

## برهمکنش یک ذره کلونیدی بلند با دیواره موجی در بلور مایع نماتیک با بررسی اثر دامنه دیواره موجی

فاطمه حسینی راد و محمدرضا مظفری\*

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه قم، قم

\*پست الکترونیکی: m.mozaffari@qom.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۴۰۳/۶/۰۷؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۴۰۳/۰۹/۰۳)

### چکیده

این مطالعه، برهمکنش یک ذره میله‌ای بلند با دیواره‌ای موجی را به صورت دوبعدی در محیط بلور مایع نماتیک بررسی می‌کند. ذره در سلولی بین دو دیواره صاف و موجی محصور شده است که قلاب‌شدگی‌های عمودی دارند. برهمکنش ذره با دیواره موجی از کمینه‌سازی عددی انرژی لاندائو-دوژن و انرژی سطحی با استفاده از روش اجزای محدود تعیین می‌شود. ما فهمیده‌ایم که در محدوده هر فرورفتگی و برآمدگی متوالی از دیواره موجی، ذره می‌تواند تحت تأثیر برهمکنش‌های جاذب و دافع در مسیرهای مشخصی سوق داده شود که توسط گرادیان انرژی ذره-دیواره تعیین می‌شود. بازآرایش سمتگیری میدان نماتیک در اطراف ذره و انحراف آن از پیکربندی چهارقطبی منجر به برهمکنش‌های ناهمسانگرد ذره-دیواره در فواصل نزدیک می‌شود. برای بررسی تأثیر بزرگی فرورفتگی‌ها و برآمدگی‌ها بر برهمکنش‌ها، به طور مجزا دیواره موجی را در دو دامنه متفاوت بررسی کرده‌ایم. محاسبات ما نشان می‌دهد که افزایش دامنه می‌تواند محدوده برهمکنش‌ها را تقویت و گسترش دهد.

**واژه‌های کلیدی:** بلور مایع نماتیک، دیواره موجی، انرژی لاندائو-دوژن، انرژی سطحی، قلاب‌شدگی، نقص

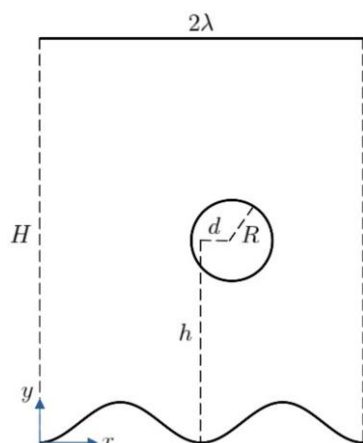
### ۱. مقدمه

ذرات میکروسکوپی را فراهم کرد. هندسه [۴ و ۵]، محصور سازی [۶ و ۷] و قلاب‌شدگی<sup>۲</sup> سطوح [۸ و ۹] ابزارهای همه کاره برای دیکته کردن برهمکنش‌های کلونیدی در سیال نماتیک به شمار می‌روند. به علاوه توانایی کنترل نقص‌ها در بلور مایع نماتیک امکان دسترسی به حالت‌های تعادلی بسیار متفاوت را در یک سامانه کلونیدی فراهم کند [۱۰ و ۱۱]. با پوشش‌دهی مناسب ذرات کلونیدی در آزمایشگاه، می‌توان به

توانایی وادار کردن ذرات میکروسکوپی به حرکت یک چالش مهم در زمینه‌های مختلف از علم مواد تا زیست‌شناسی است. بلورهای مایع نماتیک<sup>۱</sup> فرصت‌های منحصر به فردی را در این حوزه فراهم می‌کنند [۱ و ۲]. انحراف‌های کشسان در سمتگیری میدان نماتیک از نظر انرژی پرهزینه هستند [۳]. با تحمیل عمده‌ی چنین انحراف‌هایی، می‌توان انرژی لازم برای کنترل

۱. Nematic Liquid Crystals

۲. Anchoring



شکل ۱. نمایشی از مقطع دوبعدی ذره میله‌ای بلند محدود بین دو سطح تخت و موجی. سلول در امتداد محور  $x$  شرایط دوره‌ای دارد. طول موج دیواره موجی  $\lambda$  برابر با  $4R$  است. ضخامت سلول  $H$  برابر با  $10R$  است. محدوده بررسی رفتار ذره نسبت به دیواره موجی به صورت  $h \leq 6R$  و  $0 \leq d \leq \lambda/2$  در نظر گرفته می‌شود. میدان نماتیک بر روی ذره و دیواره‌ها قلاب‌شدگی عمودی دارد.

ساختارهای خودبه‌خودی ذرات کلوئیدی در حوزه مواد نرم کمک کنند.

در این مطالعه، با استفاده از روش اجزاء محدود و بهینه‌سازی انرژی لاندائو-دورژن در حضور انرژی سطحی، برهمکنش ذره میله‌ای بلند با دیواره موجی در دو دامنه مختلف در سیال نماتیک دوبعدی بررسی می‌شود.

## ۲. مدل و روش

شکل ۱، مقطع دوبعدی از یک ذره استوانه‌ای خیلی بلند را نشان می‌دهد که از بالا و پایین به دو سطح تخت و موجی محدود شده است. محور استوانه موازی با شیارهای سطح موجی است. سلول تحت بررسی شرایط مرزی دوره‌ای در امتداد عمود بر محور شیارها دارد. همه سطوح قلاب‌شدگی عمودی دارند. به واسطه هندسه مدل و قلاب‌شدگی روی سطوح، میدان نماتیک رفتار دوبعدی در سلول تحت بررسی نشان می‌دهد. در سلول به ضخامت  $H$ ، معادله منحنی دیواره موجی در صفحه  $xy$  به صورت  $y(x) = A - A \cos(2\pi x/\lambda)$  داده می‌شود که  $A$  دامنه و  $\lambda$  طول موج دیواره است. در این مقاله، برهمکنش ذره

قلاب‌شدگی‌های عمودی، مماسی یا مایل مولکول‌های بلور مایع نماتیک در نزدیکی سطوح دست یافت. بزرگی انحراف‌های کشسان میدان نماتیک در نزدیکی سطوح توسط قدرت قلاب‌شدگی کنترل می‌شود [۱۲]. برای یک ذره کلوئیدی معلق در سیال نماتیک یکنواخت، قلاب‌شدگی باعث تشکیل نقص (یا تکینگی)‌هایی به صورت نقطه یا (و) خط در میدان نماتیک اطراف ذره می‌شود. در مقایسه با الکترواستاتیک، زوج‌های ذره-نقص می‌تولند برهمکنش‌های بلندبرد دوقطبی-دوقطبی، چهارقطبی-چهارقطبی یا دوقطبی-چهارقطبی و همچنین برهمکنش‌های کوتاه‌برد ناهمسانگرد بین ذرات الفا کنند [۱۳] و [۱۴]. موازنه برهمکنش‌های جاذب و دافع سبب تشکیل ساختارهای یک‌بعدی، دوبعدی یا سه‌بعدی از ذرات کلوئیدی در محیط بلور مایع نماتیک می‌شود [۱۵].

یک دیواره موجی با قلاب‌شدگی عمودی در تماس با یک سیال نماتیک می‌تواند متناوباً باعث انحراف‌های کشسان میدان نماتیک در نزدیکی دیواره به صورت همگرا (در فرورفتگی‌ها) و واگرا (در برآمدگی‌ها) شود. لثو و همکارانش نشان دادند که میدان نیروی ناشی از گرادیان انرژی چنین انحراف‌های کشسانی باعث سوق میکرو ذرات کروی به طرف دیواره موجی در امتداد مسیرهای معینی می‌شود [۱]. میکرو ذره در چنین سامانه‌ای می‌تولند چندین پیکربندی پایدار از نقطه نظر انرژی ایجاد کند که با تغییر موقعیت فضایی ذره نسبت به دیواره می‌توان ماهیت جاذب و دافع برهمکنش ذره-دیواره و همچنین قدرت آنها را به گونه مشخصی تعیین کرد. بدین ترتیب با تنظیم هندسه دیواره و قلاب‌شدگی روی سطوح، می‌توان ذره کلوئیدی را در مسیر(های) مشخصی به موقعیت(های) از قبل تعیین شده هدایت کرد [۲]. به عنوان یک کاربرد از میدان انرژی نزدیک به دیواره موجی، می‌توان به برهمکنش‌های قفل و کلید اشاره کرد که در آن یک میکروذره کلوئیدی (به عنوان کلید) به یک مکان خاص (به عنوان قفل) در امتداد دیواره موجی جذب می‌شود تا انحراف‌های کشسان سمتگیری میدان نماتیک به حداقل برسد [۱۶ و ۱۷].

همچنین دیواره‌های موجی می‌توانند به طور مؤثر به تشکیل

[۱۸]. تانسور مرجح  $Q_{ij}^s = (S/2)(3\hat{v}_i\hat{v}_j - \delta_{ij})$  توسط بردار یکه موضعی  $\hat{v}$  بر روی سطوح مشخص می‌شود که در این مطالعه  $\hat{v}$  عمود بر سطوح است.

انرژی نهایی سامانه در واحد طول به صورت

$$F_\ell = F_{LDG} - f_{local}[S_{eq}]\Omega + F_{surface}, \quad (3)$$

بررسی می‌شود که  $f_{local}$  قسمت موضعی چگالی انرژی لاندائو-دوژن در غیاب انحراف‌های کشسان است.

در حقیقت قسمت موضعی چگالی انرژی، فقط مقدار تعادلی پارامتر نظم را تنظیم می‌کند و نقشی در انحراف‌های کشسانی میدان نماتیک ندارد [۳]. قسمت موضعی چگالی انرژی لاندائو-دوژن در غیاب انحراف‌های کشسان برحسب بزرگی پارامتر نظم  $S$  به صورت

$$f_{local}[S] = \frac{2a(T-T^*)}{4} S^2 - \frac{B}{4} S^4 + \frac{9C}{16} S^6, \quad (4)$$

داده می‌شود و بزرگی پارامتر نظم تعادلی با وردش از انرژی  $(\partial f_{local}/\partial S = 0)$  به وسیله رابطه

$$S_{eq}(T) = \frac{B}{6C} \left[ 1 + \sqrt{1 - \frac{24aC(T-T^*)}{B^2}} \right], \quad (5)$$

تعیین می‌شود. پارامترهای انرژی لاندائو-دوژن و قدرت قلاب‌شدگی برای بلورهای نماتیک  $5CB$  در این پژوهش به صورت  $B = 2.12 \times 10^6 \text{ J/m}^2$ ،  $a_s = 0.087 \times 10^6 \text{ J/m}^2 \text{ K}$ ،  $C = 1.73 \times 10^6 \text{ J/m}^2$ ،  $S_{eq} = 0.533$ ،  $L_s = 4 \times 10^{-11} \text{ J/m}$ ،  $T = 305.17 \text{ K}$ ،  $T^* = 307.15 \text{ K}$  و  $W = 10^{-7} \text{ J/m}^2$  انتخاب شده‌اند [۱۹].

در این مطالعه، از روش اجزای محدود [۲۰ و ۲۱] و بسته منبع باز Gmsh برای تجزیه ناحیه دوبعدی به اجزاء مثلثی استفاده می‌شود [۲۲]. عناصر تانسور نظم به طور خطی در داخل هر مثلث تقریب زده می‌شوند. دقت تقریب خطی به مشتقات عناصر تانسور نظم در داخل هر مثلث بستگی دارد که با ابعاد آنها کنترل می‌شود. ابعاد اجزاء مثلثی از مرتبه طول همدوسی

(به شعاع  $R = 0.25 \mu\text{m}$ ) با سطح موجی توسط دو پارامتر ارتفاع  $h$  و فاصله  $d$  بررسی می‌شود.

سمتگیری میدان نماتیک ( $\hat{n}$ ) و بزرگی پارامتر نظم ( $S$ ) در بلور مایع نماتیک تک محوری را می‌توان به طور موضعی توسط تانسور نظم بدون رد و متقارن  $Q_{ij} = (S/2)(3\hat{n}_i\hat{n}_j - \delta_{ij})$  مشخص کرد که  $|\hat{n}| = 1$  و  $\hat{n} \equiv -\hat{n}$ . بزرگ‌ترین ویژه مقدار تانسور نظم و ویژه بردار متناظر آن به ترتیب برابر با بزرگی پارامتر نظم و سمتگیری میدان نماتیک است.

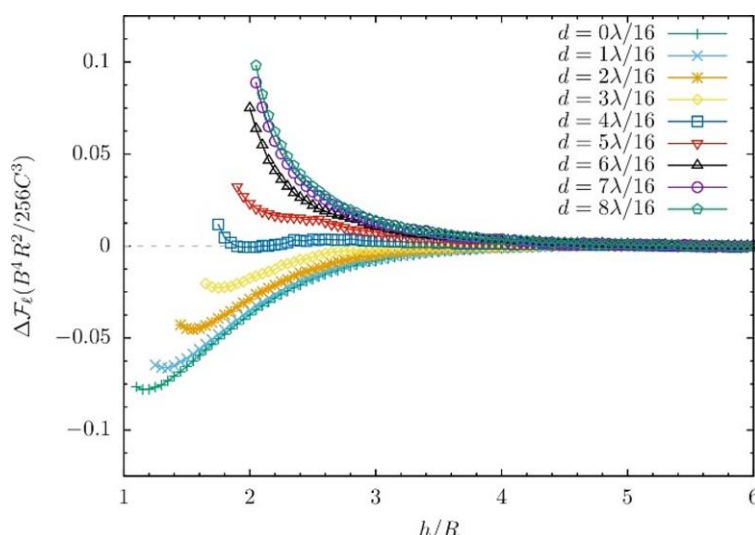
سمتگیری تعادلی میدان نماتیک در سلول تحت بررسی از بهینه کردن انرژی آزاد لاندائو-دوژن<sup>۱</sup> و انرژی سطحی بر حسب عناصر تانسور نظم نماتیک به دست می‌آید. انرژی آزاد لاندائو-دوژن در بلور تک محوری به صورت تابعی از توان‌ها و مشتقات فضایی تانسور نظم به صورت

$$F_{LDG} = \int_{\Omega} \left[ \frac{a_s(T-T^*)}{2} Q_{ij}Q_{ji} - \frac{B}{3} Q_{ij}Q_{jk}Q_{ki} + \frac{C}{4} (Q_{ij}Q_{ji})^2 + \frac{L_s}{2} (\partial_k Q_{ij})^2 \right] ds, \quad (1)$$

داده می‌شود که  $\Omega$  مساحت ناحیه اشغال شده به وسیله بلور مایع نماتیک است [۳]. جمع روی شاخص‌ها اعمال می‌شود. سه جمله اول، گذار فاز مرتبه اول آیزوتروپیک-نماتیک را تعیین می‌کند که  $T$  دما و  $T^*$  دمای ابرسرد فاز نماتیک است و ضرایب  $a_s$ ،  $B$  و  $C$  مستقل از دما هستند. جمله آخر، میزان هزینه انحراف‌های کشسان در فاز نماتیک را در تقریب تک ثابت کشسان فرنگ  $K_{\text{play}} = K_{\text{twist}} = K_{\text{bend}} = 9L_s S_{eq}/2$  مشخص می‌کند که  $K$ ها ثوابت فرنگ و  $S_{eq}$  پارامتر نظم تعادلی در غیاب انحراف‌های کشسان است. آرایش مولکول‌های بلور مایع نماتیک در نزدیکی دیواره‌ها و سطح ذره توسط انرژی سطحی به صورت

$$F_{\text{surface}} = \frac{W}{4} \int_{\partial\Omega} (Q_{ij} - Q_{ij}^s)(Q_{ji} - Q_{ji}^s) dl, \quad (2)$$

داده می‌شود که  $\partial\Omega$  سطوح در تماس با بلور مایع نماتیک اند و  $W$  قدرت قلاب‌شدگی مولکول‌ها در نزدیکی سطح است



شکل ۲. انرژی بر واحد طول  $\Delta F_\ell = F_\ell - F_\ell^*$  برهمکنش ذره-دیواره موجی با دامنه  $A = R/2$  بر حسب فاصله ذره از دیواره  $h$  در موقعیت‌های مختلف (ذره) نسبت به دیواره  $d$ . سطح انرژی صفر برهمکنش ذره-دیواره برابر است با  $F_\ell^* = 0.44(B^4R^2/256C^3)$ .

بر طبق شکل ۲، شیب انرژی برهمکنش ذره-دیواره در  $d$  های کوچک‌تر از  $\lambda/4$  منفی است. منفی‌ترین شیب در میان نمودارهای انرژی مربوط به  $d = 0$  است. ذره در این موقعیت می‌تواند در امتداد فرورفتگی جذب دیواره شود. تغییر شیب در نمودارها همچنین باعث رفتار ناهمسانگرد برهمکنش ذره-دیواره می‌شود، به طوری که ذره می‌تواند تحت تأثیر بردار نیروی ناشی از گرادیان انرژی از هر مختصاتی در محدوده  $(0 \leq d \leq \lambda/4, h = h_m)$  به طرف فرورفتگی دیواره جذب شود. در فواصل بسیار نزدیک به دیواره و به واسطه انحراف‌های شدید میدان نماتیک، انرژی برهمکنش ذره-دیواره رفتاری دافع نشان می‌دهد. رقابت بین برهمکنش‌های جاذب (بلندبرد) و دافع (کوتاه‌برد) منجر به تشکیل کمینه در نمودارهای انرژی در بازه تحت بررسی می‌شود. از نقطه نظر انرژی، پیکربندی تعادلی ذره-دیواره مربوط به قرار گرفتن ذره در داخل فرورفتگی است که مختصات آن به صورت  $(d, h) = (0.16, 1.15R)$  داده می‌شود.

انحراف‌های کشسان میدان نماتیک در اطراف هر ذره منزوی (یا دور از دیواره‌ها) با قلاب‌شدگی عمودی در یک سیال نماتیک

فاز نماتیک در نظر گرفته می‌شود. انتگرال‌گیری‌ها بر روی اجزای مثلثی به صورت عددی و بر اساس روش گوسی محاسبه می‌شود [۲۳]. برای هر پیکربندی فضایی از ذره نسبت به دیواره موجی که با  $(d, h)$  مشخص می‌شود، تانسور نظم تعادلی از بهینه‌سازی انرژی نهایی به روش عددی تکرار گرادیان مزدوج محاسبه می‌شود [۲۴]. فرایند تکرار هنگامی متوقف می‌شود که تغییرات انرژی بی‌بعد مسئله و تانسور نظم در چندگام متوالی کوچک‌تر از  $10^{-6}$  باشد.

### ۳. نتایج

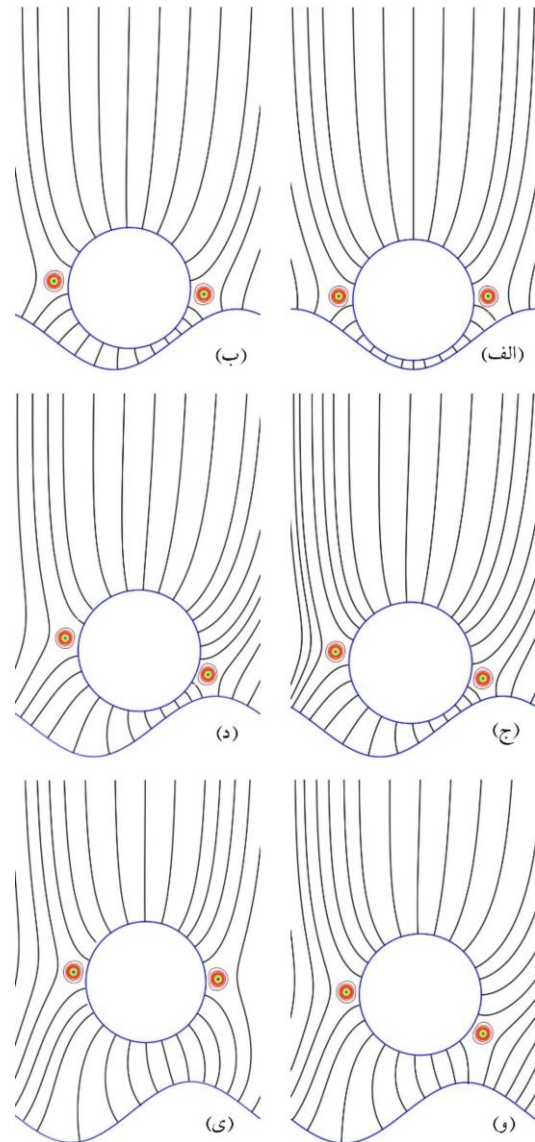
شکل ۲، انرژی برهمکنش ذره با دیواره موجی را بر حسب فاصله ذره از دیواره  $(h)$  در ناحیه‌ای بین یک فرورفتگی و برآمدگی متوالی  $(0 \leq d \leq \lambda/2)$  نشان می‌دهد. نحوه تغییرات  $h$  و  $d$  در شکل ۱ نشان داده شده است. دامنه دیواره موجی برابر با  $R/2$  است. هر نقطه  $(d, h)$  در نمودارهای انرژی به طور مستقل شامل یک کمینه‌سازی عددی بر پایه روش اجزای محدود است. مطابق شکل، ذره در فواصل دور  $(h_m = 4/5R)$  مستقل از فرورفتگی‌ها و برآمدگی‌های دیواره موجی رفتار می‌کند. اما در فواصل نزدیک، ذره متأثر از دیواره رفتار جاذب و دافع نشان می‌دهد.

ضمیمه به ذره، معمولاً در تماس با ذره‌ای دیگر یا با دیواره طوری تغییر می‌کنند که انرژی سامانه ذره-ذره یا ذره-دیواره کمینه شود. بازآرایش نقص‌ها پدیده شناخته شده و دلیل اصلی برهمکنش‌های ناهمسانگرد ذره-ذره یا ذره-دیواره است [۲ و ۱۱-۸].

شکل‌های ۳. الف-د سمتگیری میدان نماتیک و آرایش نقص‌ها را در نقاط کمینه انرژی برهمکنش ذره-دیواره به ترتیب در موقعیت‌های  $d = 0$ ،  $d = \lambda/16$ ،  $d = 2\lambda/16$  و  $d = 3\lambda/16$  نشان می‌دهد. در تمامی شکل‌ها، دو نقص  $-1/2$  (ضمیمه به ذره) تمایل دارند در بیشترین فاصله از یکدیگر قرار بگیرند و ذره-نقص حلت چهارقطبی خود را حفظ کند. با این وجود در فواصل خیلی نزدیک و به دلیل بازآرایش نقص‌ها، برهمکنش ذره با دیواره می‌تواند آثار دوقطبی نیز نشان دهد. این اثر باعث تغییر ماهیت برهمکنش‌ها از جاذب به دافع در فواصل خیلی نزدیک به دیواره می‌شود [۲۰].

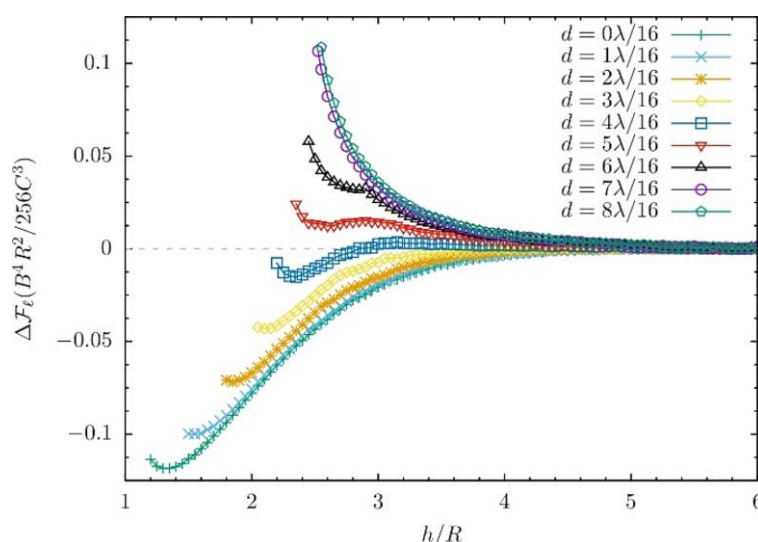
سمتگیری میدان نماتیک و نقص‌ها در اطراف ذره، در شکل ۳. الف ساختار متقارن خود را در داخل فرورفتگی حفظ می‌کند، اگرچه آنها جبهه‌جایی کوچکی به طرف بالا نشان می‌دهند. در شکل‌های ۳. ب-د، میدان نماتیک اطراف ذره سمتگیری متقارنی ندارند و باعث می‌شود که یکی از نقص‌های (ضمیمه به ذره) از فرورفتگی دیواره دور و نقص دیگر به برآمدگی مجاور آن نزدیک شود.

در شکل ۲، شیب انرژی برهمکنش ذره-دیواره در  $d$ های بزرگ‌تر از  $\lambda/4$  مثبت است. مثبت‌ترین شیب در میان نمودارهای انرژی مربوط به  $d = 8\lambda/16$  است. در این موقعیت، ذره در امتداد برآمدگی به شدت از دیواره دفع می‌شود. در اینجا انتظار داریم که میدان نماتیک و آرایش نقص‌ها (مانند  $d = 0$ )، سمتگیری متقارن خود را حول ذره حفظ کنند. ولی به جهت سمتگیری واگرای میدان نماتیک در برآمدگی‌ها، ابعاد فضایی انحراف‌های کشسان در  $d = 8\lambda/16$  بیشتر از موقعیت  $d = 0$  است. به عبارت دیگر، سوق ذره به طرف فرورفتگی‌ها، اندازه انحراف‌های کشسان را به خاطر سمتگیری همگرای میدان نماتیک کوچک می‌کند.



شکل ۳. پیکربندی‌هایی شامل سمتگیری میدان نماتیک و آرایش نقص‌های  $-1/2$  در سلول تحت بررسی با دیواره موجی به دامنه  $R/2$ . (الف)-(د) پیکربندی‌هایی در نقاط کمینه انرژی برهمکنش ذره-دیواره، و (و)-(ی) پیکربندی‌هایی در دو طرف برآمدگی انرژی برهمکنش ذره-دیواره. مختصات ذره در هر پیکربندی  $(d, h)$ ، (الف)  $(0, \lambda/16, 1/15R)$ ، (ب)  $(\lambda/16, 1/35R)$ ، (ج)  $(2\lambda/16, 1/55R)$ ، (د)  $(3\lambda/16, 1/75R)$ ، (و)  $(5\lambda/16, 2/45R)$  و (ی)  $(5\lambda/16, 2/65R)$ .

یکنواخت باعث تشکیل دو نقص  $-1/2$  در نزدیکی ذره می‌شود که در آن میدان نماتیک در پیرامون ذره سمتگیری متقارنی دارد. مرکز ذره و نقص‌ها در یک امتداد قرار دارند و بر امتداد میدان نماتیک مختل نشده عمود است. آرایش فضایی نقص‌های



شکل ۴. انرژی بر واحد طول  $\Delta F_\ell = F_\ell - F_\ell^*$  برهمکنش ذره-دیواره موجی با دامنه  $A = 3R/4$  برحسب فاصله ذره از دیواره  $h$  در موقعیت‌های مختلف ذره نسبت به دیواره  $d$ . سطح انرژی صفر برهمکنش ذره-دیواره برابر است با  $F_\ell^* = 0.53(B^4R^2/256C^3)$ .

اثر افزایش دامنه دیواره موجی:

- سطح انرژی صفر برهمکنش ذره-دیواره را افزایش می‌دهد  
 $F_\ell^*(A = 3R/4) > F_\ell^*(A = R/2)$
- فاصله مؤثر برهمکنش ذره با دیواره را افزایش می‌دهد  
 $h_{\infty}(A = 3R/4) > h_{\infty}(A = R/2)$   
 که  $\Delta F_\ell(d, h_{\infty}) = 0$

▪ بازه انرژی برهمکنش ذره-دیواره را افزایش می‌دهد

$$\begin{cases} -0.07 < \Delta F_\ell(d, h, A = R/2) < 0.1 \\ -0.12 < \Delta F_\ell(d, h, A = 3R/4) < 0.11 \end{cases}$$

که باعث افزایش بزرگی شیب نمودارها و در نتیجه بزرگی نیروهای جاذب و دافع بین ذره و دیواره می‌شود.

به طور کلی قدرت و برد برهمکنش ذره-دیواره با افزایش دامنه دیواره موجی افزایش نشان می‌دهند که می‌توان دلیل آن را در افزایش انحراف‌های کشسان میدان نماتیک در نزدیکی دیواره جستجو کرد. در حقیقت برآمدگی‌ها و فرورفتگی‌های بزرگ‌تر، به طور موضعی، انحراف‌های شدیدی را در سمتگیری میدان نماتیک در مقایسه با برآمدگی‌ها و فرورفتگی‌های کوچک‌تر القا می‌کنند.

در شکل ۴، شیب انرژی برهمکنش ذره-دیواره در  $d < \lambda/4$  منفی است. نمودار انرژی مربوط به  $d = 0$  شیب منفی تری دارد.

در محدوده  $(0 \leq d \leq \lambda/4, h = h_{\infty})$ ، تغییر شیب در نمودارها

همچنین برآمدگی‌های کوچکی در نمودارهای انرژی برهمکنش ذره-دیواره ظاهر می‌شود که به محدوده گذار برهمکنش‌های دافع و جاذب اشاره می‌کند. در سمت چپ برآمدگی نمودار انرژی، ذره به طرف دیواره جذب می‌شود و در سمت راست برآمدگی، ذره از دیواره دفع می‌شود. برای توضیح این رفتار، سمتگیری میدان نماتیک و آرایش نقص‌ها را در دو طرف برآمدگی نمودار انرژی بررسی کرده‌ایم. در شکل‌های ۳ و ۳.۱، سمتگیری میدان نماتیک و آرایش نقص‌ها ساختار یکسان در دو طرف برآمدگی نمودار انرژی ندارند. در پیکربندی جاذب یکی از نقص‌ها به طرف برآمدگی دیواره کشیده می‌شود و باعث تغییر آرایش میدان نماتیک می‌شود، در حالی که در پیکربندی دافع، ذره-نقص تقریباً ساختار چهارقطبی خود را حفظ می‌کند. به نظر می‌رسد که برآمدگی‌های دیواره موجی را می‌توان به عنوان تله برای به دام انداختن نقص‌ها به کار برد.

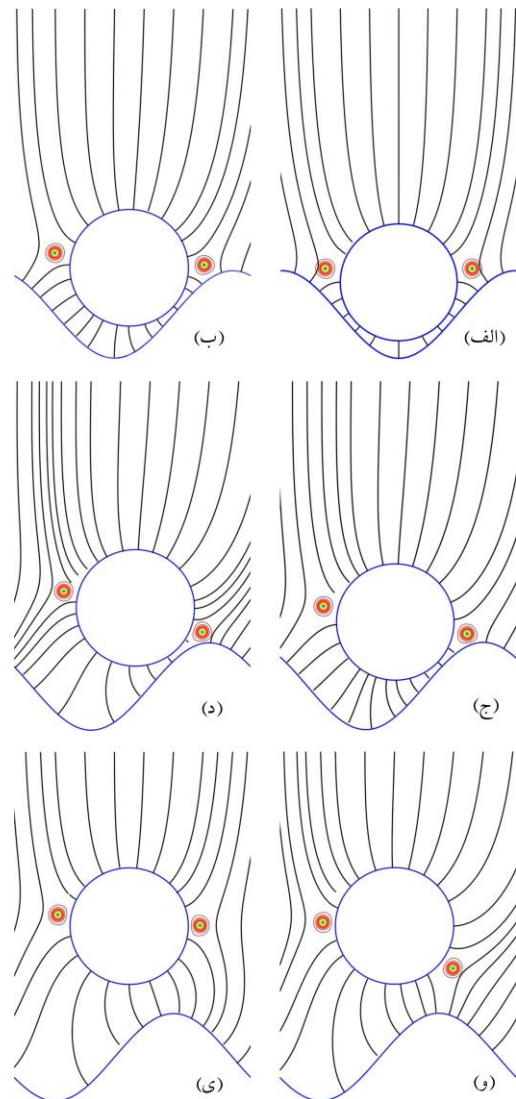
در ادامه، برای بررسی اثر دامنه نوسانات دیواره موجی بر برهمکنش ذره-دیواره، محاسبات شکل ۲ را برای دیواره‌ای با دامنه  $3R/4$  تکرار کرده‌ایم. به طور مشابه، شکل ۴ انرژی برهمکنش ذره با دیواره موجی را بر حسب فاصله ذره از دیواره ( $h$ ) در ناحیه‌ای بین یک فرورفتگی و برآمدگی متوالی  $(0 \leq d \leq \lambda/2)$  نشان می‌دهد.

به طور مشابه مربوط به قرار گرفتن ذره در فرورفتگی دیواره است که مختصات آن به صورت  $(d, h) = (0, 1/30R)$  داده می‌شود.

شیب انرژی برهمکنش بلندبرد ذره-دیواره در  $d \geq \lambda/4$  مثبت است. مثبت‌ترین شیب در انرژی مربوط به قرار گرفتن ذره در امتداد برآمدگی دیواره است ( $d = \lambda/16$ ). در اینجا میدان نماتیک و آرایش نقص‌ها (مانند  $d = 0$ )، سمتگیری متقارن خود را حول ذره حفظ می‌کند، ولی به خاطر سمتگیری واگرایی میدان نماتیک در برآمدگی‌ها، ابعاد فضایی انحراف‌های کشسان در  $d = \lambda/16$  بیشتر از موقعیت  $d = 0$  است. به عبارت دیگر، سوق ذره به طرف فرورفتگی‌ها، مساحت انحراف‌های کشسان را به خاطر سمتگیری همگرایی میدان نماتیک کوچک می‌کند.

شکل‌های ۵. الف-د، سمتگیری میدان نماتیک و آرایش نقص‌ها را در نقاط کمینه انرژی برهمکنش ذره-دیواره به ترتیب در موقعیت‌های  $d = 0$ ،  $d = \lambda/16$ ،  $d = 2\lambda/16$  و  $d = 3\lambda/16$  نشان می‌دهد که شکل ۵. الف مربوط به پیکربندی تعادلی ذره-دیواره است. در این پیکربندی که ذره به دیواره قفل می‌شود، سمتگیری میدان نماتیک و نقص‌ها ساختار متقارنی در داخل فرورفتگی دارند. ولی به دلیل محدودیت فضایی ذره در نزدیکی دیواره، نقص‌ها جابه‌جایی به طرف بالا نشان می‌دهند. در تشابه با دیواره‌ای با دامنه کوچک‌تر، در شکل‌های ۵. ب-د، میدان نماتیک اطراف ذره سمتگیری متقارنی ندارد به طوری که یکی از نقص‌ها از فرورفتگی دیواره دور و دیگری به برآمدگی مجاور آن نزدیک می‌شود.

در محدوده نزدیک به  $d = \lambda/4$ ، برآمدگی‌های کوچکی در نمودارهای انرژی برهمکنش ذره-دیواره ظاهر می‌شود که چگونگی گذار برهمکنش‌های ذره-دیواره از پیکربندی جاذب به پیکربندی دافع (یا بالعکس) را توصیف می‌کند. شکل‌های ۵. و و ۵. ی، سمتگیری میدان نماتیک و آرایش نقص‌ها در دو طرف برآمدگی انرژی را نشان می‌دهد. مطابق نتایج برهمکنش ذره-دیواره با دامنه کوچک‌تر، در پیکربندی دافع ذره-نقص تقریباً ساختار چهارقطبی دارد، ولی در پیکربندی جاذب ذره-نقص از ساختار چهارقطبی دور می‌شود.



شکل ۵. پیکربندی‌هایی شامل سمتگیری میدان نماتیک و آرایش نقص‌های  $1/2$ - در سلول تحت بررسی با دیواره موجی به دامنه  $3R/4$ . (الف)-(د) پیکربندی‌هایی در نقاط کمینه انرژی برهمکنش ذره-دیواره، و (و)-(ی) پیکربندی‌هایی در دو طرف برآمدگی انرژی برهمکنش ذره-دیواره. مختصات ذره در هر پیکربندی  $(d, h)$ ، (الف)  $(0, 1/30R)$ ، (ب)  $(\lambda/16, 1/55R)$ ، (ج)  $(2\lambda/16, 1/85R)$ ، (د)  $(3\lambda/16, 2/10R)$ ، (و)  $(5\lambda/16, 3/10R)$  و (ی)  $(5\lambda/16, 3/10R)$ .

باعث سوق ذره به طرف فرورفتگی دیواره می‌شود. انحراف‌های شدید میدان نماتیک در فواصل بسیار نزدیک ذره به دیواره، به برهمکنش‌های دافع منجر می‌شوند که رقابت آنها با برهمکنش‌های جاذب بلندبرد سبب تشکیل کمینه‌هایی در نمودارهای انرژی ذره می‌شوند. پیکربندی تعادلی ذره-دیواره در

## ۴. نتیجه‌گیری

در توافق با نتایج تجربی و تئوری مربوط به برهمکنش یک میکرو ذره کروی با دیواره‌ای با شیارهای موجی [۱ و ۲]، محاسبات دوبعدی ما نشان می‌دهد که ذره میله‌ای بلند با قلاب شدگی عمودی (به مانند یک میکرو ذره کروی) از برآمدگی‌های دیواره موجی تحت قلاب‌شدگی عمودی دفع و به طرف

فرورفتگی‌های آن جذب می‌شود. تغییر سمتگیری میدان نماتیک بین هر فرورفتگی و برآمدگی متوالی از دیواره موجی و بازآرایی نقص‌های ضمیمه به ذره، باعث برهمکنش‌های ناهمساگرد ذره با دیواره و در نهایت سوق خودبه‌خودی ذره به طرف فرورفتگی‌ها می‌شود. افزایش دامنه دیواره موجی، برد و بزرگی قدرت برهمکنش‌ها ذره-دیواره را افزایش می‌دهد.

## مراجع

1. Y Luo, et al., *Soft Matter* **12** (2016) 6027.
2. Y Luo, et al., *Nat. Commun.* **9** (2018) 3841.
3. P G de Gennes and J Prost, "*The physics of liquid crystal*". Oxford University Press (1995).
4. C. P. Lapointe, et al., *Science* **326** (2009) 1083.
5. S Park, et al., *Phys. Rev. Lett.* **117** (2016) 277801.
6. A Fernandez-Nieves, et al., *Phys. Rev. Lett.* **99** (2007) 157801.
7. T Lopez-Leon, et al., *Nat. Phys.* **7** (2011) 391.
8. M. Yade, et al., *Phys. Rev. Lett.* **92** (2004) 185501.
9. I I Smalyukh, et al., *Phys. Rev. Lett.* **95** (2005) 157801.
10. I Musevic, et al., *Science* **313** (2006) 954.
11. J Dontabhaktuni, et al., *Proc. Natl. Acad. Sci.* **111** (2014) 2464.
12. M Skarabot, et al., *Phys. Rev. E* **73** (2006) 021705.
13. M Skarabot, et al., *Phys. Rev. E* **77** (2008) 031705.
14. U Ognysta, et al., *Phys. Rev. Lett.* **100** (2008) 217803.
15. B Senyuk, et al., *Nat. Commun.* **7** (2016) 10659.
16. N M Silvestre, et al., *Phys. Rev. E* **95** (2017) 021606.
17. K Wamsler, et al., *Soft Matter* **20** (2024) 3054.
18. M Nobili and G Durand, *Phys. Rev. A* **46** (1992) R6174.
19. S Kralj, et al., *Phys. Rev. A* **43** (1991) 2943.
20. M R Mozaffari, et al., *Soft Matter* **7** (2011) 1107.
21. F Ghavidel and M R Mozaffari, *Iran. J. Phys. Res.* **23** (2023) 281.
22. C Geuzaine and J F Remacle, *Int. J. Numer. Methods Eng.* **79** (2009) 1309.
23. G R Cowper, *Int. J. Numer. Methods Eng.* **7** (1973) 405.
24. W H Press, et al., "*Numerical Recipes*", Cambridge University Press, second ed. (1992).