

3. Получение гидроокисей тетраалкиламмония электрохимическим методом, [www.ximicat.com/ebook.php?file=li.djvu&page=38](http://www.ximicat.com/ebook.php?file=li.djvu&page=38).
4. Вольфсон, А.И. Крохов В.В. Получение гидрата окиси тетраметиламмония из тетраметиламмония иодистого на анионите // ЖПХ, 1961, XXXIV, С.223-237.
5. Крешков, А.П. Саюшкина Е.Н. Дроздов В.А. Получение раствора гидроокиси тетраметиламмония методом ионного обмена // Журнал прикладной химии, 1964, 37, 9-10, С.1894-1897.
6. Теория систем. Математические методы моделирование. Сборник. М.: Мир; 1989.
7. Батулин Л.М., Позин М.Е. Математические методы в химической технике. Л.: Химия, 1971.

### ION-EXCHANGE PROCESSES TO OBTAIN HIGH PURE SOLUTIONS OF TETRAALKYLAMMONIUM HYDROOXIDES AND THEIR MODELLING

E. Krysin, A. Konovalov, M. Ryabtseva

*Institute for Chemically Pure Reagents  
3, Bogorodsky Val, Moscow, 107076, Russia*

*Abstract.* Making solutions of tetramethylammonium hydroxide (ТМАН) and tetra-n-butylammonium hydroxide on the ion-exchange resin is discussed. Optimizing the ratio of the used resins number and the degree of conversion of initial concentration of Hal-tetraalkylammonium to obtain high purity target hydroxides solutions is considered.

*Keywords:* ion-exchange pitch, solutions of hydroxides

УДК 533

### РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ОРИЕНТАЦИИ МОЛЕКУЛ КРАСИТЕЛЯ В ФОТООРИЕНТИРУЮЩЕМ СЛОЕ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ УГЛА ПАДЕНИЯ ПОЛЯРИЗОВАННОГО ПУЧКА

Н.Н.Барабанова\*, В.В.Беляев\*, Д.Л.Богданов\*,  
А.Л. Бугримов\*, А.К.Дадиванян\*, В.Г.Чигринов\*\*

*\*Московский государственный областной университет (МГОУ)  
105005, Москва, ул. Радио, 10а*

*\*\*Гонконгский университет науки и технологии, Гонконг, Китай*

*Аннотация.* Предложен механизм ориентации красителей лазерным излучением, основанный на учете анизотропии оптической поляризуемости молекул. Найдена зависимость энергии кластера молекул красителя от анизотропии оптической поляризуемости молекул, параметра порядка и числа молекул в кластере. Построена функция распределения кластера по углам.

*Ключевые слова:* жидкие кристаллы, фотоориентация, лазерное излучение, функция распределение, кластер

Одним из наиболее эффективных методов ориентирования жидких кристаллов и красителей является метод их ориентации лазерным излучением [1-6]. Теория этого яв-

ления, основанная на решении уравнения диффузии [7], позволила получить зависимость параметра порядка от времени. Однако зависимость распределения молекул по углам как функция угла падения светового пучка не была рассмотрена.

Цель настоящей работы – найти связь распределения по углам директора кластера жидкого кристалла и красителя при их ориентации лазерным излучением со свойствами ЖК и красителей и углом падения волнового вектора лазера (под кластером будем понимать группу молекул, ориентирующихся под действием световой волны).

Энергия взаимодействия электрического поля с молекулой определяется соотношением:

$$U = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} \alpha_{ij} E_i E_j,$$

$i, j = x, y, z$ ;  $\alpha_{ij}$  – компоненты тензора поляризуемости молекулы;  $E_i, E_j$  – компоненты вектора электрического поля в той же системе координат.

Пусть луч света с волновым вектором  $\mathbf{k}$  падает под углом  $\gamma$  к нормали  $\mathbf{n}$  к поверхности.  $\mathbf{n}'$  направлена по оси  $z$  лабораторной системы координат  $x, y, z$ .  $yOz$  – плоскость поляризации излучения (рис. 1).

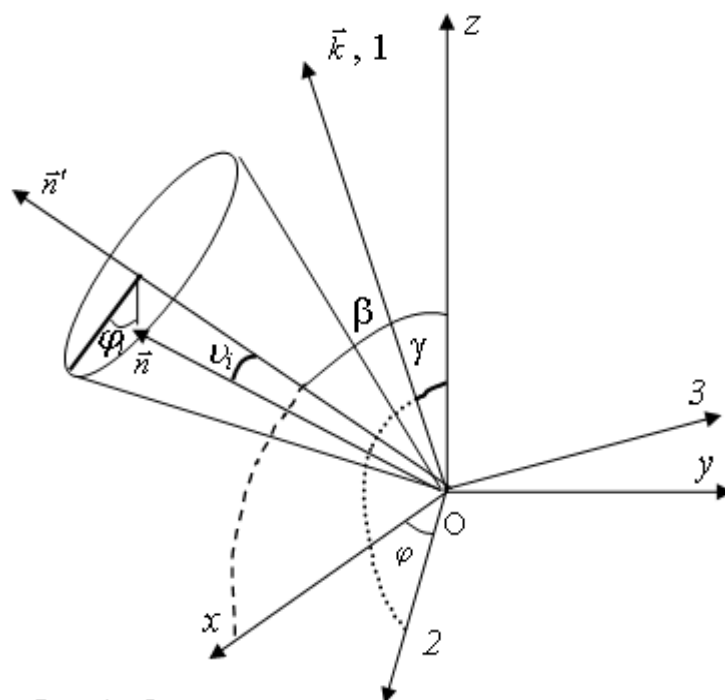


Рис. 1. Ориентация молекулы красителя или мезогена относительно лабораторной системы координат XYZ. Ось  $z$  перпендикулярна поверхности раздела,  $\mathbf{n}$  и  $\mathbf{n}'$  – направления оси симметрии эллипсоида поляризуемости молекулы и директора кластера соответственно, лежащие в плоскости  $xOz$ ;  $\psi$  и  $\varphi$  – полярный и азимутальный углы, определяющие ориентацию молекулы в системе координат  $x'y'z'$ , связанной с кластером (ось  $z'$  направлена вдоль  $\mathbf{n}'$ );  $\mathbf{k}$  – волновой вектор излучения лазера; углы  $\beta$  и  $\gamma$  – углы между осью  $z$  и волновым вектором и осью  $z$  и директором кластера.

Волновой вектор направлен по оси 1, электрическое поле по оси 2. Компоненты напряженности электрического поля  $E_x$  и  $E_z$  найдем, пользуясь матрицей перехода от системы координат, связанной с волновым вектором световой волны к лабораторной системе координат:

$$\begin{aligned} E_x &= E_0 (\cos \varphi \cdot \cos \psi \cdot \cos \gamma - \sin \varphi \cdot \sin \psi) \\ E_y &= E_0 (\cos \varphi \cdot \sin \psi + \sin \varphi \cdot \cos \psi \cdot \cos \gamma) \\ E_z &= -E_0 \sin \gamma \cdot \cos \psi. \end{aligned}$$

$\gamma$  - полярный угол оси 1 в неподвижной системе координат;  $\varphi$  - азимут оси 1 (угол между плоскостями XZ и 1Z);  $\psi$  - азимут подвижной системы (угол между плоскостями 1Z и 12)).

Так как излучение плоско поляризовано (плоскость поляризации  $xOz$ ), то  $E_y = 0$ , т.е.

$$\cos \varphi \cdot \sin \psi + \sin \varphi \cdot \cos \psi \cdot \cos \gamma = 0 \text{ и } \operatorname{tg} \psi = -\operatorname{tg} \varphi \cdot \cos \gamma \Rightarrow \psi = -\operatorname{arctg}(\operatorname{tg} \varphi \cdot \cos \gamma).$$

Отсюда следует, что

$$\begin{aligned} E_x &= E_0 \{ \cos \varphi \cdot \cos[-\operatorname{arctg}(\operatorname{tg} \varphi \cdot \cos \gamma)] \cdot \cos \gamma - \sin \varphi \cdot \sin[-\operatorname{arctg}(\operatorname{tg} \varphi \cdot \cos \gamma)] \} \\ E_y &= 0, \quad E_z = -E_0 \sin \gamma \cdot \cos[-\operatorname{arctg}(\operatorname{tg} \varphi \cdot \cos \gamma)]. \end{aligned}$$

Компоненты тензора поляризуемости молекулы в системе координат  $x', y', z'$ , связанной с кластером красителя или ЖК, определяются соотношением:

$$\alpha_{ij} = \sum_{\sigma, \tau} \alpha_{\sigma\tau}(\sigma, i)(\tau, j).$$

$i, j = x', y', z'$ ;  $\sigma, \tau = 1, 2, 3$ ;  $\alpha_{\sigma\tau}$  и  $\alpha_{ij}$  - компоненты тензора поляризуемости соответственно в системах координат, связанных с молекулой и кластером.

Считая эллипсоид поляризуемости молекулы аксиально симметричным,  $\alpha_{11} \equiv \alpha_1$ ,  $\alpha_{22} = \alpha_{33} \equiv \alpha_2$  и пользуясь матрицей перехода от системы координат, связанной с кластером, к лабораторной системе координат для поляризуемостей молекулы в направлениях, параллельном и перпендикулярном направлениям директора кластера  $\mathbf{n}'$  (соответственно,  $\alpha_{||}$  и  $\alpha_{\perp}$ ), при равномерном распределении молекул по углу  $\varphi_i$  можно получить [8]:

$$\alpha_{||} = (\alpha_1 - \alpha_2) \cos^2 \vartheta_i + \alpha_2, \quad \alpha_{\perp} = \frac{1}{2} (\alpha_1 - \alpha_2) \sin^2 \vartheta_i + \alpha_2,$$

где  $\vartheta_i$  - угол между направлениями оси симметрии молекулы и директора.

После усреднения по  $\vartheta_i$ , учитывая, что  $\overline{\cos^2 \vartheta_i} = \frac{2S+1}{3}$  и  $\overline{\sin^2 \vartheta_i} = \frac{2-2S}{3}$ , где  $S$  - параметр порядка:

$$S = \frac{\overline{3 \cos^2 \vartheta_i} - 1}{2}$$

имеем: 
$$\alpha_{||} = \frac{2S+1}{3} (\alpha_1 - \alpha_2) + \alpha_2, \quad \alpha_{\perp} = \frac{1-S}{3} (\alpha_1 - \alpha_2) + \alpha_2.$$

Если угол между директором кластера и нормалью к поверхности пленки (ось z) равен  $\beta$ , компоненты тензора поляризуемости молекулы в системе координат, связанной с поверхностью раздела, равны:

$$\begin{aligned}\alpha_{xx} &= (\alpha_1 - \alpha_2) \left( \frac{1-S}{3} + S \sin^2 \beta \right) + \alpha_2, \\ \alpha_{xz} &= \alpha_{zx} = (\alpha_1 - \alpha_2) S \sin \beta \cos \beta, \\ \alpha_{zz} &= (\alpha_1 - \alpha_2) \left( \frac{1-S}{3} + S \cos^2 \beta \right) + \alpha_2.\end{aligned}$$

Так как электрическое поле перпендикулярно оси  $y$  ( $E_y = 0$ ), то нас интересуют только приведенные выше компоненты тензора поляризуемости и остальные компоненты мы не приводим. При  $\beta = 0^\circ$  получим:

$$\bar{\alpha}_{xx} = (\alpha_1 - \alpha_2) \frac{1-S}{3} + \alpha_2, \quad \bar{\alpha}_{xz} = \bar{\alpha}_{zx} = 0, \quad \bar{\alpha}_{zz} = (\alpha_1 - \alpha_2) \frac{2S+1}{3} + \alpha_2.$$

При апертуре источника света  $\delta$  величина  $\gamma$  меняется от 0 до  $\delta/2$  величину  $E$  необходимо усреднить по  $\gamma$  и  $\varphi$ , и энергия кластера в поле световой волны будет равна:

$$U = U_1(\beta, \varphi) + U_2(\beta, \varphi) - \frac{1}{2} N F^2 A,$$

где  $U_1(\beta, \varphi)$  – энергия взаимодействия молекул внутри кластера,  $U_2(\beta, \varphi)$  – энергия взаимодействия между кластерами,

$$\begin{aligned}A &= \left[ (\alpha_1 - \alpha_2) \left( \frac{1-S}{3} + S \sin^2 \beta \right) + \alpha_2 \right] \times \\ &\times \left\{ \cos \varphi \cdot \cos[-\arctg(\tg \varphi \cdot \cos \gamma)] \cos \gamma - \sin \varphi \sin[-\arctg(\tg \varphi \cdot \cos \gamma)] \right\}^2 - \\ &- 2(\alpha_1 - \alpha_2) S \sin \beta \cos \beta \left\{ \cos \varphi \cdot \cos[-\arctg(\tg \varphi \cdot \cos \gamma)] \cos \gamma - \right. \\ &- \left. \sin \varphi \cdot \sin[-\arctg(\tg \varphi \cdot \cos \gamma)] \right\} \sin \gamma \cos[-\arctg(\tg \varphi \cdot \cos \gamma)] + \\ &+ \left[ (\alpha_1 - \alpha_2) \left[ \left( \frac{1-S}{3} + S \cos^2 \beta \right) + \alpha_2 \right] \sin^2 \gamma \cdot \cos^2[\arctg(\tg \varphi \cdot \cos \gamma)] \right]\end{aligned}$$

$$\text{и } F = E_0 \frac{n_0^2 + 2}{3},$$

$n_0$  – показатель преломления,  $N$  – число молекул в кластере.

Для функции распределения директора по углам имеем:

$$\rho(\beta) = C \exp \left( \frac{U_1(\beta) + U_2(\beta) - \frac{1}{2} N F^2 A}{kT} \right),$$

$$\text{где } C = \left( \int_0^{\pi/2} \exp \left( \frac{U_1(\beta) + U_2(\beta) - \frac{1}{2} N F^2 A}{kT} \right) \sin \beta d\beta \right)^{-1}.$$

При не очень больших значениях интенсивности света  $I < 10^4$  Вт/м<sup>2</sup> можно считать  $U_1$  и  $U_2$  независимыми от  $\beta$ . Тогда

$$\rho(\beta) = C \exp\left(\frac{-\frac{1}{2}NF^2A}{kT}\right),$$

где  $C = \left( \int_0^{\pi/2} \exp\left(\frac{-\frac{1}{2}NF^2A}{kT}\right) \sin \beta d\beta \right)^{-1}$ .

При  $N=10^7$  функция распределения имеет вид  $\delta$ -функции (отношение  $\rho(90^\circ)/\rho(0^\circ)$  составляет порядка  $10^{43}$ ), при  $N=10^5$  она достаточно размыта (рис. 2). Сравнение с экспериментальными данными показывает, что  $N=10^5$ . Эта величина близка к данным, полученным в работе [5]. В работе [9] получено значение  $N$  на несколько порядков ниже. Это расхождение связано, по-видимому, с тем, что разные экспериментальные методы дают разные значения размеров кластера.

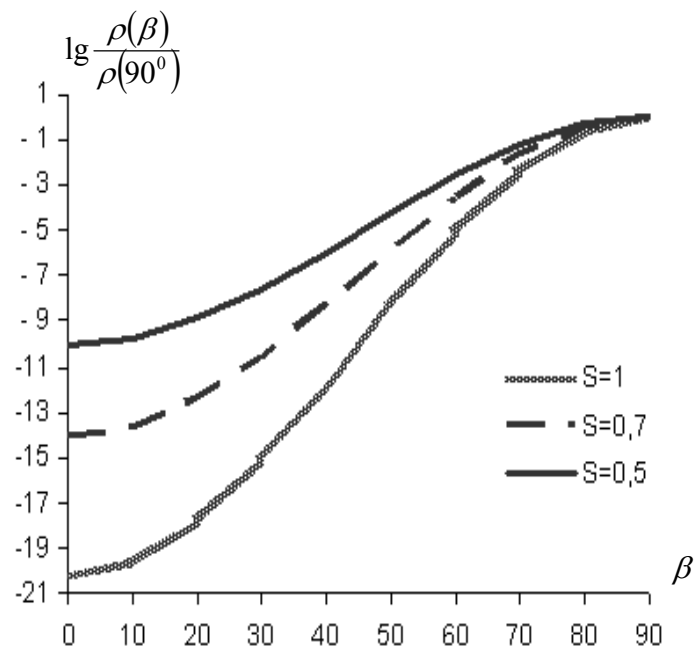


Рис. 2. График зависимости  $\lg \frac{\rho(\beta)}{\rho(90^\circ)}$  от угла  $\beta$  при различных значениях параметра порядка  $S$

Можно получить зависимость степени ориентации от времени облучения или от поглощенной энергии  $E$ , которая пропорциональна времени облучения:

$$\begin{aligned}dn &= -\xi n dt, \\n &= n_0(1 - \exp(-\xi t)),\end{aligned}$$

где  $n$  – число неориентированных молекул в момент времени  $t$ ;  $n_0$  – число неориентированных молекул в необлученном образце, т.е. при  $t=0$ . Так как энергия излучения пропорциональна времени  $t$ , то

$$n = n_0(1 - \exp(-\xi' E)).$$

**ВЫВОДЫ.** Предложен механизм ориентации жидких кристаллов и красителей лазерным излучением, основанный на учете анизотропии оптической поляризуемости молекул. Найдена зависимость энергии молекул мезогенов и красителя от анизотропии оптической поляризуемости молекул, параметра порядка и числа молекул в кластере. Найдена зависимость энергии молекул от напряженности электрического поля световой волны и угла падения светового пучка. Построена функция распределения кластера по углам. Оценено число молекул в кластере. Получена зависимость числа ориентированных молекул от времени облучения.

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ № 12-07-31172\_мол-а 12-07-90006-Бел-а, 12-07-90007-Бел-а, грантов Президента РФ НШ-1495.2012.8 и МК-1969.2012.9.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Квасников, Е.Д., Козенков, В.М., Барачевский, В.А./Е. Д. Квасников, В. М. Козенков, В.А. Барачевский // Доклады Академии наук СССР. – 1977. – **237**. – С. 633.
2. Ishimura, K., Hayashi, Y., Akiyama, H., Ikeda, T., Ishizuki, N. / K. Ishimura, Y. Hayashi, H. Akiyama, T. Ikeda, N. Ishizuki. // Applied Physics Letters/ - 1993. - **63**. – p. 449.
3. Gibbons, W.M., Kosa, T., Palffy-Muhoray, P., Shannon, P.J., Sun, S.T. / W.M. Gibbons, T. Kosa, P. Palffy-Muhoray, P.J. Shannon, S.T. Sun. // Letters to Nature. 1995. – **377**. – p. 43.
4. Schadt, M., Seiberle, H., Schuster, A. / M. Schadt, H. Seiberle, A. Schuster // Nature. 1996. - **381**, p. 212.
5. Chigrinov, V., Kozenkov, V., Kwok, H.-S. Photoalignment of Liquid Crystalline Materials / V. Chigrinov, V. Kozenkov, H.-S. Kwok. // Wiley-SID Serlesin Display Technology. John Wiley & Sons. - 2008.
6. Kozenkov, V., Belyaev, V., Chigrinov, V., Tumovskii, G., Spakhov, A. Structure and Properties of Azo Dye Films for Photoalignment and Photochromic Applications / V. Kozenkov, V. Belyaev, V. Chigrinov, G. Tumovskii, and A. Spakhov // SID'12 Digest. – 2012. - p.1411.

7. Chigrinov, V., Pikin, S., Verevochnikov, A., Kozenkov, V., Khazimullin, M., Ho, J., Huang, D.D., Kwok H.-S./ V.Chigrinov, S.Pikin, A.Verevochnikov, V.Kozenkov, M. Khazimullin, J. Ho, D.D. Huang, H.-S. Kwok // *Phys. Rev.* – **69**. – 061713. - p. 1.
8. Цветков, В.Н., Эскин, В.Е., Френкель, С.Я. Структуры макромолекул в растворах / В.Н. Цветков, В.Е. Эскин, С.Я. Френкель. // М.: Наука, 1964.
9. Беляев, В.В., Немцов В.Б. Молекулярное трение и вращательная вязкость нематических жидких кристаллов / В.В. Беляев, В.Б. Немцов // *Журнал физической химии.* – 1992. – **66**. - № 10. С. 1492.

### **DISTRIBUTION OF DYE MOLECULES ORIENTATION IN PHOTOALIGNING LAYERS. INCIDENCE ANGLE OF POLARIZED LIGHT BEAM**

**N. Barabanova\*, V. Belyaev\*, D. Bogdanov\*,  
A. Bugrimov\*, A. Dadivanyan\*. V. Chigrinov\*\***

*\*Moscow Region State University*

*10a, Radio st., Moscow, 105005, Russia*

*\*\*University of Science and Technology, Hong Kong, China*

*Abstract.* A mechanism of dyes molecules orientation by laser radiation is proposed that takes into account anisotropy of molecular optical polarizability. A dependence of dye molecules energy on polarizability anisotropy, order parameter, quantity of molecules in a cluster dyes, strength of light wave electrical field, light beam incidence angle is derived.

*Keywords:* liquid crystals, photoorientation, laser radiation, cluster.

УДК 621.378+514.76

### **КВАНТОВО-ИНФОРМАЦИОННЫЙ ПОДХОД К РАСПРОСТРАНЕНИЮ СИГНАЛОВ ВО ВСЕЛЕННОЙ ГЁДЕЛЯ**

**Е.О. Матвеева**

*Московский государственный технологический университет «СТАНКИН»*

*127994, Москва, Вадковский пер., 1*

*Аннотация.* Рассматриваются геометрические основания для мгновенного распространения световых сигналов в пространстве Вселенной Гёделя с использованием квантовой теории информации. Исследуются тензорные характеристики пространства, получена система обыкновенных дифференциальных уравнений для описания геодезических линий.