضخامتشان را حفظ خواهند کرد در حالی که جهت ملکول ها در آنها منحرف می شوند و بر روی لایه های دیگر می لغزند تا خود را با شرایط مرزی موجود تطبیق دهند. مواد زیادی وجود دارند که خواص نماتیک ها یا کلستریک ها و اسمکتیک ها را داشته باشند. قاعده ی اساسی این است که در دماهای کمتر نظم بلوری بیشتری وجود دارد. برای مثال فاز نماتیک در دمایی بالاتر از فازهای اسمکتیک حاصل خواهد شد و فاز های اسمکتیک با کاهش دما به ترتیب  $A \rightarrow C$  حاصل می شوند.

### ۳.۲.۱ فاز ستونی

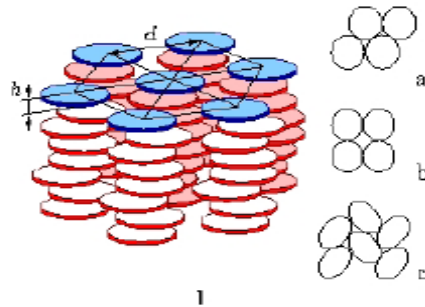
میان فازهای دیسکی شکل را می توان در گروهی جداگانه که فاز نماتیک دیسکی نیز نامیده می شود قرارداد. اگر دیسک ها در یک ستون روی هم انباشته شده باشند فاز دیسکوتیک ستونی<sup>۱۴</sup> نامیده می شود و ستون ها ممکن است در آرایه های مستطیلی یا شش وجهی قرار بگیرند (شکل (۱-۶)). علاوه بر فاز نماتیک دیسکی، فازهای نماتیک کایرال دیسکوتیک<sup>۱۵</sup> نیز وجود دارند.

فاز ستونی، یک گروه از فازهای بلور مایع است که ملکول ها تشکیل ساختارهای استوانه ای می دهند. معمولا، این نوع از بلورهای مایع را بلورهای مایع دیسکوتیک می نامند زیرا ملکول های دیسکی شکل در یک بعد روی هم سوار شده اند. اما در یافته های اخیر فازهای

<sup>14</sup>Discotic Columnar

<sup>15</sup> Chiral Discotic phase

ستونی را یافته اند که دارای ملکولهای غیر دیسکی هستند. امروزه این گروه از حالت مواد و ترکیبات نیز به عنوان بلورهای مایع ستونی شناخته می شوند.



شکل ۱-۶: فاز ستونی که از ملکول های دیسکی شکل تشکیل شده است و معمولترین نظم ستون ها در یک شبکه دوبعدی است. a: شش وجهی، b: مربعی، c: زیگزاگ، مانند استخوان های ماهی [۱].

بلورهای مایع نماتیک ستونی، نظم بلند برد مکانی ندارند و معمولاً نسبت به دیگر بلورهای مایع ستونی کمتر مرتب هستند. فازهای بلور مایع ستونی دیگری که دارای نظم بلند برد هستند، با توجه به ساختار شبکه دو بعدی شان طبقه بندی می شوند مانند: شش وجهی ها، چهارکنجی ها، مستطیلی ها و حالت های مورب.

فاز نماتیک دیسکی شامل بلورهای مایع نماتیکی می شود که ملکول های آن دیسکی شکل است و از نظم بلند برد برخوردار نیست. در این فاز مولکول ها مجموعه ی ستونی خاصی را تشکیل نمی دهند بلکه فقط طوری قرار می گیرند که محورهای کوتاه آن ها به طور متوسط، موازی با بردار جهت نما باشند.

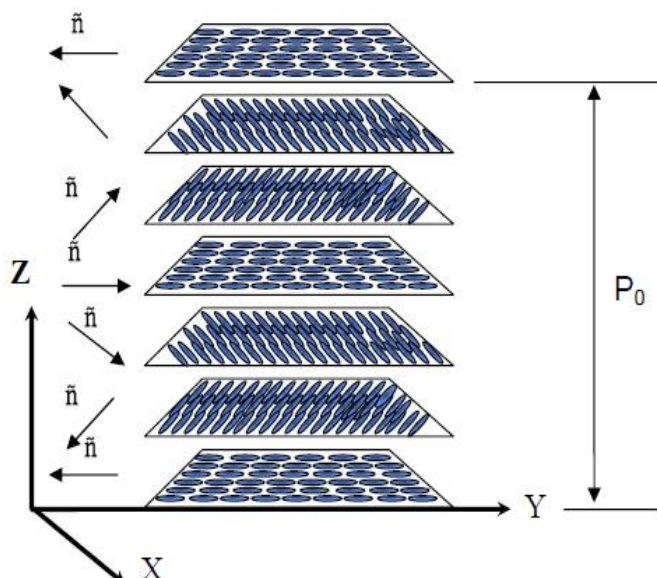
#### ۴.۲.۱ فاز کلاستریک<sup>۱۶</sup>

فاز کلاستریک یا نماتیک کایرال مانند فاز نماتیک دارای نظم جهتی بلند برد و نظم مکانی کوتاه برد در مکان های مراکز جرمی ملکول ها است. تفاوت این فاز با فاز نماتیک در این است که جهت گیری بردار جهت نما در سراسر محیط بلور مایع طبق الگوی خاصی تغییر می کند. در شکل (۷-۱) پیکر بندی این فاز، نشان داده شده است. در هر صفحه ی عمود بر محور

<sup>16</sup>Cholesteric



پیچش، ملکول‌ها تمایل دارند در یک جهت ترجیحی منظم شوند، در حالی که پس از تعداد مشخصی از صفحات جهت‌گیری ملکول‌ها دوباره تکرار می‌شود. طول دوره‌ی تناوب این جهت‌گیری را طول گام می‌نامند.



شکل ۷-۱: ساختار ملکولی فاز کلستریک،  $p_0$  طول گام است.

ساختار کلستریک توسط طول گام پیچش بردار جهت نما در راستای محور پیچش، مشخص می‌شود.

یک بلور مایع نماتیک در واقع یک فاز کلستریک با گام نامتناهی است و می‌توان گفت نماتیک یک فاز جداگانه نیست. در عمل برای یک ماده هیچ گذار فازی از نماتیک به کلستریک وجود ندارد و عملاً این دو فاز مستقل و جدا از هم نیستند. ملکول‌هایی که این فاز را می‌سازند، همواره از لحاظ اپتیکی فعال هستند زیرا گام کلستریک‌ها معمولاً در حدود چند صد نانومتر است و در نتیجه قابل مقایسه با طول موج نور مرئی است. نظم مارپیچی کلستریک‌ها دلیل رنگ‌های خاص آنها در انعکاس نور است. گام پیچ کاملاً حساس به دما، جریان، ترکیب شیمیایی و میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی خارجی می‌باشد.

### ۳.۱ پارامتر نظم در نماتیک ها

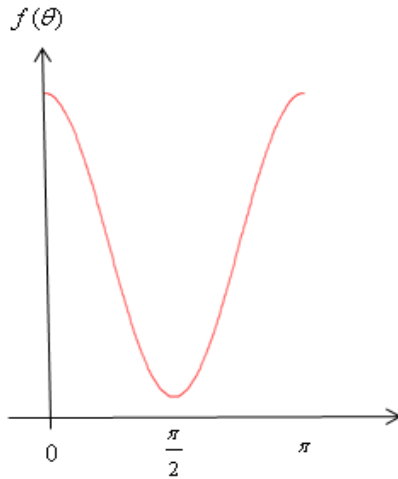
برای آنکه بتوانیم، نظم نماتیک ها را به طور کمی تعیین کنیم، لازم است پارامتری به نام پارامتر نظم را تعریف کنیم. به گونه ای که مقدار آن با افزایش بی نظمی جهت گیری ملکول ها کاهش یابد و در نهایت برای فاز مایع همسانگرد به صفر میل کند. در بعضی از سیستم های فیزیکی پارامتر نظم به طور بدیهی انتخاب می شود، برای مثال پارامتر نظم در فرومغناطیس ها، بردار مغناطش  $M$  است که دارای سه مؤلفه ی مستقل  $M_\alpha$  است. در فاز نماتیک، پارامتر نظم مانند فرومغناطیس ها بدیهی نیست و معرفی آن باید در چند مرحله صورت گیرد که در ادامه از دو دیدگاه ماکروسکوپیک و میکروسکوپیک، به تعریف آن خواهیم پرداخت.

### ۱.۳.۱ رهیافت میکروسکوپیک

میله های صلب ساده ترین تصور از ملکول های بلور مایع نماتیک است که اجازه می دهد رفتارهای آن را بررسی کنیم. مطابق شکل (۱-۳) محور یک میله توسط بردار واحد  $u^{(i)}$  مشخص می شود و فرض می شود که ملکول در اطراف بردار  $u^{(i)}$ ، تقارن کاملاً استوانه ای دارد. متوسط جهت گیری ملکول ها یا همان بردار جهت نما را در چارچوب آزمایشگاه، در راستای محور  $Z$  در نظر می گیریم. مولفه های بردار  $u^{(i)}$  توسط زوایای قطبی  $\theta$  و  $\varphi$  به صورت زیر تعریف می شود:

$$u_x^i = \sin\theta\cos\varphi, u_y^i = \sin\theta\sin\varphi, u_z^i = \cos\theta \quad (1-1)$$

نوع جهت گیری ملکول ها را می توان توسط یک تابع توزیع مانند  $f(\theta, \varphi)$  تعریف کرد طوری که  $f(\theta, \varphi)d\Omega$  احتمال حضور ملکول ها را در زاویه فضایی کوچک  $d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$  بیان می کند. در شکل (۱-۸) تغییرات تابع توزیع را نسبت به زاویه بین بردار جهت نما و محور ملکولی نشان می دهد. همانگونه که در این نمودار مشاهده می کنیم، چنانچه تابع توزیع احتمال در حالتی که ملکول ها موازی بردار جهت نما باشند بیشینه است و در وضعیتی که محور ملکول ها در راستای عمود بر بردار جهت نما باشد، این تابع کمینه خواهد شد.



شکل ۱-۸: تابع توزیع  $f(\theta)$  برای سیستمی از ملکول های میله ای در فاز نماتیک.  $f(\theta)$  در  $\theta = 0$  و  $\theta = \pi$  بیشینه است. به عبارتی ملکول ها موازی محور اپتیکی هستند. این تابع در  $\theta = \frac{\pi}{2}$  کمینه می شود [۲].

دو نکته در مورد تابع توزیع در نماتیک های معمولی وجود دارد:

۱.  $f(\theta, \varphi)$  مستقل از  $\varphi$  است، ( فاز نماتیک تقارن استوانه ای کامل در اطراف  $\mathbf{n}$  دارد).

۲.  $f(\theta) = f(\pi - \theta)$ ، ( جهت های  $\mathbf{n}$  و  $-\mathbf{n}$  هم ارز هستند).

انتظار داریم که نظم در نماتیک را از طریق یک پارامتر عددی وابسته به تابع توزیع تعیین کنیم. اولین ایده استفاده از متوسط جهت گیری ها است:

$$\langle \cos \theta \rangle = \langle u^i \cdot \mathbf{n} \rangle = \int f(\theta) \cos \theta d\Omega \quad (1-2)$$

اما طبق نکته دوم، این عبارت که مربوط به متوسط جمله دو قطبی است، صفر می شود. بنابراین باید جملات چند قطبی های بالاتر را در نظر بگیریم. اولین جمله ای که نمی توان از آن صرف نظر کرد، جمله چهارقطبی است که آن را با  $S$  نشان می دهیم:

$$S = \frac{1}{2} \langle 3 \cos^2 \theta - 1 \rangle = \int f(\theta) \frac{1}{2} (3 \cos^2 \theta - 1) d\Omega \quad (1-3)$$

با توجه به نمودار (۱-۸)،  $f(\theta)$  در  $\theta = 0$  و  $\theta = \pi$  بیشینه می شود، در نتیجه  $\cos \theta = \pm 1$  و

$S = 1$  در حالی که در  $\theta = \frac{\pi}{2}$ ، داریم  $S = -\frac{1}{2}$ . در نهایت اگر جهت گیری ملکول ها کاملا

تصادفی باشد یعنی  $f(\theta)$  مستقل از  $\theta$  باشد، آنگاه  $\langle \cos^2 \theta \rangle = \frac{1}{3}$  و  $S = 0$ . بنابراین  $S$

می تواند مقیاسی مناسبی برای تعریف نظم ملکول ها در نماتیک باشد.

### ۲.۳.۱ رهیافت ماکروسکوپی

از برخی خواص ماکروسکوپی مایعات همسانگرد و بلورهای مایع نماتیک ناهمسانگرد می توان برای تعریف پارامتر نظم استفاده کرد که پذیرفتاری مغناطیسی، قطبش پذیری الکتریکی و ثابت دی الکتریک از آن جمله اند. پارامتر نظم باید به گونه ای تعریف شود که در مایعات همسانگرد که تقریباً نظمی وجود ندارد کمینه شود. با توجه به این که رابطه بین پذیرفتاری مغناطیسی مواد با خواص ملکولی شان بیشتر شناخته شده است، در بسیاری موارد ترجیح می دهیم که پارامتر نظم در نماتیک ها را بر اساس پذیرفتاری مغناطیسی تعریف کنیم. پارامتر نظم برای بلور مایع نماتیک تک محوری از رابطه زیر بدست می آید [۲]:

$$Q_{\alpha\beta} = G \begin{vmatrix} \frac{1}{3}(\chi_{\perp} - \chi_{\parallel}) & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{3}(\chi_{\perp} - \chi_{\parallel}) & 0 \\ 0 & 0 & \frac{2}{3}(\chi_{\parallel} - \chi_{\perp}) \end{vmatrix} \quad (1-4)$$

در این رابطه  $\alpha, \beta = X, Y, Z$  است و  $G$  ثابت به هنجارش است.

### ۴.۱ نظریه پیوستگی کشسانی

در عمل، وجود عوامل خارجی مانند سطوح مرزی و میدان های خارجی اعمال شده بر بلور مایع موجب می شوند که جهت بردار جهت نما با مکان تغییر کند و واپیچش هایی در محیط بلور مایع حاصل شود. به عبارتی این عوامل، بافت همگن نماتیک را تغییر می دهند. به این ترتیب تانسور پارامتر نظم از نقطه ای به نقطه دیگر تغییر خواهد کرد. سه نوع بافت که توسط این عوامل خارجی ممکن است در یک نمونه نماتیک ایجاد شوند عبارتند از خمیده<sup>۱۷</sup>، واپیچیده<sup>۱۸</sup> و گسترده<sup>۱۹</sup> که در شکل (۹-۹) نشان داده شده اند.

<sup>17</sup> Bend  
<sup>18</sup> Twist  
<sup>19</sup> Splay