

**МОДИФИКАЦИЯ ПОЛИМЕРНО-ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ КОМПОЗИТОВ
УГЛЕРОДНЫМИ НАНОТРУКАМИ**

Эгамов М.Х.

Горно-металлургический институт Таджикистана,

г. Чкаловск, Республика Таджикистан

e-mail: egamov62@mail.ru

При эксплуатации электрооптических полимерно-жидкокристаллических (ЖК) ячеек, используемые в качестве переключатели лазерного излучения [1] или пространственно-временные модуляторы света с электрической или оптической адресацией [2], в основном применяют S (splay)- или T (torsion)-конфигурации, которые реализуют планарную ориентацию молекул ЖК-мезофазы на поверхности ориентирующей поверхности (расположение молекул ЖК вдоль поверхности подложки, т.е. $\theta=0^{\circ}$). Однако для ряда задач, где требуется изначальное поле при прохождении света через структуру, необходимо создание гомеотропной ориентации молекул на подложке (расположение молекул ЖК перпендикулярно поверхности подложки $\theta=90^{\circ}$) или косою (под определенным углом наклона директора $0 < \theta < 90^{\circ}$) ориентацией молекул ЖК.

Для получения планарной ориентации обычно используются ориентирующие покрытия, типа оксид церия (CeO), оксид кремния (SiO , SiO_2), оксид германия (GeO), или же натирание стеклянной поверхности хлопчатобумажной тканью [3]. В случае гомеотропной ориентации [4] используются поверхностно-активные вещества (ПАВ), такие как лецитин, цетилтриметиламмоний бромид (ЦТАБ) или плавленный кварц.

Важность определения типа ориентации вызвана тем, что энергия сцепления молекул ЖК с подложкой и условия ориентации значительно влияют на физические свойства ЖК-мезофазы и электрооптические характеристики устройств на ее основе. При рассмотрении плотности свободной поверхностной энергии F_s , тождественной межфазному поверхностному натяжению, связь между поверхностной энергией сцепления и геометрическим углом наклона ЖК к подложке определяется формулой

$$F_s = \frac{1}{2} W_s \cdot \sin^2 \theta$$

Поэтому в настоящей работе предложен другой способ гомеотропной ориентации молекул ЖК при бесконтактном методе создания рельефа на поверхности стеклянной подложки при напылении на последнюю углеродных нанотрубок (УНТ), которые дополнительно ориентировались электрическим полем. После нанесения нанотрубок ориентирующая поверхность обрабатывалась поверхностной электромагнитной волной. Источником для лазерного распыления УНТ и последующей обработкой, служил Ge-Ne лазер с поляризованным излучением на длине волны $\lambda=0,633$ мкм. Углеродные нанотрубки наносились на подложку при приложении поля напряженностью $100 \text{ В}\cdot\text{см}^{-1}$. Для контроля гомеотропной ориентации были собраны две сэндвич-ячейки с ЖК-мезофазой между двумя стеклянными поверхностями. Одна, измеряемая ячейка, представляла собой классическую нематическую ЖК-структуру, ориентирующие плоскости которой создавались методом натирания [4]. Для другой экспериментальной ячейки, обе ориентирующие поверхности обрабатывались с применением указанного выше способа на основе УНТ.

Для описания УНТ была выбрана модель идеального многогранника, что позволило не искривлять валентные углы. Каждая грань представляет собой хорду к описанной окружности, на которых расположены правильные шестиугольники с

атомами углерода в вершинах. Величина радиуса зависит от целого числа граней и определяется выражением

$$R_m = \frac{b}{2} \cdot \operatorname{tg} \beta$$

Величина $b=3 \cdot 1,42 A^0$ равна длине хорды, а $\beta = \frac{\pi}{2} \left(1 - \frac{2}{m}\right)$ - угол между радиусом окружности и хордой. Грани УНТ находится под углом

$$\alpha_k = \frac{2\pi}{m} (k-1)$$

Относительно начальной, а расположенный на k -й грани i -й атом УНТ имеет координату A_{ik} . В центре каждой грани лежат атомы A_{3k} , полярная координата которых имеет вид: $\left\{R_m, \frac{3}{2}\pi + \alpha_k\right\}$. Координаты атома A_{0k} определяется добавлением поправки к

координате атома A_{3k} в виде $\left\{\frac{3}{1}a, \alpha_k + 1\right\}$. Поправки для атомов A_{1k} и A_{2k} имеют вид:

$\left\{a, \alpha_k\right\}, \left\{\frac{1}{2}a, \alpha_k + \pi\right\}$ соответственно, где a -длина связи между атомами углерода, равная $1,42A^0$.

Приведенные расчеты показали, что для УНТ с параметрами (10,10) отклонение радиуса R_m R_0 составляет 1,3%, с параметрами (50,50) всего 0,2% , а для случаев, когда многогранник выражается в цилиндр, отклонение радиусов стремится к нулю.

Из физических соображений понятно, что диаметр УНТ не может меняться непрерывно и зависит от целого числа звеньев в поперечном сечении углеродной нанотрубки. Поэтому варьировать диаметр УНТ можно, изменяя значение m . Модель молекулы цианобифенила (5CB), как представитель жидкого кристалла, была построена по координатам атомов. При этом в расчетах группы СН были заменены модельными атомами, энергия взаимодействия которых достаточно хорошо описывает взаимодействия указанной группы.

Энергия взаимодействия представляется в виде суммы величин энергии взаимодействия между атомами молекулы цианобифенила и атомами УНТ, которая определяется потенциалом Леннард-Джонса:

$$E_{ij} = \frac{A}{R_{ij}^{12}} + \frac{B}{R_{ij}^6}$$

где A, B – эмпирические параметры; $A = -5,31 \cdot 10^6$ Дж·моль⁻¹·А^{0 6}; $B = 1,15 \cdot 10$ Дж·моль⁻¹·А^{0 12}; R_{ij} – расстояние между атомом УНТ (i) и атомом молекулы цианобифенила (j). Для величины R_{ij} в неподвижной системе координат были получены следующие выражения:

$$\begin{aligned} R_{ij}^2 = & (r_j \cdot \cos \theta_j + r_i \cdot \sin \theta_i \cdot \sin \varphi_i)^2 + \\ & + (r_j \cdot \sin \theta_j \cdot \cos \varphi_j - r_i \cdot \sin \theta_i \cdot \cos \varphi_i - a)^2 + \\ & + (r_j \cdot \sin \theta_j \cdot \sin \varphi_j + l \cdot b - r_i \cdot \cos \theta_i)^2 \end{aligned}$$

при $\theta=90^0$ и $\varphi=90^0$; здесь b -расстояние между молекулами одного слоя; a -расстояние между двумя модельными слоями; l – число молекул в слое.

Результаты расчета для зависимости энергии взаимодействия систем цианобифенил-поверхность УНТ типа (m, m) при различных диаметрах УНТ, начиная с (10,10) до (50,50) с шагом одно звено, показали, что молекула цианобифенила

располагается вдоль оси Z как в первом, так и во втором случае. При этом, когда молекула цианобифенила (5CB) находится в центре УНТ, с ростом диаметра УНТ энергия убывает по абсолютной величине до нуля. В случае, когда молекулы 5CB плотно прилегают к внутренней поверхности УНТ, энергия взаимодействия по абсолютной величине начинает уменьшаться и достигает минимума при диаметрах трубки во много раз. Следовательно, молекула 5CB энергетически выгодно при больших диаметрах УНТ плотно прилегать к стенкам, чем находиться в центре.

Полученные нами результаты хорошо согласуются с приведенными математическими расчетами [5] по определению энергии взаимодействия молекул алифатических углеводородов и мезогенов с поверхностью кристалла графита. В предельном случае, когда диаметр УНТ во много раз больше размеров плотно прилегающего цианобифенила, энергия взаимодействия стремится к энергии взаимодействия 5CB с поверхностью кристалла однослойного графена.

Литература

1. McEwen R.S. // J. Phys. E: Instrum. 1987, v.20, No4.-h.364-377
2. Васильев А.А., Касасент Д., Компанец И.Н., Парфенов А.В. Пространственные модуляторы света. М.: Радио и связь, 1987. – 320с.
3. Жаркова Г.М., Сонин А.С. Жидкокристаллические композиты. Новосибирск: Наука, 1994. – 214с.
4. Крахалев М.Н., Прищепа О.О., Зырянов В.Я., Лойко В.А., Шабанов А.В. Электроуправляемое поверхностное сцепление в композитных жидкокристаллических пленках. // Доклады БГУИР. 2008, №5(35). – с.138-140
5. Belyaev V.V. Physical Properties of Liquid Crystals: Nematics. Eds. D.A/ Dunmur, A. Fucuda, G.R. Luckhurst. London, IEE. 2000. – 414p.