Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

А. П. Ивашин, М. Ю. Ковалевский, Л. В. Логвинова, Гамильтонова динамика двухосных нематиков с учетом формы молекул, *ТМФ*, 2004, том 140, номер 3, 500–512

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf101>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением

<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 54.80.73.141

26 апреля 2023 г., 18:06:43

© 2004 г. А. П. Ивашин*, М. Ю. Ковалевский*, Л. В. Логвинова†

ГАМИЛЬТОНОВА ДИНАМИКА ДВУХОСНЫХ НЕМАТИКОВ С УЧЕТОМ ФОРМЫ МОЛЕКУЛ

На основе гамильтонова подхода рассмотрена динамика двухосных нематиков. Гидродинамические параметры, связанные с нарушенной симметрией, введены в терминах тензора дисторсии. Плотности и потоки аддитивных интегралов движения представлены в терминах термодинамического потенциала. Получены уравнения идеальной гидродинамики и исследованы спектры коллективных возбуждений двухосных нематиков с учетом фактора формы молекул.

Ключевые слова: гамильтонов подход, скобки Пуассона, двухосные нематики, гидродинамика, конформационные степени свободы, акустические спектры.

1. ВВЕДЕНИЕ

При исследовании динамики конденсированных сред основополагающую роль в гамильтоновом подходе играет структура скобок Пуассона для параметров сокращенного описания, макроскопически полно задающих состояние среды. Выбор параметров сокращенного описания в нематических жидких кристаллах обусловлен рядом факторов. Часть гидродинамических параметров связана со свойствами симметрии гамильтониана, что проявляется в наличии динамических уравнений, обусловленных дифференциальными законами сохранения. Другим фактором, влияющим на состав гидродинамических параметров, является форма молекул. В жидких кристаллах имеет место связь формы молекул со структурой уравнений гидродинамики. Дополнительной гидродинамической величиной в одноосных нематиках является ось анизотропии, обусловленная анизотропией молекул [1]. Как показано в работах [2], [3], в таких нематиках структура скобок Пуассона гидродинамических параметров имеет различный вид для дископодобных и стержнеподобных молекул. В работах [4] рассмотрена гидродинамика двухосных жидких кристаллов. Для этого класса жидких кристаллов характерно полное спонтанное нарушение симметрии относительно поворотов в конфигурационном пространстве $O(3)$. Однако в этих работах не выписаны в явном виде выражения для всех реактивных плотностей потоков аддитивных интегралов движения в терминах функционала энергии и не выявлен характер влияния формы молекул на динамические уравнения для

* Национальный научный центр “Харьковский физико-технический институт”, Харьков, Украина. E-mail: ivashin@kipt.kharkov.ua

† Белгородский государственный университет, Белгород, Россия

этого класса жидких кристаллов. Кроме этих параметров возможно появление дополнительных скалярных параметров, обусловленных формой молекул [5], [6].

Наконец, набор параметров сокращенного описания связан с характером спонтанного нарушения симметрии системы. Формулировка теории упругости как раздела механики сплошной среды основывается на представлении о спонтанно нарушенной трансляционной симметрии. Дополнительная макроскопическая величина – тензор деформаций – вводится как определенная функция тензора дисторсии [7]. Эта величина полностью отображает характер деформации сплошной среды. Гидродинамическая теория жидких кристаллов также представляет собой раздел механики сплошной среды со спонтанно нарушенной симметрией относительно поворотов и в ряде случаев трансляций в конфигурационном пространстве. В работах [3], [5] показано, что дополнительные гидродинамические параметры, связанные с таким нарушением симметрии, могут быть представлены в терминах тензора дисторсии для ряда одноосных и двухосных жидких кристаллов.

В настоящей работе дополнительные величины, связанные со спонтанным нарушением симметрии относительно поворотов в конфигурационном пространстве, введены в терминах тензора дисторсии, плотности и потоки аддитивных интегралов движения представлены в терминах термодинамического потенциала, получены уравнения идеальной гидродинамики и исследованы спектры коллективных возбуждений двухосных жидких кристаллов с учетом фактора формы молекул.

2. СКОБКИ ПУАССОНА В ДИНАМИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛОВ

В гамильтоновом подходе уравнения движения для параметров сокращенного описания имеют вид

$$\dot{\varphi}_\alpha(x) = \{\varphi_\alpha(x), H(\varphi)\}, \quad (2.1)$$

где $H(\varphi)$ – гамильтониан системы. Скобка Пуассона для произвольных функционалов определяется равенством

$$\{A, B\} \equiv \int d^3x \int d^3x' \frac{\delta A}{\delta \varphi_\alpha(x)} \{\varphi_\alpha(x), \varphi_\beta(x')\} \frac{\delta B}{\delta \varphi_\beta(x')}, \quad (2.2)$$

где скобки Пуассона величин $\varphi_\alpha(x)$ антисимметричны относительно их перестановки и удовлетворяют тождеству Якоби. Поэтому для произвольных функционалов справедливы равенства

$$\begin{aligned} \{A, B\} &= -\{B, A\}, \quad \{AB, C\} = A\{B, C\} + B\{A, C\}, \\ \{A, \{B, C\}\} &+ \{B, \{C, A\}\} + \{C, \{A, B\}\} = 0. \end{aligned}$$

Законы сохранения в дифференциальной форме имеют вид

$$\dot{\zeta}_a(x) = -\nabla_k \zeta_{ak}(x), \quad (2.3)$$

где $\zeta_a(x)$ представляет собой функции $\varepsilon(x)$, $\pi_k(x)$ или $\rho(x)$ — плотности аддитивных интегралов движения: $\varepsilon(x)$ — плотность энергии ($a = 0$), $\pi_k(x)$ — плотность k -й компоненты импульса ($a = k$), $\rho(x)$ — плотность массы ($a = 4$); $\zeta_{ak}(x)$ — это функции $q_k(x)$, $t_{ik}(x)$ или $j_k(x)$ — соответствующие плотности потоков аддитивных интегралов движения. Как показано в работе [8], имеет место представление плотностей потоков аддитивных интегралов движения в терминах скобок Пуассона от соответствующих плотностей $\zeta_a(x)$:

$$\begin{aligned}\zeta_{ak}(x) &= -\delta_{ak}\varepsilon(x) + \int d^3x' x'_k \int_0^1 d\lambda \{ \zeta_a(y), \varepsilon(y') \}, \quad a \neq 0, \\ \zeta_{0k}(x) &= \frac{1}{2} \int d^3x' x'_k \int_0^1 d\lambda \{ \varepsilon(y), \varepsilon(y') \}, \\ y &\equiv x + \lambda x', \quad y' \equiv x - (1 - \lambda)x' .\end{aligned}\tag{2.4}$$

Введем в рассмотрение тензор дисторсии

$$b_{ki}(x) \equiv \delta_{ki} - \nabla_i u_k(x),\tag{2.5}$$

который определяется в терминах вектора смещения $u_k(x)$, связывающего лагранжеву координату ξ_k с эйлеровой координатой x_k : $x_k = \xi_k + u_k(x)$. Тензор дисторсии $b_{ki}(x)$ (2.5) задает ориентационные и трансляционные состояния произвольной непрерывной среды. Истинная плотность вещества произвольного состояния $\rho(x)$ определяется в терминах тензора дисторсии равенством [3]

$$\rho(x) = \underline{\rho} \det |b_{ij}(x)|,\tag{2.6}$$

где $\underline{\rho}$ — плотность вещества недеформированного состояния. Скобки Пуассона для плотностей импульса, числа частиц, энтропии $\sigma(x)$ и тензора дисторсии имеют вид [3]

$$\begin{aligned}\{ \pi_i(x), \sigma(x') \} &= -\sigma(x) \nabla_i \delta(x - x'), \quad \{ \pi_i(x), b_{kj}(x') \} = -b_{ki}(x) \nabla_j \delta(x - x'), \\ \{ \pi_i(x), \pi_j(x') \} &= \pi_j(x) \nabla'_i \delta(x - x') - \pi_i(x') \nabla_j \delta(x - x'), \\ \{ \pi_i(x), \rho(x') \} &= \rho(x) \nabla'_i \delta(x - x').\end{aligned}\tag{2.7}$$

Эти скобки Пуассона служат основой построения нелинейных уравнений гидродинамического типа для нормальных жидкостей, кристаллов и жидких кристаллов. Влияние формы молекул жидких кристаллов на динамические свойства проявляется в разных видах зависимости энергии от тензора дисторсии. Ниже на конкретных примерах мы покажем, как в зависимости от формы молекулы выбирается вид параметров сокращенного описания. Далее мы учтем, что гамильтониан системы имеет галилеево-инвариантный вид

$$H = \int d^3x \left(\frac{\pi_i^2(x)}{2\rho(x)} + \Phi(\rho(x), \sigma(x), b_{ij}(x)) \right).\tag{2.8}$$

В этом случае $m j_k(x) = \pi_k(x)$, где m — масса частицы.

3. ДИНАМИКА ДВУХОСНЫХ НЕМАТИКОВ С ДИСКОПОДОБНЫМИ МОЛЕКУЛАМИ

Рассмотрим конденсированные среды со спонтанно нарушенной симметрией относительно поворотов в конфигурационном пространстве. К этому классу конденсированных сред относятся жидкие кристаллы. Предварительно заметим, что состояние изотропной жидкости описывается такими динамическими переменными, как плотность массы, плотность импульса и плотность энтропии. Для описания нематической фазы жидких кристаллов этих макроскопических параметров недостаточно, так как в этом состоянии происходит спонтанное нарушение вращательной симметрии, обусловленное анизотропией молекул. В качестве дополнительных параметров сокращенного описания в случае двухосных нематиков в работах [4] вводились две оси анизотропии, отражающие свойства анизотропии молекул. Поскольку молекулы имеют сложную форму, для их макроскопического описания требуется большее количество параметров. Дополнительными макроскопическими параметрами для одноосных жидких кристаллов являются длина молекулы в случае стержнеподобных молекул и площадь диска для дископодобных молекул. Форма молекул двухосных жидких кристаллов может быть задана длинами большой и малой осей анизотропии и углом между ними. Всюду далее параметры, с помощью которых описывается форма молекул, будем называть конформационными степенями свободы. Расширение набора параметров сокращенного описания для жидких кристаллов обусловлено свойствами анизотропии и конформационной нежесткостью молекул [5], [6]. При изучении двухосных жидких кристаллов рассмотрим вначале случай дископодобных молекул. Пусть $\vec{m}(x)$, $\vec{n}(x)$ – единичные и ортогональные векторы, определяющие оси анизотропии и характеризующие нарушение вращательной инвариантности равенствами

$$n_i(x) \equiv \frac{a(x)b_i(x) + b(x)a_i(x)}{|a(x)\vec{b}(x) + b(x)\vec{a}(x)|}, \quad m_i(x) \equiv \frac{a(x)b_i(x) - b(x)a_i(x)}{|a(x)\vec{b}(x) - b(x)\vec{a}(x)|}. \quad (3.1)$$

Здесь векторы $\vec{a}(x)$ и $\vec{b}(x)$ представлены в терминах тензора дисторсии:

$$a_j(x) \equiv e_{1k}b_{kj}(x), \quad b_j(x) \equiv e_{2k}b_{kj}(x). \quad (3.2)$$

Постоянные векторы $\vec{e}_1$, $\vec{e}_2$ задают направления осей анизотропии и размеры дископодобных молекул недеформированного жидкого кристалла. При деформации среды происходит изменение направлений осей анизотропии и размеров молекул, описываемое тензором дисторсии. Согласно формулам (2.7), (3.1), (3.2) получим скобки Пуассона для плотности импульса $\pi_k(x)$ с единичными векторами $n_k(x)$, $m_k(x)$:

$$\begin{aligned} \{\pi_i(x), n_j(x')\} &= \delta(x - x')\nabla_i n_j(x) + f_{i\lambda j}(x')\nabla'_\lambda \delta(x - x'), \\ \{\pi_i(x), m_j(x')\} &= \delta(x - x')\nabla_i m_j(x) + g_{i\lambda j}(x')\nabla'_\lambda \delta(x - x'), \end{aligned} \quad (3.3)$$

где функции $f_{i\lambda j}(x)$ и $g_{i\lambda j}(x)$ определяются равенствами

$$\begin{aligned} f_{i\lambda j}(x) &\equiv n_i(x)\delta_{j\lambda}^\perp(\vec{n}(x)) - p(x)m_j(x)(n_i(x)m_\lambda(x) + n_\lambda(x)m_i(x)), \\ g_{i\lambda j}(x) &\equiv m_i(x)\delta_{j\lambda}^\perp(\vec{m}(x)) - (1 - p(x))n_j(x)(n_i(x)m_\lambda(x) + n_\lambda(x)m_i(x)), \\ \delta_{kj}^\perp(f(x)) &\equiv \delta_{kj} - f_k(x)f_j(x). \end{aligned} \quad (3.4)$$

Величина

$$p(x) \equiv \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\vec{a}(x)\vec{b}(x)}{a(x)b(x)} \right) \quad (3.5)$$

определяет угол между осями анизотропии в деформированном состоянии. Видим, что для замыкания алгебры скобок Пуассона для гидродинамических параметров рассматриваемых жидких кристаллов недостаточно введения только осей анизотропии. Необходимо расширение набора параметров сокращенного описания, так как в правые части соотношений (3.3) входит величина $p(x)$. Скобка Пуассона для этой величины с плотностью импульса имеет вид

$$\begin{aligned} \{\pi_i(x), p(x')\} &= \delta(x - x') \nabla_i p(x) + h_{il}(x') \nabla'_l \delta(x - x'), \\ h_{ik} &\equiv 2p(1 - p)(m_i m_k - n_i n_k). \end{aligned} \quad (3.6)$$

Скобки Пуассона для набора параметров сокращенного описания $\sigma(x)$, $\pi_k(x)$, $\rho(x)$, $\vec{m}(x)$, $\vec{n}(x)$, $p(x)$ согласно (2.7), (3.3), (3.6) образуют подалгебру алгебры скобок Пуассона (2.7) для динамических переменных сплошной среды. Для двухосных жидких кристаллов помимо величины $p(x)$ в общем случае возможно введение еще двух конформационных степеней свободы, представимых в терминах тензора дисторсии

$$\bar{a}(x) \equiv 2|\vec{a}(x)|(1 - p(x))^{1/2}, \quad \bar{b}(x) \equiv 2|\vec{b}(x)|p^{1/2}(x). \quad (3.7)$$

Эти величины совместно с (3.5) определяют размеры и форму молекул жидкого кристалла в деформированном состоянии. Из определений (3.7) с учетом (3.2), (2.7) мы получим скобки Пуассона для конформационных степеней свободы с плотностью импульса:

$$\begin{aligned} \{\pi_i(x), \bar{a}(x')\} &= \delta(x - x') \nabla_i \bar{a}(x) + f_{ij}(x') \nabla'_j \delta(x - x'), \\ \{\pi_i(x), \bar{b}(x')\} &= \delta(x - x') \nabla_i \bar{b}(x) + g_{ij}(x') \nabla'_j \delta(x - x'), \end{aligned} \quad (3.8)$$

где введены обозначения

$$\begin{aligned} f_{ik} &= \bar{a}(n_i n_k - \sqrt{p(1 - p)}(n_i m_k + n_k m_i)), \\ g_{ik} &= \bar{b}(m_i m_k + \sqrt{p(1 - p)}(n_i m_k + n_k m_i)). \end{aligned}$$

Ориентационные $\vec{m}(x)$, $\vec{n}(x)$ и конформационные $\bar{a}(x)$, $\bar{b}(x)$, $p(x)$ степени свободы являются локальными функциями тензора дисторсии и рассматриваются как независимые переменные. Набор параметров сокращенного описания состоит из плотностей аддитивных интегралов движения, двух векторов $n_k(x)$, $m_k(x)$, характеризующих оси анизотропии, и трех конформационных параметров: $\varphi_\alpha(x) \equiv \{\zeta_a(x), \vec{n}(x), \vec{m}(x), \bar{a}(x), \bar{b}(x), p(x)\}$. В одноосных нематиках набор параметров сужается и имеет вид $\varphi_\alpha(x) \equiv \{\zeta_a(x), \vec{n}(x), \bar{a}(x)\}$. Скобки Пуассона (2.7), (3.3), (3.6), (3.8) образуют замкнутую алгебру гидродинамических переменных двухосного нематика с дископодобными молекулами, при этом плотность энергии конденсированной среды является функцией этих величин:

$$\varepsilon(x) = \varepsilon(\sigma(x), \vec{\pi}(x), \rho(x), \vec{n}(x), \nabla \vec{n}(x), \vec{m}(x), \nabla \vec{m}(x), \bar{a}(x), \bar{b}(x), p). \quad (3.9)$$

Введем плотность термодинамического потенциала

$$\omega \equiv \frac{\partial \sigma}{\partial \zeta_a} \zeta_a - \sigma.$$

Тогда второе начало термодинамики запишется следующим образом:

$$\begin{aligned} d\omega = \varepsilon dY_0 + \pi_i dY_i + \rho dY_4 + \left(\frac{\partial \omega}{\partial n_i} - \nabla_j \frac{\partial \omega}{\partial \nabla_j n_i} \right) dn_i + \frac{\partial \omega}{\partial p} dp + \frac{\partial \omega}{\partial \bar{a}} d\bar{a} + \frac{\partial \omega}{\partial \bar{b}} d\bar{b} + \\ + \left(\frac{\partial \omega}{\partial m_i} - \nabla_j \frac{\partial \omega}{\partial \nabla_j m_i} \right) dm_i + \nabla_j \left(\frac{\partial \omega}{\partial \nabla_j n_i} dn_i + \frac{\partial \omega}{\partial \nabla_j m_i} dm_i \right), \end{aligned} \quad (3.10)$$

где $Y_0^{-1} = T$ – температура, $-Y_k/Y_0 = v_k$ – скорость, $-Y_4/Y_0 = \mu$ – химический потенциал. С учетом скобок Пуассона (2.7), (3.3), (3.6), (3.8) и формулы (2.4) из уравнения движения в гамильтоновой форме (2.1) получим уравнения гидродинамики двухосной фазы нематика с дископодобными молекулами:

$$\begin{aligned} \dot{\sigma}(x) &= -\nabla_i (\sigma(x) \nu_i(x)), & \dot{\rho}(x) &= -\nabla_i \pi_i(x), & \dot{\pi}_i(x) &= -\nabla_k t_{ik}(x), \\ \dot{n}_j(x) &= -\nu_s(x) \nabla_s n_j(x) - f_{i\lambda j}(x) \nabla_\lambda \nu_i(x), \\ \dot{m}_j(x) &= -\nu_s(x) \nabla_s m_j(x) - g_{i\lambda j}(x) \nabla_\lambda \nu_i(x), \\ \dot{p}(x) &= -\nu_s(x) \nabla_s p(x) - h_{kl}(x) \nabla_k \nu_l(x), \\ \dot{\bar{a}}(x) &= -\nu_i(x) \nabla_i \bar{a}(x) - f_{ij}(x) \nabla_j \nu_i(x), \\ \dot{\bar{b}}(x) &= -\nu_i(x) \nabla_i \bar{b}(x) - g_{ij}(x) \nabla_j \nu_i(x). \end{aligned} \quad (3.11)$$

Плотность потока импульса $t_{ik}(x)$ может быть найдена с помощью набора скобок Пуассона (2.7), (3.3), (3.6), (3.8) и формулы (2.4) и представлена в терминах плотности термодинамического потенциала:

$$\begin{aligned} t_{ik} &= t_{ik}^0 + t'_{ik}, & t_{ik}^0 &= -\frac{\partial}{\partial Y_i} \frac{\omega Y_k}{Y_0}, \\ t'_{ik} &= \frac{1}{Y_0} \left[\frac{\partial \omega}{\partial \nabla_k n_j} \nabla_i n_j + \frac{\partial \omega}{\partial \nabla_k m_j} \nabla_i m_j + f_{ikl} \left(\frac{\partial \omega}{\partial n_l} - \nabla_j \frac{\partial \omega}{\partial \nabla_j n_l} \right) + \right. \\ &\quad \left. + g_{ikl} \left(\frac{\partial \omega}{\partial m_l} - \nabla_j \frac{\partial \omega}{\partial \nabla_j m_l} \right) + \frac{\partial \omega}{\partial p} h_{ik} + \frac{\partial \omega}{\partial \bar{a}} f_{ik} \bar{a} + \frac{\partial \omega}{\partial \bar{b}} g_{ik} \bar{b} \right]. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Формулы (3.10)–(3.12) представляют собой полный набор уравнений идеальной гидродинамики двухосного нематика, состоящего из дископодобных молекул, с тремя конформационными степенями свободы.

Используя полученные уравнения двухосного нематика, исследуем спектры коллективных возбуждений. Полагаем, что состояние равновесия среды однородно и недеформированно ($p = 1/2$) и среда как целое покоится ($\nu_k = 0$). Это означает, что

$$\begin{aligned} \frac{\partial \omega}{\partial n_k} &= \frac{\partial \omega}{\partial \nabla_l n_k} = \frac{\partial^2 \omega}{\partial n_k \partial \nabla_l n_j} = 0, \\ \frac{\partial \omega}{\partial m_k} &= \frac{\partial \omega}{\partial \nabla_l m_k} = \frac{\partial^2 \omega}{\partial m_k \partial \nabla_l m_j} = 0, \\ \frac{\partial \omega}{\partial v_k} &= \frac{\partial^2 \omega}{\partial v_j \partial n_k} = \frac{\partial^2 \omega}{\partial v_k \partial \nabla_l n_j} = 0. \end{aligned}$$

Линеаризуя систему уравнений (3.10)–(3.12), получим уравнения, описывающие малые отклонения параметров двухосного нематика от положения равновесия:

$$\begin{aligned}\delta\dot{\rho} &= -\rho\nabla_j v_j, & \delta\dot{s} &= 0, & \delta\dot{p} &= \frac{1}{2}(n_i n_l - m_i m_l)\nabla_i v_l, \\ \rho\delta\dot{v}_i &= \frac{\partial\mathcal{P}}{\partial\rho}\nabla_i\rho + \frac{1}{2Y_0}(n_i n_l - m_i m_l)\left[\frac{\partial^2\omega}{\partial p^2}\nabla_l\delta p + \frac{\partial^2\omega}{\partial p\partial n}\nabla_l\delta n\right], \\ \delta\dot{n}_j &= \left[-n_l\delta_{\lambda j}^\perp(\vec{n}) + \frac{1}{2}(n_\lambda m_l + n_l m_\lambda)\right]\nabla_\lambda\delta v_l, \\ \delta\dot{m}_j &= \left[-m_l\delta_{\lambda j}^\perp(\vec{m}) + \frac{1}{2}(n_\lambda m_l + n_l m_\lambda)\right]\nabla_\lambda\delta v_l,\end{aligned}\tag{3.13}$$

где $s \equiv \sigma/n$, n – плотность числа частиц, $\mathcal{P} \equiv -\omega/Y_0$ – давление. При получении системы уравнений (3.13) учтено, что согласно (3.5) в недеформированном состоянии в точке $p = 1/2$ реализуется минимум, т.е. $(\partial\omega/\partial p)|_{p=1/2} = 0$. Слагаемое $\partial^2\omega/(\partial p\partial n)$ полагалось малым по сравнению с $\partial^2\omega/\partial p^2$. Полагаем, что решения уравнений (3.13) имеют пространственно-временную зависимость $e^{i(\Omega t - \vec{k}\vec{x})}$. В результате найдем дисперсионное уравнение для определения спектров коллективных возбуждений:

$$\begin{aligned}\det\left(\Omega^2\delta_{ij} - k_i k_j \frac{\partial\mathcal{P}}{\partial\rho} - D_{imjl}k_m k_l\right) &= 0, \\ D_{imjl} &= A f_{im} f_{jl} + B g_{im} g_{jl} + C h_{im} h_{jl}, \\ A &\equiv \frac{1}{Y_0\rho} \frac{\partial^2\omega}{\partial a^2}, \quad B \equiv \frac{1}{Y_0\rho} \frac{\partial^2\omega}{\partial b^2}, \quad C \equiv \frac{1}{Y_0\rho} \frac{\partial^2\omega}{\partial p^2}.\end{aligned}\tag{3.14}$$

Раскрывая определитель, получим следующее уравнение:

$$\Omega^2(\Omega^4 - \Omega^2 L_4(\vec{k}) + L_2(\vec{k})) = 0,\tag{3.15}$$

где введены обозначения

$$\begin{aligned}L_4(\vec{k}) &= k^2 c^2 [1 + \Phi(\varphi, \lambda) \sin^2 \theta], \\ L_2(\vec{k}) &= k^4 c^4 \left\{ \Phi(\varphi, \lambda) \sin^2 \theta \cos^2 \theta + \frac{1}{2}(\lambda_a + \lambda_b) \sin^4 \theta \sin^2\left(\frac{\pi}{4} + 2\varphi\right) + \right. \\ &\quad + \sin^4 \theta \left[\lambda_c \sin^2 2\varphi + \frac{1}{2}\lambda_a \lambda_b \sin^2\left(\frac{\pi}{4} + 2\varphi\right) + \right. \\ &\quad \left. \left. + \lambda_a \lambda_c \sin^4\left(\frac{\pi}{4} - \varphi\right) + \lambda_c \lambda_b \sin^4\left(\frac{\pi}{4} + \varphi\right) \right] \right\}, \\ \Phi(\varphi, \lambda) &\equiv \frac{3}{4}(\lambda_a + \lambda_b) + \frac{1}{\sqrt{2}}(\lambda_a - \lambda_b) \sin\left(\frac{\pi}{4} - 2\varphi\right) + \lambda_c,\end{aligned}\tag{3.16}$$

где $c^2 = \partial\mathcal{P}/\partial\rho$ – скорость звука в изотропном состоянии рассматриваемой конденсированной среды и $\lambda_a \equiv a^2 A/c^2$, $\lambda_b \equiv b^2 B/c^2$, $\lambda_c \equiv C/(4c^2)$. Мы ввели полярный и азимутальный углы θ, φ , задающие направление волнового вектора $\vec{e} \equiv \vec{k}/k$: $\vec{e}\vec{m} = \sin \theta \cos \varphi$,

Рис. 1. Зависимость скоростей $c_+(\theta, \varphi)$ (а) и $c_-(\theta, \varphi)$ (б) от углов при значениях параметров $\lambda_a = 0.1$, $\lambda_b = 0.2$, $\lambda_c = 0.05$.

$\vec{e}\vec{n} = \sin \theta \sin \varphi$, $\vec{e}\vec{l} = \cos \theta$. Видно, что в двухосном нематике с дископодобными молекулами возможно распространение двух ветвей акустических колебаний, соответствующих первому и второму звукам:

$$\Omega_{\pm}^2(\vec{k}) = \frac{1}{2} \left(L_4(\vec{k}) \pm \sqrt{L_4^2(\vec{k}) - 4L_2(\vec{k})} \right) \equiv k^2 c_{\pm}^2(\vec{e}), \quad (3.17)$$

где решение со знаком “+” определяет звук, аналогичный тому, который имеется в нормальной жидкости, а решение со знаком “−” определяет второй звук — новую ветвь возбуждений, обусловленную конформационными степенями свободы двухосного жидкого кристалла. Для обоих решений существенна анизотропия скоростей звуков. Из

(3.16), (3.17) находим

$$c_{\pm}(\theta, \varphi) = \frac{c}{\sqrt{2}} \left\{ 1 + \Phi(\varphi, \lambda) \sin^2 \theta \pm \left[(1 - \Phi(\varphi, \lambda) \sin^2 \theta)^2 + 4Q(\varphi, \lambda) \sin^4 \theta \right]^{1/2} \right\}^{1/2},$$

$$Q(\varphi, \lambda) \equiv \Phi(\varphi, \lambda) - \frac{1}{2}(\lambda_a + \lambda_b + \lambda_a \lambda_b) \sin^2 \left(\frac{\pi}{4} + 2\varphi \right) -$$

$$- \lambda_a \lambda_c \sin^4 \left(\frac{\pi}{4} - \varphi \right) - \lambda_c \lambda_b \sin^4 \left(\frac{\pi}{4} + \varphi \right) - \lambda_c \sin^2 2\varphi. \quad (3.18)$$

Рис. 1 демонстрирует характер анизотропии (3.18) (три вектора $\vec{m}$, $\vec{n}$, $\vec{l}$ образуют прямоугольную декартову систему координат).

Сравнивая формулы (3.18) с результатами работ [4], видим, что учет в уравнениях гидродинамики двухосного нематика конформационных степеней свободы приводит к появлению реактивной составляющей в спектре второго звука уже в адиабатическом приближении.

4. ДИНАМИКА ДВУХОСНЫХ НЕМАТИКОВ СО СТЕРЖНЕПОДОБНЫМИ МОЛЕКУЛАМИ

В случае стержнеподобных молекул единичные и ортогональные оси анизотропии $\vec{m}(x)$, $\vec{n}(x)$, характеризующие нарушение вращательной инвариантности, определим равенствами

$$n_i(x) = \frac{A(x)B_i(x) + B(x)A_i(x)}{|A(x)\vec{B}(x) + B(x)\vec{A}(x)|}, \quad m_i(x) = \frac{A(x)B_i(x) - B(x)A_i(x)}{|A(x)\vec{B}(x) - B(x)\vec{A}(x)|}. \quad (4.1)$$

Здесь векторы

$$A_j(x) \equiv e_{1k} b_{kj}^{-1}(x), \quad B_j(x) \equiv e_{2k} b_{kj}^{-1}(x) \quad (4.2)$$

заданы в терминах обратной матрицы $b_{kj}^{-1}(x)$. Поскольку обратная матрица имеет вид

$$(b^{-1})_{c'c} = \frac{1}{2 \det b} \varepsilon_{abc} \varepsilon_{a'b'c'} b_{aa'} b_{bb'} b_{cc'}, \quad \det b = \frac{1}{6} \varepsilon_{abc} \varepsilon_{a'b'c'} b_{aa'} b_{bb'} b_{cc'}, \quad (4.3)$$

то в соответствии с этой формулой, определениями (4.1) и соотношениями (2.7) получим скобки Пуассона для векторов $\vec{m}(x)$, $\vec{n}(x)$ с плотностью импульса:

$$\begin{aligned} \{\pi_i(x), n_j(x')\} &= \delta(x - x') \nabla_i n_j(x) + F_{i\lambda j}(x') \nabla'_\lambda \delta(x - x'), \\ \{\pi_i(x), m_j(x')\} &= \delta(x - x') \nabla_i m_j(x) + G_{i\lambda j}(x') \nabla'_\lambda \delta(x - x'), \end{aligned} \quad (4.4)$$

где введены обозначения

$$\begin{aligned} F_{i\lambda j}(x) &\equiv -n_\lambda(x) \delta_{ij}^\perp(\vec{n}(x)) + P(x) m_j(x) (n_i(x) m_\lambda(x) + n_\lambda(x) m_i(x)), \\ G_{i\lambda j}(x) &\equiv -m_\lambda(x) \delta_{ij}^\perp(\vec{m}(x)) + (1 - P(x)) N_j(x) (n_i(x) m_\lambda(x) + n_\lambda(x) m_i(x)). \end{aligned}$$

Фактор формы

$$P(x) \equiv \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\vec{A}(x) \vec{B}(x)}{A(x) B(x)} \right) \quad (4.5)$$

и конформационные параметры

$$\bar{A}(x) \equiv 2|\vec{A}(x)|(1 - P(x))^{1/2}, \quad \bar{B}(x) \equiv 2|\vec{B}(x)|P^{1/2}(x) \quad (4.6)$$

вводятся для учета формы и размера стержнеподобных молекул. В силу определений (4.5), (4.6) и формул (2.7) получим

$$\begin{aligned} \{\pi_i(x), P(x')\} &= \delta(x - x')\nabla_i P(x) + 2H_{ij}(x')\nabla'_j \delta(x - x'), \\ \{\pi_i(x), \bar{A}(x')\} &= \delta(x - x')\nabla_i \bar{A}(x) + F_{ij}(x')\nabla'_j \delta(x - x'), \\ \{\pi_i(x), \bar{B}(x')\} &= \delta(x - x')\nabla_i \bar{B}(x) + G_{ij}(x')\nabla'_j \delta(x - x'), \end{aligned} \quad (4.7)$$

где введены обозначения

$$\begin{aligned} F_{ik} &= \bar{A}(\delta_{ik}^\perp(\vec{n}) - \sqrt{P(1 - P)}(n_i m_k + n_k m_i)), \\ G_{ik} &= \bar{B}(\delta_{ik}^\perp(\vec{m}) + \sqrt{P(1 - P)}(n_i m_k + n_k m_i)), \\ H_{ik} &= -2P(1 - P)(m_i m_k - n_i n_k). \end{aligned} \quad (4.8)$$

Выражения (2.4), (2.7), (4.4), (4.7) позволяют найти плотности потоков аддитивных интегралов движения в терминах термодинамического потенциала:

$$\begin{aligned} \zeta_{ak} &= \zeta_{ak}^0 + \zeta'_{ak}, \quad \zeta_{ak}^0 = -\frac{\partial}{\partial Y_a} \frac{\omega Y_k}{Y_0}, \\ \zeta'_{ak} &= \left[\frac{\partial \omega}{\partial \nabla_k n_j} \nabla_i n_j + \frac{\partial \omega}{\partial \nabla_k m_j} \nabla_i m_j + F_{ikl} \left(\frac{\partial \omega}{\partial n_l} - \nabla_j \frac{\partial \omega}{\partial \nabla_j n_l} \right) + \right. \\ &\quad \left. + G_{ikl} \left(\frac{\partial \omega}{\partial m_l} - \nabla_j \frac{\partial \omega}{\partial \nabla_j m_l} \right) + H_{ik} \frac{\partial \omega}{\partial P} + \frac{\partial \omega}{\partial \bar{A}} F_{ik} + \frac{\partial \omega}{\partial \bar{B}} G_{ik} \right] \frac{\partial}{\partial Y_a} \frac{Y_i}{Y_0}. \end{aligned} \quad (4.9)$$

Набор параметров сокращенного описания состоит из плотностей аддитивных интегралов движения, двух векторов $\vec{m}(x)$, $\vec{n}(x)$ и трех конформационных параметров: $\varphi_\alpha(x) \equiv \{\zeta_a(x), \vec{m}(x), \vec{n}(x), \bar{A}(x), \bar{B}(x), P(x)\}$, и образует замкнутую алгебру скобок Пуассона.

Далее, поступая аналогично рассмотренному случаю молекул с дископодобной формой, нетрудно получить локальные уравнения идеальной гидродинамики двухосных нематиков со стержнеподобной формой молекул при наличии трех конформационных степеней свободы:

$$\begin{aligned} \dot{\sigma}(x) &= -\nabla_i (\sigma(x) \nu_i(x)), \quad \dot{\rho}(x) = -\nabla_i \pi_i(x), \quad \dot{\pi}_i(x) = -\nabla_k t_{ik}(x), \\ \dot{n}_j(x) &= -\nu_s(x) \nabla_s n_j(x) - F_{i\lambda j}(x) \nabla_\lambda \nu_i(x), \\ \dot{m}_j(x) &= -\nu_s(x) \nabla_s m_j(x) - G_{i\lambda j}(x) \nabla_\lambda \nu_i(x), \\ \dot{\bar{A}}(x) &= -\nu_i(x) \nabla_i \bar{A}(x) - F_{ij}(x) \nabla_j \nu_i(x), \\ \dot{\bar{B}}(x) &= -\nu_i(x) \nabla_i \bar{B}(x) - G_{ij}(x) \nabla_j \nu_i(x), \\ \dot{P}(x) &= -\nu_i(x) \nabla_i P(x) - H_{ij}(x) \nabla_j \nu_i(x). \end{aligned} \quad (4.10)$$

Линеаризуем эти уравнения, а их решение будем искать в виде $\sim e^{i(\Omega t - \vec{k}\vec{x})}$. Линеаризация уравнений приводит к бикубическому дисперсионному уравнению

$$\Omega^6 + I_4(\theta, \varphi)\Omega^4 + I_2(\theta, \varphi)\Omega^2 + I_0(\theta, \varphi) = 0, \quad (4.11)$$

где коэффициенты этого уравнения $I_4(\theta, \varphi)$, $I_2(\theta, \varphi)$, $I_0(\theta, \varphi)$ имеют вид

$$\begin{aligned} I_4(\theta, \varphi) &= -k^2 c^2 \left\{ 1 + \sin^2 \theta \left[(\lambda_1 + \lambda_2) \left(\operatorname{ctg}^2 \theta + \frac{3}{4} \right) - \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{1}{\sqrt{2}} (\lambda_1 - \lambda_2) \sin \left(\frac{\pi}{4} - 2\varphi \right) + \lambda_3 \right] \right\}, \\ I_2(\theta, \varphi) &= k^2 c^2 (I_4(\theta, \varphi) + k^2 c^2) + \\ &\quad + k^4 c^4 \sin^4 \theta \left\{ \lambda_1 \lambda_2 \left[2 \operatorname{ctg}^2 \theta + \frac{1}{2} \sin^2 \left(\frac{\pi}{4} + 4\varphi \right) \right] + \right. \\ &\quad + \lambda_1 \lambda_3 \left[\operatorname{ctg}^2 \theta + \sin^4 \left(\frac{\pi}{4} + 2\varphi \right) \right] + \\ &\quad + \lambda_2 \lambda_3 \left[\operatorname{ctg}^2 \theta + \sin^4 \left(\frac{\pi}{4} - 2\varphi \right) \right] - \lambda_3 \cos^2 2\varphi - (\lambda_1 + \lambda_2) \times \\ &\quad \times \left[\operatorname{ctg}^4 \theta + \operatorname{ctg}^2 \theta - \frac{1}{2} \sin^2 \left(\frac{\pi}{4} + 4\varphi \right) + \frac{3}{4} \right] + \\ &\quad \left. + \frac{1}{\sqrt{2}} (\lambda_1 - \lambda_2) \left[\operatorname{ctg}^2 \theta + \frac{1}{2} \right] \sin \left(\frac{\pi}{4} - 2\varphi \right) \right\}, \\ I_0(\theta, \varphi) &= -k^6 c^6 \lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 \sin^4 \theta \cos^2 \theta. \end{aligned}$$

Здесь введены безразмерные величины

$$\lambda_1 \equiv \frac{\bar{A}^2}{\rho Y_0 c^2} \frac{\partial^2 \omega^2}{\partial \bar{A}^2}, \quad \lambda_2 \equiv \frac{\bar{B}^2}{\rho Y_0 c^2} \frac{\partial^2 \omega}{\partial \bar{B}^2}, \quad \lambda_3 \equiv \frac{1}{4 \rho Y_0 c^2} \frac{\partial^2 \omega}{\partial P^2}.$$

Анализ уравнения (4.11) (кубического относительно Ω^2) показывает, что в области изменения параметров λ_i , при которых детерминант уравнения меньше нуля, рассматриваемая конденсированная среда характеризуется тремя акустическими спектрами. Введем обозначение $y = \Omega^2 + I_4/3$ и преобразуем уравнение (4.11) к приведенному виду

$$y^3 + qy + t = 0,$$

где $q = I_2 - I_4^2/3$, $t = 2I_4^3/27 - I_2 I_4/3 + I_0$. Действительные решения приведенного уравнения имеют вид

$$y_k = \sqrt{\frac{4}{3} \left(\frac{1}{3} I_4^2 - I_2 \right)} \cos \left(\frac{\phi}{3} + (k-1) \frac{2\pi}{3} \right), \quad k = 1, 2, 3,$$

где

$$\cos \phi = -\frac{1}{2\rho} \left(\frac{2}{27} I_4^3 - \frac{1}{3} I_2 I_4 + I_0 \right), \quad \rho = \left[\frac{1}{3} \left(\frac{1}{3} I_4^2 - I_2 \right) \right]^{3/2}.$$

а

б

в

Рис. 2. Зависимость скорости первого (а), второго (б) и третьего (в) звуков от углов при значениях параметров $\lambda_1 = 0.1$, $\lambda_2 = 0.2$, $\lambda_3 = 0.05$.

Соответственно получим решения исходного уравнения (4.11):

$$\Omega_k^2 = y_k - \frac{I_4}{3}, \quad k = 1, 2, 3.$$

Три ветви акустических спектров Ω_k^2 , $k = 1, 2, 3$, представлены на рис. 2.

В работе показано, что использование гамильтонова формализма позволяет уточнить функциональную гипотезу для двухосных жидких кристаллов. Требование замкнутости алгебры скобок Пуассона привело к необходимости введения дополнительных параметров сокращенного описания – конформационных степеней свободы. В результате было предсказано существование реактивной составляющей второго звука в нематических жидких кристаллах с молекулами дископодобной формы и продемонстрирована возможность распространения второго и третьего звуков в двухосных нематиках с молекулами стержнеподобной формы.

Благодарности. Работа поддержана УНТЦ (грант 141J), Российским фондом фундаментальных исследований (грант № 03-02-17695) и фондом INTAS (грант № 00-00577).

Список литературы

- [1] *J. L. Eriksen*. Phys. Fluids. 1966. V. 9. P. 1205; *F. M. Leslie*. Arch. Ration. Mech. Anal. 1968. V. 28. P. 265; *P. C. Martin, O. Parodi, P. J. Pershan*. Phys. Rev. A. 1972. V. 6. P. 2401.
- [2] *Г. Е. Воловик*. Письма в ЖЭТФ. 1980. Т. 31. С. 297; *В. В. Лебедев, Е. М. Кац*. Динамика жидких кристаллов. М.: Наука, 1988.
- [3] *A. Isayev, M. Kovalevsky, S. Peletminsky*. Mod. Phys. Lett. B. 1994. V. 8. P. 677.
- [4] *W. M. Saslow*. Phys. Rev. A. 1982. V. 25. P. 3350; *M. Liu*. Phys. Rev. A. 1981. V. 24. P. 2720; *H. Brand, H. Pleiner*. Phys. Rev. A. 1981. V. 24. P. 2777.
- [5] *М. Ю. Ковалевский, В. В. Кузнецов*. ДАН Украины. 1999. Т. 12. С. 90.
- [6] *M. Kovalevsky, A. Shishkin*. J. Kharkov Nat. Univ. 2001. V. 510. P. 31; J. Molecular Liquids. 2003. V. 105. P. 197.
- [7] *Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц*. Теория упругости. М.: Наука, 1987.
- [8] *А. И. Ахиезер, С. В. Пелетминский*. Методы статистической физики. М.: Наука, 1977.

Поступила в редакцию 18.III.2003 г.,
после доработки 9.II.2004 г.