УДК 532.783

В.Б.НЕМЦОВ

СТАТИСТИЧЕСКАЯ И ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКАЯ ГИДРОДИНАМИКА НЕМАТИЧЕСКИХ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛОВ

В настоящее время в гидродинамике жидких кристаллов используются различные варианты феноменологического подхода, детальное сопоставление которых проведено в обзоре [1]. Представляется важным сопоставить основные результаты недавно развитой статистической гидродинамики жидких кристаллов [2,3] и гидродинамики, основанной на феноменологическом рассмотрении [1].

Прежде всего отметим, что в статистической теории все параметры определены систематически и последовательно как средние значения соответствующих молекулярных величин и тем самым устанавливается связь макроскопических и микроскопических параметров.

В феноменологических теориях, учитывающих средние повороты молекул на основе понятия директора, имеются серьезные трудности в обосновании уравнения движения директора с помощью фундаментального закона сохранения момента импульса [4]. В статистической теории собственный момент импульса среды определяется в виде среднего значения плотности динамической величины момента импульса, которая выражается через моменты импульсов молекул, обусловленных их собственным вращением. Это позволяет строгим и естественным образом установить уравнение движения для собственного момента импульса среды. При этом отмеченные выше трудности феноменологического подхода автоматически исключаются.

В отличие от феноменологической теории Лесли-Эриксена в статистической теории учитываются все три вращательные степени свободы частиц, образующих жидкокристаллическую среды. Описание средних поворотов молекул осуществляется с помощью ортогональной матрицы поворота $\alpha_{ik}(\vec{x})$, содержащей три независимых параметра [2,3]. Матрица поворота определена как среднее значение соответствующей динамической величины, выражаемой через матрицы поворота отдельных молекул.

Описание средних поворотов с помощью матрицы поворота согласуется с описанием поворотов в феноменологической гидродинамике нематических жидких кристаллов, развитой Ли и Эрингеном [5]. Отметим имеющееся и здесь различие. В теории Ли-Эрингена матрица поворота определена как функция лангранжевых переменных, в то время как в статистической теории матрица $\alpha_{ik}(\vec{x})$ является функцией переменных Эйлера.

Небезынтересно сопоставить строгое и приближенное описание средних поворотов молекул. Для этого учтем, что матрицу поворота можно представить в виде [6]

$$\alpha_{ik} = \cos\varphi\,\delta_{ik} + (1 - \cos\varphi)\, n_i n_k - \sin\varphi\, e_{ikp} n_p, \tag{1}$$

где φ – средний угол поворота молекул вокруг единичного вектора n_i (директора), ориентированного по направлению упорядоченности длинных осей молекул; e_{ikp} – тензор Леви-Чивита.

Вычисляя на основе (1) тензор ориентационной деформации [2,3],

$$\gamma_{mn} = \frac{1}{2} e_{msl}\, \alpha_{sk} (\partial \alpha_{lk} / \partial x_n), \tag{2}$$

получим

$$\gamma_{mn} = n_m (\partial\varphi/\partial x_n) + \sin\varphi\, (\partial n_m/\partial x_n) + (1 - \cos\varphi)\, \gamma^A_{mn} \tag{3}$$

При этом

$$\gamma^A_{mn} = e_{mst}\, n_s (\partial n_t / \partial x_n) \quad — \tag{4}$$

тензор ориентационной деформации,введенный в работе [7]. Тензор γ^A_{mn} характеризует ориентационные деформации при описании средних поворотов в рамках представления о директоре. Формулой (3) устанавливается соотношение между точным и приближенным описанием ориентационной деформации.

Тензор γ_{mn} совпадает с γ^A_{mn} в предположении, что $\sin\varphi = \cos\varphi = 0$, а также, что φ не зависит от $\vec{x}$. Непосредственное обоснование равенства $\sin\varphi = \cos\varphi = 0$ невозможно. Переход от γ_{mn} к γ^A_{mn} может быть оправдан, если считать, что угол φ распределен равновероятно, и провести дополнительное усреднение тензора γ_{mn} (3) по возможным значением φ. Тогда, принимая снова, что φ не зависит от $\vec{x}$ и учитывая, что $\langle \sin\varphi \rangle = \langle \cos\varphi \rangle = 0$ ($\langle ... \rangle$ – символ равновероятного усреднения), получим

$$\langle \gamma_{mn} \rangle = \gamma^A_{mn}\,.$$

Таким образом, переход от точного к приближенному описанию связан с привлечением дополнительных соображений.

В связи с широким распространением теорий, основанных на упрощенной кинематике средних поворотов, представляется важным самостоятельное построение статистической гидродинамики жидких кристаллов на основе упрощенного рассмотрения средних поворотов молекул [8,9]. Важность этой задачи обусловлена также практической необходимостью получить достаточно простые уравнения гидродинамики. Существенно, что и в этом случае статистическая теория обладает преимуществом последовательности как при обосновании уравнений движения параметров состояния среды, так и при выводе материальных уравнений [8,9].

Как в рамках полного и строгого описания [2,3], так и при использовании упрощенной кинематики поворотов [8,9] статистическая теория определяет все материальные коэффициенты через параметры, характеризующие движение и взаимодействие молекул. Все равновесные материальные коэффициенты выражены через статические, а неравновесные материальные коэффициенты через временные корреляционные функции. Отмеченная особенность статистической теории является важным ее преимуществом по сравнению с феноменологическими теориями, где определение материальных коэффициентов находится вне рамок теории и связано с обращением к опыту.

В статистической теории в отличие от феноменологического подхода изучается также в линейном приближении релаксация ориентационной упорядоченности, характеризуемой тензором второго ранга [2,3]. Для времен релаксации получены статистические выражения, из которых следует возрастание некоторых времен релаксации в области фазового перехода из нематической в изотропную фазу.

Исключение внутренних релаксирующих параметров из полной системы уравнений движения среды приводит к уравнениям, в которых коэффициенты вязкости и другие коэффициенты обладают частотной дисперсией. Эта дисперсия проявляется в распространении звука и в других явлениях.

Возможно описание релаксационных явлений в жидких кристаллах и на основе феноменологического подхода [10]. Можно отметить в этой связи, что статистическая теория релаксации ориентационной упорядоченности появилась ранее [2, 11] феноменологической теории.

Для определения независимых материальных коэффициентов, образующих соответствующие тензоры, используются соображения симметрии и соотношения взаимности Онсагера. Важно отметить, что соотношения взаимности непосредственно следуют из выражений для тензоров кинетических коэффициентов, если учесть четность потоков, входящих в определение временных корреляционных функций, относительно обращения времени. При феноменологическом же рассмотрении соотношения взаимности привлекаются в качестве дополнительных соображений.

Выражения для материальных тензоров в статистическом подходе записаны в общем виде. Учитывая соображения симметрии, можно получить выражения для независимых материальных коэффициентов. В итоге независимые материальные коэффициенты представляются в виде линейной комбинации компонент соответствующих материальных тензоров.

Так как иногда встречается непонимание процедуры перехода к независимым материальным коэффициентам [12], рассмотрим в заключение их определение. Ограничимся расчетом коэффициентов вязкости на основе статистического выражения для тензора коэффициентов вязкости a_{ijkl}.

Так как нематический жидкий кристалл обладает симметрией группы ∞/mm, то с учетом соотношений взаимности $a_{ijkl} = a_{klij}$ тензор коэффициентов вязкости представляется в виде

$$a_{ijkl}=a_1\delta_{ij}\delta_{kl}+a_2\delta_{ik}\delta_{jl}+a_3\delta_{il}\delta_{jk}+a_4(\delta_{ij}e_ke_l+\delta_{kl}e_ie_j+ \\ +a_5\delta_{ik}e_je_l+a_6(\delta_{il}e_je_k+\delta_{ik}e_ie_l)+a_7\delta_{jl}e_ie_k+a_8e_ie_je_ke_l, \tag{5}$$

где δ_{ij} – символ Кронекера; e_i – единичный вектор, направленный вдоль оси симметрии однодоменного образца; a_i – коэффициенты вязкости.

Отметим, что без учета соотношений взаимности вид тензора четвертого ранга для среды, обладающей симметрией группы ∞/mm, приведен в работе [13] и определяется десятью независимыми коэффициентами. Использование соотношений взаимности уменьшает число коэффициентов с 10 до 8.

Выразим комбинации компонентов тензора a_{ijkl} через коэффициенты вязкости с помощью соотношений:

$$\begin{cases} A_1=a_{iikk}=9a_1+3a_2+3a_3+6a_4+a_5+2a_6+a_7+a_8; \\ A_2=a_{kjaj}=3a_1+9a_2+3a_3+2a_4+3a_5+2a_6+3a_7+a_8; \\ A_3=a_{ljjl}=3a_1+3a_2+9a_3+2a_4+a_5+6a_6+a_7+a_8; \\ A_4=a_{iikl}e_ke_l+a_{ijkk}e_ie_j=6a_1+2a_2+2a_3+8a_4+2a_5+4a_6+2a_7+2a_8; \\ A_5=a_{ijil}e_je_l=a_1+3a_2+a_3+2a_4+3a_5+2a_6+a_7+a_8; \\ A_6=a_{ijki}e_je_k+a_{ijjl}e_ie_l=2a_1+2a_2+6a_3+4a_4+2a_5+8a_6+2a_7+2a_8. \\ A_7=a_{ijkj}e_ie_k=a_1+3a_2+a_3+2a_4+a_5+2a_6+3a_7+a_8; \\ A_8=a_{ijkl}e_ie_je_ke_l=a_1+a_2+a_3+2a_4+a_5+2a_6+a_7+a_8. \end{cases} \tag{6}$$

Здесь для кратности через A_i обозначены соответствующие комбинации компонент тензора a_{ijkl}.

Решая систему уравнений (6) относительно a_i, получим искомые выражения коэффициентов вязкости через компоненты тензора a_{ijkl}, который определен статистически в виде интеграла по времени от временной корреляционной функции потоков импульса [2,3]. Упомянутые выражения таковы:

$$\begin{cases} a_1=\frac{1}{8}(3A_1-A_2-A_3-3A_4+A_5+A_6+A_7+A_8); \\ a_2=\frac{1}{8}(-A_1+3A_2-A_3+A_4-3A_5+A_6-3A_7+A_8); \\ a_3=\frac{1}{8}(-A_1-A_2+3A_3+A_4+A_5-3A_6+A_7+A_8); \end{cases} \tag{7}$$

$$\left\{\begin{aligned}
a_4 &= \frac{1}{8}\left(-3A_1+A_2+A_3+5A_4-A_5-A_6-A_7-5A_8\right);\\
a_5 &= \frac{1}{8}\left(A_1-3A_2+A_3-A_4+7A_5-A_6+3A_7-5A_8\right);\\
a_6 &= \frac{1}{8}\left(A_1+A_2-3A_3-A_4-A_5+5A_6-A_7-5A_8\right);\\
a_7 &= \frac{1}{8}\left(A_1-3A_2+A_3-A_4+3A_5-A_6+7A_7-5A_8\right);\\
a_8 &= \frac{1}{8}\left(A_1+A_2+A_3-5A_4-5A_5-5A_6-5A_7+35A_8\right).
\end{aligned}\right. \tag{7}$$

В предельном случае изотропной среды $\langle e_i e_k\rangle = \frac{1}{3}\delta_{ik}$, $A_4 = \frac{2}{3}A_1$, $A_5 = \frac{1}{3}A_2$; $A_6 = \frac{2}{3}A_3$; $A_7 = \frac{1}{3}A_2$; $A_8 = \frac{1}{15}(A_1+A_2+A_3)$.

Тогда

$$\begin{aligned}
a_1 &= \frac{1}{30}\left(4A_1-A_2-A_3\right);\quad a_2 = \frac{1}{30}\left(-A_1+4A_2-A_3\right);\\
a_3 &= \frac{1}{30}\left(-A_1-A_2+4A_3\right),
\end{aligned} \tag{8}$$

а все остальные коэффициенты вязкости обращаются в нуль.

Подобным на основе статистического определения тензора модулей ориентационной упругости K_{ijkl} получаются выражения для четырех констант Франка. При этом нужно учесть, что при упрощенном описании ориентации $e_i\gamma^{A}_{ik} = 0$. Тензор k_{ijlm}, содержащий константы Франка, представляется через тензор K_{njsm} [1]:

$$k_{ijlm} = K_{nksm}(\delta_{ni} - e_n e_i)(\delta_{sl} - e_s e_l), \tag{9}$$

причем тензор K_{nksm} имеет вид (6) и выражается через восемь независимых констант, для которых справедливы соотношения типа (8). Тензор k_{ijlm} включает четыре независимых комбинации k_{11}, k_{22}, k_{33}, k_{24} – константы Франка.

В данной работе ограничимся приведенными результатами сравнения двух типов теории, более детальное сопоставление является предметом последующих публикаций.

ЛИТЕРАТУРА

1. А э р о Э.Л., Б у л ы г и н А.Н. Гидромеханика жидких кристаллов. – В сб.: Гидромеханика. М., 1973, т.7. 2. Н е м ц о в В.Б. Статистическая теория гидродинамических и кинетических процессов в жидких кристаллах. – ТМФ, 25, 1975, № 1.

3. N e m t s o v V.B. Statistical Hydrodynamics of cholesteric Liguid Crys-tals. –Physica, 86A, 1977. 4. L e e J.D. and E r i n g e n A.C. Relations of Two Continuum Theories of Liguid Crystals. In: Liguid Crystals and Ordered Flu-ids, vol. 2, Plenum Press, N.Y.1973. 5. L e e J.D. and E r i n g e n A.C. Wave Propagation in Nematic Liguid Crystals. – J.Chem.Phys. 54, N 12, 1971. 6. В а р ш а л о в и ч Д.А., М о с к а л е в А.Н., Х е р с о н с к и й В.К. Квантовая теория углового момента. –Л., 1975. 7. А э р о Э.Л., Б у л ы г и н А.Н. Кинематика нематических жидких крисcталов. – Прикладная механика, 8, 1972, вып. 3. 8. Н е м ц о в В.Б. К статистическому обоснованию уравнений гидродинамики жидких кристаллов. – В сб.: Теоретическая и прикладная механика. Минск, 1977, вып. 4. 9. Н е м ц о в В.Б. Материальные уравнения для нематических и холестерических жидких кристаллов. – В сб.: Теоретическая и прикладная механика, Минск, 1978, вып. 5. 10. H e s s S. Irreversible Thermodynamics of Noneauilibruim Alianment Phenomena in Molecular Liguid and in Liguid Crystal Z. Naturforsch, 30a, 1975. 11. Н е м ц о в В.Б. К статистической теории параметров распространения звука в нематических жидких кристаллах. – Рефераты докладов VIII Всесоюзной акустической конференции. – М., 1973. 12. Л е в Б.И., Т о м ч у к П.М. О взаимосвязи феноменологического и микроскопического подходов в теории жидких кристаллов. – ТМФ, 32, 1977, № 1. 13. Л о х и н В.А., С е д о в Л.И. Нелинейные тензорные функции от нескольких тензорных аргументов. – ПММ, 27, 1963, вып. 3.

УДК 532.135

Е.Н.ЛАМБИНА

О ПРИНЦИПЕ СООТВЕТСТВИЯ ДЛЯ МЕДЛЕННЫХ НЕУСТАНОВИВШИХСЯ ТЕЧЕНИЙ ВЯЗКО–УПРУГИХ ЛИНЕЙНЫХ ЖИДКОСТЕЙ

В теории линейной вязко-упругости широко применяются принципы соответствия, позволяющие использовать решения задач теории упругости для получения соответствующих решений вязко-упругости [1...4]. Было замечено, что если применить к квазистатическим уравнениям вязко-упругости интегральное преобразование, то полученные при этом уравнения по форме будут совпадать с уравнениями теории упругости, если в последних заменить упругие постоянные изображениями некоторых зависящих от времени величин.Отсюда следовало,что если к решению статической задачи теории упругости применить интегральное преобразование, а затем в решении для изображений заменить упругие постоянные изображениями соответствующих величин вязко-упругой задачи, то решение вязко-упругой задачи может быть получено путем обратного преобразования, примененного к трансформированному таким образом уравнению для изображений. В дальнейшем принцип соответствия был сформулирован также для динамических задач теории вязко-упругости.

Упомянутые принципы соответствия применимы для задач деформируемого твердого тела и не вполне удобны для задач течения вязко-упругих жидкостей, поскольку постановка задач гидродинамики отлична от постановки задач теории упругости. Поэтому представляет интерес такая формулировка принципа соответствия, которая позволяла бы использовать решения задач течения вязкой жидкости.