

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ  
УНИВЕРСИТЕТ  
имени М.В.ЛОМОНОСОВА

Механико-математический факультет

Механика анизотропных жидкостей

А. Г. Калугин

Москва 2005 год

А. Г. Калугин  
**Механика анизотропных жидкостей**

Изложены методы построения моделей анизотропных жидкостей. Представлена модель нематических жидких кристаллов, показан вывод уравнений движения при помощи вариационных и групповых методов механики сплошных сред, приведен ряд точных решений. Также рассмотрена модель анизотропных простых жидкостей, показана связь уравнений, описывающих такую среду с уравнениями магнитной гидродинамики и моделью нематических жидких кристаллов.

Для студентов, аспирантов и широкого круга специалистов, занимающихся изучением различных моделей сплошных сред, 64 с., 8 илл.

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (грант 05-01-00375) и программой поддержки ведущих научных школ НШ-1481.2003.1.

Рецензент — профессор В. А. Налетова

©Механико-математический факультет  
МГУ, 2005 г.  
©Калугин А. Г.

## Введение

Жидкие кристаллы были открыты в 1888 г. австрийским ботаником Ф.Рейнитцером, который, получив новое вещество холестерилбензоат, обнаружил, что оно имеет две стадии плавления, на первой из которых вещество из твердого состояния переходит в мутную жидкость, обладающую однако оптическими свойствами одноосного кристалла, а на второй стадии это вещество становится прозрачной изотропной жидкостью. Вначале он предположил, что получена смесь двух веществ с разной температурой плавления, а промежуточная фаза представляет собой смесь одного расплавленного вещества и кристаллов другого. Однако дальнейшее изучение этого вещества, проведенное О. Леманом, показало, что получено чистое вещество, обладающее новым агрегатным состоянием, которое он назвал *мезоморфной фазой или мезофазой* (от греческого слова "мезос"- промежуточный), переходным между анизотропным кристаллическим и изотропным жидким состояниями, когда в температурном интервале  $34^{\circ}$  существовал мутный, сильновязкий расплав с анизотропными оптическими свойствами. Дальнейшие исследования позволили обнаружить еще целый ряд веществ с такими свойствами, которые он назвал *жидкими кристаллами*. Позднее было обнаружено, что такие фазы возникают не только при нагревании ряда органических веществ, но и при растворении некоторых соединений, например олеата калия в смеси воды и спирта. Такие жидкие кристаллы называют *лиоетропными* (от греческого слова "лио"- растворяю), в отличие от *термотропных*, которые образуются при нагревании. В дальнейшем были получены и другие вещества, которые, будучи жидкостями, обладают анизотропными свойствами, например некоторые суспензии и коллоидные растворы, а также магнитная жидкость при наличии магнитного поля.

С момента открытия до середины 60-х годов прошлого века изучение жидких кристаллов имело в основном теоретическую направленность. Тогда были получены различные виды жидких кристаллов, проведена их классификация, выведена формула анизотропной составляющей внутренней энергии, решен ряд гидродинамических задач. Основные результаты в этот пе-

риод были получены Ф. Франком [36], В. К. Фредериксом, В. Н. Цветковым [1], Дж. Эриксоном [30], Озееном [45], М. Месовичем [41]. Однако, после того, как было обнаружено, что жидкокристаллические пленки можно использовать в качестве индикаторов излучений и недорогих и экономичных цифровых индикаторов, изучение жидких кристаллов стало бурно развиваться. Основные результаты, полученные в этот период отражены в монографиях, статьях и обзорах П. Де Жена [17], Ф. Лесли [39], С. Чандрасекара [28], А. С. Сонина [16,26,27].

Параллельно с жидкими кристаллами развивалась теория *магнитной гидродинамики*, в которой жидкость также обладает анизотропными свойствами [21], строились модели *простых анизотропных жидкостей* [46].

В данной работе описана модель нематических жидких кристаллов, изложен вывод уравнений движения при помощи вариационных и групповых методов, приведен ряд точных решений. При этом основное внимание было уделено гидродинамическим аспектам теории жидких кристаллов.

Представлена также модель анизотропных простых жидкостей, показана связь уравнений, описывающих такую среду с уравнениями магнитной гидродинамики и моделью нематических жидких кристаллов.

Автор выражает глубокую признательность профессору А. Н. Голубятникову за полезные советы и замечания, сделанные в процессе работы над рукописью.

## 1. Основные типы жидких кристаллов

К наиболее изученным следует отнести модели *нематических* (НЖК, от греческого "нема"- нить) и *смектических* (СЖК, от греческого "смеγμα"- мыло) жидких кристаллов<sup>1)</sup> [17]. Нематической жидкокристаллической фазой обычно обладают вещества, состоящие из сильно вытянутых молекул или плоских молекул, которые при определенных условиях объединяются в столбчатые структуры. Типичный представитель этого класса веществ – 4-метоксибензолиден-4'-бутиланилина (МББА), в основе молекулы которого лежат два бензольных кольца, по форме похожи на жесткие стержни диаметром порядка 0,5 нм и длиной 2 нм с относительно короткой концевой цепью. Мезофаза этого вещества существует в интервале от 16 – 21<sup>0</sup> С до 39 – 47<sup>0</sup> С в зависимости от чистоты образца. Молекулы вещества в нематическом состоянии сохраняют только ориентационный порядок длинных осей молекул, позиционный порядок центров тяжести молекул отсутствует.

Таким образом, если каждой молекуле приписать единственный вектор  $\mathbf{l}$ , направленный вдоль ее длинной оси, то можно определить новый параметр – вектор  $\mathbf{d}$ , обычно называемый в литературе *директором*, характеризующий среднее направление векторов  $\mathbf{l}$  в рассматриваемой частице сплошной среды, полагая

$$\mathbf{d} = \frac{\langle \mathbf{l} \rangle}{|\langle \mathbf{l} \rangle|}.$$

Здесь  $\langle \rangle$  означают осреднение по всем молекулам или структурным единицам, составляющим частицу среды такого вещества (рис. 1). При этом у всех известных одноосных ЖК направления  $\mathbf{d}$  и  $-\mathbf{d}$  с физической точки зрения эквивалентны. Во многих статьях и монографиях вектор ориентации обозначают  $\mathbf{n}$ , однако это не всегда удобно в силу существующей традиции обозначать таким образом единичную внешнюю нормаль. В данной работе будет использоваться система обозначений, предложенная Лесли [39,40].

Кроме этого, обычно рассматривается также так называемый тензорный параметр порядка  $\mathbf{Q}$ , компоненты которого в

---

<sup>1)</sup>Термины были придуманы Ж. Фриделем

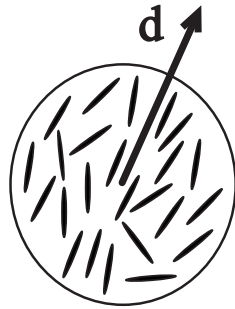


Рис. 1 Нематик

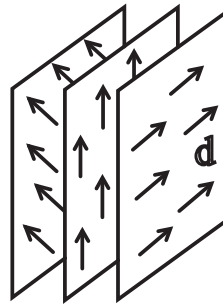


Рис. 2 Холестерик

декартовой системе координат равны

$$Q_{ij} = Q \left( d_i d_j - \frac{1}{3} \delta_{ij} \right), \quad Q = \frac{1}{2} \langle 3 \cos^2 \theta - 1 \rangle,$$

характеризующий среднее отклонение молекул от направления, задаваемого директором, где  $d_i$  – компоненты вектора  $\mathbf{d}$ ,  $\delta_{ij}$  – символ Кронекера ( $i, j = 1, 2, 3$ ),  $\theta$  – угол между директором и длинной осью молекулы. Однако, если изучать НЖК в состояниях, далеких от точек фазовых переходов, то параметр порядка  $Q$  считается быстроустанавливающейся переменной [19], которая определяется давлением и температурой и может быть исключена из последующего рассмотрения в гидродинамических задачах.

У веществ, образующих *холестерическую мезофазу* или *холестериков*, отсутствует позиционный порядок центров тяжести молекул, при этом их молекулы не имеют центра симметрии и в силу хиральной<sup>1)</sup> симметрии молекул имеется винтовая ориентационная структура с шагом порядка 100 нм: молекулы располагаются параллельно друг другу в каждом из параллельных слоев, но поворачиваются на определенный угол при переходе от слоя к слою (рис. 2). К жидким кристаллам с холестерической мезофазой относятся, например, сложные эфиры холестерина, которые дали название этому классу веществ.

<sup>1)</sup>от древнегреческого "хейр" – рука, поскольку молекулы таких веществ отличаются от своих зеркальных отражений как правая и левая руки.

Другая распространенная модель жидких кристаллов – так называемые *смектические* жидкие кристаллы или *смектики*. Смектическая фаза характерна для веществ, состоящих из молекул, образующих слои. При этом сами молекулы, как правило, вытянуты или сплюснены и обладают эффектом притяжения друг к другу, за счет чего и образуются слои из вытянутых и столбики из сплюсненных молекул. Слои могут свободно проскальзывать относительно друг друга, при этом сами они ведут себя как жидкие или упругие гибкие пленки. В смектиках директор  $\mathbf{d}$  задает направление нормали к слою. В зависимости от симметрии расположения и ориентации молекул внутри слоев различают несколько основных типов смектиков [17]. Так смектики А обладают следующими характеристиками: слоистая структура с толщиной слоев, близкой к длине молекул, каждый слой представляет собой двумерную жидкость, а система является оптически одноосной, с оптической осью, перпендикулярной плоскости слоев, с полной симметрией вращений и отражений относительно этой оси. На рис. 3 показана схема расположения молекул смектика А.

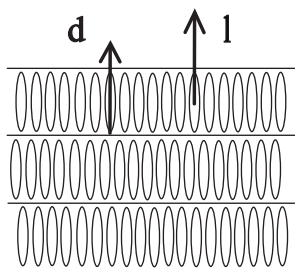


Рис. 3 Смектик А

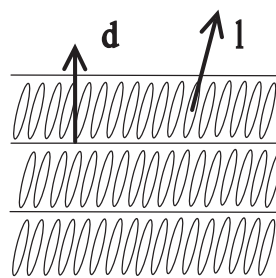


Рис. 4 Смектик С

Смектики С отличаются от смектиков А оптической двуосностью. Схематически это можно интерпретировать как наличие ненулевого угла между нормалью к слою и средним направлением осей молекул в слое (рис. 4).

Известны также смектики  $C^*$ , когда при добавлении к смектику С оптически активных молекул, направление наклона на-

чинает прецессировать вокруг нормали к слоям и возникает спиральная конфигурация.

У смектиков В слои уже не являются двумерными жидкостями и они не очень гибкие. Фактически такие вещества можно представлять себе как колоду карт, когда отдельные карты могут достаточно свободно проскальзывать относительно друг друга. При этом смектики В обладают подгруппами, примеры которых наблюдаются в природе и которые можно назвать  $B_A$  (молекулы перпендикулярны слоям) и  $B_C$  (молекулы наклонены к плоскости слоя).

Фактически упорядоченность молекул возрастает от нематиков (N) или холестериков к смектикам В. Известны вещества, у которых наблюдается несколько жидкокристаллических фаз, например тетрафтал-бис-(*n*-бутиланилин) (ТББА), у которого существуют следующие фазы:

тв. тело  $\rightleftharpoons B \rightleftharpoons C \rightleftharpoons A \rightleftharpoons N \rightleftharpoons$  изотр. жидкость.

По способу получения жидкие кристаллы делятся на термотропные и лиотропные. Термотропные жидкие кристаллы образуются при нагревании твердых кристаллов или охлаждении изотропной жидкости и существуют в определенном температурном интервале. Температурный интервал существования мезофаз зависит от вещества и может находиться как при низких (от  $-60^0$  С), так и при высоких температурах (до  $400^0$  С), например, МББА относится к типичным термотропным кристаллам.

Лиотропные жидкие кристаллы получают при растворении твердых органических веществ в определенных растворителях. Например, водные растворы мыл, полипептидов, липидов, белков, ДНК, ряда вирусов образуют при некоторых концентрациях и температурах жидкокристаллические фазы.

Системы типа мыло-вода представляют собой растворы так называемых амфифильных соединений. У молекул таких веществ имеются две части, одна из которых (полярная головка) обладает дипольным электрическим моментом и растворима в воде, но не растворима в углеводородах, а вторая (углеводородная цепочка), наоборот, нерастворима в воде. Такая избирательность приводит к возникновению слоистых фаз в водных растворах, в которых полярные головки амфифильных моле-



кул обращены к водным прослойкам, а углеводородные цепочки – друг к другу, образуя бислои. При этом такие вещества могут образовывать как пленки, то есть относиться к типу смектических жидких кристаллов (рис. 5), так и цилиндрические или сферические структуры, образуя при этом нематическую фазу (рис. 6) [28].

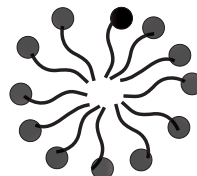
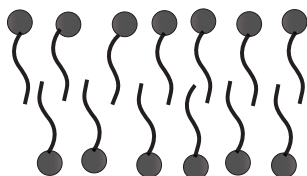


Рис. 5 Лиотропный смектик

Рис. 6 Лиотропный нематик

## 2. Групповая классификация жидких кристаллов

Будем говорить, что сплошная среда в данной точке обладает некоторой точечной группой симметрии  $G$  – группой линейных аффинных преобразований лагранжевых координат, сохраняющих координаты самой точки, если функция внутренней энергии  $U$  инвариантна относительно всех таких преобразований. При этом группа симметрии, вообще говоря, может меняться от точки к точке. Для однородной среды группу  $G$  можно считать постоянной. Поскольку изменение энергии происходит, в частности, за счет работы сил, то группу симметрии сплошной среды можно интерпретировать как конечные деформации, которые среда допускает при бесконечно малых приложенных силах или такие деформации, при осуществлении которых не происходит работы.

Наличие группы симметрии сплошной среды позволяет в ряде случаев строить в общем виде модели такой среды, поскольку ограничивает количество аргументов функции внутренней энергии, а также количество независимых тензоров в опреде-

ляющих модель соотношениях.

Первая классификация кристаллов как сред, допускающих группу преобразований координат – подгруппу группы вращений  $\pm SO_3$ , которая переводит среду саму в себя и, следовательно, не меняет уравнений состояния среды, была дана А. В. Шубниковым [29]. Однако для жидких кристаллов такая классификация является неполной, поскольку с точки зрения ортогональных преобразований изотропная жидкость и изотропное твердое тело эквивалентны, хотя они описываются разными уравнениями. Позднее Б. Д. Колеман, К.-К. Ван и В. Нолл предложили рассматривать для описания симметрий сплошных сред группу  $\pm SL_3$ , состоящую из всех матриц с определителем, равным  $\pm 1$ , которая уже позволяет различать твердые тела и жидкости [33,46]. Полная групповая классификация жидкостей как сред, инвариантных относительно преобразований – подгрупп группы  $\pm SL_3$ , дана А. Н. Голубятниковым [10-13].

Рассмотрим внутреннюю энергию  $U$  как функцию от тензорных аргументов – лагранжевых (сопутствующих) компонент метрического тензора  $\hat{g}_{pq}$  (или компонент матрицы дисторсии  $x_p^i$ ), где  $\hat{g}_{pq} = x_p^i x_q^j \delta_{ij}$ ,  $x_p^i = \frac{\partial x^i}{\partial \xi^p}$ ,  $x^i(\xi^p, t)$  – закон движения индивидуальных частиц,  $\xi^p$  и  $x^i$  – соответственно лагранжевы и эйлеровы координаты частиц сплошной среды. Скалярная функция  $U$  может зависеть от скалярных комбинаций, составленных из этих аргументов и дополнительных тензоров, задающих свойства симметрии среды. Сопутствующие компоненты этих тензоров с верхними или нижними индексами могут быть как *вмороженными*, то есть не зависеть от времени, так и меняться со временем по каким-то законам, при этом они также могут быть разными в разных точках среды. Если группа симметрии сплошной среды известна, то можно заранее определить вид тензоров, которые могут быть аргументами  $U$ . Тем самым, задание группы симметрии сплошной среды определяет и вид скалярных аргументов внутренней энергии.

При переходе к новой системе координат компоненты тензора, как известно, меняются по закону:

$$T_j^i(x^p) = T_l^k(y^q) \frac{\partial x^i}{\partial y^k} \frac{\partial y^l}{\partial x^j},$$

где  $y^i = y^i(x^j)$  – достаточно гладкие обратимые функции. Тензор  $\mathbf{T}$  называется инвариантным относительно некоторой группы преобразований  $G$ , если для любого преобразования координат  $y^i = y^i(x^j)$  из этой группы выполняется соотношение

$$T_j^i(x^p) \equiv T_j^i(y^q),$$

то есть компоненты тензора не меняются при всех преобразованиях координат из данной группы.

Укажем некоторые примеры сред, обладающими различными группами симметрии, и, вследствие этого, различными тензорными инвариантами и скалярными аргументами внутренней энергии.

1) Сжимаемая жидкость (газ): группа симметрии – специальная линейная группа  $\pm SL_3$  – все преобразования лагранжевых координат, определитель матриц которых равен  $\pm 1$ . Тензорным инвариантом в этом случае является тензорный квадрат тензора Леви-Чивита начального состояния  $\varepsilon_0^{ijk} \varepsilon_0^{lmn}$ . При помощи этого инварианта и  $\hat{g}_{ij}$  можно составить только одну функционально независимую комбинацию – определитель метрического тензора

$$\hat{g} = \frac{1}{6} \varepsilon_0^{ijk} \varepsilon_0^{lmn} \hat{g}_{il} \hat{g}_{jm} \hat{g}_{kn},$$

что, с учетом формулы Лагранжа  $\rho_0 \sqrt{g_0} = \rho \sqrt{\hat{g}}$ , приводит к зависимости  $U$  от плотности  $\rho$  (или относительного объема  $V = \rho_0/\rho$ ). При этом можно определить жидкость как среду, допускающую произвольные сдвиговые деформации при сохранении плотности в случае действия сколь угодно малых сил, так как любое преобразование координат с матрицей, определитель которой равен  $\pm 1$ , не меняет внутреннюю энергию такой среды и, следовательно, не требует совершения работы.

2) Среда, описываемая уравнениями магнитной гидродинамики в предположении бесконечной проводимости [21]: в этом случае кроме тензора Леви-Чивита существует еще один тензор  $H_{pq}$ , компоненты которого являются замороженными. Тензор  $H_{pq}$  может быть связан с вектором напряженности магнитного поля  $\mathbf{H}$  соотношением

$$H^i = \varepsilon_0^{ipq} H_{pq}.$$

Группой симметрии в этом случае является подгруппа группы  $SL_3$ , которая в специальной системе координат с базисным вектором  $e_1$  направленным вдоль  $\mathbf{H}$ , состоит из всех матриц вида

$$(a_p^i) = \begin{pmatrix} 1 & a & b \\ 0 & c & d \\ 0 & e & f \end{pmatrix} \quad (2.1)$$

с дополнительным условием  $cf - ed = 1$ . В качестве скалярных аргументов функции  $U$  для этой модели обычно используют  $\rho$  и  $|\mathbf{H}|^2 = \dot{H}^i \dot{H}^j \hat{g}_{ij}$ .

3) Изотропная упругая среда определяемая как среда, внутренняя энергия которой инвариантна при действии группы вращений  $O_3$ , сохраняющей начальные компоненты метрического тензора, то есть при поворотах начального состояния среды как твердого тела. Дополнительными тензорными аргументами будут тензор  $\varepsilon_0^{ijk}$  и метрический тензор начального состояния  $g_{ij}^0$ . При помощи этих тензоров можно составить три независимые скалярные величины, в качестве которых обычно берутся три инварианта тензора деформаций  $I_1, I_2, I_3$  [9,25].

В работе [14] изучались среды, группы симметрии которых являются подгруппы группы  $\pm SL_3$ , определяемые четырьмя и более параметрами. Такие среды обладают двумя скалярными инвариантами, один из которых – определитель метрического тензора. Было показано, что устойчивыми с точки зрения корректности постановки задачи Коши о распространении волн (гиперболичности системы уравнений, описывающих эволюцию среды) могут быть среды, перечисленные выше. При этом во втором примере возможны два различных случая, когда анизотропные свойства среды задаются тензорами первого ранга с верхними (вектор) или нижними (ковектор) индексами. Матрицей преобразований такой подгруппы в специальном базисе, в котором сам вектор направлен вдоль первой координатной оси является матрица  $(a_p^i)$ , умноженная на матрицу отражений. Если инвариантом является ковектор, вместо матрицы  $(a_p^i)$  надо взять транспонированную к ней.

Функция  $U$  в этих случаях может зависеть от плотности и от модуля вектора (ковектора), а также от сверток составленных из компонент этого вектора, производных его компонент

и метрического тензора. Причем сами свертки нельзя устроить произвольным образом, они осуществляются только при помощи тензоров, составленных из тензорных инвариантов подгруппы. В работе [22] выписан общий вид таких инвариантов с валентностями 1-4 для подгрупп группы  $\pm O_3$ . Для указанных подгрупп группы  $SL_3$  тензорные инварианты будут отличаться только верхним или нижним расположением индексов, а разница между вектором или ковектором приводит к различным уравнениями на эволюцию их компонент в эйлеровой системе координат, что будет рассмотрено ниже.

С точки зрения классификации жидких кристаллов относительно подгрупп группы  $\pm SL_3$  дополнительным инвариантом в случае нематиков будет вектор, в случае смектиков – ковектор. Классификация таких сред с точки зрения подгрупп группы  $\pm O_3$  будет уже неполной, поскольку в декартовой системе координат компоненты тензора с верхними и нижними индексами совпадают [12]. Однако такая классификация, как будет показано ниже, позволяет строить некоторые модели как изотропных, так и анизотропных сплошных сред. При такой классификации, например, группа симметрии нематиков и смектиков А описывается в специальном базисе матрицей поворотов в плоскости, перпендикулярной директору, умноженной на матрицу отражений относительно трех координатных плоскостей (группа симметрий цилиндра), и обозначается как  $m \cdot \infty : m$ , обозначение группы симметрии холестериков –  $\infty \cdot m$  (группа симметрий конуса). Также в ряде работ использовались следующие обозначения для групп симметрии:  $D_{\infty h}$  для нематиков,  $D_{\infty h}$  для холестериков,  $D_{\infty h}$  в случае смектиков А [19].

### 3. Простые анизотропные жидкости

#### 3.1. Уравнения движения в лагранжевой системе координат

Модель простых анизотропных сред была предложена Б. Д. Колеманом, К.-К. Ваном и В. Ноллом [33,46]. Будем рассматривать идеальные простые среды, внутренняя энергия  $U$  которых является функцией лагранжевых компонент метрическо-

го тензора  $\hat{g}_{ij} = x_i^k x_j^l \delta_{kl}$ . Кроме этого,  $U$  может зависеть от лагранжевых координат  $\xi^i$  и энтропии  $s$ , а также, дополнительно, от набора тензоров, задающих свойства симметрии среды. Такие среды принято называть простыми, потому что  $U$  содержит производные только от закона движения частиц сплошной среды и не зависит явно от производных других своих аргументов. Если предположить, что среда в начальном состоянии однородна, то зависимость  $U$  от  $\xi^i$  отсутствует. Поскольку для идеальных сред при отсутствии притока тепла и ударных волн энтропия индивидуальной частицы постоянна, то при изучении таких процессов для однородных сред и при однородном начальном распределении энтропии далее явной зависимостью  $U$  от энтропии можно пренебречь. Для вывода уравнений движения воспользуемся вариационным принципом. Для выделенного объема среды  $V$  с границей  $\Sigma$  функционал-действие имеет вид

$$I = \int_{t_1}^{t_2} \int_V \rho \left( \frac{v^2}{2} - U \right) d\tau dt.$$

Здесь  $\rho$  – плотность,  $v$  – модуль вектора скорости движения частиц среды.

Для получения уравнений, определяющих закон движения среды воспользуемся вариационным уравнением Л. И. Седова [24] в виде

$$\delta I + \delta W = 0. \quad (3.1)$$

В общем случае уравнение (3.1) содержит еще слагаемое  $\delta W^*$ , позволяющее учесть производство энтропии и действие диссипативных сил. Краевой функционал  $\delta W$  позволяет определить вид естественных условий на границе среды и начальные условия [5].

Вычисление  $\delta I$  дает

$$\delta I = \delta \int_{t_1}^{t_2} \int_V \rho \left( \frac{v^2}{2} - U \right) d\tau dt = \int_{t_1}^{t_2} \int_V \rho \left( v^i \delta v_i - \frac{\partial U}{\partial x_k^i} \delta x_k^i \right) d\tau dt =$$

$$\begin{aligned}
&= \int_{t_1}^{t_2} \int_V \rho \left( v^i \frac{d}{dt} (\delta x_i) - \frac{\partial U}{\partial x_k^i} \frac{\partial}{\partial \xi^k} (\delta x^i) \right) d\tau dt = \\
&= \int_{t_1}^{t_2} \int_V \rho \left( -\frac{dv_i}{dt} + \frac{\partial}{\partial \xi_k} \frac{\partial U}{\partial \xi^k} \right) \delta x^i d\tau dt + \\
&+ \int_V \rho v_i \delta x^i d\tau \Big|_{t_1}^{t_2} - \int_{t_1}^{t_2} \int_{\Sigma} \frac{\partial U}{\partial x_k^i} n_k \delta x^i d\sigma dt,
\end{aligned} \tag{3.2}$$

где  $n_k$  – компоненты внешней по отношению к  $V$  нормали. Последние два слагаемых в (3.2) служат для определения вида начальных и краевых условий, соответственно. При выводе соотношения (3.2) также использовались соотношения

$$\frac{d}{dt} \delta x^i = \delta v^i, \quad \delta x_k^i = \delta \frac{\partial x^i}{\partial \xi^k} = \frac{\partial}{\partial \xi} \delta x^i,$$

которые справедливы в неварьируемых координатах  $(\xi^i, t)$  [8]. Кроме этого учитывалось, что в силу закона сохранения массы  $\rho d\tau = dm = \rho_0 d\tau_0 = \text{const}$  и в лагранжевом описании уравнение неразрывности выполняется автоматически.

Пусть в уравнении (3.1) функционал  $\delta W$  имеет вид

$$\delta W = - \int_V p_i \delta x^i d\tau \Big|_{t_1}^{t_2} + \int_{t_1}^{t_2} \int_{\Sigma} p_{ni} \delta x^i d\sigma dt,$$

Тогда в силу уравнения (3.1) первое слагаемое в (3.2) должно быть равно нулю, а из произвольности объема  $V$  и вариаций  $\delta x^i$  следует, что подынтегральное выражение при отсутствии разрывов должно быть тождественно равно нулю. Следовательно, из (3.2) получаем систему уравнений для нахождения закона движения индивидуальных частиц среды  $x^i(\xi^j, t)$  в лагранжевых координатах в виде

$$\frac{\partial^2 x_i}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial \xi^j} \left( \frac{\partial U}{\partial x_j^i} \right). \tag{3.3}$$

При этом, поскольку  $U$  как скаляр может зависеть только от скалярных свертков сопутствующих компонент метрического тензора с компонентами инвариантных тензоров вида  $I_k = \hat{T}_k^{ij} \hat{g}_{ij}$  или  $I_k = \hat{T}_{ij}^k \hat{g}^{ij}$  ( $k$  в данном случае – номер инварианта), в правой части уравнения (3.3) можно сделать замену:

$$\frac{\partial U}{\partial x_j^i} = \frac{\partial U}{\partial I_k} \frac{\partial I_k}{\partial x_j^i}.$$

Так как лагранжевы компоненты тензоров  $\mathbf{T}_k$  являются *вмороженными* (постоянными в лагранжевой системе координат), их сопутствующие компоненты удовлетворяют уравнениям вида

$$\frac{\partial T_j^i(\xi^p)}{\partial t} \equiv 0 \quad \text{или} \quad T_j^i(\xi^p) = \text{const}(\xi^p), \quad (3.4)$$

и система уравнений (3.3) является замкнутой. Однако при переходе к системе координат наблюдателя уравнения (3.4) перестают быть тривиальными и их необходимо добавлять к системе уравнений движения среды (3.3).

### 3.2. Уравнения движения в эйлеровой системе координат

Перепишем систему (3.3) в эйлеровой системе координат. Пусть внутренняя энергия  $U = U(\rho, |\mathbf{B}|^2)$ , где  $\mathbf{B}$  – вектор, ковариантные лагранжевы компоненты которого являются *вмороженными*. Тогда закон изменения количества движения такой среды в случае отсутствия массовых сил примет вид:

$$\rho \frac{dv^i}{dt} = \nabla_j p^{ij}, \quad (3.5)$$

$$p^{ij} = \rho^2 \frac{\partial U}{\partial \rho} \delta^{ij} - \rho B^i B^j \frac{\partial U}{\partial |\mathbf{B}|^2}.$$

Эволюция компонент вектора  $\mathbf{B}$  в системе координат наблюдателя описывается уравнением

$$\frac{dB_i}{dt} = -B_k \nabla_i v^k. \quad (3.6)$$



В случае, когда замороженными будут лагранжевы контравариантные компоненты вектора  $\mathbf{A}$ , предположим, что  $U = U(\rho, |\mathbf{A}|^2)$ . Тогда тензор напряжений и уравнение для компонент  $\mathbf{A}$  примут вид:

$$p^{ij} = \rho^2 \frac{\partial U}{\partial \rho} \delta^{ij} + \rho A^i A^j \frac{\partial U}{\partial |\mathbf{A}|^2}, \quad (3.7)$$

$$\frac{dA^i}{dt} = A^k \nabla_k v^i. \quad (3.8)$$

Таким образом, с учетом уравнения неразрывности, имеем замкнутую систему уравнений в случае модели простой идеальной анизотропной жидкости. В частности, путем переобозначений и некоторых преобразований, систему (3.5), (3.7), (3.8) можно свести к уравнениям магнитной гидродинамики с идеальной проводимостью [21], при этом надо учесть, что в этом случае замороженной является комбинация  $H^i/\rho$ , кроме того  $\operatorname{div} \mathbf{H} = 0$ .

### 3.3. Волны Римана в простых анизотропных жидкостях

Покажем как может влиять на физические свойства среды наличие той или иной группы симметрии на примере рассмотренных в предыдущем параграфе моделей простых анизотропных жидкостей. Для этого изучим задачу о распространении волн Римана в таких средах. Рассмотрим простейший случай, когда среда идеальна и однородна, а внутреннюю энергию можно представить в виде

$$U = U_0(\rho) + U_1(I) = U_0(\rho) + \frac{K}{2} I,$$

где  $I = |\mathbf{A}|^2$  в случае замороженного вектора,  $I = |\mathbf{B}|^2$  – ковектора,  $K = \text{const}$ .

Выпишем полную систему уравнений движения в случае замороженного вектора:

$$\frac{dA^i}{dt} = A^k \nabla_k v^i, \quad \frac{d\rho}{dt} = -\rho \nabla_k v^k, \quad (3.9)$$

$$\rho \frac{dv^i}{dt} = -\nabla^i p + \nabla_k (\rho K A^k A^i), \quad p = \rho^2 \frac{\partial U_0}{\partial \rho}. \quad (3.10)$$

Будем рассматривать такие одномерные движения этой среды, когда искомые величины зависят только от  $x^1 = x$  и  $t$ . Изучим течения типа простых волн, когда, дополнительно, все неизвестные зависят только от одной функции  $\psi(x, t)$ . Тогда для производных искомым функций получаем выражения:

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{df}{d\psi} \frac{\partial \psi}{\partial x} = f' \psi'_x, \quad \frac{\partial f}{\partial t} = \frac{df}{d\psi} \frac{\partial \psi}{\partial t} = f' \psi'_t. \quad (3.11)$$

Функция  $\psi(x, t)$ , а вместе с ней и все остальные величины, остается постоянной, если

$$d\psi = \psi'_t dt + \psi'_x dx = 0$$

или

$$\frac{dx}{dt} = -\frac{\psi'_t}{\psi'_x} = \lambda_0, \quad (3.12)$$

где  $\lambda_0$  – скорость фазы волны относительно наблюдателя. Относительно частиц среды фаза волны движется со скоростью

$$a = \frac{dx}{dt} - v^1. \quad (3.13)$$

Подставляя соотношения (3.11), (3.12), (3.13) в систему (3.9), (3.10), получим для производных искомым функций однородную линейную систему:

$$\left\{ \begin{array}{l} -aA^{1'} - A^1 u' = 0 \\ -aA^{2'} - A^1 v' = 0 \\ -aA^{3'} - A^1 w' = 0 \\ -a\rho' + \rho u' = 0 \\ -a\rho u' + p'\rho' - (\rho K A^1 A^1)' = 0 \\ -a\rho v' - (\rho K A^1 A^2)' = 0 \\ -a\rho w' - (\rho K A^1 A^3)' = 0 \end{array} \right. \quad (3.14)$$

где  $\mathbf{v} = (u, v, w), \quad p' = \frac{\partial p}{\partial \rho}.$

Для существования нетривиального решения этой системы необходимо, чтобы ее определитель был равен нулю, тогда система будет вырожденной. Из условия вырожденности получаем характеристическое уравнение для определения  $a$ . Подставляя одно из полученных значений  $a$  в систему (3.14), выразим все производные через одну или несколько из них, например через  $\rho$ , тогда можно взять эту функцию в качестве  $\psi(x, t)$ , а ее вид определяется начальными условиями. При этом закон движения задается соотношением  $x = [a(\rho) + u(\rho)]t$ . Характеристическое уравнение системы (3.14) имеет вид:

$$a(a^2 - (p' + KA^1A^1))(a^2 - KA^1A^1)^2 = 0,$$

и при  $p' + KA^1A^1 \geq 0$  и  $KA^1A^1 \geq 0$  система (3.14) имеет три типа нетривиальных решений на искомые функции, причем при  $a \neq 0$  решения с одинаковым значением абсолютной величины  $a$  будут отличаться только направлением распространения волны по частицам среды.

1) Если  $a = 0$ , то волна не распространяется по частицам и можно показать, что среда в этом случае движется как твердое тело.

2) Когда  $a = \pm\sqrt{p' + KA^1A^1}$ , интегрируя систему (3.14), получим, что  $v, w, A^2, A^3$  – постоянны и в случае  $a > 0$  имеем:

$$A^1 = \frac{c}{\rho}, \quad u' = \frac{\rho'}{\rho} \sqrt{p' + K \frac{c^2}{\rho^2}}, \quad a = \sqrt{p' + K \frac{c^2}{\rho^2}}.$$

Такие волны можно назвать звуковыми, при этом скорость звука зависит и от величины  $A^1$ , а не только от  $\rho$  как в изотропном газе.

3) Если  $a = \pm\sqrt{KA^1}$ , тогда  $u = u_0$  и  $A^1 = A_0^1$  – постоянны,

$$v = A^2\sqrt{K} + v_0, \quad w = A^3\sqrt{K} + w_0, \quad \frac{dx}{dt} = u_0 \pm A_0^1\sqrt{K},$$

при этом  $A^2, A^3$  – произвольные функции от  $\psi(x, t)$ . По аналогии с магнитной гидродинамикой, такие волны можно назвать *альфвеновскими* или *вращательными*, так как при таких движениях происходит поворот векторов ориентации  $\mathbf{A}$  и скорости  $\mathbf{v}$ , при этом плотность среды и давление не меняются. Они

являются поперечными, поскольку возмущения происходят в плоскости, перпендикулярной оси  $x$ , при этом скорость распространения таких волн постоянна, в отличие от звуковых. Такого сорта решения известны как в магнитной гидродинамике [21] так и для смектических жидких кристаллов [19].

В случае замороженного ковектора  $\mathbf{B}$ , уравнения движения примут вид:

$$\begin{aligned} \frac{dB_i}{dt} &= -B_k \nabla_i v^k, & \frac{d\rho}{dt} &= -\rho \nabla_k v^k, \\ \rho \frac{dv^i}{dt} &= -\nabla^i p - \nabla_k (\rho K B^k B^i) & p &= \rho^2 \frac{\partial U_0}{\partial \rho}. \end{aligned}$$

Проделав выкладки, аналогичные случаю замороженного вектора, получим систему для одномерных волн Римана:

$$\left\{ \begin{array}{l} -aB_1' + B_1 u' + B_2 v' + B_3 w' = 0 \\ -aB_2' = 0 \\ -aB_3' = 0 \\ -a\rho' + \rho u' = 0 \\ -a\rho u' + p'\rho' + (\rho K B_1^2)' = 0 \\ -a\rho v' + (\rho K B_1 B_2)' = 0 \\ -a\rho w' + (\rho K B_1 B_3)' = 0 \end{array} \right. \quad (3.15)$$

Характеристическое уравнение этой системы имеет вид:

$$a^3(a^4 - ba^2 + c) = 0, \quad \text{где}$$

$$b = p' + 3KB_1^2 + KB_2^2 + KB_3^2, \quad c = K(p' - KB_1^2)(B_2^2 + B_3^2).$$

Как и в случае вектора, можно показать, что нулевым значениям  $a$  отвечает движение среды как твердого тела, а решения, отвечающие ненулевым значениям

$$a = \pm \sqrt{\frac{b \pm \sqrt{b^2 - 4c}}{2}},$$

дают решения системы (3.15) аналогичные случаю 2 для вектора. Аналоги таких волн известны в магнитной гидродинамике как медленные и быстрые магнитозвуковые волны [21]. Таким

образом, при одинаковом виде зависимости внутренней энергии от компонент замороженного тензора, тип волновых решений существенно образом зависит от того, какие именно компоненты (с верхними или нижними индексами) этого тензора будут замороженными.

Отметим, что существование в среде волн Римана разного типа может также определяться видом зависимости внутренней энергии от своих аргументов. Например, среди волновых решений системы уравнений магнитной гидродинамики с бесконечной проводимостью существуют и альфвеновские и оба типа магнитозвуковых волн [21].

### 3.4. Учет релаксации ориентации

В предыдущих разделах соответствующие компоненты тензоров, определяющих анизотропные свойства среды считались замороженными. Однако эти компоненты могут быть переменными, например меняться в результате процесса релаксации. Рассмотрим среду у которой внутренняя энергия, как и раньше, является функцией сопутствующих компонент метрического тензора  $\hat{g}$  и, дополнительно, переменного тензора  $\mathbf{A}$ . Для определенности будем считать, что  $\mathbf{A}$  – вектор. Пусть  $U = U(x_p^i, g_{ij}, \hat{A}^a, s) = U(\hat{g}_{pq}, \hat{A}^r, s) = U(\rho, s, I)$ , где  $\rho = \rho_0/\sqrt{\hat{g}}$ ,  $I = \hat{g}_{pq}\hat{A}^p\hat{A}^q$ . Тогда уравнение притока тепла при отсутствии вязкости и теплопроводности имеет вид [25]:

$$\rho \frac{dU}{dt} = \hat{p}^{ij} \hat{e}_{ij}, \quad (3.16)$$

где  $\hat{p}^{ij}$  – сопутствующие компоненты тензора напряжений,

$2e_{ij} = (\nabla_i v_j + \nabla_j v_i) = \frac{d\hat{g}_{ij}}{dt}$  – компоненты тензора скоростей деформаций. Дифференцируя  $U$ , с учетом ее аргументов, получим:

$$\frac{dU}{dt} = 2\hat{e}_{pq} \frac{\partial U}{\partial \hat{g}_{pq}} + \frac{\partial U}{\partial s} \frac{ds}{dt} + \frac{\partial U}{\partial \hat{A}^p} \frac{d\hat{A}^p}{dt}.$$

Используя определения Гиббса для тензора напряжений

$$\hat{p}^{pq} = 2\rho \frac{\partial U}{\partial \hat{g}_{pq}} \quad \text{и температуры} \quad T = \frac{\partial U}{\partial s},$$

получим уравнение производства энтропии:

$$\rho \frac{ds}{dt} = -\frac{\hat{h}_p}{T} \frac{d\hat{A}^p}{dt}, \quad \text{где} \quad \hat{h}_p = \frac{\partial U}{\partial \hat{A}^p}.$$

Используя принцип Онзагера [25] для замыкания системы уравнений (3.3), (3.16), зададим соотношение:

$$-\hat{h}^i = \mu_1 \frac{d\hat{A}^i}{dt} + \mu_2 \hat{A}^i \hat{A}^j \frac{d\hat{A}^j}{dt} \frac{1}{|\mathbf{A}|^2},$$

причем из второго закона термодинамики следует, что

$$\mu_1 \geq 0, \quad \mu_1 + \mu_2 \geq 0.$$

Тогда

$$T\rho \frac{ds}{dt} = \mu_1 \hat{g}_{pq} \frac{d\hat{A}^p}{dt} \frac{d\hat{A}^q}{dt} + \mu_2 \left( \hat{A}^p \frac{d\hat{A}^p}{dt} \right)^2 \frac{1}{|\mathbf{A}|^2} \geq 0$$

или

$$\rho \frac{ds}{dt} = \frac{1}{T} \left( \frac{1}{\mu_1} |h_\perp|^2 + \frac{1}{\mu_1 + \mu_2} |h_\parallel|^2 \right),$$

$$\text{где} \quad h_\perp^i = \left( \delta_j^i - \frac{A^i A_j}{|\mathbf{A}|^2} \right) h^j, \quad h_\parallel^i = \frac{A^i A_j}{|\mathbf{A}|^2} h^j.$$

Матрица

$$\left( \delta_j^i - \frac{A^i A_j}{|\mathbf{A}|^2} \right) \quad (3.17)$$

задает оператор проектирования на плоскость с вектором нормали  $\mathbf{A}$ .

Система уравнений среды в этом случае в лагранжевых координатах при отсутствии массовых сил и  $\rho_0 = \text{const}$  принимает вид:

$$\frac{\partial^2 x_i}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial \xi_p} \frac{\partial U}{\partial x_q^i} = \frac{\partial^2 U}{\partial x_p^i \partial x_q^j} x_{pq}^j + \frac{\partial^2 U}{\partial \hat{A}^k \partial x_p^i} \hat{A}_p^k + \frac{\partial^2 U}{\partial x_p^i \partial s} s_p,$$

$$\rho \frac{ds}{dt} = \frac{1}{T} \left( \frac{|h_\perp|^2}{\mu_1} + \frac{|h_\parallel|^2}{\mu_1 + \mu_2} \right),$$

$$\frac{d\hat{A}^p}{dt} = -\frac{h_{\perp}^p}{\mu_1} - \frac{h_{\parallel}^p}{\mu_1 + \mu_2},$$

где нижними индексами  $p, q$  обозначены частные производные по  $\xi^k$ .

Таким образом, в частном случае, когда  $\mu_2 = 0$ ,  $\mu_1 = \text{const}$ , получаем следующее уравнение для вектора ориентации  $\mathbf{A}$ :

$$\frac{d\hat{A}^p}{dt} = -\frac{1}{\mu_1} \hat{g}^{pq} \frac{\partial U}{\partial \hat{A}^q}. \quad (3.18)$$

Если  $U = U(s, J)$ , где  $J = |\mathbf{A}| = \sqrt{I}$ , для уравнения (3.18) возможны два варианта: решение относительно  $\mathbf{A}$  затухает и стремится к нулевому значению  $\mathbf{A}$ , что соответствует фазовому переходу из анизотропного состояния в изотропное, или затухание решения происходит в окрестности состояния равновесия  $h^i(A_0^k) = 0$ . В первом случае, при  $\mu_1 > 0$ , имеем

$$\frac{d|\mathbf{A}|^2}{dt} = \hat{A}_p \frac{d\hat{A}^p}{dt} = -\frac{1}{\mu_1} A_p \frac{\partial U}{\partial \hat{A}^p} = -\frac{1}{\mu_1} \frac{\hat{A}^p \hat{A}_p}{J} U_J \leq 0$$

и затухание решения (3.18) к нулю обеспечивается условием

$$\frac{\partial U}{\partial J} \geq 0. \quad (3.19)$$

Во втором случае из условия на состояние равновесия  $h^i(A_0^k) = 0$  следует, что  $\left. \frac{\partial U}{\partial \hat{A}^p} \right|_{\hat{A}^k = A_0^k} = 0$  и затухание решения в окрестности состояния равновесия обеспечивается положительной определенностью матрицы  $M$ , коэффициенты которой равны

$$(M_{pq}) = \left( \frac{\partial^2 U}{\partial \hat{A}^p \partial \hat{A}^q} \right) \Big|_{\hat{A}^k = A_0^k}.$$

Требование положительной определенности этой матрицы с учетом вида аргументов функции внутренней энергии приводит к условию на вторую производную от  $U$ :

$$\frac{\partial^2 U}{\partial J^2} > 0. \quad (3.20)$$

Можно показать, что условия (3.19), (3.20) совпадают с условиями гиперболичности уравнений движения при зависимости  $U$  от замороженных компонентах вектора  $\mathbf{A}$  [14]. Аналогичная связь между условиями гиперболичности уравнений движения и ростом энтропии при релаксации касательных напряжений в упругих средах была исследована в монографии [9].

## 4. Модель нематических жидких кристаллов

### 4.1. Вывод уравнений движения

Рассмотрим нематические жидкие кристаллы (НЖК) как сплошную среду обладающую дополнительными внутренними степенями свободы [24]. Согласно теории Эриксона-Лесли [17,26,35] в качестве параметров, задающих модель такой среды можно взять:

$x^i(\xi^j, t)$  – закон движения частиц сплошной среды;

$d_k^i = \nabla_k d^i$ , где  $d^i$  – компоненты введенного в первой главе *директора*  $\mathbf{d}$  – вектора ориентации в частице сплошной среды, характеризующего среднее направление ориентации осей молекул в частице сплошной среды и степень их упорядоченности, который может быть связан с микроскопическими параметрами НЖК при помощи осреднения по объему частицы;

$T$  – температура;

Для процессов с температурами, достаточно далекими от точек фазовых переходов твердое тело-нематик и нематик-изотропная жидкость вектор  $\mathbf{d}$  можно считать постоянным по длине, поэтому далее примем

$$|\mathbf{d}| = 1. \quad (4.1)$$

При этих же температурах можно считать среду несжимаемой, что приводит к соотношению

$$\rho = \rho_0 \sqrt{\frac{g_0}{\hat{g}}} = \text{const}.$$

В дальнейшем положим  $\sqrt{g_0} = 1$ .



Применим вариационные принципы для построения модели НЖК и вывода замкнутой системы уравнений, полученных Лесли [39].

Вариационное уравнение Л. И. Седова для нематика, заключенного в жидком объеме  $V$  с замкнутой кусочно-гладкой границей  $\Sigma$  ( $\mathbf{n}$  – единичная внешняя нормаль к этой границе), имеет вид:

$$\delta I + \delta W^* + \delta W = 0. \quad (4.2)$$

Функционал-действие:

$$I = \int_{t_1}^{t_2} \left[ \int_V \Lambda d\tau + \int_{\Sigma} \Lambda_{\Sigma} d\sigma \right] dt,$$

$$\frac{\Lambda}{\rho} = \frac{v^2}{2} + p \left( \frac{1}{\rho} - \frac{1}{\rho_0} \right) - F_0(T) + \frac{1}{2} I_1 |\dot{\mathbf{d}}|^2 - \quad (4.3)$$

$$- F_1(T, \mathbf{d}, \nabla_i \mathbf{d}) + \lambda(|\mathbf{d}|^2 - 1) + U_g(\mathbf{r}),$$

$$\Lambda_{\Sigma} = -F_{\Sigma}(\mathbf{d}, \mathbf{n}) + \lambda_{\Sigma}(|\mathbf{d}|^2 - 1). \quad (4.4)$$

Краевой функционал, определяющий уравнения состояния:

$$\begin{aligned} \delta W = & - \int_V \rho(v_i \delta x^i + I_1 d_i \delta d^i) d\tau \Big|_{t_1}^{t_2} + \int_{t_1}^{t_2} \int_{\Sigma} (p_i^j \delta x^i + q_i^j \delta d^i) n_j d\sigma dt + \\ & + \int_{t_1}^{t_2} \int_{\Sigma} \left[ \left( \frac{\partial F_{\Sigma}}{\partial d^i} - 2\lambda_{\Sigma} d_i \right) \delta d^i - \delta x^i \nabla_{\alpha} \sigma_i^{\alpha} \right] d\sigma dt, \end{aligned}$$

где компоненты тензора поверхностных натяжений, по определению, равны  $\sigma_{\alpha}^i = F_{\Sigma} x_{\alpha}^i - \frac{\partial F_{\Sigma}}{\partial d^l} x_{\alpha}^l n^i$ .

Диссипативный функционал:

$$\delta W^* = \int_{t_1}^{t_2} \int_V [-\rho s \delta T - \tau^{ij} \nabla_{(i} \delta x_{j)} - L_1^i \delta_J d_i] d\tau dt, \quad (4.5)$$

где  $\delta_J d^i = \delta d^i - \nabla^{[k} \delta x^{i]} d_k$ .

Здесь использованы следующие обозначения:  $\lambda, \lambda_\Sigma$  – множители Лагранжа, появляющиеся в выражении для функционала действия в силу учета условия постоянства длины вектора ориентации  $\mathbf{d}$  (4.1);

$s$  – удельная энтропия;

$I_1$  – постоянный параметр, характеризующий инерцию ориентации вектора  $\mathbf{d}$  в частице среды;

$$\dot{\mathbf{d}} = \frac{d\mathbf{d}}{dt};$$

$F = \rho F_1$  – удельная свободная энергия упругих искажений Франка [36];

$F_0$  – удельная изотропная свободная энергия;

$F_\Sigma$  – поверхностная плотность свободной энергии;

$U_g = (\mathbf{g}, \mathbf{r})$  – потенциал силы тяжести;

$\delta_J$  – яумановская вариация, равная нулю при виртуальном вращении элемента сплошной среды с вектором ориентации  $\mathbf{d}$  как твердого тела, что обеспечивает  $\delta W^* = 0$  при таком вращении и позволяет вывести уравнение момента количества движения в дивергентной форме [7].

Также введем понятие *яумановской производной*:

$$D_J d^i = \frac{d_J d^i}{dt} = \frac{d d^i}{dt} - [\boldsymbol{\omega}, \mathbf{d}]^i,$$

которая задает изменение вектора  $\mathbf{d}$  относительно вращающегося с частицей среды базиса, где  $2\boldsymbol{\omega} = \text{rot } \mathbf{v}$ . В ряде работ эта величина обозначается как  $\mathbf{N}$  [39].

$\boldsymbol{\tau}$  – симметричный тензор вязких напряжений;

$\mathbf{L}_1$  – вектор ориентационной диссипации энергии.

$$B^{(ij)} = \frac{B^{ij} + B^{ji}}{2}, \quad B^{[ij]} = \frac{B^{ij} - B^{ji}}{2}.$$

Варьирование (4.3), (4.4) при постоянных  $\xi^k$  дает

$$\delta I = \int_{t_1}^{t_2} \int_V \delta \left( \frac{\Lambda}{\rho} \right) \rho d\tau dt + \int_\Sigma \delta(\sqrt{\hat{a}} \Lambda_\Sigma) \frac{1}{\sqrt{\hat{a}}} d\sigma dt,$$

$$\begin{aligned}
& \int_{t_1}^{t_2} \int_V \rho \delta \left( \frac{\Lambda}{\rho} \right) d\tau dt = \int_{t_1}^{t_2} \int_V \left[ v^i \delta v_i + \delta p \left( \frac{1}{\rho} - \frac{1}{\rho_0} \right) + p \delta \frac{1}{\rho} - \right. \\
& \quad - \frac{\partial F_0}{\partial T} \delta T - \frac{\partial F_1}{\partial T} \delta T + I_1 \dot{d}^i \delta d_i - \frac{\partial F_1}{\partial d^i} \delta d^i - \frac{\partial F_1}{\partial d_k^i} \delta d_k^i + \\
& \quad \left. + \frac{\partial U_g}{\partial x^i} \delta x^i + \delta \lambda (|\mathbf{d}|^2 - 1) + 2\lambda d_i \delta d^i \right] \rho d\tau dt = \\
& \quad = \int_V \rho \left[ v^i \delta x_i + I_1 \dot{d}_i \delta d^i \right] d\tau \Big|_{t_1}^{t_2} - \\
& \quad - \int_{t_1}^{t_2} \int_\Sigma \rho \left[ \frac{\partial F_1}{\partial d_k^i} \delta d^i - p \delta x^k - \frac{\partial F_1}{\partial d_k^i} d_i^j \delta x^l \right] n_k d\sigma dt + \\
& \quad + \int_{t_1}^{t_2} \int_V \left[ -\rho \frac{dv_i}{dt} \delta x^i + \rho \left( \frac{1}{\rho} - \frac{1}{\rho_0} \right) \delta p + \rho (|\mathbf{d}|^2 - 1) \delta \lambda - \right. \\
& \quad - \nabla_i p \delta x^i - \rho \frac{\partial (F_1 + F_0)}{\partial T} \delta T - \rho \frac{\partial F_1}{\partial d^i} \delta d^i + 2\rho \lambda d_i \delta d^i + \quad (4.6) \\
& \quad \left. + \nabla_k \left( \rho \frac{\partial F_1}{\partial d_k^i} \right) \delta d^i - \nabla_k \left( \rho \frac{\partial F_1}{\partial d_k^i} d_l^j \right) \delta x^l - \rho I_1 \frac{d^2 d_i}{dt^2} \delta d^i \right] d\tau dt,
\end{aligned}$$

где использовано соотношение  $\delta \nabla_k d^i = \nabla_k \delta d^i - \nabla_k \delta x^l \cdot \nabla_l d^i$ .

$$\begin{aligned}
& \delta(\sqrt{\hat{a}} \Lambda_\Sigma) = -\sqrt{\hat{a}} \left( \frac{\partial F_\Sigma}{\partial d^i} \delta d^i + \frac{\partial F_\Sigma}{\partial n^i} \delta n^i \right) - F_\Sigma \delta \sqrt{\hat{a}} + \\
& \quad + \sqrt{\hat{a}} (\delta \lambda_\Sigma (|\mathbf{d}|^2 - 1) + 2\lambda_\Sigma d_i \delta d^i) = \\
& \quad = -\sqrt{\hat{a}} \left[ \frac{\partial F_\Sigma}{\partial d^i} \delta d^i + \delta x^i \nabla^\alpha \left( \frac{\partial F_\Sigma}{\partial n^l} x_\alpha^l n_i - F_\Sigma x_{i\alpha} \right) - \quad (4.7) \right. \\
& \quad \left. - \nabla^\alpha \left( \left( \frac{\partial F_\Sigma}{\partial n^l} x_\alpha^l n_i - F_\Sigma x_{i\alpha} \right) \delta x^i \right) - \delta \lambda_\Sigma (|\mathbf{d}|^2 - 1) - 2\lambda_\Sigma d_i \delta d^i \right].
\end{aligned}$$

При выводе уравнений (4.6), (4.7) использовались также формулы для вариации определителя поверхностного метрического тензора и вектора нормали к поверхности  $\Sigma$ :

$$\begin{aligned}\delta\sqrt{\hat{a}} &= \sqrt{\hat{a}} x_\alpha^i \nabla^\alpha \delta x_i = \sqrt{\hat{a}} [\nabla^\alpha (x_\alpha^i \delta x_i) - b_\beta^\beta n^i \delta x_i], \\ \delta n^i &= -x_\beta^i n_k \nabla^\beta \delta x^k,\end{aligned}$$

где  $b_{\alpha\beta} = n_i \nabla_\alpha x_\beta^i$  – компоненты второго фундаментального тензора поверхности.

Из (4.6), приравнявая коэффициенты в уравнении (4.2) при независимых вариациях к нулю, получаем систему уравнений для нематика:

$$\rho \frac{dv^i}{dt} = \nabla_j p^{ij} - \rho g^i, \quad (4.8)$$

$$\rho \left( I_1 \frac{d^2 d_i}{dt^2} + \frac{\partial F_1}{\partial d^i} \right) - \nabla_k q_i^k - 2\rho \lambda d_i + L_{1i} = 0, \quad (4.9)$$

$$|\mathbf{d}| = 1, \quad \rho = \rho_0,$$

$$\frac{\partial(F_0 + F_1)}{\partial T} = -s \quad (4.10)$$

и уравнения состояния

$$p^{ij} = -p\delta^{ij} - q_k^i \nabla^j d^k + \tau^{ij} - L_1^{[i} d^{j]}, \quad (4.11)$$

$$q_i^j = \rho \frac{\partial F_1}{\partial \nabla_j d^i}. \quad (4.12)$$

Сюда следует добавить краевые условия:

$$p^{ij} n_j - \nabla_\alpha \sigma^{i\alpha} = p_{(e)}^{ij} n_i, \quad (4.13)$$

$$q_i^j n_j + \frac{\partial F_\Sigma}{\partial d^i} - 2\rho \lambda_\Sigma d_i = q_{(e)i}^j n_j, \quad (4.14)$$

$$\sigma_\alpha^i = F_\Sigma x_\alpha^i - \frac{dF_\Sigma}{d d_n} d_l x_\alpha^l n^i, \quad (4.15)$$

где индексом  $e$  обозначены внешние воздействия. На ребрах поверхности  $\Sigma$  также должны выполняться соотношения на разрывах:

$$(\sigma_\alpha^i m^\alpha)_+ + (\sigma_\alpha^i m^\alpha)_- = 0, \quad (4.16)$$

где  $\mathbf{m}_\pm$  – соответствующие внешние поверхностные нормали к ребру. Кроме этого необходимо еще учитывать начальные условия, краевые условия и уравнение притока тепла.

Для замыкания системы уравнений (4.8)-(4.15) необходимо задать свободную энергию в объеме  $V$  и на поверхности  $\Sigma$  как функцию своих аргументов и, используя принципы термодинамики необратимых процессов, получить выражения для компонент тензора вязкости  $\tau^{ij}$  и вектора диссипации  $L_1^i$ , связывая их с другими величинами, входящими в уравнения.

## 4.2. Свободная энергия Франка

Согласно модели Озеена-Франка [45], функцию  $F_1$  принято считать квадратичной относительно градиентов  $\mathbf{d}$ :

$$2\rho F_1 = C^{ijkl}(\nabla_i d_j)(\nabla_k d_l), \quad (4.17)$$

где  $C^{ijkl} = C^{ijkl}(T)$ . В силу того, что подгруппа  $m \cdot \infty : m$  группы вращений является группой симметрии нематика,  $C^{ijkl}$  как инвариант этой группы имеет вид [22]:

$$C^{ijkl} = k_1 g^{ij} g^{kl} + k_2 g^{ik} g^{jl} + k_3 g^{il} g^{jk} + k_4 g^{ij} d^k d^l + k_5 g^{ik} d^j d^l + \\ + k_6 g^{il} d^k d^j + k_7 g^{kl} d^i d^j + k_8 g^{jl} d^k d^i + k_9 g^{jk} d^i d^l + k_{10} d^i d^j d^k d^l. \quad (4.18)$$

Из (4.17), (4.18), учитывая, что в силу (4.1) выполняется равенство  $d_i \nabla_j d^i \equiv 0$ , получаем выражение для свободной энергии Франка [30,36]:

$$2\rho F_1 = k_1 (\nabla_i d^i)^2 + k_2 (\nabla^i d^j)(\nabla_i d_j) + \\ + k_3 (\nabla^i d^j)(\nabla_j d_i) + k_8 (d^k \nabla_k d^i)(d^l \nabla_l d_i). \quad (4.19)$$

Если коэффициенты  $k_2, k_3$  постоянны, то это выражение можно упростить, выделив дивергентные части при константах  $k_2, k_3$ , с использованием тождества:

$$(\nabla_i d^i)^2 - (\nabla^i d^k)(\nabla_k d_i) \equiv \nabla_i (d^i \nabla_k d^k - d^k \nabla_k d^i). \quad (4.20)$$

Тогда

$$d^i \nabla_i d^k = -[\mathbf{d}, \text{rot } \mathbf{d}]^k, \quad (4.21)$$

$$\begin{aligned} \nabla_i d^k \nabla^i d_k &= (\nabla_i d^i)^2 + (\mathbf{d}, \text{rot } \mathbf{d})^2 + |[\mathbf{d}, \text{rot } \mathbf{d}]|^2 + \\ &+ \nabla_i (d_k \nabla^k d^i) - \nabla_k (d^k \nabla_i d^i). \end{aligned} \quad (4.22)$$

Причем равенства (4.21), (4.22) справедливы только для вектора  $\mathbf{d}$  с постоянной длиной. В результате в качестве свободной энергии можно взять функцию

$$\begin{aligned} 2\rho F_1 &= K_1(\text{div } \mathbf{d})^2 + K_2(\mathbf{d}, \text{rot } \mathbf{d})^2 + K_3|[\mathbf{d}, \text{rot } \mathbf{d}]|^2 + \\ &+ K_{24}\nabla_i (d^k \nabla_k d^i - d^i \text{div } \mathbf{d}), \end{aligned} \quad (4.23)$$

называемую *свободной энергией упругих искажений вектора ориентации* или *свободной энергией Франка* [17,36]. Коэффициенты  $K_i$  принято называть *константами Франка*. Коэффициент при дивергентном слагаемом исторически имеет двойной индекс  $K_{24}$ , в ряде работ применяется обозначение  $K_2 - K_4$ . Если рассмотреть деформации "бруска" из нематика с замороженной ориентацией, то каждая из констант соответствует своему виду деформации [26]:

$K_1$  – изгиб ребра, перпендикулярного  $\mathbf{d}$ ;

$K_2$  – кручение с осью, перпендикулярной вееру  $\mathbf{d}$ ;

$K_3$  – изгиб ребра, параллельного  $\mathbf{d}$ ;

Такие деформации поля ориентации служат для измерения  $K_i$  [17]. Для МББА  $K_1 = 6$  пН,  $K_2 = 4$  пН,  $K_3 = 7,5$  пН (здесь и ниже параметры МББА даны при  $T = 25^\circ \text{C}$  [34,38]).

Поскольку последнее слагаемое в (4.23) имеет дивергентную форму, то при интегрировании по объему эта часть объемной энергии сводится к поверхностному интегралу. Поэтому оно не влияет на ориентацию поля директора внутри исследуемого объема, однако его необходимо учитывать при выводе граничных условий.

В силу того, что константы Франка близки по величине друг к другу, во многих практических задачах применяется также модель Озеена-Франка – так называемое *одноконстантное приближение* [17], когда

$$K_1 = K_2 = K_3 = K.$$

В этом случае выражение (4.23) для  $\rho F_1$  с точностью до дивергентных слагаемых и с учетом (4.20)-(4.21) имеет вид:

$$\rho F_1 = \frac{1}{2} K (\nabla_i d^j) (\nabla^i d_j). \quad (4.24)$$

Для модели Озеена-Франка также возможен ряд дополнительных упрощений, что позволяет решать некоторые задачи о течениях жидкого кристалла аналитически.

### 4.3. Свободная энергия Франка для холестериков

Холестерические жидкие кристаллы имеют группу симметрии  $m \cdot \infty$ , поэтому в выражение для свободной энергии упругих искажений поля директора могут входить слагаемые, линейные по его пространственным производным и квадратичные по компонентам директора. Тогда разложение второго порядка по градиентам директора функции свободной энергии можно представить в виде:

$$F_1 = C^{ijkl} (\nabla_i d_j) (\nabla_k d_l) + L^{ijk} d_i \nabla_j d_k,$$

где компоненты тензора  $C^{ijkl}$  задаются соотношением (4.18), а тензор  $L$  имеет вид [22]:

$$L^{ijk} = k_1 g^{ij} d^k + k_2 g^{ik} d^j + k_3 g^{kj} d^i + k_4 d^i d^j d^k.$$

Как и для нематика, выражение для свободной энергии холестерика с точностью до дивергентных слагаемых можно свести к аналогичному (4.23) выражению:

$$2\rho F_1 = K_1 (\operatorname{div} \mathbf{d})^2 + K_2 ((\mathbf{d}, \operatorname{rot} \mathbf{d}) + q)^2 + K_3 |[\mathbf{d}, \operatorname{rot} \mathbf{d}]|^2, \quad (4.25)$$

где параметр  $|q|$  имеет порядок  $10^7$  1/м.

Изучим физический смысл параметра  $q$ . Рассмотрим задачу о нахождении поля директора для холестерика в случае статического равновесия при отсутствии внешних сил в безграничном пространстве. В этом случае необходимо потребовать, чтобы внутренняя энергия достигала минимума. Представим в декартовой системе координат компоненты единичного вектора  $\mathbf{d}$  в виде

$$\mathbf{d} = (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta),$$

и, приравняв каждое из трех слагаемых в (4.25) к нулю, получим, что отвечающее свободному положению равновесия при  $K_\alpha \geq 0$ , с точностью до выбора декартовых координат  $x, y, z$  дает  $\theta = \pi/2$  и  $\varphi = qz$  (см. рис. 2). Таким образом, в силу эквивалентности направлений  $\mathbf{d}$  и  $-\mathbf{d}$ , период пространственной винтовой структуры холестерической мезофазы при отсутствии внешних воздействий равен  $\pi/q$ .

#### 4.4. Замыкание системы уравнений для нематика

Для замыкания системы уравнений, задающих модель НЖК, рассмотрим процессы диссипации. Так как справедливо равенство

$$\delta W^* = \int_{t_1}^{t_2} \int_V (-\rho s \delta T - \rho \delta q') d\tau dt,$$

то с учетом (4.5) получим следующее выражение для некомпенсированного тепла:

$$\rho \frac{dq'}{dt} = \tau^{ij} e_{ij} + L_1^i D_J d_i.$$

Согласно второму началу термодинамики:

$$\rho \frac{ds}{dt} + \nabla_i \frac{q^i}{T} = -\frac{1}{T^2} q^i \nabla_i T + \frac{1}{T} \tau^{ij} e_{ij} + \frac{1}{T} L_1^i D_J d_i \geq 0. \quad (4.26)$$

Выбирая  $e_{ij}$ ,  $\nabla_i T$ ,  $D_J d^i$  в качестве термодинамических потоков, а  $\tau^{ij}$ ,  $q^i$ ,  $L_1^i$  – термодинамических сил, предположим, что термодинамические силы представляют собой тензорные функции от  $g_{ij}$ ,  $T$ ,  $d^i$ ,  $D_J d^i$ ,  $e_{ij}$ ,  $\nabla_i T$ , инвариантные относительно изменения знака векторов  $d^i$  и  $L_1^i$ . Согласно линейному принципу Онзагера получим:

$$q_i = -(\varkappa_\perp \nabla_i T + \varkappa_d d_i d^j \nabla_j T).$$

Для МББА  $\varkappa_\perp = 0,126$ ,  $\varkappa_d = 0,084$  (Вт/(м·К)). Для сравнения для воды в тех же единицах  $\varkappa_\perp = 0,58$ ,  $\varkappa_d = 0$ . При этом из условия неубывания энтропии следует, что

$$\varkappa_\perp \geq 0, \quad \varkappa_\perp + \varkappa_d \geq 0.$$



Аналогично, компоненты тензора вязких напряжений  $\tau_{ij}$  и вектора *крутильной вязкости*  $L_1^i$  можно записать в виде:

$$\begin{aligned}\tau_{ij} &= Q_{ijk} D_J d^k + R_{ijkl} e^{kl}, \\ L_{1i} &= Q_{ij} D_J d^j + R_{ijk} e^{jk}.\end{aligned}$$

Используя теорию симметрии сплошных сред [22,25], для тензоров, связывающих термодинамические силы и потоки, получим:

$$Q_{ij} = \beta_1 g_{ij} + \beta_2 d_i d_j,$$

причем, считая  $L_1^i d_i = 0$ , предположим, что

$$Q_{ij} d^i = 0,$$

$$R_{ijk} = l_1 g_{ij} d_k + l_2 g_{ik} d_j + l_3 g_{jk} d_i + l_4 d_i d_j d_k.$$

Из соотношений взаимности Онзагера также следует, что

$$Q_{jki} = R_{ijk}.$$

Из  $R_{ijk} = R_{ikj}$  получаем, что  $l_1 = l_2$ . Так как  $L_1^i d_i = 0$ , то  $R_{ijk} d^i = 0$  и, следовательно  $l_3 = 0$ ,  $2l_1 + l_4 = 0$ . Тогда

$$R_{ijk} = 2l_1 (g_{i(j} d_{k)}) - d_i d_j d_k).$$

Тензор  $R_{ijkl}$  аналогичен  $C_{ijkl}$  из соотношения (4.18). Окончательно, используя несжимаемость, получаем выражения для компонент симметричного тензора вязких напряжений  $\tau$  и вектора  $L_1$ :

$$\tau_{ij} = 2l_1 D_J d^{(i} d_{j)} + 2\lambda_2 e_{ij} + 2\lambda_3 g_{ij} d^k d^l e_{kl} + \quad (4.27)$$

$$+ 2\lambda_4 (d^k d_j e_{ik} + d_i d^k e_{jk}) + \lambda_5 d_i d_j e_{kl} d^k d^l,$$

$$L_{1i} = \beta_1 D_J d_i + 2l_1 (e_{ik} d^k - d_i d^j d^k e_{jk}). \quad (4.28)$$

Для несжимаемой жидкости в (4.27) можно также опустить слагаемое при  $\lambda_3$ , так как  $g_{ij} d^k d^l e_{kl}$  обычно включают в определение давления  $p$  [17]. Окончательно получаем 5 коэффициентов Лесли [39]:  $l_1$ ,  $\lambda_2$ ,  $\lambda_4$ ,  $\lambda_5$ ,  $\beta_1$ , которые в общем случае являются функциями температуры, но во многих задачах их принято считать постоянными. Коэффициенты вязкости для МБ-БА имеют порядок 10–100 мПа·с. Также, в силу второго закона термодинамики, они должны удовлетворять ряду ограничений, вытекающих из условия неубывания энтропии, которые будут выписаны ниже.

## 4.5. Предельный случай для уравнений эволюции директора

Отметим важную особенность в структуре уравнения для определения ориентации (4.9). Поскольку  $I_1 \approx 10^{-19} \text{ м}^2$ , то инерцией ориентации в процессах, более медленных, чем распространение волн ориентации, что соответствует порядку скоростей  $\sqrt{\frac{K}{\rho I_1}} \approx 10^2 \text{ м/с}$ , пренебрегают. Тогда уравнение (4.9) можно переписать в виде:

$$\begin{aligned} \frac{d d^i}{dt} + d^k \nabla_k v^i \left( -\frac{1}{2} + \frac{l_1}{\beta_1} \right) + d_k \nabla^i v^k \left( \frac{1}{2} + \frac{l_1}{\beta_1} \right) - \\ - 2 \frac{l_1}{\beta_1} d^i e_{dd} - 2\rho \frac{\lambda d^i}{\beta_1} + \frac{\pi^i}{\beta_1} = 0, \end{aligned} \quad (4.29)$$

где  $\pi^i = \rho \frac{\partial F_1}{\partial d_i} - \nabla_k q_i^k$ ,  $e_{dd} = e_{ij} d^i d^j$ .

При  $l_1/\beta_1 = -1/2$  первые три слагаемых представляют собой верхнюю производную Ли-Олдроида [7], которая используется в условии замороженности компонент вектора (3.8). Таким образом, если  $\beta_1 = -2l_1$  и  $\pi_i = 0$  уравнение (4.29) сводится после исключения  $\lambda$  и учета соотношений  $\hat{g}_{pq} \hat{d}^p \hat{d}^q = 1$ ,  $e_{dd} = \frac{1}{2} \hat{d}^p \hat{d}^q \frac{d \hat{g}_{pq}}{dt}$  к уравнению

$$\frac{d \hat{d}^p}{dt} + e_{dd} \hat{d}^p = 0,$$

решение которого имеет вид

$$\hat{d}^p = \frac{\hat{d}_0^p}{|\mathbf{d}_0|},$$

где  $\hat{d}_0^p$  – начальные значения лагранжевых компонент вектора ориентации  $\mathbf{d}$ .

Итак, с точностью до величины модуля, вектор  $\mathbf{d}$  выражается через замороженный в среду вектор  $\mathbf{d}_0$ . Таким образом, уравнения для определения директора в случае жидкого кристалла в таком приближении, если опустить вязкость и теплопроводность, совпадают с условием замороженности вектора

ориентации (3.8) для простых анизотропных жидкостей из главы 3, если в последнем ввести нормировку вектора  $\mathbf{A}$ , используя множитель Лагранжа. Заметим, что уже при скоростях  $v \approx 10^{-4}$  м/с и характерном размере  $l = 10^{-3}$  м при приведении уравнения (4.29) к безразмерному виду в слагаемом  $\pi_i/\beta_1$  возникает малый параметр  $\varepsilon = K/\lambda vl \approx 10^{-2}$ . Это означает, что при наличии движения вклад упругости ориентации в уравнение для определения  $\mathbf{d}$  мал и им можно пренебречь. Для МББА  $2l_1/\beta_1 = -1.03$ , что позволяет при рассмотрении некоторых динамических процессов с хорошей точностью перейти от модели НЖК к моделям сред с замороженной ориентацией.

Известно также, что для сред, молекулы которых имеют сплюснутую, дискообразную форму, с хорошей точностью  $l_1/\beta_1$  близко к  $1/2$  [19], что при аналогичных предположениях о незначительном влиянии упругости ориентации приводит к уравнениям для вектора с замороженными в среду ковариантными компонентами (3.6).

#### 4.6. Поверхностная энергия

Для замыкания системы уравнений (4.8)–(4.15) необходимо задать еще  $F_\Sigma$  как функцию  $d_n$ . Принято рассматривать несколько моделей для определения вектора ориентации на границе раздела нематик-твердая стенка [16] или нематик-изотропная среда [23]. Например, можно считать заданным направление  $\mathbf{d}$  на границе. Как правило,  $\mathbf{d} \parallel \mathbf{n}$  или  $\mathbf{d} \perp \mathbf{n}$ . При  $\mathbf{d} \parallel \mathbf{n}$  направление  $\mathbf{n}$  называют осью сильного ориентирования, а такие граничные условия характерны при сильном взаимодействии между молекулами нематика и внешней средой. Если  $\mathbf{d} \perp \mathbf{n}$ , то возможны два случая: вектор  $\mathbf{d}$  может свободно вращаться в плоскости, касательной к границе, или его направление также строго фиксировано. Другая модель связана с введением так называемой оси легкого ориентирования – вектора  $\mathbf{b}$ , который также можно считать единичным. В этом случае про  $\mathbf{b}$  известно, что он образует с нормалью  $\mathbf{n}$  фиксированный угол  $\Omega$ , величина которого также определяется характером взаимодействия нематика с внешней средой и в задачах о нахождении поля ориентации является заранее заданной величиной, как и коэффициенты вяз-

кости или константы Франка  $K_i$ . При этом фиксированным является только угол  $\Omega$ , а сам вектор  $\mathbf{b}$  может свободно вращаться по конусу с осью  $\mathbf{n}$  и углом  $\Omega$  между осью и образующими. Поскольку в теории нематических жидких кристаллов постулируется эквивалентность всех уравнений при замене  $\mathbf{d} \rightarrow -\mathbf{d}$ , и, кроме этого, предполагается, что поверхностная энергия  $F_\Sigma$  не зависит от производных  $\mathbf{d}$ , поэтому  $F_\Sigma$  должна быть функцией от переменной  $d_b^2$ . Обычно в теории жидких кристаллов рассматривается функция  $F_\Sigma$  в виде, предложенном Рапини:

$$F_\Sigma = \alpha + \frac{1}{2}\beta(1 - d_b^2), \quad (4.30)$$

где  $\alpha, \beta$  – положительные постоянные, численный порядок которых  $\alpha \approx 0.04$  Н/м,  $\beta \approx 10^{-8} \div 10^{-3}$  Н/м [34,38] и зависит от физико-химических свойств контактной поверхности. Существуют также модели, в которых вместо скалярного произведения в (4.30) берутся другие функции [4], однако при малых отклонениях угла от оси ориентирования они хорошо аппроксимируются моделью Рапини.

Так как вектор  $\mathbf{b}$  является дополнительной независимой величиной, то он должен варьироваться отдельно от остальных переменных. Поэтому в (4.2) необходимо добавить варьирование ориентации  $\mathbf{b}$  при заданной величине  $b_n = \cos \Omega$ , причем всегда можно считать, что  $\Omega \in [0, \pi/2]$ .

Для определения  $\mathbf{b}$  изучим случай общего положения, когда  $\mathbf{d} \neq \mathbf{n}$ , и  $\mathbf{b} \neq \mathbf{n}$  и рассмотрим не саму функцию  $F_\Sigma$ , а только ее аргумент  $d_b^2$ , считая векторы  $\mathbf{d}$  и  $\mathbf{n}$  фиксированными. Тогда для вектора  $\mathbf{b}$  справедливо разложение:

$$\mathbf{b} = b_1\mathbf{n} + b_2\mathbf{d} + b_3\mathbf{k},$$

где  $\mathbf{k}$  – единичный вектор, ортогональный  $\mathbf{n}$  и  $\mathbf{d}$ . Тогда

$$(\mathbf{d}, \mathbf{b})^2 = (b_1d_n + b_2)^2, \quad (4.31)$$

причем

$$1 = |\vec{b}|^2 = b_3^2 + b_1^2 + b_2^2 + 2b_1b_2d_n. \quad (4.32)$$

После исключения  $2b_1b_2d_n$  из (4.31)-(4.32) следует, что  $(\mathbf{d}, \mathbf{b})^2$  при фиксированных  $\mathbf{d}, \mathbf{n}$  увеличивается, а внутренняя энергия

поверхностного натяжения – уменьшается, когда вектор  $\mathbf{b}$  лежит в одной плоскости с  $\mathbf{d}$  и  $\mathbf{n}$  и  $b_3 = 0$ , поскольку его можно поворачивать вокруг  $\mathbf{n}$ . Тогда при  $d_n \neq 1$  имеем:

$$\mathbf{b} = b_1 \mathbf{n} + b_2 \mathbf{d},$$

$$b_n^2 = b_1^2 + b_2^2 d_n^2 + 2b_1 b_2 d_n, \quad (4.33)$$

$$b_1^2 + b_2^2 + 2b_1 b_2 d_n = 1. \quad (4.34)$$

Из (4.33), (4.34) следует, что  $b_2^2 + b_n^2 - b_2^2 d_n^2 = 1$ ,

$$b_2 = \pm \sqrt{\frac{1 - b_n^2}{1 - d_n^2}}. \quad (4.35)$$

Из (4.33) и (4.35) можно выразить  $b_1$ :

$$b_1 = b_n \mp d_n \sqrt{\frac{1 - b_n^2}{1 - d_n^2}}. \quad (4.36)$$

Из (4.31) и (4.36) окончательно получим

$$\begin{aligned} (\mathbf{d}, \mathbf{b})^2 &= (b_1 d_n + b_2)^2 = \left[ \left( b_n \mp d_n \sqrt{\frac{1 - b_n^2}{1 - d_n^2}} \right) d_n \pm \sqrt{\frac{1 - b_n^2}{1 - d_n^2}} \right]^2 = \\ &= (\sqrt{(1 - b_n^2)(1 - d_n^2)} \pm d_n b_n)^2 \leq (\sqrt{(1 - b_n^2)(1 - d_n^2)} + |d_n b_n|)^2. \end{aligned}$$

Таким образом, от функции  $F_\Sigma = F_\Sigma(\mathbf{d}, \mathbf{b}, \mathbf{n})$  можно перейти к функции  $F_\Sigma = F_\Sigma(d_n)$  вида:

$$F_\Sigma = \alpha + \frac{1}{2} \beta (1 - (\sqrt{(1 - b_n^2)(1 - d_n^2)} + |d_n b_n|)^2). \quad (4.37)$$

Также в выражение для поверхностной энергии можно включить дивергентное слагаемое из внутренней энергии Франка (4.23), которое на поверхности имеет вид:

$$\frac{1}{2} K_{24} n_i (d^k \nabla_k d^i - d^i \operatorname{div} \mathbf{d}).$$

#### 4.7. Различные виды записи системы уравнений модели нематика

В ряде работ использовалась форма записи тензора вязких напряжений в несимметричном виде, предложенном Лесли [39]:

$$\begin{aligned} \tau_{ij} = & \eta_1 e_{ij} + \eta_2 d_i e_{jk} d^k + \eta_3 d_j e_{ik} d^k + \eta_4 d_i d_j e_{kl} d^k d^l + \\ & + \eta_5 d_i D_J d_j + \eta_6 d_j D_J d_i \end{aligned} \quad (4.38)$$

при этом выражение для вектора ориентационной вязкости  $L_i$  принимает вид:

$$L_i = \gamma_1 D_J d_i + \gamma_2 e_{ij} d^j, \quad (4.39)$$

Коэффициенты  $\eta_i$  однозначно выражаются введенные выше  $\lambda_i$  и наоборот. Из принципа Онзагера в этом случае следует, что

$$\gamma_1 = \eta_5 - \eta_6 \quad \gamma_2 = \eta_2 - \eta_3, \quad (4.40)$$

$$\eta_2 - \eta_3 = \eta_5 + \eta_6. \quad (4.41)$$

Для МББА  $\eta_1 = 83$ ,  $\eta_2 = -35$ ,  $\eta_3 = 46$ ,  $\eta_4 = 6, 5$ ,  $\eta_5 = -1$ ,  $\eta_6 = -77, 5$  (мПа·с). Для сравнения для воды в тех же единицах  $\eta_1 = 2$ , остальные – нули. Отметим также, что равенство (4.41) для МББА выполняется приблизительно.

Кроме того, второй закон термодинамики, связанный с неотрицательностью правой части равенства (4.26) требует выполнения неравенств:

$$\eta_1 \geq 0, \quad \eta_1/2 + \eta_2 + \eta_3 + \eta_4 \geq 0, \quad \eta_5 - \eta_6 \geq 0,$$

$$4(2\eta_1 + \eta_2 + \eta_3)(\eta_5 - \eta_6) - (\eta_5 + \eta_6 + \eta_2 - \eta_3)^2 \geq 0.$$

Эти неравенства выполняются для МББА.

Приведем полную систему уравнений для модели несжимаемого нематического жидкого кристалла в форме Лесли в этом случае:

$$\nabla_i v^i = 0, \quad (4.42)$$

$$\rho \frac{dv^i}{dt} + \nabla^i (p + \rho F_1) = \rho F^i + \nabla_j \tau^{ij}, \quad (4.43)$$

$$\rho I_1 \frac{d^2 d^i}{dt^2} = \rho \nabla_j \left( \frac{\partial F_1}{\partial \nabla_j d_i} \right) - \rho \frac{\partial F_1}{\partial d_i} + L^i + \lambda d^i, \quad (4.44)$$

Отметим, что выписанная система уравнений (4.38)-(4.44) по виду отличается от системы (4.8)-(4.12). Например, в уравнении (4.43) слагаемое  $\nabla_j \left( \rho \frac{\partial F_1}{\partial d^k_{,j}} d^k_{,i} \right)$  преобразовано к виду  $\nabla^i \rho F_1$ . Также вектор  $\mathbf{L}$  в системе Лесли отличается от  $\mathbf{L}_1$  в системе (4.8)-(4.12) противоположным знаком, при этом стоит в другой части уравнения по сравнению с (4.9). Тензор вязких напряжений Лесли  $\boldsymbol{\tau}$  и вектор  $\mathbf{L}$  можно получить, если в уравнении (4.8) сделать переобозначения, объединив все вязкие члены в один антисимметричный тензор (индекс 1 означает, что берутся величины в обозначениях параграфов 4.1 и 4.4):

$$\tau^{ij} = \tau_1^{ij} - L_1^{[i} d^{j]},$$

добавив к симметричному тензору вязких напряжений антисимметричную часть, связанную с вектором  $\mathbf{L}_1$ . Величины  $\mathbf{L}$  и  $\mathbf{L}_1$  связаны соотношением:

$$L^i = -L_1^i - 2l_1 d^i e_{kl} d^k d^l.$$

В литературе также встречается еще один вариант записи уравнений движения:

$$\rho \frac{dv^i}{dt} + \nabla^i (p + \rho F_1) = \rho F^i + \nabla_j (L^j d^i) + \nabla_j \tau_2^{ij},$$

который можно получить если в соотношении (4.12) сделать следующее преобразование:

$$\tau_1^{ij} - L_1^{[i} d^{j]} = \tau_1^{ij} - \frac{1}{2} L_1^i d^j + \frac{1}{2} L_1^j d^i = \tau_2^{ij} + L^j d^i.$$

При этом как численные значения коэффициентов вязкости у слагаемых, входящих в выражения для соответствующих компонент  $\tau_{ij}$  и  $L_i$ , так и соотношения между ними, во всех выписанных случаях будут разными. Однако, если выписать все уравнения только в переменных  $\mathbf{v}$  и  $\mathbf{d}$ , то во всех трех случаях коэффициенты при соответствующих слагаемых будут совпадать.

Кроме того, в силу антисимметричности тензора вязких напряжений в уравнении (4.43), нужно следить по какому индексу (первому или второму) матрицы компонент тензора вязких

напряжений происходит свертка с оператором ковариантного дифференцирования. В выписанных выше уравнениях суммирование идет по второму индексу, если производить его по первому, то при вычислениях надо поменять местами величины коэффициентов  $\eta_2$  и  $\eta_3$ ,  $\eta_5$  и  $\eta_6$  в уравнениях (4.38), (4.40), (4.41).

Кроме системы обозначений Лесли, существует также система, предложенная Месовичем [41], который впервые обнаружил анизотропию вязких напряжений. Коэффициенты вязкости Месовича и Лесли связаны соотношениями:

$$\nu_1 = \frac{1}{2}(\eta_1 + \eta_3 - \eta_6), \quad \nu_2 = \frac{1}{2}(\eta_5 + \eta_1 + \eta_2), \quad \nu_3 = \eta_1, \quad \nu_{12} = \eta_4.$$

Такая система обозначений удобна с практической точки зрения, поскольку во многих экспериментах по определению вязких коэффициентов при помощи сдвиговых течений измеряются коэффициенты Месовича [3].

Предположим в дальнейших выкладках, что  $I_1 \equiv 0$ , поскольку, как было показано выше, слагаемое, связанное с инерцией ориентации, дает незначительный вклад в уравнения движения в большинстве экспериментов. Можно исключить неопределенный множитель Лагранжа  $\lambda$  из (4.44), умножив это уравнение на оператор ортогонального проектирования на плоскость с нормалью  $\mathbf{d}$  (3.17):

$$\left(\delta_i^j - d^j d_i\right) \left(\rho \nabla_j \left(\frac{\partial F_1}{\partial \nabla_j d_i}\right) - \rho \frac{\partial F_1}{\partial d_i} + L^i\right) = 0, \quad (4.45)$$

причем из трех уравнений (4.45) независимыми будут только два, а скалярно умножая их на  $\mathbf{d}$ , получаем тождество  $0 \equiv 0$ .

Вместо уравнения (4.44) для  $\mathbf{d}$  можно также использовать уравнение внутреннего момента количества движения [7], которое получается после векторного умножения (4.45) на  $\mathbf{d}$  и выражения компонент вектора  $\mathbf{L}$  через компоненты тензора вязких напряжений  $\tau_{ij}$ :

$$\nabla_j \left(\rho \varepsilon^{ikl} d_k \frac{\partial F_1}{\partial \nabla_j d^l}\right) = \varepsilon^{ijk} \left(-\rho \frac{\partial F_1}{\partial \nabla^k d^l} \nabla_j d^l + \tau^{jk}\right). \quad (4.46)$$

Отметим, что уравнения (4.46) в случае, когда силами упругости ориентации можно пренебречь, сводится к условию сим-



метрии тензора вязких напряжений:

$$\tau^{ij} = \tau^{ji}. \quad (4.47)$$

Уравнение моментов (4.46) также позволяет выразить производную директора  $D_J \mathbf{d}$  через пространственные производные  $\mathbf{d}$  и скорости  $\mathbf{v}$ :

$$\begin{aligned} D_J d^i = & \frac{(\delta_j^i - d^i d_j)}{(\eta_5 - \eta_6)} \left( -\rho \frac{\partial F_1}{\partial d_j} + \rho \nabla_k \frac{\partial F_1}{\partial \nabla_k d_j} \right) + \\ & + \frac{(\delta_j^i - d^i d_j)}{(\eta_5 - \eta_6)} \left( (\eta_3 - \eta_2) e_k^j d^k \right), \end{aligned} \quad (4.48)$$

в результате чего ее можно исключить из тензора вязких напряжений  $\boldsymbol{\tau}$ , входящего в уравнение движения. После этого, используя малый параметр  $\rho K / \eta^2$  (для МББА  $\rho K / \eta^2 = 3,7 \cdot 10^{-6}$ ), можно, в зависимости от числа Рейнольдса, выписывать приближенные уравнения. Некоторые приближения позволяют получать точные решения для поля скорости и директора, такие решения будут рассмотрены ниже.

## 5. Примеры точных решений уравнений движения нематика

### 5.1. Сдвиговые течения нематиков

Изучим важный с точки зрения приложений тип решений – сдвиговые течения нематика. Такие решения важны как с теоретической так и с практической точки зрения, поскольку, используя их, можно определять экспериментально, например, величину коэффициентов вязкости. Сдвиговые течения изучались еще в 30-е годы М. Месовичем [41] и В. Н. Цветковым [3], такие решения приведены в статьях Ф. Лесли [39], в которых он выводил уравнения гидродинамики нематиков, они обсуждались также в работах [31,32,47].

Во многих экспериментах по измерению вязкости можно указать следующие порядки значений физических величин: характерный линейный размер  $h \sim 10^{-4} \div 10^{-3}$  м (например, тол-

щина пленки жидкого кристалла или капилляра вискозиметра), скорость  $V \sim 10^{-5} \div 10^{-3}$  м/с. Используя эти две параметра течения, а также коэффициенты вязкости  $\eta_i$  и упругости ориентации  $K_i$ , можно составить безразмерный параметр (коэффициенты  $K$  и  $\eta$  взяты для МББА)  $\varepsilon = \frac{K}{Vh\eta} < 10^{-4} \ll 1$ , который указывает на незначительное влияние сил упругости ориентации по сравнению с вязкими силами в таких задачах. В этом случае система уравнений движения нематика (4.43)-(4.44) примет вид:

$$\begin{aligned} \tau^{ij} - \tau^{ji} &= 0, \\ \rho \frac{dv^i}{dt} + \nabla^i(p - \rho U_g) &= \nabla_j \tau^{ij}. \end{aligned} \quad (5.1)$$

Будем искать одномерные стационарные решения в виде:

$$\mathbf{v} = (u(y), 0, 0),$$

$$\mathbf{d} = (\cos \varphi(y) \sin \theta(y), \sin \varphi(y) \sin \theta(y), \cos \theta(y)),$$

направив ось  $x^1 = x$  вдоль вектора скорости, а оси  $x^2 = y$  и  $x^3 = z$  – перпендикулярно ему. Тогда из уравнения  $\tau_{12} - \tau_{21} = 0$  получим:

$$(d_1)^2(\eta_2 - \eta_3 + \eta_5 - \eta_6) + (d_2)^2(\eta_3 - \eta_2 + \eta_5 - \eta_6) = 0. \quad (5.2)$$

Возможны три решения уравнения (5.2), два из которых можно объединить в один класс:

$$\text{А) } \cos 2\varphi = \frac{\eta_6 - \eta_5}{\eta_2 - \eta_3} = \chi, \text{ тогда } \varphi = \pm \frac{1}{2} \arccos \chi, \theta = \pi/2;$$

$$\text{В) } \theta = 0.$$

Отметим, что ориентация директора в обоих случаях постоянна во всем потоке и не зависит от скорости. Из соотношения (4.41) следует, что в случае А должно быть  $\varphi = 0$ , однако для большинства нематиков этот угол отличен от 0, для МББА  $\varphi = \pm 9,6^\circ$ . Также существуют вещества, для которых  $\chi > 1$  [17], для таких веществ решения первого типа не существует, а возможно только однородное решение В.

Пусть анизотропная часть поверхностной энергии равна нулю. В этом случае при плоской поверхности краевые условия

приводят к соотношениям только для вектора скорости и давления: к условию прилипания на твердой стенке и к условиям непрерывности нормальной составляющей вектора напряжений и равенства нулю касательной составляющей вектора вязких напряжений на свободной границе. Найдем выражение для скорости при каждом из найденных решений для вектора ориентации.

1) Изучим поток между двумя пластинами (течение Куэтта). Пусть расстояние между пластинами равно  $H$ , нижняя пластина (плоскость  $y = 0$ ) неподвижна, верхняя ( $y = H$ ) движется с постоянной скоростью  $U$  параллельно нижней, сила тяжести отсутствует. Тогда из первого уравнения (5.1) для любого возможного направления директора следует  $\frac{d^2 u}{dy^2} = 0$ , что, с учетом условий прилипания на стенках, дает решение  $u = Uy/H$ , не зависящее от вектора ориентации. Давление в потоке определяется из второго уравнения (5.1) с точностью до постоянной  $p_0$ :

$$p = p_0 + \frac{U}{H} \left( \frac{\eta_2 + \eta_3 + \eta_5 + \eta_6}{2} d_2 + \eta_4 (d_2)^3 \right) d_1.$$

2) Рассмотрим задачу о равномерном стекании тонкой пленки однородного НЖК толщины  $H$  по наклонной поверхности с углом наклона  $\alpha$  под действием постоянной силы тяжести. Пусть плоскость задана уравнением  $y = 0$ , а сила тяжести в такой системе координат имеет направление  $\mathbf{g} = (\sin \alpha, -\cos \alpha, 0)$ . Тогда система (5.1) принимает вид:

$$\nabla_2 \tau^{12} = -\rho g \sin \alpha, \quad (5.3)$$

$$\nabla_2 (\tau^{22} - p) = \rho g \cos \alpha. \quad (5.4)$$

Пренебрегая взаимодействием нематика с внешней средой, из условия равенства нулю касательных напряжений, получим, что при  $y = H$  выполняется условие  $du/dy = 0$ . С учетом этого условия и условия прилипания на дне, решение системы (5.3), (5.4) имеет вид:

$$\begin{aligned} \text{А) } u &= \frac{\rho g y (2h - y)}{2b} \sin \alpha, \\ p &= \frac{\rho g (h - y)}{2D} (2D \cos \alpha + (\eta_5 + \eta_6) \cos \varphi \sin \alpha), \end{aligned}$$

$$\text{где } D = \eta_1 + \eta_2 \cos^2 \varphi + \eta_3 \sin^2 \varphi + \frac{\eta_4}{4} \sin^2 2\varphi + \\ + \frac{\eta_6}{2} \sin^2 \varphi - \frac{\eta_5}{2} \cos^2 \varphi, \quad D > 0 \quad \text{для МББА.}$$

$$\text{В) } u = \frac{\rho g y}{\eta_1} (2h - y) \sin \alpha, \quad p = \rho g (h - y) \cos \alpha$$

Таким образом, решения для течения пленки нематика могут отличаться от решения для изотропной жидкости ( $\eta_1 \neq 0$ , остальные нули  $\eta_i = 0$ ) только коэффициентами в выражениях для скорости и давления.

Отметим, что полученные решения существуют и в том случае, когда в уравнениях движения и ориентации присутствуют слагаемые, связанные с наличием упругости ориентации.

Если учесть, что вблизи стенок направление вектора ориентации может не совпадать с направлением, вырабатываемым потоком, то можно рассмотреть задачу о пограничном слое в таком потоке, когда вблизи стенок упругостью ориентации не пренебрегают [39], кроме того в ряде работ изучалась устойчивость подобных течений [40,42].

## 5.2. Поверхностные волны

### 5.2.1. Постановка задачи

Изучим задачу о распространении коротких гармонических волн малой амплитуды вдоль поверхности несжимаемого нематического жидкого кристалла с анизотропным поверхностным натяжением [15,37]. Будем рассматривать приближение Озеена для объемной фазы. Модель Озеена обладает дополнительной группой симметрии [30], связанной с независимым вращением вектора  $\mathbf{d}$ , что значительно упрощает систему уравнений и позволяет полностью провести исследования поставленной задачи в элементарной форме. В этом случае тензор вязких напряжений будет таким же, как и для изотропной жидкости ( $\tau^{ij} = 2\mu e^{ij}$ ), а выражение для внутренней энергии Франка можно переписать в виде

$$\rho F_1 = \frac{1}{2} K (\nabla_i d_j)(\nabla^i d^j) + \frac{1}{2} K_{24} ((\nabla_i d_j)(\nabla^j d^i) - (\nabla_k d^k)^2). \quad (5.5)$$

Тогда уравнения, описывающие движение жидкости и поведение ее ориентации в гравитационном поле  $\mathbf{g}$  при пренебрежении внутренним моментом количества движения, имеют вид:

$$\nabla_i v^i = 0, \quad (5.6)$$

$$\rho \frac{dv^i}{dt} = \nabla_j p^{ij} + \rho g^i, \quad (5.7)$$

$$\left( \delta_k^j - d^j d_k \right) \nabla_i \frac{\partial F_1}{\partial \nabla_i d^j} = 0, \quad (5.8)$$

$$p^{ij} = -\rho \nabla^i d^k \frac{\partial F_1}{\partial \nabla_j d^k} - p g^{ij} + 2\mu e^{ij}.$$

Также на свободной границе, кроме кинематического соотношения  $v_n = D$ , имеют место условия (4.13)-(4.15), которые в данной задаче, при предположении о невесомости и идеальности внешней среды, принимают вид:

$$p_i^j n_j = \nabla_\alpha \sigma_i^\alpha - p_a n_i, \quad (5.9)$$

$$\left( \delta_k^j - d^j d_k \right) \left( \frac{\partial F_1}{\partial \nabla_i d^j} n_i + \frac{dF_\Sigma}{d d_n} n_j \right) = 0, \quad (5.10)$$

$$F_\Sigma = \alpha + \frac{\beta}{2} \left( 1 - (\sin \Omega \sqrt{1 - d_n^2} + \cos \Omega |d_n|)^2 \right),$$

где  $\Omega$  – заданный угол между осью легкого ориентирования и нормалью,  $D$  – нормальная скорость движения поверхности,  $p_a$  – внешнее давление.

Поверхностная ковариантная производная  $\nabla^\alpha$ ,  $\alpha = 1, 2$ , вычисляется по метрике  $a_{\alpha\beta} = g_{ij} x_\alpha^i x_\beta^j$ , где  $x_\alpha^i = \partial x^i / \partial u^\alpha$  – компоненты касательных векторов,  $u^\alpha$  – координаты на поверхности.

Уравнения движения (5.7) с помощью второго уравнения системы (5.8) могут быть упрощены до уравнений

$$\rho \frac{dv^i}{dt} + \nabla^i (p + \rho F_1) = \mu \Delta v^i + \rho g^i.$$

Таким образом, для модели Озеена после переопределения давления  $p$  уравнение движения и уравнения ориентации полностью разделяются и искомые величины остаются связанными только краевыми условиями.

Слагаемое в (5.5) с коэффициентом  $K_{24}$  представляет собой дивергентный член, который не дает вклад в уравнения движения (5.7) и ориентации (5.8), однако существенно влияет на краевые условия (5.9) и (5.10). В силу векторного условия (5.8) соотношение (5.9) можно разделить на касательную и нормальную составляющие [18]:

$$e_{\alpha n} = 0, \quad (5.11)$$

$$\begin{aligned} 2\mu e_{nm} + d^\alpha \nabla_\alpha \left( \frac{dF_\Sigma}{d d_n} \right) + \nabla_i d^i \frac{dF_\Sigma}{d d_n} &= \\ = b_\alpha^\alpha \left( F_\Sigma - d_n \frac{dF_\Sigma}{d d_n} \right) + p - p_a, \end{aligned} \quad (5.12)$$

где  $b_{\alpha\beta}$  – компоненты второго фундаментального тензора поверхности,  $d^\alpha$  – компоненты касательной составляющей вектора ориентации.

### 5.2.2. Гармонические поверхностные волны

Рассмотрим задачу о распространении простых гармонических волн малой амплитуды вдоль поверхности ориентируемой жидкости с бесконечной глубиной в однородном гравитационном поле. Выберем декартову систему координат  $x, y, z$  так, чтобы ось  $z$  была направлена противоположно силе тяжести  $\mathbf{g}$ , а ось  $x$  – вдоль горизонтальной составляющей волнового вектора  $\mathbf{k}$ . В общем случае в декартовых координатах вектор  $\mathbf{d}$  имеет вид

$$\mathbf{d} = (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta).$$

Тогда в основном состоянии равновесия жидкости  $\theta_0 = \Omega$  и  $\varphi_0$  – заданные постоянные углы при линейном распределении давления  $p_0 = p_a - \rho g z$ .

В случае общего положения, когда  $\Omega > 0$ , линеаризованные уравнения системы (5.6)-(5.8) для возмущений имеют вид:

$$\nabla_i v^i = 0, \quad \rho v_t^i + \nabla^i \tilde{p} = \mu \Delta v^i, \quad \Delta \tilde{\theta} = 0, \quad \Delta \tilde{\varphi} = 0. \quad (5.13)$$

Здесь индексом  $t$  обозначена частная производная по времени. Вырожденный случай  $\Omega = 0$  приводит к уравнению для  $\tilde{\varphi}$

переменными коэффициентами. При этом результаты соответствуют формулам общего положения, взятым при  $\Omega \rightarrow 0$ .

Рассмотрим решение уравнений (5.13) вида

$$\begin{aligned} v^i &= \operatorname{Re}(u^i(z) E), & \tilde{p} &= \operatorname{Re}(q(z) E), \\ \tilde{\theta} &= \operatorname{Re}(r(z) E), & \tilde{\varphi} &= \operatorname{Re}(s(z) E) \end{aligned}$$

с формой свободной поверхности  $z = \operatorname{Re}(Q E)$ , где  $k$  – вещественное положительное число,  $Q$  – комплексная постоянная и

$$E = \exp(i(\omega t - k x)).$$

Тогда используя линеаризованные краевые условия (5.11), (5.12) и условие затухания возмущений всех искомых функций при  $z \rightarrow -\infty$ , получим:

$$\begin{aligned} v_1 &= -i(A \exp(kz) + Bl/k \exp(lz)), & v_2 &= 0, \\ v_3 &= A \exp(kz) + B \exp(lz), & q &= -i\rho A\omega/k \exp(kz), \\ r &= C \exp(kz), & s &= i\gamma \sin \varphi_0 r(z), \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} A &= -B \left( 1 + \frac{i\omega\rho}{2\mu k^2} \right), & l &= k \sqrt{1 + \frac{i\omega\rho}{\mu k^2}}, \\ Q &= -\frac{\rho B}{2\mu k^2}, & C &= \frac{i k \beta \cos \varphi_0 Q}{k K (1 - (\gamma \sin \Omega \sin \varphi_0)^2) + \beta}, \end{aligned}$$

$\gamma = K_{24}/K$ ,  $B$  – произвольная комплексная постоянная.

Кроме этого имеет место дисперсионное соотношение

$$\rho(\omega^2 - k g) - \tilde{\alpha}(k) k^3 = 4\mu k^2 (i\omega + (1 - l/k) \mu k^2 / \rho), \quad (5.14)$$

$$\tilde{\alpha} = \alpha + \frac{\cos \varphi_0^2 \beta k K}{kK + \beta / (1 - (\gamma \sin \Omega \sin \varphi_0)^2)},$$

решение которого определяет величину частоты  $\omega$ .

Исследование соотношения (5.14) показывает, что если  $|\gamma| > 1/\sin \Omega$ , то при подходящем невозмущенном угле  $\varphi_0$ , зависящем от горизонтальной составляющей волнового вектора, всегда существуют такие  $k$ , для которых  $\operatorname{Im} \omega < 0$ , что дает неустойчивость поверхности.

Обычно при моделировании полагают  $\gamma = 0$ , тогда всегда  $s \equiv 0$ , т.е. собственно в модели Озеена отсутствует вращение вектора ориентации вокруг вертикальной оси. В случае когда волновой вектор направлен так, что  $\cos \varphi_0 = 0$ , т.е. волна идет перпендикулярно горизонтальной проекции вектора  $\mathbf{d}_0$ , а возмущения обоих углов равны нулю.

Приведем также асимптотики частоты при малых и больших числах Рейнольдса:

$$\omega \approx i \frac{\rho g + \tilde{\alpha} k^2}{2\mu k}, \quad \text{при} \quad \frac{|\omega|\rho}{\mu k^2} \rightarrow 0;$$

$$\omega \approx 2i\mu k^2/\rho + \sqrt{gk + \tilde{\alpha} k^3/\rho}, \quad \text{при} \quad \frac{|\omega|\rho}{\mu k^2} \rightarrow \infty.$$

### 5.3. Задача о равновесии капли

#### 5.3.1. Постановка задачи

Важное прикладное значение имеет задача о равновесии капли НЖК, погруженной в изотропную среду, поскольку решение такой задачи позволяет определять, например, коэффициенты поверхностного натяжения [43,44]. Рассмотрим в рамках модели нематического жидкого кристалла задачу о равновесии капли, погруженной в изотропную жидкость [18,37]. Пусть обе жидкости несжимаемы, с постоянной одинаковой плотностью  $\rho$  и находятся в поле силы тяжести. Будем считать, что температура среды постоянна и однородна, движение в капле и в жидкости отсутствует. Тогда из уравнений (4.42)-(4.45) следует исключить все слагаемые, содержащие скорость, производные от температуры и производные по времени и они примут вид:

$$\nabla_i(p + \rho F_1 - \rho U_g) = 0, \quad (5.15)$$

$$\left( \delta_k^j - d^j d_k \right) \left( \frac{\partial F_1}{\partial d^j} - \nabla_i \left( \frac{\partial F_1}{\partial \nabla_i d^j} \right) \right) = 0. \quad (5.16)$$

Краевые условия (4.13)-(4.14) для статической задачи принимают вид

$$p_i^j n_j = \nabla_\alpha \sigma_i^\alpha - p_e n_i, \quad (5.17)$$



$$\left(\delta_k^j - d^j d_k\right) \left(\rho \frac{\partial F_1}{\partial \nabla_i d^j} n_i + \frac{dF_\Sigma}{d d_n} n_j\right) = 0, \quad (5.18)$$

$$\sigma_\alpha^i = F_\Sigma x_\alpha^i - \frac{dF_\Sigma}{d d_n} d_l x_\alpha^l n^i.$$

Уравнение (5.15) позволяет определить давление

$$p = \rho(U_g - F_1) + \text{const}, \quad (5.19)$$

которое затем можно исключить для независимой формулировки задачи о распределении ориентации и формы капли.

При наличии ребер (или в пределе пиков) на поверхности капли, специально не организованных внешними условиями типа подвески или опоры [20], следует принять условие уравновешенности линейных сил (4.16), вычисленных по обе стороны от ребра. В силу наличия члена, содержащего нормаль к поверхности в (4.15), линейная сила имеет в общем случае отрывающую составляющую, присутствие которой не характерно для поверхностного натяжения изотропных жидкостей.

Отметим также, что в силу векторного условия (5.18) условие (5.17) сводится к одному скалярному соотношению

$$\frac{d^2 F_\Sigma}{d d_n^2} d^\alpha \nabla_\alpha d_n + \frac{dF_\Sigma}{d d_n} \nabla_i d^i = b_\alpha^\alpha \left( F_\Sigma - d_n \frac{dF_\Sigma}{d d_n} \right) + p - p_e.$$

Это обстоятельство связано с независимостью теории от выбора поверхностных координат  $u^\alpha$  и позволяет фактически варьировать только одну функцию, описывающую форму поверхности, например, в эйлеровых переменных.

### 5.3.2. Линеаризация задачи о капле

Задача о равновесии капли НЖК, взвешенной в изотропной жидкости сводится к поиску минимума для функционала вида

$$E = \int_V \rho F_1 d\tau + \int_\Sigma F_\Sigma d\sigma, \quad (5.20)$$

при заданном объеме капли  $V$ , что позволяет найти форму капли и распределение вектора ориентации внутри нее, а дав-

ление находится после этого из уравнения (5.19). Характерный размер капли нематического жидкого кристалла, при котором ее можно рассматривать как монокристалл при отсутствии внешних воздействий, упорядочивающих ориентацию, составляет  $R_0 \approx 10^{-5}$  м. С учетом порядка  $K \approx 6 \cdot 10^{-12}$  Н, из физических параметров, определяющих задачу, можно составить два безразмерных параметра:

$$\varepsilon_1 = \frac{\beta}{\alpha} \approx 10^{-1} \div 10^{-6},$$

$$\varepsilon_2 = \frac{\beta R_0}{K} \approx 10^3 \div 10^{-2}$$

и использовать их для упрощения уравнений. Физический смысл  $\varepsilon_2$  – соотношение между вкладом в суммарную энергию системы капля-жидкость анизотропной части поверхностного натяжения и энергии ориентации. Параметр  $\varepsilon_1$  позволяет оценивать соотношение между изотропной и анизотропной частями тензора поверхностных натяжений.

При  $\beta = 0$  (а значит и  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$ ) изопериметрическая задача о наименьшем значении функционала  $E$  при заданном  $V$  имеет следующее единственное решение:  $\mathbf{d} = \text{const}$ , а форма капли есть сфера. При  $\beta > 0$  задача о форме капли в силу малости параметра  $\varepsilon_1$  всегда может быть линеаризована по отклонениям от сферы. При этом, если параметр  $\varepsilon_2 \ll 1$  (случай слабой анизотропии поверхностного натяжения), то уравнения для формы капли и распределения ориентации становятся полностью линейными и их можно решать практически независимо, проверяя только согласование знаков  $\pm d_n \geq 0$  в (4.37), необходимое для минимизации функционала (5.20).

В случае сильной анизотропии, когда  $\varepsilon_2 \gg 1$ , для объемного распределения ориентации в основном приближении (чем обычно и ограничивается решение) требуется решать нелинейные уравнения (5.16), но с заданными значением  $|d_n| = \cos \Omega$  на сфере [16]. Далее форма капли находится с учетом известных значений тензора напряжений Эриксона (4.11)  $-p\delta^{ij} - q_k^i \nabla^j d^k$  на сфере. Далее будем рассматривать случай слабой анизотропии, позволяющий непосредственно определять форму капли.

Будем искать решение в классе функций, обладающих симметрией основного состояния. Уменьшение симметрии увеличивает значения  $E$ . Тогда в сферических координатах  $r, \theta, \varphi$  контравариантные компоненты векторов ориентации и нормали к поверхности капли  $r = R(\theta)$  имеют вид

$$\mathbf{d} = \left( \cos \chi, \frac{\sin \chi}{r}, 0 \right), \quad \mathbf{n} = \left( \frac{R, -R'/R, 0}{\sqrt{R^2 + R'^2}} \right).$$

Введем функцию  $u = \theta + \chi(r, \theta)$  как угол между осью симметрии капли – полярной осью и вектором  $\mathbf{d}$ . Тогда в силу симметрии искомого решения относительно экваториальной плоскости функция  $R(\theta)$  – четная, а функция  $u(r, \theta)$  – нечетная по переменной  $x = \pi/2 - \theta$ .

Функционал  $E + \lambda V$  ( $\lambda$  – множитель Лагранжа) с учетом формулы (4.37) может быть представлен в форме

$$\begin{aligned} E + \lambda V = & \pi K \int_0^\pi \int_0^R \left( r^2 u_r^2 + u_\theta^2 + \frac{\sin^2 u}{\sin^2 \theta} \right) \sin \theta dr d\theta + \quad (5.21) \\ & + 2\pi \int_0^\pi R \sqrt{R^2 + R'^2} \left( \alpha + \frac{\beta}{2} \sin^2 (\Omega - h(\zeta)) \right) \sin \theta d\theta + \\ & + \frac{2\pi\lambda}{3} \int_0^\pi R^3 \sin \theta d\theta, \\ & \zeta = \theta - u - \arctg(R'/R), \end{aligned}$$

где  $u_r, u_\theta$  – частные производные по  $r$  и  $\theta$  и введена периодическая пилообразная функция  $h = \arccos |d_n|$ :  $h(\zeta) = |\zeta|$  при  $\zeta \in [-\pi/2; \pi/2]$  с периодом  $\pi$ .

Недифференцируемость функции  $h(\zeta)$  в целом при последующей линеаризации содержащего ее члена в окрестности точек  $\zeta = \theta$  общего положения, не близких к значениям  $0, \pi/2, \pi$ , может быть учтена с помощью формулировки в точках излома соответствующих краевых условий типа отсутствия на поверхности капли внешних линейных или сосредоточенных сил. В соответствие со свойствами симметрии искомого решения

линеаризованную задачу достаточно решить только в области  $0 \leq r \leq R_0$ ;  $0 \leq \theta \leq \pi/2$ .

Пусть основное решение отвечает  $u = 0$  и  $R = R_0$ . Введем безразмерные переменные порядка единицы

$$r_1 = r/R_0, \quad y(x) = (R - R_0)/(\varepsilon_1 R_0), \quad w(r, x) = u/\varepsilon_2.$$

Тогда, оставляя в функционале (5.21) лишь главные по  $\varepsilon_1$  и  $\varepsilon_2$  члены, не выше квадратичных по  $\varepsilon_1, \varepsilon_2$  получим

$$\begin{aligned} \frac{E}{2\pi} \approx & \frac{K}{2} \int_0^\pi \int_0^{R_0} \left( r^2 u_r^2 + u_\theta^2 + \frac{u^2}{\sin^2 \theta} \right) \sin \theta dr d\theta + \\ & + R_0^2 \int_0^\pi \left[ \alpha + \frac{\beta}{2} \sin^2(\theta - \Omega) + \alpha y^2 + y\beta \sin^2(\theta - \Omega) - \right. \\ & \left. - \frac{\beta}{2} |(y' + u) \sin 2(\theta - \Omega)| + \alpha \frac{(y')^2}{2} \right] \sin \theta d\theta, \end{aligned} \quad (5.22)$$

где удержаны члены порядка

$$E \sim KR_0(\varepsilon_2^2 + \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1}(1 + \varepsilon_1 + \varepsilon_1^2 + \varepsilon_2 + \varepsilon_1\varepsilon_2)),$$

а также должно выполняться условие постоянства объема

$$\int_0^\pi y \sin \theta d\theta = 0.$$

Далее, варьируя (5.22), получим следующие уравнения для угла отклонения вектора ориентации при  $0 < r_1 < 1$ ,  $0 < x < \pi/2$

$$(r_1^2 w_{r_1})_{r_1} + \frac{(w_x \cos x)_x}{\cos x} - \frac{w}{\cos^2 x} = 0 \quad (5.23)$$

с краевыми условиями

$$w_{r_1}(1, x) = \frac{1}{2} \sin 2(x + \Omega),$$

$$w(r_1, 0) = w(r_1, \pi/2) = 0.$$

Для формы поверхности капли, переопределяя  $\lambda$ , из (5.22) имеем

$$(y' \cos x)' = (2y + \lambda_1) \cos x - \frac{1}{2} \cos(3x + 2\Omega). \quad (5.24)$$

При этом с помощью линеаризованного изопериметрического условия  $\int_0^{\pi/2} y \cos x dx = 0$  из уравнения (5.24) определяется  $\lambda_1$ . В гладком случае

$$\lambda_1 = -\frac{1}{6}(\sin 2\Omega + \cos 2\Omega).$$

В случае наличия ребер должна быть непрерывной величина

$$\left( y' + \frac{1}{2} \sin 2(x + \Omega) \right) \cos x,$$

пропорциональная радиальной составляющей суммарной на данной стороне ребра линейной силы. Следовательно, при постоянном параметре  $\Omega$  поверхность капли является всюду гладкой, возможно, за исключением полюсов. Исследование асимптотики решения уравнения (5.24) при  $x \rightarrow \pi/2$  при условии ограниченности функции  $y(x)$  и отсутствии сосредоточенных сил на полюсах капли приводит для почти всех  $\Omega$  к наличию конических пиков с  $y' = \frac{1}{2} \sin 2\Omega$ .

### 5.3.3. Точные частные решения

Укажем точные решения уравнений (5.23), (5.24). Пусть  $\Omega = 0$ , то есть ось легкого ориентирования совпадает с нормалью. Тогда

$$w = w_1 \equiv \frac{1}{4} r_1^2 \sin 2x, \quad y = y_1 \equiv \frac{1}{24} (3 \cos 2x - 1). \quad (5.25)$$

Таким образом, форма поверхности капли представляет собой сплюснутый эллипсоид вращения. Согласованность знаков переменных  $w$  и  $y'(x)$  обеспечивает минимальное значение функционала (5.22). Аналогичное решение существует и при  $\Omega = \pi/2$ . При этом знаки  $w$  и  $y$  в формуле (5.25) просто меняются на противоположные. Форма поверхности – вытянутый

эллипсоид. На рис. 7 представлена форма капли по сравнению со сферической, построенная в меридиональном сечении при  $\varepsilon_1 = 1$  для этих случаев, в силу симметрии все графики строились только в одной координатной четверти. Отметим также, что решение (5.25) для формы поверхности представляет собой второй полином Лежандра.

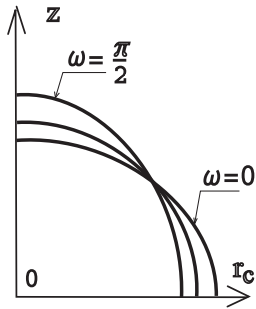


Рис. 7

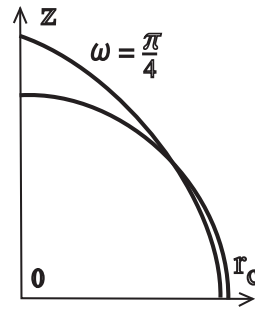


Рис. 8

Распределение линий ориентации как линий тока векторного поля  $\mathbf{d} = (r, \theta, \varphi)$  внутри капли удобно определить в меридиональной плоскости  $\varphi = 0$ , используя стандартные цилиндрические координаты  $r_c = r \sin \theta$ ,  $z = r \cos \theta$ :

$$\frac{dr_c}{dz} = \operatorname{tg} u \approx u = \varepsilon_2 w. \quad (5.26)$$

Используя решение (5.25), получим соответственно для  $\Omega = 0$  и  $\Omega = \pi/2$

$$r_c = C \exp\left(\pm \frac{\varepsilon_2 z^2}{4R_0^2}\right),$$

где постоянная  $C \in [0, 1]$ . В первом случае линии ориентации с ростом  $z$  удаляются от оси симметрии, во втором – приближаются.

### 5.3.4. Определение формы капли и поля ориентации в общем случае

В общем случае решение ищется в виде:

$$w = \cos 2\Omega w_1 + \sin 2\Omega w_2,$$

$$y = \cos 2\Omega y_1 + \sin 2\Omega y_2$$

и, таким образом, определение функций  $w_2, y_2$  сводится к решению уравнений (5.23), (5.24) для  $\Omega = \pi/4$ .

При  $\Omega = \pi/4$  уравнение (5.24), в этом случае принимает вид

$$(y' \cos x)' = \left(2y - \frac{1}{6}\right) \cos x + \frac{1}{2} \sin 3x \quad (5.27)$$

и его можно решить численно при следующих краевых условиях на концах отрезка интегрирования:  $y'(0) = 0$  и  $y'(\pi/2) = 1/2$ , например, стандартным методом прогонки. При этом точность вычислений можно контролировать путем проверки условия сохранения объема. Результаты расчетов формы капли при  $\Omega = \pi/4$  в цилиндрических координатах, при условии  $R_0 = 1$ , представлены на рис. 8 по сравнению с окружностью, соответствующей случаю изотропного поверхностного натяжения. Для наглядности представления график изображен при  $\varepsilon_1 = 1$ .

Для определения поля вектора ориентации среды при  $\Omega = \pi/4$  уравнение (5.23) решается при краевых условиях

$$w_{r_1}(1, x) = \frac{1}{2} \cos 2x,$$

$$w(r_1, 0) = w(r_1, \pi/2) = 0.$$

Введем новую функцию  $W$  так, что

$$w = -W_x(r_1, x).$$

Тогда можно показать, что, если  $W$  удовлетворяет уравнению Лапласа

$$r_1^2 \cdot \Delta W = (r_1^2 W_{r_1})_{r_1} + \frac{(W_x \cos x)_x}{\cos x} = 0, \quad (5.28)$$

то функция  $w$  будет удовлетворять уравнению (5.23). Таким образом, поиск решения сводится к осесимметричной задаче Неймана внутри шара  $r_1 < 1$ ,  $|x| \leq \pi/2$  для уравнения Лапласа для функции  $W$  при краевом условии

$$W_{r_1}(1, x) \equiv f(x) = \frac{1}{6} - \frac{1}{4}|\sin 2x|. \quad (5.29)$$

Решение задачи (5.28), (5.29) выписывается в квадратурах при помощи функции Грина второго рода [6]

$$W(r_1, x) = \frac{1}{4\pi} \int_{\Sigma} \left( \frac{2}{Z} - \ln(1 - r_1 \cos \gamma + Z) \right) f(x_0) \sin \theta_0 d\theta_0 d\varphi_0,$$

где  $r_1$  – расстояние от центра сферы до точки, в которой вычисляется  $W(r_1, x)$ ,  $\theta_0 = \pi/2 - x_0$ ,  $\theta = \pi/2 - x$ ,

$\gamma$  – угол между радиусами этой точкой и текущей точкой интегрирования, лежащей на сфере  $\Sigma$  ( $r_1 = 1$ ),

$Z$  – расстояние между этими двумя точками.

Указанные величины связаны между собой соотношением

$$Z^2 = 1 + r_1^2 - 2r_1 \cos \gamma,$$

$$\text{где} \quad \cos \gamma = \sin \theta \sin \theta_0 \cos \varphi_0 + \cos \theta \cos \theta_0,$$

$(r_1, \varphi, \theta)$  – сферические координаты точки, для которой вычисляется  $W$ ,

$(\varphi_0, \theta_0)$  – переменные интегрирования.

Таким образом, точное решение для функции  $w(r_1, x)$  имеет вид:

$$w(r, x) = \frac{1}{4\pi} \int_{\Sigma} \left( \frac{Zr_1 + r_1}{Z - Zr_1 \cos \gamma + Z^2} + \frac{2r_1}{Z^3} \right) \cdot [\sin \theta_0 \cos \theta \cos \varphi_0 - \cos \theta_0 \sin \theta] f(x_0) \sin \theta_0 d\theta_0 d\varphi_0. \quad (5.30)$$

Хотя интеграл (5.30) по видимому, не представляется в виде комбинации элементарных функций, однако его значение для любых значений  $r_1$ ,  $x$  можно определить при помощи численных методов.

Таким образом, комбинируя точное решение (5.25) и численное (5.30), а также решение уравнения (5.27), можно построить решение задачи о форме капли и распределении ориентации при любом значении  $\Omega$ .



### 5.3.5. Исследование формы капли вблизи полюса в нелинейном случае

Исследуем форму границы капли вблизи полюсов в общем случае, когда ее отклонения от сферы не обязательно малы. Для этого, варьируя функционал (5.21), получим полную систему уравнений и граничных условий для определения функции  $u(r, \theta)$  и границы  $r = R(\theta)$  и исследуем их асимптотику при  $\theta \rightarrow 0$ , предполагая существование решения для  $u$ , гладкого внутри и непрерывного в замкнутой области. Граница предполагается кусочно-гладкой с ограниченной  $R'$ .

Пусть задана некоторая форма границы  $R(\theta)$ . Тогда, варьируя  $u$ , получим следующую краевую задачу

$$(r^2 u_r)_r + \frac{(u_\theta \sin \theta)_\theta}{\sin \theta} - \frac{\sin 2\theta}{2 \sin^2 \theta} = 0 \quad (5.31)$$

$$u(r, 0) = u(r, \pi/2) = 0 \quad (5.32)$$

$$K(R^2 u_r - R' u_\theta)|_{r=R} = \frac{\beta R}{2} \sqrt{R^2 + R'^2} \sin 2(\Omega - h)$$

Последнее равенство имеет место, если  $0 < \zeta < \pi/2$ , где  $\zeta = \theta - u - \arctg(R'/R)$ , иначе требуется дополнительное уточнение знака правой части.

Вычисление асимптотики  $u$  при  $\theta \rightarrow 0$  с учетом первого краевого условия дает  $u \approx a(r)\theta$ , где  $a(r)$  – произвольная функция. В силу последнего условия (5.32) имеем при  $\theta \rightarrow 0$ :

$$-\frac{Ka(R)R'}{R\sqrt{R^2 + R'^2}} \approx \frac{\beta}{2} \sin 2(\Omega - h), \quad (5.33)$$

где  $h = -\arctg(R'/R) \geq 0$  по предположению.

Из соотношения (5.33) уже следует, что в силу ограниченности  $a(r)$  должно выполняться  $R' \neq 0$  при  $\sin 2\Omega \neq 0$  или  $\Omega \neq 0; \pi/2$ . Оказывается, предел  $R'/R$  можно найти точно, рассматривая уравнение для формы капли. Затем из (5.33) вычисляется значение  $a(R(0))$ .

С учетом соотношений (5.31)-(5.32) получим

$$\left[ \frac{R \sin \theta}{\sqrt{R^2 + R'^2}} \left( R' \left( \alpha + \frac{\beta}{2} \sin^2(\Omega - h) \right) + \frac{\beta R}{2} \sin 2(\Omega - h) \right) \right]' =$$

$$\begin{aligned}
&= \sin \theta \left[ \frac{K}{2} \left( u_\theta^2 - r^2 u_r^2 + 2R' u_r u_\theta + \frac{\sin^2 u}{\sin^2 \theta} \right)_{r=R} + \lambda R^2 + \right. \\
&\quad \left. + \frac{2R^2 + R'^2}{\sqrt{R^2 + R'^2}} \left( \alpha + \frac{\beta}{2} \sin^2(\Omega - h) \right) - \frac{\beta R R'}{2\sqrt{R^2 + R'^2}} \sin 2(\Omega - h) \right]. \tag{5.34}
\end{aligned}$$

Кроме этого, на возможных ребрах при  $\sin \theta \neq 0$  должно быть непрерывно выражение, стоящее в левой части (5.34) под знаком производной.

Рассмотрим главные члены уравнения (5.34) при  $\theta \rightarrow 0$ . Так как правая часть стремится к 0, интегрируя и дополнительно предполагая, что  $R > 0$ , получим:

$$R' \left( \alpha + \frac{\beta}{2} \sin^2(\Omega - h) \right) + \frac{\beta R}{2} \sin 2(\Omega - h) \approx 0.$$

Если ввести переменную  $z = R'/R$  и параметр  $\varepsilon_1 = \beta/al$ , то после простых преобразований получим кубическое уравнение:

$$2z + \varepsilon_1 [(z^3 + z) \cos^2 \Omega + \sin 2\Omega] = 0,$$

которое в силу положительности коэффициентов имеет единственное решение. Как было показано выше, параметр  $\varepsilon_1$  является малой величиной, поэтому можно выписать следующее уточненное значение:

$$z = -\frac{\varepsilon_1 \sin 2\Omega}{2 + \varepsilon_1 \cos^2 \Omega} + O(\varepsilon_1^4).$$

Таким образом, учет анизотропии поверхностного натяжения при  $\omega \neq 0; \pi/2$  всегда приводит к возникновению конических пиков на полюсах капли. Аналогичный эффект наблюдался для взвешенных капель магнитной жидкости [2], модель поверхностного натяжения которой по своей структуре близка к модели НЖК, и применялся для измерения физических параметров, задающих модель.

## Литература

1. *Аэро Э. Л., Булыгин А. Н.* Гидромеханика жидких кристаллов. Итоги науки и техники. Серия Гидромеханика. ВИНТИ М. 1973 т.7, с.106-213.
2. *Архипенко В. Н., Барков Ю. Д., Баштовой В. Г.* Некоторые особенности поведения капли намагничивающейся жидкости в магнитных полях. Магнитная гидродинамика, 1980, 3, с. 3-10.
3. *Беляев В. В.* Вязкость нематических жидких кристалло. М.: Физматлит, 2002. 224 с.
4. *Блинов Л. М., Кац Е. И., Сонин А. А.* Физика поверхности термотропных жидких кристаллов. УФН, Т. 152, вып. 3, с. 449-477.
5. *Бердичевский В. Л.* Вариационные принципы механики сплошной среды. М.: Наука, 1983, 448 с.
6. *Владимиров В. С.* Уравнение математической физики. Изд.4. М.: Наука, 1981, 512 с.
7. *Галлин Г. Я., Голубятников А. Н. и др.* Механика сплошных сред в задачах. М.: Московский Лицей 1996, т. 1, 395 с., т. 2, 394 с.
8. *Гельфанд И. М., Фомин С. В.* Вариационное исчисление. М.: Физматгиз, 1961.
9. *Годунов С. К.* Элементы механики сплошной среды. М.: Наука, 1978, 303 с.
10. *Голубятников А. Н.* Непрерывные группы симметрии жидких кристаллов. ДАН СССР, 1978. Т. 240, N 2. 298-301.
11. *Голубятников А. Н.* Аффинная симметрия сплошных сред. Вестн. Моск. ун-та. Сер. 1. Матем. Механ, 1997, N<sup>0</sup> 6. 56-59.
12. *Голубятников А. Н.* Аффинная симметрия сплошных сред. Успехи механики 2003, Т. 2, N<sup>0</sup> 1. 126-183.
13. *Голубятников А. Н.* Аффинная симметрия сплошных сред. М. Изд-во ЦПИ при механико-математическом факультете МГУ, 2001, 94 с.
14. *Голубятников А. Н., Калугин А. Г.* Об устойчивости несжимаемых сплошных сред с высокой аффинной симметрией. Вестн. Моск. ун-та. Сер. 1, Матем. Механ. 1996, N<sup>0</sup> 2. 59-62.

15. Голубятников А. Н., Калугин А. Г. О коротких поверхностных волнах в анизотропных жидкостях. Вестн. Моск. ун-та. Сер. 1. Матем. Механ. 2001, N<sup>0</sup> 1. 42-43.
16. Жаркова Г. М., Сонин А. С. Жидко-кристаллические композиты. Новосибирск: ВО Наука, 1994, 214 с.
17. Жен П. Ж. де Физика жидких кристаллов. М.: Мир. 1977, 400 с.
18. Калугин А. Г., Голубятников А. Н. О равновесной форме капли нематического жидкого кристалла. Труды МИРАН, 1998, N. 3. 171-177.
19. Кац Е. И., Лебедев В. В. Динамика жидких кристаллов. М.: Наука, 1988, 144 с.
20. Кочин Н. Е., Кибель И. А., Розе Н. В. Теоретическая гидромеханика. М.: Физматгиз, 1963, т. 1,2.
21. Куликовский А. Г., Любимов Г. А. Магнитная гидродинамика М.: Физматгиз, 1962, 246 с.
22. Лохин В. В., Седов Л. И. Нелинейные тензорные функции от нескольких тензорных аргументов. ПММ, 1963, т.27, N<sup>0</sup> 3. 393-417.
23. Матвеев В. Н., Кирсанов Е. А. Поверхностные явления в жидких кристаллах. М.: Изд - во МГУ, 1991, 271 с.
24. Седов Л. И. Математические методы построения новых моделей сплошных сред. Успехи матем. наук., 1965, т. 20, 5, 121-180.
25. Седов Л. И. Механика сплошной среды. Изд. 5, испр. М.: Наука, 1994, Т. 1, 2.
26. Сонин А. С. Введение в физику жидких кристаллов. М.: Наука, 1983, 320 с.
27. Сонин А. С. Лиотропные нематики. УФН, 1987. Т. 153, вып. 2. 273 - 310.
28. Чандрасекар С. Жидкие кристаллы. М.: Мир, 1980, 344 с.
29. Шубников А. В. Симметрия и антисимметрия конечных фигур. М.: Изд-во АН СССР, 1951, 172 с.
30. Эриксен Дж. Исследования по механике сплошных сред. М.: Мир, 1977, 247 с.
31. Atkin R. J. Poiseuille flow of liquid crystals of the nematic type. Arch. Rat. Mech. Anal., 1970, V. 38, N. 3, pp. 224-240.

32. *Atkin R. J., Leslie F. M.* Couette flow of nematic liquid crystals Quart. J. Mech. Appl. Math., 1970, V. 23, N. 2, pp. 3-24.
33. *Coleman B. D.* Simple liquid crystals. Arch. Rat. Mech. Anal., 1965, V. 20, N. 1. pp. 41-58.
34. *Demus D., Demus H., Zashke H.* Flussige Kristalle in Tabellen. Leipzig: Deutscher Verl. Grundstoffindustrie, 1974, 356 p.
35. *Eriksen J. L.* Continuum theory of liquid crystals of nematic type. Mol. Cryst. Liq. Cryst., 1969, V. 7, pp. 153-164.
36. *Franc F. C.* On the liquid crystals. Disc. Faraday Soc., 1958, V. 25, pp. 19-28.
37. *Golubiatnikov A. N., Kalugin A. G.* On short surface waves in nematic liquid crystals. Mol. Cryst. Liq. Cryst., 2001, V. 366, pp. 2731-2736.
38. *Kelker H., Hatz R.* Handbook of Liquid crystals. Weinheim: Verl. Chemie, 1980, 917 p.
39. *Leslie F. M.* Some constitutive equations for liquid crystals. Arch. Rat. Mech. Anal., 1968, V. 28, N. 4, pp. 265-283.
40. *McIntosh J. G., Leslie F. M., Sloan D. M.* Stability for shearing flow of nematic liquid crystals. Continuum Mech. Thermodyn., 1997, V. 9, pp. 293-308.
41. *Miesowicz M.* Nature. 1935, V.136, p. 261.
42. *Pieranski P., Guyon E.* Instability of certain shear flows in nematic liquids. Phys. Rev. A, 1974, V. 9, N. 1, pp. 404-417.
43. *Press M. J., Arrot A. S.* Theory and experimental on configurations with cylindrical symmetry in liquid crystal droplets. Phys. Rev. Lett., 1974, V. 33, N. 7, pp. 403-406.
44. *Press M. J., Arrot A. S.* Elastic Energies and director fields in liquid crystal droplets. I. Cylindrical symmetry. J. de Phys. Coll. C. 1, 1975, V. 36, N. 3, pp. 177-184.
45. *Ossen C. W.* Neue Grundlegung der Theorie der anisotropen Flüssigkeiten. Arkiv. Math., Astron., Fys., 1925, V. 19a, N. 9, pp. 16-19.
46. *Wang C.-C.* A general theory of subfluids. Arch. Rational Mech. Anal., 1965, V. 20, N. 1, pp. 1-40.
47. *White A. E., Cladis P. E., Torza S.* Study of liquid crystals in flow. Mol. Cryst. Liq. Cryst., 1977, V. 43, pp. 13-31.

## Содержание

Введение	3
<b>1 Основные типы жидких кристаллов</b>	<b>5</b>
<b>2 Групповая классификация жидких кристаллов</b>	<b>9</b>
<b>3 Простые анизотропные жидкости</b>	<b>14</b>
3.1 Уравнения движения в лагранжевой системе координат . . . . .	14
3.2 Уравнения движения в эйлеровой системе координат . . . . .	17
3.3 Волны Римана в простых анизотропных жидкостях	18
3.4 Учет релаксации ориентации . . . . .	21
<b>4 Модель нематических жидких кристаллов</b>	<b>25</b>
4.1 Вывод уравнений движения . . . . .	25
4.2 Свободная энергия Франка . . . . .	30
4.3 Свободная энергия Франка для холестериков . . .	32
4.4 Замыкание системы уравнений для нематика . . .	33
4.5 Предельный случай для уравнений эволюции директора . . . . .	35
4.6 Поверхностная энергия . . . . .	36
4.7 Различные виды записи системы уравнений модели нематика . . . . .	39
<b>5 Примеры точных решений уравнений движения нематика</b>	<b>42</b>
5.1 Сдвиговые течения нематиков . . . . .	42
5.2 Поверхностные волны . . . . .	45
5.2.1 Постановка задачи . . . . .	45
5.2.2 Гармонические поверхностные волны . . .	47
5.3 Задача о равновесии капли . . . . .	49
5.3.1 Постановка задачи . . . . .	49
5.3.2 Линеаризация задачи о капле . . . . .	51
5.3.3 Точные частные решения . . . . .	55

5.3.4	Определение формы капли и поля ориентации в общем случае . . . . .	56
5.3.5	Исследование формы капли вблизи полюса в нелинейном случае . . . . .	58
	<b>Литература</b>	<b>61</b>

Калугин Алексей Георгиевич

Механика анизотропных жидкостей  
М., Издательство Центра прикладных исследований при  
механико-математическом факультете МГУ, 64 стр.

Подписано в печать 01.09.2005 г.  
Формат 60×90 1/16. Объем 4 п.л.  
Заказ 16 Тираж 100 экз.

---

Издательство ЦПИ при механико-  
математическом факультете МГУ  
г. Москва, Воробьевы горы.  
Лицензия на издательскую деятельность ИД  
№ 04059 от 20.02.2001 г.

---

Отпечатано на типографском оборудовании  
механико-математического факультета