

УДК 621.38:537.533.3:532.783

В.І. КОЦУН, канд. техн. наук, зав. каф., Приватний вищий навчальний заклад "Європейський університет", Львів

МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ ФОРМУВАННЯ ГРАДІЄНТНОГО СВІТЛОВОДУ В ШАРІ НЕМАТИЧНОГО РІДКОГО КРИСТАЛА

Досліджено ступінь впорядкованості та профіль директора модельного рідкого кристалу, який утримується в порі з гомеотропними граничними умовами в різних мезогенних фазах. За допомогою методу молекулярної динаміки виконано комп'ютерне моделювання процесу формування градієнтного світловода під дією електричного поля. Лл.: 3. Бібліогр.: 10 назв.

Ключові слова: градієнтні світловоди, рідкі кристали, молекулярна динаміка.

Постановка проблеми та аналіз літератури. Планарні світловоди використовуються в оптичних колах обробки та передачі інформації як пасивні, активні та з'єднувальні елементи ланцюгів таких кіл. В сучасних умовах для їх виготовлення найчастіше використовують тверді речовини. У твердотільних планарних світловодних системах існує проблема створення активних та пасивних елементів на основі одного матеріалу. При застосуванні середовищ із різними оптичними властивостями спостерігаються значні втрати оптичного випромінювання на межах розділу різних матеріалів. Одним зі шляхів вирішення цієї проблеми є застосування рідкокристалічних (РК) матеріалів як активного середовища планарних світловодів, які характеризуються високою анізотропією показника заломлення, високою чутливістю до зовнішніх електричного та магнітного полів та широким діапазоном робочих температур. Однак для їх застосування необхідно дослідити процеси поширення оптичного випромінювання (в тому числі лазерного видимого діапазону) у світловодах з рідкокристалічною серцевиною, зокрема явища розсіювання світла та ефекти, що виникають під час проходження світла в неоднорідно орієнтованих шарах рідких кристалів. Тому моделювання процесу формування градієнтного світловода та відповідно розподілу напрямку директора в шарі нематичного рідкого кристалу (НРК) з початковою гомеотропною орієнтацією в зовнішньому електричному полі, дасть можливість досконало вивчити градієнтні світловоди з рідкокристалічною серцевиною.

Для моделювання РК систем можна скористатись тими ж методами, які використовуються для дослідження властивостей рідин виконавши деякі узагальнення на випадок анізотропії взаємодії між мезогенами [1 –

3]. В основі будь-якої комп'ютерної симуляції лежить потенціал взаємодії, який описує (із певним рівнем деталізації) мікроскопічну енергетику, характерну для системи. Так, спочатку задається відповідний термодинамічний ансамбль: певна кількість молекул поміщається в комірку і на неї накладаються умови, наприклад, постійної кількості частинок N , об'єму V (або тиску P) і температури T [2]. Досліджуючи об'ємні властивості, застосовують періодичні граничні умови, під час дослідження поверхневих явищ у напрямку однієї з просторових осей створюється атомарна або континуальна стінка. Для опису ізотропної та нематичної фаз достатнім є використання комірки постійної форми (як в NVT , так і в NPT ансамблях). Сметичні ж фази характеризуються значною анізотропією, і їхня самоорганізація може ускладнитись несумірністю метрики фази із формою комірки. Індикатором цього є значна анізотропія тензора тиску у разі розміщення такої системи в комірці із постійною формою [4]. В таких випадках ефективним є використання ансамблів із змінною формою комірки, наприклад, у найзагальнішій формі Паррінелло-Рамана [5], або у простішій формі $NP_{xx}P_{yy}P_{zz}T$, в останньому випадку забезпечується постійність кожної з діагональних компонент тиску. Їх обчислюють за методикою, згідно з якою спочатку обчислюється тензор впорядкування, а потім він діагоналізується [6, 7]. Альтернативний метод базується на обчисленні далекосяжних орієнтаційних кореляцій [8]. Для аналізу структури фази, якій властиве трансляційне впорядкування, ведеться обчислення парних кореляційних функцій.

Мета роботи – визначення ступеня впорядкованості та напрямку директора НРК.

Моделювання. Комп'ютерне моделювання молекулярних моделей в цій роботі виконане за допомогою програми GBMOLDD – паралельна програма молекулярної динаміки із алгоритмом просторового розбиття [9].

В основі комп'ютерного моделювання лежить потенціал взаємодії, який описує мікроскопічну енергетику, характерну для системи. Для моделювання РК систем використовують класичні двочастинкові потенціали, які враховують квантово-механічні ефекти лише в ефективний спосіб. В цій роботі нами використано потенціал Гей-Берне:

$$U_{ij}^{(GB)}(\hat{u}_i, \hat{u}_j, \hat{r}_{ij}) = \sigma_{ij}^{(GB)}(\hat{u}_i, \hat{u}_j, \hat{r}_{ij}) \times \left[(\rho_{ij}^{(GB)}(\hat{u}_i, \hat{u}_j, \hat{r}_{ij}))^{12} - (\rho_{ij}^{(GB)}(\hat{u}_i, \hat{u}_j, \hat{r}_{ij}))^6 \right], \quad (1)$$

де u_i , u_j – орієнтації довгих осей відповідно i -ї та j -ї молекул, r_{ij} – одиничний радіус-вектор між їх центрами,

$$\rho_{ij}^{(GB)} = \frac{\sigma_0^{(GB)}}{r_{ij} - \sigma^{(GB)}(\hat{u}_i, \hat{u}_j, \hat{r}_{ij}) + \sigma_0^{(GB)}} \quad (2)$$

зсунута контактна відстань між молекулами, а

$$\sigma_{ij}^{(GB)}(\hat{u}_i, \hat{u}_j, \hat{r}_{ij}), \quad \sigma^{(GB)}(\hat{u}_i, \hat{u}_j, \hat{r}_{ij}) \quad (3)$$

відповідно енергетичний параметр та ефективна сепарація між i -ю та j -ю молекулами, залежні від їх взаємного розташування та орієнтацій [Gay-Berne].

Програмний засіб GBMOLDD дає змогу отримувати розподіл напрямку директора в будь-якій області комірки та відповідну величину параметра впорядкування, який безпосередньо пов'язаний із значенням показника заломлення [5, 7].

Базовими вхідними даними для програми є: n_x , n_y , n_z – кількість молекул, відповідно, по осі x , y та z ; f_{srf} – величина сили зчеплення приповерхневих шарів; T – температура моделювання; f_{el} – величина поля, яка діє на молекули РК.

Результати програми записуються у файли двох типів: *.coord та instant.lst. Файли типу *.coord дають змогу візуально відобразити переорієнтацію молекул у шарі РК, а відповідно і напрям директора молекул instant.lst дає змогу отримати числові значення параметра порядку, які в подальшому обробляються для отримання зміни показника заломлення в шарі РК під дією електричного поля.

Першим завданням моделювання було визначення модельного значення температури, при якій утворювалась нематична фаза рідкого кристала.

Початкове розташування молекул, з якої починається моделювання, наведена на рис. 1, а. На рис. 1, б представлено розташування молекул в ідеальній смектичній А-фазі ($T = 400$ К) де спостерігаємо пошарове розташування молекул, як у примезових областях так і в середній області. Параметр порядку, отриманий після аналізу файлу instant.lst, для такої структури $S = 0,82$.

З подальшим збільшенням температури до $T = 500$ К (рис. 1, в, г) молекули, які розташовані близько до обмежуючих поверхонь, зберігають гомеотропний стан, а з віддаленням від поверхні починається розупорядкування молекул, зумовлюючи перехід у нематичну фазу про що свідчить зменшення величини параметру порядку до $S = 0,6$.

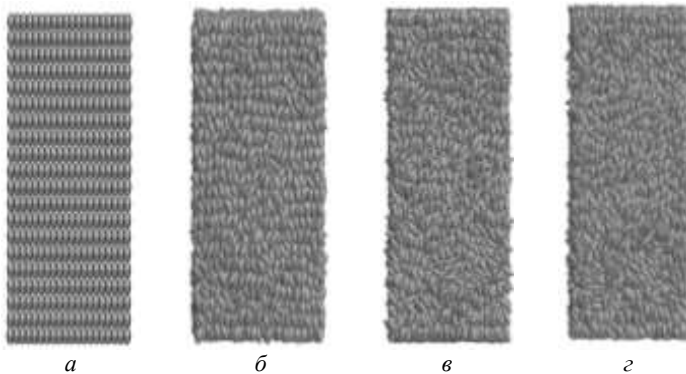


Рис. 1. Змодельовані текстури: *a* – початкове розташування молекул; *б* – смектична фаза, $T = 400$ К; *в* – початкова фаза нематика, $T = 450$ К; *г* – нематична фаза, $T = 500$ К

Подальше збільшення модельного значення температури приводить до повного розупорядкування в розташуванні молекул тобто переходу нематичної фази в ізотропну рідину. Параметр порядку при цьому дорівнює $S = 0,2$. Тому для подальшого моделювання було обрано модельну температуру $T = 500$ К, при якій існує нематична фаза.

Розглянемо поведінку молекул НРК з початковою гомеотропною орієнтацією під дією модельного електричного поля величиною $f_{el} = 0,6$. На рис. 2 показано процес зміни орієнтації молекул за певний проміжок часу після прикладання модельного електричного поля. Як видно з рисунків, процес переорієнтації молекул починається зі збурення початкової гомеотропної текстури (рис. 2, *a*). В подальшому спостерігається переорієнтація центральної частини шару РК рис. 2, *б*. В результаті, через певний проміжок часу відбувається переорієнтація більшості молекул РК в напрямку дії поля, внаслідок чого утворюється планарно орієнтований шар, однак у приповерхневих ділянках зберігаються гомеотропно орієнтовані шари. Таке розташування молекул у шарі нематичного рідкого кристала є аналогом градієнтного світловоду (рис. 2, *в*), адже враховуючи, що $\Delta n = n_{\parallel} - n_{\perp}$, величина Δn змінюється від мінімального значення (приповерхневі області) до максимального (центральної області).

Отримані результати моделювання добре узгоджуються з експериментальними даними описаними в роботі [10].

Проаналізувавши дані з файлу `instant.lst` отримуємо числові значення параметра порядку, які в подальшому обробляються для

отримання розподілу директора та зміни показника заломлення в шарі НРК під дією електричного поля. Типовий розподіл напрямку директора зображено на рис. 3. В даній моделі напрямок директора може приймати значення від 1 (гомеотропна орієнтація) до $-0,5$ (планарна орієнтація).

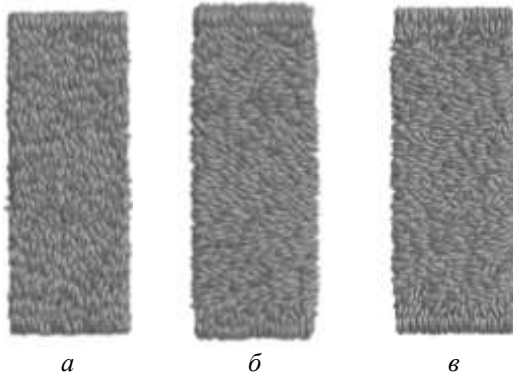


Рис. 2. Змодельовані текстури НРК: *а* – час дії електричного поля $t = 20$ пс, $T = 500$ К; *б* – час дії електричного поля $t = 180$ пс, $T = 500$ К; *в* – час дії електричного поля $t = 300$ пс, $T = 500$ К

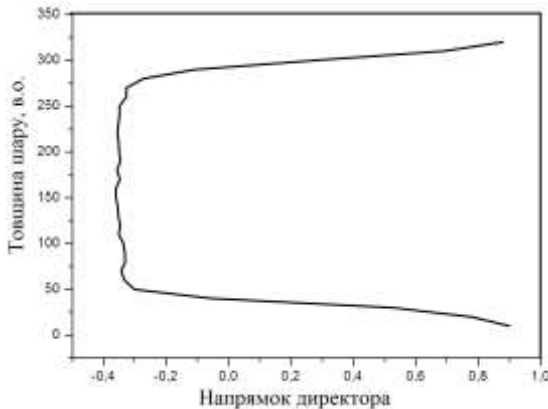


Рис. 3. Розподіл директора в шарі нематичного рідкого кристала, отриманий за результатами комп'ютерного моделювання при $T = 500$ К, стаціонарний стан при прикладенні зовнішнього електричного потенціалу

Висновки. Проведене комп'ютерне моделювання дало змогу візуально показати процес утворення планарно орієнтованого шару в

НРК та отримати розподіл напрямку директора при дії електричного потенціалу. Таке розташування молекул приводить до утворення градієнтного світловода у шарі нематичного рідкого кристала.

Список літератури: **1.** *Frenkel D.* Understanding molecular simulation, from algorithms to applications / *D. Frenkel, B. Smit* – New York: Academic, 2002. – P. 664. **2.** *Tildesley A.D.* Computer simulation of liquids / *A.D. Tildesley*. – M-Oxford: Oxford University Press, 1986. – P. 301. **3.** *Rapaport D.* The art of molecular dynamics simulation / *D. Rapaport*. – Cambridge: Cambridge University Press, 1995. – P. 414. **4.** *Dominguez H.* Stress anisotropy in liquid crystals / *H. Dominguez, E. Velasco, J. Alejandro* // *Mol. Phys.* – 2002. – Vol. 100. – №. 16. – P. 2739-2744. **5.** *Parrinello M.* Crystal structure and pair potentials: A molecular-dynamics study / *M. Parrinello, A. Rahman* // *Phys. Rev. Let.* – 1980. – Vol. 45. – №. 14. – P. 1196. **6.** *Eppenga R.* Monte Carlo study of the isotropic and nematic phases of innitely thin hard platelets / *R. Eppenga, D. Frenkel* // *Mol. Phys.* – 1984. – Vol. 58. – №. 6. – P. 1303-1334. **7.** *Vieillard-Baron J.* The equation of state of a system of hard spherо cylinders / *J. Vieillard-Baron* // *Mol. Phys.* – 1974. – Vol. 28. – №. 3. – P. 809-818. **8.** *Zannoni C.* Computer simulations / *C. Zannoni* // *Molecular Physics of Liquid Crystals*. – 1979. – P. 191-220. **9.** *Ihnytskyi J.* Molecular dynamics simulations of various branched polymeric liquid crystals / *J. Ihnytskyi, D. Neher, M. Saphiannikova, M. Wilson, L. Stimson* // *Molecular Crystals and Liquid Crystals*. – 2008. – Vol. 496. – P. 186–201. **10.** *Hotra Z.* New method of the threshold voltages determination of a cholesteric-nematic transition / *Z. Hotra, Z. Mykytyuk, O. Hotra, et al.*, // *Molecular crystal and liquid crystal*. – 2011. – Vol. 535. – P. 225-232.

Bibliography (transliterated): **1.** *Frenkel D.* Understanding molecular simulation, from algorithms to applications / *D. Frenkel, B. Smit* – New York: Academic, 2002. – P. 664. **2.** *Tildesley A.D.* Computer simulation of liquids / *A.D. Tildesley*. – M-Oxford: Oxford University Press, 1986. – P. 301. **3.** *Rapaport D.* The art of molecular dynamics simulation / *D. Rapaport*. – Cambridge: Cambridge University Press, 1995. – P. 414. **4.** *Dominguez H.* Stress anisotropy in liquid crystals / *H. Dominguez, E. Velasco, J. Alejandro* // *Mol. Phys.* – 2002. – Vol. 100. – №. 16. – P. 2739-2744. **5.** *Parrinello M.* Crystal structure and pair potentials: A molecular-dynamics study / *M. Parrinello, A. Rahman* // *Phys. Rev. Let.* – 1980. – Vol. 45. – №. 14. – P. 1196. **6.** *Eppenga R.* Monte Carlo study of the isotropic and nematic phases of innitely thin hard platelets / *R. Eppenga, D. Frenkel* // *Mol. Phys.* – 1984. – Vol. 58. – №. 6. – P. 1303-1334. **7.** *Vieillard-Baron J.* The equation of state of a system of hard spherо cylinders / *J. Vieillard-Baron* // *Mol. Phys.* – 1974. – Vol. 28. – №. 3. – P. 809-818. **8.** *Zannoni C.* Computer simulations / *C. Zannoni* // *Molecular Physics of Liquid Crystals*. – 1979. – P. 191-220. **9.** *Ihnytskyi J.* Molecular dynamics simulations of various branched polymeric liquid crystals / *J. Ihnytskyi, D. Neher, M. Saphiannikova, M. Wilson, L. Stimson* // *Molecular Crystals and Liquid Crystals*. – 2008. – Vol. 496. – P. 186–201. **10.** *Hotra Z.* New method of the threshold voltages determination of a cholesteric-nematic transition / *Z. Hotra, Z. Mykytyuk, O. Hotra, et al.*, // *Molecular crystal and liquid crystal*. – 2011. – Vol. 535. – P. 225-232.

Надійшла (received) 28.03.2014

Статтю представив д-р техн. наук НУ "ЛПІ" Фечан А.В.

Kotsun Vladimir, PhD. Ph.D, Associate Professor
Private Higher Educational Institution "European University"
e-mail: v_kotsun@ukr.net