

ГЛАВА VI

МЕХАНИКА ЖИДКИХ КРИСТАЛЛОВ¹⁾

§ 36. Статические деформации нематиков

Жидкие кристаллы представляют собой с макроскопической точки зрения анизотропную текучую среду. Механика этих сред несет в себе черты, свойственные как обычным жидкостям, так и упругим средам, и в этом смысле занимает положение, промежуточное между гидродинамикой и теорией упругости.

Существуют различные типы жидких кристаллов. Категорию *нематических жидких кристаллов* (или, как говорят для краткости, *нематиков*) составляют среды, которые в своем недеформированном состоянии однородны не только макро-, но и микроскопически; анизотропия среды связана только с анизотропной ориентацией молекул в пространстве (см. V, §§ 139, 140). Подавляющее большинство известных нематиков относится к простейшему их типу, в котором анизотропия полностью определяется заданием в каждой точке среды единичного вектора n , выделяющего *всего одно избранное направление*; вектор n называют *директором*. При этом значения n и $-n$, различающиеся лишь знаком, физически эквивалентны, так что выделенной является лишь определенная ось, а два противоположных направления вдоль нее эквивалентны. Наконец, свойства этого типа нематиков (в каждом элементе их объема) инвариантны относительно инверсии — изменения знака всех трех координат²⁾. Ниже мы рассматриваем только этот тип нематических жидких кристаллов.

Таким образом, состояние нематической среды описывается заданием в каждой ее точке наряду с обычными для жидкости величинами — плотности ρ , давления p и скорости v — еще и директора n . Все эти величины входят в качестве неизвестных функций координат и времени в уравнения движения нематика.

В равновесном состоянии неподвижный нематик, не находящийся под действием внешних сил (в том числе со стороны ограничивающих его стенок), однороден: во всем его объеме $n = \text{const}$. В деформированном же нематике направление директора медленно меняется по пространству; медленность подразумевается здесь в обычном для макроскопической теории смысле: характерные

¹⁾ Эта глава написана совместно с Л. П. Питаевским.

²⁾ Нематики, не инвариантные относительно инверсии, неустойчивы по отношению к деформации, превращающей их в так называемые холестерики — см. § 43.

длины, на которых деформация существенно меняется, велики по сравнению с молекулярными размерами, так что производные $\partial n_i / \partial x_k$ должны рассматриваться как малые величины.

В этой главе мы будем относить все термодинамические величины к единице объема деформированного тела, а не к единице объема недеформированного, как в предыдущих главах. Определенная таким образом плотность свободной энергии F нематической среды складывается из свободной энергии недеформированного нематика $F_0(p, T)$ и энергии деформации F_d . Последняя представляет собой квадратичное по производным от n выражение, общий вид которого (C. W. Oseen, 1933; F. C. Frank, 1958; J. L. Ericksen, 1962)

$$F_d = F - F_0 = \frac{K_1}{2} (\operatorname{div} n)^2 + \frac{K_2}{2} (n \operatorname{rot} n)^2 + \frac{K_3}{2} [n \operatorname{rot} n]^2 \quad (36.1)$$

(см. V § 140); отметим, что для единичного вектора $n(r)$ в силу тождества $\nabla n^2 \equiv 0$ справедливо равенство

$$[n \operatorname{rot} n] = -(n \nabla) n, \quad (36.2)$$

поэтому последний член в (36.1) может быть записан также и в эквивалентной форме $K_3 ((n \nabla) n)^2 / 2$.

Энергия (36.1) играет в механике нематиков роль, аналогичную роли упругой энергии деформированного твердого тела, и именно ее существование придает этой механике некоторые черты теории упругости¹.

Три квадратичные комбинации производных в (36.1) независимы друг от друга: каждая из них может быть отлична от нуля при разных нулях двух других. Поэтому условие устойчивости недеформированного состояния требует положительности всех трех коэффициентов K_1 , K_2 , K_3 (функции плотности и температуры); мы будем называть их *модулями упругости нематика* (их называют также *модулями Франка*).

Упомянем, что деформации, в которых отлична от нуля лишь одна из величин $\operatorname{div} n$, $n \operatorname{rot} n$ или $[n \operatorname{rot} n]$, называют соответственно *поперечным изгибом*, *кручением* или *продольным изгибом*²). В общем случае, конечно, деформация нематика содержит одновременно все эти три элемента. Для иллюстрации их характера укажем простые примеры. Пусть нематическая среда заполняет пространство между двумя коаксиальными цилиндрическими по-

¹⁾ Деформирование жидкого кристалла приводит, вообще говоря, к его дипольной поляризации и соответственно к возникновению электрического поля (см. VIII, § 17); этот эффект обычно слаб, и мы не будем рассматривать его влияние на механические свойства среды. Мы не будем также рассматривать влияние, которое оказывает на свойства жидких кристаллов внешнее магнитное поле; ввиду анизотропии магнитной (фактически диполимагнитной) воспринимчивости нематика магнитное поле оказывает на него ориентирующее действие.

²⁾ По английской терминологии: *splay*, *twist* или *bend*.

верхностями; r , φ , z — цилиндрические координаты с осью z по оси цилиндров. Если директор n в каждой точке среды направлен вдоль радиуса ($n_r = 1$, $n_\varphi = n_z = 0$), то деформация представляет собой поперечный изгиб ($\operatorname{div} n = 1/r$). Если n направлен в каждой точке вдоль окружности с центром на оси z ($n_\varphi = 1$, $n_r = n_z = 0$), то мы имеем чистый продольный изгиб ($\operatorname{rot}_z n = -1/r$). Наконец, если по толщине (ось z) плоскопараллельного слоя нематика направление директора меняется по закону $n_x = \cos \varphi(z)$, $n_y = \sin \varphi(z)$, $n_z = 0$, мы имеем дело с чистым кручением ($n \operatorname{rot} n = -\varphi'(z)$).

Стенки, ограничивающие занимаемый жидкокристаллической средой объем, и даже ее свободная поверхность оказывают на среду ориентирующее воздействие (об этом будет говориться подробнее ниже). Поэтому уже само наличие граничных поверхностей приводит, вообще говоря, к деформированию неподвижной жидкокристаллической среды. Возникает вопрос о нахождении уравнений, определяющих эту деформацию; другими словами — об уравнениях, определяющих равновесное распределение $n(r)$ при заданных граничных условиях (J. L. Ericksen, 1966).

Для этого исходим из общего термодинамического условия равновесия — минимальности полной свободной энергии тела, т. е. интеграла $\int F dV$, представляющего собой функционал от функции $n(r)$. Поскольку вектор n единичный, этот функционал должен быть минимален при дополнительном условии $n^2 = 1$. Следуя известному методу неопределенных множителей Лагранжа, надо потребовать равенства нулю вариации

$$\delta \int \left\{ F - \frac{1}{2} \lambda(r) n^2 \right\} dV, \quad (36,3)$$

$\lambda(r)$ — некоторая функция. Подынтегральное выражение зависит как от самих функций $n_i(r)$, так и от их производных. Имеем ¹⁾

$$\begin{aligned} \delta \int F dV &= \int \left\{ \frac{\partial F}{\partial n_i} \delta n_i + \frac{\partial F}{\partial (\partial_k n_i)} \partial_k \delta n_i \right\} dV = \\ &= \int \left\{ \frac{\partial F}{\partial n_i} - \partial_k \frac{\partial F}{\partial (\partial_k n_i)} \right\} \delta n_i dV + \oint \frac{\partial F}{\partial (\partial_k n_i)} \delta n_i df_k. \end{aligned} \quad (36,4)$$

Второй член — интеграл по поверхности тела — существен лишь для нахождения граничных условий. Полагая пока $\delta n = 0$ на границах, находим для вариации полной свободной энергии

$$\delta \int F dV = - \int H \delta n dV, \quad (36,5)$$

¹⁾ В этой главе для упрощения записи формул мы будем пользоваться принятым в современной литературе кратким обозначением оператора дифференцирования по координатам; $\partial_i = \partial/\partial x_i$.

где \mathbf{H} — вектор с компонентами

$$H_i = \partial_k \pi_{ki} - \frac{\partial F}{\partial n_i}, \quad \pi_{ki} = \frac{\partial F}{\partial (\partial_k n_i)}. \quad (36,6)$$

Величина \mathbf{H} играет роль поля, стремящегося «выпрямить» направления \mathbf{n} во всем объеме жидкого кристалла; его называют *молекулярным полем*.

Уравнение же (36,3) принимает вид

$$\int (\mathbf{H} + \lambda \mathbf{n}) \delta \mathbf{n} dV = 0,$$

откуда ввиду произвольности вариации $\delta \mathbf{n}$ находим уравнение равновесия в виде $\mathbf{H} = -\lambda \mathbf{n}$. Отсюда $\lambda = -\mathbf{H} \cdot \mathbf{n}$, т. е. продольная компонента этого уравнения удовлетворяется за счет выбора λ . Поэтому фактически условие равновесия сводится к требованию коллинеарности векторов \mathbf{H} и \mathbf{n} в каждой точке среды; продольная же компонента \mathbf{H} не имеет физического смысла. Таким образом, условие равновесия можно записать в виде

$$\mathbf{h} \equiv \mathbf{H} - \mathbf{n}(\mathbf{n} \cdot \mathbf{H}) = 0, \quad (36,7)$$

введя вектор \mathbf{h} , для которого $\mathbf{n} \cdot \mathbf{h} = 0$.

Найдем явное выражение молекулярного поля, соответствующего свободной энергии (36,1). Для проведения дифференцирования по $\partial_k n_i$ замечаем, что

$$\operatorname{div} \mathbf{n} = \partial_i n_i, \quad \operatorname{rot}_i \mathbf{n} = e_{ikl} \partial_k n_l$$

(где e_{ikl} — антисимметричный единичный тензор), и поэтому

$$\frac{\partial \operatorname{div} \mathbf{n}}{\partial (\partial_k n_i)} = \delta_{ik}, \quad \frac{\partial}{\partial (\partial_k n_i)} \operatorname{rot}_i \mathbf{n} = e_{ikl}.$$

В результате получим для тензора π_{ki} выражение

$$\pi_{ki} = K_1 \delta_{ik} \operatorname{div} \mathbf{n} + K_2 (\mathbf{n} \operatorname{rot} \mathbf{n}) n_i e_{ikl} + K_3 [[\mathbf{n} \operatorname{rot} \mathbf{n}] n_i] e_{ikl}. \quad (36,8)$$

Дальнейшее дифференцирование, согласно определению (36,6), приводит к следующей довольно сложной формуле для молекулярного поля:

$$\begin{aligned} \mathbf{H} = \nabla (K_1 \operatorname{div} \mathbf{n}) - \{K_2 (\mathbf{n} \operatorname{rot} \mathbf{n}) \operatorname{rot} \mathbf{n} + \operatorname{rot} (K_2 (\mathbf{n} \operatorname{rot} \mathbf{n}) \mathbf{n})\} + \\ + \{K_3 [[\mathbf{n} \operatorname{rot} \mathbf{n}] \operatorname{rot} \mathbf{n}] + \operatorname{rot} [K_3 \mathbf{n} [\mathbf{n} \operatorname{rot} \mathbf{n}]]\}. \end{aligned} \quad (36,9)$$

Границные условия к уравнениям равновесия не могут быть установлены в общем виде: они зависят не только от упругой энергии (36,1), но и от конкретного рода взаимодействия жидкости с ограничивающей ее стенкой; эта поверхностная энергия должна была бы быть включена в полную свободную энергию, минимальность которой определяют условия равновесия. Фактически эти поверхностные силы обычно настолько велики, что именно они устанавливают направление \mathbf{n} на границе, не зависящее от характера деформации в объеме образца. Если граничная твердая

поверхность анизотропна, то это направление оказывается вполне определенным (или одним из нескольких вполне определенных). Если же поверхность изотропна (сюда относится и случай свободной поверхности), то оказывается заданным лишь угол между \mathbf{n} и нормалью к поверхности. Если этот угол равен нулю, то \mathbf{n} имеет вполне определенное направление — по нормали к поверхности. Если же угол отличен от нуля, то допустимые направления \mathbf{n} заполняют коническую поверхность с определенным углом раствора.

В этой последней ситуации необходимо поставить дополнительное граничное условие. Оно устанавливается требованием обращения в нуль поверхностного интеграла в (36,4) для вариаций $\delta \mathbf{n}$, представляющих собой повороты \mathbf{n} вокруг нормали в каждой точке поверхности с сохранением угла наклона к ней (т. е. вариаций, не меняющих поверхностной энергии). Такая вариация имеет вид $\delta \mathbf{n} = [\mathbf{v} \mathbf{n}] \delta\varphi$, где \mathbf{v} — единичный вектор нормали, а $\delta\varphi$ — произвольный (в каждой точке поверхности) угол поворота. Написав также элемент поверхности в виде $d\mathbf{f} = \mathbf{v} df$, получим

$$\oint \pi_{ki} e_{imn} n_n v_m v_k \delta\varphi d\mathbf{f} = 0,$$

откуда ввиду произвольности $\delta\varphi$ следует граничное условие

$$\pi_{ki} e_{imn} n_n v_m v_k = 0, \quad (36,10)$$

или, направив ось z вдоль \mathbf{v} :

$$\pi_{zx} n_y - \pi_{zy} n_x = 0. \quad (36,11)$$

Наконец, сделаем еще следующее замечание по поводу фигурирующих в (36,1) модулей упругости. Поскольку они введены как коэффициенты в свободной энергии, ими определяются изотермические деформации тела. Легко видеть, однако, что те же коэффициенты определяют в нематиках также и адиабатические деформации. Действительно, мы видели в § 6, что для твердого тела различие между изотермическими и адиабатическими модулями возникает в силу наличия в свободной энергии членов, линейного по тензору деформации. Для нематиков аналогичную роль мог бы играть член, линейный по производным $\partial_k n_i$. Такой член должен был бы быть скаляром и к тому же инвариантным по отношению к изменению знака \mathbf{n} . Очевидно, что такой член построить нельзя (произведение $\mathbf{n} \otimes \mathbf{n}$ — псевдоскаляр, а единственный истинный скаляр $\operatorname{div} \mathbf{n}$ меняет знак вместе с \mathbf{n}). По этой причине изотермические и адиабатические модули нематика совпадают друг с другом (подобно тому, как это имеет место для модуля сдвига изотропного твердого тела — § 6). Эти рассуждения можно сформулировать и несколько иначе: в отсутствие линейного члена квадратичная упругая энергия (36,1) является первой «малой поправкой» к термодинамическим величинам не-

деформированного тела; в силу «теоремы о малых добавках» (см. V, § 15), будучи выражена через соответствующие термодинамические переменные (температуру или энтропию), она однаакова для свободной энергии и для внутренней энергии.

§ 37. Прямолинейные дисклинации в нематиках

Равновесному состоянию нематической среды при заданных граничных условиях не обязательно соответствует всюду непрерывное распределение $\mathbf{n}(\mathbf{r})$, в котором вектор \mathbf{n} имел бы в каждой точке вполне определенное направление. В механике нематиков необходимо рассматривать также и деформации с полями $\mathbf{n}(\mathbf{r})$, содержащими особые точки или особые линии, в которых направление \mathbf{n} оказывается неопределенным. Линейные особенности называют *дисклинациями*.

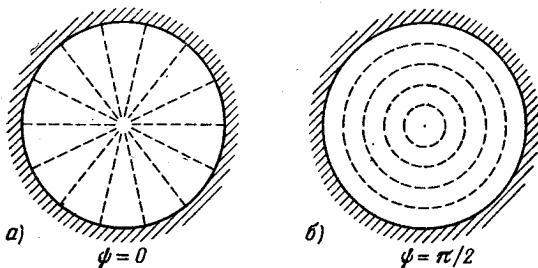


Рис. 27

Возможность возникновения дисклинаций можно проиллюстрировать простыми примерами. Рассмотрим нематик в длинном цилиндрическом сосуде, причем граничные условия требуют перпендикулярности \mathbf{n} поверхности сосуда. Естественно ожидать, что в равновесии вектор \mathbf{n} в каждой точке будет лежать в плоскости поперечного сечения цилиндра и направлен по радиусу в этом сечении (как это изображено на рис. 27, а); очевидно, что на оси цилиндра направление \mathbf{n} будет при этом неопределенным, так что эта ось будет дисклинацией. Если же граничные условия требуют параллельности направления \mathbf{n} стенке сосуда в плоскостях его поперечного сечения, то установится распределение с векторами \mathbf{n} , лежащими везде вдоль концентрических окружностей в этих плоскостях с центрами на оси цилиндра (рис. 27, б); и в этом случае направление \mathbf{n} на оси будет неопределенным.

Эти два примера — простые частные случаи прямолинейных дисклинаций. Мы рассмотрим общую задачу о возможных распределениях $\mathbf{n}(\mathbf{r})$ в прямолинейных дисклинациях в неограниченной нематической среде. Очевидно, что распределение $\mathbf{n}(\mathbf{r})$ в такой дисклинации не зависит от координаты вдоль ее длины,