

УДК 532.783:6:539.2-022.532

Исследование мезоморфного состояния *p'*-децилоксибензилиден-*p'*-амино-2-метилбутилциннамата в полимерной матрице методом молекулярной динамики

А.В. Шабанов, М.А. Коршунов

Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, Красноярск, 660036, Россия

Методом молекулярной динамики исследовано распределение молекул смектического жидкого кристалла *p'*-децилоксибензилиден-*p'*-амино-2-метилбутилциннамата в капсуле с фиксированным приграничным слоем. Рассмотрено изменение расположения молекул в слоях смектика в зависимости от наклона молекул на границе. Получены температурные зависимости параметров порядка $\langle P_2 \rangle$ и $\langle P_4 \rangle$. Вычислена температура перехода из смектической фазы C^* в смектическую фазу А в капсуле. В фазе смектика C^* выявлены искривления смектических слоев.

Ключевые слова: молекулярная динамика, капсула, жидкий кристалл, оптоэлектроника

Molecular dynamics study of the mesomorphic state of *p'*-decyloxy-benzylidene-*p'*-amino-2-methyl-butyl-cinnamate in a polymer matrix

A.V. Shabanov and M.A. Korshunov

Kirensky Institute of Physics SB RAS, Krasnoyarsk, 660036, Russia

Molecular dynamics study was performed on the molecular distribution of a smectic liquid crystal of *p'*-decyloxy-benzylidene-*p'*-amino-2-methyl-butyl-cinnamate in a capsule with a fixed near-boundary layer. The arrangement of molecules in smectic layers depending on the molecular tilt at the boundary was considered. Temperature dependences of the order parameters $\langle P_2 \rangle$ and $\langle P_4 \rangle$ were obtained. The temperature of transition from the smectic phase C^* to the smectic phase А in the capsule was calculated. In the C^* smectic phase, curvature of smectic layers was detected.

Ключевые слова: molecular dynamics, capsule, liquid crystal, optoelectronics

1. Введение

Расположение молекул жидкого кристалла сказывается на прохождении света через образец (например, в дисплеях). Поэтому знать расположение молекул в жидких кристаллах и возможность на него влиять представляется важной практической задачей. Имеется обширный экспериментальный материал о влиянии температуры на оптические свойства жидких кристаллов [1, 2]. Модели, описывающие физические свойства на макроскопическом уровне, многие характеристики предсказывали правильно. Тем не менее, некоторые важные особенности в температурной зависимости структурных и оптических свойств остаются непонятыми. Необходимо выяснить температурные зависимости поведения отдельных групп молекул в жидких кристаллах.

Для этой цели наиболее перспективным авторам представляется численное моделирование с использованием метода молекулярной динамики. Моделирование позволяет найти расположение молекул в структуре жидкого кристалла и проявление этого расположения при оптических исследованиях. На практике (например, в дисплеях) широко используются нематические жидкие кристаллы. Но время реакции их при изменении внешнего поля больше, чем смектических жидких кристаллов, поэтому смектики применяются в быстродействующих модуляторах света, управляемых фазовых пластинках, преобразователях в высшие гармоники и т.д. [3–5]. Оказываются, более удобными для практического применения являются пленки жидкокристаллических композитов, которые состоят из полимерной матрицы с

полостями, заполненными молекулами жидкого кристалла (жидкий кристалл в капсулах). Такие композиты имеют ряд преимуществ по сравнению с аналогами на основе чистых жидких кристаллов. Это высокая яркость, гибкость, более дешевая технология изготовления, высокая надежность в эксплуатации. Накоплен большой экспериментальный материал по капсулированным жидким кристаллам [6]. Среди сегнетоэлектрических жидких кристаллов наиболее изученным различными методами является *p'*-децилоксибензилиден-*p'*-амино-2-метилбутилциннамат [2, 7]. Также представляется важным изучить изменение структуры жидкого кристалла при смене граничных условий.

2. Расчет

Метод молекулярной динамики подробно описан в работах [8–10]. Основным моментом в этом методе является расчет сил, которые находятся из потенциала. Поэтому его выбор является определяющим для конечного результата.

Развитие методов моделирования жидких кристаллов описано в работе [11]. Они успешно использовались для моделирования жидких кристаллов с реальными молекулами [12–14].

Молекулы жидкого кристалла протяженные и могут изгибаться, что должно учитываться при расчетах.

Для этой цели используется метод молекулярной механики [15]. Потенциал взаимодействия представляется в виде:

$$U = U_s + U_b + U_t + U_{vdW} + U_e,$$

где U_s , U_b , U_t , U_{vdW} и U_e — потенциальная энергия валентных связей, валентных и торсионных углов, взаимодействий Ван-дер-Ваальса и кулоновских сил;

$$U_s = 1/2 \sum_1^N K_s (r_i - r_e)^2,$$

K_s — жесткость валентной связи; i — номер связи в молекуле; N — число валентных связей; r_i — длина связи; r_e — равновесная длина связи;

$$U_b = 1/2 \sum_1^N K_b (\alpha_i - \alpha_e)^2,$$

K_b — упругость валентного угла; i — номер валентного угла; N — число валентных углов; α_i — значение валентного угла; α_e — его равновесное значение;

$$U_t = 1/2 \sum_n K_t (1 + \cos(n^\theta \delta + \delta_n)),$$

K_t — константа;

$$U_e = \sum_{i \neq j} \frac{q_i q_j}{r_{ij} \epsilon},$$

q_i , q_j — парциальные заряды.

Коэффициенты в потенциалах U_s , U_b , U_t и U_e взяты из работ [16–18]. Например, коэффициент K_s , описывающий жесткость валентной связи, составлял для связи С–С 317 ккал/Å, Н–С — 331 ккал/Å. Некоторые из

Таблица 1
Параметры K_b , использованные при моделировании [17]
(X — любой тип атомов)

Тип угла	Угол α_e	K_b , ккал/рад ² моль
N – C – C	180°	57.6
C – C – C	111°	63.6
C – C – H	108.9°	63.6
X – C – X	120°	50.4

коэффициентов для потенциалов U_b и U_t приведены в табл. 1 и 2.

Для описания межмолекулярного взаимодействия использовался метод атом-атом потенциалов [19]. Потенциал взаимодействия U_{vdW} был использован в форме:

$$U_{vdW} = \sum_{i,j} \left(-\frac{A_{ij}}{r_{ij}^6} + B_{ij} \exp^{-c_{ij} r_{ij}} \right).$$

В расчетах U_{vdW} использовались коэффициенты, полученные нами ранее [20–22]: $A_{CC} = 370$ ккал·Å⁶/моль, $B_{CC} = 68700$ ккал/моль, $C_{CC} = 3.6$ Å⁻¹, $A_{HH} = 31$ ккал × Å⁶·моль⁻¹, $B_{HH} = 3890$ ккал/моль, $C_{HH} = 3.76$ Å⁻¹ и $A_{NN} = 380$ ккал·Å⁶/моль, $B_{NN} = 70000$ ккал/моль, $C_{NN} = 3.57$ Å⁻¹.

Расчет координат атомов и их скоростей в процессе взаимодействия можно найти, используя алгоритм Верле в скоростной форме [23]. Шаг по времени составлял 2 фс.

В работе предполагается исследовать поведение молекул жидкого кристалла для ряда температур (в частности, для нахождения изменения параметра порядка с температурой).

В молекулярной динамике температура молекулярной системы вводится через среднее значение хаотической составляющей полной кинетической энергии атомов.

В процессе расчета температура системы поддерживалась через коррекцию скорости частиц. Для этого был использован термостат Берендсена [24]. После каждого шага по времени производилось масштабирование скоростей:

$$\mathbf{v}_i(t) = \mathbf{v}_i^*(t) \sqrt{1 + \frac{\Delta t}{\tau_T} \left(\frac{T_0}{T(t)} - 1 \right)},$$

Таблица 2
Параметры K_t , использованные при моделировании [17]
(X — любой тип атомов)

Торсионный угол	Угол θ	K_t , ккал/моль
X – C – C – X для бензольного кольца	0.18°	40
C – C – C – C	0°	1.008
X – C – C – X	180°	0.324

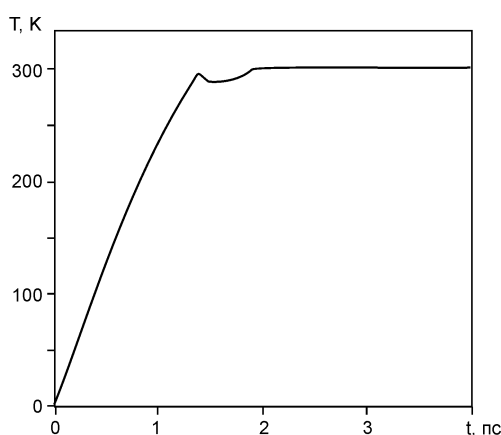


Рис. 1. График изменения температуры со временем при использовании термостата

где T_0 — заданная температура; $T(t)$ — значение температуры в момент времени t ; τ_T — параметр термостата ~ 0.5 пс, это значение определялось по методике, описанной в работе [25]. На рис. 1 показано изменение температуры системы со временем. Как видим, после 2 пс температура стабилизировалась. Эта температура, соответствующая заданной T_0 , приводится в работе.

Начальные условия задавались следующим образом. Координаты атомов брали в соответствии с выбранной начальной геометрической структурой молекулярной системы. Ориентация отдельной молекулы определялась по направлению длинной оси молекулы, проходящей через бензольные кольца. Первоначально внутри сферической капсулы молекулы располагались упорядоченно, т.е. длинные оси молекул были параллельны и молекулы располагались периодически, координаты атомов исходной молекулы через определенные периоды сдвигались по координатным осям. Начальные скорости атомов задаются с помощью случайного генератора чисел и имеют максвелловское распределение, соответствующее выбранной температуре. Для каждой заданной температуры расчеты проводились несколько раз, что позволило найти наиболее вероятное расположение молекул при данной температуре.

Расчеты проводились по программе, написанной на языке FORTRAN. При этом применялась технология CUDA [26, 27], позволяющая использовать при решении задач графические процессоры и проводить параллельные вычисления, что значительно повысило скорость расчетов на ЭВМ.

Модель капсулированного жидкого кристалла была представлена следующим образом. Из экспериментальных данных в работе [5] показано, что ориентация молекул в приповерхностных слоях жидкого кристалла задается достаточно жестко влиянием катионного сурфактанта. Поэтому в расчетах расположение молекул в приповерхностных слоях (2–3 слоя) задавалось жестко и в дальнейшем в процессе расчета не изменялось. Предполагалось, что эти слои составляют оболочку капсулы, и рассматривалось взаимодействие между этими молекулами и молекулами внутри объема капсулы. Чтобы исследовать, как расположение молекул в оболочке влияет на расположение молекул в объеме жидкого кристалла, проводились расчеты, когда молекулы оболочки располагались тангенциально или аксиально. Это изменяло силу взаимодействия между жидким кристаллом и оболочкой. Количество молекул внутри капсулы зависело от рассматриваемого объема (максимум 2000 молекул, каждая молекула имеет 78 атомов). При расчетах форма капсулы в одних случаях принималась сферической, в других представляла вытянутый эллипсоид вращения (отношение большой полуоси к малой составляло 1.3). На рисунках срезов сферы группы молекул с приблизительно одинаковым расположением их главных осей представлены стрелками. Применение метода молекулярной динамики для расчета нематического жидкого кристалла в капсуле подробно описано в предыдущей статье авторов [28]. В результате расчетов были найдены координаты атомов молекул *p*'-децилоксибензилиден-*p*'-амино2-метилбутилциннамата при заданной температуре. Вид молекулы *p*'-децилоксибензилиден-*p*'-амино2-метилбутилциннамата приведен на рис. 2.

Из найденного расположения молекул при изменении температуры для *p*'-децилоксибензилиден-*p*'-амино2-метилбутилциннамата рассчитана температурная зависимость параметра порядка (рис. 3):

$$\langle P_2 \rangle = \left\langle \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{3 \cos^2 \beta - 1}{2} \right\rangle,$$

$$\langle P_4 \rangle = \left\langle \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{35 \cos^4 \beta - 30 \cos^2 \beta + 3}{8} \right\rangle,$$

где β — угол между длинной осью отдельной молекулы и директором жидкого кристалла. За длинную ось отдельной молекулы принималась ось, проходящая через атомы углерода C1–C2 бензольных колец, координатами которых и определялось ее направление (рис. 2). Для

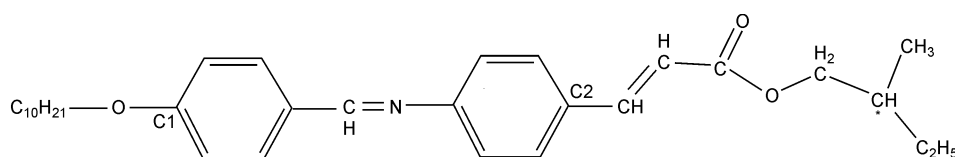
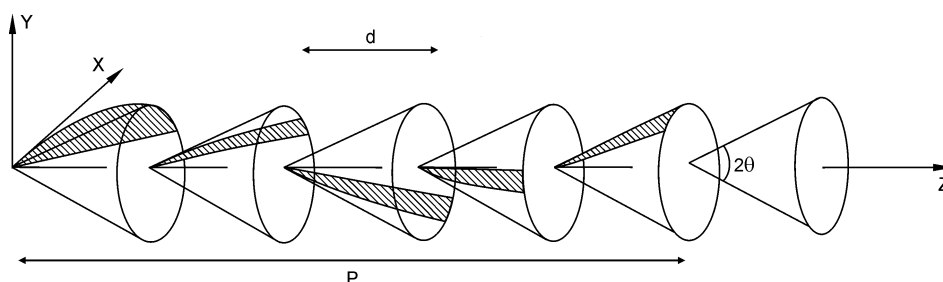


Рис. 2. Молекула *p*'-децилоксибензилиден-*p*'-амино2-метилбутилциннамата

Рис. 3. Период геликоидальной моды P , толщина слоя d и наклон молекул в слое θ

нахождения директора жидкого кристалла \mathbf{n} проведено вычисление единичных векторов длинных осей молекул \mathbf{e}_i , исходя из координат длинных осей (C1–C2) для каждой молекулы, как это предложено в работе [16]:

$$\mathbf{n} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbf{e}_i,$$

где N — число рассмотренных молекул. После этого был найден косинус угла β между длинной осью отдельной молекулы и директором жидкого кристалла с использованием формулы скалярного произведения векторов.

Так как смектик S^* имеет слоистую структуру, то в среднем директор в каждом слое d немного повернут вокруг оси Z относительно предыдущего слоя и полный поворот на 360° определяет период геликоидальной структуры P (рис. 3). Поэтому смектик S^* имеет геликоидальную структуру, которую можно найти, зная координаты атомов молекул.

Таким образом, в результате расчетов были найдены координаты атомов молекул при данной температуре, что позволило найти расположение молекул в капсуле и рассчитать параметр порядка.

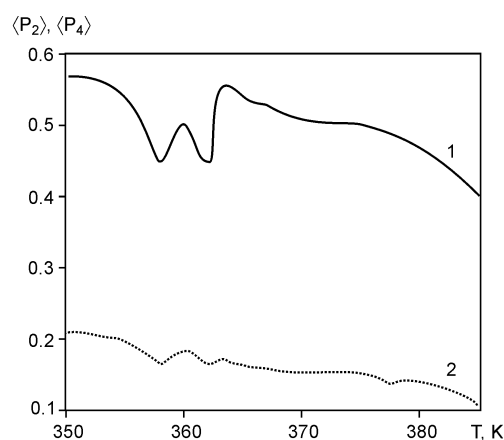
3. Обсуждение результатов

В результате расчетов было найдено распределение молекул жидкого кристалла p' -децилоксибензилиден- p' -амино2-метилбутилциннамата по ориентации их длинных осей (ось, проходящая вдоль молекулы через бензольные кольца по атомам C1 и C2, рис. 2) и конформация этих молекул для ряда температур. Это позволило рассчитать параметр порядка $\langle P_2 \rangle$ и $\langle P_4 \rangle$ в зависимости от изменения температуры (рис. 4) для жидкого кристалла p' -децилоксибензилиден- p' -амино2-метилбутилциннамата в сферической капсуле. Исследование смектического жидкого кристалла p' -децилоксибензилиден- p' -амино2-метилбутилциннамата без капсулы (что представляется нам аналогом свободных граничных условий в капсуле) проведено аналогичным методом в работе [29]. Получено расположение молекул в области существования фазы смектика S^* , при этом в структуре отмечается сосуществование ряда геликоидальных мод с разным периодом. Вследствие того что

расположение молекул в каждом слое неравномерное, в отдельных областях жидкого кристалла можно найти геликоидальные моды с меньшим периодом, чем для всего кристалла. По расположению молекул в слоях можно также определить, находится жидкий кристалл в фазе смектика S или смектика A .

Кроме того, изменение наклона молекул в приграничной области позволило отметить изменение расположения молекул жидкого кристалла от изменения взаимодействия с оболочкой в сферической капсуле.

В p' -децилоксибензилиден- p' -амино2-метилбутилциннамате экспериментально наблюдаются следующие переходы (из кристаллического состояния в смектик S^* при температуре 349 К, из смектика S^* в смектик A при 367 К и из смектика A в изотропное состояние при 388 К) [30]. При экспериментальном исследовании поведения этого кристалла в области перехода смектик S^* в смектик A в работе [31] отмечается изменение периодичности геликоидальной структуры за 0.5 К до перехода в смектик A . В работе [7] также наблюдается особенность за 2 К до перехода в поведении соотношения поляризации к углу наклона директора. При исследовании впервые второй гармоники в p' -децилоксибензилиден- p' -амино2-метилбутилциннамате отмечается особенность в области перехода, что связано с флуктуа-

Рис. 4. Параметр порядка $\langle P_2 \rangle$ (1) и $\langle P_4 \rangle$ (2) в зависимости от температуры для жидкого кристалла p' -децилоксибензилиден- p' -амино2-метилбутилциннамата в капсуле

циями ориентации молекул жидкого кристалла [32]. В работе [6] представлены основные особенности поведения и отличительные характеристики капсулированных жидких кристаллов, в частности волнообразная деформация молекулярных слоев, наблюдаемая на текстурных картинах капсулированных смектиков. Капсулы имеют эллипсоидальную форму. Но теоретически их поведение на молекулярном уровне не рассмотрено.

В капсулированном жидком кристалле наблюдается уменьшение температуры перехода из смектика С в смектик А (рис. 4), по сравнению с экспериментальными данными по этому кристаллу, не находящемуся в капсуле [33].

В результате расчетов капсулированного *p'*-децилоксибензилиден-*p'*-амино2-метилбутилциннамата было получено расположение молекул, представленное на рис. 5. Молекулы в основном располагались по сфере с двумя буждумами (точечными вихрями). Геометрическое положение этих буждумов в капсуле может не быть диаметрально противоположным. По мере удаления от границы возрастает упорядоченность молекул.

Изменение наклона молекул в приграничной области сказывается на изменении силы взаимодействия между жидким кристаллом и оболочкой капсулы.

В работе [34] рассматриваются сжатие смектических слоев и коэффициент сжатия K_4 . Это сжатие определяется изменением наклона молекул в слое смектика при данной температуре. На рис. 6 приведено изменение угла наклона молекул внутри слоя (находящегося в центре сферической капсулы) при расположении молекул оболочки в двух положениях: радиальном (1) и аксиальном (2). При радиальном расположении молекул взаимодействие между молекулами оболочки и жидким кристаллом меньше, чем при аксиальном расположении молекул оболочки. Это обуславливает то, что изменение ориентации молекул начинается при большей температуре в капсуле с радиальным расположением молекул в оболочке. Таким образом, уменьшение взаимодей-

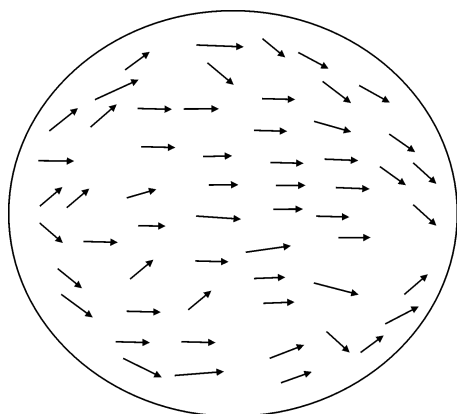


Рис. 5. Расположение молекул *p'*-децилоксибензилиден-*p'*-амино2-метилбутилциннамата (смектическая фаза) на срезе сферы

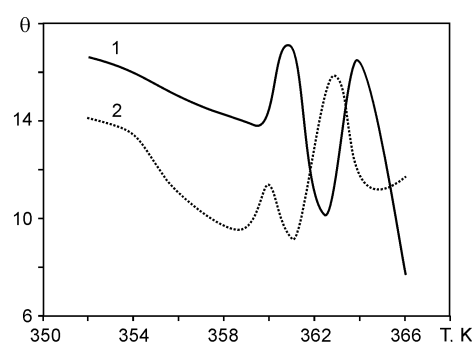


Рис. 6. Изменение наклона молекул в слое смектика при радиальном (1) и аксиальном (2) расположении молекул оболочки в зависимости от температуры

вия между приграничными молекулами при тангенциальном их расположении и жидким кристаллом в объеме увеличивает температуру перехода из смектика C^* в смектик А.

В вытянутой капсуле с жидким кристаллом *p'*-децилоксибензилиден-*p'*-амино2-метилбутилциннамата наблюдается волнообразная деформация молекулярных слоев в области существования смектика С, что представлено на срезе капсулы (рис. 7). При этом буждумы смещены относительно длинной оси капсулы. Найденное в смектике C^* расположение слоев молекул (рис. 7) согласуется с экспериментальными данными по капсулированному смектическому жидкому кристаллу, приведенными в работе [6], что подтверждают результаты расчета.

При экспериментальном изготовлении капсулированного жидкого кристалла сфера может иметь неоднородности и дефекты. Поэтому расчеты расположения молекул *p'*-децилоксибензилиден-*p'*-амино2-метилбутилциннамата были проведены в случае сферы с дефектами. Как видно из рис. 8, в области с увеличенным взаимодействием (на срезе сферы эта область обозначена *b*) концентрация молекул жидкого кристалла увеличивается, а в области с пониженным взаимодействием (область на рисунке обозначена *a*) уменьшается, но

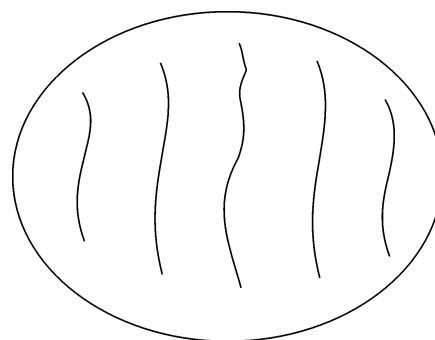


Рис. 7. Вид искривления слоев на срезе капсулы *p'*-децилоксибензилиден-*p'*-амино2-метилбутилциннамата

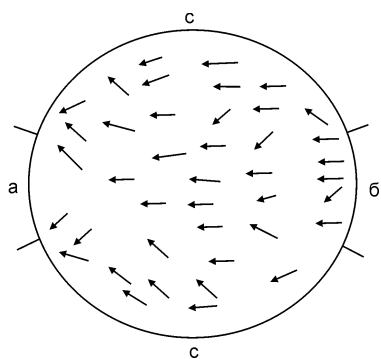


Рис. 8. Расчетное расположение молекул *p'*-децилоксибензилиден-*p'*-амино-2-метилбутилциннамата на срезе сферической капсулы с областями, где граничное взаимодействие молекул больше, чем у всей сферы *c* (область обозначена *б*), и с областью меньшего взаимодействия *a*

увеличивается по ее краям. В кристалле *p'*-децилоксибензилиден-*p'*-амино-2-метилбутилциннамата в центральной части сферы разделение на слои сохраняется.

Таким образом, специально вводя определенные дефекты на поверхности капсулы, можно влиять на расположение молекул в ней.

4. Заключение

Проведено численное моделирование поведения молекул жидкого кристалла *p'*-децилоксибензилиден-*p'*-амино-2-метилбутилциннамата методом молекулярной динамики. Рассмотрено изменение расположения молекул в слоях смектика от наклона молекул на границе, что изменяет силу взаимодействия между молекулами жидкого кристалла и приграничными молекулами. При радиальном расположении молекул в оболочке капсулы изменение наклона молекул в слое смектика начинается при большей температуре, чем при аксиальном расположении молекул оболочки. Рассчитано поведение параметров порядка $\langle P_2 \rangle$ и $\langle P_4 \rangle$ в зависимости от температуры. В капсулированном жидком кристалле в *p'*-децилоксибензилиден-*p'*-амино-2-метилбутилциннамате наблюдается сохранение слоистости, хотя и несколько искаженной. Моделирование расположения молекул жидкого кристалла *p'*-децилоксибензилиден-*p'*-амино-2-метилбутилциннамата в нанокapsule показало, что в сфере имеются два бужума. Их геометрическое положение в капсуле может не быть диаметрально противоположным. Наличие на сфере области с большей силой взаимодействия увеличивает около нее концентрацию молекул, которая в области с пониженным взаимодействием уменьшается, но увеличивается по ее краям. Расчеты показали, что в нанокapsule температура перехода из смектической фазы S^* в смектическую фазу А понижается. Отмечается искривление смектических слоев в фазе смектика S^* в согласии с экспериментальными данными. Таким образом, видно, что наличие капсулы су-

щественно сказывается на расположении молекул в объеме жидкого кристалла.

Литература

1. Жаркова Г.М., Сонин А.С. Жидкокристаллические композиты. – Новосибирск: Наука, 1994. – 214 с.
2. Blinov L.M. Structure and Properties of Liquid Crystals. – Dordrecht: Springer Science Business Media B.V., 2011. – 439 p.
3. Drzaic P.S. Liquid Crystal Dispersions. – Singapore: World Scientific, 1995. – 430 p.
4. Crawford G.P., Zumer S. Liquid Crystals in Complex Geometries. – London: Taylor & Francis Publ. Ltd, 1996. – 584 p.
5. Фотонные кристаллы и нанокompозиты: структурообразование, оптические и диэлектрические свойства / Под ред. В.Ф. Шабанова, В.Я. Зырянова. – Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2009. – 257 с.
6. Presnyakov V., Shabanov V., Zyryanov V., Komitov L. Chiral additive effects on electrooptical response and droplet structure in uniaxially oriented films of polymer dispersed nematic // Mol. Cryst. Liq. Cryst. – 2001. – V. 367. – P. 369–377.
7. Dumrongrattana S., Huang C.C. Polarization and tilt-angle measurements near the smectic-*A*-chiral-smectic-*C* transition of *p*-(*n*-decyloxybenzylidene)-*p*-амино-(2-метил-бутил)циннамат (DOBAMBC) // Phys. Rev. Lett. – 1986. – V. 56. – No. 5. – P. 464–467.
8. Allen M.P., Tildesley D.J. Computer Simulation of Liquids. – Oxford: Clarendon Press, 1987. – 385 p.
9. Frenkel D., Smit B. Understanding Molecular Simulation. From Algorithms to Applications. – London: Academic Press, 1996. – 638 p.
10. Rapaport D.C. The Art of Molecular Dynamics Simulation. – Cambridge: University Press, 1995. – 549 p.
11. Wilson M.R. Progress in computer simulations of liquid crystals // Int. Rev. Phys. Chem. – 2005. – V. 24. – P. 421–455.
12. Berardi R., Zannoni C., Lintuvuori J.S., Wilson M.R. A soft-core Gay-Berne model for the simulation of liquid crystals by Hamiltonian replica exchange // J. Chem. Phys. – 2009. – V. 131. – P. 174107-1–174107-6.
13. Pelaez J., Wilson M. Molecular orientational and dipolar correlation in the liquid crystal mixture E7: A molecular dynamics simulation study at a fully atomistic level // Phys. Chem. Chem. Phys. – 2007. – V. 9. – P. 2968–2975.
14. Picken S.J., van Gunsteren W.F., van Duijnen P.Th., de Jeu W.H. A molecular dynamics study of the nematic phase of 4-*n*-pentyl-4'-cyanobiphenyl // Liq. Cryst. – 1989. – V. 6. – P. 357–371.
15. Клапк Т. Компьютерная химия. – М.: Мир, 1990. – 380 с.
16. Komolkin A.V., Laaksonen A., Maliniak A. Molecular dynamics simulation of a nematic liquid crystal // J. Chem. Phys. – 1994. – V. 101. – P. 4103–4116.
17. Cornell W.D., Cieplak P., Bayly C.I., Gould I.R., Merz K.M., Jr., Ferguson D.M., Spellmeyer D.C., Fox T., Caldwell J.W., Kollman P.A. A second generation force field for the simulation of proteins, nucleic acids, and organic molecules // J. Am. Chem. Soc. – 1995. – V. 117. – P. 5179–5197.
18. Allinger N.L., Yuh Y.H., Lii J.-H. Molecular mechanics. The MM3 force field for hydrocarbons // J. Am. Chem. Soc. – 1985. – V. 111. – P. 8551–8566.
19. Китайгородский А.И. Молекулярные кристаллы. – М.: Наука, 1971. – 424 с.
20. Шабанов В.Ф., Спиридонов В.П., Кориунов М.А. Поляризационные исследования спектра комбинационного рассеяния малых частот парадибром- и парабромхлорбензола // Журн. прикл. спектр. – 1976. – Т. 25. – № 4. – С. 698–701.
21. Korshunov M.A., Shabanov V.F. Size effects on dynamics of a *p*-dibromobenzene lattice // Nanotech. Russia. – 2010. – V. 5. – No. 1–2. – P. 73–77.
22. Korshunov M.A. Low-frequency Raman spectra of paradichlorobenzene thin films // Optic. Spectros. – 2009. – V. 106. – No. 3. – P. 347–349.

23. Swope W.C., Andersen H.C., Berens P.H., Wilson K.R. A Computer simulation method for the calculation of equilibrium constants for the formation of physical clusters of molecules: Application to small water clusters // J. Chem. Phys. – 1982. – V. 76. – P. 637–649.
24. Berendsen H.J.C., Postma J.P.M., van Gunsteren W.F., DiNola A., Haak J.R. Molecular dynamics with coupling to an external bath // J. Chem. Phys. – 1984. – V. 81. – P. 3684–3690.
25. Julin J., Napari L., Vehkamäki H. Comparative study on methodology in molecular dynamics simulation of nucleation // J. Chem. Phys. – 2007. – V. 126. – P. 224517-1–224517-8.
26. Van Meel J.A., Arnold A., Frenkel D., Zwart S.F.P., Belleman R.G. Harvesting graphics power for MD simulations // Mol. Simul. – 2008. – V. 34. – No. 3. – P. 259–266.
27. Sunarso A., Tsuji T., Chono S. GPU-accelerated molecular dynamics simulation for study of liquid crystalline flows // J. Comput. Phys. – 2010. – V. 229. – P. 5486–5497.
28. Коршунов М.А., Шабанов А.В., Крахалев М.Н. Изучение методом молекулярной динамики мезоморфного состояния 4-н'-пентил-4'-цианобифенила в микро- и нанокапсулах // Физ. мезомех. – 2011. – Т. 14. – № 6. – С. 71–78
29. Коршунов М.А., Шабанов А.В. Исследование геликоидальной структуры смектика C₂ методом молекулярной динамики // ФТТ. – 2012. – Т. 54. – № 8. – С. 1596–1599.
30. Meyer R.B., Liebert L., Strzelecki L., Keller P. Ferroelectric liquid crystals // J. Phys. France. – 1975. – V. 36. – P. 69–71.
31. Seppen A. Temperature dependence of the rotatory power in the SmC* phase of DOBAMBC // J. Phys. France. – 1988. – V. 49. – P. 1569–1573.
32. Vtyurin A.N., Ermakov V.P., Ostrovsky B.I., Shabanov V.F. Study of optical second harmonic generation in ferroelectric liquid crystal // Phys. Stat. Sol. B. – 1981. – V. 107. – No 1. – P. 397–402.
33. Luzar M. ¹³C NMR in ferroelectric smectic liquid crystals // Ferroelectrics. – 1984. – V. 58. – P. 115–132.
34. Палто С.П. О моделировании динамики и электрооптических эффектов сегнетоэлектрических кристаллов // Кристаллография. – 2003. – Т. 48. – № 1. – С. 130–147.

Поступила в редакцию 24.01.2012 г.,
после переработки 06.08.2012 г.

Сведения об авторах

Коршунов Михаил Анатольевич, к.ф.-м.н., снс ИФ СО РАН, kors@iph.krasn.ru
Шабанов Александр Васильевич, к.ф.-м.н., снс ИФ СО РАН, alexch@nikel.akadem.ru