

Peculiar features and applicability of asymptotic expansions for anisotropic additive intermolecular interactions in anisotropic media.

1. Theory. Model calculations for O₂ and *p*-terphenyl

P.P.Shtifanyuk, A.V.Dyomin, L.N.Lisetski, S.E.Yakovenko

Institute for Single Crystals, National Academy of Sciences of Ukraine,
60 Lenin Ave., 61001 Kharkiv, Ukraine

Received February 7, 2002

The problem is considered of correct theoretical description of anisotropic intermolecular forces in condensed media, which is of essential importance for property analysis of liquid crystals and melts of molecular crystals on the basis of molecular models. A method has been developed for construction of separable expansions of anisotropic interaction potentials over rotation group invariants, starting from additive models of anisotropic molecules and pairwise-additive interaction of their constituent fragments. For power-type singular potentials, convergence analysis is carried out of asymptotic representations of U -coefficients and their validity for statistical mechanics of anisotropic media. Numerical results are presented for molecules of oxygen and *p*-terphenyl.

Рассматривается проблема корректного теоретического описания анизотропных межмолекулярных взаимодействий в конденсированных средах, имеющая принципиальное значение для анализа свойств жидких кристаллов и расплавов молекулярных кристаллов на основе молекулярных моделей. Развита метод построения сепарабельных разложений потенциалов анизотропных взаимодействий по инвариантам группы вращений, исходя из аддитивных моделей анизотропных молекул и попарно-аддитивного взаимодействия составляющих их фрагментов. Для сингулярных потенциалов степенного типа проведен анализ сходимости асимптотического представления U -коэффициентов и их применимости для построения статистической механики анизотропных сред. Приведены результаты численных расчетов для молекул кислорода и *n*-терфенила.

Introduction

In the recent years, rapid expansion has been observed in the application fields of new functional materials based on organic anisotropic media. As examples of such objects, one can note liquid crystals, molecular crystals, artificial structures imitating biological membranes, oriented polymer films, etc. Specific properties of anisotropic media are largely determined by anisotropic interactions. In a classic work [1], statistical mechanics of molecular system is constructed on the basis of expansions of microscopic parameters over rotation group invariants. For the pair intermolecular interaction energy, this expansion has the form