



جلسه دفاع از پایان نامه کارشناسی ارشد

## بررسی دیاگرام فاز سیال RE-squared و ناهمسانگردی برهمکنشهای موثر القایی ذرات کلوئیدی در کریستال مایع نماتیک

نیلوفر فقیهی

زیر نظر

دکتر محمد رضا اجتهادی

چکیده:

در دو دهه اخیر پیشرفتهای قابل ملاحظه ای در درک رفتار سیستمهای کریستال مایع با استفاده از شبیه سازی کامپیوتری بدست آمده است. در بعضی از این مطالعات جزئیات بر همکنشی بیشتری مورد توجه قرار گرفته است و در بعضی دیگر مدل‌های مولکولی ساده تری مورد استفاده قرار می گیرد. در پتانسیل برهمکنشی متداول Gay-Berne به هر مولکول یک توزیع گوسی که نمایانگر توزیع ماده در مولکول است نسبت داده می شود و بر همکنش دو مولکول متناسب با همپوشانی دو توزیع در نظر گرفته می شود. اما این پتانسیل توجیه میکروسکوپیکی واضحی ندارد و دارای رفتار بلند برد غیر فیزیکی است. بدلیل اشکالات وارد بر این پتانسیل، اخیراً پتانسیل RE-squared بر اساس تئوری Hamaker پیشنهاد شده است که پارامترهای فیزیکی واضحی دارد و دارای رفتار بلند برد درستی است. در این مطالعه رفتار سیال RE-squared با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی جسم صلب در سامانه NVT و به کمک توابع توزیع شعاعی و تانسور نظم مرتبه دوم مورد بررسی قرار گرفته است و دیاگرام فاز آن ترسیم شده است. این مطالعه نشان می دهد سیال RE-squared فازهای همگن، نماتیک، اسمکتیک A و اسمکتیک B را از خود نشان می دهد. در نهایت نیروی وارد بر ذره کلوئیدی معلق در فاز نماتیک برای اتصال مماسی در سطح محاسبه می شود.

واژگان کلیدی: کریستال مایع، پتانسیل RE-squared، دیاگرام فاز، کلوئید

زمان: شنبه ۸۶/۹/۱۷ ، ساعت ۱۴:۰۰

مکان: آمفی تئاتر دانشکده فیزیک