ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ
И МАТЕМАТИЧЕСКАЯ
ФИЗИКА
Том 56, № 1
июль, 1983

О СТАТИСТИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ ГИДРОДИНАМИЧЕСКИХ И РЕЛАКСАЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ В СМЕКТИЧЕСКИХ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛАХ

Немцов В. Б.

На основе методов неравновесной статистической термодинамики установлена замкнутая система уравнений релаксационной гидродинамики смектических жидких кристаллов типа А. Состояние среды описывается гидродинамическими переменными (плотностями числа частиц, импульса, энтропии и смещением смектического слоя) и релаксационными переменными (модулем комплексного параметра порядка и директором), которые в области фазового перехода смектик-нематик обнаруживают мягкомодовое поведение. В качестве дополнительной переменной используется плотность вращательного момента импульса.

1. ВВЕДЕНИЕ

Смектические жидкие кристаллы наряду с ориентационным дальним порядком обладают определенной упорядоченностью средних положений центров масс молекул и характеризуются слоистой структурой [1–6].

В смектических жидких кристаллах типа А, рассматриваемых в данной работе, длинные оси молекул (в равновесном состоянии) в среднем перпендикулярны к слоям, в пределах которых центры масс молекул распределены, как в обычных жидкостях. Поэтому в смектиках А плотность числа частиц периодична в направлении, нормальном к слоям, и постоянна вдоль плоскостей слоев.

В ряде работ [1–4] на основе феноменологического подхода дан вывод уравнений гидродинамики смектических жидких кристаллов. Обзор этих результатов и их применений дан в работах [1, 5]. Рассмотрены термодинамика и фазовые переходы на основе теории Ландау [1, 5, 6] с широким использованием теоретико-группового подхода [6]. Для этих работ характерно использование в той или иной мере представлений о молекулярной структуре среды.

Привлечение молекулярных представлений является естественным и последовательным в статистическом подходе. Статистический подход в форме теории среднего поля применялся к исследованию равновесных свойств смектических жидких кристаллов в работах Мак-Миллана и других авторов (см., например, [5]).

Настоящая работа посвящена статистическому выводу уравнений линейной релаксационной гидродинамики смектических жидких кристаллов типа А на основе одного из методов современной неравновесной статистической термодинамики (метода НСО [7, 8]). Рассмотрена возможность нелинейных обобщений теории.

В отличие от метода Каданова — Мартина, использованного при статистическом обосновании гидродинамики нематиков [9], здесь справедливость определенной формы уравнений гидродинамики заранее не предполагается.

В развиваемом подходе [10] структура уравнений гидродинамики предопределена лишь выбором динамических переменных, средние значения которых определяют состояние среды.

Статистическая теория позволяет не только обосновать уравнения феноменологической теории, но и существенно дополнить и углубить ее результаты. В статистической теории дано строгое и полное описание дополнительных степеней свободы, характерных для жидких кристаллов (ориентационные степени свободы и степени свободы, описывающие искажение слоистой структуры смектических фаз).

В рамках этой теории естественно и последовательно устанавливается необычное для классической гидродинамики различие между производной по времени среднего угла поворота и средней угловой скорости собственного вращения молекул, а также различие производной по времени смещения слоя и скорости его смещения. В статистической теории в отличие от феноменологического подхода отпадает необходимость постулировать отмеченные различия.

Представленные здесь результаты являются развитием и обобщением статистической гидродинамики нематиков и холестериков [11, 12].

2. ДИНАМИЧЕСКИЕ ПЕРЕМЕННЫЕ

Так как жидкие кристаллы принадлежат к классу сред с вращательными степенями свободы [11, 12], их неравновесное состояние описывается средними значениями плотностей числа частиц $\hat{n}(\mathbf{x})$, импульса $\hat{p}_i(\mathbf{x})$, энергии $\hat{H}(\mathbf{x})$ и вращательного момента импульса $\hat{L}_i(\mathbf{x})$:

$$\hat{n}(\mathbf{x})=\sum_{\nu=1}^{N}\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}^\nu),\quad \hat{p}_i(\mathbf{x})=\sum_{\nu=1}^{N}p_i^\nu\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}^\nu),\tag{1}$$

$$\hat{L}_i(\mathbf{x})=\sum_{\nu=1}^{N}s_i^\nu\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}^\nu),$$

$$\hat{H}(\mathbf{x})=2^{-1}\sum_{\nu=1}^{N}\Big[m^{-1}(p^\nu)^2+\sum_{k=1}^{3}I_k^{-1}(s_k'^{\,\nu})^2+\sum_{\mu\neq\nu}^{N}\Phi(\mathbf{r}_\mu^{\ \nu},\varphi_i^\mu,\varphi_i^\nu)\Big]\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}^\nu).$$

Здесь $\mathbf{x}^\nu$ — радиус-вектор центра масс молекулы с номером ν (число молекул равно N), $\mathbf{x}$ — радиус-вектор точки пространства, s_i^ν — вращательный момент импульса молекулы, p_i^ν — ее импульс, $s_k'^{\nu}$ — проекции вращательного момента импульса молекулы на ее главные оси инерции, I_k — главные моменты инерции молекулы, m — ее масса, $\delta(\mathbf{x})$ — дельта-функция, $\mathbf{r}^{\nu\mu}=\mathbf{x}^\nu-\mathbf{x}^\mu$, Φ — парный потенциал межмолекулярного взаимодействия, зависящий от взаимного расположения центров масс молекул ν и μ и их ориентации, задаваемой углами Эйлера φ_i^ν и φ_i^μ.

Ориентационная упорядоченность смектических жидких кристаллов обусловливает существование неравновесного поля средних поворотов молекул. В линейной теории рассматриваются малые повороты, определяемые углами θ_i^ν. Макроскопическое поле малых средних поворотов $\theta_i(\mathbf{x})$ выражается через среднее значение динамической величины плотности малых углов поворота $\hat{\theta}_i(\mathbf{x})$:

$$\theta_i(\mathbf{x})=n^{-1}\langle\hat{\theta}_i(\mathbf{x})\rangle_l, \tag{2}$$

где $n=\langle\hat{n}(\mathbf{x})\rangle_l$, $\langle\cdots\rangle_l$ — символ усреднения по локально-равновесному распределению, явный вид которого будет рассмотрен ниже. В свою очередь,

$$\hat{\theta}_i(\mathbf{x})=\sum_{\nu=1}^{N}\theta_i^\nu\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}^\nu). \tag{3}$$

В силу одномерной упорядоченности центров масс молекул в направлении единичного вектора $\mathbf{n}^0$, перпендикулярного слоям, существует макроскопическое поле $u(\mathbf{x})$ малого смещения смектического слоя в указанном направлении. Это поле определяется через среднее значение динамической величины плотности смещений молекул

$$u(\mathbf{x})=n^{-}\langle\hat{u}(\mathbf{x})\rangle_l,\quad \hat{u}(\mathbf{x})=\sum_{\nu=1}^{N}n_i^\nu n_i^0\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}^\nu), \tag{4}$$

где $u_i^\nu n_i^0$ — смещение молекулы вдоль $\mathbf{n}^0$. Подчеркнем, что вектор $\mathbf{n}^0$ и перпендикулярные к нему слои относятся к равновесному состоянию смектика А.

Для описания деформационного состояния смектических жидких кристаллов удобно применять не сами поля $u(\mathbf{x})$ и $\theta_i(\mathbf{x})$, а их градиенты в виде следующих тензоров деформации:

$$\varepsilon_k=u_{,k}+e_{mki}n_i^0\theta_m,\qquad \gamma_{ik}=\theta_{i,\,k}, \tag{5}$$

где e_{mki} — символ Леви-Чивиты, $u_{,k}=\partial u/\partial x_k$. Удобство этих мер деформации связано с тем, что они инвариантны относительно жесткого поворота и смещения среды. Тензоры деформации ε_k и γ_{ik} традиционны для теории с вращательными степенями свободы (см., например, [13]).

Слоистая структура смектиков А обусловливает модуляцию плотности по гармоническому закону с волновым числом $q=2\pi/d$ [14]

$$n(\mathbf{x})=n_0+\exp(iqz)\psi(\mathbf{x})+\exp(-iqz)\psi^*(\mathbf{x}), \tag{6}$$

где $\psi(\mathbf{x})$ — комплексный параметр порядка, d — равновесное расстояние между слоями, $z=\mathbf{x}\cdot\mathbf{n}^0$, $n_0=N/V$, V — объем системы, звездочка означает комплексное сопряжение. Функция $\psi(\mathbf{x})$ является медленно меняющейся функцией $\mathbf{x}$ и z в том числе (соответствующие волновые векторы меньше q).

Выражение (6) представляет собой не просто три первых члена разложения плотности в ряд Фурье, а результат суммирования некоторого отрезка ряда Фурье, построенного с учетом одномерной трансляционной периодичности равновесной структуры среды и указанных ограничений на волновые векторы.

В силу важности параметра $\psi(\mathbf{x})$ представляется необходимым установить для него микроскопическое выражение. Для этого построим ряд Фурье для микроскопической величины $n(\mathbf{x})$

(7)
$$\hat{n}(\mathbf{x}) = V^{-1} \sum_{k_\parallel} \exp(ik_\parallel z) \left(\sum_{\mathbf{k}_\perp} \exp(i\mathbf{k}_\perp \mathbf{r}) \hat{n}(\mathbf{k}) \right),$$
$$\hat{n}(\mathbf{k}) = \int \hat{n}(\mathbf{x}) \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{x})\, d\mathbf{x} = \sum_{\nu=1}^{N} \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{x}^\nu),$$

здесь $\mathbf{r}=\mathbf{x}-z\mathbf{n}^0$, $k_\parallel = qN_1^{-1}n_z$, $k_x=2\pi L^{-1}n_x$, $k_y=2\pi L^{-1}n_y$, $\mathbf{k}_\perp(k_x, k_y)$; n_x, n_y, n_z — целые числа, N_1 — некоторое макроскопическое число слоев. Длина периодичности L по осям x и y в плоскости слоя имеет вспомогательное значение в отличие от длины $L_1=N_1 d$ — реального периода вдоль оси z, нормальной к слоям.

Выделим из суммы (7) член $n_0=N/V$, соответствующий $k=0$. Принимая во внимание, что при условии $-N_1 \leqslant n_z \leqslant N_1$ $k_\parallel$ изменяется в пределах $-q \leqslant k_\parallel \leqslant q$, вычислим соответствующую часть суммы ряда (7). Тогда

(8)
$$\hat{n}(\mathbf{x}) = n_0 + (2\pi)^{-3} \sum_{\nu=1}^{N} \int \exp(ik_\parallel(z-z^\nu))\, dk_\parallel \int \exp(i\mathbf{k}_\perp(\mathbf{r}-\mathbf{r}^\nu)]\, d\mathbf{k}_\perp.$$

При вычислении суммы проведено интегрирование по $k_\parallel$ в пределах $-q \leqslant k_\parallel < q$, а по $k_\perp$ в бесконечных пределах. Замена суммирования по $k_\parallel$ интегрированием равносильна пренебрежению N_1^{-1} по сравнению с 1.

Выполняя в (8) интегрирование, установим окончательно

(9)
$$\hat{n}(\mathbf{x}) = n_0 + \exp(iqz)\hat{\psi}(\mathbf{x}) + \exp(-iqz)\hat{\psi}^*(\mathbf{x}),$$
$$\hat{\psi}(\mathbf{x}) = -i(2\pi)^{-1} \sum_{\nu=1}^{N} \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}^\nu)(z-z^\nu)^{-1} \exp(-iqz^\nu).$$

Величина $\hat{\psi}(\mathbf{x})$ является микроскопическим комплексным параметром порядка, т. к. после усреднения (9) получим (6). Существенно, что при выводе (9) учтены явно одномерная периодичность вдоль оси z и ограничения на волновой вектор $k_\parallel$. Ограничения на $\mathbf{k}_\perp$ будут выполняться при рассмотрении достаточно плавных изменений $\psi(\mathbf{x})$ в плоскостях слоев.

При неограниченном возрастании размеров тела тепловые флуктуации размывают функцию плотности [15]. В силу этого одномерный трансляционный порядок в смектиках А не является истинным дальним порядком. Однако благодаря логарифмической расходимости коррелятора смещений не исключается существование одномерного трансляционного порядка в макроскопических конечных объемах [15, 6].

В комплексном параметре порядка $\psi = \langle\hat{\psi}\rangle_t$ можно выделить модуль и фазу:

(10)
$$\psi = \varphi \exp(iq\chi), \quad \varphi = |\psi|.$$

Отметим, что выражение для ψ аналогично выражению для «конденсатной волновой функции» в теории сверхтекучести [16, 17] и сверхпроводимости [16]. Аналогия параметра порядка с макроскопической волновой функцией в теории сверхпроводимости Ландау — Гинзбурга широко использована в феноменологической теории смектических жидких кристаллов [5, 14].

Градиент фазы $\nabla\chi$ удобен как переменная состояния в нелинейной гидродинамике смектических жидких кристаллов [18] в предположении, что средние собственные повороты молекул полностью определяются деформациями поверхности постоянной фазы (деформациями слоев). Если же собственные повороты молекул кинематически независимы от деформации слоев, то нелинейной инвариантной мерой деформации может служить величина [19]

$$W=\nabla\chi-\mathbf{n}, \tag{11}$$

где единичный вектор $\mathbf{n}$ (директор) определяет направление преимущественной ориентации длинных осей молекул, а его изменение учитывает приближенно собственные повороты молекул.

Градиент фазы χ аналогичен скорости сверхтекучего движения v_s, и его можно выразить непосредственно через ψ и ψ^* подобно выражению v_s через конденсатную волновую функцию [20]

$$\nabla\chi=(2iq)^{-1}(\psi^{-1}\nabla\psi-\psi^{*-1}\nabla\psi^*). \tag{12}$$

В линейной теории фаза определяется смещением слоя u, а ее градиент сводится к $u_{,k}$ и является частью инвариантной меры деформации ε_k (5).

3. ЛОКАЛЬНО-РАВНОВЕСНОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ

Построим локально-равновесную функцию распределения, характеризующую состояние локального равновесия среды, которое определяется средними значениями плотностей числа частиц $\hat{n}(\mathbf{x})$, импульса $\hat{p}_i(\mathbf{x})$, энергии $\hat{H}(\mathbf{x})$, вращательного момента импульса $\hat{L}_i(\mathbf{x})$, модулем комплексного параметра порядка $\varphi=|\psi|$, тензорами деформации $n\varepsilon_k$ и $n\gamma_{ik}$.

Вид локально-равновесного распределения установим из принципа максимума информационной энтропии

$$S=-\operatorname{Sp}\rho\ln\rho \tag{13}$$

при дополнительных условиях фиксации параметров состояния среды и сохранении нормировки [7, 8]. В (13) ρ — искомая функция распределения, символ Sp означает интегрирование по фазовым переменным. Дополнительные условия учитываются с помощью множителей Лагранжа [7, 8].

При варьировании энтропии нужно учесть, что n, ε_k, γ_{ik} и φ зависят от ρ (см. (2), (4), (5)):

$$n=\operatorname{Sp}\rho\hat{n},\quad n\varepsilon_k=\operatorname{Sp}\rho n[(\operatorname{Sp}\rho\hat{u}/\operatorname{Sp}\rho\hat{n})_{,k}-e_{mki}n_i^0\operatorname{Sp}\rho\hat{\theta}_m/\operatorname{Sp}\rho\hat{n}], \tag{14}$$

$$n\gamma_{ik}=\operatorname{Sp}\rho\hat{n}(\operatorname{Sp}\rho\hat{\theta}_i/\operatorname{Sp}\rho\hat{n})_{,k},\quad \varphi=\sqrt{\psi\psi^*}=\sqrt{\operatorname{Sp}\rho\hat{\psi}\cdot\operatorname{Sp}\rho\hat{\psi}^*}.$$

Зависимость средних значений от ρ при определении вида ρ учитывалась ранее при выводе уравнений гидродинамики сверхтекучей жидкости [20].

Локально-равновесная функция распределения имеет вид

$$(15)\qquad \rho_l=\exp\left(-\Phi-\int d\mathbf{x}[\beta\hat{H}'-\lambda\hat{n}-E_k\hat{\varepsilon}_k-g_{ik}\hat{\Gamma}_{ik}-\mu\hat{\varphi}]\right)=\exp(-\hat{S}(t)),$$

где

$$(16)\qquad \hat{H}'=\hat{H}-v_i\hat{p}_i+2^{-1}mv^2\hat{n}-\omega_i\hat{L}_i$$

— плотность энергии в сопровождающей системе отсчета, движущейся со скоростью v_i и вращающейся с угловой скоростью ω_i. В (15) β — обратная локальная температура, λ/β — локальный химический потенциал; E_k, g_{ik} и μ — термодинамические параметры, сопряженные средним значениям динамических величин $\hat{\varepsilon}_k$, $\hat{\Gamma}_{ik}$ и $\hat{\varphi}$, $\hat{s}$ — динамическая величина энтропии.

Гидродинамическая скорость $v_i(\mathbf{x}, t)$ определяется обычным образом с помощью соотношения [7]

$$(17)\qquad v_i(\mathbf{x}, t)=(mn)^{-1}\langle\hat{p}_i(\mathbf{x})\rangle_l.$$

Поле $\omega_i(\mathbf{x}, t)$ выражается через среднюю плотность вращательного момента импульса

$$(18)\qquad \omega_i(\mathbf{x}, t)=I_{ik}^{-1}\langle\hat{L}_k(\mathbf{x})\rangle_l,$$

где I_{ik} — плотность тензора инерции

$$I_{ik}(\mathbf{x},t)=\left\langle\sum_{\nu=1}^{N} I_{ik}^{\nu}\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}^{\nu})\right\rangle_l,$$

причем I_{ik}^{ν} — тензор инерции молекулы ν в лабораторной системе отсчета.

В смектиках в отличие от нематиков [11, 12, 18] компоненты I_{ik} не рассматриваются как квазигидродинамические переменные; так, в области фазового перехода нематик-смектик неголдстоуновские компоненты I_{ik} не проявляют мягкомодового поведения.

Выражения для $\hat{\varepsilon}_k$, $\hat{\Gamma}_{ik}$ и $\hat{\varphi}$ получены при варьировании S с учетом (14):

$$(19)\qquad \hat{\varepsilon}_k=\hat{u}_{,k}-e_{mki}n_i^0\hat{\theta}_m-n^{-1}n_{,k}\hat{u}+u(\hat{n}n^{-1}n_{,k}-\hat{n}_{,k}),$$

$$\hat{\Gamma}_{ik}=\hat{\theta}_{i,k}-n^{-1}n_{,k}\hat{\theta}_i+\theta_i(\hat{n}n^{-1}n_{,k}-\hat{n}_{,k}),$$

$$\hat{\varphi}=(\hat{\psi}\psi^*+\psi\hat{\psi}^*)(2|\psi|)^{-1};\quad \langle\hat{\varepsilon}_k\rangle_l=n\varepsilon_k,\quad \langle\hat{\Gamma}_{ik}\rangle_l=n\gamma_{ik},\quad \langle\hat{\varphi}\rangle_l=\varphi.$$

В дальнейшем применяются линеаризованные выражения

$$(20)\qquad \hat{\varepsilon}_k=\hat{u}_{,k}-e_{mki}n_i^0\hat{\theta}_m,\quad \hat{\Gamma}_{ik}=\hat{\theta}_{i,k}.$$

Функционал Масье — Планка находится из условия нормировки $\mathrm{Sp}\,\rho_l=1$:

$$\Phi=\ln\mathrm{Sp}\exp\left\{-\int d\mathbf{x}[\beta\hat{H}'-\lambda\hat{n}-E_k\hat{\varepsilon}_k-g_{ik}\hat{\Gamma}_{ik}-\mu\hat{\varphi}]\right\}.$$

Определяя энтропию системы как $S=\langle\hat{s}\rangle_l$, на основании (15) установим выражение для вариации объемной плотности энтропии

$$(21)\qquad \delta S(\mathbf{x})=\beta\delta H-\lambda\delta n-E_k\delta(n\varepsilon_k)-g_{ik}\delta(n\gamma_{ik})-\mu\delta\varphi-\beta\omega_i\delta L_i,$$

где $L_i=\langle\hat{L}_i\rangle_l$, $H=\langle\hat{H}'\rangle_l+L_i\omega_i$ — плотность внутренней энергии. С помощью величин, отнесенных к единице массы $h=(mn)^{-1}H$, $s=(mn)^{-1}S$, $l_i=$

$=(mn)^{-1}L_i$, вариация массовой плотности энтропии записывается в виде

$$mn\delta s=\beta mn\delta h-\beta mn\omega_i\delta l_i-E_k n\delta\varepsilon_k-g_{ik}n\delta\gamma_{ik}-\mu\delta\varphi+\beta mn\mathscr{P}\delta v, \tag{22}$$

где $v=(mn)^{-1}$ – объем единицы массы, а квазиравновесное давление $\mathscr{P}$ определяется формулой $\beta\mathscr{P}=S-\beta H+\lambda n+\beta\omega_i L_i+E_k n\varepsilon_k+g_{ik}n\gamma_{ik}$.

4. УРАВНЕНИЯ ДВИЖЕНИЯ

Для вывода уравнений гидродинамики установим вначале уравнения движения для динамических переменных, воспользовавшись уравнениями классической механики в формализме скобок Пуассона.

Уравнения движения представим в форме уравнений баланса

$$\partial\hat{n}/\partial t=-\hat{j}_{i,i},\quad \partial\hat{p}_i/\partial t=\hat{\tau}_{ik,k}, \tag{23}$$

$$\partial\hat{L}_i/\partial t=\hat{\pi}_{ik,k}+e_{ikl}\hat{\tau}_{lk},\quad \partial\hat{H}/\partial t=-\hat{j}^{H}_{i,i},$$

$$\partial\hat{u}/\partial t=\hat{J}^{u},\quad \partial\hat{\theta}_i/\partial t=\hat{J}_i^{\theta},\quad \partial\hat{\psi}/\partial t=\hat{J}^{\psi},$$

$$\partial\hat{\varepsilon}_k/\partial t=\hat{J}^{u}_{,k}=-e_{mki}n_i^0\hat{J}_m^{\theta},\quad \partial\hat{\Gamma}_{ik}/\partial t=\hat{J}^{\theta}_{i,k},\quad \partial\hat{\varphi}/\partial t=\hat{J}^{\varphi}.$$

Явные выражения для плотностей потоков и источников связывают их с параметрами движения и взаимодействия молекул. Выражения для плотностей потоков числа частиц $\hat{j}_i$, импульса $\hat{\tau}_{ik}$, вращательного момента импульса $\hat{\pi}_{ik}$ и энергии $\hat{j}_i^H$ известны (см., например, [12]). Отметим, что микроскопические тензоры напряжений $\hat{\tau}_{ik}$ и моментных напряжений $\hat{\pi}_{ik}$ асимметричны из-за нецентральности межмолекулярных сил [12, 13].

Плотности источников в уравнениях движения для $\hat{u}$, $\hat{\theta}_i$ и $\hat{\psi}$ определяются как

$$\hat{J}^{u}=\sum_{\nu=1}^{N}m^{-1}\mathbf{p}^{\nu}\cdot\mathbf{n}^0\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}^{\nu})-\left(\sum_{\nu=1}^{N}\mathbf{u}^{\nu}\cdot n^0 m^{-1}p_i^{\nu}\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}^{\nu})\right)_{,i}, \tag{24}$$

$$\hat{J}_i^{\theta}=\sum_{\nu=1}^{N}\omega_i^{\nu}\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}^{\nu})-\left(\sum_{\nu=1}^{N}\theta_i^{\nu}m^{-1}p_k^{\nu}\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}^{\nu})\right)_{,k},$$

$$\hat{J}^{\psi}=-q(2\pi m)^{-1}\sum_{\nu=1}^{N}(z-z^{\nu})^{-1}\mathbf{p}^{\nu}\cdot\mathbf{n}^0\exp(-iqz^{\nu})\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}^{\nu})+$$

$$+i(2\pi m)^{-1}\left(\sum_{\nu=1}^{N}(z-z^{\nu})^{-1}p_i^{\nu}\exp(-iqz^{\nu})\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}^{\nu})\right)_{,i},$$

где $\omega_i^{\nu}=d\theta_i^{\nu}/dt$ – угловая скорость молекулы в лабораторной системе координат.

Уравнения движения для динамических величин деформации $\hat{\varepsilon}_k$ и $\hat{\Gamma}_{ik}$ установлены на основе (20) и уравнений движения для $\hat{u}$ и $\hat{\theta}_i$. Уравнение движения для $\hat{\varphi}$ получено с помощью соотношения (19) и уравнения движения для $\hat{\psi}$. Плотность источника $\hat{J}^{\varphi}$ определяется как

$$\hat{J}^{\varphi}=2^{-1}(\sqrt{\hat{\psi}^*/\hat{\psi}}\hat{J}^{\psi}+\sqrt{\hat{\psi}/\hat{\psi}^*}\hat{J}^{\psi*})- \tag{25}$$

$$-2^{-1}(\hat{\varphi}/\varphi)(\sqrt{\psi^*/\psi}\langle\hat{J}^{\psi}\rangle+\sqrt{\psi/\psi^*}\langle\hat{J}^{\psi*}\rangle)+2^{-1}\varphi^{-1}(\hat{\psi}\langle\hat{J}^{\psi*}\rangle+\hat{\psi}^*\langle\hat{J}^{\psi}\rangle).$$

Преобразуем плотности потоков и источников в сопровождающую систему отсчета. Преобразование величин $\hat{j}_i$, $\hat{j}^H$, $\hat{\tau}_{ik}$ и $\hat{\pi}_{ik}$ осуществляется по известным формулам (см., например, [12]). Остальные источники преобразуются следующим образом:

$$
\begin{aligned}
(26)\qquad & \hat{J}^u = \mathbf{v}\cdot\mathbf{n}^0\hat{n} - (v_i u)_{,i} + \hat{J}'^{\,u}, \\
& \hat{J}_i^{\theta} = \omega_i \hat{n} - (v_k \hat{\theta}_i)_{,k} + \hat{J}_i'^{\,\theta}, \\
& \hat{J}^{\psi} = -(\hat{\psi} v_i)_{,i} + \hat{J}'^{\,\psi}.
\end{aligned}
$$

Штрихами отмечены величины в сопровождающей системе отсчета. Выражения для них получаются заменой в (24) $\mathbf{p}^{\nu}$ и $\boldsymbol{\omega}^{\nu}$ на их флуктуации.

Подставим полученные выражения для потоков и источников в уравнения движения, проведем их неравновесное усреднение и в результате установим макроскопические уравнения движения.

Неравновесное усреднение осуществляется с помощью неравновесной функции распределения Зубарева [7, 8]:

$$
\begin{aligned}
(27)\qquad & \rho(t) = \exp(-\hat{S}(t)) + \int_{-\infty}^{0} dt' \exp((\varepsilon + i\mathscr{L})t')\,\dot{\hat{S}}(t+t')\times \\
& \times \exp(-\hat{S}(t+t')), \\
& \dot{\hat{S}}(t) = \sum_m (\hat{P}_m - \langle \hat{P}_m \rangle_l)(\partial F_m/\partial t) + \sum_m F_m (\partial \hat{P}_m/\partial t),
\end{aligned}
$$

причем $\hat{P}_m$ — обозначение для плотностей $\hat{n}$, $\hat{p}_i, \ldots, F_m$ — сопряженные им термодинамические параметры λ, βv_i и т. д. Суммирование по m включает также интегрирование по x, $\mathscr{L}$ — оператор Лиувилля, предельный переход $\varepsilon \to +0$ производится после термодинамического предельного перехода $N\to\infty$, $V\to\infty$, $N/V=\text{const}$.

Функция распределения (27) является решением уравнения Лиувилля с источником [7, 8] и соответствует сокращенному описанию состояния системы с помощью набора величин $\langle \hat{P}_m \rangle_l$. Неравновесные значения термодинамических параметров F_m в любой момент времени определяются равенствами $\langle \hat{P}_m \rangle = \langle \hat{P}_m \rangle_l$, где $\langle \ldots \rangle$ — символ неравновесного усреднения с помощью функции $\rho(t)$. Макроскопические уравнения движения запишем аналогично (23) в форме уравнений баланса

$$
\begin{aligned}
(28)\qquad & dn/dt = -nv_{k,k}, \quad mn(dv_i/dt) = \tau_{ik,k}, \\
& mn(dl_i/dt) = \pi_{ik,k} + e_{ikl}\tau_{lk}, \quad mn(dh/dt) = \\
& = \tau_{ik}\dot{\varepsilon}_{ik} + \pi_{ik}\omega_{i,k} - q_{i,i} + mn\omega_i(dl_i/dt), \\
& du/dt = \mathbf{v}\cdot\mathbf{n}^0 + n^{-1}J^u, \quad d\theta_i/dt = \omega_i + n^{-1}J_i^{\theta}, \\
& d\psi/dt = -\psi v_{i,i} + J^{\psi}, \quad d\varphi/dt = -\varphi v_{i,i} + J^{\varphi}, \\
& d\varepsilon_k/dt = \dot{\varepsilon}_{ik} n_i^0 + n^{-1}(J^u_{,k} - e_{mki} n_i^0 J_m^{\theta}), \quad d\gamma_{ik}/dt = \omega_{i,k} + n^{-1} J^{\theta}_{i,k}.
\end{aligned}
$$

В уравнениях (28) $\tau_{ik} = \langle \hat{\tau}_{ik}' \rangle$ — тензор напряжений, $\pi_{ik} = \langle \hat{\pi}_{ik}' \rangle$ — тензор моментных напряжений, $q_i = \langle j_i'^{\,H} \rangle$ — поток тепла, $d/dt = \partial/\partial t + v_i(\partial/\partial x_i)$ — материальная производная. Остальные плотности источников определены как $J^u = \langle \hat{J}'^{\,u} \rangle$, $J_i^{\theta} = \langle J_i'^{\,\theta} \rangle$, $J^{\psi} = \langle J'^{\,\psi} \rangle$.

Плотность J^φ выражается через J^ψ и J^{ψ^*} с помощью соотношения

$$J^\varphi=2^{-1}(\sqrt{\psi^*/\psi}J^\psi+\sqrt{\psi/\psi^*}J^{\psi^*}). \tag{29}$$

Наконец, тензор скоростей деформации $\dot{\varepsilon}_{ik}$ определяется как

$$\dot{\varepsilon}_{ik}=v_{i,k}-e_{mki}\omega_m. \tag{30}$$

На основании уравнений движения (28) и выражения для вариации массовой плотности энтропии (22) установим уравнение баланса энтропии

$$mn(ds/dt)=-j^s_{i,j}+\sigma, \tag{31}$$

где плотность потока энтропии

$$j_i^s=\beta q_i+E_iJ^u+g_{ik}J_k^\theta, \tag{32}$$

а ее локальное производство σ равно сумме произведений необратимых потоков j^n на термодинамические силы X_n,

$$\sigma=(\tau_{ik}-\tau^0_{ik})\beta\dot{\varepsilon}_{ik}+(\pi_{ik}-\pi^0_{ik})\beta\omega_{i,k}+q_i\beta_{,i}-$$
$$-J^\varphi\mu+J^uE_{k,k}+J_m^\theta(g_{mk,k}+E_ke_{mki}n_i^0)=\sum_n j^nX_n, \tag{33}$$

здесь

$$\tau_{ik}{}^0=\mathscr{P}\delta_{ik}+\beta^{-1}nn_i{}^0E_k,\quad \pi_{ik}{}^0=\beta^{-1}ng_{ik} \tag{34}$$

— недиссипативные (локально-равновесные) вклады в тензор напряжений и моментных напряжений. Формулы определяют смысл термодинамических параметров E_k и g_{ik}. Отметим, что в (34) давление $\mathscr{P}$ содержит дополнительный вклад $\mu\varphi\beta^{-1}$ за счет члена $-\varphi v_{i,i}$ в уравнении движения для φ.

На основании (34) можно получить выражение для E_k:

$$E_k=n^{-1}\beta n_i{}^0(\tau_{ik}{}^0+\mathscr{P}\delta_{ik})=n^{-1}\beta n_i{}^0\tilde{\tau}_{ik}{}^0,$$

где $\tilde{\tau}_{ik}{}^0$ — бесшпуровая часть $\tau_{ik}{}^0$.

В последующем изложении линейной теории будут использоваться соотношения

$$E_{k,k}=n^{-1}\beta(n_i{}^0\tilde{\tau}_{ik}{}^0)_{,k},\qquad g_{mk,k}+E_ke_{mkj}n_j{}^0=n^{-1}\beta M_m{}^0, \tag{35}$$

где $M_m{}^0=\pi^0_{mk,k}+e_{mkj}n_j{}^0n_i{}^0\tilde{\tau}_{ik}{}^0$ — объемная плотность недиссипативного момента пары сил.

5. МАТЕРИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Для замыкания уравнений движения необходимо дополнить их материальными уравнениями.

В линейной теории материальные уравнения получаются на основе линеаризированного по отклонениям от равновесия выражения (27) для функции распределения $\rho=\rho_l+\Delta\rho$,

$$\rho_l=\rho_0\Big[1-\int d\mathbf{x}\{(\hat{H}'-\langle\hat{H}'\rangle_0)(\beta-\beta_0)-$$
$$-(\hat{n}-\langle\hat{n}\rangle_0)(\lambda-\lambda_0)-(\hat{\varphi}-\langle\hat{\varphi}\rangle_0)\mu-E_k\tilde{e}_k-g_{ik}\hat{\Gamma}_{ik}\}\Big], \tag{36}$$

$$(37)\qquad \Delta\rho=\int d\mathbf{x}'\int\limits_{-\infty}^{0} dt' \exp(\varepsilon+(1-\mathcal{P}_M)i\mathcal{L}t')\rho_0 j^n(\mathbf{x}',t+t')X_n(\mathbf{x}',t+t').$$

Здесь ρ_0 — равновесное распределение, $\langle\ldots\rangle_0$ — символ равновесного усреднения, β_0, λ_0 — равновесные значения, $\mathcal{P}_M$ — оператор проектирования Мори (см., например, [8])

$$\mathcal{P}_M\hat{A}=\langle\hat{A}\rangle_0+\sum_m(\hat{A},\hat{P}_m)(\hat{P}\hat{P})^{-1}_{mn}(\hat{P}_n-\langle\hat{P}_n\rangle_0),$$

в котором $\hat{A}$, $\hat{P}_m)$, $(\hat{P}_m$, $\hat{P}_n)$ — равновесные корреляционные функции, определяемые формулой

$$(38)\qquad (\hat{A},\hat{B})=\langle(\hat{A}-\langle\hat{A}\rangle_0)(\hat{B}-\langle\hat{B}\rangle_0)\rangle_0.$$

Динамические величины необратимых потоков выражаются через потоки и источники $\hat{J}_n$, входящие в уравнения баланса (23):

$$(39)\qquad \hat{j}^n=(1-\mathcal{P}_M)\hat{J}_n,\quad \hat{J}_n=\{\hat{\tau}_{ik},\ \hat{\pi}_{ik},\ \hat{j}_i^H,\ \hat{J}^\varphi,\ \hat{J}^u,\ \hat{J}_i^\theta\}.$$

При переходе от (27) к (37) производные $\partial\hat{P}_m/\partial t$ определены из уравнений движения (23), производные же $\partial F_m/\partial t$ исключены с помощью оператора проектирования $\mathcal{P}_M$ на основе метода, предложенного в работе [21], кроме того, проведено интегрирование по частям по x' и отброшены поверхностные интегралы.

Линейные соотношения между потоками и термодинамическими силами получаются в результате усреднения потоков с помощью функции распределения (37),

$$(40)\qquad \langle\hat{j}^n(\mathbf{x},t)\rangle=\langle\hat{j}^n(\mathbf{x},t)\rangle_l+\int d\mathbf{x}'\int\limits_{-\infty}^{0} dt'\times$$

$$\times\langle\hat{j}^n(\mathbf{x},t)\exp(\varepsilon+i(1-\mathcal{P}_M)\mathcal{L}t')\hat{j}^m(\mathbf{x}',t+t')\rangle_0 X_m(\mathbf{x}',t+t').$$

Эти соотношения записаны с учетом нелокальности и памяти, учет которых важен в области фазового перехода.

Вдали от области фазового перехода можно пренебречь нелокальностью и запаздыванием и представить (40) в виде

$$(41)\qquad \begin{aligned}
\tau_{ik}-\tau_{ik}^0&=\beta L_{ikmn}^{\tau,\tau}\dot{\varepsilon}_{mn}-L_{ik}^{\tau,J^\varphi}\mu+L_{ikl}^{\tau,J^\theta}n^{-1}\beta M_l^0,\\
\pi_{ik}-\pi_{ik}^0&=L_{ikl}^{\pi,q}\beta_{,l}+\beta L_{ikmn}^{\pi,\pi}\omega_{m,n}+L_{ik}^{\pi,J^u}E_{n,n},\\
J_i^\theta&=\beta L_{imn}^{J^\theta,\tau}\varepsilon_{mn}+L_{ik}^{J^\theta,J^\theta}n^{-1}\beta M_k^0,\\
J^\varphi&=\beta L_{ik}^{J^\varphi,\tau}\varepsilon_{ik}-L^{J^\varphi,J^\varphi}\mu,\\
q_i&=L_{ik}^{q,q}\beta_{,k}+\beta L_{ikl}^{q,\pi}\omega_{k,l}+L_i^{q,J^u}E_{k,k},\\
J^u&=L_i^{J^u,q}\beta_{,i}+\beta L_{ik}^{J^u,\pi}\omega_{i,k}+L^{J^u,J^u}E_{k,k}.
\end{aligned}$$

Кинетические коэффициенты в (41) определяются временными корреляционными функциями потоков

$$(42)\qquad L^{j^n j^m}=\int d\mathbf{x}'\int\limits_{-\infty}^{0} dt'\exp(\varepsilon t')\langle\hat{j}^n(\mathbf{x})\exp((1-\mathcal{P}_M)i\mathcal{L}t')\hat{j}^m(\mathbf{x}')\rangle_0.$$

Из (42) следуют соотношения взаимности Онсагера:

$$L_{ik}^{q,q}=L_{ki}^{q,q},\quad L_{ikl}^{q,\pi}=-L_{kli}^{\pi,q},\quad L_{ikmn}^{\tau,\tau}=L_{mnik}^{\tau,\tau},$$
$$L_{ik}^{\tau,J^\varphi}=-L_{ik}^{J^\varphi,\tau},\quad L_{ikl}^{\tau,J^\theta}=-L_{lik}^{J^\theta,\tau},\quad L_{ikmn}^{\pi,\pi}=L_{mnik}^{\pi,\pi},$$
$$L_{ik}^{\pi,J^u}=-L_{ik}^{J^u,\pi},\quad L_{ki}^{J^\theta,J^\theta}=L_{ki}^{J^\theta,J^\theta}.$$

Материальные уравнения содержат также соотношения между $\mathscr{P}$, s, μ, $n_i^0\tau_{ik}^0$, π_{ik}^0, v, β, φ, ε_k, γ_{ik}, получаемые в результате усреднения соответствующих величин с помощью распределения ρ_l (36),

$$\pi_{ik}^0=K_{ikmn}\gamma_{mn},\quad n_i^0\tau_{ik}^0=D\varepsilon_k\quad (k=1,\ 2;\quad i=3),\tag{43}$$
$$n_i^0\tau_{ik}^0=B\varepsilon_k+C(v-v_0)+A(\varphi-\varphi_0)+N(T-T_0),$$
$$\mathscr{P}-\mathscr{P}_0=-C\varepsilon_k-K_Tv_0^{-1}(v-v_0)-M(\varphi-\varphi_0)+\mathscr{P}_T(T-T_0),$$
$$\mu=A\varepsilon_k+M(v-v_0)+Q(\varphi-\varphi_0)+L(T-T_0),$$
$$s-s_0=-N\varepsilon_k+\mathscr{P}_T(v-v_0)-L(\varphi-\varphi_0)+c_vT_0^{-1}(T-T_0).$$

Здесь $T=\beta^{-1}$, v_0, φ_0, T_0, $\mathscr{P}_0$ и s_0 — равновесные значения, K_T — изотермический модуль объемной упругости, c_v — теплоемкость, $\mathscr{P}_T$ — термический коэффициент давления, K_{ikmn} — тензор модулей упругости Франка, B, C и D — модули упругости, связанные с деформациями слоев, в последних четырех уравнениях $\varepsilon_k=u_{,k}$ $(k=3)$.

Все равновесные характеристики выражаются через статические корреляционные функции. Например, $D=n^2T(\hat{\varepsilon}_1,\ \hat{\varepsilon}_1)^{-1}$, $K_{ikmn}=n^2T(\hat{\Gamma},\ \hat{\Gamma})^{-1}_{ikmn}$, где статические корреляционные функции определяются формулами вида

$$(\hat{\varepsilon}_1,\hat{\varepsilon}_1)=\int\langle(\hat{\varepsilon}_1(\mathbf{x})-\langle\hat{\varepsilon}_1\rangle_0)(\hat{\varepsilon}_1(\mathbf{x}')-\langle\hat{\varepsilon}_1\rangle_0)\rangle_0 d\mathbf{x}'.$$

Соотношения (43) могут быть записаны в нелокальной форме. Например,

$$n_i^0\tau_{ik}^0=\int D(\mathbf{x},\mathbf{x}')\varepsilon_k(\mathbf{x}')d\mathbf{x}',$$
$$D(\mathbf{x},\mathbf{x}')=n^2T(\hat{\varepsilon}_1(\mathbf{x}),\hat{\varepsilon}_1(\mathbf{x}'))^{-1},$$

где $(\hat{\varepsilon}_1(\mathbf{x}),\hat{\varepsilon}_1(\mathbf{x}'))$ — корреляционная функция, определяемая согласно (38), она служит ядром интегрального соотношения между ε_k и $n_i^0\tau_{ik}^0$.

Отметим некоторые особенности используемых корреляционных функций. Смысл корреляционных функций от сингулярных динамических величин определяется на основе теории обобщенных функций в предположении, что распределение Гиббса ρ_0 является основной функцией с необходимыми свойствами. В частности, интегралы по фазовым переменным с сингулярностью вида $(z-z^\nu)^{-1}$ рассматриваются как интегралы в смысле главного значения Коши.

При переходе к локальному приближению в корреляционных функциях, содержащих слагаемые с градиентами динамических величин (см. (24)), интегрирование по $\mathbf{x}'$ выполняется после усреднения. Если после усреднения зависимость от градиентов остается, локальные уравнения, полученные на основании (40), приобретают дополнительные слагаемые, пропорциональные вторым пространственным производным термодинамических сил. Структура этих слагаемых легко определяется из соотношений (40), записанных в фурье-представлении по волновому вектору.

Совокупность уравнений движения для n, v_i, ω_i, u, θ_i, φ, s и соответствующих материальных уравнений образует замкнутую систему уравнений, описывающую гидродинамические и релаксационные процессы в смектических жидких кристаллах.

Возможность включения релаксационных процессов в схему гидродинамического описания вдали от области фазового перехода связана с их медленностью, обусловленной предполагаемой малостью ориентационной части взаимодействия молекул в сравнении с основным изотропным взаимодействием. Предполагается также, что другие релаксационные процессы протекают более быстро, чем происходит релаксация величин φ и $\mathbf{n}$ (см. ниже).

6. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Конкретизируем уравнения для u, θ_i и φ с учетом одноосной симметрии среды, а затем проведем сопоставление всех полученных уравнений с уравнениями феноменологической гидродинамики смектиков A.

Рассмотрим сначала уравнение для смещения слоя. Пренебрегая вкладом от неоднородности угловой скорости ω_i, материальное уравнение (41) для J^u запишем как

$$J^u=-nfn_i^0T_{,i}+n\lambda_p(n_i^0\tau_{ik}^0)_{,k}, \tag{44}$$

$$fn_i^0=n^{-1}\beta^2L_i^{J^u,q}, \quad \lambda_p=\beta n^{-2}L^{J^u,J^u}.$$

С учетом (44) уравнение для u приобретает вид

$$du/dt=\mathbf{v}\cdot\mathbf{n}^0-fn_i^0T_{,i}+\lambda_p(n_i^0\tau_{ik})_{,k}. \tag{45}$$

Это уравнение описывает эффект «просачивания» молекул сквозь слоистую структуру, образованную этими же молекулами.

Запишем в явном виде уравнение движения для среднего угла малого поворота молекул. Выразим производную $d\theta_i/dt$ через директор, используя известное представление матрицы поворота [22]

$$\alpha_{ik}=\cos\alpha\,\delta_{ik}+(1-\cos\alpha)n_in_k-e_{ikl}n_l\sin\alpha, \tag{46}$$

где α – средний угол поворота молекул вокруг директора n_i. Так как (см., например, [12]) $d\theta_i/dt=2^{-1}e_{isl}\alpha_{sk}(d\alpha_{lk}/dt)$, то с учетом (46), получим

$$d\theta_i/dt=(d\alpha/dt)n_i+\sin\alpha(dn_i/dt)+(1-\cos\alpha)e_{ikl}n_k(dn_l/dt).$$

Полагая, что в среднем $\langle\sin\alpha\rangle=\langle\cos\alpha\rangle=0$, найдем приближенное выражение

$$d\theta_i/dt=(d\alpha/dt)n_i+e_{ikl}n_k(dn_l/dt). \tag{47}$$

Уравнение движения $d\theta_i/dt=\omega_i+n^{-1}J_i^\theta$ с учетом (47) и материального уравнения (41) для J_i^θ представим в форме

$$(d\alpha/dt)n_i+e_{ilk}n_k(dn_l/dt)=\omega_i+\lambda_{ikl}\varepsilon_{kl}+b_{ik}M_k^0, \tag{48}$$

$$\lambda_{ikl}=\beta n^{-1}L_{ikl}^{J^\theta,\tau}, \quad b_{ik}=\beta n^{-2}L_{ik}^{J^\theta,J^\theta}.$$

Примем во внимание, что для одноосных сред с центром симметрии

$$(49)\qquad \lambda_{ikl}=\Lambda_1 e_{ikl}+\Lambda_2 n_l n_m e_{mik}+\Lambda_3 n_i n_m e_{mlk}+$$
$$+\Lambda_4 n_k n_m e_{mil},\qquad b_{ik}=b_1\delta_{ik}+b_2 n_i n_k.$$

Тензор $\dot{\varepsilon}_{ik}$ представим в виде суммы $\dot{\varepsilon}_{ik}=e_{ik}+(\omega_l-\Omega_l)e_{lik}$, $\mathbf{\Omega}=2^{-1}\operatorname{rot}\mathbf{v}$, $e_{ik}=2^{-1}(v_{i,k}+v_{k,i})$. Тогда, разлагая $\boldsymbol{\omega}$, $\boldsymbol{\omega}-\mathbf{\Omega}$, $\mathbf{M}^0$ на продольную и поперечную по отношению к директору составляющие, разделим в уравнении (48) продольное и поперечное движения и представим их в виде двух уравнений

$$(50)\qquad d\alpha/dt=\boldsymbol{\omega}\cdot\mathbf{n}+\lambda_1(\boldsymbol{\omega}-\mathbf{\Omega})\cdot\mathbf{n}+(b_1+b_2)\mathbf{M}^0\cdot\mathbf{n},$$
$$dn_i/dt=(\boldsymbol{\omega}\times\mathbf{n})_i-\lambda_2 n_k e_{ik}+\lambda_3 N_i+b_1(\mathbf{M}^0\times\mathbf{n})_i,$$

где $N_i=(\omega_m-\Omega_m)n_l e_{mli}$, $\lambda_1=2(\Lambda_1-\Lambda_3)$, $\lambda_2=\Lambda_2+\Lambda_4$, $\lambda_3=2\Lambda_1+\Lambda_2-\Lambda_4$.

Уравнения (50) содержат четыре независимых параметра α, $\mathbf{n}$, $\boldsymbol{\omega}\cdot\mathbf{n}$ и $\boldsymbol{\omega}\times\mathbf{n}$, т. к. $d\theta_i/dt\neq\omega_i$. Дополнительные уравнения получаются после разделения продольных и поперечных движений в уравнении (28) баланса собственного момента импульса l_i с учетом материального уравнения (41) для тензора напряжений τ_{ik}. Эти уравнения имеют вид

$$(51)\qquad 2(a_2-a_3)(\boldsymbol{\omega}-\mathbf{\Omega})\cdot\mathbf{n}=(1+\lambda_1)(\mathbf{M}^0\cdot\mathbf{n})+\left(\mathbf{M}'-mn\frac{d\mathbf{l}}{dt}\right)\cdot\mathbf{n},$$
$$\overset{0}{\gamma}_1 N_i+\overset{0}{\gamma}_2 n_k e_{ki}=(1+\lambda_3)(\mathbf{M}^0\times\mathbf{n})_i+\left(\left(\mathbf{M}'-mn\frac{d\mathbf{l}}{dt}\right)\times\mathbf{n}\right),$$

$$(52\text{а})\qquad \overset{0}{\gamma}_1=a_7-2a_6+a_5+2(a_2-a_3),$$

$$(52\text{б})\qquad \overset{0}{\gamma}_2=a_7-a_5,$$

$M_i'=(\pi_{ik}-\pi_{ik}^0)_{,k}$ — диссипативный момент пары сил. Для удобства сопоставления с феноменологическими уравнениями в (51) не раскрыт явный вид выражения для $\mathbf{M}'$. В соотношениях (52) a_i — коэффициенты вязкости, входящие в тензор вязких напряжений $\tau_{ik}'=a_{ikmn}\dot{\varepsilon}_{mn}$ $(a_{ikmn}=\beta^{\tau,\tau}_{ikmn})$.

Для сред с осевой симметрией группы $D_{\infty h}$ τ_{ik}' представляется в виде [12]

$$(53)\qquad \tau_{ik}'=(a_1\delta_{ik}+a_4 n_i n_k)e_{mm}+(a_2+a_3)e_{ik}+$$
$$+(a_2-a_3)(\omega_s-\Omega_s)e_{sik}+a_4\delta_{ik}n_m n_n e_{mn}+$$
$$+(a_5+a_6)n_k n_n e_{in}+(a_6+a_7)n_i n_n e_{nk}+(a_6-a_5)N_i n_k+$$
$$+(a_7-a_6)n_i N_k+a_8 n_i n_k n_m n_n e_{mn}.$$

Используя (51), преобразуем уравнение движения для директора

$$(54)\qquad dn_i/dt=(\mathbf{\Omega}\times\mathbf{n})_i-(\overset{0}{\lambda}(1+\lambda_3)-\lambda_2)n_k e_{ki}+$$
$$+(b_1+\overset{0}{\gamma}{}_1^{-1}(1+\lambda_3)^2)(\mathbf{M}\times\mathbf{n})_i+\overset{0}{\gamma}{}_1^{-1}(1+\lambda_3)\left(\left(\mathbf{M}'-mn\frac{d\mathbf{l}}{dt}\right)\times\mathbf{n}\right)_i,$$
$$\overset{0}{\lambda}=-\overset{0}{\gamma}_2/\overset{0}{\gamma}_1.$$

С учетом определения $\mathbf{M}^0$ величину $\mathbf{h}=\mathbf{M}^0\times\mathbf{n}$ запишем в виде

$$h_i=h_i^{н}+h_i^{c},\quad h_i^{н}=e_{ikl}n_l(\pi_{kn}^{0})_{,n},$$

$$h_i^{c}=-D(u_{,i}+\delta n_i),\quad \delta n_i=n_i-n_i^0\quad (i=1,\,2).$$

Тогда, пренебрегая $\mathbf{M}'$ и $d\mathbf{l}/dt$, уравнение (54) представим в форме релаксационного уравнения

$$dn_i/dt=(\Omega\times\mathbf{n})_i+(\mathring{\lambda}(1+\lambda_3)-\lambda_2)n_k e_{ki}-$$
$$-\tau_1^{-1}(\delta n_i-\delta\tilde{n}_i^0)+(b_1+\mathring{\gamma}_1^{-1}(1+\lambda_3)^2)h_i^{н}, \tag{55}$$

где $\delta\tilde{n}_i^0=-u_{,i}$, а время релаксации директора определяется формулой

$$\tau_1^{-1}=(b_1+\gamma_1^{-1}(1+\lambda_3)^2)D. \tag{56}$$

В нематической фазе $D=0$, $\tau_1^{-1}=0$ и директор является гидродинамической переменной. Так как в смектической фазе $D\neq 0$, здесь имеет место релаксация директора, которая замедляется в области фазового перехода в нематическую фазу. Рассмотрим уравнение для еще одной релаксационной переменной — модуля смектического параметра порядка φ. С учетом материальных уравнений (41) и (43) для J^φ и μ уравнение для φ представим в виде (величиной $-\varphi v_{i,i}$ в линейной теории можно пренебречь)

$$d\varphi/dt=-\tau^{-1}(\varphi-\tilde{\varphi}_0)+c_{ik}e_{ik},\quad c_{ik}=\beta L_{ik}^{J^\varphi,\,\tau},$$
$$\tilde{\varphi}_0=\varphi_0-Q^{-1}(A\varepsilon_k+M(v-v_0)-L(T-T_0)). \tag{57}$$

Время релаксации модуля смектического параметра порядка определяется как

$$\tau=(QL^{J^\varphi,\,J^\varphi})^{-1}. \tag{58}$$

Релаксация величины φ существенна в области фазового перехода нематик-смектик А, т. к. здесь имеет место замедление релаксации. Замедление релаксации связано с тем, что $Q\to 0$ при $T\to T_k$, где T_k — температура фазового перехода. В частности, согласно феноменологической теории среднего поля $Q\sim(T-T_k)$ [5, 14]. Отметим, что фазовые переходы в смектиках подробно рассматриваются в работе [6]; релаксационное уравнение (58) аналогично релаксационному уравнению Ландау — Халатникова в теории сверхтекучести (см., например, [23]).

Наиболее полным образом линейная феноменологическая гидродинамика смектиков А построена в [4]. В этой же работе обсуждены предшествующие результаты упрощенного описания гидродинамических процессов в смектиках типа А. Поэтому проведем сопоставление с результатами работы [4]. Для получения уравнений упомянутой работы в представленных здесь уравнениях нужно положить $d\alpha/dt=0$, $\mathbf{M}^0\cdot\mathbf{n}=0$, $d\mathbf{l}/dt=0$, $\mathbf{M}'=0$, что оправдано в низкочастотной и длинноволновой областях, кроме того, в материальных уравнениях (43) следует считать $T-T_0=0$ и опустить вовсе уравнение состояния для энтропии.

Тогда система уравнений релаксационной гидродинамики будет включать (с учетом упомянутых пренебрежений) уравнение непрерывности и уравнение сохранения импульса (28), энтропии (31), уравнения (45), (55) и (57), материальные уравнения для тензора напряжений и потока тепла (41) и материальные уравнения (43) без использованных уже уравнений для μ и $n_i^0\tau_{ik}^0$ (k=1, 2; i=3), при этом в тензоре вязких напряжений (53) нужно исключить вектор N_i с помощью (51) и положить $a_2-a_3=0$.

Отметим, что в правой части уравнений (50б), (54) и (55) должен присутствовать член γn_i, где γ определяется из условия $n_i^2=1$.

Подчеркнем, что пренебрежение температурой в (43) и уравнением состояния для энтропии нельзя считать оправданным, т. к. в этом случае не представляется возможным учесть изменение температуры в адиабатическом процессе (например, при распространении звука) и определить адиабатические материальные характеристики среды.

При переходе к временам, превышающим наибольшее из времен τ_1 и τ, получаем уравнения для гидродинамических переменных n, s, u, v_i, совпадающие с уравнениями гидродинамики де Жена (см., например, [1, 2, 4, 5]).

Таким образом, статистическая теория не только дает обоснование феноменологическим результатам, но и содержит уравнение состояния для энтропии и, кроме того, дополнительные члены, учитывающие градиенты угловой скорости и инерционные эффекты вращения молекул ($d\mathbf{l}/dt\neq0$). В итоге уравнения статистической теории пригодны в более широкой области частот и волновых чисел. В отличие от феноменологической теории, статистическая теория предоставляет возможность определения материальных характеристик среды, выражая их через корреляционные функции.

Автор благодарен Д. Н. Зубареву и Э. Л. Аэро за полезные обсуждения работы.

Литература

[1] *Де Жен П.* Физика жидких кристаллов. М.: Мир, 1977, 325–389.
[2] *Martin P. C., Paradi O., Persham P. S.*– Phys. Rev., 1972, *A6*, № 6, 2401–2420.
[3] *Janig F.*– J. de Phys., 1975, *36*, № 4, 315–324.
[4] *Lio M.*– Phys. Rev., 1979, *A19*, № 5, 2090–2094.
[5] *Чандрасекар.* Жидкие кристаллы. М.: Мир, 1980, 294–339.
[6] *Пикин С. А.* Структурные превращения в жидких кристаллах. М.: Наука, 1981, 9–86.
[7] *Зубарев Д. Н.* Неравновесная статистическая термодинамика. М.: Наука, 1971.
[8] *Зубарев Д. Н.* Современные методы статистической теории неравновесных процессов. «Современные проблемы математики», т. 15. (Итоги науки и техники). М.: ВИНИТИ АН СССР, 1979, 131–226.
[9] *Форстер Д.* Гидродинамические флуктуации, нарушенная симметрия и корреляционные функции. М.: Атомиздат, 1980, гл. II.
[10] *Немцов В. Б.* Тезисы докладов IV Международной конференции социалистических стран по жидким кристаллам. Тбилиси: Изд-во АН ГССР, 1981, т. 1, 179–180.
[11] *Немцов В. Б.*– ТМФ, 1975, *25*, № 1, 118–131.
[12] *Nemtsov V. B.*– Physica, 1977, *86A*, 513–514.
[13] *Немцов В. Б.*– ПММ, 1971, *35*, № 3, 411–419.
[14] *De Gennes P. S.*– Sol. Stat. Commun., 1972, *10*, № 9, 753–756.
[15] *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Статистическая физика. М.: Наука, 1976, ч. 1, 471–475, 477–479.
[16] *Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П.* Статистическая физика. М.: Наука, 1978, ч. 2, 128–136, 207–220.

[17] *Боголюбов Н. Н.* К вопросу о гидродинамике сверхтекучей жидкости. Избранные труды. К.: Наукова думка, т. 3, 244–281.
[18] *Воловик Г. Е., Кац Е. И.*– ЖЭТФ, 1981, *81*, вып. 1 (7), 240–248.
[19] *Kleman M., Paradi O.*– J. de Phys.. 1975, *36*, № 7, 8, 671–681.
[20] *Морозов В. Г.*– ТМФ, 1976, *28*, № 2, 267–280.
[21] *Сергеев М. В.*– ТМФ, 1974, *21*, № 3, 402–414.
[22] *Варшалович Д. А., Москалев А. Н., Херсонский В. К.* Квантовая теория углового момента. Л.: Наука, 1975, 28–29.
[23] *Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П.* Физическая кинетика. М.: Наука, 1979, 516–519.

Белорусский технологический
институт им. С. М. Кирова

Поступила в редакцию
22.VII.1982 г.

ON THE STATISTICAL THEORY OF HYDRODYNAMICS AND RELAXATION PROCESSES IN SMECTIC LIQUID CRYSTALS

Nemtsov V. B.

A complete set of relaxation hydrodynamic equations for smectic liquid crystals type *A* are derived by the methods of nonequilibrium statistical thermodynamics. The state of the material is described by the set of hydrodynamic variables (the densities of particle number, momentum, enthropy and the displacement of smectic layers) and relaxation variables (the modulus of the complex order parameter and the director). The latter show soft mode behaviour in the region of smectic A – nematic phase transition. The angular momentum density is used as an additional variable.