

## مطالعه دو بعدی ذرات میله‌ای بلند در بلور مایع نماتیک با قلاب‌شدگی‌های مماسی و عمودی

فاطمه قویدل و محمدرضا مظفری

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه قم، قم

پست الکترونیکی: m.mozaffari@qom.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۴۰۱/۱۱/۹؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۴۰۲/۰۳/۰۴)

### چکیده

در این پژوهش، برهمکنش دو ذره میله‌ای همسان، خیلی بلند و موازی با قلاب‌شدگی‌های مماسی و عمودی را به صورت دو بعدی در بلور مایع نماتیک بررسی کرده‌ایم. محور موازی میله‌ها بر راستای میدان نماتیک در فواصل دور عمودند. قلاب‌شدگی‌های مماسی و عمودی میدان نماتیک بر روی سطح ذرات، در صفحات عمود بر محور میله‌ها قرار دارند که منجر به رفتار دو بعدی سمتگیری میدان نماتیک در اطراف ذرات می‌شود. برای این منظور، مطالعه برهمکنش دو ذره میله‌ای در سه بعد را به مطالعه مقاطع دایره‌ای این ذرات در دو بعد محدود کرده‌ایم. میدان تعادلی نماتیک در اطراف مقاطع دایره‌ای از کمینه سازی عددی انرژی آزاد لاندائو-دوژن و انرژی سطحی قلاب‌شدگی‌ها به دست می‌آید. ذره و نقص‌های ایجاد شده سبب برهمکنش‌های کوتاه‌برد و بلند-برد بین ذرات می‌شود. در فواصل دور، برهمکنش بین ذرات در مقایسه با الکترواستاتیک رفتار چهارقطبی نشان می‌دهد و در فواصل نزدیک، انرژی برهمکنش بین ذرات نسبت به راستای میدان نماتیک رفتار مقارنی حول پیکربندی فضایی ۴۵ درجه دارد که شامل دو پیکربندی تعادلی در صفر و ۹۰ درجه است.

**واژه‌های کلیدی:** ذرات میله‌ای بلند، بلور مایع نماتیک، محاسبات دو بعدی، قلاب‌شدگی مماسی و عمودی، نقص، انرژی لاندائو-دوژن

### ۱. مقدمه

سیال میزبان منجر شود [۵]. بررسی ذرات کلونیدی در مایعات ناهمسانگرد مانند بلورهای مایع نماتیک منجر به دسته جدیدی از برهمکنش‌ها در سامانه‌های کلونیدی می‌شود [۶، ۱ و ۷]. پوشش دهی ذرات کلونیدی به وسیله مواد سطح پوشان و پلیمری به ترتیب باعث قلاب‌شدگی‌های عمودی و مماسی مولکول‌های بلور مایع نماتیک بر روی ذرات کلونیدی می‌شود [۴، ۸ و ۹]. این قلاب‌شدگی‌ها باعث انحراف‌های کشسان راستای میدان نماتیک از سمتگیری یکنواخت خود در توده می‌شود و ممکن است

امروزه مطالعه برهمکنش ذرات کلونیدی در بلور مایع نماتیک بسیار مورد توجه فیزیک ماده چگال نرم قرار دارد [۱-۴]. این ذرات ابعادی از مرتبه ۱۰ نانومتر تا ۱۰۰ میکرومتر دارند و به دو شکل تعلیق (ذرات جامد) و امولوسیون (قطرات مایع) در سیال پراکنده می‌شوند. به طور کلی، ذرات کلونیدی کاربرد زیادی در رنگ‌ها، غذاها و داروها دارند. موازنه بین برهمکنش‌های جاذب و دافع چنین ذراتی می‌تواند به پایداری ساختارهای کلونیدی در

دارد که در آن از انبرک‌های لیزری به عنوان ابزاری برای کنترل ساختارهای کلوئیدی استفاده می‌شود.

برهمکنش ذرات کروی با قلاب‌شدگی‌های عمودی اما با تقارن‌های متفاوت دوقطبی و چهارقطبی منجر به ساختارهای دو بعدی منظم با واحدهای سازنده متنوع می‌شود [۱۳]. به طور مشابه، برای ذرات کروی با قلاب‌شدگی‌های عمودی و مماسی که تقارن چهارقطبی دارند، امکان ساخت شبکه‌های دو بعدی مربعی فراهم است. در مقابل با بلورها با واحدهای سازنده اتمی، چنین ساختارهایی در حوزه ماده چگال نرم می‌توانند کاربردهای اپتیکی متنوع از خود نشان دهند [۱۴].

در مقایسه با مطالعه برهمکنش‌های سه بعدی ذرات کروی با قلاب‌شدگی‌های مماسی و عمودی [۱۵]، در این مطالعه، برهمکنش دو ذره میله‌ای همسان، موازی و خیلی بلند را از کمینه سازی عددی انرژی لاندائو-دوژن و انرژی سطحی قلاب‌شدگی مقاطع دایره‌ای این ذرات به صورت دو بعدی [۱۶] بررسی کرده‌ایم.

## ۲. مدل و روش

در این بررسی، ذرات میله‌ای (همسان و خیلی بلند) به صورت موازی در داخل محیط یکنواخت بلور مایع نماتیک فرو برده شده‌اند. مطابق شکل ۱. الف، میدان نماتیک در فواصل دور بر محور ذرات میله‌ای عمود است و قلاب‌شدگی‌های مماسی و عمودی بر روی سطح ذرات همواره در داخل صفحات عمود بر محور میله‌ها قرار دارند. در این شرایط سمتگیری میدان نماتیک در اطراف ذرات یک رفتار دو بعدی دارد. برای این منظور مطالعه برهمکنش دو ذره میله‌ای (همسان، خیلی بلند و موازی) در سه بعد را محدود به بررسی برهمکنش مقاطع دایره‌ای این ذرات در بلور مایع نماتیک دو بعدی کرده ایم. شکل ۱. ب، مقاطع دایره‌ای دو ذره میله‌ای همسان، موازی و خیلی بلند را نشان می‌دهد. این ذرات میله‌ای طول خیلی بزرگی نسبت به شعاع مقاطع دایره‌ای خود دارند ( $L_z / R \gg 1$ ). محور میله‌ها با یکدیگر موازی‌اند و بر راستای میدان نماتیک در فواصل دور عمودند ( $\hat{n}_z = 0$  یا  $\hat{n}_z \perp z$ ).

تکنیکی‌هایی را در میدان نماتیک اطراف ذرات ایجاد کند که آنها را نقص‌های توپولوژیکی<sup>۱</sup> می‌نامند. ساختار نقص‌ها در آزمایشگاه توسط میکروسکوپ اپتیکی و دو قطبشگر متقاطع مورد بررسی قرار می‌گیرد. نقص‌ها از نقطه نظر ثنوری با دو ویژگی عدد چرخش و بار توپولوژیکی دسته بندی می‌شوند. عدد چرخش سمتگیری میدان نماتیک را به طور موضعی در اطراف نقص‌ها مشخص می‌کند و بار توپولوژیکی با ویژگی‌های هندسی نقص در بلور مایع ارتباط دارد [۱۰].

با توجه به نوع قلاب‌شدگی و هندسه ذرات، زوج ذره-نقص می‌تواند در تشابه با الکترواستاتیک یک پتانسیل دوقطبی یا چهارقطبی القا کند که دلیل برهمکنش‌های بلند-برد و کوتاه-برد ناهمسانگرد بین ذرات است [۱۱ و ۱۲].

برای یک ذره کروی با قلاب‌شدگی مماسی تبهگن، دو نقص سطحی بوجوم<sup>۲</sup> در قطب‌ها ظاهر می‌شود که در آن سمتگیری میدان نماتیک در اطراف ذره، تقارن چهارقطبی دارد. چنین ذراتی در محیط‌های کلوئیدی تشکیل زنجیره می‌دهند که با راستای میدان نماتیک در فواصل دور زاویه تقریباً ۳۰ درجه می‌سازند [۹ و ۱۱]. برای ذره کروی بزرگ با قلاب‌شدگی عمودی، یک نقص نقطه‌ای هذلولی در نزدیکی یکی از قطب‌ها تشکیل می‌شود که در آن سمتگیری میدان نماتیک در اطراف ذره تقارن دوقطبی دارد. چنین ذراتی در محیط‌های کلوئیدی تشکیل زنجیره‌هایی می‌دهند که با میدان نماتیک در فواصل دور هم راستا هستند [۸ و ۱۱]. برای ذره کروی کوچک با قدرت قلاب‌شدگی عمودی ضعیف یک نقص حلقه زحلی نزدیک به ذره در صفحه استوا تشکیل می‌شود که در آن سمتگیری، میدان نماتیک در اطراف ذره تقارن چهارقطبی دارد. در این شرایط ذرات تشکیل زنجیره‌های زیگزاگ کلوئیدی می‌دهند که بر راستای میدان نماتیک در فواصل دور عمود هستند [۷ و ۱۱]. در چگالی‌های بالا از ذرات کلوئیدی با قلاب‌شدگی عمودی امکان تشکیل ساختارهای دو بعدی توسط ذرات دوقطبی یا چهارقطبی وجود دارد. تشکیل شبکه‌های منظم از این ساختارها علاوه بر دما به نحوه چیدمان ذرات نیز بستگی

۱. Topological Defects

۲. Boojum

$$F_{LdG} = L_z \int_{\Omega} \left[ \frac{A(T)}{2} Q_{ij} Q_{ji} - \frac{B}{3} Q_{ij} Q_{jk} Q_{ki} + \frac{C}{4} (Q_{ij} Q_{ji})^2 \right] dA \quad (1)$$

$$+ L_z \int_{\Omega} \frac{L_z}{4} (\partial_k Q_{ij})^2 dA,$$

داده می‌شود که  $A(T) = a_i(T - T^*)$  [۱۷]. شاخصه‌ها، در سرتاسر این مطالعه، نمایش مؤلفه‌های دستگاه دکارتی اند که جمع روی آنها زده می‌شود.  $\Omega$  فضای دوبعدی اشغال شده به وسیله بلور مایع نماتیک است.  $dA$  جزء<sup>۳</sup> انتگرال گیری دو بعدی در صفحه در برگرفته مقاطع دایره‌ای است. مطابق شکل ۱. ج اجزای انتگرال گیری مثلثی هستند.

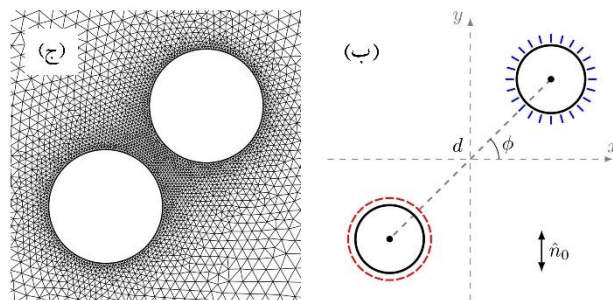
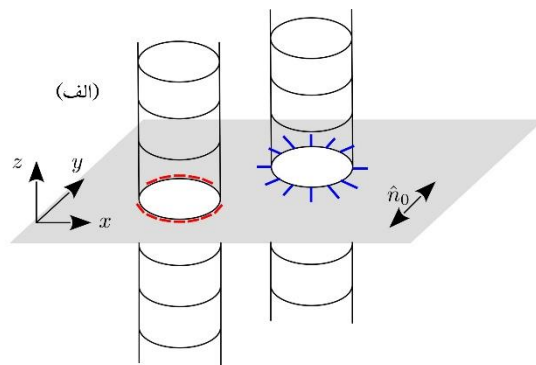
$a_i$ ،  $B$  و  $C$  پارامترهای وابسته به ماده‌اند.  $T$  دما و  $T^*$  دمای فوق سرد فاز نماتیک-همسانگردند. در فاز نماتیک، ضرایب جملات اول و دوم در بسط منفی هستند و  $C > 0$  تضمین می‌کند که قسمت موضعی چگالی انرژی آزاد از پایین محدود است.

سه جمله اول، گذار فاز نماتیک-همسانگرد در بلور مایع وابسته به دما<sup>۴</sup> را توصیف می‌کند. برای یک دمای مشخص، پارامتر نظم تعادلی در تانسور نظم از وردش قسمت موضعی چگالی انرژی آزاد،  $f[S] = 3a_i(T - T^*)S^2/4 - BS^2/4 + 9CS^4/16$ ، به دست می‌آید:

$$S(T) = \frac{B}{6C} \left[ 1 + \sqrt{1 - \frac{24a_i(T - T^*)}{B^2}} \right]. \quad (2)$$

جمله آخر در بسط، سهم انحراف‌های کشسان میدان نماتیک در تقریب تک ثابت کشسان ضرایب فرنگ  $k_{splay} = k_{twist} = k_{bend} = 9L_e S_{eq}^2/2$  است. بزرگی پارامتر نظم در اطراف نقص‌ها از  $S_{eq}$  در توده به صفر در هسته نقص‌ها تغییر می‌کند. انرژی سمتگیری میدان نماتیک بر روی سطح ذرات را می‌توان با استفاده از انرژی سطحی

$$F_s = L_z \frac{W}{4} \int_{\partial\Omega} (Q_{ij} - Q_{ij}^s)(Q_{ji} - Q_{ji}^s) d\ell, \quad (3)$$



شکل ۱. (الف) نمایشی از آرایش فضایی دو میله همسان، خیلی بلند و موازی که در داخل بلور مایع نماتیک یکنواخت با سمتگیری  $\hat{n}$  فرو برده شده‌اند. قلاب‌شدگی‌های مماسی و عمودی در روی صفحات عمود بر محور میله‌ها قرار دارند. (ب) نمایشی از مقاطع دایره‌ای دو ذره میله‌ای به شعاع  $R$  ( $0.5 \mu m$ ) که با دو پارامتر  $d$  و  $\phi$  در محیط دو بعدی مشخص می‌شوند. میدان نماتیک بر روی محیط مقاطع دایره‌ای ذرات قلاب‌شدگی مماسی و عمودی دارد. (ج) تجزیه محیط دو بعدی اشغال شده توسط بلور مایع نماتیک به اجزای مثلثی. ابعاد مثلث‌ها به خاطر تغییرات سریع میدان نماتیک در اطراف ذرات به صورت غیر یکنواخت انتخاب می‌شود.

فاز نماتیک تک محوری<sup>۱</sup> به طور موضعی توسط یک تانسور  $3 \times 3$ ، متقارن ( $Q_{ij} = Q_{ji}$ ) و بدون رد ( $Tr Q = 0$ ) به صورت،  $Q_{ij} = (S/2)(3\hat{n}_i\hat{n}_j - \delta_{ij})$  توصیف می‌شود. بزرگی پارامتر نظم  $S$  و راستای میدان نماتیک  $\hat{n}$  به ترتیب برابر بزرگ‌ترین ویژه مقدار تانسور نظم  $\lambda_{max}$  و ویژه بردار متناظر با آن است.

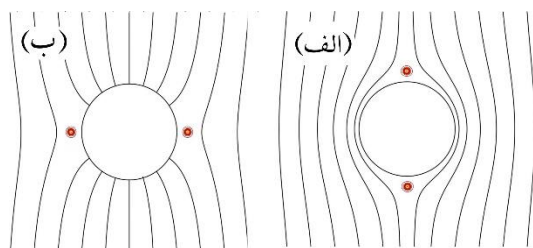
انرژی آزاد لاندائو-دوژن<sup>۲</sup> بر حسب توان‌ها و مشتقات فضایی تانسور نظم به صورت،

۱. Uniaxial

۲. Landau de-Gennes

۳. Element

۴. Thermotropic



شکل ۲. سمتگیری میدان نماتیک و آرایش نقص‌ها در اطراف مقاطع دایره‌ای دو ذره میله‌ای خیلی بلند و موازی با (الف) قلاب‌شدگی مماسی و (ب) قلاب‌شدگی عمودی. رخ‌نمای پارامتر نظم برای مقادیر کوچک‌تر از مشخص شده است.

چگالی انرژی در غیاب انحراف‌های کشسان میدان نماتیک است. در معادله (۵)، چگالی انرژی موضعی نسبت به مقدار تعادلی خود (یعنی  $\hat{f}[\hat{S}_{eq}]$ ) مقایسه می‌شود که  $S_{eq} = (1 + \sqrt{-24\tau\eta^2}) / 6\eta$ .  $\xi = \sqrt{LC/\eta^2 B^2}$  یک طول همدوسی نوعی در فاز نماتیک و  $w = WC/\eta^2 B^2$  طول قلاب‌شدگی انرژی سطحی است. در اینجا  $\xi$  و  $w$  مشخصه‌های طولی مدل هستند. تمامی طول‌ها در شکل بی بعد انرژی با مشخصه طولی هندسه (یعنی  $R$ ) مقیاس می‌شوند،  $\partial_k = (1/R)\hat{\partial}_k$  و  $dA = R^2 d\hat{A}$  و  $d\ell = R d\hat{\ell}$  [۲۲].

در این مطالعه، از روش اجزای محدود [۲۳] و بسته منبع باز Gmsh برای تجزیه ناحیه دو بعدی به اجزای مثلثی استفاده می‌شود [۲۴]. عناصر تانسور نظم به طور خطی در داخل هر مثلث تقریب زده می‌شوند. اعتبار تقریب خطی به مشتقات عناصر تانسور نظم در داخل هر مثلث بستگی دارد که با ابعاد آنها کنترل می‌شود. به واسطه شرایط مرزی مماسی و عمودی روی ذرات، بیشترین انحراف‌های کشسان میدان نماتیک در نزدیکی سطح ذرات اتفاق می‌افتد. برای این منظور ابعاد اجزای  $d\hat{A}$  در نزدیکی ذرات از مرتبه طول همدوسی فاز نماتیک در نظر گرفته می‌شود. در فواصل دور از ذرات که میدان نماتیک انحرافی را تحمل نمی‌کند، ابعاد اجزای  $d\hat{A}$  از مرتبه ابعاد هندسی ذرات انتخاب می‌شود (مطابق شکل ۱ ج). انتگرال‌گیری‌ها بر روی اجزاء مثلثی به صورت عددی و بر اساس روش گوسی محاسبه می‌شود [۲۵]. برای هر پیکربندی فضایی ذرات، تانسور نظم تعادلی از کمینه‌سازی شکل بی بعد انرژی کل بر واحد طول معادله (۵)، به روش عددی تکرار گرادیان مزدوج محاسبه

به دست آورد [۱۸] که  $W$  قدرت قلاب‌شدگی و  $Q_{ij}^s = (S_i/2)(3\hat{v}_i\hat{v}_j - \delta_{ij})$  تانسور نظم مرجح بر روی محیط مقاطع دایره‌ای ذرات است.  $\hat{v}$  بردار یکه موضعی قلاب‌شدگی‌های مماسی و عمودی است و  $S_i$  بزرگی پارامتر نظم بر روی سطح ذرات است که معمولاً برابر با بزرگی پارامتر نظم در توده  $S_{eq}$  انتخاب می‌شود.  $d\ell$  جزء انتگرال‌گیری روی محیط مقاطع دایره‌ای است.

پارامترهای انرژی لاندائو-دوژن و قدرت قلاب‌شدگی برای بلورمایع نماتیک ۵CB به صورت  $a_i = 0.087 \times 10^6 \text{ J/m}^2 \text{ K}$ ،  $S_{eq} = 0.533$ ،  $C = 1/73 \times 10^6 \text{ J/m}^2$ ،  $B = 2/12 \times 10^6 \text{ J/m}^2$  و  $T^* = 307/15 \text{ K}$ ،  $L_i = 4 \times 10^{-11} \text{ J/m}$ ،  $W = 10^{-7} \text{ J/m}^2$  و  $T = 305/17 \text{ K}$  انتخاب می‌شود [۱۹ و ۲۰].

در این مطالعه، صرفاً اثر انحراف‌های کشسان و همچنین اثر قلاب‌شدگی سطحی میدان نماتیک را در حضور ذرات کلونیدی بررسی می‌کنیم. برای این منظور، قسمت موضعی چگالی انرژی لاندائو-دوژن را از مقدار تعادلی آن کسر کرده و انرژی کل در واحد طول را به صورت:

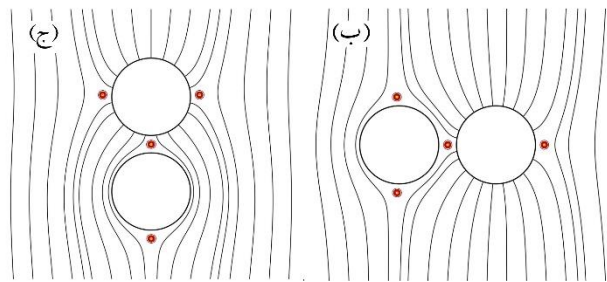
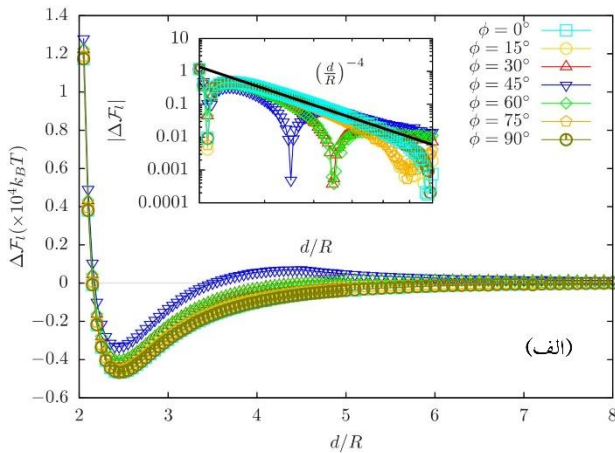
$$F_\ell = [F_{ldg} - f[S_{eq}]\Omega + F_s] / L_c \quad (4)$$

بررسی می‌کنیم. برای سادگی محاسبات، از نمایش بی بعد انرژی برای تقلیل پارامترهای سامانه استفاده کرده‌ایم که امکان مقایسه مشخصه طولی هندسه (یعنی  $R$ ) با مشخصه‌های طولی مدل را فراهم می‌کند.

در ادامه، پارامتر نظم را توسط یک ضریب مقیاس  $\eta$  به صورت  $S = \eta(B/C)\hat{S}$  باز تعریف کرده‌ایم [۲۱]. نمایش بی بعد انرژی کل بر واحد طول به صورت:

$$\hat{F}_\ell = \int_{\hat{\Omega}} \left[ \frac{\tau}{2} q_{ij} q_{ji} - \frac{1}{3\eta} q_{ij} q_{jk} q_{ki} + \frac{1}{4} (q_{ij} q_{ji})^2 - \hat{f}[\hat{S}_{eq}] \right] d\hat{A} \quad (5)$$

$+ \frac{1}{2} \left( \frac{\xi}{R} \right)^2 \int_{\hat{\Omega}} (\partial_k q_{ij})^2 d\hat{A}$   
 $+ \frac{1}{2} \frac{w}{R} \int_{\hat{\Omega}} (q_{ij} - q_{ij}^s)(q_{ij} - q_{ji}^s) d\hat{\ell}$ ،  
 داده می‌شود که  $\hat{F}_\ell = F_\ell / R^2 f$ ،  $\eta = \sqrt{C}$ ،  $f_s = \eta^2 B^2 / C^2$ ،  $q_{ij} = (\hat{S}/2)(3\hat{n}_i\hat{n}_j - \delta_{ij})$  و  $\tau = a_i C(T - T^*) / \eta^2 B^2 = -1/05$



شکل ۳. الف) تغییرات انرژی پتانسیل برهمکنش بر واحد طول، میله‌ای خیلی بلند و موازی با قلاب‌شدگی‌های مماسی و عمودی برحسب فاصله مرکز به مرکز  $d$  و سمتگیری‌های مختلف  $\phi$ . نمودار لگاریتمی رفتار بلند برد برهمکنش بین ذرات را نسبت به پتانسیل چهارقطبی نشان می‌دهد. سمتگیری تعادلی میدان نماتیک و آرایش نقص‌ها در اطراف ذرات برای دو پیکربندی تعادلی، (ب)  $(d = 2/45R, \phi = 90^\circ)$  و (ج)  $(d = 2/45R, \phi = 90^\circ)$ . رخ‌نمای پارامتر نظم برای مقادیر کوچک‌تر از  $0.5S_{eq}$  مشخص شده است.

در یک نمودار لگاریتمی مقایسه شده است. نتایج نشان می‌دهد که رفتار بلند-برد ذرات توافق خوبی با برهمکنش چهارقطبی در فواصل دور دارد. تغییرات انرژی در  $\phi = 45^\circ$  علاوه بر کمینه، شامل یک برآمدگی نیز است که باعث برهمکنش دافع بلند-برد بین ذرات در  $d > 2/45R$  می‌شود. کمینه در نمودارهای انرژی مشخص می‌کند که برای  $\phi < 45^\circ$ ، پیکربندی تعادلی ذرات در  $d = 2/45R$  و  $\phi = 0^\circ$  است و برای  $\phi > 45^\circ$ ، پیکربندی تعادلی ذرات در  $d = 2/45R$  و  $\phi = 90^\circ$  است. شکل‌های ۳. ب و ۳. ج به ترتیب آرایش نقص‌ها و سمتگیری میدان نماتیک را در  $\phi = 90^\circ$  و  $\phi = 0^\circ$

می‌شود که در آن معادلات اوپلر-لاگرانژ انرژی نسبت به عناصر میدان نماتیک در هر نقطه از توده و سطح به صورت:

$$\begin{cases} \tau q_{ij} - (\nu/\eta) q_{ik} q_{kj} + \\ (q_{ki} q_{lk}) q_{ij} - (\xi/R) \hat{\partial}_k q_{ij} = 0 & \text{in } \hat{\Omega} \\ (\xi/R) \hat{\nu}_k \hat{\partial}_k q_{ij} + \\ (w/R)(q_{ij} - q_{ij}^s) = 0 & \text{on } \hat{\partial}\hat{\Omega} \end{cases}$$

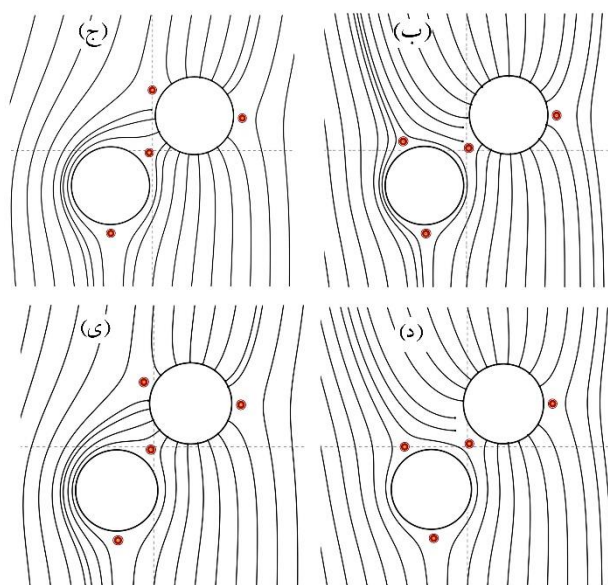
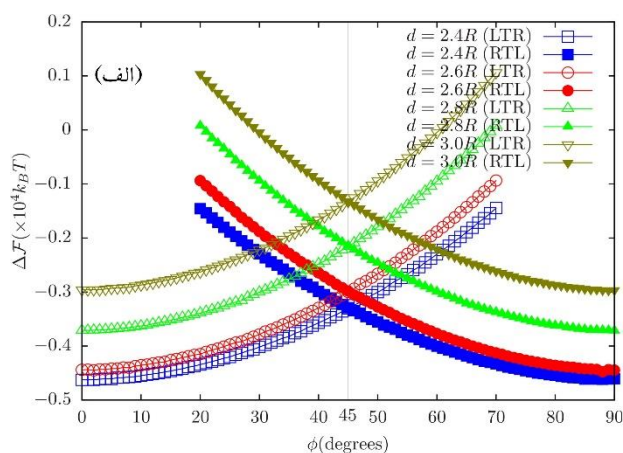
داده می‌شود. هنگامی فرایند تکرار متوقف می‌شود که تغییرات انرژی کل و تانسور نظم بی بعد در چندگام متوالی کوچک‌تر از  $10^{-6}$  باشد [۲۶].

### ۳. نتایج

شکل ۲، چگونگی سمتگیری میدان نماتیک و آرایش نقص‌ها در اطراف مقطع دایره‌ای یک ذره میله‌ای بلند با قلاب‌شدگی‌های مماسی ۲. الف و عمودی ۲. ب را نشان می‌دهد.

با وجود قلاب‌شدگی‌های متفاوت و سمتگیری متفاوت نقص‌ها نسبت به میدان تعادلی نماتیک در فواصل دور، قدرت (یا عدد چرخش) نقص‌ها برای هر دو ذره یکسان و برابر  $k = -1/4$  است. برای قلاب‌شدگی مماسی، خط واصل عبوری از مرکز مقطع دایره‌ای و نقص‌ها، موازی با راستای میدان نماتیک است و برای قلاب‌شدگی عمودی، خط واصل عبوری از مرکز مقطع دایره‌ای و نقص‌ها، عمود بر راستای میدان نماتیک در فواصل دور است. در هر دو شکل، سمتگیری میدان نماتیک در اطراف ذره-نقص در تشابه با الکترواستاتیک یک چهارقطبی کشسان در محیط دو بعدی القا می‌کند [۲۷].

در ادامه، قصد داریم برهمکنش دو ذره با قلاب‌شدگی‌های مماسی و عمودی را در محیط یکنواخت بلور مایع نماتیک بررسی کنیم. شکل ۳. الف تغییرات انرژی کل در واحد طول (یا تغییرات انرژی پتانسیل برهمکنش بین دو ذره) را برحسب فاصله بین ذرات  $d$ ، به ازای سمتگیری‌های مختلف  $\phi$  نشان می‌دهد. برای  $\phi \neq 45^\circ$ ، انرژی‌ها رفتار بلند-برد جاذب و کوتاه-برد دافع دارند. رقابت بین برهمکنش‌های جاذب و دافع باعث تشکیل کمینه‌هایی در نمودار انرژی می‌شود. تغییرات انرژی در فواصل دور ( $d > 6R$ ) مستقل از زاویه سمتگیری  $\phi$  است. پتانسیل برهمکنش ذرات به ازای سمتگیری‌های مختلف با رابطه



شکل ۴. الف) تغییرات انرژی پتانسیل برهمکنش بر واحد طول،  $\Delta F_\ell = F_\ell(d, \phi) - F_\ell(d = 8R, \phi = 0^\circ)$ ، بین مقاطع دایره‌ای دو ذره میله‌ای خیلی بلند و موازی با قلاب‌شدگی‌های مماسی و عمودی بر حسب زاویه در فواصل نزدیک. تغییرات انرژی برای هر فاصله جدایی در دو شاخه چپ (به راست) و راست (به چپ) محاسبه شده است. (ب) - (ی) سمگگیری تعادلی میدان نماتیک و آرایش نقص‌های تشکیل شده در اطراف دو ذره را در نشان می‌دهد. در (ب) و (ج)  $\phi = 40^\circ$  و در (د) و (ی)  $\phi = 50^\circ$  است. رخ‌نمای پارامتر نظم برای مقادیر کوچک‌تر از  $0.5 S_{eq}$  مشخص شده است.

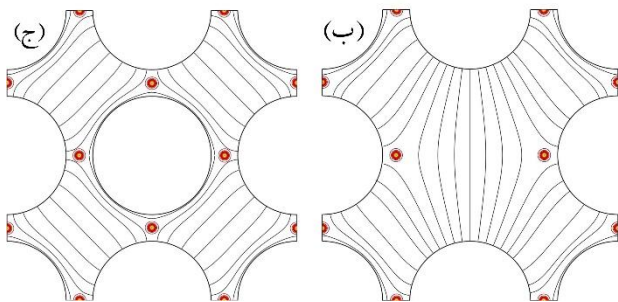
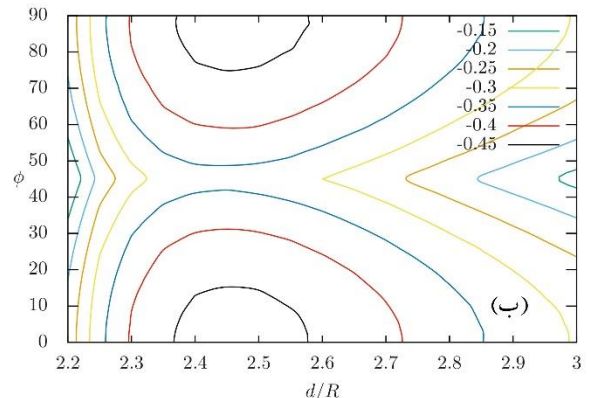
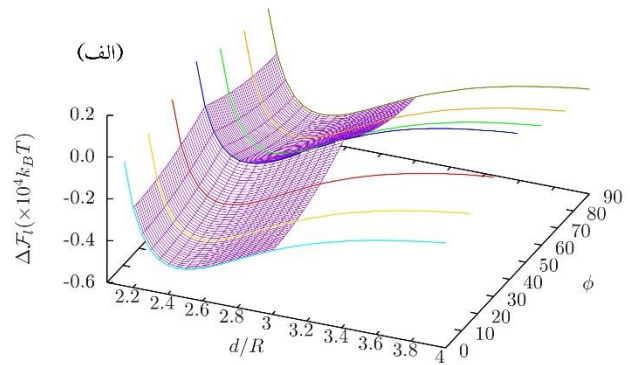
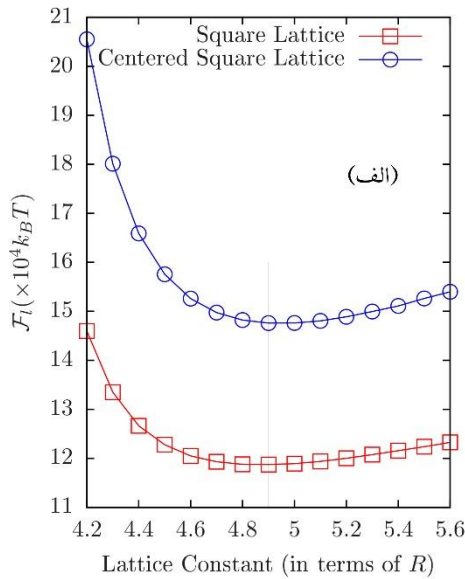
تعادلی سوق داده می‌شوند. در شکل ۵. الف، سد انرژی یک رفتار متقارنی حول نشان می‌دهد.

فاصله تعادلی  $d = 2/45R$  نشان می‌دهد. پیکربندی نقص‌ها در حالت‌های تعادل سازگار با نتایج تجربی [۱۴] و عددی [۱۵] برای ذرات کروی در سه بعد است.

برای بررسی رفتار ناهمسانگر ذرات در فواصل نزدیک، مطابق شکل ۴. الف، تغییرات انرژی کل در واحد طول را بر حسب سمگگیری فضایی  $\phi$  بررسی کرده‌ایم. به صورت عددی و در هر فاصله جدایی، شرایط اولیه سمگگیری میدان نماتیک در فرایند کمینه سازی انرژی برای هر شاخه چپ (به راست) از پیکربندی  $\phi = 0^\circ$  و برای هر شاخه راست (به چپ) از پیکربندی  $\phi = 90^\circ$  انتخاب شده است. شاخه‌های چپ و راست نمودارهای انرژی به ازای تمامی فواصل جدایی یکدیگر را در  $\phi = 45^\circ$  قطع می‌کنند. با این حال نقطه قطع برای ذرات کروی در سه بعد  $54^\circ$  به دست آمده است [۱۵].

برای هر فاصله جدایی، گشتاور نیرو وارد بر ذرات در هر دو شاخه مساوی و در خلاف جهت یکدیگر است. کمینه‌های انرژی در صفر درجه و  $90^\circ$  پیکربندی تعادلی ذرات را به ترتیب در شاخه‌های چپ و راست نشان می‌دهد. شکل‌های ۴. ب-ی، سمگگیری تعادلی میدان نماتیک و آرایش نقص‌ها در اطراف ذرات در  $d = 2/80R$  هستند. شکل‌های ۴. ب و ۴. د پیکربندی‌هایی از شاخه چپ نمودار انرژی به ترتیب در  $\phi = 40^\circ$  و  $50^\circ$  هستند، و به طور مشابه، شکل‌های ۴. ج و ۴. ی پیکربندی‌های از شاخه راست نمودار انرژی به ترتیب در  $\phi = 40^\circ$  و  $50^\circ$  هستند. از نقطه نظر انرژی، سمگگیری میدان نماتیک و آرایش نقص‌ها در شکل‌های ۴. ب و ۴. ی، پیکربندی‌های تعادلی ذرات حول  $\phi = 45^\circ$  هستند که با نتایج تجربی [۱۴] و عددی [۱۵] برای ذرات کروی در سه بعد در توافق‌اند. در تمامی فواصل جدایی ذرات، تغییرات انرژی رفتار مشابهی در  $\phi = 45^\circ$  نشان می‌دهد؛ به طوری که شکل‌های ۴. ب و ۴. ی پیکربندی‌های تبهگن در  $\phi = 45^\circ$  هستند.

شکل‌های ۵. الف و ۵. ب، بینش بهتری از رفتار ناهمسانگر تغییرات انرژی کل در واحد طول به ازای تغییرات فاصله  $d$  و زاویه  $\phi$  می‌دهد. برای هر نقطه در فضای  $(d, \phi)$ ، رویه سه بعدی تغییرات انرژی پتانسیل نشان می‌دهد که ذرات چگونه به نقاط



شکل ۶. (الف) انرژی پتانسیل برهمکنش بین ذرات در دو شبکه مربعی و مرکز مربعی مقاطع دایره‌ای ذرات میله‌ای خیلی بلند و موازی با قلاب‌شدگی‌های مماسی و عمودی برحسب ثابت شبکه. (ب) نمایش سمتگیری میدان نماتیک و آرایش نقص‌ها برای ثابت شبکه تعادلی  $4/90R$ . رخ‌نمای پارامتر نظم برای مقادیر کوچک‌تر از  $5/90R$  مشخص شده است.

که امکان تشکیل ساختارهای متنوع مربعی به وسیله کنترل ذرات توسط انبرک‌های نوری نیز وجود دارد [۱۴].

در این مطالعه، برای بررسی ساختارهای منظم دو بعدی ذرات از یک سلول مربعی با شرایط دوره‌ای میدان نماتیک استفاده می‌شود. اجزای تولید شده توسط بسته منبع باز Gmsh امکان بررسی شرایط دوره‌ای را در روش اجزای محدود فراهم می‌کند. نمودارها در شکل ۶. الف، ثابت شبکه تعادلی را برای دو شبکه مربعی (سه ذره‌ای) و مرکز مربعی (چهار ذره‌ای) با روش کمینه‌سازی انرژی مشخص می‌کند. ثابت شبکه برای هر دو شبکه برابر با  $4/90R$  به دست آورده می‌شود. محاسبات نشان می‌دهد که افزایش ذرات در شبکه باعث افزایش سطح انرژی می‌شود.

شکل ۵. (الف) تغییرات انرژی پتانسیل برهمکنش بر واحد طول  $\Delta F_l = F_l(d, \phi) - F_l(d = \sqrt{2}R, \phi = 0^\circ)$  بین مقاطع دایره‌ای دو ذره میله‌ای خیلی بلند و موازی با قلاب‌شدگی‌های مماسی و عمودی برحسب فاصله بین ذرات  $d$  و زاویه  $\phi$ . (ب) منحنی‌های هم‌تراز تغییرات انرژی پتانسیل در صفحه  $(d, \phi)$ .

تیزی سد انرژی در فواصل دور نرم‌تر می‌شود و باعث می‌شود تا پیکربندی نقص‌ها در دو طرف سد به راحتی گذارهای ساختاری کنند. شکل ۵. ب منحنی‌های هم‌تراز انرژی را در صفحه  $(d, \phi)$  نشان می‌دهد. منحنی‌ها یک رفتار متقارن حول  $\phi = 45^\circ$  دارند. نیروهای وارد بر ذرات همواره عمود بر منحنی‌ها به طرف نقاط تعادلی در فاصله  $d = 2/45R$  و زوایای  $\phi = 0^\circ$  و  $\phi = 90^\circ$  هستند.

مطالعه انرژی برهمکنش دو ذره با قلاب‌شدگی مماسی و عمودی نشان می‌دهد که ترکیب دوتایی از چنین ذراتی (به صورت نشان داده شده در شکل‌های ۳. ب و ۳. ج می‌توانند در یک بعد و در دو امتداد عمود و موازی بر میدان نماتیک، زنجیره‌های کلوئیدی تشکیل دهند. علاوه بر ساختارهای یک بعدی، نتایج آزمایشگاهی روی ذرات کروی نشان می‌دهد

یکنواخت بررسی شده است. ذرات با یکدیگر برهمکنش‌های کوتاه-برد و بلند-برد ناهمسانگرد دارند. برهمکنش ذرات رفتار متقارنی نسبت به امتداد ۴۵ درجه خط واصل ذرات با میدان نماتیک دارد. ذرات می‌توانند در دو امتداد عمود و موازی بر میدان نماتیک تشکیل زنجیره‌های کلوئیدی دهند و امکان تشکیل ساختارهای دوره‌ای در یک سلول مربعی از ذرات با قلاب‌شدگی‌های مماسی و عمودی نیز وجود دارد.

شکل ۶. ب، سمتگیری میدان نماتیک و نقص‌های ایجاد شده را برای هر دو شبکه مربعی و مرکز مربعی در فاصله تعادلی نشان می‌دهد. تشکیل شبکه‌های مربعی توخالی با ابعاد بزرگ‌تر از نقطه نظر آزمایشگاهی امکان پذیر است [۱۴].

#### ۴. نتیجه‌گیری

در این مطالعه، با کمینه‌سازی عددی انرژی لاندائو-دوژن در دو بعد، برهمکنش مقاطع دایره‌ای ذرات میله‌ای خیلی بلند و موازی با قلاب‌شدگی‌های موازی و عمودی در بلور مایع نماتیک

#### مراجع

1. B Senyuk, Q Liu, S He, R D Kamien, R B Kusner, T C Lubensky, and I I Smalyukh, *Nature* **493** (2013) 7431.
2. B Senyuk, O Puls, O M Tovkach, S B Chernyshuk, and I I Smalyukh, *Nat. Comm.* **7** (2016) 10659.
3. B Senyuk, J Aplinc, M Ravnik, and I I Smalyukh, *Nat. Comm.* **11** (2019) 1825.
4. B Senyuk, A Mozaffari, K Crust, R Zhang, J J de Pablo, and I I Smalyukh, *Science Advances* **7** (2021) 377.
5. W Russel, D Saville, and W Schowalter, "Colloidal Dispersions". Cambridge University Press, (1989).
6. P Poulin, H Stark, T C Lubensky, and D A Weitz, *Science* **275** (1997) 1770.
7. I Musevic, M Skarabot, U Tkalec, M Ravnik, and S Zumer, *Science*, **313** (2006) 954.
8. M Yada, J Yamamoto, and H Yokoyama, *Phys. Rev. Lett.* **92** (2004) 185501.
9. I I Smalyukh, O D Lavrentovich, A N Kuzmin, A V Kachynski, and P N Prasad, *Phys. Rev. Lett.* **95** (2005) 157801.
10. S Chandrasekhar, "Liquid Crystals". New York: Cambridge University Press, second ed., (1992).
11. P Poulin and D A Weitz, *Phys. Rev. E* **57** (1998) 626.
12. T C Lubensky, D Pettey, N Currier, and H Stark, *Phys. Rev. E* **57** (1998) 610.
13. U Ognysta, A Nych, V Nazarenko, M Skarabot, and I Musevic, *Langmuir* **25** (2009) 12092.
14. U M Ognysta, A B Nych, V A Uzunova, V M Pergamenschik, V G Nazarenko, M Škarabot, and I Musevic, *Phys. Rev. E* **83** (2011) 041709.
15. Z Eskandari, N M Silvestre, M Tasinkevych, and M M Telo da Gama, *Soft Matter* **8** (2012) 10100.
16. M Tasinkevych and D Andrienko, *Eur. Phys. J. E* **21** (2006) 10065.
17. P G de Gennes and J Prost, "The physics of liquid crystal". Oxford university press, (1995).
18. M Nobili and G Durand, *Phys. Rev. A* **46** (1992) R6174.
19. S Kralj, S Zumer, and D W Allender, *Phys. Rev. A* **43** (1991) 2943.
20. H Stark, *Physics Reports* **351** (2001) 387.
21. J Fukuda, H Stark, M Yoneya, and H Yokoyama, *Phys. Rev. E* **69** (2004) 041706.
22. S R Seyednejad, M R Mozaffari, T Araki, and E Nedaee Oskoe, *Phys. Rev. E* **98** (2018) 032701.
23. M R Mozaffari, M Babadi, J Fukuda, and M R Ejtehadi, *Soft Matter* **7** (2011) 1107.
24. C Geuzaine and J F Remacle, *International Journal for Numerical Methods in Engineering* **79** (2009) 1309.
25. G R Cowper, *International Journal for Numerical Methods in Engineering* **7** (1973) 405.
26. W H Press, S A Teukolsky, W T Vetterling, and B P Flannery, "Numerical Recipes", Cambridge University Press, second ed., (1992).
27. M Tasinkevych, N M Silvestre, P Patricio, and M M Telo da Gama, *Eur. Phys. J. E* **9** (2002) 341.