

*М.Е. АГЕЛЬМЕНЕВ, З.М. МУЛДАХМЕТОВ, С.М. БРАТУХИН,
В.В. ПОЛИКАРПОВ, Г.С. БЕКТАСОВА, Д. ЕРБОЛАТУЛЫ*

(Институт органического синтеза и углехимии, Караганда)

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОВЕДЕНИЯ НЕМАТИЧЕСКИХ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛОВ ПРИ НАЛИЧИИ ВНУТРИ КЛАСТЕРА НЕСКОЛЬКИХ МОЛЕКУЛ ФУЛЛЕРЕНА C₆₀

Аннотация

В работе представлены результаты компьютерного моделирования поведения нематических жидких кристаллов (ЖК) в присутствии фуллеренов. Установлено, что с ростом температуры фуллерены сближаются в направлении директора ЖК матрицы. При этом наблюдается расширение по высоте параллелепипеда, в вершинах которого расположены фуллерены. Наличие фуллеренов способствует в целом стабилизации положения максимума плотности при температурном воздействии.

Ключевые слова: компьютерное моделирование, жидкие кристаллы, эфиры фенолов, фуллерен, кластеры, наночастица, полярные молекулы.

Кілт сөздер: компьютерлік үлгілеу, сұйық кристалдар, фенол эфирлері, фуллерен, кластерлер, нанобөлшектер, полярлық молекулалар.

Key words: computer modeling, liquid crystals, ethers of phenols, fullerene, clusters, nanoparticles, polar molecules.

Ориентирующая способность жидких кристаллов (ЖК) используется при создании электрооптических ячеек. Характерные времена электрооптического переключения в нематических ЖК обычно находятся в миллисекундном диапазоне. Существуют определенные способы улучшения времен переключения нематических ЖК-ячеек. Обычно это повышение напряжения питания и уменьшение толщины структуры. Кроме известных способов, используют физические принципы, связанные с введением в жидкий кристалл фоточувствительных компонентов. В качестве фоточувствительных компонентов могут выступать комплексы с переносом заряда между органическим донором (мономер, полимер, наночастица) [1–8] и фуллереном как сильным акцептором электронов с энергией сродства к электрону 2.3 – 2.65 эВ. Обладая повышенным дипольным моментом [9], новый комплекс приводит к увеличенной поляризуемости системы, что вызывает более эффективное ее управление при приложении внешнего электрического или светового воздействия. В [10] показано, что комплекс органический донор – фуллерен выступает как активатор процесса самоорганизации ЖК системы, обуславливая более упорядоченную укладку молекул ЖК. При этом установлено на 2 порядка сокращение времени переключения структур.

Для формирования такой системы необходимо понимание влияния молекул фуллерена на поведение ЖК. Симметричность формы фуллерена C₆₀ в окружении нематических ЖК не создает сильных пространственных возмущений. При введении в матрицу ЖК фуллеренов возможно более сложное распределение фуллеренов, которые способны модулировать пространственную упорядоченность ЖК.

Поэтому целью данной работы явились исследования влияния расположения нескольких молекул фуллерена в кластере на поведение нематических ЖК при воздействии температуры и электрического поля.

В качестве ЖК были использованы фенилпропаргиловый эфир *n*-хлорфенола (ПЕС), фенилпропаргиловый эфир *n*-фторфенола (ПЕФ), фенилпропаргиловый эфир *n*-крезола (ПЕК) [11-12].

Для проведения моделирования поведения этих соединений был использован метод молекулярной динамики на основе программы GROMACS [13] версии 3.3.1 в приближении жидкого агрегатного состояния [14-15]. При моделировании использован NPT ансамбль. Радиусы отсечки дисперсионного и кулоновского взаимодействий составляли 2 нм. Были проведены последовательные отжиги в режиме нагрева. Компьютерное моделирование было осуществлено для случая планарной ориентации молекул относительно подложки в присутствии электрического поля, направление которого было перпендикулярно подложке. Время отжига при одной температуре составляло 10 пс, но при этом кластер располагался в одной ячейке, чем было реализовано жидкое агрегатное состояние системы, а значение напряженности электрического поля составляло $1,0 \cdot 10^7$ В/м.

1 Линейное расположение молекул фуллерена

3 фуллерена располагались на расстоянии 0,6 нм (по оси OZ) (ПЕС, ПЕФ) и 0,7 нм (ПЕК) от соседней плоскости в центре кластера. Ряд, в котором находились фуллерены, был смещен относительно соседних рядов на 0,7 нм (по оси OY) (ПЕС, ПЕФ) и 0,8 нм (по оси OX) (ПЕК). Исходные кластеры жидких молекул составляли прямоугольные параллелепипеды размерами – 14x14x14 (ПЕС, ПЕФ) и 13x13x16 (ПЕК). Молекулы одной из граней XOY были заморожены и представляли подложку. Расстояния между плоскостями (OZ) составили 0,4 нм (ПЕС, ПЕФ), 0,5 нм (ПЕК); по OY – 1,6 нм для всех молекул (это направление совпадает с направлением директора); по OX – 0,8 нм (ПЕС, ПЕФ) и 0,6 нм (ПЕК). Смещение молекул в соседних рядах составляла по OY – 0,7 нм и соседние молекулы располагались антипараллельно по отношению друг другу. Направление электрического поля совпало с OZ, а направление директора – с OY. Радиус фуллерена C₆₀ составил $r=0.357$ нм [16-17].

Методика подготовки и проведения экспериментов по компьютерному моделированию описана в [14-15].

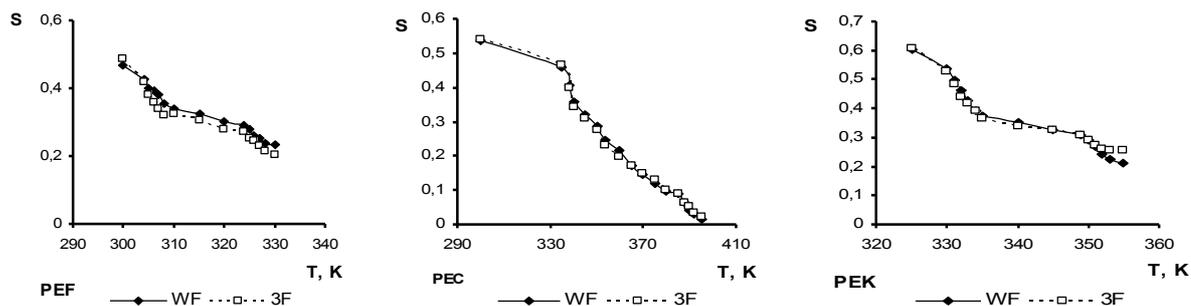


Рисунок 1 – Температурная зависимость степени упорядоченности исследуемых соединений

(WF-кластер без фуллерена, 3F- наличие трех фуллеренов)

Линейное расположение 3-х фуллеренов в кластере слегка ослабляет упорядоченность исследуемых соединений (рис. 1). Эта тенденция подтверждается и температурными зависимостями информационной энтропии исследуемых соединений (рис. 2).

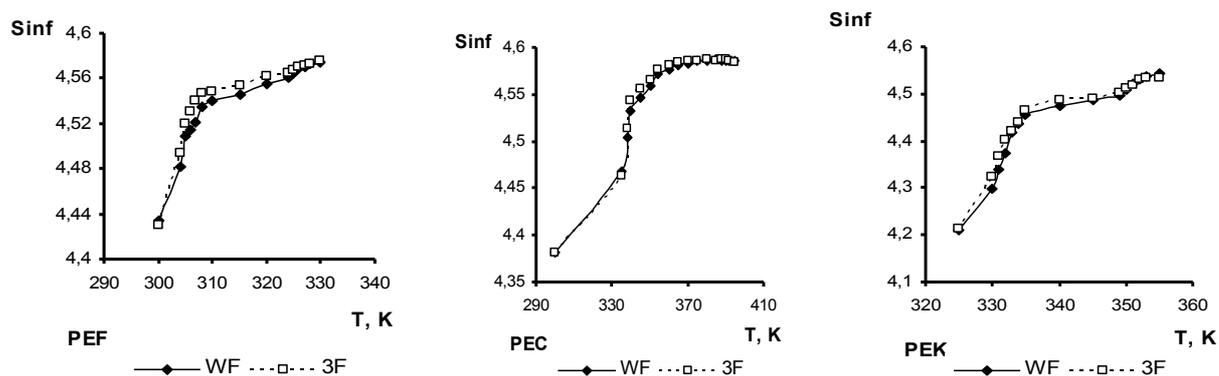


Рисунок 2 – Температурная зависимость информационной энтропии исследуемых соединений

Влияние полярности исследуемых соединений проявляется на кривых температурной зависимости суммарного дипольного момента молекул кластера (рис. 3).

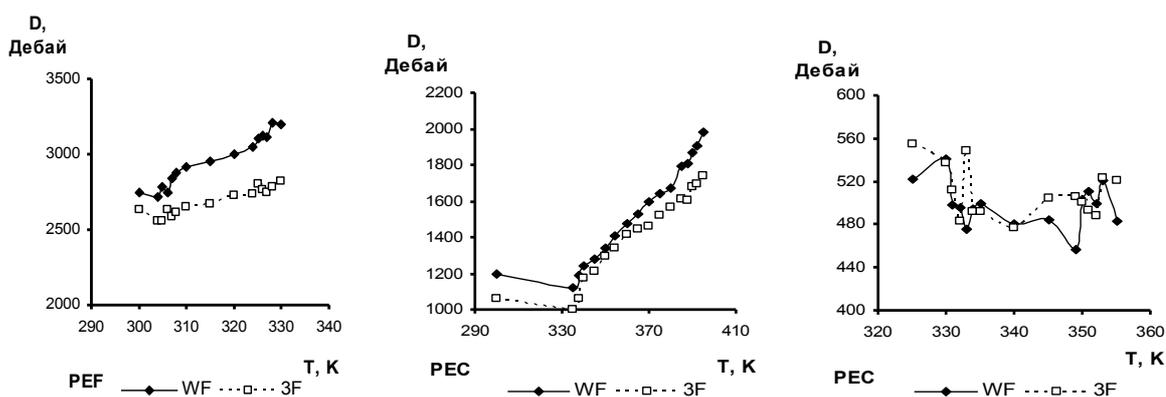
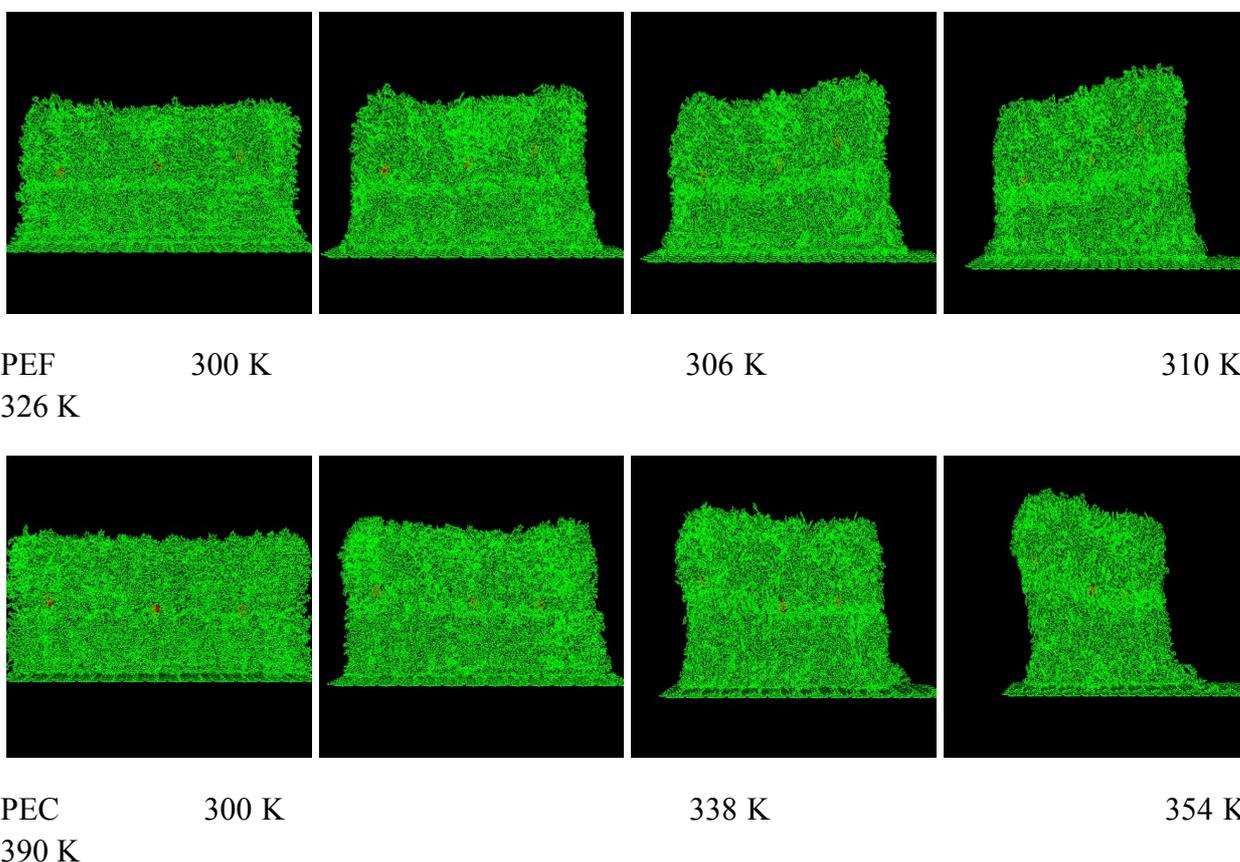
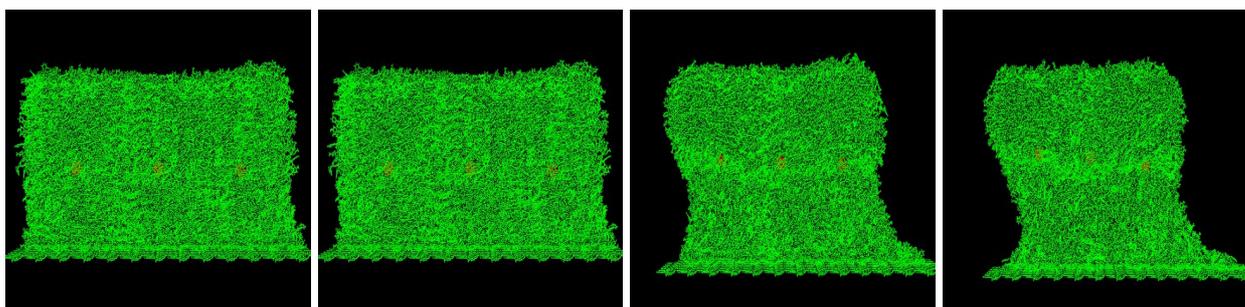


Рисунок 3 – Температурная зависимость информационной энтропии исследуемых соединений

Для полярных молекул PEF и PEC с ростом температуры наблюдается увеличение суммарного дипольного момента. Наличие фуллерена приводит к уменьшению его значений. Это влияние проявляется для молекулы PEF с наиболее электроотрицательным атомом фтора. Для неполярной молекулы PEK влияние фуллерена на суммарный дипольный момент не столь очевидно.

На рисунке 4 представлены снимки кластеров исследуемых соединений при различных фазовых состояниях.





РЕК 325 К 333 К 340 К
351 К

Рисунок 4 – Снимки кластеров исследуемых соединений при различных фазовых состояниях

(кристаллическое, плавление, мезофаза, просветление)

Снимки показывают наличие своеобразной полосы вдоль линии, соединяющей фуллерены. С ростом температуры происходит изменение рельефа кластера. У полярных молекул РЕФ, РЕС это изменение происходит уже при плавлении. Это может быть связано с большим межмолекулярным взаимодействием по сравнению с РЕК, которое приводит к большему уплотнению после фазовых переходов.

Как видно на рисунке 5, расстояния между фуллеренами уменьшаются с ростом температуры.

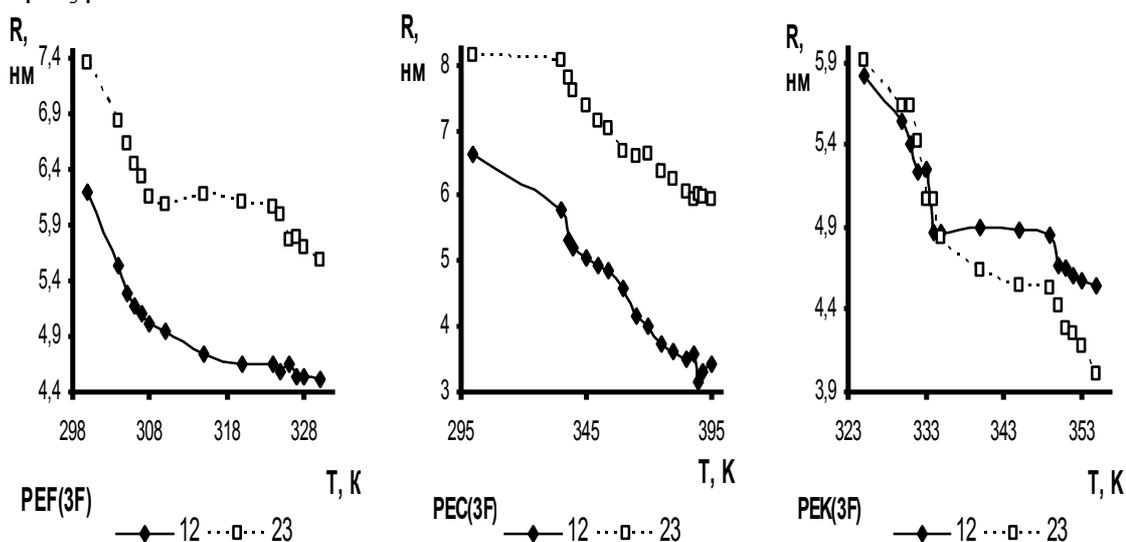


Рисунок 5 – Температурные зависимости расстояний между фуллеренами в кластерах (2-средний фуллерен)

Наиболее быстрое уменьшение расстояния наступает после плавления. Для полярных молекул РЕФ, РЕС уже при первых отжигах устанавливается разница между 1-2 и 2-3, которая сохраняется в дальнейшем. В случае неполярной молекулы РЕК равенство между ними сохраняется до плавления, а в области просветления на кривых наблюдается очередной перегиб. Увеличение подвижности после фазовых переходов приводит к возможности сближения фуллеренов. В области мезофазы наблюдается некоторое замедление этого процесса. Одной из причин установившейся разницы между длинами 1-2 и 2-3 может быть появление «пустоты» в области 2-3 за счет отталкивания однополярных концов молекул.

Анализ функции радиального распределения исследуемых молекул показывает тенденцию стабилизации положения максимума плотности от центрального (2) фуллерена. Радиальная функция распределения или функция парной корреляции $g_{AB}(r)$ между частицами типов А и В определяется следующим образом [9]:

$$g_{AB}(r) = \frac{\langle \rho_B(r) \rangle}{\langle \rho_B \rangle_{local}} = \frac{1}{\langle \rho_B \rangle_{local}} \frac{1}{N_A} \sum_{i \in A} \sum_{j \in B} \frac{\delta(r_{ij} - r)}{4\pi r^2}$$

где $\langle \rho_B(r) \rangle$ – плотность частиц типа В на расстоянии r вокруг частиц А, и $\langle \rho_B \rangle_{local}$ – плотность частиц типа В, усредненная по всем сферам вокруг частиц А с радиусом r_{max} . В качестве частицы А был выбран центр исходного кластера, совпадающий со средней молекулой фуллерена. В качестве частицы В был выбран заместитель ЖК. Так для молекулы PEC после кристаллического состояния сильно уменьшается интенсивность широкой полосы и остается один пик при 0,725 нм. Эта положение соответствует максимуму плотности после кристаллического состояния и в молекуле PEK. Помимо нее постоянно присутствуют в районе пики при 1,075 нм и 1,625 нм. Для молекулы PEF картина сложнее. Интенсивный пик в области 0,725 нм также присутствует, но максимум колеблется в области от 1,125 нм, при просветлении достигая 0,675 нм, в изотропной фазе – 0,725 нм. При этом наблюдается интенсивные пики вплоть до 3,125 нм.

Разница функции распределения для исследуемых молекул обусловлена, по-видимому, тем, что PEC и PEK менее подвижны по сравнению с PEF из-за больших размеров заместителей. Сокращение расстояния между фуллеренами, по-видимому, также способствует этой стабилизации.

2 Моделирование поведения нематических жидких кристаллов при наличии внутри кластера нескольких фуллеренов C60, расположенных вдоль замкнутой линии

В этом разделе исследованы кластеры с молекулами PEF, PEC, PEK, с наличием 6 фуллеренов в виде правильного шестиугольника и 8 фуллеренов в виде прямоугольного параллелепипеда (рис.6).

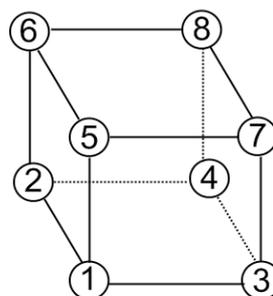
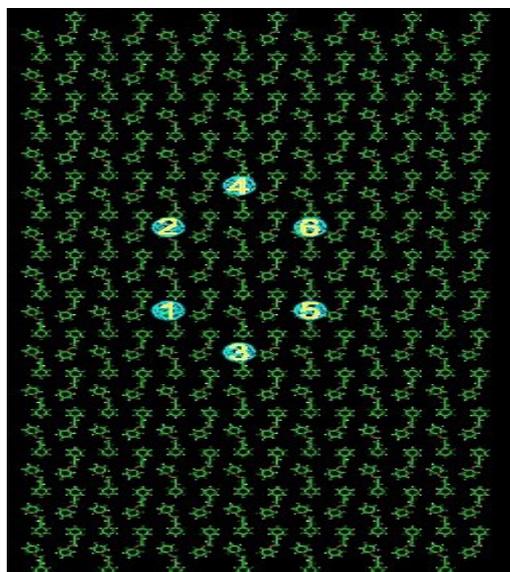


Рисунок 6 – Расположение молекул фуллерена в кластере в случаях, когда их шесть и ВОСЕМЬ

Линии, соединяющие молекулы фуллеренов 1-2, 3-4, 5-6, 8-7, совпадают с осью OY и направлением директора в исходном кластере. Исходные кластеры ЖК молекул составляли прямоугольные параллелепипеды размерами – 14x14x16 (PEC, PEF) и 13x13x17 молекул (PEK). Молекулы одной из граней XOY были заморожены и представляли подложку. Расстояния между плоскостями (OZ) составили 0,4 нм (PEC, PEF), 0,5 нм (PEK); по OY – 1,6 нм для всех молекул; по OX – 0,8 нм (PEC, PEF) и 0,6 нм (PEK). Смещение молекул в соседних рядах составляло по OY – 0,7 нм и соседние молекулы располагались антипараллельно по отношению друг другу. Направление электрического поля совпало с OZ, а направление директора – с OY. Ряд, в котором находились фуллерены, был смещен относительно соседних рядов на 0,6 нм (по оси OY) (PEC, PEF); в PEK на 0,8 нм по оси OX и 0,7 нм по оси OZ.

В случае 6 фуллеренов в кластерах с PEC, PEF, PEK расстояния между фуллеренами составляли – 1-2, 5-6 = 3,2 нм; 1-3, 2-4, 3-5, 4-6 = 2,26 нм (нумерация молекул фуллерена указана на рисунке 6). Координаты в исходном кластере относительно молекул с PEC, PEF следующие: 1 фуллерен – 5x7x9, 2 – 5x9x9, 3 – 7x6x9, 4 – 7x10x9, 5 – 9x7x9, 6 – 9x9x9. В случае 6 фуллеренов в кластерах с PEK: 1 фуллерен – 5x6x9, 2 – 5x8x9, 3 – 7x5x9, 4 – 7x9x9, 5 – 9x6x9, 6 – 9x8x9.

При 8 фуллеренах в кластерах с PEC, PEF расстояния между фуллеренами составляли – 1-2, 3-4, 5-6, 7-8 = 3,2 нм; 1-5, 2-6, 3-7, 4-8 = 2,4 нм; 1-3, 2-4, 5-7, 6-8 = 2,4 нм (нумерация молекул фуллерена указана на рисунке 6). Координаты в исходном кластере относительно молекул с PEC, PEF следующие: 1 фуллерен – 5x7x7, 2 – 5x9x7, 3 – 8x7x7, 4 – 8x9x7, 5 – 5x7x12, 6 – 5x9x12, 7 – 8x7x12, 8 – 8x9x12. В случае 8 фуллеренов в кластерах с PEK расстояния между фуллеренами составляли – 1-2, 3-4, 5-6, 7-8 = 3,2 нм; 1-5, 2-6, 3-7, 4-8 = 1,4 нм; 1-3, 2-4, 5-7, 6-8 = 2,8 нм. Координаты в исходном кластере относительно молекул с PEK следующие: 1 фуллерен – 5x6x7, 2 – 5x8x7, 3 – 9x6x7, 4 – 9x8x7, 5 – 5x6x9, 6 – 5x8x9, 7 – 9x6x9, 8 – 9x8x9.

Методика подготовки и проведения экспериментов по компьютерному моделированию описана в [18-19].

Результаты проведенных исследований представлены на рисунках 7-11.

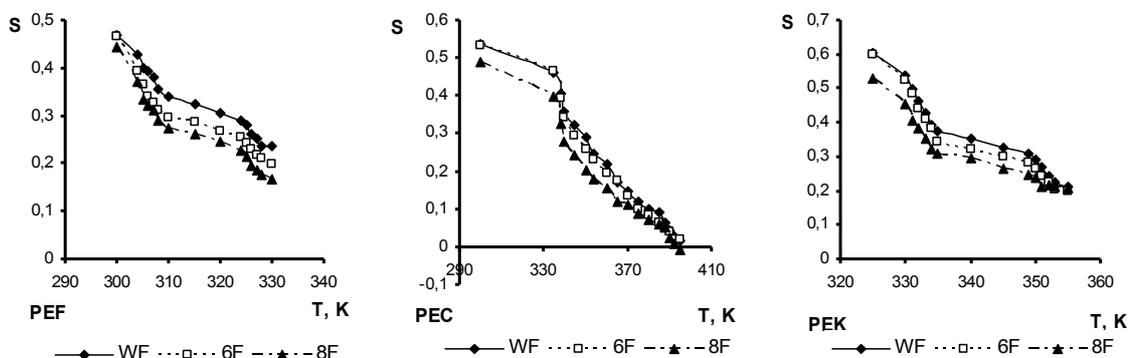


Рисунок 7 – Температурная зависимость степени упорядоченности исследуемых соединений (WF-кластер без фуллерена, 6F- наличие шести, 8F- фуллеренов)

Как видно на рисунке 7, при увеличении количества фуллеренов происходит уменьшение упорядоченности.

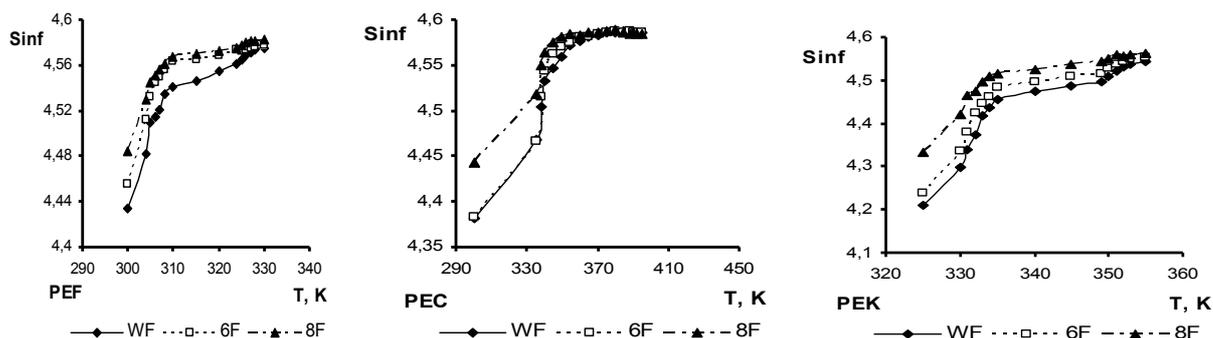


Рисунок 8 – Температурная зависимость информационной энтропии исследуемых соединений

Эта тенденция подтверждается на кривых температурной зависимости информационной энтропии исследуемых соединений (рис. 8).

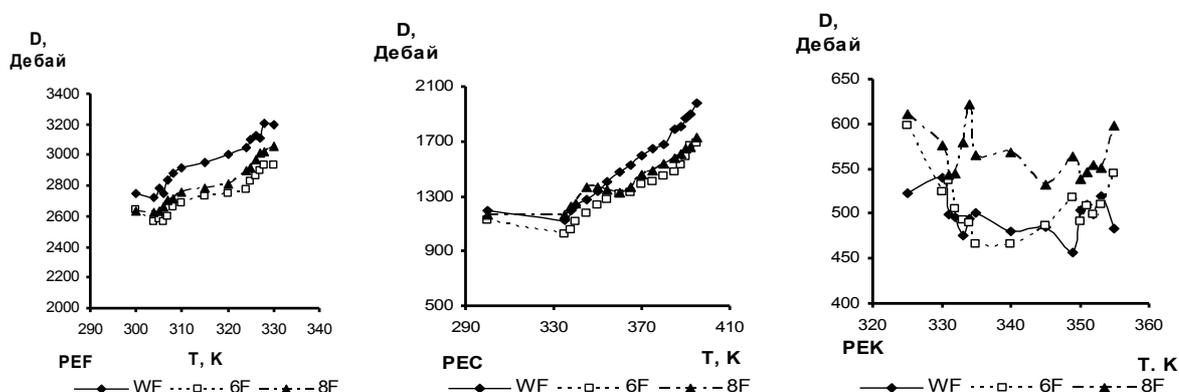
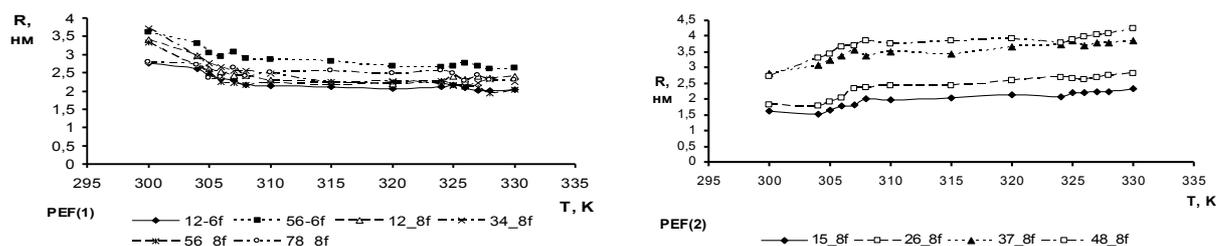


Рисунок 9 – Температурная зависимость суммарного дипольного момента исследуемых соединений

Характер изменения температурных зависимостей суммарного дипольного момента для полярных молекул PEC, PEF (рис. 9) не изменяется при появлении фуллеренов, а ее величина незначительно уменьшается. Для неполярной молекулы PEK нет такой однозначности.

На рисунках 10-12 представлены температурные зависимости расстояний между фуллеренами. Обозначения находятся в соответствии с обозначениями (рис. 6). Тип рисунка PEF(1), PEC(1), PEK(1) соответствует длинам сторон, совпадавшим с направлением директора для случаев 6 и 8 фуллеренов; PEF(2), PEC(2), PEK(2) – сторонам, совпадающим с нормалью к подложке в случае 8 фуллеренов; PEF(3), PEC(3), PEK(3) – сторонам, перпендикулярным директору в случае 8 фуллеренов; PEF(4), PEC(4), PEK(4) – сторонам, имеющий угол с директором в случае 6 фуллеренов.



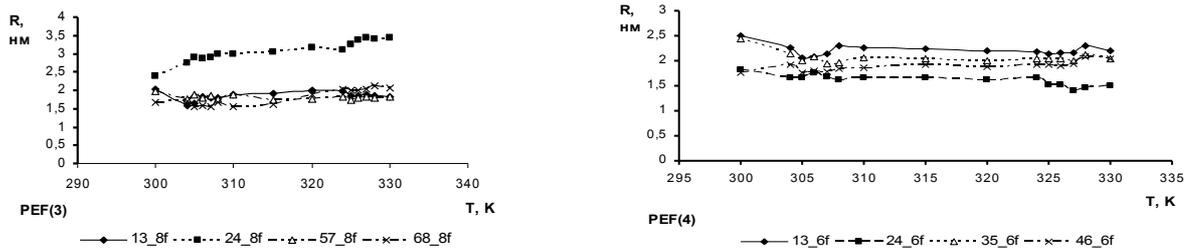


Рисунок 10 – Температурные зависимости длин сторон фигур, образуемых фуллеренами в кластере с PEF

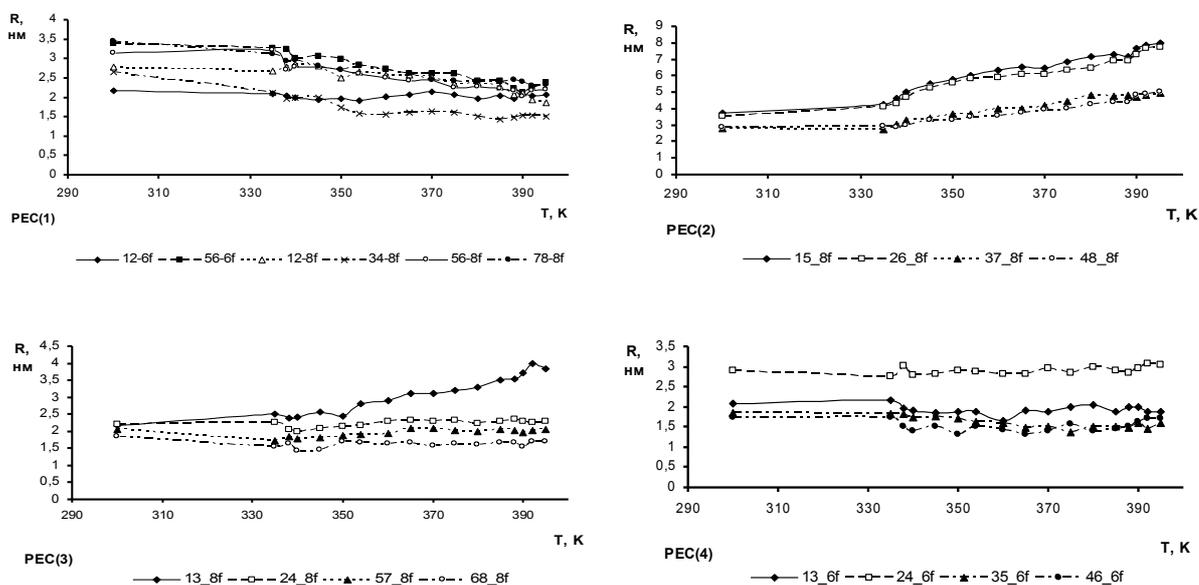
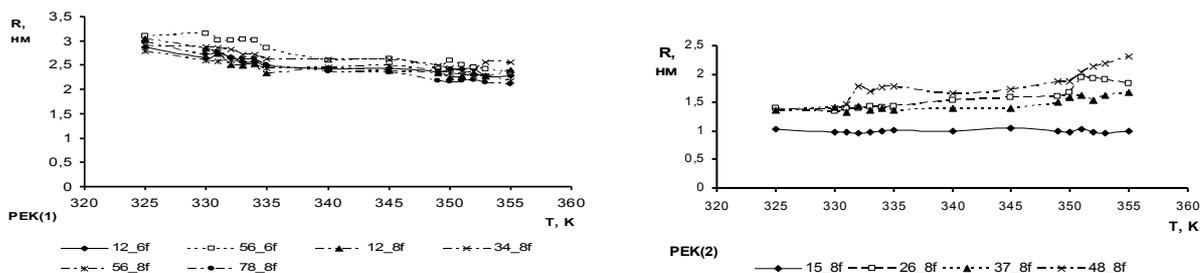


Рисунок 11 – Температурные зависимости длин сторон фигур, образуемых фуллеренами в кластере с PEC

Как видно из кривых температурных зависимостей длины сторон, образованных 6 и 8 фуллеренами S_{60} , стороны, совпадающие с директором, с ростом температуры уменьшаются, высоты же параллелепипеда увеличиваются. На других же сторонах нет ясной закономерности. Перегибы на полученных кривых показывают, что увеличение подвижности ЖК матрицы позволяет фуллеренам так перемещаться.



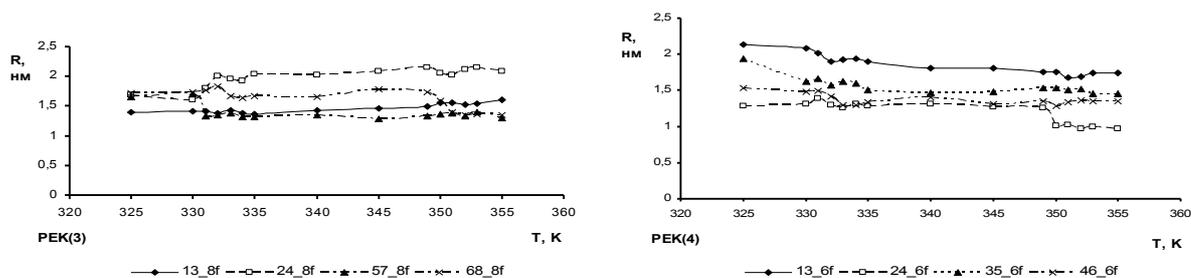


Рисунок 12 – Температурные зависимости длин сторон фигур, образуемых фуллеренами в кластере с PEK

Анализ температурных зависимостей функции радиального распределения плотности ЖК молекул относительно центральной молекулы показывает, что наличие фуллеренов способствует стабилизации положения максимума плотности в кластере. Так при наличии 6 фуллеренов в PEK этот максимум находится во всех состояниях при 0,625 нм, а при изотропной жидкости имеются 2 пика – 0,475(1) и 0,625(0,95). В кластере PEC максимум соответствует 0,725 нм, при этом присутствуют дополнительные пики в области 0,925 нм, 0,575 нм. В кластере с PEF максимум в основном варьируется в области 0,675 нм, при плавлении – 0,425 нм, изотропной жидкости 0,525 нм. Имеются также немногочисленные интенсивные пики в окрестности максимума. Во всех рассмотренных случаях наблюдается широкая полоса, простирающаяся до 10 нм.

В случае 8 фуллеренов в кластере PEK максимум остается при 0,625 нм, как и в случае с 6. Только при просветлении и изотропной жидкости он становится ближе к центру – 0,275 нм, но интенсивный пик при 0,625 нм также присутствует. Наблюдается также небольшая широкая полоса, простирающаяся до 10 нм. В кластере PEC максимум плотности в кристаллическом состоянии находится при 0,725 нм, при плавлении – 0,575 нм, в мезофазе 0,475 нм с наличием пика при 0,725 нм (0,72), просветлении – 0,625 нм с пиками 0,725 нм (0,49) и 0,925 (0,89), в изотропной жидкости – 0,725 нм с пиками 0,625 нм(0,998). Имеется широкая полоса, которая значительно возрастает при плавлении и просветлении, что обусловлено увеличением подвижности молекул. В кластерах с PEF максимум варьируется в области 0,675 нм, при этом он перемещается при просветлении в 0,425 нм и в изотропной жидкости – 0,475 нм. При этом наблюдается интенсивный пик в 0,675 нм.

Таким образом, показано, что с ростом температуры фуллерены сближаются в направлении директора ЖК матрицы. При этом наблюдается расширение по высоте параллелепипеда, в вершинах которого расположены фуллерены. Наличие фуллеренов способствует в целом стабилизации положения максимума плотности при температурном воздействии.

ЛИТЕРАТУРА

1 Hosoda K., Tada R., Ishikawa M., Yoshino K.. Effect of C60 doping on electrical and optical properties of poly[(disilanyl)oligophenylenes] // Jpn. J. Appl. Phys. – 1997. – Pt 2. Vol. 36, № 3B. – P.L372-L375.

2 Itaya A., Sizzuki I., Tsuboi Y., Miyasaaka H. Photoinduced electron transfer processes of C60-doped poly(*N*-vinylcarbazole) films as revealed by picosecond laser photolysis // J. Phys. Chem. B. – 1997. – Vol. 101, № 26. – P.5118-5123.

3 Kamanina N.V. Reverse saturable absorption in fullerene-containing polyimides. Applicability of the Forster model // Opt. Commun. – 1999. – Vol. 162, № 4-6. – P.228-232.

4 Kamanina N., Barrientos A., Leyderman A. et al. Effect of fullerene doping on the absorption edge shift in COANP // Molecular Materials. – 2000. – Vol. 13, № 1-4. – P.275-280.

5 Lu Z., Goh S.H., Lee S.Y. et al. Synthesis, characterization and nonlinear optical properties of copolymers of benzylaminofullerene with methyl methacrylate or ethyl methacrylate // Polymer. – 1999. – Vol. 40. – P.2863-2867.

6 Kamanina N.V., Bagrov I.V., Belousova I.M. et al. Fullerene-doped π -conjugated organic systems under infrared laser irradiation // Opt. Commun. – 2001. – Vol. 194, № 4-6. – P.367-372.

8 Каманина Н.В. Светоиндуцированное изменение показателя преломления в системе полиимид-фуллерен // Оптика и спектроскопия. – 2001. – Т. 90, № 6. – С. 960-964.

9 Каманина Н.В., Сизов В.Н., Стаселько Д.И. Запись тонких фазовых голограмм в полимер-диспергированных жидкокристаллических композитах на основе фуллеренсодержащих π -сопряженных органических систем // Оптика и спектроскопия. – 2001. – Т. 90, № 1. – С.5-7.

9 Ruani G., Biscarini M., Cavallini M. et al. Optical limiting in the near infrared: a new approach // Abstract booklet of 2nd Intern. Symp. on Optical Power Limiting, Venice (Italy), July 2-5, 2000. P.69.

10 Каманина Н.В. Фуллеренсодержащие диспергированные нематические жидкокристаллические структуры: динамические характеристики и процессы самоорганизации // Успехи физ.наук. – 2005. – Т.175, №4. – С.445-454.

11 Мулдахметов З.М., Агельменев М.Е., Советов Е.С. Влияние заместителей на мезоморфизм ацетиленовых соединений // Ж. физ. хим. – 1999. – Т. 73, № 11. – С.2085-2086.

12 Агельменев М.Е., Бажиков К.Т., Мулдахметов З.М., Сизых М.Ю. Влияние атомов галогена на мезоморфизм ацетиленовых соединений // Ж. физ. хим. – 2002. – Т. 76, № 10. – С.1891-1893.

13 Van der Spoel D., Lindahl E., Hess B., van Buuren A.R., Apol E., Meulenhoff P.J., Tieleman D.P., Sijbers A.L.T.M., Feenstra K.A., van Drunen R. and Berendsen H.J.C., GROMACS User Manual version 3.3.1 , www.GROMACS.org

14 Агельменев М.Е., Мулдахметов З.М., Братухин С.М., Поликарпов В.В. Моделирование мезогенной системы в жидком агрегатном состоянии // Ж. физ. хим. – 2010. – Т. 84, № 7. – С. 280–1284.

15 Agelmenev M.E., Muldakhmetov Z.M., Bratukhin S.M., Pak V.G., Polikarpov V.V., Yakovleva O.A. The Dynamics of Some Nematic Liquid Crystals // Mol. Cryst. Liq. Cryst. – 2008. – Vol.494. – P.339-352.

16 Wong-ekkabut J., Baoukina S., Triampo W., Tang I-M., Tieleman D.P., Monticelli L. A simulation study of fullerene translocation through lipid membranes // *Nature Nanotechnology*. – 2008. – Vol.3. – P.363-368.

17 <http://www.dsimb.inserm.fr/~luca>

REFERENCES

1 Hosoda K., Tada R., Ishikawa M., Yoshino K. *Jpn. J. Appl. Phys.* **1997**, Pt. 2, 36, 3B, 372-375 (in Eng.).

2 Itaya A., Sizzuki I., Tsuboi Y., Miyasaka H. *J. Phys. Chem. B.* , **1997**, V. 101, 26, 5118-5123 (in Eng.)

3 Kamanina N.V. *Opt. Commun*, **1999**. 162, 4-6, 228-232 (in Eng.).

4 Kamanina N., Barrientos A., Leyderman A. et al. *Molecular Materials*. **2000**, 13, 1-4, 275-280 (in Eng.).

5 Lu Z., Goh S.H., Lee S.Y. et al. *Polymer*, **1999**, 40, 2863-2867 (in Eng.).

6 Kamanina N.V., Bagrov I.V., Belousova I.M. et al. *Opt. Commun*. **2001**, 194, 4-6, 367-372 (in Eng.).

8 Kamanina N.V. *Optika I spektroskopiy*, **2001**, 90, 6. 960-964 (in Russ.).

9 Kamanina N.V., Sizov V.N., Staselko D.I. *Optika I spektroskopiy*, **2001**, 90, 1, 5-7 (in Russ.).

9 Ruani G., Biscarini M., Cavallini M. et al. *Optika I spektroskopiy*, (Italy), **2000**, 69 (in Eng.).

10 Kamanina N.V. *Uspehi chemiy phiz.nauk*, **2005**, 175, 4, 445-454 (in Russ.).

11 Muldakhmetov Z.M., Agelmenev M.E., Sovetov E.S. *J. Phys. chem.* **1999**, 73, 11, 2085-2086 (in Russ.).

12 Agelmenev M.E., Bazhikov K.T., Muldakhmetov Z.M., Sizih M.Y. *J. Phys. chem.* **2002**, 76, 10, 1891-1893 (in Russ.).

13 Van der Spoel D., Lindahl E., Hess B., van Buuren A.R., Apol E., Meulenhoff P.J., Tieleman D.P., Sijbers A.L.T.M., Feenstra K.A., van Drunen R. and Berendsen H.J.C., *GROMACS User Manual version 3.3.1* , www.GROMACS.org (in Eng.).

14 Agelmenev M.E., Muldakhmetov Z.M., Bratuhin C.M., Polikarpov V.V. *J. Phiz. chem.* **2010**, 84, 7, 1280-1284 (in Russ.).

15 A Agelmenev M.E., Muldakhmetov Z.M., Bratukhin S.M., Pak V.G., Polikarpov V.V., Yakovleva O.A. *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **2008**, 494, 339-352 (in Eng.).

16 Wong-ekkabut J., Baoukina S., Triampo W., Tang I-M., Tieleman D.P., Monticelli L. *Nature Nanotechnology*. **2008**, 3, 363-368 (in Eng.).

17 <http://www.dsimb.inserm.fr/~luca>

Резюме

*М.Е. Агелменев, З.М. Молдахметов, С.М. Братухин,
В.В. Поликарпов, Г.С. Бектасова, Д. Ерболатұлы*

(Органикалық синтез және көмірхимиясы институты, Қарағанды қ.)

КЛАСТЕРДЕ C60 ФУЛЛЕРЕННІҢ БІРНЕШЕ МОЛЕКУЛАЛАРЫ БАР ЖАҒДАЙДА НЕМАТИКАЛЫҚ СҰЙЫҚ КРИСТАЛДАРДЫҢ ТӘРТІБІН ҮЛГІЛЕУ

Жұмыс барысында нематикалық сұйық кристалдардың фуллерен молекулалардың қатысуындағы тәртібінің компьютерлік үлгілеу нәтижелері көрсетілген. Фуллерендер температураның өсуімен СК матрицаның директоры бағытында жақындайтындығы анықталған. Бұл жағдайда фуллерендер шындарында орналасқан параллелепипед биіктігінің өскендігі байқалған. Фуллерендердің бар болуы температура әсерінен жалпы тығыздық максимумы жағдайының тұрақтандыруына әсер етеді.

Кілт сөздер: компьютерлік үлгілеу, сұйық кристалдар, фенол эфирлері, фуллерен, кластерлер, нанобөлшектер, полярлық молекулалар.

Summary

*M.E. Agelmenev, Z.M. Muldakhmetov, S.M. Bratukhin,
V.V. Polikarpov, G.S. Bektasova, D. Erbolatuly*

(Institute of organic synthesis and coal chemistry, Karaganda)

MODELING OF THE NEMATIC LIQUID CRYSTALS BEHAVIOR IN THE PRESENCE IN CLUSTER OF SEVERAL C60 FULLERENE MOLECULES

In this work the results of the computer modeling of the behavior of nematic liquid crystals (LCs) in the presence of fullerenes were presented. It was found that with increasing temperature the fullerenes converge towards the director of the LC matrix. At the same time was shown the increase in height of the parallelepiped, on point of which the fullerenes are located. The presence of fullerenes in general contributes to the stabilization of the maximum density at the temperature influence.

Key words: computer modeling, liquid crystals, ethers of phenols, fullerene, clusters, nanoparticles, polar molecules.

Поступила 17.02.2013 г.