УДК 531.19:532.738

В.Б. Немцов, профессор;
А.В. Кондратенко, аспирант

АЛЬТЕРНАТИВНОЕ СТАТИСТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ГИДРОДИНАМИЧЕСКОГО ПОТОКА НЕМАТИКА С ОРИЕНТАЦИЕЙ ЕГО МОЛЕКУЛ

On the basis of the methods of correlation theory the calculation of the independent coefficients of the tensor describing mutual interaction of hydrodynamical flow of nematic liquid crystal and its molecular orientation is done.

При описании кинетико-гидродинамических процессов в жидких кристаллах как средах, обладающих ориентационным порядком, необходимо учитывать взаимодействие между гидродинамическим потоком и ориентацией молекул среды, в результате которого выражения для коэффициентов вязкости принимают вид, существенно отличающийся от соответствующих выражений, в которых указанное взаимодействие не учитывается [1]. Дополнительные вклады в коэффициенты вязкости определяются независимыми коэффициентами тензоров, являющихся временными корреляционными функциями микроскопических потоков динамических величин, описывающих особенности ориентационной фазы (малый угол поворота и тензорный параметр порядка) и плотности потока импульса.

В настоящей работе вычисляются коэффициенты тензора E_{ijkl}, играющего важную роль при описании взаимодействия гидродинамических течений и средней ориентации молекул нематика и являющегося временной корреляционной функцией потока тензорного параметра порядка и плотности потока импульса:

$$E_{ijkl} = V^{-1}\int_0^\infty dt e^{-\varepsilon t}\left\langle \mathcal{J}_{ij}^R(t)\tilde{T}_{kl}(0)\right\rangle, \tag{1}$$

где $\mathcal{J}_{ij}^R$ и $\tilde{T}_{kl}$ - интегралы по объему V от плотности потока тензорного параметра порядка;

$$\tilde{\mathcal{J}}_{ij}^R = \sum_{\nu=1}^N \omega_n^\nu (e_{inm}d_{mj}^\nu + e_{jnm}d_{mi}^\nu); \quad d_{im}^\nu = \frac{3}{2}\left(c_i^\nu c_j^\nu - \frac{1}{3}\delta_{im}\right), \tag{2}$$

и микроскопического тензора напряжений, в качестве которого используется тензор, полученный в работе Кузуу и Доя [2]:

$$\tilde{T}_{kl} = -2\beta^{-1}{}_{\lambda}\tilde{R}_{km}(\delta_{ml} - bSn_m n_l), \tag{3}$$

где интеграл по объему от микроскопического тензорного параметра порядка определяется выражением

$$\widetilde{R}_{ij} = \frac{3}{2}\sum_{\nu=1}^{N}\left(c_i^\nu c_j^\nu - \frac{1}{3}\delta_{im}\right). \tag{4}$$

Здесь c_i^ν и ω_i^ν - единичный вектор, направленный вдоль длинной оси молекулы с номером ν, и угловая скорость этой молекулы соответственно; e_{ijk} - тензор Леви-Чивита; δ_{ij} - символ Кронекера; β - обратная температура; χ характеризует удлиненность молекулы, $\chi = (\sigma_\parallel^2 - \sigma_\perp^2)/(\sigma_\parallel^2 + \sigma_\perp^2)$, причем $\sigma_\parallel$ и $\sigma_\perp$ - длины большой и малой осей моделирующего форму молекулы эллипсоида вращения; b - параметр, связанный с интенсивностью взаимодействия данной молекулы с окружающими ее соседями; S - степень упорядочивания; угловые скобки обозначают равновесное усреднение.

В отличие от работы [3], в которой для расчета независимых коэффициентов тензора E_{ijkl} использовалось приближенное решение уравнения Фоккера-Планка для вероятности перехода от начального к текущему состоянию системы частиц, обладающих ориентационными степенями свободы, здесь применяется альтернативный подход.

Так как прямое вычисление тензора E_{ijkl} сталкивается с трудностями, связанными с тем, что коррелятор в выражении (1) является нечетной функцией относительно обращения времени из-за наличия в нем угловой скорости в первой степени (см. соотношения (2), (3)), то естественно найти для E_{ijkl} другое выражение без указанной особенности. Для этого, усредняя микроскопический тензорный параметр порядка с помощью квазиравновесной функции распределения [4], получим следующее выражение для E_{ijkl} в фурье-представлении в первом порядке по волновому вектору:

$$E_{ijkl} = D_{ijmn}B_{mnkl}, \tag{5}$$

где

$$B_{ijkl} = V^{-1}\int_0^\infty dt\left\langle \widetilde{R}_{ij}(t)\widetilde{T}_{kl}(0)\right\rangle; \tag{6}$$

$$D_{ijmn} = \sum_{\alpha=1}^{3}\left(\tau_\alpha^{-1} + i\omega\right)B_{ijmn}^{\alpha}. \tag{7}$$

Здесь B^{α}_{ijmn} - идемпотентные матрицы, введенные Р.Л. Стратоновичем [5]; ω - частота. τ_{α} - времена релаксации тензорного параметра порядка; $\tau_{\alpha} = g_{\alpha}/F_{\alpha}$, где g_{α} - независимые коэффициенты статической автокорреляционной функции параметра порядка

$$g_{ijkl} = V^{-1}\left\langle \hat{R}_{ij}(0)\hat{R}_{kl}(0)\right\rangle = \sum_{\alpha=1}^{3} g_{\alpha} B^{\alpha}_{ijkl}, \tag{9}$$

а F_{α} - независимые коэффициенты автокоррелятора плотности потока тензорного параметра порядка

$$F_{ijkl} = V^{-1}\int_{0}^{\infty} dte^{-\varepsilon t}\left\langle \mathcal{J}^{R}_{ij}(t)\mathcal{J}^{R}_{kl}(0)\right\rangle = \sum_{\alpha=1}^{3} F_{\alpha} B^{\alpha}_{ijkl} \tag{10}$$

Из выражений (6)-(10) видно, что теперь все величины в (5) являются четными относительно инверсии времени и, следовательно, вышеуказанное затруднение снято. Тогда с учетом формул (3), (6)-(10) выражение для тензора E_{ijkl} в низкочастотном приближении ($\omega \to 0$) принимает вид:

$$E_{ijkl} = \beta^{-1}\chi g_{ijkm}(-\delta_{ml} + bSn_m n_l). \tag{11}$$

Структура материальных тензоров определяется одноосной симметрией нематика (группа $D_{\infty h}$), что позволяет представить их через независимые коэффициенты. Учитывая это представление для тензора g_{ijkl} (формула (9)) и тензора E_{ijkl}

$$\begin{aligned} E_{ijkl} &= E_1\delta_{ij}\delta_{kl} + E_2(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}) + E_3\delta_{ij}n_k n_l + \\ &+ E_4(\delta_{ik}n_j n_l + \delta_{jk}n_i n_l) + E_5(\delta_{il}n_j n_k + \delta_{jl}n_i n_k) - \\ &-(3E_1 + 2E_2)\delta_{kl}n_i n_j - (3E_3 + 2E_4 + 2E_5)n_i n_j n_k n_l, \end{aligned} \tag{12}$$

из формулы (11) находятся выражения для независимых коэффициентов тензора E_{ijkl}:

$$E_1 = \beta^{-1}\chi\left(g_1 - \frac{1}{3}g_2\right); \quad E_2 = -\beta^{-1}\chi g_1; \quad E_5 = \beta^{-1}\chi(g_1 - g_3);$$

$$E_3 = \beta^{-1}\chi\left(g_2 - g_1 - \frac{2}{3}bSg_2\right); \quad E_4 = \beta^{-1}\chi(g_1 - g_3 + bSg_3). \tag{13}$$

Вычисление независимых коэффициентов статической автокорреляционной функции тензорного параметра порядка g_α было проведено в работе [6] (θ - угол между направлением оси отдельной молекулы $\overset{\vee}{c_i}$ и директором, n - плотность, выражение для параметра A приведено в указанной выше работе):

$$g_1 = \frac{9n}{16}\overline{\sin^4\theta}\left[1 - \frac{9}{256}A\beta n \overline{\sin^4\theta}^{\,3}\right]^{-1};$$

$$g_2 = \frac{27n}{8}\left(\overline{\cos^4\theta} - \overline{\cos^2\theta}^{\,2}\right)\left[1 - \frac{32}{243}A\beta n\left(\overline{\cos^4\theta} - \overline{\cos^2\theta}^{\,2}\right)^3\right]^{-1};$$

$$g_3 = \frac{9n}{4}\left(\overline{\cos^2\theta} - \overline{\cos^4\theta}\right)\left[1 - \frac{9}{4}A\beta n\left(\overline{\cos^2\theta} - \overline{\cos^4\theta}\right)^3\right]^{-1}. \qquad (14)$$

Формулы (13), (14) позволяют провести численное вычисление независимых коэффициентов тензора E_{ijkl}, описывающего взаимодействие гидродинамического потока нематика с ориентацией его молекул, и, следовательно, учесть вклад этого взаимодействия в коэффициенты вязкости.

ЛИТЕРАТУРА

1. Немцов В.Б. К теории вязкости нематических жидких кристаллов // Труды БГТУ. - 1996. - Сер. V. Физ.- мат. науки. - Вып. 3. - С.42-50.
2. Kuzuu N., Doi M. Constitutive equations for nematic liquid crystals under weak velocity gradient derived from a molecular kinetic equation // Journ. Phys. Soc. Japan - 1983. - V. 52. - P. 3486-3494.
3. Бокун Г.С., Немцов В.Б., Кондратенко А.В. Взаимодействие гидродинамических течений и средней ориентации молекул в нематических жидких кристаллах // Труды БГТУ. - 1996. - Сер. V. Физ.- мат. науки. - Вып. 3. - С. 50-57.
4. Nemtsov V.B. Statistical theory of hydrodynamic and relaxation processes in liquid crystals // Mol. Cryst. Liq. Cryst. - 1990. - V. 192. - P. 137 - 141.
5. Стратонович Р.Л. // ЖЭТФ. - 1976. - Т. 70, вып. 4. - С. 1290 -1299.
6. Немцов В.Б. Корреляционные функции параметра порядка для ориентированных нематических жидких кристаллов // ДАН БССР. - 1986. - Т. XXX, № 2. - С. 135-138.