مقاله‌نامه بیست و سومین کنفرانس بهاره فیزیک (۳۰-۲۹ اردیبهشت ۱۳۹۵)

اثر ناخالصی های یونی و نانوذرات فروالکتریک بر نظم سمتگیری بلورمایع نماتیک

روشنک محمدی سیاه بومی ،سعیده شعاری نژاد

دانشکده فیزیک- شیمی، دانشگاه الزهرا، تهران

چکیده:

مطالعات نشان داده اند که افزودن نانوذارت فروالکتریک به بلور های مایع نماتیک دمای گذار فاز همسانگرد به نماتیک را شدیدا تحت اثر قرار می دهد که ناشی از جفت شدگی بین نانوذرات و مولکول های بلور مایع است. چنین تغییر دمای گذاری به بهبود خواص فیزیکی می انجامد. در این مقاله پارامتر نظم بلورهای مایع نماتیک آمیخته به نانوذارت فروالکتریک را در نزدیکی دمای گذار با در نظر گرفتن پوششی بر میدان الکتروستاتیک نانوذرات ناشی از حضور یون های ناخالص در محیط بلور مایع بررسی می شود.

مقدمه

آزمایش ها نشان داده اند که غلظت کمی از نانوذرات فروالکتریک می تواند به طور چشم گیری خواص فیزیکی بلور مایع نماتیک را بهبود بخشد[1]. نانوذرات $Sn_2P_2S_6$ و $BaTiO_3$ با غلظت کم (حتی کمتر از1%) پارامتر های نظم بلور مایع میزبان را شدیدا تحت اثر قرار می دهند. پارامتر نظم مولکول های بلور مایع هنگامی که در فاز نماتیک قرار دارند به صورت زیر است[2]:

$$Q_{\alpha\beta} = S(T)\left[n_\alpha(r)n_\beta(r) - \frac{1}{3}\delta_{\alpha\beta}\right] \qquad (1)$$

در رابطه (۱)، n مربوط به جهت میانگین مولکول های بلور مایع است. مشابه با مولکول های بلور مایع، نانوذرات فروالکتریک با گشتاورهای دوقطبیp نیز تانسور پارامتر نظمی به صورت $Q_{\alpha\beta}^{NP} = \frac{3}{2}\frac{\langle p_\alpha p_\beta\rangle}{p^2} - \frac{1}{2}\delta_{\alpha\beta}$ داریم.وارد کردن نانوذرات فروالکتریک درمحیط نماتیک، در اثر برهم کنش میدان الکترواستاتیکی نانوذرات با تانسور نظم بلور مایع والقاء نظم قطبی، نوعی جفت شدگی بین پارامتر نظم نانوذرات و بلور مایع ایجاد می شود که با کمینه کردن چگالی انرژی آزاد کل در چارچوب نظریه لاندائو[3]، به صورت $S_{NP} = \frac{\Delta\epsilon\, p^2}{45\pi\epsilon_0\epsilon^2 R^3 k_B T} S_{LC}$ حاصل می شود و با جای گذاری آن در چگالی انرژی آزاد لاندائو-دژن زیر

$$F = \frac{1}{2}a(T - T^*)S^2 - \frac{1}{3}bS^3 - \frac{1}{4}cS^4 + \frac{1}{2}L(\nabla S)^2 \qquad (2)$$

با ضرایب ثابت a ,b ,c, L و در نظرگرفتن تخمین $a_{NP} = 5k_BT\rho_{NP}$ برای ابعاد نانوذرات که با بسط آنتروپی برحسب تابع توزیع جهت گیری بدست می آید[٤]، خواهیم داشت:

$$\frac{F}{V}=\frac{\grave{a}_{LC}}{2}\left[-(T-T^{*})-\frac{{\rho_{NP}}^{2}}{\grave{a}_{LC}\,a_{NP}}\left(\frac{\Delta\varepsilon\,p^{2}}{9\pi\epsilon_{0}\epsilon^{2}R^{3}}\right)^{2}\right]S_{LC}^{2}-\frac{b}{3}S_{LC}^{3}+\frac{C}{4}S_{LC}^{4} \qquad (3)$$

با کمینه کردن معادله (۳).سه مقدار برای پارامتر نظم حاصل می شود: $S_{LC_1}=0$ مربوط به حالت همگن و دو پارامتر نظم دیگر به صورت داده شده در معادله (٤).

$$S_{LC_{2,3}}=\left(b\pm\sqrt{b^{2}+4C\left[-\grave{a}_{LC}\,(T-T^{*})+\frac{\rho_{NP}}{5k_{B}T}\left(\frac{\Delta\epsilon p^{2}}{24\pi\epsilon_{0}\epsilon^{2}}\right)^{2}\right]}\right)\Big/2c \qquad (4)$$

از آن جا که S_{LC_2} دارای جواب های مثبت است پس از لحاظ فیزیکی تنها S_{LC_2} جواب مساله است. نتایج تاثیر وجود نانوذرات فرو الکتریک را بر پارامتر نظم بلور مایع نشان می دهند که ناشی از القا نظم سمتگیری بیشتر به بلور مایع میزبان، در اثر میدان الکتروستاتیکی ایجاد شده در اطراف آنهاست.

اما می دانیم به طور طبیعی محیط بلور مایع دارای برخی یون های ناخالصی می باشد و این ناخالصی ها می توانند شامل یون های مثبت و منفی باشند که یقینا با پوشش دهی میدان الکتروستاتیک نانوذرات فروالکتریک و توزیع مجدد، درتغییر پاسخ سیستم به میدان الکتریکی موثرخواهند بود. حال ما به منظور بررسی نظم القا شده و تعیین اثر این ناخالصی ها، معادله ی خطی پواسون بولتزمن[1] را برای یافتن میدان الکتریکی اطراف دوقطبی در حضور یون ها حل می کنیم. این میدان به صورت زیر نوشته می شود[4] :

$$E(r)=\frac{e^{-kr}}{4\pi\epsilon_{0}\epsilon}\left[(1+kr)\left(\frac{3r(r.P)}{r^{5}}-\frac{P}{r^{3}}\right)+\frac{k^{2}r(r.P)}{r^{3}}\right] \qquad (5)$$

در این عبارت، k^{-1} طول پوشش دهی دبای است که با $k^{-1}=\left(\frac{\epsilon_{0}\epsilon k_{B}T}{2nq^{2}}\right)^{\frac{1}{2}}$ داده می شود. n غلظت یون ها و q بار آن ها را نشان می دهد. با در نظر گرفتن $E(r)$ برای دو ذره و جا گذاری آن ها در معادله چگالی انرژی آزاد حاصل از برهم کنش نانوذرات و مولکول های بلور مایع به رابطه زیر می رسیم:

$$F_{int}=\frac{-\Delta\epsilon Q_{\alpha\beta}^{LC}}{24\pi\epsilon_{0}\epsilon^{2}}p_{\alpha}p_{\beta}\left[\int_{0}^{R}\left[\frac{9k^{2}}{r^{2}}+\frac{16k}{r^{3}}+\frac{6}{r^{4}}+\frac{4k^{3}}{r}+\frac{2}{3}k^{4}\right]e^{-2kr}dr\right] \qquad (6)$$

برای حل انتگرال این معادله از روش گاوس لژاندر [5] به صورت زیر، استفاده می کنیم:

$$\int_{0}^{R}f(r)dr\cong\frac{R}{2}\sum_{i=1}^{N}W_{i}f\left(\frac{R}{2}+\frac{R}{2}x_{i}\right)\quad;\quad N=3\quad;\quad f(r)=\left[\frac{9k^{2}}{r^{2}}+\frac{16k}{r^{3}}+\frac{6}{r^{4}}+\frac{4k^{3}}{r}\right]e^{-2kr}$$

پس، چگالی انرژی آزاد با وارد کردن اثر برهم کنش نانوذرات و مولکول های بلور مایع و با در نظر گرفتن تانسورهای نظم به صورت زیرخواهد بود:

$$\frac{F_{int}}{V}=A\left(\frac{-\Delta\epsilon\rho_{NP}p^{2}}{24\pi\epsilon_{0}\epsilon^{2}}\right)S_{LC}S_{NP}\ ,\qquad A=\int_{0}^{R}\left[\frac{9k^{2}}{r^{2}}+\frac{16k}{r^{3}}+\frac{6}{r^{4}}+\frac{4k^{3}}{r}+\frac{2}{3}k^{4}\right]e^{-2kr}dr \qquad (7)$$

[1] Poisson-Boltzmann

مقاله‌نامه بیست و سومین کنفرانس بهاره فیزیک (۳۰-۲۹ اردیبهشت ۱۳۹۵)

از حل انتگرال و قرار دادن معادله (۷) در عبارت آخر معادله مربوط به چگالی انرژی آزاد گفته شده در معادله (۲) چگالی انرژی آزاد را در حالتی که حضور یون ها در نظر گرفته می شود، به صورت زیر به دست می آید:

$$\frac{F}{V}=\left[-\frac{\grave{a}_{LC}\,(T-T^{*})}{2}-\frac{1}{2a_{NP}}\left(\frac{\Delta\epsilon\rho_{NP}p^{2}}{24\pi\epsilon_{0}\epsilon^{2}}\right)^{2}\frac{R^{2}}{4}\left[\left[\frac{1}{2}\left(\frac{36k^{2}}{R^{2}}\left(\frac{22}{100}\right)^{2}+\frac{128k}{R^{3}}\left(\frac{22}{100}\right)^{3}+\frac{96}{R^{4}}\left(\frac{22}{100}\right)^{4}+\frac{8k^{3}}{R}\left(\frac{22}{100}\right)\right)e^{-kR\left(\frac{22}{100}\right)}+\frac{4}{5}\left(\frac{36k^{2}}{R^{2}}+\frac{128k}{R^{3}}+\frac{96}{R^{4}}+\frac{8k^{3}}{R}\right)e^{-kR}+\frac{1}{2}\left(\frac{36k^{2}}{R^{2}}\left(\frac{177}{100}\right)^{2}+\frac{128k}{R^{3}}\left(\frac{177}{100}\right)^{3}+\frac{96}{R^{4}}\left(\frac{177}{100}\right)^{4}+\frac{8k^{3}}{R}\left(\frac{177}{100}\right)\right)e^{-kR\left(\frac{177}{100}\right)}\right]+\frac{k^{3}}{3}\left(1-e^{-2kR}\right)\right]^{2}\right]S_{LC}^{2}-\frac{b}{3}S_{LC}^{3}+\frac{c}{4}S_{LC}^{4} \qquad (8)$$

در واقع مانند حالت قبل می توان با کمینه کردن عبارت چگالی انرژی آزاد، S_{NP} را برحسب S_{LC} به دست آورد. همچنین با جای گذاری S_{NP} در معادله $\frac{F}{V}$ ،معادله (۸) به دست می آید. و با کمینه کردن معادله (۸)، می توانیم پارامتر نظم بلور مایع را با در نظر گرفتن اثر حضور یون ها و جفت شدگی بین سمتگیری نماتیک و نانوذرات به دست آوریم . یکی از پارامترهای نظم به صورت $S_{LC_1}=0$ حاصل خواهد شد و صورت دو پارامتر دیگر به صورت زیر هستند:

$$S_{LC_{2_3}}=\left(b\pm\sqrt{b^{2}+4C\left[-\grave{a}_{LC}\,(T-T^{*})+\frac{\rho_{NP}}{5k_{B}T}\left(\frac{\Delta\epsilon p^{2}}{24\pi\epsilon_{0}\epsilon^{2}}\right)^{2}A^{2}\right]}\right)\Big/2c \qquad (9)$$

مانند حالت قبل تنها S_{LC_2} جواب مساله است.از مقایسه معادله (٤) با معادله (۹) واضح است که اثر حضور یون ها بصورت یک ضریب A^2 در پارامتر نظم ظاهر شده است و ازآنجا که A به غلظت یون ها به شدت بستگی دارد، تغییر غلظت یون ها، نوع و میزان طول پوشش دهی آن ها می تواند تاثیربسزایی در پارامتر نظم داشته باشد. این نتیجه اهمیت زیادی در کارکرد اسباب ساخته شده برپایه بلورهای مایع خواهد داشت.

نتیجه گیری:

مطالعات اخیر نشان داده اند که حضور نانوذرات بدون اثر یون های نا خالص موجب افزایش نظم مولکول های بلور مایع می شود.دراینجا نشان داده شد که اثر یون ها بسته به غلظت و نوع آن ها و هم چنین بسته به دمای سیستم، می تواند گذار سمتگیری و میزان تاثیر نانوذرات در محیط بلور مایع را تغییر دهد. درواقع حضور یون های ناخالصی عملا با پوشش دهی میدان الکتروستاتیکی حاصل از نانوذارت فروالکتریک، نظم القا شده را کاهش می دهد.

مرجع ها

1.M. S. Zakerhamidi, S. Shoarinejad, S. Mohamadpour, J. Mol. Liq., 191, 16 (2014)
2.Physical Properties Of Liquid Crystalline Material, Edited By W. H. Dejeu
3.The Physics Of Liquid Crystals, Edited By P.G,De Genes And J. Prost.
4. Lena M.Loptina and jonathan V. Selinger.,phys,Rev,Lett.,102 (2009) 191802.
5.Numerical analysis by Richard L.Burden(Author),J.Douglas.