

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РЕСПУБЛИКИ ТАДЖИКИСТАН

**ТАДЖИКСКИЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени академика М.С. Осими**

УДК.5.32.7. + 532.783.

На правах рукописи

АБДУРАСУЛОВ ДАЛЕР АНВАРОВИЧ

**ИССЛЕДОВАНИЕ РАВНОВЕСНЫХ И ДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ
ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ТЕРМОТРОПНЫХ НЕМАТИЧЕСКИХ
ЖИДКИХ КРИСТАЛЛОВ**

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание учёной степени кандидата технических
наук по специальности: 01.04.14 – Теплофизика и теоретическая теплотехника

Душанбе – 2023

**Работа выполнена на кафедре «Сети связи и системы коммутации»
Таджикского технического университета имени академика М.С. Осими**

- Научный руководитель:** **Одинаев Саидмухамед**, доктор физико-математических наук, профессор, академик НАН Таджикистана, заслуженный деятель науки и техники Таджикистана
- Официальные оппоненты:** **Шарифов Абдумумин**, доктор технических наук, профессор кафедры сельское строительство и благоустройство городов Дангаринского государственного университета
Холиков Мазбут Махмудович, кандидат технических наук, проректор по учебной части Института промышленности и сервиса города Худжанда
- Ведущая организация:** **кафедра общей физики Бохтарского государственного университета имени Носира Хусрава.**

Защита состоится 6 марта 2023 г. в 14⁰⁰ часов на заседании диссертационного совета 6D.KOA-041 при Таджикском техническом университете имени академика М.С. Осими по адресу: 734042, г. Душанбе, проспект академиков Раджабовых, 10а, e-mail: d.s6d.koa.041@yandex.ru

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке и на сайте <http://web.ttu.tj> Таджикского технического университета имени академика М.С. Осими

Автореферат разослан «4» февраля 2023 года

Учёный секретарь
диссертационного совета 6D.KOA-041,
кандидат технических наук, доцент

Тагоев С.А.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность и необходимость проведения исследований по теме диссертации. Сегодня трудно представить отрасль производства или технологии, где не используются жидкокристаллические материалы. Малая инертность, хорошее качество работы, высокая энергоэффективность жидкокристаллических материалов сделали их основными элементами информационных и коммуникационных систем, телевидения, радиоэлектроники, а также других отраслей современной технологии. Исследование жидкокристаллического состояния вещества превратилось в одну из актуальных и быстро расширяющихся областей научных исследований, имеющей большое фундаментальное и прикладное значение.

Известно, что в жидкокристаллическом состоянии могут находиться только определённые вещества, состоящие из удлинённых или дискообразных молекул, и это в ограниченных областях значений термодинамических параметров состояния. В связи с этим исследование закономерностей поведения теплофизических параметров жидких кристаллов в интервале значения термодинамических параметров, соответствующих их жидкокристаллическому состоянию, особенно в окрестностях точки фазовых переходов, **является актуальной задачей физики жидкостей и жидких кристаллов.**

Основными свойствами жидкостей, в том числе жидких кристаллов является текучесть. В текучих системах возникают гидродинамические потоки, вязкоупругие процессы и релаксационные явления, которые влияют на значение и свойства других теплофизических параметров системы.

При реальных условиях эксплуатации жидкие системы подвергаются высокочастотным и высокоинтенсивным возмущениям. Установлено, что теплофизические свойства жидкостей при высокочастотных динамических процессах существенно отличаются от их аналогичных свойств при медленных и статических процессах. При этом характер влияния внешних динамических возмущений на свойства теплофизических параметров не одинаков для различных жидкостей, а существенно зависит от особенностей молекулярной структуры жидкостей и от механизмов происходящих в них внутренних релаксационных процессов.

В связи с вышеизложенным комплексное, в том числе теоретическое исследование равновесных и динамических теплофизических свойств нематических жидких кристаллов с учётом вкладов особенностей их молекулярной структуры и механизмов происходящих в них внутренних релаксационных процессов в широком интервале изменения термодинамических параметров состояния и частоты внешнего возмущения **является актуальной задачей физики жидкого состояния и составляет основное содержание настоящей диссертационной работы.**

Степень разработанности темы диссертации. Жидкие кристаллы были открыты в 1888 году австрийским ботаником Рейницером. Парадоксально, но факт, что из-за слабой перспективы практического применения исследованием жидких кристаллов на начальном этапе их открытия занимались отдельные учёные.

С определением возможности широкого применения жидких кристаллов в различных технических устройствах, начиная со второй половины прошлого века, начинается период бурного развития физико-технического исследования жидких кристаллов. Разрабатываются макроскопические и микроскопические методы описания свойств жидких кристаллов. В работах П. де Жена термодинамическая теория Ландау Л.Д. для фазовых переходов второго рода удачно обобщается для описания фазовых переходов в жидких кристаллах.

Лесли М. и Эриксен Дж.Л. в представлении жидких кристаллов, как сплошной среды, описывают вязкоупругие свойства НЖК. Майером - Заупе развивается молекулярная теория среднего поля для описания ориентационных свойств НЖК. Издаются обобщающие научные монографии Чандрасекаром С. по теоретическому описанию, Капустиним А.П. по экспериментальному исследованию и Цыкало А.Л. по компьютерному исследованию теплофизических свойств НЖК. Недавно Беляевым В.В. была опубликована серия обзорных и обобщающих работ по гидродинамическому описанию и экспериментальному исследованию вязкоупругих свойств НЖК.

Для комплексного исследования жидких кристаллов создаются крупные научные группы и центры: Орсейский центр во Франции; Ивановский и другие центры в СССР; известная группа индийских учёных в Бангалоре; Кентская группа учёных в США и многие другие.

В 1970-1992 гг. группа учёных Таджикского аграрного университета имени Ш. Шотемурова (Бабаев А.С., Сабуров Б., Маллабоев У. и др) занимались экспериментальным, а в Физико-техническом институте имени С.У.Умарова НАН Таджикистана (Салахутдинов М.И., Часовских В.П., Рахимов А.) машинным моделированием и акустическим исследованием жидких кристаллов.

Последние годы для теоретического исследования неравновесных свойств жидкостей, в том числе и жидких кристаллов успешно применяется метод неравновесной функции распределения (НФР) Зубарева Д.Н. По мнению многих учёных, этот метод не содержит некоторые ограничения, присущие другим методам статистической теории жидкого состояния, и его можно успешно применить для описания теплофизических свойств и сложных жидких систем.

Исходя из вышеприведенного анализа в качестве **главной цели** диссертационной работы было определено: **теоретическое исследование равновесных и динамических свойств теплофизических параметров нематических жидких кристаллов (НЖК) в широком диапазоне изменения температуры, давления, плотности и частоты внешнего возмущения.**

Для реализации этой цели планировалось решение следующих задач:

1. Обобщение и применение **метода неполного термодинамического потенциала** для исследования аномальных ориентационных свойств теплофизических параметров НЖК в широком диапазоне изменения термодинамических параметров состояния, включая окрестности точки фазового перехода нематический жидкий кристалл-изотропная жидкость (НЖК-ИЖ);

2. В рамках обобщённого для описания сложных асимметричных жидких систем метода НФР исследовать равновесные и динамические свойства теплофизических параметров термотропных НЖК с учётом особенностей их мо-

лекулярной структуры и механизмов, происходящих в них внутренних термических релаксационных процессов;

3. Провести численные расчёты зависимости равновесных и динамических теплофизических параметров НЖК от температуры, плотности, давления и частоты, создать банк данных о значениях этих параметров в широком диапазоне изменения температуры, плотности, давления и частоты внешнего возмущения.

Объектами исследования являются термотропные нематические жидкие кристаллы в нематической и изотропной фазах.

Как предмет исследования определены: теоретическое описание равновесных и динамических теплофизических свойств НЖК в широком интервале изменения термодинамических параметров состояния и частоты внешнего возмущения; анализ механизмов внутренних релаксационных процессов и определение их вкладов в динамические вязкоупругие свойства НЖК.

Методы исследования. В диссертации были использованы два известных метода теоретического описания теплофизических свойств жидкостей:

1. **метод неполных термодинамических потенциалов** для макроскопического описания равновесных теплофизических свойств НЖК и аномальных поведений теплофизических параметров НЖК в окрестностях точки фазового перехода НЖК-ИЖ;

2. **метод НФР** для статистического описания равновесных и динамических теплофизических свойств НЖК с учётом вкладов их молекулярной структуры и происходящих в них внутренних релаксационных процессов;

Отрасль исследования. Физика жидкостей и жидких кристаллов

Основная информационная и методологическая база. Научная периодика и традиционно-развитые статистические и термодинамические методы исследования жидких систем в Республике Таджикистан (основанные в 60-е годы академиком Адхамовым А.А. и его учениками).

Достоверность полученных в диссертации результатов обеспечивалась использованием апробированных методов исследования, сопоставлением полученных результатов с экспериментальными данными и с результатами известных работ.

Научная новизна полученных результатов:

1. Метод неполного термодинамического потенциала **обобщен и применен** для описания вкладов дальнего ориентационного порядка и флуктуации ориентационного порядка в аномальном поведении равновесных теплофизических параметров НЖК в окрестностях точки фазового перехода НЖК-ИЖ; **определено** аналитическое выражение для равновесного ориентационного параметра порядка, позволяющее корректно описать зависимость теплофизических параметров НЖК от температуры и от давления;

2. **Получены** аналитические выражения и проведены численные расчёты зависимости скачки плотности, энтропии, теплоёмкости, теплового расширения и сжимаемости НЖК от температуры и давления с учётом вкладов ориентационного порядка и флуктуации ориентационного параметра порядка в

их аномальном поведении вблизи точки фазового перехода НЖК-ИЖ;

3. **Показана** возможность стабилизации и управление температурной областью существования нематической фазы (рабочая область жидкокристаллических приборов) с помощью изменения давления жидкости;

4. Впервые **определено** комплексное выражение для теплоёмкости изотропной фазы НЖК, корректно учитывающее вклады теплового движения и взаимодействия молекул, ближних радиальных и ориентационных структур и флуктуации ориентационного порядка в определении характера зависимости теплоёмкости НЖК от температуры и плотности в изотропной окрестности точки фазового перехода НЖК-ИЖ;

5. впервые **проведено** термодинамическое и статистическое описание реологии НЖК, **получены** аналитические выражения для ориентационных модулей упругости НЖК (при ориентационных деформациях типа поперечного изгиба, продольного изгиба и кручения), **вычислена** зависимость ориентационных модулей упругости ПАА от температуры, плотности и давления;

6. Сформулирована замкнутая **система уравнения обобщённой гидродинамики**, позволяющая описать динамические вязкоупругие свойства асимметричных жидкостей; **проведён** детальный анализ молекулярных механизмов термических релаксационных процессов и определены их вклады в динамические вязкоупругие свойства НЖК;

7. Получены упрощённые аналитические выражения для динамических коэффициентов ориентационных вязкостей и соответствующих им динамических модулей ориентационной упругости НЖК; **проведены** численные расчёты зависимости времени вращательной релаксации и динамических ориентационных вязкоупругих параметров ПАА от температуры, плотности, давления и частоты.

Теоретическая ценность исследования. Полученные в диссертации уравнения и аналитические выражения отражают общие теоретические основы изучаемых процессов. При выборе соответствующих моделей жидкостей и конкретизации параметров могут быть использованы для описания подобных свойств схожих жидких объектов.

Установленная методом НФР связь равновесных и динамических параметров НЖК от формы молекул и энергии их взаимодействия позволяют описать нормальные и аномальные свойства НЖК как в нематической, так и в изотропной фазах.

Практические значения полученных в диссертации результатов:

- **полученные** в диссертации аналитические выражения и формулы могут быть использованы для определения и расчёта как равновесных, так и динамических значений теплофизических параметров НЖК при различных условиях их эксплуатации;

- **установленная** в диссертации возможность изменения температурной области существования НЖК изменением давления может быть использована для стабилизации и управления температурной областью работы жидкокристаллических приборов;

- **выявленная** в диссертации связь теплофизических параметров НЖК с формой, размером, массой и энергией взаимодействия молекул может быть использована как физическая основа создания жидкокристаллических материалов с заданными теплофизическими и другими физико-техническими свойствами;

- **имеющиеся** в диссертации материалы могут быть полезны докторантам, аспирантам, соискателям, магистрантам и студентам старших курсов физических, физико-химических и технологических специальностей при чтении спецкурсов, выполнении ими диссертации и дипломных работ.

Результаты исследования внедрены для выполнения научно-исследовательских работ и чтения спецкурсов на физическом факультете Таджикского национального университета и для проведения лабораторных и практических занятий на кафедре Сети связи и системы коммутации Таджикского технического университета имени академика М.С. Осими.

Положения, выносимые на защиту.

1. результаты обобщения и применения метода неполных термодинамических потенциалов для описания аномальных свойств теплофизических параметров жидких кристаллов как в нематической, так и в изотропной фазах;

2. результаты обобщения и применения метода НФР для описания равновесных и динамических теплофизических свойств НЖК;

3. получена замкнутая система уравнения обобщённой гидродинамики для описания динамических вязкоупругих свойств асимметричных жидкостей и общих аналитических выражений для динамических коэффициентов вязкостей и динамических модулей упругостей НЖК, корректно учитывающих особенности молекулярной структуры и механизмов происходящих в жидкости внутренних релаксационных процессов;

4. результаты детального анализа механизмов релаксационных процессов и определение вклада вращательных релаксационных процессов в ориентационные динамические вязкоупругие свойства НЖК.

5. результаты численных расчётов зависимости равновесных и динамических теплофизических параметров ПАА и МБА от температуры, давления, плотности и частоты.

Апробация работы. Основные результаты диссертационной работы были доложены на: V Международной конференции «Современные проблемы физики», Душанбе, ФТИ имени С.У. Умарова НАН Таджикистана, 18-19 ноября 2016 г.; VIII научно-практической конференции «Перспективы развития науки и образования». -Душанбе, ТТУ имени академика М.С. Осими, 3-4 ноября 2016; Международной конференции «Электроэнергетика Таджикистана: актуальные проблемы и пути их решения», Филиал МЭИ в Душанбе, 19 октября 2019г; Международной научно-практической конференции студентов, магистрантов, аспирантов и молодых ученых «Мухандис-2019» Душанбе, ТТУ имени академика М.С. Осими. -2019; Научно-практической конференции «Современные проблемы физико-конденсированного состояния и ядерной физики» -Душанбе, ТНУ 19 февраля 2020г; Международной научно-

практической конференции «Электроэнергетика Таджикистана. Проблемы энергосбережения, энергоэффективности и использования возобновляемых источников энергии», Филиал МЭИ в Душанбе, 29-30 апреля 2021г; Международной научно-практической конференции «Технические науки и инженерное образование для устойчивого развития», Душанбе, ТТУ имени академика М.С. Осими 12-13 ноября 2021 г; Республиканской научно-практической конференции «Наука-основа инновационного развития» раздел фундаментальные науки. Душанбе, ТТУ имени академика М.С. Осими, 2022; Республиканской научно-практической конференции «Современные проблемы естествознания в науке и образовательном процессе». Душанбе, РТСУ 27 мая 2022г; VIII Международной конференции «Современные проблемы физики», Душанбе, ФТИ имени С.У. Умарова, 21-22 октября 2022г.

Личный вклад соискателя. Все основные аналитические и численные результаты диссертационной работы получены при активном участии соискателя. Составление литературного обзора, проведение численного расчёта на ЭВМ, составление таблиц и графиков, сбор и анализ материалов, оформление диссертации и автореферата в основном выполнена соискателем.

Публикации. По результатам исследований опубликовано 22-работ, в том числе 4-статьи в журналах рекомендованных ВАК при Президенте Республики Таджикистан и 15 статьи в республиканской и международной конференции.

Соответствие паспорту специальности.

По тематике и методам исследования настоящая диссертационная работа соответствует паспорту специальности 01.04.14 «Теплофизика и теоретическая теплотехника» для технических наук: п 2. аналитические и численные исследования теплофизических свойств веществ в различных агрегатных состояниях.; п.4. экспериментальные и теоретические исследования процессов взаимодействия интенсивных потоков энергии с веществом; п. 6. Экспериментальные исследования, физическое и численное моделирование процессов переноса массы, импульса и энергии в многофазных системах и при фазовых превращениях.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, четырёх глав, заключения и списка цитированной литературы. Содержание диссертации изложено на **143** страницах компьютерного набора, **39** рисунков и **15** таблиц. Список литературы содержит **124** ссылки.

ОСНОВНЫЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ:

Во **введении** обосновывается актуальность темы исследования, определяются цели и задачи диссертационной работы, коротко характеризуется состояние исследуемой в диссертации научной проблемы, констатируется научная новизна, теоретическая и практическая значимость полученных в диссертационной работе результатов.

В первой главе приведены обзор и анализ экспериментальных и теоретических работ по исследованию зависимости теплофизических параметров НЖК от температуры, плотности, давления и частоты.

В **первом разделе** главы представлены краткая информация об истории открытия, этапы развития, основные понятия, принципы классификации и

другие характеристики жидкокристаллических веществ.

Во **втором разделе** главы анализированы результаты экспериментальных исследований зависимости теплофизических параметров НЖК от термодинамических параметров состояния. Приведено определение дальнего скалярного

$$\eta = \frac{1}{2}(3 \cos^2 \theta - 1)_{\delta V}, \quad (1)$$

и тензорного ориентационного параметров порядка в жидких кристаллах,

$$S^{\alpha\beta} = \eta \left(n_\alpha n_\beta - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} \right), \quad (2)$$

где \vec{n} - единичный вектор, указывающий направление средней ориентации молекул (директор), θ -угол между \vec{n} и длиной оси молекул.

Во **третьем разделе** описано состояние теоретических исследований равновесных и неравновесных теплофизических свойств НЖК. Больше уделено внимание на гидродинамическую теорию Лесли-Эриксона. Обсуждена термодинамическая теория Ландау-де Жена и приведено разложение

$$\Phi(P, T, S_{\alpha\beta}) = \Phi_i(P, T) + \frac{1}{2} A S_{\alpha\beta}^2 + \frac{1}{3} B S_{\alpha\beta} S_{\beta\gamma} S_{\gamma\alpha} + \frac{1}{4} C S_{\alpha\beta}^2 S_{\gamma\sigma}^2 + \frac{1}{2} D (\nabla S_{\alpha\beta})^2 \quad (3)$$

Анализируется содержание теории Майера-Заупе и приведено выражение Майера-Заупе для потенциала межмолекулярного взаимодействия

$$\Phi(\theta_{ij}) = -\frac{A}{V^2} \eta (1 - \frac{3}{2} \sin^2 \theta_i), \quad (4)$$

где, $\frac{A}{V^2}$ - энергетическая глубина потенциала, а η - определяется выражением (1).

Описаны основные принципы и понятия метода НФР и приведено выражение обобщённого для описания сложных асимметричных жидкостей НФР в виде

$$f(t) = f_L(1 + \Delta f) = f_L + f_t, \quad (5)$$

где:

$$f_L = f_0 \left\{ 1 - \xi_t^{\alpha\beta}(\vec{x}, t) \tilde{P}_t^{\alpha\beta}(t) - \xi_{tr}^{\alpha\beta}(\vec{x}, t) \tilde{P}_{tr}^{\alpha\beta}(t) - \xi_r^{\alpha\beta}(\vec{x}, t) \tilde{P}_r^{\alpha\beta}(t), - \dots \right\} \quad (5a)$$

- локально равновесная функция распределения молекул; а

$$f_0 = \frac{\exp\{-\beta(\vec{x}, t)(H - \mu(\vec{x}, t)N)\}}{\int \dots \int \exp\{-\beta(\vec{x}, t)(H - \mu(\vec{x}, t)N)\} d\Gamma} \quad (5b)$$

- функция канонического распределения Гиббса;

$$f_t = f_0 \Delta f = -f_0 \int_{-\infty}^0 e^{\varepsilon t_i} dt_1 \left[+ \xi_t^{\alpha\beta}(\vec{x}, t + t_1) \tilde{I}_t^{\alpha\beta}(t_1) + \xi_{rt}^{\alpha\beta}(\vec{x}, t + t_1) \tilde{I}_{tr}^{\alpha\beta}(t_1) + \xi_r^{\alpha\beta}(\vec{x}, t + t_1) \tilde{I}_r^{\alpha\beta}(t_1) + \dots \right], \quad (5b)$$

- неравновесная часть статистической функции распределения молекул, которые нами будут использованы для решения диссертационных задач.

Во **второй главе** на основе метода неполного термодинамического потенциала (НТП) исследованы вклады дальнего ориентационного порядка и флуктуации ориентационного порядка в аномальном поведении равновесных теплофизических параметров НЖК вблизи точки фазового перехода НЖК-ИЖ

В **первом разделе этой главы** подставлением (2) в (3) для плотности термодинамического потенциала НЖК получено выражение

$$\varphi(P, T, \eta, \vec{n}) = \varphi_n(P, T, \eta_0) + \Delta\varphi_f + \Delta\varphi_d, \quad (6)$$

$$\text{где:} \quad \varphi_n(P, T, \eta) = \varphi_i(P, T) + 3A\eta^2 - 2B\eta^3 + 9C\eta^4 \quad (7)$$

- значение плотности термодинамического потенциала только с учётом вклада равновесной ориентации молекул;

$$\Delta\varphi_f(P, T) = \frac{1}{2} a (\delta\eta)^2 + \frac{b}{2} (\nabla\delta\eta)^2 \quad (8)$$

- вклад флуктуации ориентационного порядка в термодинамический потенциал;
а,

$$\Delta\phi_d(P, T, \vec{n}) = \frac{1}{2}K_1(\text{div}\vec{n})^2 + \frac{1}{2}K_2(\vec{n}\text{rot}\vec{n})^2 + \frac{1}{2}K_3(\vec{n} \times \text{rot}\vec{n})^2 \quad (9)$$

- представляет вклад деформации директора \vec{n} в термодинамический потенциал и составляет основу исследования реологии НЖК

Далее, на основе анализа (P, T) диаграммы фазового перехода НЖК-ИЖ определена зависимость коэффициента A от температуры и давления

$$A(P, T) = A_c + \alpha(T - T_c) + \alpha\beta(P_c - P), \quad (10)$$

получено выражение для равновесного значения ориентационного параметра порядка

$$\eta = 0, \quad \eta(P, T) = \frac{3}{4}\eta_c \left(1 \pm \frac{\sqrt{T_i - T + \beta(P_c - P)}}{3\sqrt{T_i - T_c}} \right). \quad (11)$$

Здесь: T_i - температура несколько выше, чем, T_c ; $T_i - T_n = \frac{B^2}{24\alpha C}$ - температурная окрестность точки фазового перехода, T_c ; $\eta_c = \frac{2B}{9C}$ - значение η при T_c . С учётом (11) выражение (7) становится замкнутой и позволяет исследовать зависимость зависящих от ориентационного порядка равновесных термодинамических параметров НЖК от температуры и давления.

На рис.1 приведены результаты численного расчёта зависимости ориентационного параметра порядка η от температуры, а на рис.2 от давления по формуле (11) для МВВА. Точки (o,•) представляют данные эксперимента.

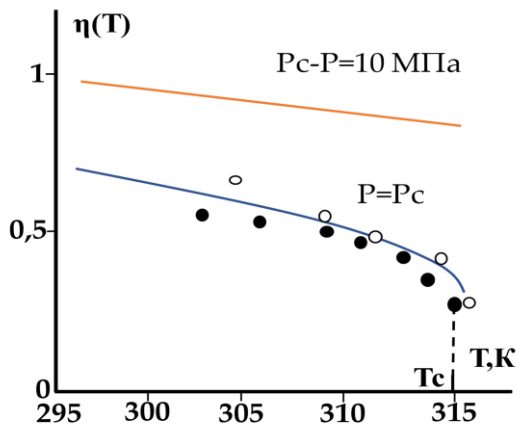


Рис. 1.-Зависимость ориентационного параметра порядка МВВА от температуры

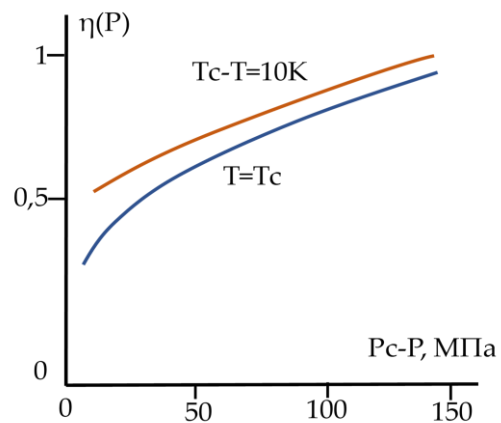


Рис. 2.-Зависимость ориентационного параметра порядка МВВА от давления

Как видно из рис.1 и рис. 2, в нематической фазе зависимость ориентационного параметра порядка от температуры и давление почти одинаковые и линейные. Только с повышением температуры η уменьшается, и с увеличением давления - ($P - P_c$) аномальная область $\eta(T)$ смещается в сторону высоких температур.

Аналогично с увеличением ($T_i - T$) аномальная область $\eta(P)$ смещается в сторону более низких давлений.

С целью определения влияния давления на температурную область существования нематической фазы в таблице 1. приведены значения температур, соответствующие значениям параметра ориентационного порядка ($\eta = 0,9$ вблизи точки плавления и $\eta = 0,225$ при T_i) в нематической фазе, для различных значений давления жидкости.

Таблица 1.-Значения температуры и давления, соответствующие определенным значениям ориентационного параметра порядка η_0 для ПАА

$\eta_0(P, T) \Rightarrow$	0,901	0,85	0,752	0,658	0,552	0,411	0,340	0,284	0,255
$P - P_c$, МПа.	Значения соответствующих температур (Т, К)								
0	389,0	392,0	397,0	401,0	404,5	407,5	408,3	408,6	408,64
10	392,0	395,0	400,5	404,5	407,5	411,0	411,5	412,0	412,04
50	405,5	409,0	414,0	418,0	421,0	424,5	425,0	425,6	425,64
100	423,0	426,0	431,0	435,0	438,5	441,5	442,1	442,6	442,64

Из таблицы следует, что температурная область существования нематической фазы ПАА при повышении $(P - P_c)$ от 0 до 100 МПа. смещается от области температур $(389 \div 408,84)$ К в область температур $(423 \div 442,64)$ К. Если эти результаты экспериментально реализуются, тогда с помощью изменения давления можно стабилизировать и управлять температурной областью работы жидкокристаллических устройств.

Для скачка термодинамических параметров, определяемых как производные первого порядка термодинамического потенциала, т.е. для объема (V), энтропии (S) и скрытой теплоты фазового перехода (q), находим

$$\Delta S_n(\eta) = S_n - S_i = -3\alpha\eta_0^2, \quad \Delta V_n(\eta) = V_n - V_i = -3\beta\eta_0^2, \quad (13)$$

$$q_{NI} = T(S_n - S_i) = 3T\alpha\eta_0^2.$$

В таблице 2. представлены результаты численного расчёта зависимости скрытой теплоты фазового перехода q_{NI} для МББА от температуры и давления, рассчитанного по формуле (13). Согласно таблице 2 скрытая теплота фазового перехода МББА фактически от температуры не зависит, а с увеличением давления быстро растёт, что соответствует имеющимся в литературе информациям

Таблица 2.-Результаты расчёта зависимости скрытой теплоты фазового перехода НЖК-ИЖ $\left(q_{NI}, \frac{\text{кДж}}{\text{кг}}\right)$ от температуры и давления для МББА

P, МПа	Температура, К								
	296	305	308	309	310	313	314	315	316
0	2,18	2,25	2,27	2,28	2,29	2,31	2,31	2,33	2,33
1	3,58	3,69	3,72	3,73	3,75	3,79	3,79	3,81	3,82
3	5,57	5,74	5,80	5,82	5,83	5,90	5,91	5,94	5,95
5	7,27	7,49	7,56	7,59	7,61	7,70	7,71	7,75	7,76
7	8,84	9,11	9,20	9,22	9,25	9,36	9,37	9,42	9,43
9	10,32	10,64	10,74	10,78	10,81	10,93	10,95	11,01	11,02
110	11,76	12,11	12,23	12,27	12,31	12,45	12,47	12,53	12,55
130	13,15	13,55	13,68	13,73	13,77	13,93	13,95	14,02	14,04
150	14,51	14,95	15,10	15,15	15,19	15,37	15,39	15,47	15,49

Во втором разделе главы исследован вклад ориентационного порядка в аномальные поведения тех теплофизических параметров НЖК, которые определяются как производные второго порядка термодинамического потенциала. Получены явные аналитические выражения для ориентационных аномальных частей теплоёмкости (ΔC_{pn}) , сжимаемости $(\Delta\beta_T)$ и теплового расширения $(\Delta\alpha_T)$ НЖК $\Delta C_{pn}(\eta_0) = \frac{27}{64} \frac{\alpha\eta_0^2 T}{(T_i - T_n)} \left(1 + \frac{\sqrt{T_i - T_n}}{\sqrt{T_i - T + \beta(P - P_c)}}\right)$,

$$\Delta\beta_T = -\frac{\beta^2 27}{\alpha V 64} \frac{\eta_c^2 T}{(T_i - T_n)} \left(1 + \frac{\sqrt{T_i - T_n}}{\sqrt{T_i - T + \beta(P - P_c)}}\right), \quad \Delta\alpha_T = \frac{\beta 27}{V 64} \frac{\eta_c^2 T}{(T_i - T_n)} \left(1 + \frac{\sqrt{T_i - T_n}}{\sqrt{T_i - T + \beta(P - P_c)}}\right), \quad (14a)$$

$$\alpha_T = \frac{\beta}{\alpha V} \frac{\Delta C_p}{T}; \quad \Delta\beta_T = -\frac{\beta^2}{\alpha^2 V} \frac{\Delta C_p}{T} \quad (14b)$$

На рис. 3 приведена зависимость теплоёмкости МВВА от температуры при трёх значениях давления: 1) $P = P_c$; 2) $P - P_c = 1$ МПа; 3) $P - P_c = 10$ МПа.

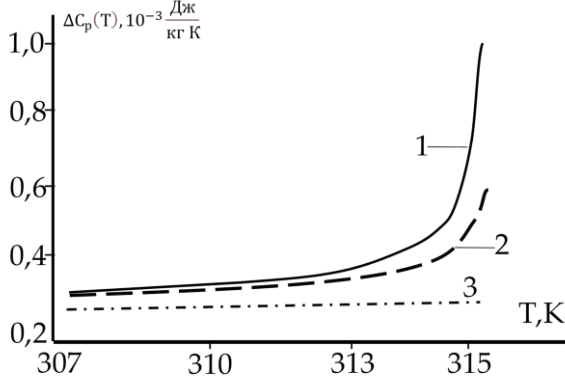


Рис.3.-Зависимость аномальной части теплоёмкости МБВА от температуры при трёх значениях давления

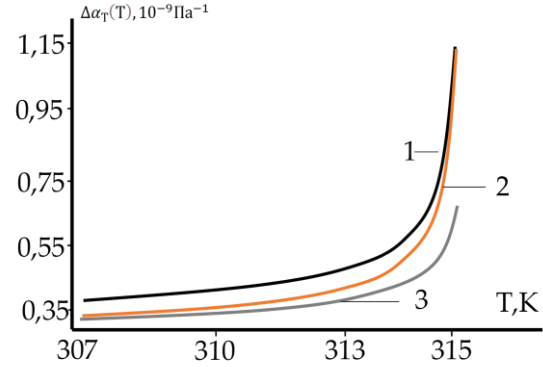


Рис.4.-Зависимость аномальной части термического коэффициента расширения МБВА от температуры

Как видно, аномальное поведение теплоёмкости при высоких давлениях более резкое и с увеличением $P - P_c$ постепенно ослабляется.

Температурная зависимость аномальной части термического коэффициента расширения МВВА, рассчитанной по формуле (14а) для двух значений давления ($P = P_c$ и $P - P_c = 1$ МПа), представлена на рис. 4 (кривые 1 и 3). Кривая 2 на рис. 3 построена с использованием значения ΔC_{pn} по формуле (14б). Из результатов на рис. 4 следует, что аномальные поведения коэффициентов ΔC_{pn} и $\Delta\alpha_T$ взаимно связанные, по аномальному поведению одной из них можно определить аномальное поведение другого.

В третьем разделе главы, представляя флуктуацию ориентационного параметра порядка, как пространственный ряд Фурье $\delta\eta(x) = \sum_k \eta_k e^{-ixk}$, из выражения (6) для флуктуационной части плотности термодинамического потенциала получено выражение

$$\Delta\phi_f(\eta, P, T) = \frac{k_B T}{4\pi^2} \int_0^{k_0} \ln \frac{2\pi k_B T}{V_0(a + bk^2)} k^2 dk \quad (15)$$

и с учётом только длинноволновых флуктуаций определены вклады флуктуации ориентационного порядка в аномальном поведении объёма и теплоёмкости НЖК в виде

$$\Delta V_n^f = \frac{V_0 k_B k_0 T}{4\pi^2 b} \frac{\beta}{\alpha} \left(\frac{\partial a}{\partial T}\right)_P \quad (16a)$$

$$\Delta C_{Pn}^f(P, T) = \frac{k_0^3 k_B}{12\pi^2} - \frac{k_0 k_B}{4\pi^2 b} \left[2T \left(\frac{\partial a}{\partial T}\right)_P + T^2 \left(\frac{\partial^2 a}{\partial T^2}\right)_P \right] + \frac{k_B T^2}{16\pi b^2 \chi} \left(\frac{\partial a}{\partial T}\right)_P^2, \quad (16b)$$

Суммарные значения скачка объёма и теплоёмкости с учётом вкладов ориентации и флуктуации ориентации в нематической фазы определены как:

$$\Delta V_n(P, T, \eta) = v_n(P, T, \eta) - v_i^0(P, T) = \Delta V_n(P, T, \eta_0) + \Delta V_n^f(P, T); \quad (17a)$$

$$\Delta C_{Pn}(P, T, \eta) = C_{Pn}(P, T, \eta) - C_{Pi}^0(P, T) = \Delta C_{Pn}(P, T, \eta_0) + \Delta C_{Pn}^f(P, T). \quad (17b)$$

В изотропной окрестности точки фазового перехода согласно (11) $\eta = 0$ и в скачке объёма и теплоёмкости дает вклад только флуктуация ориентации,

$$\Delta V_i(P, T) = V_i(P, T) - V_i^0(P, T) = \Delta V_n^f = \frac{k_o \beta^3}{\pi^2 b^2} k_B T; \quad \chi_i = \sqrt{\frac{6\alpha}{b} \sqrt{(T - T_n) + \beta(P - P_c)}}; \quad (18)$$

$$\Delta C_{pi}(P, T) = C_{pi}(P, T) - C_{pi}^0(P, T) = \Delta C_{pl}^f = \frac{k_o^3 k_B}{12\pi^2} - \frac{3\alpha k_o k_B}{\pi^2 b} T + \frac{9k_B \alpha^2 T^2}{4\pi b^2 \chi_i}$$

Численные расчёты зависимости скачка объёма ПАА от температуры при $P_c - P = 0$ в нематической фазе по формулам (17а) представлены на рис.5. Видно, что вклад ориентационного порядка в скачке объёма ПАА в нематической фазе с ростом температуры уменьшается (кривая 1), а вклад флуктуации ориентационного порядка (кривая -2) с приближением к точке фазового перехода увеличивается. Суммарное значение скачка объёма (кривая 3) с ростом температуры в начале почти линейно уменьшается, а с приближением к окрестности точки фазового перехода нелинейно растёт. Это говорит о преимущественном вкладе флуктуации ориентационного порядка в аномальном поведении объёма НЖК в окрестности точки фазового перехода

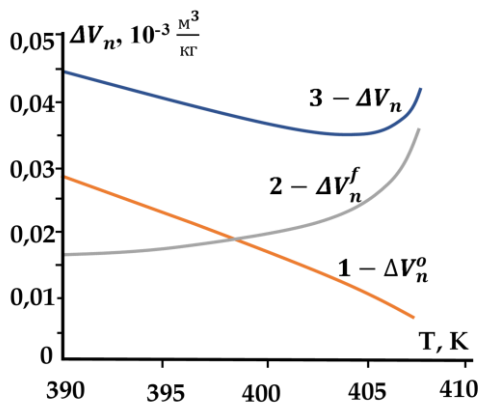


Рис.5.-Температурная зависимость аномальных частей объёма ПАА при значении давления $P - P_c = 0$.

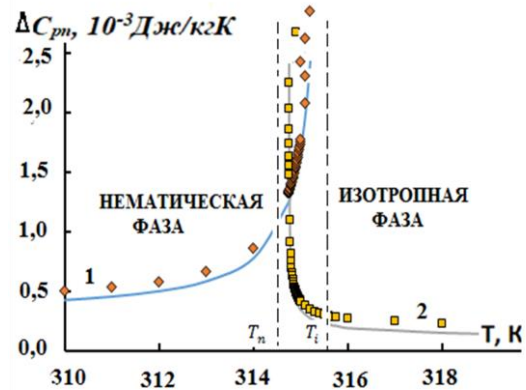


Рис. 6.-Температурная зависимость теплоёмкости МББА в окрестностях точки фазового перехода НЖК-ИЖ

Скачок объёма ПАА в изотропной фазе согласно (18) регулярной величине не имеет аномальной зависимости от температуры.

Результаты численного расчёта зависимости теплоёмкости МББА от температуры по формуле (17б) при значении давления $P_c - P = 0$ представлены на рис.6, где $\blacklozenge, \blacksquare$ – экспериментальные точки. Как видно, результаты численных расчётов температурной зависимости аномальных частей теплоёмкостей нематической и изотропной фазы МББА по формулам (17) и (18) проявляют удовлетворительные согласия с экспериментальными данными.

В последнем четвертом разделе второй главы, исходя из выражения коэффициентов (9) $K \approx 9D\eta^2$ и экспериментальных данных для коэффициентов упругости – K_1, K_2 и K_3 , получены простые выражения

$$K = 10,08 \cdot 10^{-12} \text{ Н}, \quad K_2 = 7,66 \cdot 10^{-12} \eta^2, \text{ Н}; \quad K_3 = 22,77 \cdot 10^{-12} \eta^2, \text{ Н}. \quad (19)$$

Используя выражение (11) для η , по формулам (19) проведены численные расчёты зависимости соответствующих модулей упругости \mathbf{K} от температуры и давления для ПАА. Результаты численных расчётов представлены на рис.7. Уменьшение значения $K(T)$ с ростом температуры и увеличение $K(P)$ с ростом $P - P_c$ вполне соответствует установленным свойствам упругости жидкостей.

В первом разделе третьей главы изложены основные принципы и понятия

молекулярно-статистического описания асимметричных жидких систем.

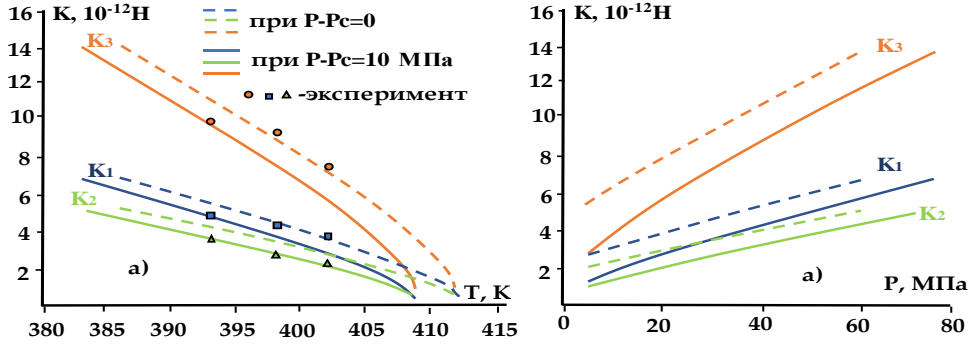


Рис. 7.-Зависимость коэффициентов упругости ПАА: а) от температуры при двух значениях давления; б) от давления при двух значениях температуры.

Точки \bullet \blacktriangle \blacksquare - экспериментальные результаты.

Рассмотрена жидкая система, состоящая из N одинаковых жёстких молекул произвольной формы с массами m и моментом инерции I . Для описания состояния таких несферических молекул в фазовом пространстве использован набор декартовых $(x; y; z)$ и угловых $(\theta; \psi; \varphi)$ координат, а также соответствующие им компоненты импульса $\{p_{xi}; p_{yi}; p_{zi}\}$ и собственного момента импульса молекул $\{M_{xi}; M_{yi}; M_{zi}\}$. Полагается, что такие молекулы обладают поступательными и вращательными степенями свободы, свойства, которые можно описать законами классической физики.

Микроскопическая модель жидкости задаётся Гамильтонианом

$$H(\vec{x}_i, \vec{\theta}_i, \vec{P}_i, \vec{M}_i) = \sum_{i=1}^N \left[\frac{P_i^2}{2m} + \frac{M_i^\alpha M_i^\beta}{2I_{\alpha\beta}} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^N \Phi_{ij}(\vec{x}_{ij}, \vec{\theta}_i, \vec{\theta}_j) \right], \quad (20)$$

где $\Phi_{ij}(\vec{x}_{ij}, \vec{\theta}_i, \vec{\theta}_j)$ - парный, но несферический потенциал взаимодействия i -ой и j -ой молекул жидкости. Определено уравнение временной эволюции динамических плотностей числа частиц и энергии:

$$\hat{n}(\vec{x}, \vec{\theta}) = \sum_{i=1}^N \delta(\vec{x}_i - \vec{x}) \delta(\vec{\theta}_i - \vec{\theta}); \quad \hat{H}(\vec{x}, \vec{\theta}) = \sum_{i=1}^N H_i(\vec{x}_i, \vec{\theta}_i, \vec{P}_i, \vec{M}_i) \delta(\vec{x}_i - \vec{x}) \delta(\vec{\theta}_i - \vec{\theta}), \quad (21)$$

а также динамической плотности компонент тензоров переноса импульса и момента импульса молекул:

$$\begin{aligned} \hat{P}_t^{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{\theta}) &= \sum_{i=1}^N \left(\frac{P_i^\alpha P_i^\beta}{m} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=i}^N F_{ij}^\alpha X_{ij}^\beta \right) \delta(\vec{x}_i - \vec{x}) \delta(\vec{\theta}_i - \vec{\theta}); \\ \hat{P}_r^{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{\theta}) &= \sum_{i=1}^N \left(\frac{\vec{M}_i^\alpha \vec{M}_i^\beta}{I_{\beta\gamma}} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=i}^N N_{ij}^\alpha b_i^{\beta\gamma} \theta_{ij}^\gamma \right) \delta(\vec{x}_i - \vec{x}) \delta(\vec{\theta}_i - \vec{\theta}); \end{aligned} \quad (22)$$

$$\hat{P}_{tr}^{\alpha\beta}(\vec{x}_i, \vec{\theta}_i) = \sum_{i=1}^N \frac{P_i^\alpha \vec{M}_i^\beta}{I_{\beta\gamma}} \delta(\vec{x}_i - \vec{x}) \delta(\vec{\theta}_i - \vec{\theta}); \quad \hat{P}_{rt}^{\alpha\beta}(\vec{x}_i, \vec{\theta}_i) = \sum_{i=1}^N \frac{\vec{M}_i^\alpha P_i^\beta}{m} \delta(\vec{x}_i - \vec{x}) \delta(\vec{\theta}_i - \vec{\theta}),$$

обусловленные поступательными (t), вращательными (r) степенями свободы молекул и их взаимодействием (tr).

Во **втором разделе** главы на основе равновесного значения функции распределения Гиббса (5б),

$$f_0 = \left(\int \dots \int e^{-\frac{H}{k_B T}} d\Gamma \right)^{-1} e^{-\frac{H}{k_B T}}, \quad (23)$$

исследованы равновесные теплофизические свойства НЖК в изотропной фазе.

В частности, усреднением (21) и (22) по (23) для плотности внутренней энергии и давления жидкости получены выражения

$$e(T, \rho) = 3nk_B T + \frac{n^2}{2} \int \Phi_{ij}(x_{ij}, \theta_{ij}) g_o(x_{ij}, \theta_{ij}) d\vec{x}_{ij} d\vec{\theta}_{ij}, \quad (24)$$

$$\left. \begin{matrix} P_t(T, n) \\ P_r(T, n) \end{matrix} \right\} = nk_B T - \frac{n^2}{6} \int \left\{ \frac{\partial \Phi_{ij}(x_{ij}, \theta_{ij})}{\partial x_{ij}} x_{ij} \right. \\ \left. \frac{\partial \Phi_{ij}(x_{ij}, \theta_{ij})}{\partial \theta_{ij}} \theta_{ij} \right\} g_o(x_{ij}, \theta_{ij}) d\vec{x}_{ij} d\vec{\theta}_{ij} \quad (25)$$

Выражения (24) и (25) являются калорическими и термическими уравнениями состояния и позволяют исследовать теплофизические свойства НЖК.

Согласно (24) и (25) задачи исследования теплофизических свойств жидкостей теперь сводятся к задаче выбора потенциала парного взаимодействия молекул $\Phi_{ij}(x_{ij}, \theta_{ij})$, и равновесной радиальной функции распределения молекул $g_o(x_{ij}, \theta_{ij})$, которые мы выбирали в виде

$$\tilde{\Phi}(r, \theta) = \begin{cases} \infty, & \text{при } 0 < r \leq 1 \\ \tilde{\Phi}_{ij}(r, \theta), & \text{при } r > 1. \end{cases} \quad (26)$$

$$g_o(r, \theta) = \begin{cases} y(1) = \frac{2-\tilde{n}}{2(1-\tilde{n})}, & \text{при } r \leq 1 \quad \text{а)} \\ y(r)e^{-\frac{\tilde{\Phi}_{ij}(r, \theta)}{\epsilon}}, & \text{при } r > 1. \quad \text{б)} \end{cases} \quad (27)$$

где, $\tilde{\Phi} = \frac{\Phi_{ij}}{\epsilon}$, ϵ – энергетическая глубина потенциальной ямы.

Рассмотрим простой случай, когда

$$\Phi(r, \theta) = \Phi(r) + \Phi(\theta), \quad (28)$$

и в качестве $\Phi(\theta)$ и $\Phi(r)$ используем потенциалы Майера-Заупе (4) и Леннарда – Джонса

$$\Phi(r) = 4\epsilon_o(r^{-12} - r^{-6}). \quad (29)$$

В рамках этих предположений для теплоёмкости изотропной фазы НЖК - ПАА получено удобное для проведения численных расчётов выражение

$$c_{pi}(T, n) = c_{pi}^k(T, n) + c_{pi}^c(T, n) + c_{pi}^r(T, n) + c_{pi}^\theta(T, n) + c_{pi}^{r\theta}(T, n) + c_{pi}^f(T, n), \quad \frac{\text{кДж}}{\text{м}^3 \cdot \text{К}} \quad (30)$$

где:

$$c_{pi}^k(T, n) = 0,112 \left(\frac{\rho}{\rho_c} \right) \left(1 - 0,22 \left(\frac{T}{T_c} \right) \right), \quad c_{pi}^c(T, n) = 2,21 \left(\frac{\rho}{\rho_c} \right)^2 \left(1 + 0,037 \left(\frac{T}{T_c} \right) \right),$$

$$c_{pi}^r(T, n) = 0,121 \left(\frac{\rho}{\rho_c} \right)^2 V(r) a(\theta); \quad c_{pi}^{r\theta}(T, n) = -1,31 \left(\frac{\rho}{\rho_c} \right)^2 \left(\frac{T_c}{T} \right)^2 \eta^2 C(r) a(\theta);$$

$$c_{pi}^f(T, n) = 0,927 \tilde{k} \left(\frac{T}{T_c} \right)^2 \left(\frac{T}{T_c} - 1 \right)^{-\frac{1}{2}} + 4,8 \cdot 10^{-3} \tilde{k} \left(\frac{T}{T_c} \right); \quad \eta(P, T) = 0,265 \left(1 - 11,54 \left(\frac{T}{T_c} - 1 \right)^{\frac{1}{2}} \right);$$

$$c_{pi}^\theta(T, n) = -0,121 \left(\frac{\rho}{\rho_c} \right)^2 \left(\eta^2 - 2,31 \eta \left(\frac{T}{T_c} - 1 \right)^{-\frac{1}{2}} \right) a(\theta) a(r); \quad \left(\frac{\partial \eta}{\partial T} \right) = -\frac{0,0037}{\sqrt{\frac{T}{T_c} - 1}},$$

- учитывают вклады: тепловых движений молекул - c_{pi}^k ; упругих столкновений молекул - c_{pi}^c ; ближней радиальной структуры жидкости - c_{pi}^r ; ближнего ориентационного порядка молекул - c_{pi}^θ ; взаимодействия радиальной и ориентационной структуры жидкости - $c_{pi}^{r\theta}$; и флуктуации ориентации молекул - c_{pi}^f . Здесь: $a(r)$, $V(r)$, $C(r)$; $a(\theta)$ – интегрируемые множители.

На рис. 8а приведены результаты численного расчёта температурной зависимости компонент теплоёмкости изотропной фазы с учётом вкладов упругих столкновений молекул, ориентации ближнего порядка и флуктуации ориентации молекул с использованием для η выражения (11), где $\alpha > 0$. Как видно в этом случае, кривые температурной зависимости ориентационной части

(кривая 2) и c_{pi} в целом (кривая 4) охватывают область нематической фазы. Если скорректировать выражение (11) для η с учётом устойчивости изотропной фазы ($\alpha < 0$), все кривые температурной зависимости компонент c_{pi} располагаются в области изотропной фазы (рис.8б).

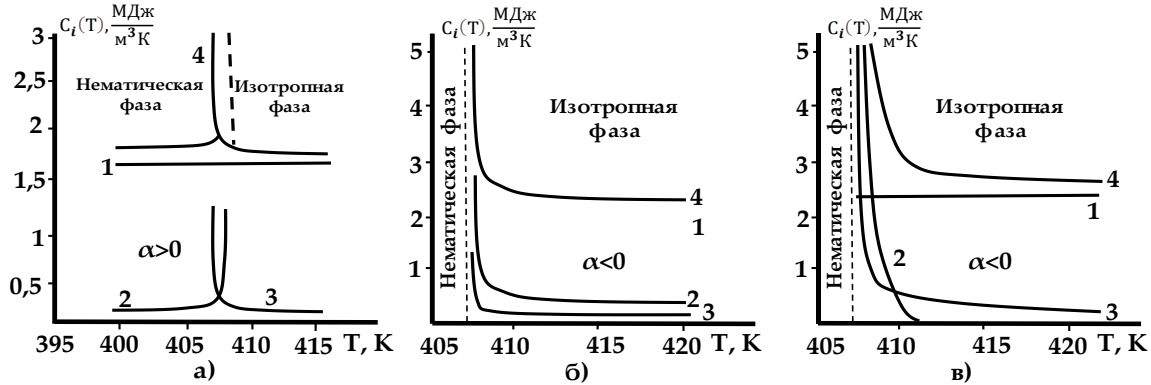


Рис.8.-Результаты численного расчёта зависимости теплоёмкости изотропной фазы ПАА от температуры

Результаты численного расчёта температурной зависимости компонент c_{pi} для ПАА по формулам (30) представлены на рис.8в. Суммарные вклады - $c_{pi}(r) = c_{pi}^k + c_{pi}^c + c_{pi}^r$, представлены на рис.8в прямыми линиями 1. Видно, что вклады $c_{pi}(r)$ и здесь проявляют слабый линейный рост с увеличением температуры. Вклады ближнего ориентационного порядка в температурную зависимость c_{pi} ПАА учтены членами $c_{pi}(\theta) = c_{pi}^\theta + c_{pi}^{r\theta}$ и проявляются в очень узкой изотропной окрестности точки фазового перехода ($408,3 \div 411,36$ К) и на рис. 8в отражены кривой 2. Вклад флуктуации ориентационного порядка (кривые 3) на рис.8в вычислен по выражению (31e). Температурная зависимость суммарного значения теплоёмкости изотропной фазы ПАА по формуле (30) на рис.8в изображена кривой 4 и качественно соответствует существующим в литературе результатам.

Далее, на основе анализа полученных результатов обосновано одно из условий существования ближнего ориентационного порядка (sort order) в изотропной окрестности точки фазового перехода НЖК-ИЖ.

В третьем разделе этой главы в рамках локально-равновесной функции распределения молекул исследованы упругие свойства НЖК. Усреднением уравнения изменения выражения (22) по локально равновесному ансамблю (5а) получена замкнутая система уравнений для изменения тензоров напряжений $\sigma^{\alpha\beta} = -\langle \hat{p}^{\alpha\beta} \rangle_L + P\delta^{\alpha\beta}$, где $P = \frac{\langle \hat{p}^{\alpha\alpha} \rangle_L}{3}$ - давление жидкости по времени, которые позволяют исследовать упругие свойства НЖК. Для ориентационных модулей упругости НЖК получены выражения

$$K_{11}^r = \frac{P_t}{c_V} \left(\frac{\partial P_r}{\partial T} \right)_\rho; \quad K_{22}^r = \frac{P_t}{2c_V} \left(\frac{\partial P_r}{\partial T} \right)_\rho; \quad K_{33}^r = P_r \left[\frac{\rho}{P_r} \left(\frac{\partial P_r}{\partial \rho} \right)_T + \frac{e}{c_V P_r} \left(\frac{\partial P_r}{\partial T} \right)_\rho - 1 \right]; \quad (31)$$

По аналогии с обозначениями второй главы коэффициенты K_{11} , K_{22} , K_{33} были названы соответствующими модулями ориентационной упругости НЖК при ориентационных деформациях типа поперечного изгиба (K_{11}), продольного изгиба (K_{22}) и кручения (K_{33}).

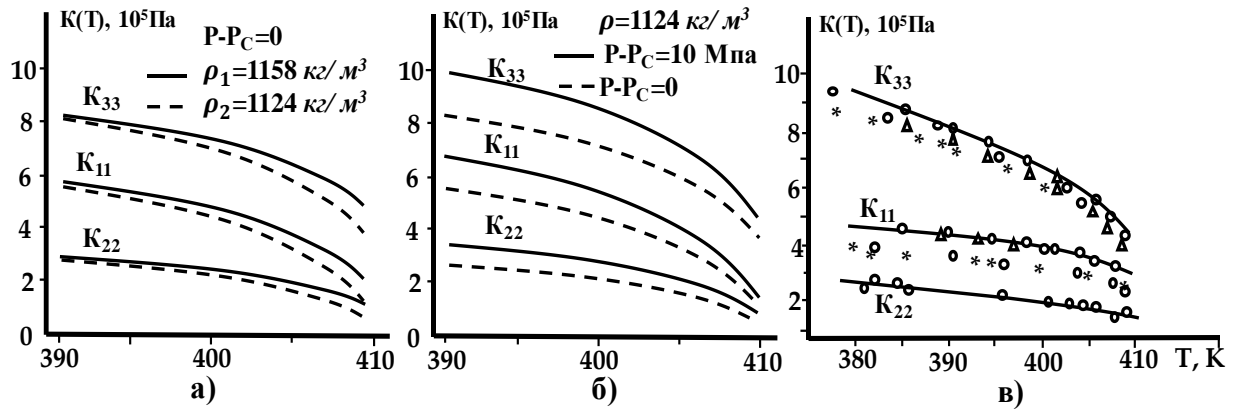


Рис.9.-Зависимость коэффициентов ориентационной упругости ПАА от температуры

Результаты численных расчётов зависимости соответствующих ориентационных модулей упругости ПАА от температуры, плотности и давления с использованием потенциала Майера - Заупе в диссертации приведены и в таблицах. Здесь, на рис.9а приведены результаты расчёта температурной зависимости модулей упругости от температуры при двух значениях плотности, а на рис.9б при двух значениях давления. На рис.9в представлены результаты экспериментальных исследований по литературе. Как видно, качественные согласия наших расчётов с экспериментальными результатами удовлетворительные.

В четвертой главе исследованы термические релаксационные процессы и их вклады в динамические вязкоупругие свойства НЖК. В **первом разделе** главы приведен краткий анализ происходящих в жидкостях внутренних релаксационных процессов. Во **втором разделе** получена замкнутая система уравнения обобщённой (релаксационной) гидродинамики, позволяющая описать динамические вязкоупругие свойства сложных асимметричных жидких систем.

Проведён детальный анализ происходящих в жидкости термических релаксационных процессов и показано, что все входящие в систему уравнений обобщённой гидродинамики характерные времена релаксации:

$$\begin{aligned} \tau_{tt} &= \frac{10m}{3\beta_{tt}}, \quad \beta_{tt} = \frac{1}{3kT} \int_0^t \langle F(t)F(0) \rangle_o dt; \quad \tau_{rr} = \frac{10l}{3\beta_{rr}}; \quad \beta_{rr} = \frac{1}{3kT} \int_0^t \langle N(t)N(0) \rangle_o dt \\ \tau_{tr} &= \frac{4\tau_{tt}\tau_{rr}}{\tau_{tt} + \tau_{rr}}, \quad \tau_{tr} = \tau_{tr} = 2\sqrt{\frac{m}{I}}\tau_{tr}; \quad \tau_{tr} = \tau_{tr} = \frac{20}{3}\sqrt{\frac{l}{m}}\tau_{tr}; \quad \tau_{tr} = \frac{\sqrt{Im}}{\beta_{tr}}, \quad (32) \\ \beta_{tr} &= \frac{1}{3kT} \int_0^t \langle F(t)N(0) \rangle_o dt, \end{aligned}$$

выражаются через три связанных с выбранной моделью жидкости характерных времени - трансляционная релаксация (τ_{tt}), вращательная релаксация (τ_{rr}) и перекрёстная (интерференционная) релаксация (τ_{tr}).

На основе упрощённых для жидких систем, где обмен энергии между одинаковыми степенями свободы молекул происходит гораздо быстрее, чем обмен энергии между различными степенями свободы, результатов определено выражение для динамических коэффициентов ориентационных вязкостей ($\eta(v)$) и для соответствующих им динамических модулей ориентационной упругости ($K(v)$) в виде:

$$\eta_{s11}^r(v) = \frac{\tau_{rr}K_{11}^r}{1+(v\tau_{rr})^2}; \quad \eta_{s22}^r(v) = \frac{\tau_{rr}K_{22}^r}{1+(v\tau_{rr})^2}; \quad \eta_{s33}^r(v) = \frac{\tau_{rr}K_{11}^r}{1+(v\tau_{rr})^2}; \quad (33)$$

$$K_{s\ 11}^r(\nu) = \frac{(\nu\tau_{rr})^2 K_{11}^r}{1+(\nu\tau_{rr})^2}; K_{s\ 22}^r(\nu) = \frac{(\nu\tau_{rr})^2 K_{22}^r}{1+(\nu\tau_{rr})^2}; K_{s\ 33}^r(\nu) = \frac{(\nu\tau_{rr})^2 K_{11}^r}{1+(\nu\tau_{rr})^2} \quad (34)$$

Выражения (33) и (34) позволяют исследовать динамические вязкоупругие свойства НЖК с учётом вклада особенностей структуры и вращательных релаксационных процессов.

В конце этого раздела проведены оценки асимптотического поведения вязкоупругих параметров НЖК при предельно низкочастотных и предельно высокочастотных динамических процессах. Показано, что при низкочастотных динамических процессах вязкоупругие свойства жидкости определяются низкочастотными значениями коэффициентов вязкостей, а при высокочастотных процессах - высокочастотными значениями модулей упругости.

В третьем разделе 4 главы на основе выражения (31)-(34) проведены численные расчёты зависимости динамических вязкоупругих параметров ПАА от температуры, плотности и частоты.

С использованием потенциала Майера-Заупе для характерного времени вращательной релаксации ПАА получено расчётное выражение

$$\tau_{rr} = \frac{1,88 \cdot 10^{-10} \bar{\tau}}{\bar{\tau} \bar{n} (1 + 20,2 \sqrt{1 - \bar{T}} + 0,073(1 - \bar{P}))^2} * \left\{ \frac{2 - \bar{n}}{6(1 - \bar{n})^3} a(r) e^{\frac{1,35}{\bar{T}}} \int_0^\pi e^{\frac{0,39}{\bar{T}} (1 + 11,73 \sqrt{1 - 4,54 \bar{T}} + 0,073(1 - \bar{P})) \cos^2 \theta_i} \cos^2 \theta_i \sin^3 \theta_i d\theta_i \right\}^{-1} \quad (35)$$

С целью определения влияния формы потенциала межмолекулярного взаимодействия на динамические вязкоупругие свойства НЖК получено расчётное выражение для τ_{rr} и с использованием более общего, неразделяемого на радиальные и угловые части потенциала взаимодействия Макмиллана

$$\tau_{rr} = \frac{3,9 \cdot 10^{-10} \bar{\tau}_B^{-1} T^*}{n \left\{ \frac{4}{45} y(1) + \int_0^\pi \int_1^\infty \left(e^{-2r^2} - \frac{4,62}{T^*} \left(\frac{3}{2} \cos^2 \theta_{ij} - \frac{1}{2} \right) \right) \cos^2 \theta_i \sin^3 \theta_i d\theta_i r^2 dr \right\}} \quad (36)$$

В диссертации результаты численных расчётов зависимости τ_{rr} , $\eta_{s\ 11}^r$, $K_{s\ 11}^r$ от температуры и плотности по формулам (33) - (36) приведены и в виде таблиц. Здесь приведём результаты зависимости этих величин от изменения термодинамических параметров состояния только графически.

Увеличение $\tau_{rr}(T)$ с ростом температуры говорит о термической природе τ_{rr} . Уменьшение τ_{rr} с увеличением плотности и давления также соответствует установленным для жидкостей закономерностям.

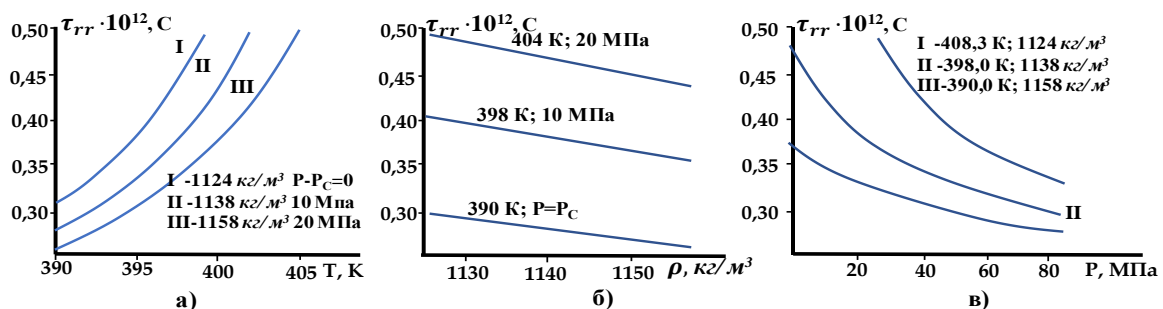


Рис. 10.-Результаты численного расчёта температурной зависимости вращательного времени релаксации для ПАА по формуле (35) при трёх фиксированных значениях плотности и давления

Используя теперь значения K_{11}^r , K_{22}^r , K_{33}^r и τ_{rr} , можно провести численные расчёты зависимости динамических коэффициентов ориентационных вязкостей ($\eta^r(\nu)$) и соответствующие им динамические модули ориентационной упругости ($K^r(\nu)$) от температуры, плотности, давления и частоты.

На рис. 11а приведены результаты численного расчёта зависимости низкочастотного значения $\eta_{11}^r(\nu)$ для ПАА от плотности, а на рис. 11.б от давления при двух фиксированных значениях температуры (прерывистые линии) и при экспериментально согласованных значениях температуры и плотности (сплошные линии).

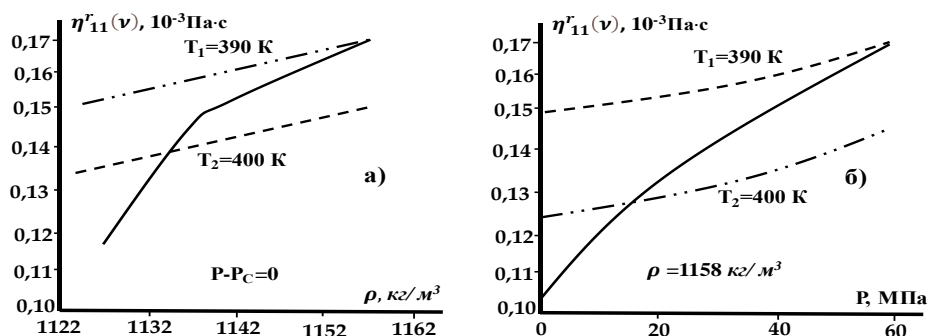


Рисунок 11.-Результаты численного расчёта зависимости низкочастотных значений ориентационного динамического коэффициента вязкости ПАА от плотности (а) и от давления (б).

Уменьшение значения коэффициента вязкости с увеличением температуры и увеличение её значения с ростом плотности и давления вполне соответствует свойствам вязкости жидкостей. Более существенная зависимость вязкости и других параметров от температуры при нефиксированных значениях плотности (объёма) (сплошные кривые) говорит об определяющей роли взаимодействия молекул в формировании вязкоупругих свойств жидкостей.

ОСНОВНЫЕ ВЫВОДЫ И ЗАКЛЮЧЕНИЯ

На основе проведённых в диссертации теоретических исследований равновесных и динамических теплофизических свойств НЖК и сопоставления полученных результатов с существующими в литературе информацией можно сформулировать следующие выводы и заключения.

1. Метод неполных термодинамических потенциалов обобщён и использован для описания аномальных ориентационных свойств теплофизических параметров НЖК в окрестностях точки фазового перехода НЖК-ИЖ. Впервые более корректно и последовательно учтена зависимость ориентационных аномальных свойств теплофизических параметров НЖК от давления жидкости в окрестностях точки фазового перехода НЖК-ИЖ. [1-А, 2-А, 4-А, 9-А, 10-А, 13-А]

2. Получены аналитические выражения для ориентационного параметра порядка для скачка объёма, энтропии, удельной теплоты фазового перехода, теплоёмкости, сжимаемости, коэффициента теплового расширения и модулей ориентационной упругости НЖК, позволяющие исследовать зависимость этих параметров от температуры и давления. Показана возможность стабилизации и управления температурной области работы жидкокристаллических устройств с помощью изменения давления жидкости. [1-А, 2-А, 4-А, 9-А, 10-А, 13-А]

3. Впервые в рамках равновесного статистического ансамбля определено выражение для теплоёмкости изотропной фазы НЖК, учитывающее вклады теплового движения, ближнего радиального и ориентационного порядка НЖК. Показана возможность существования ближнего ориентационного порядка (sort order) в изотропной окрестности точки фазового перехода НЖК-ИЖ. [4-А, 5-А, 6-А, 13-А, 14-А, 15-А]

4. Термодинамическими и молекулярно-статистическими методами исследована реология нематических жидких кристаллов. Определены аналитические выражения для модулей упругости нематических жидких кристаллов при ориентационных деформациях типа поперечного изгиба, продольного изгиба и кручения. Проведены численные расчёты зависимости этих модулей упругости от температуры, плотности и давления. [3-А, 5-А, 7-А, 12-А, 16-А, 20-А, 21-А]

5. В рамках неравновесной статистической теории асимметричных жидкостей, состоящих из жёстких молекул произвольной формы, сформулирована замкнутая система уравнения обобщённой (релаксационной) гидродинамики, позволяющей исследовать динамические вязкоупругие свойства нематических жидких кристаллов. Проведён детальный анализ механизмов внутренних термических релаксационных процессов в НЖК. Показана определяющая роль вращательных релаксационных процессов в динамические вязкоупругие свойства НЖК. [3-А, 7-А, 8-А, 11-А, 12-А, 19-А, 20-А, 21-А]

6. Получены упрощённые аналитические выражения для динамических коэффициентов ориентационных вязкостей и для соответствующих им динамических модулей ориентационной упругости НЖК, учитывающие особенности молекулярной структуры жидкости и вклады вращательных релаксационных процессов. Проведен анализ асимптотического поведения динамических вязкоупругих параметров НЖК в областях предельно высоких и предельно низких частот. [3-А, 5-А, 7-А, 8-А, 11-А, 12-А, 16-А, 17-А, 18-А, 19-А, 20-А, 21-А]

7. Все полученные аналитические выражения приведены в удобную для проведения численных расчётов форму, и выбором подходящего пакета программ на ЭВМ проведены численные расчёты зависимости равновесных и динамических теплофизических параметров НЖК (ПАА) от температуры, плотности, давления и частоты. Получены удовлетворительные качественные согласия с имеющимися в литературе результатами. [1-А, 2-А, 3-А, 4-А, 5-А, 6-А, 7-А, 8-А, 11-А, 12-А, 16-А, 17-А, 18-А, 19-А, 20-А, 21-А]

Рекомендации по практическому использованию научных результатов диссертации

Полученные в диссертации аналитические выражения и формулы, приведенные результаты численных расчётов закономерностей зависимости равновесных и динамических теплофизических параметров НЖК от температуры, давления, плотности и частоты внешнего возмущения, могут быть использованы для прогноза устойчивости работы жидкокристаллических материалов при различных условиях их эксплуатации.

Приведённые в диссертации численные значения равновесных теплофизических и динамических вязкоупругих параметров НЖК в широком диапазоне изменения термодинамических параметров состояния и частоты внешнего возмущения могут служить как банк данных о значениях этих параметров при различных условиях практического использования НЖК.

Установленная в диссертации возможность изменения температурной области существования НЖК изменением давления может быть использована для стабилизации и управления температурной области работы жидкокристаллических приборов.

Выявленная в диссертации связь теплофизических параметров НЖК с формой, размером, массой и энергией взаимодействия молекул может быть использована как основа создания жидкокристаллических материалов с заданными теплофизическими и другими физико-техническими свойствами.

Приведенные в диссертации материалы и информации могут быть полезны докорантам, аспирантам, магистрантам, соискателям, студентам старших курсов в областях физики, физхимии, материаловедения, теплотехники, молекулярной физики, физики конденсированного состояния.

СПИСОК ОПУБЛИКОВАННЫХ РАБОТ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

Статьи, опубликованные в научных журналах, рекомендуемых ВАК при Президенте Республики Таджикистан:

[1-А] **Абдурасулов, Д.А.** Метод неполного термодинамического потенциала для нематических жидких кристаллов / Д.А. Абдурасулов, А.А. Абдурасулов, С. Одинаев // Политехнический вестник. Серия: интеллект, инновация, инвестиции. -2019. -№4(48). -С.12-16.

[2-А] **Абдурасулов, Д.А.** Об аномальном поведении теплоёмкости нематических жидких кристаллов при переходе в изотропную фазу. / Д.А. Абдурасулов, А.А. Абдурасулов, С. Одинаев // Политехнический вестник, Серия: Интеллект. Инновация. Инвестиция. -2020. -№ 4(52). -С.7-12.

[3-А] **Абдурасулов, Д.А.** О вкладе динамики изменения внутренних давлений в вязкоупругие свойства асимметричных жидкостей. / А.А. Абдурасулов, Н.Б. Шоайдаров, Д.А. Абдурасулов // Политехнический вестник, Серия: Интеллект. Инновация. Инвестиция. -2020. -№4(52). -С.20-25.

[4-А] **Абдурасулов Д.А.** Исследование зависимости теплоёмкости изотропной фазы нематических жидких кристаллов от температуры и плотности / Д.А. Абдурасулов // Политехнический вестник, Серия: Интеллект. Инновация. Инвестиция. – 2021. -№ 3(55). -С.40-46.

[5-А] **Абдурасулов, Д.А.** Молекулярно-статистическое исследование ориентационных упругих свойств нематических жидких кристаллов / С. Одинаев, Д.А. Абдурасулов, А.А. Абдурасулов // Доклады НАН Таджикистана. -2021. -Том 65. -№3-4. -С.210-219.

[6-А] **Абдурасулов, Д.А.** О вкладе ближнего ориентационного и радиального порядка молекул в теплоёмкость изотропной фазы нематических жидких кристаллов / С. Одинаев, Д.А. Абдурасулов, А. Абдурасулов // Известия НАНТ. -2022. -№2(187). -С37-48.

[7-А] **Абдурасулов, Д.А.** Исследование вращательных релаксационных процес-

сов и ориентационных вязкоупругих свойств нематических жидких кристаллов / Д.А. Абдурасулов, А.А. Абдурасулов, С. Одинаев // Политех-нический вестник, Серия: Интеллект. Инновация. Инвестиция. -2022. -№1(57). -С.19-24.

В других изданиях

[8-А] **Абдурасулов, Д.А.** О вращательной вязкости нематических жидких кристаллов / А.А. Абдурасулов, Д.А. Абдурасулов, А. Рахими // Материалы VIII научно-практической конференции «Перспективы развития науки и образования». -Душанбе, 3-4 ноября 2016. Часть 2. -С.116-120.

[9-А] **Абдурасулов, Д.А.** К термодинамике жидких кристаллов вблизи точки фазового перехода нематический жидкий кристалл-изотропная жидкость / А.А. Абдурасулов, Д.А. Абдурасулов, Н.Б. Шоайдаров // Научные труды инженерной академии Республики Таджикистан. -2019. -С.61-65.

[10-А] **Абдурасулов, Д.А.** Об аномальном поведении теплофизических параметров нематических жидких кристаллов вблизи точки фазового перехода НЖК-ИЖ /Д.А. Абдурасулов, А.А. Абдурасулов, Н.Б. Шоайдаров // Материалы Международной конф.«Электроэнергетика Таджикистана: актуальные проблемы и пути их решения», Филиал МЭИ в Душанбе, 19 октября 2019 г., -С.237-242.

[11-А] **Абдурасулов, Д. А.** К теории вращательных релаксационных процессов и динамических вязкоупругих свойств нематических жидких кристаллов / А.А. Абдурасулов, Д.А. Абдурасулов, С. Одинаев // Материалы международной научно-практической конференции студентов, магистрантов, аспирантов и молодых ученых «Мухандис-2019» часть 1, естественные науки ТТУ имени академика М.С. Осими.-Душанбе,-2019.-С.78-84.

[12-А] **Абдурасулов, Д.А.** Локальные законы сохранения и вязкоупругие свойства ассиметричных жидкостей / Н.Б. Шоайдаров, Д.А. Абдурасулов А.А. Абдурасулов // Материалы международной научно-практической конференции «Электроэнергетика Таджикистана: актуальные проблемы и пути их решения», Филиал МЭИ в Душанбе, 19 декабря 2019 г. -С.250-255.

[13-А] **Абдурасулов, Д.А.** О вкладе флуктуации ориентационного порядка в аномальном поведении теплоемкости нематических жидких кристаллов. / А.А. Абдурасулов, Д.А. Абдурасулов, С. Одинаев // Материалы Научно-прак. конф. на тему «Современные проблемы физики конденсированного состояния и ядерной физики» 19 февраля 2020 г., ТНУ. г. Душанбе. -2020. -С.110-113.

[14-А] **Абдурасулов, Д.А.** О связи термических и калорических параметров нематических жидких кристаллов в окрестностях точки фазового перехода НЖК-ИЖ / Д.А. Абдурасулов, А.А. Абдурасулов С. Одинаев // Материалы Научно-прак. конф. на тему «Современные проблемы физики конденсированного состояния и ядерной физики» 19 февраля 2020 г., ТНУ. г. Душанбе. -2020. -С.106-109.

[15-А] **Абдурасулов, Д.А.** К молекулярной теории теплоёмкости изотропной фазы нематических жидких кристаллов / Д.А. Абдурасулов, А.А. Абдурасулов, Н.Б. Шоайдаров // Материалы Международной научно-практической конференции «Электроэнергетика Таджикистана. Проблемы энергосбережения, энергоэффективности и использования возобновляемых источников энергии», г. Душанбе 29-30 апреля 2021 г., -С.312-317.

- [16-А] **Абдурасулов, Д.А.** Исследование зависимости коэффициентов ориентационной деформации нематических жидких кристаллов от температуры и давления / А.Д. Абдурасулов, А.А. Абдурасулов, Н.Б. Шоайдаров // Материалы международной научно-практической конференции «Технические науки и инженерное образование для устойчивого развития» часть 1, Душанбе, 12-13 ноября 2021 г. -С.158-161
- [17-А] **Абдурасулов, А.Д.** Релаксационные процессы и динамические вязкоупругие свойства неполярных жидкостей / Н.Б. Шоайдаров, А.Д. Абдурасулов, А.А.Абдурасулов // Материалы международной научно-практической конференции «Технические науки и инженерное образование для устойчивого развития» часть 1, Душанбе, 12-13 ноября 2021 г. -С.110-113
- [18-А] **Абдурасулов, Д.А.** Исследование термических релаксационных процессов в многоатомных жидкостях / Д.А. Абдурасулов, Н.О. Шоайдаров //Материалы респуб. научно-прак. конференции “Наука-основа инновационного развития” раздел фундаментальные науки. Душанбе. -2022, -С.298-302.
- [19-А] **Абдурасулов, Д.А.** Исследование зависимости динамических коэффициентов вязкостей нематических жидких кристаллов от температуры, плотности и давления / Д.А. Абдурасулов // Республиканская научно-практическая конференция «Современные проблемы естествознания в науке и образовательном процессе». Душанбе, РТСУ 27 мая 2022г., -С.118-120.
- [20-А] **Абдурасулов, Д.А.** Статистическое описание динамических вязкоупругих свойств жидкостей с произвольными формами молекул. 1.Жидкие системы со сферическими молекулами / С. Одинаев, Д.А. Абдурасулов, А.А. Абдурасулов //Материалы VIII Международной конф. «Современные проблемы физики», Душанбе, ФТИ имени С.У. Умарова, 21-22 октября 2022г., -С.22-27.
- [21-А] **Абдурасулов, Д.А.** Статистическое описание динамических вязкоупругих свойств жидкостей с произвольными формами молекул. 2.Простые модели нематических жидких кристаллов / С. Одинаев, Д.А. Абдурасулов, А.А. Абдурасулов // Материалы VIII Международной конф. «Современные проблемы физики», Душанбе, ФТИ имени С.У. Умарова, 21-22 октября 2022г., -С.30-35.
- [22-А] **Абдурасулов, Д.А.** К статистической теории динамических вязкоупругих свойств многоатомных жидкостей / А.А. Абдурасулов, Н.Б. Шоайдаров Д.А. Абдурасулов // Материалы VIII Международной конф. «Современные проблемы физики», Душанбе, ФТИ имени С.У. Умарова, 21-22 октября 2022г., -С.134-139.