

HYDRODYNAMIK KOMPLEXER FLUIDE

Harald Pleiner

FB7, Physik, Universität Essen, D 45 117 Essen

Institut für Physik, Universität Augsburg, D 86 135 Augsburg

in *Komplexe Systeme zwischen Atom und Festkörper*, 25. IFF Ferienkurs, Forschungszentrum Jülich, p. 20.1-32 (1994)

1. Einleitung

Die Hydrodynamik ist wie die Elektrodynamik und die Elastizitätstheorie (die ein Teil von ihr ist) eine Feldtheorie, d.h. der Zustand eines Systems wird durch kontinuierliche Raum-Zeitfunktionen beschrieben, deren räumliche und zeitliche Variationen die Dynamik des Systems charakterisieren. Als klassische Theorie beschreibt sie das makroskopische Verhalten von deformierbaren Stoffen, wie Gasen, Flüssigkeiten, Mesophasen und Festkörpern. Die eigentliche Hydrodynamik, wie sie in zahlreichen Lehrbüchern¹ beschrieben wird, umfaßt nur die gewöhnlichen Flüssigkeiten (und Gase), wie z.B. Wasser, Alkohol und Methan. Sie ist als Methode² jedoch leicht verallgemeinerbar und auch auf kompliziertere Systeme mit zusätzlichen inneren Freiheitsgraden anwendbar. Solche komplexen Fluide spielen eine wachsende Rolle im täglichen Leben (vom Haarshampoo über Majonaise bis zur Flüssigkristallanzeige) und die

Kenntnis ihrer Dynamik ist wesentlich auf vielen Gebieten,³ z.B. bei der Verfahrenstechnik (Fließverhalten von Polymeren), in der theoretischen Physik (Instabilitäten⁴ und Turbulenz⁵), aber auch im Alltag (Wettervorhersage). Natürlich gibt es auch exotische komplexe Fluide ohne erkennbare Anwendungsmöglichkeiten (z.B. die superfluiden Phasen⁶ des ^3He bei 10^{-3} Kelvin), die im folgenden aber keine Rolle spielen werden.

Die hydrodynamische Methode besteht darin, Systeme in ihrem langwelligen und niederfrequenten Verhalten zu beschreiben, d.h. es finden gerade solche Störungen eines Gleichgewichtszustands Berücksichtigung, die sich auf einer großen Längen- und Zeitskala abspielen. In diesem sogenannten hydrodynamischen Bereich sollten in der Regel einige wenige Felder genügen, das System vollständig zu beschreiben, wohingegen für hohe Frequenzen und kleine Wellenzahlen (mikroskopischer Bereich) die Proliferation der 10^{23} lokalen Freiheitsgrade eine solche Beschreibung unmöglich macht. Der Erfolg einer hydrodynamischen Beschreibung hängt deshalb auch von der Möglichkeit ab, diese beiden Bereiche klar zu trennen. Einer der wesentlichen Vorteile der hydrodynamischen Methode ist, daß man nur von recht allgemeinen Gesetzmäßigkeiten Gebrauch macht, z.B. von Erhaltungssätzen, Symmetrieüberlegungen und thermodynamischen Gesetzen. Im hydrodynamischen Grenzfall (Wellenzahl gegen Null, Frequenz gegen Null) ist diese Theorie sogar exakt. Als Preis für diese Rigorosität und die Allgemeinheit der Theorie muß man allerdings das Auftreten von phänomenologischen Parametern (statische Suszeptibilitäten und Transportparameter) in Kauf nehmen, die man nicht innerhalb der Theorie bestimmen kann, sondern nur messen oder mittels mikroskopischer Methoden näherungsweise berechnen kann.

Nach dieser etwas allgemein-theoretischen Einleitung (deren Aussagen vielleicht erst im Verlauf der Vorlesung im Detail deutlich werden) werden wie jetzt mit einer kurzen Wiederholung der Hydrodynamik gewöhnlicher Flüssigkeiten unser eigentliches

Thema vorbereiten.

2. Hydrodynamik gewöhnlicher Flüssigkeiten

Die Hydrodynamik gewöhnlicher Flüssigkeiten läßt sich in 5 partiellen Differentialgleichungen⁷ für die (Massen-)Dichte (pro Volumen) $\rho(\mathbf{r}, t)$, die Impulsdichte (pro Volumen) $\mathbf{g}(\mathbf{r}, t)$ [Vektoren sind im folgenden fett oder mit Pfeil dargestellt] und die Energiedichte (pro Volumen) $\epsilon(\mathbf{r}, t)$ ausdrücken, wobei die Gleichungen als Kontinuitäts-, Navier-Stokes- und Wärmeleitungsgleichung bezeichnet werden

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial g_i}{\partial t} + \nabla_j (g_i v_j) + \nabla_i p = \nabla_j (\nu \nabla_j v_i) + \nabla_i (\zeta - \frac{\nu}{3}) \operatorname{div} \vec{v} \quad (2)$$

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\epsilon \vec{v}) = \vec{\nabla} \cdot (\kappa \vec{\nabla} T) \quad (3)$$

Neben den obengenannten Variablen wurden noch 5 weitere Felder eingeführt, die Geschwindigkeit $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$, der hydrostatische Druck $p(\mathbf{r}, t)$ und die Temperatur $T(\mathbf{r}, t)$. Die Einstein Konvention über die Summation doppelt vorkommender Indizes wird benutzt und in (3) wurde die Wärmeproduktion der viskosen Reibung weggelassen (da sie quadratisch in den Geschwindigkeitsgradienten ist), was zumindest bei den gewöhnlichen Fluiden gerechtfertigt ist. Wie angekündigt enthalten die Gleichungen phänomenologische Parameter, nämlich die Scherviskosität ν , die Volumenviskosität ζ und die Wärmeleitungszahl κ , womit auch die physikalische Bedeutung der rechten Seiten von (2) und (3) offenkundig ist. Weitere 3 Parameter finden sich in den statischen Grundgleichungen (Zustandsgleichungen), die $\{p, T\}$ mit $\{\rho, \epsilon\}$ verknüpfen (siehe Appendix 1). Alle phänomenologischen Parameter können noch von den skalaren Größen des Systems (T , p und v^2) abhängen.

Benutzt man die Identität $\mathbf{g} = \rho \mathbf{v}$ (d.h. Impulsdichte gleich Massenstromdichte) so läßt sich (2) als Differentialgleichung für \mathbf{v} schreiben. Man findet dann dort – wie

durch Ausmultiplizieren in (1) – den für die Hydrodynamik charakteristischen Operator $\partial/\partial t + \vec{v} \cdot \vec{\nabla}$ (die Transportableitung) wieder, ebenso wie in (3), wenn man dort zu ϵ/ρ , der Energiedichte pro Masse, übergeht. Diese Transportableitung beschreibt, daß die zeitliche Änderung einer Größe an einem bestimmten Ort, nicht nur durch die lokale zeitliche Änderung, sondern auch durch den Transport dieser Größe von und zu diesem Ort erfolgen kann.

Offensichtlich haben die Gleichungen (1)-(3) die Form lokaler Erhaltungssätze

$$\begin{aligned}\dot{\rho} + \vec{\nabla} \cdot \vec{g} &= 0 \\ \dot{g}_i + \nabla_j \sigma_{ij} &= 0 \\ \dot{\epsilon} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j}^{(\epsilon)} &= 0\end{aligned}\tag{4}$$

mit dem Spannungstensor (d.h. der Impulsstromdichte) σ_{ij} und der Energiestromdichte $\mathbf{j}^{(\epsilon)}$. Integriert man nun über das ganze Volumen unter der Annahme, daß die Stromdichten im Unendlichen verschwinden, so erhält man sofort die zeitliche Konstanz der Masse, des Impulses und der Energie. Vielleicht haben Sie in (4) die Drehimpulserhaltung vermißt. Da es aber keine Drehimpulsdichte gibt, die integriert über den Raum den Gesamtdrehimpuls des Systems ergibt (vgl. Appendix 1), existiert auch keine lokale Differentialgleichung der Form (4) in diesem Fall. Drehimpulserhaltung ist lokal durch die Symmetrieforderung an den Spannungstensor $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$ erfüllt. Damit ist offensichtlich, daß alle Dichten von Erhaltungsgrößen eines Systems auch hydrodynamische Variable (Felder) sind. Dieser Satz, der im übrigen nicht umkehrbar ist, wird seine Gültigkeit auch bei komplexen Fluiden behalten. Physikalisch ist der Zusammenhang zwischen lokalen Erhaltungssätzen und hydrodynamischen Variablen leicht einzusehen: da die Erhaltungsgrößen nicht lokal oder instantan erzeugt oder vernichtet werden können, können sie nur transportiert werden, was natürlich wesentlich langsamer ist als der instantane, lokale Zerfall der vielen mikroskopischen Freiheitsgrade, der sich auf der Skala mittlerer Stoßzeiten (10^{-12} sec) und freier Weglängen (10^{-8} cm) ab-

spielt. Insbesondere wird der Ausgleich unterschiedlicher Werte einer Erhaltungsgröße an verschiedenen Orten um so langsamer erfolgen, je weiter diese Orte voneinander entfernt sind, und dies genau ist ja das Charakteristikum einer hydrodynamischen Dynamik. Die Hydrodynamik geht also davon aus, daß die vielen mikroskopischen Freiheitsgrade alle schon in ihr Gleichgewicht relaxiert sind (“lokales thermodynamisches Gleichgewicht”) und gilt deshalb nur für Frequenzen und Wellenzahlen unterhalb der reziproken Stoßzeiten und freien Weglängen.

Linearisiert man (1)-(3) und (A.1) so erhält man nach einer Fouriertransformation die Elementaranregungen (hydrodynamischen Moden) gewöhnlicher Fluide, nämlich die Schallpropagation, die Wärmediffusion und die Wirbeldiffusionen, deren Dispersionsrelationen $\omega(k)$ natürlich alle hydrodynamisch sind, d.h. sie erfüllen $\omega(k \rightarrow 0) \rightarrow 0$.

3. Komplexe Fluide

Komplexe Fluide sind nun solche deformierbaren Stoffe zu deren vollständiger dynamischer Beschreibung die 5 Gleichungen (1)-(3) nicht ausreichen, weil zusätzliche innere Freiheitsgrade existieren. Dies ist vielleicht keine absolut strenge Definition komplexer Fluide, ist aber für unsere Zwecke ausreichend und geeignet. Für zusätzliche hydrodynamische Variable und entsprechende zusätzliche Gleichungen gibt es zwei prinzipielle Gründe. Erstens gibt es Systeme mit zusätzlichen Erhaltungsgrößen, deren dynamische Gleichungen wieder die Form lokaler Erhaltungssätze haben. Als Beispiel sind hier die binären Flüssigkeitsmischungen zu nennen (z.B. Alkohol in Wasser, auch Wein genannt), bei denen 2 Massenerhaltungssätze gelten, da für jede Komponente die Masse getrennt erhalten ist. In der Regel benutzt man dabei je eine hydrodynamische Gleichung für die Gesamtmasendichte und für die Konzentration einer Komponente.⁷ Ferner gehören hierzu die leitfähigen Systeme, bei denen die elektrische Ladung erhal-

ten ist, so daß für die Ladungsdichte ρ_e der Erhaltungssatz⁸

$$\dot{\rho}_e + \vec{\nabla} \cdot \vec{j}^{(e)} = 0 \quad (5)$$

gilt, mit $\vec{j}^{(e)}$ der elektrischen Stromdichte. Analog gibt die Spinerhaltung in magnetischen Systemen Anlaß zu einer weiteren hydrodynamischen Gleichung.²

Ein zweiter Grund für zusätzliche hydrodynamische Variable liegt vor bei Systemen mit spontan gebrochenen (kontinuierlichen) Symmetrien, also z.B. wenn eine bestimmte Richtung im Raum ausgezeichnet ist (wie bei nematischen Flüssigkristallen), wenn eine langreichweitige Positionsordnung vorliegt (wie bei smektischen Flüssigkristallen oder bei gewöhnlichen Kristallen) oder wenn die Eichinvarianz des Systems gebrochen ist (wie bei Superflüssigkeiten). In den nächsten beiden Kapiteln werden wir ausführlich darauf zurückkommen.

Neben dem Auftreten zusätzlicher hydrodynamischer Variablen auf Grund von Erhaltungsgesetzen oder spontan gebrochenen Symmetrien ist man manchmal gezwungen, in komplexen Fluiden auch nicht-hydrodynamische Variable und deren dynamische Gleichungen zu berücksichtigen. Dies ist dann notwendig, wenn einer (oder einige wenige) der vielen mikroskopischen Relaxationsvorgänge “zufällig” so langsam wird, daß er auf einer typischen makroskopischen Zeitskala noch nicht in sein Gleichgewicht relaxiert ist. Eine strikte hydrodynamische Theorie, welche solche langsamen Relaxationsvorgänge ausschließt, wäre in ihrer Gültigkeit auf evtl. unvernünftig lange Zeitskalen beschränkt. Um dem abzuhelpen erweitert man den Satz der hydrodynamischen Gleichungen um die makroskopischen dynamischen Gleichungen solcher langsam relaxierender Vorgänge und erhält damit eine “makroskopische Dynamik”, die zwar nicht mehr streng hydrodynamisch ist, aber wieder einen vernünftigen Gültigkeitsbereich besitzt⁹. Natürlich ist dieses Verfahren nur anwendbar, wenn es nur wenige solcher langsamer nicht-hydrodynamischer Variable gibt und wenn man in der Lage ist, aus

für das gegebene System spezifischen physikalischen Überlegungen heraus diese Variablen zu identifizieren, da es keine allgemeinen Kriterien (wie für die wirklich hydrodynamischen Variablen) für deren Auftreten gibt. Als Beispiel wird im Kapitel 7 die makroskopische Dynamik viskoelastischer Flüssigkeiten (Polymere) behandelt, wo die inneren elastischen Spannungen nur langsam relaxieren.¹⁰

4. Nematische Flüssigkristalle

Im einfachsten Fall bestehen nematische Flüssigkristalle¹¹ aus stäbchenförmigen Molekülen, die sich unterhalb einer bestimmten Temperatur (“Klärpunkt”) spontan (im Mittel) ausrichten und eine Vorzugsrichtung $\hat{\mathbf{n}}$, Direktor genannt, definieren.

Fig. 1: Die ungeordnete (isotrope) Phase oberhalb ($T > T_c$) und die geordnete (nematische) Phase unterhalb des Klärpunkts ($T < T_c$).¹²

Neben stäbchenförmigen Molekülen können auch scheibchenförmige (“diskotische”) Moleküle durch Ausrichtung ihrer (gedachten) Scheibenachsen oder zusammengesetzte anisotrope Objekte (Säulen aus Scheiben zusammengesetzt, amphiphile Strukturen etc.) nematische Phasen bilden. Das Auftreten einer Vorzugsrichtung bricht die Rotationsinvarianz des Raumes, die in der isotropen Phase natürlich noch gegeben ist. Diese Symmetriebrechung heißt “spontan”, da sie nicht durch äussere Felder oder Kräfte hervorgerufen wird. Dies bedeutet aber auch, daß alle Vorzugsrichtungen energetisch gleichberechtigt sind. Dreht man also die Vorzugsrichtung homogen (z.B. alle

Moleküle gemeinsam), so kostet dies keine Energie und es entsteht auch keine Rückstellkraft. Damit haben wir aber die Drehungen des Direktors δn_i (mit $\hat{n}_i \cdot \delta n_i = 0$) als die zur gebrochenen Rotationssymmetrie gehörende hydrodynamische Variable identifiziert, denn diese Drehung erfolgt unendlich langsam ($\omega = 0$) im homogenen Fall ($k = 0$). Bei einer inhomogenen Drehung (an einer Stelle stärker gedreht als an einer anderen) wird das Direktorfeld verbogen, was sicherlich Energie kostet. Die Drehung zurück in den homogenen Zustand erfolgt aber um so langsamer, je geringer die Verbiegung ist, also hydrodynamisch mit $\omega(k \rightarrow 0) \rightarrow 0$.

Diese Erkenntnis kann verallgemeinert werden:² Zu jeder spontan gebrochenen kontinuierlichen Symmetrie gehört eine SymmetrievARIABLE, deren Dynamik hydrodynamisch ist (jedenfalls bei Abwesenheit langreichweitiger Kräfte); dabei beschreibt die SymmetrievARIABLE gerade solche Änderungen der symmetriebrechenden Größe, die der gebrochenen Symmetrie entsprechen (hier: Drehungen des Direktors).

Natürlich ist δn_i keine erhaltene Größe mehr und wird auch keinem Erhaltungssatz der Form (4) genügen. Die genaue Form und die Herleitung der kompletten Dynamik des Direktors wird in Appendix 2 diskutiert. Hier sollen nur einige interessante Aspekte dieser Dynamik besprochen werden. Die schon oben erwähnte Verbiegung des Direktorfeldes läßt sich in drei Grundstrukturen aufspalten (Fig.2), die durch 3 verschiedene orientierungselastische Konstanten (“Frank Konstanten”) gekennzeichnet sind¹¹; dabei ist berücksichtigt, daß $\hat{\mathbf{n}}$ und $-\hat{\mathbf{n}}$ ununterscheidbar sind.

Spreizung (splay, K_1)

Biegung (bend, K_3)

Verdrillung (twist, K_2)

Fig. 2: Die drei Grundverbiegungen eines Direktorfeldes¹²

Von besonderem Interesse ist auch die Dynamik des Direktors in einer Strömung.

Der entsprechende Teil der dynamischen Gleichung lautet (vgl. (A2.1) und (A2.5))

$$\dot{n}_i + v_j \nabla_j n_i = \frac{1}{2} (\delta_{ik} - n_i n_k) n_j [\nabla_j v_k - \nabla_k v_j + \lambda (\nabla_k v_j + \nabla_j v_k)] \quad (6)$$

Neben der Transportableitung auf der linken Seite von (6) erkennt man rechts den transversalen Kroneckertensor $\delta_{ij} - n_i n_j$, der dafür sorgt, daß nur Drehungen (\dot{n}_i mit $\dot{n}_i n_i = 0$) in (6) enthalten sind (dabei kann $\hat{\mathbf{n}}^2$ oBdA auf eins normiert werden). In der eckigen Klammer wird die Ankopplung an eine Rotations- (antisymmetrischer Geschwindigkeitsgradient) und eine Elongationsströmung (symmetrischer Geschwindigkeitsgradient) beschrieben. Erstere erfolgt ohne phänomenologischen Parameter, da \dot{n}_i gerade Drehungen beschreibt, während die zweite durch λ , den “Strömungsorientierungsparameter” charakterisiert ist, der vom Material (und evtl. von der Temperatur, dem Druck etc.) abhängt. Das Verhalten des Direktors in den einzelnen Strömungstypen ist in Fig. 3 skizziert.

Fig. 3: Drehungen des Direktors a) in einer Rotationsströmung, b) in einer einfachen Elongationsströmung und c) auf Grund der Transportableitung. Gezeigt

sind immer die Orientierungen zu 2 verschiedenen Zeiten (ausgezogene Linien: Strömungsfeld, gestrichelte Linien: Einige verschiedene Direktororientierungen)

Experimentell einfach sind Scherströmungen (z.B. $\mathbf{v} = \alpha z \hat{\mathbf{e}}$), die man als Überlagerung einer Rotations- und einer Elongationsströmung auffassen kann. In beiden Strömungstypen wird der Direktor gedreht, jedoch in unterschiedlicher Weise. Es gibt nun (für $|\lambda| > 1$) gerade eine Orientierung des Direktors relativ zur Scherströmung ($\hat{\mathbf{n}} = \mathbf{e}_x \cos \theta_0 + \mathbf{e}_y \sin \theta_0$) so, daß sich hierfür die Wirkungen der Strömungen aufheben und der Direktor stationär bleibt ($\theta = \theta_0$). Ist also anfänglich der Direktor z.B. parallel zu \mathbf{v} ($\theta = 0$), so wird er solange gedreht, bis dieser Winkel θ_0 erreicht wird (Fig. 4).

Fig. 4: Ausrichtung eines ursprünglich planaren Direktors in einer Scherströmung

Eine einfache Rechnung (Umschreiben von Glg.(6) als Differentialgleichung für $\theta(t)$) liefert¹¹ den stationären Winkel θ_0 als Funktion von λ , $\cos 2\theta_0 = \lambda^{-1}$, wobei das Fehlen einer Abhängigkeit von der Scherrate α durch die bezüglich der Geschwindigkeitsgradienten lineare Struktur von (6) bedingt ist. Physikalisch zeigt sich diese Scherungsorientierung des Direktors in einer ausgeprägten Scherungsdoppelbrechung.

Neben der Orientierung des Direktors durch eine Scherströmung existiert auch der umgekehrte Effekt: Eine Verbiegung des Direktors erzeugt Spannungen in der Flüssigkeit, wodurch eine Strömung angeregt werden kann. Dieser Effekt (“back-flow” Effekt) ist allerdings experimentell weniger leicht zugänglich und wird auch in theore-

tischen Berechnungen oft vernachlässigt. Weitere interessante elektro-optische Effekte in nematischen Flüssigkristallen werden im Abschnitt 6a) beschrieben, die kompletten hydrodynamischen Gleichungen für geladene Nematene werden im Appendix 2 abgeleitet.

Die bisherige Beschreibung (und auch die in App. 2) ging von einer perfekt geordneten homogenen Struktur im Gleichgewicht aus. Es kommt aber vor, daß sich eine (metastabile) Struktur mit einzelnen Defekten bildet.¹³ An solchen Defektstellen ist die Orientierung des Direktors nicht definiert, bzw. die Ordnung bricht lokal zusammen (vgl. auch Vortrag 5.2.7).

Fig. 5: Ein Disklinationsdefekt¹⁴

Solange solche Defekte nur einzeln vorkommen, wird ihre Dynamik durch dieselben Gleichungen beschrieben wie im defektfreien Fall. Die Lösung dieser Gleichungen kann aber beträchtlich komplizierter werden. Falls sehr viele Defekte vorliegen, kann man zur dynamischen Beschreibung eine Defektdichte bzw. den Ordnungsparameter als zusätzliche Variable einführen. Bei einer geordneten Struktur von Defekten (“Defektgitter”) bietet sich diese Struktur (die evtl. spontan gebrochene Symmetrien zeigt) als neue Beschreibungsebene an (z.B. in den “Blauen Phasen”¹⁵).

5. Smektische Flüssigkristalle

Eine andere Art der gebrochenen Symmetrie tritt in smektischen Flüssigkristallen auf. Hier ordnen sich Moleküle in einer Schichtstruktur an (Fig. 6), so daß sich eine eindimensionale Positionsordnung ergibt.¹⁶ Innerhalb einer Schicht ist der smektische Flüssigkristall flüssig.¹⁷ Es gibt sehr viele verschiedene Modifikationen smektischer Flüssigkristalle, je nachdem ob in den Schichten noch zusätzlich Orientierungsordnung herrscht (smektisch C, B_{hex} , I, F, L etc.), ob die einzelnen Schichten noch polare Eigenschaften haben (smektisch A_1 , A_2 , A_d , C_1 etc.) oder ob sie chiral (d.h. ohne Inversionszentrum) sind (z.B. A^* , C^* etc.). Im einfachsten Fall, smektisch A, sind die Schichten isotrop, in smektisch C wird durch die Neigung (“tilt”) der Moleküle eine Vorzugsrichtung ausgezeichnet. Falls nur wenige Schichten vorliegen (dünner Film) sind sie ein gutes Modellsystem für fluide Membranen (vgl. Vortrag 4.9).

Fig. 6: Smektisch A Flüssigkristall: eindimensionale Positionsordnung mit dem “Gittervektor” \mathbf{a} entlang der Schichtnormalen; der Schichtabstand ist ca. 30 Å. Smektisch C Flüssigkristall: zusätzliche Neigung des Direktors relativ zur Schichtnormale.

Die ebene Schichtstruktur bricht spontan die Translationssymmetrie entlang der Schichtnormalen. Die SymmetrievARIABLE, also die zusätzliche hydrodynamische Variable auf Grund der spontanen Symmetriebrechung, ist eine Verschiebung entlang der Schichtnormalen. Diese gibt Anlaß zu einer schallartigen hydrodynamischen Anregung ($\omega \propto k$), dem sogenannten zweiten Schall, der elastische Schichtverbiegungen beinhaltet.

tet. Dem entsprechen in dreidimensionalen Kristallen die transversalen Schälle. Der erste Schall (“longitudinaler Schall”), der durch Dichteänderungen hervorgerufen wird, existiert natürlich in jedem deformierbaren System.

6. Displays

Durch den zunehmenden Einsatz elektronischer Steuerungs- und Datenverarbeitungsanlagen in allen Bereichen unseres Lebens wird die Schnittstelle zwischen Mensch und Maschine immer wichtiger. Dabei geschieht die Kommunikation von der Maschine zum Benutzer inzwischen meist optisch, d.h. mittels Anzeigen (displays). Es gibt dabei im wesentlichen zwei Gruppen von Anzeigen,¹⁸ solche für geringen Informationstransfer (Armbanduhr, Armaturenbretter in Autos, Steuerungstafeln von Maschinen) und solche für hohen und schnellen Informationstransfer (Fernsehen, Video, Computer Graphik). Auf dem ersten Feld gibt es seit 20 Jahren Flüssigkristallanzeigen (“twisted nematics”, TN), die inzwischen auch den Markt beherrschen, auf dem zweiten Feld dominieren noch die Kathodenstrahlröhren, aber neuartige flüssigkristalline Anzeigen (“surface stabilized ferroelectric liquid crystals”, SSFLC) sind dabei auch diesen Markt zu erobern.

Bevor wir den Mechanismus dieser Anzeigen verstehen können, müssen wir noch einige optische Eigenschaften (vor allem nematischer) Flüssigkristalle kennenlernen. Der erste für uns wichtige Punkt ist, daß nematische Flüssigkristalle Licht stark streuen, weshalb sie auch trübe sind. Dabei sind die Orientierungsfluktuationen des Direktors entscheidend. Der differentielle Wirkungsquerschnitt für Lichtstreuung, Q , ist proportional zu den Fluktuationen des dielektrischen Tensors, genauer

$$Q \sim \langle |\delta\epsilon_{es}(\vec{q})|^2 \rangle \quad (7)$$

wo die Indizes e und s die Polarisationsrichtung des einfallenden und des gestreuten Lichts bezeichnen, die Fouriertransformierte des dielektrischen Tensors auftritt, \vec{q} die

Differenz zwischen einfallendem und gestreutem Wellenvektor darstellt und $\langle \rangle$ den thermischen Mittelwert bezeichnet. Fluktuationen des dielektrischen Tensors

$$\delta\epsilon_{ij} = \delta_{ij} \frac{\partial\epsilon_{\perp}}{\partial\rho} \delta\rho + \epsilon_a (n_i \delta n_j + n_j \delta n_i) \quad (8)$$

ergeben sich aus isotropen Dichteschwankungen und anisotropen Orientierungsschwankungen, wobei in nematischen Flüssigkeitskristallen erstere völlig vernachlässigbar sind gegenüber letzteren. Dies ergibt sich sofort aus einem Dimensionsargument von P.G. deGennes¹¹: Der differentielle Wirkungsquerschnitt ist umgekehrt proportional zur Energie der Fluktuationen, welcher für Dichteschwankungen durch die Kompressibilität gekennzeichnet ist, während für Orientierungsschwankungen des Direktors nur inhomogene Fluktuationen Energie kosten, so daß hier der differentielle Wirkungsquerschnitt wie $\sim q^{-2}$ geht. Da der Quotient der Wirkungsquerschnitte für Dichte- und Orientierungsschwankungen aber dimensionslos ist, muß er proportional zu $(qa)^{-2}$ sein, wobei a als einzig mögliche Länge des Systems die Moleküllänge ist. Die Lichtstreuung in nematischen Flüssigkristallen ist also um den Faktor 10^6 stärker als in gewöhnlichen Fluiden, wo keine Orientierungsfluktuationen auftreten können.

Ein weiterer wichtiger Punkt kann sofort aus (7) und (8) abgelesen werden. Orientierungsschwankungen ändern die Polarisationsrichtung des Lichtes um $\pi/2$, da n_i und δn_i gerade senkrecht aufeinander stehen. Dieser depolarisierende Effekt ist neben der Stärke der Fluktuationen der zweite für die Anwendungen wesentliche optische Aspekt der nematischen Flüssigkristalle.

a) TN (STN) DISPLAYS:

Werden nematische Flüssigkristalle chiralisiert, so daß sie kein Inversionszentrum mehr besitzen, so ordnet sich der Direktor helisch anstatt homogen an,¹⁹ d.h. die Orientierung des Direktors ändert sich von Ebene zu Ebene entlang der helischen Achse

(vgl. Fig. 7a). Da die helische Ganghöhe (1μ bis ∞) aber sehr groß ist verglichen mit der Moleküllänge kann man lokal noch die nematische Beschreibung verwenden. Ist die Ganghöhe ($> 20\mu$) auch noch viel größer als die Wellenlänge des Lichts, so wirkt eine solche helische Struktur als Wellenleiter, bei dem die Polarisierung der Lichtwelle der Direktororientierung folgt¹². In einer Zelle, bei der der Direktor oben und unten gerade um $\pi/2$ gedreht ist (TN Zelle), wird durchscheinendes linear polarisiertes Licht also um $\pi/2$ gedreht. Fügt man unten und oben um 90° gedrehte Polarisatoren (gekreuzte Nicols) hinzu, so wird das Licht ungestört hindurchgehen. Entfernt man aber den gewisteten Flüssigkristall, bzw. macht seine Drehwirkung unwirksam, so wird das Licht vollständig blockiert (Fig. 7). Dies erreicht man mit Hilfe eines äußeren elektrischen Feldes entlang der Helixachse, welches ab einer bestimmten Grenzspannung den Direktor zu einer Umorientierung zwingt.²⁰ Dabei stellt sich der Direktor parallel zum Feld, falls die dielektrische Anisotropie positiv ist (vgl. (A2.3)), weshalb für TN Zellen nur solche Materialien gewählt werden.

Fig. 7: TN Zelle im “hell” Zustand (a) mit helischer Struktur des Direktors und im “dunkel” Zustand (b), wo das externe Feld die Direktorstruktur bestimmt.²¹

Geht das Schalten vom hellen zum dunklen Zustand mit Hilfe des externen Feldes noch relativ rasch, so ist der umgekehrte Vorgang, die Relaxation des Direktors in seine ungestörte helische Struktur nach Abschalten des Feldes, ziemlich langsam. Dieser Rückstellvorgang wird nur getrieben durch die Franksche Gradientenenergie, (die im chiralen Fall ihr Minimum bei der helischen Struktur hat und) die nicht von außen verstärkt werden kann (vgl. (A2.11)). Betrachtet man ferner schräg einfallendes Licht, so erkennt man, daß der Kontrast (der Unterschied zwischen “hell” und “dunkel”) für große Betrachtungswinkel sehr schlecht wird. Dieser Nachteil wird heute durch die “super twisted nematics” (STN) Zellen abgemildert, bei denen der Verdrillungswinkel des Direktors (oft wesentlich) größer als $\pi/2$ ist. Der Vorteil der TN und STN Zellen ist aber, daß sie billig, einfach, klein, flach, und thermisch, mechanisch und chemisch robust sind.

b) SSFLC DISPLAYS:

Eine etwas andere Strategie wird bei den ferrolektrischen Anzeigen verfolgt.²² Es handelt sich hierbei um (chirale) smektisch C* Flüssigkristalle, die innerhalb der smektischen Schichten den Direktor um einen festen Winkel ψ gegenüber der Helixachse gedreht (“getiltet”) haben. Da sie chiral sind, bildet der Direktor eine konisch helische

Fig. 8: Smektisch C*: Der konisch helische Direktor schließt mit der Helixachse (= Schichtnormalen) einen festen Winkel ψ ein [im Vergleich zu Fig. 6 sind die smektischen Schichten um $\pi/2$ gedreht]. Die Lage des Direktors auf dem Konus ändert sich von Schicht zu Schicht.

Struktur aus (Fig. 8). Diese (unerwünschte) Helix wird nun in dünnen Zellen (wenige μ dick) in der Bücherregalanordnung (“bookshelf geometry”) unterdrückt, indem man die Oberflächen so behandelt, daß der Direktor sich parallel zur Oberfläche einstellen will. Von den möglichen Orientierungen des Direktors auf dem Konus bleiben also gerade zwei übrig, die parallel zur Oberfläche sind (Fig. 9).

Fig. 9: Die zwei Möglichkeiten des Direktors in der Bücherregalanordnung parallel zur Oberfläche und gleichzeitig auf dem Konus zu liegen [smektische Schichten wie in Fig. 8].

Diese zwei Zustände, die beide stabil sind, werden jetzt so präpariert, daß einer der “hell” und der andere der “dunkel” Zustand ist. Dazu bringt man oben und unten um $\pi/2$ gedrehte Polarisatoren an. Für den Streuquerschnitt bedeutet dies, daß z.B. die einfallende Welle in x- und die gestreute Welle in y-Richtung polarisiert ist (das Licht propagiert in z-Richtung, vgl. Fig. 9). Liegt nun der Direktor in der x/y Ebene um den Winkel ϕ gedreht relativ zur x-Achse, so liefert Gleichung (7) den Wirkungsquerschnitt für Lichtstreuung $Q \sim \cos^2(2\phi)$. Dies bedeutet, daß für $\phi = 0$ starke Streuung (Licht geht nicht durch) und für $\phi = \pi/4$ keine Streuung herrscht (Licht geht durch). Nimmt man ein Material, dessen Drehwinkel (“Tiltwinkel” ψ) gerade $\pi/8$ ist und damit der gesamte Konusöffnungswinkel $\pi/4$, so kann man mit den beiden stabilen Zuständen

gerade die hell/dunkel Bedingung realisieren.²³

Der entscheidende Trick ist nun aber, daß es in den smektisch C* Flüssigkristallen möglich ist, einfach und schnell zwischen diesen Zuständen hin- und herzuschalten. Es existiert nämlich eine spontane Polarisierung in jeder Schichtebene. In der ungestörten smektisch C* Struktur spiralt diese Polarisierung ebenfalls helisch wie der Direktor (allerdings nicht konisch, da sie aus Symmetriegründen immer in der Schichtebene liegt). Bei den beiden durch die Ränder erzwungenen Zuständen steht einmal die Polarisierung entlang der z-Achse und einmal entgegengesetzt (Fig. 10), so daß es möglich ist, durch ein äusseres elektrisches Feld diese Polarisierung (und damit die beiden Zustände) zu schalten.²³

Fig. 10: Die beiden Schaltzustände einer SSFLC Zelle mit den unterschiedlichen Polarisationsrichtungen \mathbf{P} .

Es soll nicht verschwiegen werden, daß die tatsächliche Struktur in einer SSFLC Zelle wesentlich komplizierter ist und ihre Dynamik auch heute noch ziemlich unverständlich ist. Trotzdem gibt die obige vereinfachte Darstellung die wesentlichen Cha-

rakteristika richtig wieder. Offensichtlich ist eine solche Zelle schnell und mit großer Wiederholfrequenz schaltbar. Durch die Bistabilität ist auch ein periodisches Auffrischen überflüssig. Von Nachteil ist, daß nur zwei Zustände existieren, so daß Graustufen (und daraus Farbstufen mittels Farbfilter) durch räumliches oder zeitliches Mitteln (“dithern”) hergestellt werden müssen. Einen Teil dieser Nachteile werden eventuell die gerade in der Entwicklung befindlichen “antiferroelektrischen” Anzeigen²⁴ vermeiden können. Marktreife haben im Moment aber erst die SSFLC Anzeigen, die für Laptops etc. und flache Fernsehschirme eingesetzt werden. Nicht unerwähnt bleiben soll die Tatsache, daß, obwohl fast alle wissenschaftlichen Ideen und Erkenntnisse in Europa und Nordamerika ihren Ursprung haben, die gesamte Fertigung und Entwicklung dieser modernen Flüssigkristallanzeigen in Japan stattfindet, nicht zuletzt deshalb, weil anderswo das Risiko und die Schwierigkeiten zur Entwicklung der benötigten Mikrometerschichttechnologie gescheut wurden. Die fertigungstechnischen Probleme (1.5μ Schichten bei Toleranzen von 3% auf Flächen von mehreren 100cm^2) scheinen inzwischen in Japan gelöst zu sein, was der dortigen Industrie einen fast uneinholbaren Vorsprung auf diesem Gebiet gibt.

Auf weitere interessante und wichtige technologische Probleme wie Addressierung, passive oder aktive Ansprache (mittels Dünnschichttransistoren) konnte hier nicht eingegangen werden. Auch sind Anzeigen nicht die einzigen Einsatzmöglichkeiten dieser Flüssigkristalle. Ihr Nutzen als schnelle optische Schalter ist offensichtlich. Ihr Einsatz als optische Speicher mit unglaublicher Speicherdichte wird nach wie vor untersucht mit dem Endziel, rein optische Datenverarbeitungssysteme zu entwickeln. Erwähnen möchte ich auch noch die ebenfalls erst in der Entwicklung befindlichen “polymer dispersed” Anzeigen,²⁵ die potentiell einige Nachteile der SSFLC Zellen vermeiden könnten (Farbfilter, Polarisatoren, Oberflächenbehandlung zur Orientierung,

Hintergrundbeleuchtung). Dies leitet zwanglos zum letzten Thema dieser Vorlesung über.

7. Polymere

Wir haben bisher vor allem die Hydrodynamik gewöhnlicher Flüssigkeiten und solcher mit gebrochenen Symmetrien (und deren Anwendungen) betrachtet. Charakteristisch war dabei, daß nur echte hydrodynamische Variable (Erhaltungsgrößen und SymmetrievARIABLE) eine Rolle spielten. Wir kommen nun zu einem Beispiel für ein Fluid, dessen makroskopische Beschreibung nur sinnvoll ist, wenn auch eine nicht-hydrodynamische Variable, d.h. ein langsam relaxierendes Feld mitbetrachtet wird. Wie typische Scherexperimente²⁶ zeigen, verhalten sich Polymere bei hohen Frequenzen (auf kurzen Zeitskalen) wie Festkörper, d.h. sie zeigen elastische Scherspannungen, während sie sich im Limes langer Zeiten (kleiner Frequenzen) flüssig verhalten, also allenfalls viskose Scherspannungen zulassen. Festkörper werden aber beschrieben mittels eines Verschiebungsfeldes \mathbf{u} , entsprechend der spontan gebrochenen Translationssymmetrie. Mit der üblichen Begründung für SymmetrievARIABLE ist offensichtlich, daß nur Gradienten von \mathbf{u} zur (elastischen) Energie beitragen können. Man geht deshalb in der Regel sofort zum Dehnungsfeld $\eta_{ij} = (\frac{1}{2})(\nabla_i u_j + \nabla_j u_i)$ über (ϵ_{ij} ist zwar üblicher als η_{ij} , aber ersteres hatten wir schon), wobei wir auch gleich noch Drehungen und Nicht-linearitäten weggelassen haben. Dieses Dehnungsfeld ist über das Hooksche Gesetz mit elastischen Spannungen verknüpft, welche ihrerseits wieder zum Spannungstensor beitragen. Auf diese Weise entstehen die transversalen Schälle als charakteristische hydrodynamische Moden.

In Polymeren werden wir zur Beschreibung der kurzzeitigen Spannungen ebenfalls eine “Dehnungsvariable” benutzen, obwohl diese dort eine ganz andere physikalische Bedeutung hat. Schert man Polymere rasch, so wird der ursprüngliche Zustand

verschoben, da die langen miteinander verhakten Ketten der äusseren Kraft nicht folgen können. Nach einer gewissen Zeit jedoch kehrt das Polymer wieder in einen Gleichgewichtszustand zurück, d.h. die “Dehnung” relaxiert, aber nicht dadurch daß wie im Festkörper die festen (alten) Gleichgewichtslagen wieder eingenommen werden (solche existieren im Polymer ja gar nicht), sondern dadurch, daß der Referenzzustand sich verändert hat (vgl. Fig. 11).

Fig. 11: Ein Polymer (wie es sich der Theoretiker vorstellt) a) vor der Scherung, b) kurz nach der Scherung und c) lange nach der Scherung im Gleichgewicht.

Deswegen beschreibt η_{ij} im Polymer auch keine wirkliche Dehnung und muß weder als Gradient einer Verschiebung darstellbar sein, noch symmetrisch sein (obwohl die antisymmetrischen Teile von η_{ij} in isotropen Polymeren keine Rolle spielen und weggelassen werden können). Da η_{ij} weder eine Erhaltungsgröße noch eine SymmetrievARIABLE ist, lauten die makroskopischen dynamischen Gleichungen wie folgt²⁷

$$\dot{\eta}_{ij} - \frac{1}{2}(\nabla_j v_i + \nabla_i v_j) = -\xi_{ijkl}\Psi_{kl} \quad (9)$$

$$\Psi_{ij} = c_{ijkl}\eta_{kl} \quad (10)$$

wobei in (9) ξ_{ijkl} die Relaxationskonstanten von η_{ij} sind und (10) das Hooksche Gesetz darstellt (das in Polymeren keinen allzu großen Gültigkeitsbereich hat²⁶). Die Navier-

Stokes Gleichung ist auch zu ergänzen um die elastischen Spannungen, d.h. auf der rechten Seite von (2) ist $\nabla_j \Psi_{ij}$ einzufügen.

Es ist nun ganz lehrreich sich den transversalen Schall in diesem Modell anzuschauen. Für eine Ausbreitung in z-Richtung und eine Auslenkung (d.h. Geschwindigkeit) in x-Richtung ergibt sich ein Gleichungssystem der Struktur

$$\begin{aligned}\rho \dot{v}_x &= c_3 \nabla_z \eta_{xz} + \nu_3 \nabla_z^2 v_x \\ \dot{\eta}_{xz} &= \nabla_z v_x - c_3 \xi_3 \eta_{xz}\end{aligned}\tag{11}$$

Nach raum-zeitlicher Fouriertransformation hat die Dispersionsrelation (die Lösungsbedingung des homogenen Gleichungssystems (11)) die genäherte Form

$$\omega = \begin{cases} \pm \left(\frac{c_3}{\rho}\right)^{\frac{1}{2}} k_z + i \frac{\nu_3}{2\rho} k_z^2 & \text{falls } \omega\tau \gg 1 \\ i \frac{1}{\rho} (\tau c_3 + \nu_3) k_z^2 & \text{falls } \omega\tau \ll 1 \end{cases}\tag{12}$$

mit c_3 dem elastischen Schermodul, ξ_3 dem Scherrelaxationskoeffizient und ν_3 der Scherviskosität. Die charakteristische Zeit $\tau = (c_3 \xi_3)^{-1}$ trennt das hochfrequente (festkörperartige) elastische Verhalten (Schallwelle) von der niederfrequenten Wirbel-diffusion der Flüssigkeiten. Wäre τ eine mikroskopische Zeit, hätten wir das Verhalten einer einfachen Flüssigkeit, und wäre $\tau = \infty$ wäre es ein Festkörper. Da τ^{-1} aber im Bereich makroskopischer Frequenzen liegt, muß η_{ij} als Variable mitbetrachtet werden.

Die oben skizzierte makroskopische Dynamik gehört in die Klasse der verallgemeinerten Maxwell-Modelle. Es beschreibt die lineare Viskoelastizität der Polymere und hat den Vorteil, im Rahmen einer allgemeinen hydrodynamischen Theorie vernünftig herleitbar zu sein (man muß nicht ad hoc physikalische Parameter komplex werden lassen!²⁸) und es lässt sich für kompliziertere Polymere leicht verallgemeinern, da offensichtlich ist, wie weitere hydrodynamische Variable ankoppeln können.²⁹ Charakteristisch ist das Auftreten eines Gedächtniseffekts. Integriert man die zweite Gleichung in (11) so erhält man

$$\eta_{xz}(t) = \int_{-\infty}^t dt' \exp\left(\frac{1}{\tau}[t' - t]\right) \nabla_z v_x(t')\tag{13}$$

was bedeutet, daß die “Dehnung” nicht nur von der Scherströmung zur gleichen Zeit, sondern zu allen vergangenen Zeiten abhängt mit einem in die Vergangenheit exponentiell abfallenden Gewichtungsfaktor. Dabei setzt τ die Zeitskala für dieses zeitliche Abklingen des Gedächtnisses.

Allerdings gibt es auch eine Reihe von Effekten in Polymeren, die nicht durch lineare viskoelastische Gleichungen erfaßt werden. Zum ersten erfolgt die Relaxation oft nicht-exponentiell, was einer gewissen Vielzahl oder Bandbreite von Abklingzeiten (im Gegensatz zu einer einzigen) entspricht. Dies könnte man in der obigen Beschreibung durch Einführen von Gedächtnisfunktionen beheben, um den Preis, statt einiger weniger phänomenologischer Parameter dann ganze phänomenologische Funktionen zu haben. Ferner zeigen viele Polymere (und andere komplexe Fluide) Scherverdünnung oder Scherverdickung, also eine Abnahme oder Zunahme der effektiven Viskosität in Abhängigkeit von der Scherrate Γ . Dies läßt sich beschreiben durch ad hoc Gesetze der Form $\nu_3 = \nu_3(\Gamma)$.

Fig. 12: Ein rotierender Stab in a) einer einfachen Flüssigkeit, b) einem Polymer, das am Stab hinaufklettert (Weissenberg-Effekt). Das Experiment kann man selbst leicht durchführen mit Hilfe eines Knethakens (Rührgerät) und Teig (z.B. schwäbischer Spätzleteig).

Eine weitere Klasse von Effekten, die nicht durch einfache viskoelastische Gleichungen zu beschreiben sind, sind die Normalspannungseffekte. Als Beispiel hierzu will ich – zum Schluß – den Weissenbergeffekt diskutieren. Wir wollen dazu untersuchen, wie die Gleichung beschaffen sein muß, die diesen Effekt beschreibt. Schreiben wir (2) in der Form $\rho(\dot{v}_i + v_j \nabla_j v_i) + \nabla_i p + \nabla_j \sigma'_{ij} = 0$ mit unbekanntem σ'_{ij} (wo wir den Strich gleich wieder weglassen werden) in Zylinderkoordinaten für ein vorgegebenes Scherströmungsfeld $\mathbf{v} = \hat{\mathbf{e}}_\phi v_\phi(r)$, so erhält man

$$\begin{aligned} -\rho \frac{v_\phi^2}{r} + \frac{dp}{dr} - \frac{\sigma_{\phi\phi}}{r} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr}(r\sigma_{rr}) &= 0 \\ \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr}(r^2 \sigma_{r\phi}) &= 0 \end{aligned} \tag{14}$$

Gesucht sind nun Lösungen, bei denen der Normaldruck, $p + \sigma_{zz}$, nicht verschwindet, denn ein solcher Normaldruck würde das Hochsteigen des Polymers erklären. Nach einigen kurzen Manipulationen²⁸ findet man

$$\frac{d}{d(\ln r)}(\sigma_{zz} + p) = \sigma_{\phi\phi} - \sigma_{rr} + \rho v_\phi^2 \tag{15}$$

was bedeutet, daß der Normaldruck mit abnehmendem Radius zunimmt (wie für den Effekt notwendig), wenn die rechte Seite von (15) negativ ist. Für gewöhnliche Fluide und auch für die oben besprochenen Gleichungen für Polymere ist die sogenannte erste Normalspannung $\sigma_{\phi\phi} - \sigma_{rr}$ Null, d.h. sie können den Weissenberg-Effekt (und andere Normalspannungseffekte) nicht beschreiben. Dazu müssen weitere Terme in die Navier-Stokes Gleichung eingefügt werden. Es gibt zwar eine Reihe von ad hoc Modellen³⁰ hierzu, eine saubere physikalische Herleitung solcher Zusatzterme fehlt aber noch.

Appendix 1: Ergänzungen zur Hydrodynamik

Im Kapitel 2 haben wir einige generelle Punkte nur kurz angedeutet, die wir hier etwas ausführlicher diskutieren wollen. Das erste Problem war der Drehimpulserhaltungssatz $d\mathbf{L}/dt = 0$. Für eine lokale Drehimpulsdichte müßte dabei $\mathbf{L} = \int \mathbf{l}^{loc} dV$ gelten, wobei \mathbf{l}^{loc} eine intensive (von der Masse unabhängige) Variable sein müßte. Dies ist aber nicht der Fall. Der Drehimpuls eines starr rotierenden Körpers ist $\mathbf{L} = \Theta\vec{\omega}$. Dabei ist das Trägheitsmoment von der Dimension [Masse Länge²], was für \mathbf{L} eine Skalierung mit dem Volumen von $V^{5/3}$ bzw. für \mathbf{l}^{loc} eine von $V^{2/3}$ ergibt, womit \mathbf{l}^{loc} keine intensive Größe sein kann. Diese nicht additive Eigenschaft des Drehimpulses endlicher Volumina wird auch in Fig. 13 deutlich, wo $\mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2 + \mathbf{L}_3 \neq \mathbf{L}$ gilt.

Fig. 13: Nicht-Additivität endlicher Bahndrehimpulse bzw. Wirbel (alle Drehimpulse stehen senkrecht auf der Zeichenebene): Bei der Addition heben sich innere Beiträge auf.

Für Drehimpulse (d.h. hier immer Bahndrehimpulse) gilt kein lokaler Drehimpulserhaltungssatz³¹. Ganz ohne Einfluß auf die Hydrodynamik ist der (globale) Drehimpulserhaltungssatz aber doch nicht. Betrachtet man die Drehimpulsdichte einzelner Massenpunkte (am Ort \mathbf{r} mit der Impulsdichte \mathbf{g}), $\mathbf{r} \times \mathbf{g}$, so liefert der lokale Impulser-

haltungssatz

$$(\vec{r} \times \dot{\vec{g}})_i = \frac{\partial}{\partial t} (\vec{r} \times \vec{g})_i = \nabla_l (-\epsilon_{ijk} r_j \sigma_{kl}) + \epsilon_{ijk} \sigma_{kj} \quad (\text{A1.1})$$

wobei $\nabla_j r_i = \delta_{ij}$ und $\partial \vec{r} / \partial t = \vec{v}$ benutzt wurde. Da ohne äussere Drehmomente der Drehimpuls dieser Massenpunkte erhalten bleiben muss, lautet die Forderung an den Spannungstensor $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$, d.h. die Symmetrie des Spannungstensors garantiert die Drehimpulserhaltung.

Der zweite Punkt, den wir im Hauptteil nicht behandelt hatten, betrifft die Zustandsgleichungen einfacher Flüssigkeiten. Hierbei werden die Größen Druck und Temperatur durch die Variablen Dichte und Energiedichte verknüpft. Aus der Gibbs Relation $d\epsilon = Td\sigma + \mu d\rho$ sieht man, daß es theoretisch günstiger ist, die Entropiedichte σ und die Dichte ρ als Variable, sowie die Temperatur T und das chemische Potential μ als abhängige thermodynamisch konjugierte Größen zu nehmen. Man erhält dann

$$\begin{aligned} \delta T &= \frac{T_0}{C_V} \delta \sigma + \frac{1}{\rho \alpha_s} \delta \rho \\ \delta \mu &= \frac{1}{\kappa_s \rho^2} \delta \rho + \frac{1}{\rho \alpha_s} \delta \sigma \end{aligned} \quad (\text{A1.2})$$

wobei C_V die spezifische Wärme (bei konstanter Dichte oder Volumen), α_s die adiabatische Wärmeausdehnung und κ_s (fast) die adiabatische Kompressibilität ist. Den Druck erhält man aus (A1.2) mittels der Gibbs-Duhem Relation $dp = \rho d\mu + \sigma dT$ und die dynamische Gleichung für σ folgt aus (1)-(3) und der Gibbs Relation $\dot{\sigma} = (1/T)\dot{\epsilon} - (\mu/T)\dot{\rho}$ und lautet

$$\dot{\sigma} + \nabla_i (\sigma v_i) = \nabla_i \left(\frac{\kappa}{T} \nabla_i T \right) + R \quad (\text{A1.3})$$

wobei $\int R dV$ die Entropieproduktion ist (d.h. die pro Zeit dissipierte Energie dividiert durch T), die für dissipative Prozesse größer Null ist. In diesem Fall ist die Entropie keine Erhaltungsgröße und (A1.3) kein Erhaltungssatz. Gleichung (A1.3) ist natürlich nicht unabhängig von (1)-(3), sondern kann z.B. benutzt werden, um Glg.(3) zu ersetzen.

Appendix 2: Geladene nematische Flüssigkristalle

In diesem Anhang werden die vollständigen hydrodynamischen Gleichungen für geladene nematische Flüssigkristalle hergeleitet: zum einem als Beispiel für die Wirksamkeit von Symmetrie- und Thermodynamikargumenten, zum andern als Vorbereitung auf kommende Vorlesungen.

Wie schon im Hauptteil diskutiert benötigen wir für die vollständige hydrodynamische Beschreibung neben den Erhaltungssätzen gewöhnlicher Flüssigkeiten (4) und dem lokalen Erhaltungssatz für die Ladungsdichte (5) noch zwei Gleichungen, die die Drehungen des Direktors n_i beschreiben. Da der Direktor keine Erhaltungsgröße ist, kann diese Gleichung nur lauten

$$\dot{n}_i + Y_i = 0, \quad (\text{A2.1})$$

wobei Y_i bislang nur eine andere Schreibweise für $-\dot{n}_i$ ist. Die Spezifizierung von Y_i beinhaltet die Dynamik des Systems. Zuvor soll aber noch die Statik behandelt werden. Es ist ja gerade ein großer Vorteil dieser Methode, daß Statik und Dynamik in zwei verschiedenen Schritten behandelt werden können.

a) STATIK:

In der Thermodynamik werden Zustandsänderungen mit Hilfe eines thermodynamischen Potentials beschrieben, das in unserer lokalen Version als Volumenintegral über eine entsprechende Dichte ausgedrückt wird.

$$F = \int f dV = \int dV \left\{ f_0(\delta\epsilon, \delta\rho) + \frac{1}{2} K_{ijkl} (\nabla_j n_i) (\nabla_l n_k) - \frac{1}{2} \epsilon_0 \epsilon_{ij} E_i E_j - e_{ijk} E_k \nabla_j n_i \right\} \quad (\text{A2.2})$$

Dabei ist $f_0(\delta\epsilon, \delta\rho)$ das thermodynamische Potential für gewöhnliche Flüssigkeiten entsprechend (A1.2). Der Term $\sim K_{ijkl}$ beschreibt die orientierungselastischen Verbiegungen des Direktors ("Franksche Gradientenenergie", Fig. 2); die dielektrische Energie

($\propto \epsilon_{ij} E_i E_j = (\epsilon_{\perp} [\delta_{ij} - n_i n_j] + \epsilon_{\parallel} n_i n_j) E_i E_j$) ist orientierungsabhängig entsprechend der uniachsialen Symmetrie der nematischen Phase und der letzte Term in (A2.2) beschreibt eine Wechselwirkung zwischen elektrischem Feld und Direktorverbiegungen (“flexo-elektrischer Effekt”¹). Der direktorabhängige Anteil der dielektrischen Energie,

$$2f_a = -\epsilon_0 \epsilon_a (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{E})^2 \quad (\text{A2.3})$$

hat einen orientierenden Einfluß auf den Direktor, da f_a minimiert wird durch $\hat{\mathbf{n}} \parallel \mathbf{E}$ bzw. $\hat{\mathbf{n}} \perp \mathbf{E}$, je nachdem ob die dielektrische Anisotropiekonstante $\epsilon_a \equiv \epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}$ positiv oder negativ ist. Der flexo-elektrische Effekt ist, obwohl linear im Feld, meist nur eine kleine Korrektur zur Frankschen und dielektrischen Energie.

b) DYNAMIK

Die Dynamik besteht darin, die Ströme der Erhaltungssätze (bzw. Y_i in Gleichung (A2.1)) durch die in der Statik definierten Größen auszudrücken. Dazu spalten wir zuerst additiv die Ströme in reversible (oben R) und irreversible (oben D) Teile auf, also³²

$$\begin{aligned} \sigma_{ij} &= \sigma_{ij}^R + \sigma_{ij}^D & Y_i &= Y_i^R + Y_i^D \\ \vec{j}^{(\epsilon)} &= \vec{j}^{(\epsilon)R} + \vec{j}^{(\epsilon)D} & \vec{j}^{(e)} &= \vec{j}^{(e)R} + \vec{j}^{(e)D}, \end{aligned} \quad (\text{A2.4})$$

wobei die reversiblen Teile zeitumkehrinvariant und nicht-dissipativ sind, wohingegen die irreversiblen Teile dissipativ sind und die Entropie des Systems erhöhen. Da Geschwindigkeiten und Impulse unter Zeitumkehr ihr Vorzeichen wechseln, findet man für Y_i^R die in Gleichung (6) angegebenen Beiträge,

$$Y_i^R = v_j \nabla_j n_i - \frac{1}{2} (\delta_{ik} - n_i n_k) n_j [\nabla_j v_k - \nabla_k v_j + \lambda (\nabla_k v_j + \nabla_j v_k)] \quad (\text{A2.5})$$

und für σ_{ij}^R – neben dem hydrostatischen Druck und dem Transportterm – die sogenannten “back-flow” Terme

$$\sigma_{ij}^R = p \delta_{ij} + \rho v_j v_i + \frac{1}{2} [(\lambda + 1) (\delta_{ik} - n_i n_k) n_j + (\lambda - 1) (\delta_{jk} - n_j n_k) n_i] h_k \quad (\text{A2.6})$$

sowie jeweils die Transportterme ($\vec{j}^{(\epsilon)R} = \epsilon\vec{v}$, $\vec{j}^{(\rho)R} = \rho\vec{v}$).

Die irreversiblen (dissipativen) Anteile lauten

$$\sigma_{ij}^D = -\nu_{ijkl}\nabla_l v_k \quad (\text{A2.7})$$

$$j_i^{(\epsilon)D} = -\kappa_{ij}\nabla_j T + \frac{1}{T}\pi_{ij}E_j \quad (\text{A2.8})$$

$$j_i^{(e)D} = \sigma_{ij}^{(L)}E_j + \pi_{ij}\nabla_j T + \zeta^E\nabla_j(n_i\frac{\delta F}{\delta n_j} + n_j\frac{\delta F}{\delta n_i}) \quad (\text{A2.9})$$

$$Y_i^D = \zeta\frac{\delta F}{\delta n_i} + \zeta^E(\delta_{ik} - n_in_k)n_j(\nabla_k E_j + \nabla_j E_k) \quad (\text{A2.10})$$

Sie beschreiben die Strömungsviskosität durch den uniachsialen Viskositätstensor ν_{ijkl} (A2.7), die anisotrope Wärmeleitung (κ_{ij}) und den anisotropen Peltier-Effekt³³ (π_{ij}) in (A2.8), die anisotrope elektrische Leitfähigkeit $\sigma_{ij}^{(L)} = \sigma_{\perp}^{(L)}\delta_{ij} + \sigma_a n_in_j$, den Seebeck-Effekt (π_{ij}) und eine dissipative Kreuzkopplung zwischen der elektrischen Stromdichte und Direktorverbiegungen (ζ^E) in (A2.9),³⁴ sowie die Rotationsviskosität für Direktordrehungen (ζ) und die Kreuzkopplung zwischen elektrischem Feld und Direktordrehungen (ζ^E) in (A2.10). Dabei ist $\delta F/\delta n_i$ die Variationsableitung des thermodynamischen Potentials nach n_i , welche üblicherweise “molekulares Feld” genannt wird. Für die Relaxation des “dunkel” Zustands in den “hell” Zustand der TN Zelle (Fig. 7) nach Abschalten des elektrischen Feldes liefern die Gleichungen (A2.1), (A2.4) und (A2.10)¹⁸

$$\delta\dot{n}_i + \zeta\bar{K}k^2\delta n_i = 0 \quad (\text{A2.11})$$

wobei \bar{K} eine Linearkombination der Frank Konstanten ist und der Wellenvektor k durch $\pi/\text{Zellendicke}$ abgeschätzt werden kann.

Referenzen

- 1 H. Lamb, *Hydrodynamics*, Dover Publishing, New York 1932
- 2 D. Forster, *Hydrodynamic Fluctuations, Broken Symmetry, and Correlation Functions* Benjamin Press, Reading, 1975; ist in der *Advanced Book Classics* Serie, Addison-Wesley, wieder erhältlich.
- 3 Vgl. auch die nachfolgenden Vorträge 5.2.4 – 5.4.3
- 4 P.G. Drazin and W.H. Reid, *Hydrodynamic Stability*, Cambridge University Press, Cambridge 1981; M.C. Cross and P.C. Hohenberg, *Rev.Mod.Phys.* **65**, 851 (1993)
- 5 P. Manneville, *Dissipative Structures and Weak Turbulence*, Academic Press, Boston (1990)
- 6 D. Vollhardt and P. Wölfle, *The Superfluid Phases of ^3He* , Taylor and Francis, London 1990
- 7 L.D. Landau and E.M. Lifshitz, *Hydrodynamics*, Pergamon Press, New York 1959
- 8 Mittels der elektrostatischen Maxwell-Gleichungen läßt sich dies auch als $\mathbf{D} + \mathbf{j}^{(e)} = 0$ schreiben.
- 9 H. Pleiner in *Incommensurate Crystals, Liquid Crystals, and Quasicrystals*, J.F. Scott and N.A. Clark Eds., Plenum Press, New York 1987
- 10 Ein weiteres Beispiel stellt der Ordnungsparameter nahe Phasenübergängen 2. Ordnung dar, wo die Stärke des Ordnungsgrades eine langsam relaxierende Größe wird.³⁵
- 11 P.G. deGennes, *The Physics of Liquid Crystals*, Clarendon Press, Oxford 1974. Eine umfangreiche Neuauflage dieses Buches (deGennes/Prost) erscheint gerade.
- 12 S. Chandrasekhar, *Liquid Crystals*, Cambridge University Press, Cambridge 1977; neue Auflage gerade erschienen.
- 13 M. Kléman, *Points, Lines and Walls*, John Wiley, Chichester 1983; *Rep. Prog.Phys.* **52**, 555 (1989)
- 14 D. Demus and L. Richter, *Textures of Liquid Crystals*, VEB Deutscher Verlag f. Grundstoffindustrie, Leipzig 1978
- 15 A. Saupe, *Mol.Cryst.Liq.Cryst.* **7**, 59 (1969); S. Meiboom, M. Sammon, and W.F. Brinkman, *Phys.Rev.* **A27**, 438 (1983)
- 16 Im Gegensatz zu dreidimensional geordneten Kristallen, wo die Positionsordnung echt langreichweitig ist, ist sie in smektischen Flüssigkristallen nur “quasi-

langreichweitig”, d.h. die Korrelationen fallen mit einem Potenzgesetz des Abstands auf Null ab. Für die meisten praktischen Zwecke kann die Positionsordnung aber auch in smektischen Flüssigkristallen als echt langreichweitig betrachtet werden.

- 17 Es gibt auch “geordnete” smektische Phasen (smektisch B, G, H etc.), die eine gewisse Positionsordnung innerhalb der Schichten zeigen. Solche Phasen muß man nicht unbedingt zu den smektischen Systemen zählen.
- 18 M. Schadt, *Displays* **13**, 11 (1992)
- 19 Das Fehlen eines Inversionszentrums erlaubt in der Gradientenenergie einen *linearen* Gradiententerm, $\hat{\mathbf{n}} \cdot \text{curl} \hat{\mathbf{n}}$, welcher durch die helische Struktur minimiert wird.
- 20 Dies ist der “splay-Freedericksz-Übergang”: Oberhalb einer Grenzspannung beginnt der Direktor in der Mitte der Zelle sich umzuorientieren. Mit steigendem Feld wird diese Umorientierung (bis auf eine dünne Randschicht) vollendet, d.h. der hell/dunkel Übergang ist kontinuierlich (Graustufen).
- 21 S. Ried, Diplomarbeit, Universität Stuttgart 1993
- 22 J.W. Goodby Ed., *Ferroelectric Liquid Crystals*, Gordon and Breach, Philadelphia 1991
- 23 Es gibt auch noch eine Art “Bragg-Bedingung” für die Wellenlänge λ des durchgehenden Lichts²², $Q \sim \sin^2 \frac{d \Delta n}{\lambda} \pi$, d.h. $\lambda \approx 2d \Delta n$, wo d die Zelldicke und Δn den optischen Doppelbrechungsindex bedeutet.
- 24 A.D.C. Chandani, E. Gorecka, Y. Ouchi, H. Takezoe, and A. Fukuda, *Jap.J. Appl.Phys.* **28**, L1265 (1989)
- 25 J.W. Doane, N.A. Vaz, B.G. Wu, and S. Zumer, *Appl.Phys.Lett.* **48**, 269 (1986)
- 26 F. Ferry, *Viscoelastic Properties of Polymers* John Wiley, New York 1970
- 27 H. Pleiner and H.R. Brand, *Mol.Cryst.Liq.Cryst.* **199**, 407 (1991)
- 28 R.B. Bird, B. Armstrong, and O. Hassager, *Dynamics of Polymer Liquids*, Vol.I, John Wiley, New York 1987
- 29 H. Pleiner and H.R. Brand, *Macromol.* **25**, 895 (1992)
- 30 Ein Modell besteht z.B. darin²⁸, im viskosen Teil des Spannungstensors, $\nabla_j v_i + \nabla_i v_j$ durch $(\partial/\partial t + \vec{v} \cdot \vec{\nabla})(\nabla_j v_i + \nabla_i v_j) - \{(\nabla_k v_i)(\nabla_j v_k + \nabla_k v_j) + (\nabla_k v_j)(\nabla_i v_k + \nabla_i v_k)\}$ zu ergänzen. Diese Einführung höherer Zeitableitungen und räumlicher Gradienten erfolgt aber ohne physikalische Begründung.
- 31 P.C. Martin, O. Parodi, and P.S. Pershan, *Phys. Rev.* **A6**, 2401 (1972)

- 32 Ferner erhält die Navier-Stokes Gleichung auf der rechten Seite einen Quellterm $qE_i = E_i \operatorname{div} \vec{D}$ auf Grund der Coulomb Kraft.
- 33 S.R. de Groot and P. Mazur, *Nonequilibrium Thermodynamics*, North-Holland, Amsterdam 1962 [Neuaufgabe bei Dover, New York 1984]
- 34 H.R. Brand and H. Pleiner, *J. Physique* **45**, 563 (1984)
- 35 I.M. Khalatnikov, *Introduction to the Theory of Superfluidity*, Benjamin, Reading 1965; ebenfalls in der *Advanced Book Classics* Serie, Addison-Wesley, wieder erhältlich.