

УДК 548.0

ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В ЛИОТРОПНЫХ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛАХ, ВЫЗВАННЫЕ ИЗМЕНЕНИЕМ КОНЦЕНТРАЦИИ И γ -ИЗЛУЧЕНИЕМ

Д.А. БАДАЛЯН, М.А. СТЕПАНЯН, Г.Г. БАДАЛЯН*

Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

*e-mail: hbadal@ysu.am

(Поступила в редакцию 15 июля 2016 г.)

Разработана молекулярно-статистическая теория фазовых переходов в лиотропных жидких кристаллах, которая описывает фазовые переходы между изотропной (мицеллярной), нематической и ламеллярной фазами. Получены уравнения, описывающие зависимости параметров ориентационного и трансляционного дальнего порядка от концентрации. Показано, что в зависимости от значений микроскопических констант модели фазовый переход нематическая фаза–ламеллярная фаза может быть переходом как первого, так и второго рода. Рассмотрено влияние интенсивного и низкоинтенсивного γ -излучения на указанные фазовые переходы. Показано, что облучение изменяет константы модели, отвечающие за фазовые переходы. Исходя из этого, можно предполагать, что γ -излучение влияет на ход зависимости параметров дальнего порядка от концентрации, а также изменяет величины критических концентраций фазовых переходов и даже род фазового перехода.

1. Введение

Как известно, лиотропные жидкие кристаллы (ЛЖК) получают путем растворения амфифильных веществ в полярных растворителях. Чаще всего это водные растворы веществ, молекулы которых имеют жесткую структуру (ДНК, некоторые синтетические полипептиды и др.). ЛЖК могут быть образованы также растворенными в воде цилиндрическими мицеллами – агрегатами амфифильных молекул [1–3]. В зависимости от концентрации растворенного вещества в указанных системах появляется ориентационный и/или трансляционный порядок, который, как полагают, главным образом является результатом взаимодействия стержневидных частиц друг с другом, тогда как взаимодействие их с растворителем играет второстепенную роль [4].

Механизмы фазовых переходов и термодинамические характеристики ЛЖК, в отличие от обычных термотропных жидких кристаллах (ТЖК), изучены крайне мало. Поэтому является важным изучение термодинамических свойств ЛЖК на основе молекулярно-статистических моделей. Целью настоящей работы

является микроскопическое исследование фазовых переходов в ЛЖК, образованных из стержневидных частиц (далее – стержней). Соответствующая теория представляет собой распространение метода, развитого ранее для описания ориентационного и трансляционного дальнего порядка, в термотропных жидких кристаллах (ТЖК) и органических твердых растворах [5,6].

2. Свободная энергия ЛЖК

Для дальнейшего развития теории необходимо знать свободную энергию F , зависящую от параметров ориентационного и трансляционного дальнего порядка. Выражение для F получим, используя обобщенную модель решеточного газа. Рассмотрим идеализированную систему жестких стержней в инертном бесструктурном растворителе. Центры тяжести стержней и молекул растворителя располагаются в узлах некоторой пространственной решетки с малым размером периода. Стержни в каждом узле могут принимать произвольные ориентации, описываемые единичными векторами

$$\mathbf{m} = (\sin \theta_m \cos \varphi_m, \sin \theta_m \sin \varphi_m, \cos \theta_m),$$

где θ и φ – сферические координаты. Парные энергии взаимодействия стержней, находящихся в узлах \mathbf{r} и \mathbf{r}' имеющих ориентации \mathbf{m} и \mathbf{m}' , определяются потенциалами $V_{\mathbf{m},\mathbf{m}'}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$. Предполагается, что ориентации \mathbf{m} и \mathbf{m}' эквивалентны.

Допустим, что ориентации частиц дискретны и их число равняется ν . В произвольном узле \mathbf{r} может возникнуть $\nu + 1$ различных состояний, так как узел может быть занят как молекулой растворителя, так и стержнем с одной из ν ориентаций. Введем случайные функции $c_\alpha(\mathbf{r})$ ($\alpha = 0, 1, \dots, \nu$), равные единице, если узел \mathbf{r} находится в состоянии α , и нулю – в обратном случае (индекс $\alpha = 0$ характеризует то состояние, когда узел занят молекулой растворителя). Функции $c_\alpha(\mathbf{r})$ подчиняются условиям нормировки

$$\sum_{\alpha=1}^{\nu} c_\alpha(\mathbf{r}) = 1, \quad (2.1)$$

означающим, что произвольный узел \mathbf{r} занят либо стержнем, либо молекулой растворителя.

Дополнительно имеем

$$\sum_{\mathbf{r}} c_0(\mathbf{r}) = N_{\text{solv}} = N(1 - c), \quad (2.2)$$

где N_{solv} – число молекул растворителя, N – полное число узлов решетки и c – концентрация стержней. Следует обратить внимание на модель ЛЖК многокомпонентного твердого раствора: если в ЛЖК каждый узел решетки занят как молекулой растворителя, так и стержнем с ν различными ориентациями, то в $(\nu + 1)$ -компонентном твердом растворе замещения в каждом узле также может

возникнуть $\nu + 1$ различных состояний в зависимости от сорта атома, попадающего в этот узел. Поэтому общие результаты, полученные в работе [6], могут быть перенесены на модель с дискретными ориентациями частиц. Если же учесть, что в ЛЖК ориентации меняются непрерывно, то суммирование по дискретным ориентациям необходимо заменить интегрированием. Тогда конфигурационная свободная энергия ЛЖК в приближении самосогласованного поля принимает вид

$$F = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} \int V_{\mathbf{m}\mathbf{m}'}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \rho_{\mathbf{m}}(\mathbf{r}) \rho_{\mathbf{m}'}(\mathbf{r}') d\Omega_{\mathbf{m}} d\Omega_{\mathbf{m}'}, \quad (2.3)$$

$$+ kT \sum_{\mathbf{r}} (1 - n(\mathbf{r})) \ln(1 - n(\mathbf{r})) + kT \sum_{\mathbf{r}} \int \rho_{\mathbf{m}}(\mathbf{r}) \ln \rho_{\mathbf{m}}(\mathbf{r}) d\Omega_{\mathbf{m}},$$

где $n(\mathbf{r}) = 1 - \langle c_0(\mathbf{r}) \rangle$ – вероятность нахождения стержня в узле \mathbf{r} , $\rho_{\mathbf{m}}(\mathbf{r}) d\Omega_{\mathbf{m}} = \langle c(\mathbf{r}) \rangle d\Omega_{\mathbf{m}}$ – одновременная вероятность нахождения стержня в узле \mathbf{r} в малом телесном угле $d\Omega_{\mathbf{m}} = \sin \theta_{\mathbf{m}} d\theta_{\mathbf{m}} d\varphi_{\mathbf{m}}$ вокруг ориентации \mathbf{m} , T – абсолютная температура, k – постоянная Больцмана, $\langle \dots \rangle$ обозначает усреднение по ансамблю невзаимодействующих частиц при дополнительных условиях (ср. (2.1) с (2.2)) и

$$\int \rho_{\mathbf{m}}(\mathbf{r}) d\Omega_{\mathbf{m}} = n(\mathbf{r}); \quad \sum_{\mathbf{r}} n(\mathbf{r}) = c. \quad (2.4)$$

В дальнейшем мы будем пренебрегать слабой корреляцией между ориентациями и положениями центров тяжести стержней. Это предположение приводит к приближенному равенству

$$\rho_{\mathbf{m}}(\mathbf{r}) = n(\mathbf{r}) \rho_{\mathbf{m}}^0, \quad (2.5)$$

где $\rho_{\mathbf{m}}^0$ – вероятность ориентации стержня в малом телесном угле $d\Omega_{\mathbf{m}}$ вокруг направления \mathbf{m} при условии, что узел \mathbf{r} занят стержнем.

Для дальнейшего расчета допустим, что потенциал $V_{\mathbf{m}\mathbf{m}'}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ описывается функцией

$$V_{\mathbf{m}\mathbf{m}'}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \tilde{U}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - \tilde{\Phi}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') P_2(\cos \gamma_{\mathbf{m}\mathbf{m}'}), \quad (2.6)$$

где первый член характеризует центральные силы электростатического отталкивания, второй – ориентационные (анизотропные и дисперсионные) силы притяжения, $P_2(\cos \gamma_{\mathbf{m}\mathbf{m}'})$ – полином Лежандра второй степени и $\gamma_{\mathbf{m}\mathbf{m}'}$ – угол между ориентациями \mathbf{m} и \mathbf{m}' .

Подставляя (2.5) и (2.6) с учетом (2.4) в (2.3), приходим к функционалу свободной энергии, содержащей две независимые функции распределения $\rho_{\mathbf{m}}^0$ и $n(\mathbf{r})$. Функцию $\rho_{\mathbf{m}}^0$ для одноосных ЛЖК всегда можно представить в виде разложения по полиномам Лежандра

$$\rho_{\mathbf{m}}^0 = \frac{1}{4\pi} + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{4k+1}{4\pi} P_{2k}(\cos \theta_{\mathbf{m}}) S_{2k}, \quad (2.7)$$

где S_{2k} – коэффициенты разложения, играющие роль параметров ориентационного дальнего порядка.

Функция $n(\mathbf{r})$ для слоистых структур имеет вид

$$n(\mathbf{r}) = c + \frac{\eta}{2} e^{i\mathbf{k}_0 \mathbf{r}}, \quad (2.8)$$

где η – параметр трансляционного дальнего порядка и $2\mathbf{k}_0 = 2\pi G$ (G – вектор обратной решетки решеточного газа).

Таким образом, из формул (2.3)–(2.8) получим

$$\begin{aligned} F = N \left\{ \frac{1}{8} U(\mathbf{k}_0) \eta^2 - \frac{1}{2} \Phi(0) S_2^2 - \frac{1}{8} \Phi(\mathbf{k}_0) \eta^2 S_2^2 \right. \\ + \frac{kT}{2} \left[\left(c + \frac{\eta}{2} \right) \ln \left(c + \frac{\eta}{2} \right) + \left(c - \frac{\eta}{2} \right) \ln \left(c - \frac{\eta}{2} \right) \right. \\ \left. + \left(1 - c + \frac{\eta}{2} \right) \ln \left(1 - c + \frac{\eta}{2} \right) + \left(1 - c - \frac{\eta}{2} \right) \ln \left(1 - c - \frac{\eta}{2} \right) \right] \\ \left. + kTc \int \rho_m^0 \ln \rho_m^0 d\Omega_m \right\}, \quad (2.9) \end{aligned}$$

где

$$\Phi(0) = \sum_{\mathbf{r}} \tilde{\Phi}(\mathbf{r}), \quad \Phi(\mathbf{k}_0) = \sum_{\mathbf{r}} \tilde{\Phi}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}_0 \mathbf{r}}, \quad U(\mathbf{k}_0) = \sum_{\mathbf{r}} \tilde{U}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}_0 \mathbf{r}}.$$

3. Уравнения для параметров ориентационного и трансляционного дальнего порядка

Найдем уравнения для параметров η и S_{2k} из условий минимума свободной энергии

$$\frac{\partial F}{\partial \eta} = 0, \quad \frac{\partial F}{\partial S_{2k}} = 0 \quad (k = 1, 2, 3, \dots). \quad (3.1)$$

Подставляя (2.9) в (3.1), получим замкнутую систему уравнений для параметров η и $S_{2k} \equiv S$:

$$\ln \frac{\left(1 - c + \frac{\eta}{2} \right) \left(c + \frac{\eta}{2} \right)}{\left(1 - c - \frac{\eta}{2} \right) \left(c - \frac{\eta}{2} \right)} = \frac{g S^2 - b}{\tau} \eta, \quad (3.2)$$

$$S = \frac{3}{4m^2} \left(\frac{e^{m^2}}{D(m)} - 1 \right) - \frac{1}{2}, \quad (3.3)$$

где $g = \frac{\Phi(\mathbf{k}_0)}{\Phi(0)}$, $b = \frac{U(\mathbf{k}_0)}{\Phi(0)}$ и $\tau = \frac{kT}{\Phi(0)}$ – безразмерная температура, $D(m)$ – инте-

грал Доусона [7]: $D(m) = \int_0^1 e^{m^2 x^2} dx$, $m^2 = \frac{3S}{2\tau} \left(1 + \frac{g}{4c} \eta^2 \right)$. Остальные параметры

S_{2k} ($k < 1$) выражаются через параметр S .

Система уравнений (3.2) и (3.3) при заданных τ , b и g дает зависимость параметров порядка S и η от концентрации C . Для разбавленных растворов ($c \ll 1$) эта система имеет тривиальное решение $S = \eta = 0$, описывающее изотропный (мицеллярный) раствор. С увеличением концентрации твердого вещества могут возникнуть нетривиальные решения $\eta = 0$, $S \neq 0$ и $\eta \neq 0$, $S = 0$, которые описывают лиотропную нематическую и ламеллярную фазы.

Концентрации, которые приводят к потере устойчивости изотропной и нематической фаз, определяются из линеаризованных уравнений (3.2) и (3.3), в результате чего получается

$$\frac{1}{c_L^*(1-c_L^*)} = \frac{g S_L^{*2} - b}{\tau}, \quad c_N^* = 5\tau, \quad (3.4)$$

где c_L^* , c_N^* – концентрации потерь устойчивостей нематической и изотропной фаз, S_L^* – значение параметра S в точке c_L^* , которая совпадает с критической концентрацией c^0 фазового перехода второго рода, если он имеет место, и несколько больше c^0 , если происходит фазовый переход первого рода.

В общем случае можно упростить уравнения (3.2) и (3.3), для этого нужно учесть, что в ламеллярной фазе ориентационный дальний порядок сильно насыщен ($s \geq 0.8$), поэтому $m^2 \gg 1$. Тогда, воспользовавшись разложением функции

$D(m)$ при больших m , $D(m) \approx \frac{e^{m^2}}{2m^2} \left(1 + \frac{1}{2m^2} \right)$, получим приближенное уравне-

ние для параметра порядка S :

$$S = \frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{1 - \frac{4\tau}{a}} \right), \quad (3.5)$$

где $a = c + \frac{g}{4c} \eta^2$. Исключив параметр S из формулы (3.2) с помощью (3.5), по-

лучим уравнение относительно параметра η . Зная η , по формуле (3.5) найдем значение S .

В ламеллярной фазе, ограничиваясь областью состояний с малыми значениями параметра η , разложим левую и правую части уравнения (3.2) по степеням η . Сохранив в разложении лишь несколько первых членов, включая слагаемые $\sim \eta^4$, получим уравнение

$$Z_1 + Z_2 \eta^2 + Z_3 \eta^4 = 0 \quad (3.6)$$

$$\begin{aligned}
Z_1 &= \frac{1}{c(1-c)} - g \left(\frac{1+R}{2\tau} - \frac{1}{c} \right) + \frac{b}{\tau}, \\
Z_2 &= \frac{1}{12} \left(\frac{1}{c^3} + \frac{1}{(1-c)^3} \right) - \frac{g^2}{4c^3} \frac{1+R}{R}, \\
Z_3 &= \frac{1}{80} \left(\frac{1}{c^5} + \frac{1}{(1-c)^5} \right) + \frac{g^3}{16c^5} \frac{1+R}{R}, \\
R &= \sqrt{1 - \frac{4\tau}{c}}.
\end{aligned} \tag{3.7}$$

Если переход из нематической фазы в ламеллярную может произойти по механизму перехода второго рода, то в точке потери устойчивости исходной фазы $\eta = 0$. Концентрация потери устойчивости c_L^* , согласно формуле (3.6), определяется из условия

$$Z_1(g, b, \tau, c_L^*) = 0. \tag{3.8}$$

При фазовом переходе первого рода параметры η и S изменяются скачкообразно. Концентрация перехода c_L^0 , а также величины скачков параметров порядка определяются из условия равенства свободных энергий $F(0, S_L^0)$ при $\eta = 0$ и $S = S_L^0$ в нематической фазе и $F(\eta_L^0, \tilde{S}_L^0)$, соответствующей не равному нулю значению параметра η_L^0 в ламеллярной фазе. Также используются уравнения для η (3.6) и для S , получающиеся из формулы (3.5) с учетом малости параметра η в исследуемой области. Последнее уравнение имеет вид

$$S = \frac{1}{2} \left\{ 1 + R \left[1 + \frac{g\tau\eta^2}{2R^2c^3} \left(1 - \frac{g^2\eta^2}{4c^2} \right) \right] \right\}. \tag{3.9}$$

Для нематической фазы формула (3.9) принимает простой вид

$$S = (1 + R)/2. \tag{3.10}$$

Эта формула при критической концентрации $c_N^0 = 4\tau$ приводит к фазовому переходу первого рода: изотропная жидкость–лиотропный нематик. Скачок параметра S в этой точке равняется $S_N^0 = 0.5$. Более точное рассмотрение, основанное на формуле (3.3), дает $c_N^0 = 4.54\tau$; $S_N^0 = 0.43$ известно из теории ТЖК [4]. Сравнение показывает, что даже в точке фазового перехода в нематик приближение (3.9) приводит к ошибке, не превышающей 12–16%.

4. Исследование зависимости параметров η и S от концентрации

Исследуем зависимость параметров дальнего порядка η и S от концентрации при разных значениях g , b и τ . Корни биквадратного уравнения (3.6) получаются из формулы

$$\sigma_{\pm} = \frac{2C^2(-\tilde{Z}_2 \pm \sqrt{D})}{\tilde{Z}_3}. \quad (4.1)$$

Здесь $\sigma = \eta^2$, $D = \tilde{Z}_2^2 - 4\tilde{Z}_1\tilde{Z}_3$, \tilde{Z}_i – коэффициенты, которые связаны с прежними коэффициентами (3.7) следующими соотношениями:

$$\tilde{Z}_1 = cZ_1, \quad \tilde{Z}_2 = 4c^3Z_2, \quad \tilde{Z}_3 = 16c^5Z_3. \quad (4.2)$$

Из-за требования $\sigma > 0$ вычисление корней уравнения (3.6) сильно зависит от знака коэффициентов \tilde{Z}_i . В связи с этим в формулах (3.7) нужно взять $g > 0$ (в противном случае, возникновение ламеллярной фазы является затруднительным). Из этого предположения следует, что $\tilde{Z}_3 > 0$, а коэффициенты \tilde{Z}_1 и \tilde{Z}_2 могут быть как положительными, так и отрицательными. В общем случае возможны следующие варианты:

$$1 \begin{cases} \tilde{Z}_1 \geq 0 \\ \tilde{Z}_2 \geq 0 \end{cases}, \quad 2 \begin{cases} \tilde{Z}_1 \leq 0 \\ \tilde{Z}_2 \geq 0 \end{cases}, \quad 3 \begin{cases} \tilde{Z}_1 \geq 0 \\ \tilde{Z}_2 \leq 0 \end{cases}, \quad 4 \begin{cases} \tilde{Z}_1 \leq 0 \\ \tilde{Z}_2 \leq 0 \end{cases}. \quad (4.3)$$

Анализ показывает, что из-за требований $\sigma > 0$ и $D \geq 0$ вариант 1 исключается, так как в этом случае получаются отрицательные корни. В вариантах 2 и 4 $\sqrt{D} > |\tilde{Z}_2|$ и имеется один положительный корень σ_+ . В случае варианта 3 $\sqrt{D} < |\tilde{Z}_2|$ и оба корня (σ_+, σ_-) равенства (4.1) положительные.

Таким образом, прежде чем получить кривые зависимости параметров дальнего порядка от концентрации, необходимо исследовать концентрационную зависимость коэффициентов \tilde{Z}_i . На рис.1 приведены зависимости \tilde{Z}_i при константах $g = 0.30$, $b = 0.18$ и $\tau = 0.02$. Из рисунка следует, что этот случай соответствует второму варианту (4.3), т. е. уравнение (4.1) имеет один положи-

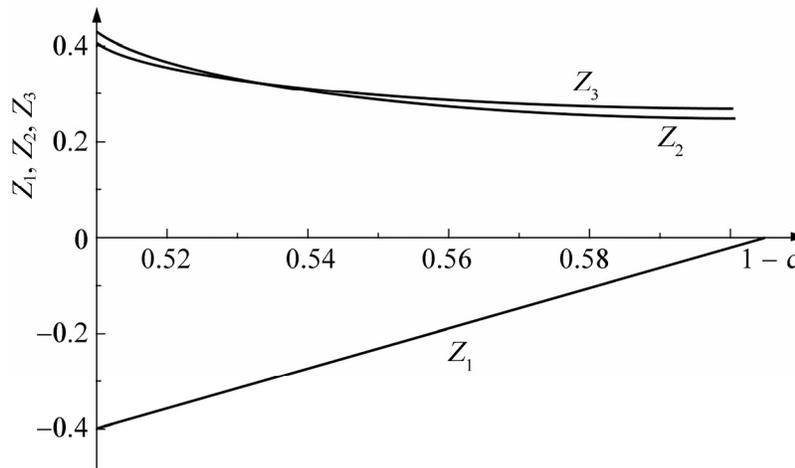


Рис.1. Зависимости коэффициентов Z_1 , Z_2 и Z_3 от концентрации растворителя $(1 - c)$ и $(b = 0.18, g = 0.3$ и $\tau = 0.02)$.

тельный корень. Из-за пересечения зависимости \tilde{Z}_1 с осью $1-c$ можно заключить, что в рассмотренном случае возможен переход в ламеллярную фазу с точкой потери устойчивости нематической фазы $c_L^* = 0.365$.

На рис.2 приведены концентрационные зависимости параметров S и σ_+ , соответствующие формулам (3.9) и (4.1) с теми же константами. Из рисунка следует, что параметр σ_+ непрерывно убывает с увеличением $1-c$ и при концентрации c_L^* обращается в нуль. Следовательно, здесь происходит фазовый переход второго рода.

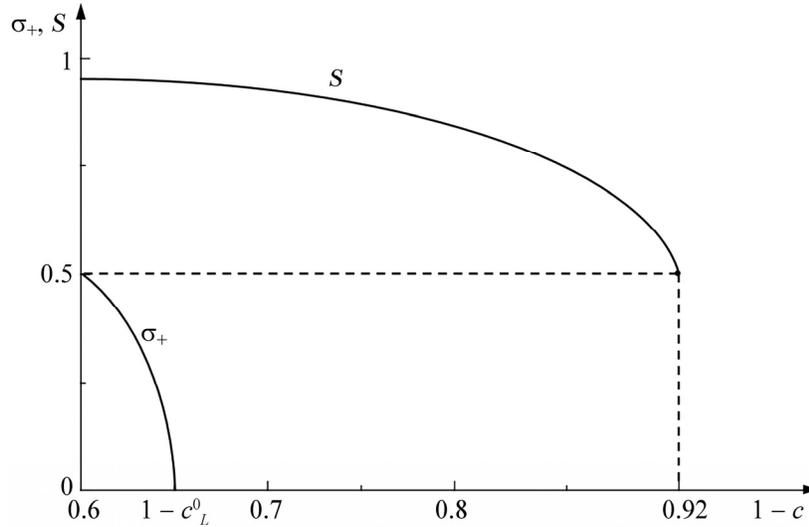


Рис.2. Зависимости параметров σ_+ и S от концентрации растворителя ($1-c$) и ($b = 0.18, g = 0.3$ и $\tau = 0.02$).

Рассмотрим другой случай: не меняя τ , увеличим константы взаимодействия g и b ($g = 0.45, b = 0.304$ и $\tau = 0.02$). Анализ кривых \tilde{Z}_1 показывает, что здесь имеет место вариант 3 (уравнение (4.3)), т. е. оба корня уравнения (4.1) положительны. Зависимости функций η и S от $1-c$ показаны на рис.3. Из рисунка видно что в интервале между концентрациями $1-c_L^*$ и $1-\tilde{c}$ ($1-\tilde{c}$ – точка перегиба кривой η) каждой точке $1-c$ соответствует два значения параметра η . Как известно, такая ситуация характерна для фазовых переходов первого рода в упорядочивающихся сплавах [8]. Чтобы найти решение, соответствующее равновесному значению параметра дальнего порядка при данной концентрации ЛЖК, необходимо исследовать зависимость свободной энергии как от параметра дальнего порядка, так и при температурном фазовом переходе первого рода. Такое исследование показывает, что участок AB соответствует минимуму свободной энергии. Участок BC соответствует метастабильным состояниям. Значения η в интервале CD соответствуют максимуму F , и эти состояния не реализуемы. Как уже было сказано, концентрация фазового перехода первого рода определяется

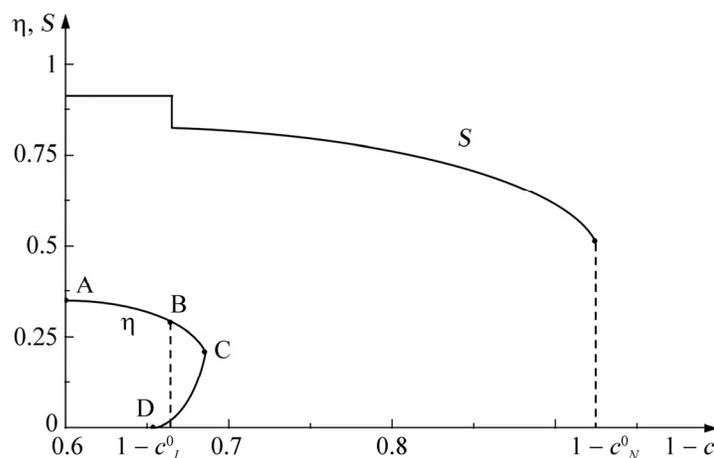


Рис.3. Зависимости параметров η и S от концентрации растворителя $(1 - c)$ и $(b = 0.304, g = 0.45$ и $\tau = 0.02)$.

из условия равенства свободных энергий при $\eta = 0$ и $\eta = \eta_L^0$. В результате расчетов имеем: $c_L^0 \approx 0.333$ и $\eta_L^0 \approx 0.257$.

5. Влияние γ -излучения на фазовые переходы в ЛЖК

Обсудим здесь влияние внешнего γ -излучения на фазовые переходы, наблюдаемые в ЛЖК, а также рассмотрим применение развитой здесь модели ЛЖК к данной проблеме. Важность этой проблемы связана с тем, что жидкие среды организма (цитоплазма, плазма крови, лимфа и т. д.) являются одним из видов ЛЖК, которые при температуре около 37°C находятся в непосредственной близости к точке фазового перехода, поэтому они могут реагировать даже на слабые внешние сигналы, например, на низкоинтенсивное лазерное излучение, применяемое в медицине [9]. Считается, что одним из механизмов действия слабого лазерного излучения является изменение физико-химических характеристик растворителя – составной части ЛЖК. Необходимо принять во внимание, что из-за слабой интенсивности света (несколько мВт/см²) тепловые эффекты ничтожно малы. Учитывая, что электростатическое отталкивание ионов в электролите описывается потенциалом Дебая–Хюккеля, который сильно зависит от диэлектрической проницаемости растворителя, можно предполагать, что в первую очередь слабое излучение изменяет диэлектрическую проницаемость. С точки зрения развитой здесь теории это изменение влияет на константу b .

Воздействие γ -излучения на ЛЖК при высокой концентрации амфифильного вещества γ -квантами приводит к фазовым переходам двух типов: переходу от ламеллярной фазы к кристаллической (α -фаза) и переходу от фазы с упорядоченными хвостами (кристаллическое состояние) к фазе с неупорядоченными хвостами, называемой «плавлением» хвостов [10–13]. При малых концентрациях

амфифильного вещества имеет место фазовый переход нематическая фаза–ламеллярная фаза. В результате радиации происходит смещение точки перехода в сторону малых значений концентрации амфифильного вещества.

Результаты воздействия γ -излучения на ЛЖК зависят от внешних параметров и состояния ЛЖК. Как известно, ионизирующая природа γ -лучей приводит к изменению заряда как ламелл или мицелл, так и растворителя. В первом случае имеет место прямое влияние γ -лучей, а во втором – опосредованное. При прямом воздействии увеличение ионного заряда приводит к росту сил электростатического отталкивания (константа b). Одновременно происходит пероксидное окисление хвостов молекул, которое уменьшает долю вандерваальсовых сил притяжения (константа g). В результате нарушения баланса этих сил силы отталкивания превышают силы притяжения, приводящие к набуханию ламелл. Это в свою очередь приводит к разрыхлению ламелл. Результатом облучения является также выделение тепловой энергии, приводящее к повышению температуры системы (константа τ) и «плавлению» области нагревания.

6. Заключение

Из вышеизложенного следует, что теория фазовых переходов в ЛЖК интерпретируется переходом из изотропной (мицеллярной) фазы в лиотропную нематическую, а также переходом между нематической и ламеллярной фазами. Получены уравнения для описания зависимости параметров ориентационного и трансляционного дальнего порядка от концентрации. Показано, что в зависимости от констант модели фазовый переход от нематической фазы в ламеллярную может быть переходом как первого, так и второго рода.

Влияние γ -радиации на ЛЖК приводит к изменению всех констант модели, отвечающих за равновесные термодинамические свойства кристалла. Это означает, что радиация изменяет ход зависимости параметров дальнего порядка от концентрации, влияя на критические концентрации фазовых переходов, а также на род фазового перехода.

Работа выполнена в рамках проекта МНТЦ А-2089.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Р. Екwall.** *Advances in Liquid Crystals.* V.1, New York, Academic Press, 1975.
2. **А.А. Веденов.** *Физика растворов.* Москва, Наука, 1984.
3. **А.С. Сонин.** *УФН*, **153**, 273 (1987).
4. **П. де Жен.** *Физика жидких кристаллов.* Москва, Мир, 1977.
5. **Д.А. Бадалян.** *Кристаллография*, **27**, 20 (1982).
6. **Д.А. Бадалян, Э.С. Абовян.** *Кристаллография*, **28**, 629 (1983).
7. **Е. Янке, Ф. Эмде, Ф. Леш.** *Специальные функции.* Москва, Наука, 1977.
8. **М.А. Кривоглаз, А.А. Смирнов.** *Теория упорядочивающихся сплавов.* Москва, Физматгиз, 1958.

9. **T.I. Karu.** The Science of Low Power Laser Therapy. London, Gordon & Breach Sci. Publ., 1998.
10. **F.M. Ali, S.E. Abo-Neima, H.A. Motaweh Fayza El-Akad, A.M. El-Khatib, A.A. Sakr.** Joint Institute for Nuclear Research (JINR), Dubna, 2013, E3-2013-22.
11. **N.S. Selim, O.S. Desouky, S.M. Aly, M.A. Ibrahim, H.A. Ashry.** Romanian J. Biophys., **19**, 171 (2009).
12. **A.D. Kitchen, G.F. Mann, J.F. Harrison, A.J. Zuckerman.** Vox Sanguinis, **56**, 223 (1989).
13. **G.J. Köteles.** Radiation and Environmental Biophysics, **21**, 1 (1982).

ԿՈՆՑԵՆՏՐԱՑԻԱՅԻ ՓՈՓՈԽՈՒԹՅԱՄԲ ԵՎ γ -ՃԱՌԱԳԱՅԹՄԱՄԲ
ՊԱՅՄԱՆԱՎՈՐՎԱԾ ՓՈԻԼԱՅԻՆ ԱՆՑՈՒՄՆԵՐԸ
ԼԻՈՏՐՈՊ ՀԵՂՈՒԿ ԲՅՈՐԵՂՆԵՐՈՒՄ

Դ.Հ. ԲԱԴԱԼՅԱՆ, Մ.Ա. ՍՏԵՓԱՆՅԱՆ, Հ.Գ. ԲԱԴԱԼՅԱՆ

Մշակված է լիոտրոպ հեղուկ բյուրեղներում փուլային անցումների մոլեկուլյար-ստատիստիկ տեսությունը, որը նկարագրում է փուլային անցումները իզոտրոպ (միցելյար), նեմատիկ և լամելյար փուլերի միջև: Ստացված են օրինատացիոն և տրանսլյացիոն հեռակակարգի պարամետրերի կախվածությունը կոնցենտրացիայից նկարագրող հավասարումները: Ցույց է տրված, որ մոդելի միկրոսկոպիկ հաստատունների արժեքներից կախված նեմատիկ փուլ – լամելյար փուլ փուլային անցումը կարող է լինել ինչպես առաջին, այնպես էլ երկրորդ կարգի անցում: Քննարկված էին ինտենսիվ և ցածր ինտենսիվ γ -ռադիացիայի ազդեցությունը փուլային անցումների վրա: Ցույց է տրված, որ ճառագայթումը փոփոխում է փուլային անցումներին համապատասխանող մոդելի հաստատունները: Կարելի է ենթադրել, որ γ -ռադիացիան ազդում է կոնցենտրացիայից հեռակա կարգի պարամետրերի կախվածության ընթացքի վրա, ինչպես նաև փոփոխում է փուլային անցումների կրիտիկական կոնցենտրացիաների մեծությունները և նույնիսկ փուլային անցման կարգը:

PHASE TRANSITIONS IN LYOTROPIC LIQUID CRYSTALS
CAUSED BY CONCENTRATION CHANGE AND γ -RADIATION

D.A. BADALYAN, M.A. STEPANYAN, H.G. BADALYAN

Molecular-statistical theory of phase transitions in lyotropic liquid crystals, which describes the phase transitions between isotropic (micellar), nematic and lamellar phases was developed. The equations describing the dependence of the parameters of orientation and translational long-range order on concentration were obtained. It was shown that depending on the values of the model microscopic constants, the nematic phase–lamellar phase transition can be both of the first and second kind. The influence of intensive and low intensive γ -radiation on the phase transitions mentioned herein was considered. It was shown that irradiation changes the model constants responsible for the phase transitions. On this basis it can be assumed that γ -radiation influences the course of the dependence of the long-range order parameters on concentration as well as it changes the values of the critical concentrations of the phase transitions and even a kind of the phase transition.