Письма в ЖЭТФ, том 31, вып.5, стр. 297 – 300 *5 марта 1980 г.*

СВЯЗЬ МЕЖДУ ФОРМОЙ МОЛЕКУЛ И ГИДРОДИНАМИКОЙ В НЕМАТИКЕ

Г.Е.Воловик

Методом скобок Пуассона показано, что реактивный коэффициент в уравнениях гидродинамики нематика должен быть близок к + 1 для молекул в форме палочек и к –1 для дискообразных молекул.

Экспериментальное исследование динамики нематика показало, что реактивный коэффициент λ , фигурирующий в уравнениях гидродинамики:

$$\lambda = \frac{a_2 + a_3}{a_2 - a_3}, \tag{1}$$

где a_2 и a_3 — коэффициенты Лесли, близок к единице (см. [1]). Используя метод скобок Пуассона для вывода уравнений гидродинамики, мы покажем, что близость λ к $+1$ является следствием палочкообразной формы молекул, а для недавно открытого нематика с дискообразными молекулами [2] коэффициент λ должен быть близок к -1.

Метод скобок Пуассона для вывода уравнений гидродинамики в конденсированных средах был развит в работе Дзялошинского и автора [3]. В отличии от [3], где для вывода уравнений гидродинамики нематика использовалась вспомогательная переменная — плотность момента импульса, которая в конечных уравнениях полагалась равной нулю, мы с самого начала будем работать с гидродинамическими переменными: ρ — плотность жидкости, $\mathbf{p}$ — плотность импульса и $\mathbf{n}$ — единичный вектор — директор.

Скобки Пуассона между этими переменными можно получить, зная преобразование гидродинамических переменных под действием неоднородного сдвига $\mathbf{r} \to \mathbf{r} + \mathbf{u}(\mathbf{r})$, генерируемого оператором импульса ([3], см. также [4]). Так из преобразований $\mathbf{p}$ и ρ следует:

$$\{ p_i(\mathbf{r}), p_k(\mathbf{r}') \} = p_k(\mathbf{r}) \nabla_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - p_i(\mathbf{r}') \nabla'_k \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \tag{2}$$

$$\{ p_i(\mathbf{r}), \rho(\mathbf{r}') \} = \rho(\mathbf{r}) \nabla_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \tag{3}$$

Нужно выяснить трансформационные свойства директора $\mathbf{n}$. Они существенно зависят от формы молекул. Если молекулы имеют форму палочек, то в идеальном случае бесконечно тонких и прямых палочек вектор $\mathbf{n}$ совпадает с направлением оси палочки. Поэтому, будучи вмороженным в вещество, вектор $\mathbf{n}$ является контравариантным вектором при преобразованиях координат. Напомним, что контравариантные вектора преобразуются по закону

$$A^k \to A^k(\mathbf{r} - \mathbf{u}) + A^l \nabla_l u^k, \tag{4}$$

а ковариантные по закону

$$A_k \to A_k(\mathbf{r} - \mathbf{u}) - A_l \nabla_k u^l. \tag{5}$$

Используя (4) и учитывая единичность директора, получаем для нематика с палочкообразными молекулами следующую скобку Пуассона:

$$\{ p_i(\mathbf{r}), n_k(\mathbf{r}') \} = -(\nabla_i n_k) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + (\delta_{ik} - n_i(\mathbf{r}') n_k(\mathbf{r}')) \mathbf{n}(\mathbf{r}') \overleftarrow{\nabla} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \tag{6}$$

Если молекулы имеют форму дисков, то в идеальном случае бесконечно тонких дисков нематик представляет собой систему поверхностей, вмороженных в среду. Вектор $\mathbf{n}$, являясь нормалью к этим поверхностям, при преобразовании координат должен вести себя как ковариантный вектор. Поэтому из (5), снова учитывая единичность директора, имеем:

$$\{p_i(\mathbf{r}), n_k(\mathbf{r}')\} = -(\nabla_i n_k)\,\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') + n_i(\mathbf{r}')(n_k(\mathbf{r}')n_l(\mathbf{r}') - \delta_{kl})\nabla'_l\,\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'). \tag{7}$$

Уравнения гидродинамики представляют собой уравнения Лиувилля, которые с учетом диссипации имеют следующий вид:

$$\dot{\rho} + \{\rho, H\} = 0, \tag{8}$$

$$\dot{p}_k + \{p_k, H\} = -\frac{\delta R}{\delta v_k}, \tag{9}$$

$$\dot{n}_k + \{n_k, H\} = \frac{\delta R}{\delta h_k}. \tag{10}$$

Здесь H – энергия системы

$$H = \int d^3 r \left(\epsilon_0(\rho) + \epsilon(\mathbf{n}) + \frac{\mathbf{p}^2}{2\rho}\right), \tag{11}$$

а R – диссипативная функция, выраженная через скорость

$$\mathbf{v} = \frac{\delta H}{\delta \mathbf{p}} = \frac{\mathbf{p}}{\rho}$$

и молекулярное поле

$$\mathbf{h} = -\frac{\delta H}{\delta \mathbf{n}} = -\frac{\partial \epsilon}{\partial \mathbf{n}} + \nabla_i \frac{\partial \epsilon}{\partial \nabla_i \mathbf{n}}.$$

Согласно [1] R имеет следующий вид в приближении несжимаемой жидкости ($\vec{\nabla}\mathbf{v} = 0$)

$$R = \int d^3 r \left[\frac{1}{2\gamma_1}(\mathbf{h}^2 - (\mathbf{n}\mathbf{h})^2) + 2(\nu_3 - \nu_2)(A_{ik}n_k)^2 + \nu_2 A_{ik}A_{ik} + (\nu_1 + \nu_2 - 2\nu_3)(n_i A_{ik} n_k)^2\right]. \tag{12}$$

Здесь $A_{ik} = \frac{1}{2}(\nabla_i v_k + \nabla_k v_i)$. Мы записали (12) через положительные диссипативные коэффициенты ν_1, ν_2, ν_3 и γ_1, введенные так называемой Гарвардской группой [5].

Раскрывая уравнение (10) с помощью (11), (12) и скобки Пуассона (6) или (7), получаем известное уравнение для директора (см. [1], [5])

$$\frac{\partial \mathbf{n}}{\partial t} + (\mathbf{v}\nabla)\mathbf{n} - \frac{1}{2}[\mathrm{rot}\,\mathbf{v}, \mathbf{n}] - \lambda(\mathbf{n}\overleftrightarrow{A} - \mathbf{n}(\mathbf{n}\overleftrightarrow{A}\mathbf{n})) = \frac{1}{\gamma_1}(\mathbf{h} - \mathbf{n}(\mathbf{h}\mathbf{n})). \quad (13)$$

Здесь λ – реактивный параметр, который в [5] не определяется и который нужно находить из эксперимента. В приведенной здесь схеме параметр λ полностью определен. Он равен +1 если используется скобка Пуассона (6), т.е. если молекулы имеют форму палочек, и –1, если используется скобка Пуассона (7), т.е. если молекулы дискообразны.

В действительности, если учесть отклонения от идеальности, например конечное отношение длины палочки к толщине или наличие разброса ориентаций палочек относительно среднего направления, определяющего вектор директора, то наше утверждение сводится к следующему. Для нематиков с палочкообразными молекулами λ близко к + 1, а для нематиков с дискообразными молекулами λ близко к –1. Первое утверждение хорошо выполняется, так, например, приведенное в [1] значение λ для МББА при 22° С равно 1,04. Второе утверждение проверить пока трудно ввиду отсутствия достаточного количества такого рода нематика.

Заметим, что при приближении к фазовому переходу в изотропную жидкость, когда отклонения осей молекул от среднего направления возрастают, отличие $|\lambda|$ от единицы должно увеличиваться. Аналогично при переходе в смектик А, когда директор переходит в нормаль к смектическим слоям.

В заключение хотелось бы поблагодарить Е.И.Каца за полезные обсуждения и информацию об открытии нематиков с дискообразными молекулами, которая стимулировала написание этой статьи.

Институт теоретической физики
им. Л.Д.Ландау

Поступила в редакцию
23 января 1980 г.

Литература

[1] П. де Жен. Физика жидких кристаллов. М., 1977, глава 5.

[2] C.Destrade et al. Theses of International Liquid Crystals Conference, Bangalore, 1979.

[3] I.E.Dzyaloshinskii, G.E.Volovik. Ann. Phys., в печати.

[4] Г.Е.Воловик, В.С.Доценко. ЖЭТФ, 78, 132, 1980.

[5] D.Forster, T.Lubensky, P.Martin, J.Swift, P.Pershan. Phys. Rev. Lett., 26, 1016, 1971.