

4. Гуров, К. П. Основания кинетической теории. М.: «Наука», 1966. 351 с.
5. Де Грот, С. Р., Мазур П. Неравновесная термодинамика. М.: «Мир», 1964.

THE KINETICS OF THE VORTEX MOTION OF THE GAS-LIKED MEDIUM IN THE CONSTANT POTENTIAL FIELD

A. Golov, M. Zudina

*Moscow Region State University
10a Radio st., Moscow, 105005, Russia*

Abstract. The formula of the density of the matter flow in the non-stationary gas-liked system of many particles with regard for the non-potential term is considered. The analytical formulae of the components of the curl of the matter flow are obtained. The analysis and graphical presentation of the obtained formulae are performed.

Key words: kinetics, vortex motion, gas-liked medium.

УДК 533.72

К ТЕОРИИ ФОТООРИЕНТАЦИИ И ФОТОАНИЗОТРОПИИ ПРИ ПОЛЯРИЗАЦИИ И УДАРНОМ СЖАТИИ ДИЭЛЕКТРИКОВ

А.Н. Голов, М.М. Кузнецов, Л.В. Смотрова

*Московский государственный областной университет
105005, Москва, ул. Радио, 10а*

Аннотация. Предложена модель, описывающая фотоориентацию и фотоанизотропию в поляризуемых конденсированных средах. Для случая нестационарной поляризации среды проведено усреднение по фазе быстро меняющихся микроскопических величин. Зависимость от времени макроскопических характеристик среды предложено объяснить изменением концентрации диполей. Рассмотрено влияние нагрева образца в процессе освещения на рассматриваемые явления. Получены формулы для показателя преломления и характеристики двулучепреломления. В качестве примера рассмотрено также возможное применение теории к исследованию оптических свойств ударно сжатых конденсированных веществ.

Ключевые слова: нестационарная поляризация, фотоанизотропия, ударное сжатие.

В настоящий момент одной из новых и наиболее актуальных технологий производства ЖК-дисплеев является безнатирочная технология (т.н. фотоориентация) основанная на явления фотоиндуцированной анизотропии. Ее широкое распространение влечет за собой необходимость разработки теории данного явления, которая бы отвечала со-

временным требованиям теоретического анализа проблем, возникающих при внедрении новых технологий. Существуют различные модели указанных явлений и механизмы для их объяснения, [1 – 7], но имеющиеся экспериментальные данные не позволяют полностью отбросить какой-либо из этих механизмов или отдать полное предпочтение другому. В отличие от предыдущих работ здесь рассматривается статистическая теория нестационарной поляризации в периодических полях, исходящая из нестационарной модификации распределения Больцмана.

Для объяснения фотоориентации жидких кристаллов в фотополимерах, молекулы азокрасителей и прочие кинетические единицы мы рассматривали как системы невзаимодействующих дипольных частиц с постоянным дипольным моментом в переменном электрическом поле. Задачей работы являлось получение формул для показателя преломления и объяснения фотоанизотропии. Предварительная задача заключалась в отыскании формулы поляризации вещества. Считая, что концентрация диполей, распределённых в неполярной конденсированной среде, не высока, пренебрегаем их взаимодействием, учитывая, что диполи слабо взаимодействуют друг с другом и силы их взаимодействия весьма быстро убывают с расстоянием. Поэтому решаем задачу в 1-частичном приближении. Так же предполагаем, что ориентация диполей происходит достаточно свободно, т. е., ближнее окружение диполя не препятствует существенно его ориентации, что близко к имеющимся представлениям о жидких кристаллах. Примем электрическое поле (направленное по OZ) периодическим:

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \sin(\omega t)$$

и ограничим применимость теории областью $\lambda \gg l$ (λ -длина электромагнитной волны, l - плечо диполя). Далее будем использовать основные представления теории Дебая – Ланжевена [8, 9 и др.].

Функцию распределения примем в больцмановском виде

$$f = \frac{1}{Z} e^{\left(\frac{p_0 E_0 \sin(\omega t) \cos(\alpha)}{T} \right)}, \quad (1)$$

где (и далее) p_0 - дипольный момент частицы; T - температура (в единицах энергии, т. е. $k_B T \rightarrow T$), α - угол между напряженностью поля и направлением случайно ориентированного дипольного момента. Обозначим

$$M = \frac{p_0 E_0 \sin(\omega t)}{T}; \quad (2)$$

Статистический интеграл для этой функции (в сферических координатах):

$$Z = \frac{2}{3} \frac{\pi R^3 (e^M - e^{-M})}{M}. \quad (3)$$

Нормированное распределение:

$$F = \frac{3}{2} \frac{M \cdot e^{(Mx)}}{\pi R^3 (e^M - e^{(-M)})} \quad (x = \cos \alpha). \quad (4)$$

Подставим в (4) выражение M , обозначая далее $M=M_0 \sin(\omega t)$; $M_0=p_0 E_0/T$.

$$F_t = \frac{3}{2} \frac{e^{(M_0 \sin(\omega t) \cos(\alpha))} M_0 \sin(\omega t)}{\pi R^3 (e^{M_0 \sin(\omega t)} - e^{(-M_0 \sin(\omega t))})} \quad (5)$$

Используя (5), найдем среднее значение проекции $p_z=p_0 \cos(\alpha)$ на OZ . Получим:

$$\langle p_z \rangle = p_0 \left(\frac{e^M + e^{-M}}{e^M - e^{-M}} - \frac{1}{M} \right); \quad (6)$$

Тогда поляризация, обычно определяемая как объёмная плотность средней геометрической суммы дипольных моментов, с учётом (6) есть:

$$P = N \langle p_z \rangle = N p_0 \left(\frac{e^M + e^{-M}}{e^M - e^{-M}} - \frac{1}{M} \right) \quad (7)$$

(по модулю), где N - концентрация дипольных частиц. Из (7), по известной формуле

$$\mathbf{P} = \xi \mathbf{E}, \quad (8)$$

найдем диэлектрическую восприимчивость среды ξ (нестационарную):

$$\xi = \frac{N p_0 \left(\frac{e^{\left(\frac{p_0 E_0 \sin(\omega t)}{T}\right)} + e^{\left(-\frac{p_0 E_0 \sin(\omega t)}{T}\right)}}{e^{\left(\frac{p_0 E_0 \sin(\omega t)}{T}\right)} - e^{\left(-\frac{p_0 E_0 \sin(\omega t)}{T}\right)}} - \frac{T}{p_0 E_0 \sin(\omega t)} \right)}{E_0 \sin(\omega t)}. \quad (9)$$

Заметим, что формула (9) не имеет особенностей при $\sin(\omega t)=0$, как может показаться. Тогда нестационарная диэлектрическая проницаемость

$$\varepsilon = 1 + 4\pi\xi \quad (10)$$

и показатель преломления (считая, что магнитная проницаемость среды близка к 1)

$$n = \sqrt{1 + 4\pi\xi}. \quad (11)$$

Рассмотрим случай сравнительно слабых полей. Критерий слабости поля (или достаточно высоких температур):

$$\frac{p_0 E_0}{T} \ll 1. \quad (12)$$

Тогда в 1-м приближении показатель преломления для изотропной среды:

$$n = \sqrt{1 + 4\pi N p_0^2 / 3T} \cdot \left[1 - \frac{2\pi N p_0^4 E_0^2 \sin^2(\omega t)}{45T^3 \cdot (1 + 4\pi N p_0^2 / 3T)} \right]. \quad (13)$$

Входящая в предыдущие формулы «быстрая» зависимость от времени (с частотой в оптическом диапазоне) практически не может быть измерена в эксперименте. Поэтому предлагается, учитывая периодичность поля, характеризовать вещество средними по времени (или по фазе) за период значениями найденных выше величин. Такое усреднение для выражения (13) даёт:

$$n = \sqrt{1 + \frac{4\pi N p_0^2}{3T}} \cdot \left[1 - \frac{\pi N p_0^4 E_0^2}{45T^3 \left(1 + \frac{4\pi N p_0^2}{3T} \right)} \right]. \quad (14)$$

Выражение (14) явно не зависит от «быстрого» времени. Зависимость показатель преломления от времени при длительном освещении образца проявляется через «медленную» зависимость текущей концентрации $N(t)$. Для этой зависимости примем в приближении линейной теории релаксации уравнение:

$$\frac{dN(t)}{dt} = -k \cdot (N(t) - N_\infty) \quad (15)$$

т. е., считаем, что скорость изменения концентрации диполей пропорциональна разности мгновенного значения $N(t)$ и значения при насыщении поляризации N_∞ (k – коэффициент, обратный времени релаксации τ). Заметим, что применимость (15) ограничена условием малости величины $(N(t) - N_\infty) / N_\infty$. Решение (15) при начальном условии

$$N(t=0) = N_0 \quad (16)$$

есть

$$N(t) = N_\infty + (N_0 - N_\infty) \cdot \exp(-k \cdot t). \quad (17)$$

Подстановка (17) в (16) даёт:

$$n = \sqrt{1 + \frac{4}{3} \frac{\pi(N_\infty + e^{(-kt)}(N_0 - N_\infty))p_0^2}{T}} \cdot \left[1 - \frac{1}{45} \frac{\pi(N_\infty + e^{(-kt)}(N_0 - N_\infty))p_0^4 E_0^2}{T^3 \left(1 + \frac{4}{3} \frac{\pi(N_\infty + e^{(-kt)}(N_0 - N_\infty))p_0^2}{T} \right)} \right]. \quad (18)$$

Качественная зависимость (18) от времени при разных k показана на рис. 1.

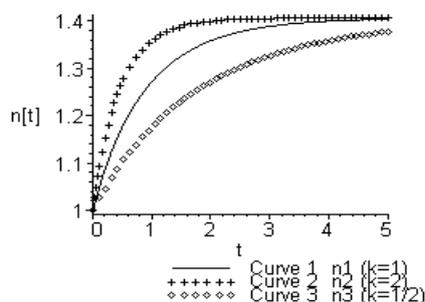


Рис.1. Приведённый показатель преломления (определён отношением (18) к начальному значению). Ординаты здесь и ниже даны в условных единицах ввиду выбора значений параметров, продиктованного возможностями программ и соображениями наглядности.
 Принято: $p_0 = 0,1$; $E_0 = 0,1$; $T = 1$; $N_0 = 1000$, $N_\infty = 2000$.
 Время здесь и ниже – безразмерное, в единицах τ .

В среде с двойным лучепреломлением для пары лучей (обыкновенного и необыкновенного) следует принять два значения k_1 и k_2 (при прочих равных параметрах). Тогда имеем две функции вида (18) и показатель двулучепреломления анизотропного образца (разность показателей преломления обыкновенного и необыкновенного лучей) $\Delta n = n_2(k_2) - n_1(k_1)$. Графики зависимости $\Delta n(t)$ представлены на рис.2.

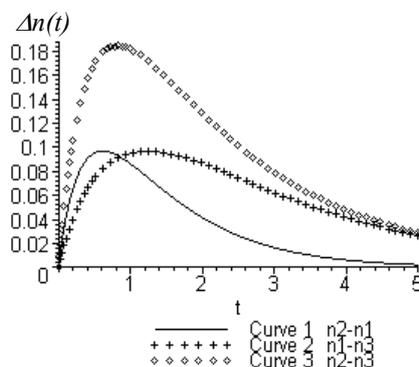


Рис.2. Графики показателя двулучепреломления.
 Значения параметров и обозначения n_1 , n_2 , n_3 – те же, что на рис. 1.

Однако, имеющиеся экспериментальные данные [4, 9 и др.], наряду с зависимостями такого типа, показывают большее разнообразие и более широкий спектр поведения показателя дихроизма фотоанизотропных веществ в зависимости от времени облучения. Для объяснения этого материала следует допустить различие других параметров в (18) для обыкновенного и необыкновенного лучей. Значения E_0 и T естественно считать одинаковыми для обоих лучей. Но не исключено, что асимптотическая концентрация

диполей различна для этих лучей. Пусть эти значения её $N_{\infty 1}$ и $N_{\infty 2}$. Тогда ход кривых для показателей дихроизма изображается следующими графиками.

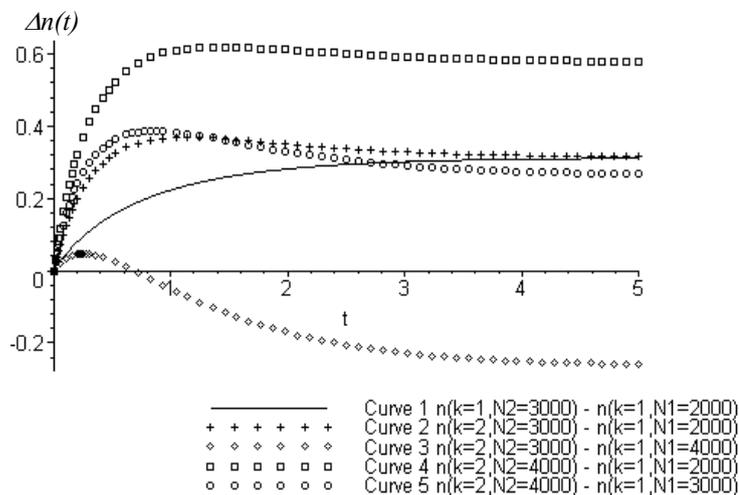


Рис. 3. Показатели дихроизма для лучей с разными k и N_{∞}
(и прочими равными параметрами
[$p_0=0,1; E_0=0,1; T=1; N_0=1000$]). ($N_1 \equiv N_{\infty 1}, N_2 \equiv N_{\infty 2}$)

Семейство кривых, приведённых на рис. 3, в совокупности с кривыми, приведёнными на рис. 2, качественно описывает почти весь экспериментальный материал по рассматриваемым процессам. В свою очередь, экспериментальные данные позволяют оценить отношение $N_{\infty 1}$ и $N_{\infty 2}$.

Представляют интерес последствия нагревания образца при длительном облучении. Предположим, что при не слишком больших мощностях излучения на некотором интервале времени температура растёт линейно, вследствие поглощения части энергии излучения и её перехода в энергию хаотического микроскопического движения диполей. Закон изменения температуры примем в виде:

$$T(t) = T_0 + ht, \quad (19)$$

где $h \ll 1$. Подстановка (19) в (18) влечёт дополнительную зависимость $n(t)$, вследствие чего после этапа начальной поляризации образца идёт прогрессирующая деполяризация его. Причиной этого является усиление теплового хаоса при нагреве. При этом:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} n(t) = 1,$$

т. е., восстанавливается исходное значение приведённого показателя преломления. Соответствующие графики приведены на рис. 4. Разумеется, в практических приложениях неограниченно «тянуть» приближённую зависимость (19) нельзя, и реально рост температуры ограничен фазовым переходом.

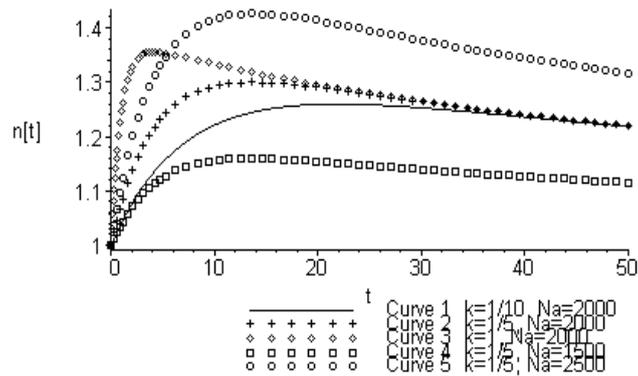


Рис. 4. Зависимость $n(t)$ при росте температуры по закону (19).
 $[p_0=1/20, E_0=1/20, T_0=1, h=1/5, N_0=1000, N_{\infty} \equiv N_{\infty}]$

Приведённые на рис. 4 кривые 1, 2 и 3 позволяют сравнить случаи с разным k при равных N_{∞} . Кривые 2, 4 и 5 позволяют сравнить случаи с разным N_{∞} при равных k . Поскольку при малом h деполяризация происходит значительно медленнее поляризации, здесь для наглядности выбраны иные значения параметров, чем на предыдущих рисунках. При этом, соответственно, изменяется поведение показателя двулучепреломления анизотропного образца (см. рис. 5).

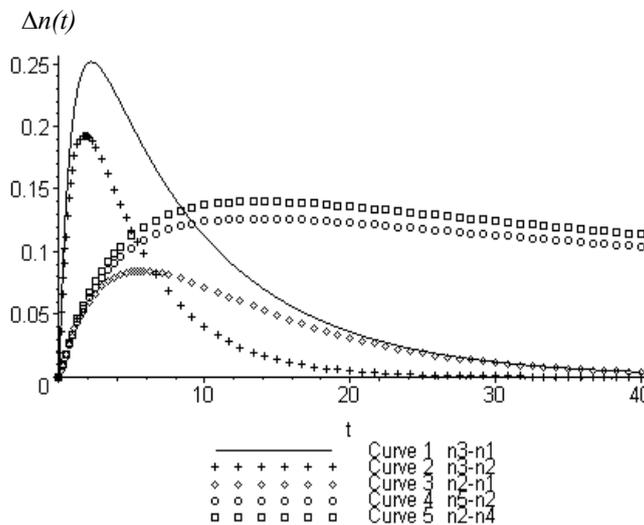


Рис. 5. Зависимость показателя двулучепреломления от времени для лучей с разными k и N_{∞} при росте температуры по закону (19).
 Обозначения $n_1 \dots n_5$ соответствуют кривым на рис. 4

Из рисунка видно, что рост температуры приводит к медленному уменьшению фотоанизотропии (асимптотически – до нуля), с той же оговоркой об ограничении применимости формул и графиков принятой моделью и сделанными приближениями. Следует иметь в виду, что мы предполагаем линейный рост температуры в 1-м приближении, не учитывая как передачу тепла от диполей неполярным частицам среды, так и теплоотдачу образца в целом, что может замедлить и вообще остановить рост температуры. При чрезмерном же нагревании может разрушиться жидкокристаллическая структура образца и сам образец.

В связи с вопросом применимости данной модели и полученных результатов приведём некоторые численные оценки. Условие приближения малой концентрации есть:

$$V_0 \ll V_1.$$

где V_0 – условный собственный объём дипольной частицы, определяемый силами отталкивания электронной оболочки и, приближённо, пропорциональный кубу её линейных размеров; $V_1 = V/N_D$ – средний объём вещества, приходящийся на 1 дипольную частицу, определяемый свойствами и состоянием среды (V – объём образца, N_D – полное число диполей в данном объёме). Отсюда для концентрации находим:

$$N = N_D/V \ll 1/V_0.$$

Была рассчитана величина

$$b = \frac{4\pi N p_0^2}{3T},$$

являющаяся, в сущности, комбинированным параметром, от которого зависит показатель преломления. Значение величины b при обычных значениях N , T и p_0 по порядку величины находится в интервале от 1 до 10^{-11} . При этом значения показателя преломления находятся в интервале от 1 до 1,5.

Описываемое предложенными формулами поведение показателя преломления и характеристики двулучепреломления находится в качественном согласии с экспериментом [4, 9 и др.]. Эти формулы позволяют получить, в области применимости теории, удовлетворительные численные значения показателя преломления и показателя двулучепреломления, имеющие разумный порядок. Данная модель устанавливает связь двулучепреломления с параметрами поляризации вещества. Предсказывается «стирание» оптической анизотропии при длительном нагреве образца в процессе облучения. Разработанная теория может применяться также для объяснения особенностей эффекта Яноши [10].

Формулы (5), (9), (13) параметрически зависят от термодинамических характеристик среды (N , T , p_0) и периодически – от времени. Эти зависимости могут оказаться полезными при исследовании оптических свойств ударно сжатых конденсированных диэлектриков. В обзорной работе [11] приведены (стр.681) качественные закономерности изменения температуры и концентрации свободных электронов по времени за фронтом ударной волны. При подстановке их в формулы (5), (9), (13) получим качест-

венную закономерность в изменении оптической плотности твёрдотельных диэлектриков (типа Cs Br) в процессе релаксации электронной температуры к равновесной фоновой за фронтом ударной волны.

Работа была выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты №10-07-00385-а и 10-03-90028-Бел_а) и Министерства образования и науки РФ (Государственный контракт №02.740.11.5218). Авторы выражают благодарность проф. Беляеву В. В. и проф. Чигринову В. Г. за весьма полезное и плодотворное обсуждение.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Neporent, B.S. and Stolbova O. V.*, Opt. Spektrosk. 14, 624_1963_.
2. *Макушенко, А.М., Столбова О.В.*. Нелинейность обратимого ориентационного фотодихроизма. Доклады Академии Наук СССР 1963. том 149. №1
3. *Непорент, Б.С., Столбова О.В., Макушенко А.М.*. О механизме обратимой ориентации молекул в растворах. Доклады Академии наук СССР 1967, т. 175, №4
4. *Джанг, Я. С., Козенков В.М., Магницкий С.А., Назгорский Н. М.* Фотохромные и фотоанизотропные свойства азокрасителя AD-1 в различных агрегатных состояниях. МГУ, препринт №12/2006, М., 2006.
5. *Chigrinov, V., Pikin S., Verevochnikov A., Kozenkov V., Khazimullin M., Ho J., Dan Ding Huang, Hoi-Sing Kwok.* Diffusion model of photoaligning in azo-dye layers. Phys. Rev., E 69, 2004
6. *Kiselev A.D., Chigrinov V.G., Huang D.D.*, Phys. Rev. E 72, 061703_2005.
7. *Kiselev A.D., Vovk R.G., Egorov R.I., Chigrinov V.G.*, Phys. Rev. A 78, 015815_2008.
8. *Дебай П.* Полярные молекулы. М. – Л. 1931.
9. *Блинов, Л. М.* Электро- и магнитооптика жидких кристаллов. М. «Наука» 1978
10. *Janossy, I. and Kosa T.* Influence of anthraquinone dyes on optical reorientation of nematic liquid crystals, Optics Lett. 17, 1183-1185]. 1992)
11. *Кормер, С.Б.* Оптические исследования свойств ударно сжатых конденсированных диэлектриков // Успехи физических наук, т. 94, вып. 4, с. 641-685.1968

ON THE THEORY OF THE PHOTO-ORIENTATION AND PHOTO-ANISOTROPY UNDER POLARIZATION AND SHOCK COMPRESSION OF THE DIELECTRICS

A. Golov, M. Kuznetsov, L. Smotrova

*Moscow Region State University
10a Radio st., Moscow, 105005, Russia*

Abstract. A model describing photo-orientation and photo-anisotropy in polarized condensed medium is proposed. The averaging of the phase of rapidly varying of microscopic quantities has been carried out for the case of non-stationary polarization of the medium. Temporal variation of the macroscopic characteristics of the medium is proposed to explain the change in concentration of dipoles. The influence of sample heating

during illumination on the phenomenon has been considered. Formulae for the refraction index and birefringence characteristics are obtained. As an example, the possible application of the theory to the investigation of the optical properties of shock compressed condensed matter was also considered.

Key words: non-stationary polarization, photo-anisotropy, shock compression.

УДК 533.6.011

ТЕОРЕМЫ О МАКСИМУМЕ ОТНОСИТЕЛЬНОГО ВЫСОКОСКОРОСТНОГО «ПЕРЕХЛЁСТА» В БИМОДАЛЬНОЙ УДАРНОЙ ВОЛНЕ

М.М. Кузнецов, Ю.Д. Кулешова, Л.В. Смотрова

*Московский государственный областной университет
105005, Москва, ул. Радио, 10а*

Аннотация. Доказаны две теоремы о максимуме относительной величины высокоскоростного «перехлёста» в гиперзвуковой ударной волне. Рассмотрен однокомпонентный газ с внутренними степенями свободы, описываемый бимодальным распределением Тамма-Мотт-Смита. Максимум достигается как по координате вдоль потока в ударной волне, так и по величине относительной скорости молекул.

Ключевые слова: кинетика, уравнение, неравновесный, энергия активации, ударная волна, распределение, молекулярный.

Работа посвящена аналитическому исследованию эффекта высокоскоростной поступательной неравновесности в сильных ударных волнах, когда относительная скорость молекул, сталкивающихся внутри фронта ударной волны, значительно превосходит по величине скорость звука в газовом потоке перед волной. Несмотря на протекшие три десятилетия с начала исследования этого эффекта (в основном численных), в его понимании остается все еще много невыясненных вопросов, в разрешении которых свою полезную роль может сыграть аналитическая бимодальная модель ударной волны. С точки зрения практических приложений наибольший интерес представляет исследование т.н. высокопороговой, высокоскоростной поступательной неравновесности, возникающей при протекании неравновесных химических реакций с высокими энергиями активации в сильно сжатых газовых смесях. Однако и при рассмотрении структуры сильных ударных волн в однокомпонентных, многоатомных газах с неупругими столкновениями можно, как оказалось, установить существенное, четко определенное свойство высокоскоростной поступательной неравновесности, с необходимостью следующее из аналитической бимодальной модели ударной волны. Это свойство, по видимому, незамеченное в численных исследованиях, сводится к тому, что в высокоскоростном «хвосте» бимодальной Тамм-Мотт-Смитовской функции распределения пар молекул, известный ранее [1] эффект «перехлёста», т.е. преобладания числа $N_{\text{неq}}$ высокоскоростных пар внутри фронта волны над числом N_{eq} в поступательно равновес-