

ЛИТЕРАТУРА

1. Fisher M.E. The nature of critical points. - Colorado: Univ. of Colorado Press, 1965.
2. Haus J. and Kher K.W. // Phys. Reps. - 1987. - V. 150. - P. 263.
3. Gomer R. // Rep. Progr. Phys. - 1990. - V. 53. - P. 917.
4. Zhdanov V.P. Elementary Physicochemical Processes on Solid Surfaces. - New York: Plenum, 1991.
5. Allnatt A.R. and Lidiard A.B. Atomic transport in solids.- Cambridge: Cambr. Univ. Press, 1993.
6. Vikhrenko V.S. and Bokun G.S. // Adv. in Synerg. - 1997. - V. 9. - P.180.
7. Vikhrenko V.S. and Bokun G.S. // Ionics. - 1997. - V. 1&2. - P. 44.
8. Zhdanov V.P. // Surf. Sci. - 1985. - V. 140. - P. L 13.
9. Balescu R. Equilibrium and nonequilibrium statistical mechanics. - New York: John Wiley and Sons, 1978.
10. Hill T.L. Statistical mechanics. - New York: Mc Graw, 1956.
11. Binder K. and Landau D.P. // Phys. Rev. - 1980. - V. B21. - P. 1941.
12. Uebing C. and Gomer G. // J. Chem. Phys. - 1991. - V. 95. - P. 7636.
13. Бокун Г.С., Вихренко В.С. // Труды БГТУ. - 1997. - Вып. V. Сер. IV: Физико - математические науки и информатика. - С. 20.
14. Huang K. Statistical mechanics. - New York: John Wiley and Sons, 1963.
15. C. Uebing and G. Gomer, Surf. Sci. 381 (1997) 33.

УДК 536.758

В.В. Белов, доцент;
 А.В. Кондратенко, ассистент;
 В.Б. Немцов, профессор

СВОЙСТВА ЖИДКИХ КРИСТАЛЛОВ В ПРИГРАНИЧНЫХ ОБЛАСТЯХ

The integral equation for one-particle distribution function taking into account an external field gives the basis to calculate the dependence of coefficients of orientational and surface elasticity and viscous coefficients of liquid crystals on the distance from nonhomogeneity source.

В работе [1] было получено интегральное уравнение для одночастичного потенциала средних сил ϕ системы несферических частиц, моделирующих жидкокристаллическую среду, в присутствии некоторого внешнего поля u в следующем виде:

$$\beta\phi(1) = -\frac{\rho}{\Omega} \int d^2C_2(1,2) \exp\{-\beta[\phi(2) + u(2) - 1]\}. \quad (1)$$

Здесь $\beta=1/k_B T$, k_B – постоянная Больцмана; T – абсолютная температура; ρ – плотность среды; Ω – объем в пространстве угловых переменных Ω_1, Ω_2 , задающих ориентацию молекул; $\varphi(1) \equiv \varphi(\mathbf{r}_1, \Omega_1)$; \mathbf{r}_1 – радиус-вектор центра масс молекулы 1; C_2 – прямая корреляционная функция. Если для нее использовать, например, точное решение уравнения Перкуса–Йевики для системы твердых сфер, приведенное уравнение станет замкнутым.

Будем рассматривать полубесконечную среду, ограниченную плоской энергетически однородной поверхностью $z=0$ (ось z перпендикулярна этой поверхности), которая и является источником внешнего поля u . Потенциал его выберем в виде [2]

$$u(z, \mathbf{e}) = \frac{2\pi}{3} \frac{\varepsilon}{\sigma_w^2} \left[\frac{2}{15} \left(\frac{\sigma_0 \sigma_w}{z} \right)^9 - \left(\frac{\sigma_0 \sigma_w}{z} \right)^3 \right], \quad (2)$$

где

$$\begin{aligned} \varepsilon &= \varepsilon_0 (1 - \chi^2 e_x^2)^{-1/2}, \\ \sigma_w &= \left[1 - \chi e_z^2 / (1 - \chi^2 e_x^2) \right]^{-1/2}, \\ \chi &= (d^2 - 1) / (d^2 + 1); \end{aligned} \quad (3)$$

e_x и e_z – проекции единичного вектора \mathbf{e} , определяющего направление длинной оси молекулы, на соответствующие оси координат; d – отношение размера продольной оси к поперечной эллипсоида вращения, моделирующего форму молекулы.

При таком выборе потенциала внешнего поля вычисление интеграла в (1) удобно осуществлять в цилиндрической системе координат, в которой положение точек определяется как $\mathbf{r}_i = \mathbf{s}_i + z_i \mathbf{k}$ ($i=1,2$; $\mathbf{s}_i \perp \mathbf{k}$, \mathbf{k} – единичный вектор, задающий ориентацию оси z). Поэтому

$$C_2(1,2) = C_2(\mathbf{r}_1, \Omega_1, \mathbf{r}_2, \Omega_2) = C_2(|\mathbf{s}_1 - \mathbf{s}_2|, z_1, z_2, \Omega_1, \Omega_2). \quad (4)$$

В дальнейшем будем считать, что зависимость прямой корреляционной функции от пространственных и угловых переменных имеет вид [3]

$$C_2(\mathbf{r}, \Omega_1, \Omega_2) = C_2(r / \sigma(\Omega_1, \Omega_2)), \quad (5)$$

где

$$r = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|,$$

$$\sigma(\Omega_1, \Omega_2) = \sigma_0 \left\{ 1 - \frac{\chi}{2r^2} \left[\frac{(\mathbf{r} \cdot (\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2))^2}{1 + \chi \mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_2} + \frac{(\mathbf{r} \cdot (\mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_2))^2}{1 - \chi \mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_2} \right] \right\}^{-1/2} \quad (6)$$

— параметр, определяющий ориентацию частиц в межчастичном потенциале взаимодействия Гэя-Берне [4], и для $C_2(t)$ воспользуемся упоминавшимся выше точным решением уравнения Перкуса-Йевики [5]:

$$C_2(t) = (1 - \gamma)^{-4} \left[-(1 + 2\gamma)^2 + 6\gamma \left(1 + \frac{\gamma}{2}\right)^2 t - \frac{1}{2} \gamma (1 + 2\gamma)^2 t^3 \right]. \quad (7)$$

где

$$\gamma = \frac{4}{3} \pi \rho \sigma_0^3.$$

На основе изложенного было осуществлено численное решение уравнения (1), что, в свою очередь, позволило выяснить особенности поведения некоторых важных характеристик жидкого кристалла вблизи поверхности. В качестве таковых были выбраны одночастичная плотность числа частиц, параметр порядка, модули Франка, характеризующие ориентационную упругость нематических жидких кристаллов и коэффициент сдвиговой вязкости. Плотность числа частиц имеет вид

$$\rho_1(z_1, \Omega_1) = \frac{\rho}{\Omega} \exp\{-\beta[\varphi(z_1, \Omega_1) + u(z_1, \Omega_1)]\}, \quad (8)$$

а параметр порядка определен как среднее значение второго полинома Лежандра (усреднение осуществляется с помощью одночастичной функции (8)):

$$\langle P_2 \rangle = \langle (3 \cos^2 \vartheta - 1) / 2 \rangle, \quad (9)$$

где ϑ — угол между длинной осью молекулы и некоторым фиксированным направлением (в качестве такового, в силу задания потенциала внешнего поля в виде (2),(3), было выбрано положительное направление оси z). При этом внимание было сосредоточено, главным образом, на выяснении зависимости этих величин от расстояния до поверхности $z=0$, являющейся источником неоднородности. Поведение модулей Франка в зависимости от плотности и температуры было исследовано ранее в работе [6]. При расчетах использовались безразмерные величины $\rho = \sigma_0^3 / v$ и $\beta = \epsilon_0 / k_B T$.

Численный эксперимент выявил короткодействующий характер указанных величин, т.е. влияние поверхности распространялось на расстояния порядка двух-двух с половиной диаметров молекул, что, в общем-то, не явилось большой неожиданностью, поскольку функция (7) определена

только при $t \leq 1$. Поскольку такое поведение не соответствовало результатам молекулярно-динамических расчетов, в дальнейшем использовалось модифицированное ядро уравнения (1), в которое наряду с C_2 , определяемой выражением (7), было добавлено слагаемое, продолжающее C_2 в область $t > 1$ и отражающее асимптотику прямой корреляционной функции, которая, как известно, определяется притягивающей частью межчастичного потенциала и убывает как t^{-6} , если иметь в виду упомянутый выше потенциал Гэя-Берне.

Такая модификация привела к существенно более далекому проникновению неоднородности в глубь среды – это отчетливо просматривается на приведенных рисунках для значений $\rho=0,32$ и $1/\beta=0,75$, где все величины представлены как функции расстояния от источника неоднородности (стенки), расположенного в плоскости $z=0$.

На рисунке 1 представлена плотность числа частиц (одночастичная функция распределения), поведение которой находится в качественном согласии с результатами молекулярно-динамических расчетов [2] (в этой работе представлена гистограмма распределения числа частиц в зависимости от расстояния до стенки).

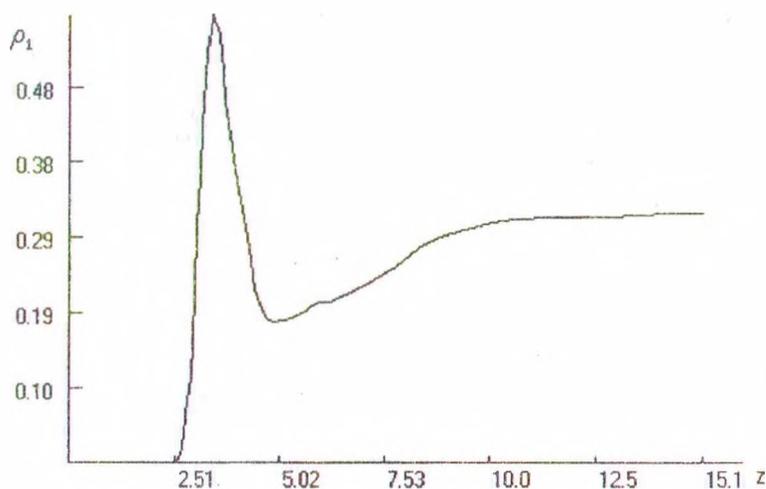


Рис. 1

На рисунке 2 отражено поведение параметра порядка по мере удаления от стенки, где сплошная линия соответствует результатам данной работы, черными квадратами отмечены соответствующие значения, полученные в цитированной работе [2].

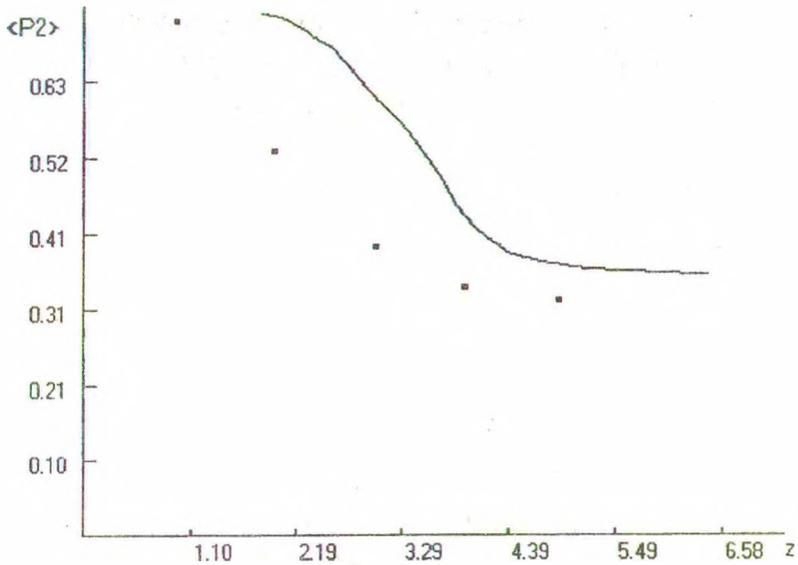


Рис. 2

На рисунках 3 – 6 представлено поведение модулей Франка K_{11} , K_{22} , K_{33} и модуля поверхностной упругости K_{24} , рассчитанных по формулам, полученным в (7). Видно, что на достаточно больших расстояниях от стенки модули Франка выходят на значения, близкие к тем, которые были получены для однородной среды в работе [6].

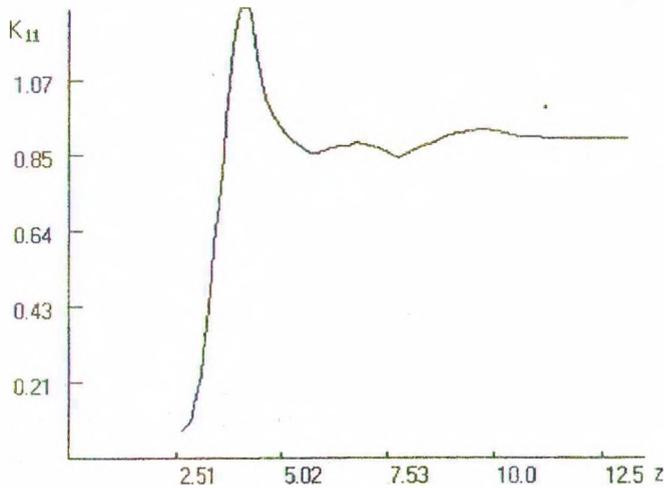


Рис. 3

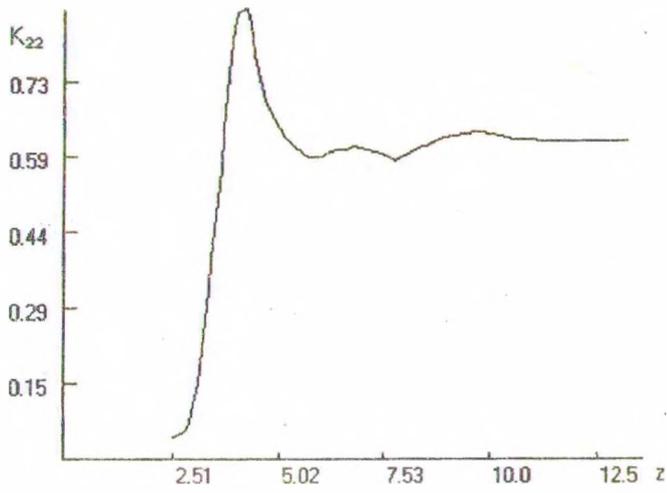


Рис. 4

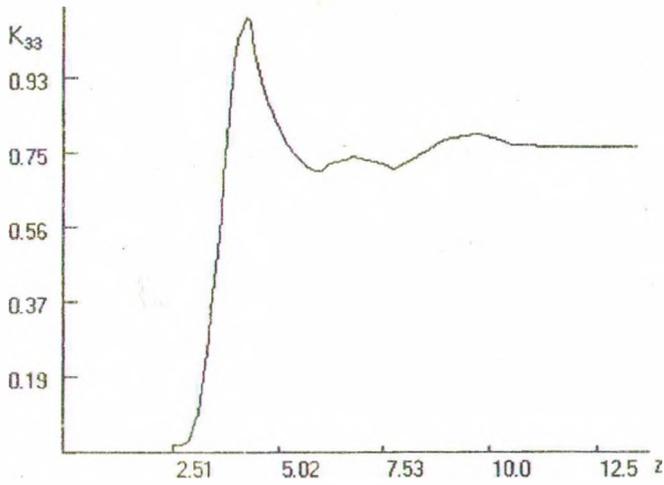


Рис.5

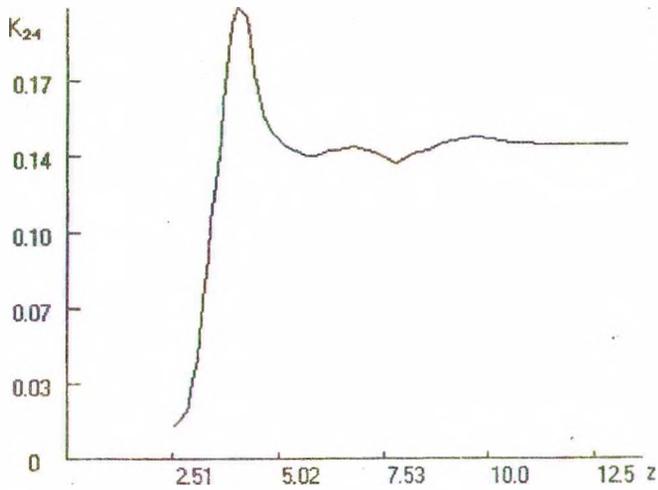


Рис. 6

На рис. 7 представлена зависимость от расстояния z до стенки коэффициента сдвиговой вязкости η нематика в приведенном виде. Этот коэффициент связан с коэффициентом вязкости Лесли α_4 [7] соотношением

$$\alpha_4 = 2\eta\rho(D^{\text{rot}}\beta)^{-1}, \quad (10)$$

где D^{rot} - 'эффективный' коэффициент вращательной диффузии; ρ - плотность числа частиц. Зависимость коэффициента вязкости от расстояния до стенки получена на основании выражений для коэффициентов вязкости нематического жидкого кристалла через скалярный параметр порядка [8]. Из рис. 7 видно, что при удалении от стенки вязкость уменьшается и далее выходит на свое объемное значение.

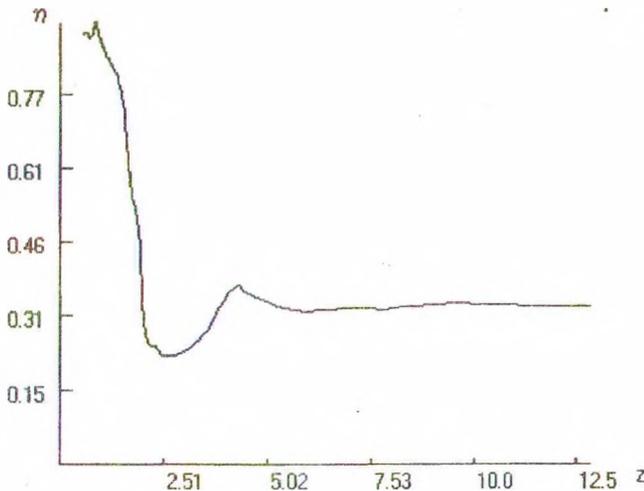


Рис. 7

ЛИТЕРАТУРА

1. Белов В.В., Немцов В.Б. Интегральное уравнение для унарной функции распределения неоднородных систем в приграничных областях//Труды БГТУ, сер. ф.-м. наук. Минск, 1997, вып. V.- С.42-48.
2. Цыкало А.Л., Багмет А.Д. Молекулярно-динамическое исследование нематических жидких кристаллов и тонких жидкокристаллических пленок//Acta Physica Polonica, 1979.- Vol.A55, № 1. -P.111-124.
3. Немцов В.Б. Корреляционные функции параметра порядка для ориентированных нематических жидких кристаллов//ДАН БССР, 1986.-Т.30, № 2.- С.135-138.
4. Gay J.G., Berne B.J. Modification on the overlap potential to mimic a linear site-site potential//J. Chem. Phys., 1981.-Vol. 74, № 6.-P.3316-3319.
5. Балеску Р. Равновесная и неравновесная статистическая механика.-М.: Мир, 1978.-Т.1.
6. Белов В.В. Статистико-механическое описание свойств модельной системы с нецентральной взаимоделиствием: модули ориентационной упругости//Труды БГТУ, сер. ф.-м. наук. Минск, 1996, вып.IV.- С.27-34.
7. Немцов В.Б. Неравновесная статистическая механика систем с ориентационным порядком.- Мн.: Тэхналогія, 1997.
8. Kondratenko A.V., Nemtsov V.B. Correlation theory of viscosity of nematic liquid crystals // Adv. in Synergetics, 1997, Vol. 9. – P. 132 - 140.

УДК 536.758

В.Б. Немцов, профессор

ПРИМЕНЕНИЕ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ БИОЛОГИЧЕСКИХ МЕМБРАН В ТЕОРИИ ИХ УПРУГИХ СВОЙСТВ

The bending elasticity of biological membranes is considered in the terms of their liquid crystal model with help of which the bending moduli are estimated.

Идеи и методы физики термотропных жидких кристаллов успешно используются в большом числе приложений. Среди них - теория лиотропных и полимерных жидких кристаллов [1,2]. Эти идеи начали применяться и в теории биологических мембран [3]. Однако конкретная разработка жидкокристаллической модели все еще отсутствует.

Цель данной работы состоит в разработке метода расчета параметров упругости биологических мембран с помощью ее жидкокристаллической модели, позволяющей провести вычисление модулей изгибной упругости