

эквивалентные (поскольку сдвиг на период совмещает решетку саму с собой, т. е. оставляет состояние решетки тождественно неизменным). Отрезок с эквивалентными концами топологически совпадает с окружностью. Таким образом, пространство вырождения кристаллической решетки представляет собой трехмерную область, построенную на трех окружностях. Эту область можно представить себе как куб, противоположные грани которого попарно эквивалентны, или, что то же самое, как трехмерную поверхность тора в четырехмерном пространстве¹⁾. На таком торе существуют не стягиваемые в точку контуры Γ , каждый из которых характеризуется тремя целочисленными топологическими инвариантами n_1, n_2, n_3 — числами обходов трех образующих тор окружностей. Если контур Γ — образ контура γ , обходящего в физическом пространстве особую линию (дислокацию), то три его инварианта совпадают с тремя компонентами вектора Бюргерса (измеренными в единицах соответствующих периодов a_1, a_2, a_3). Таким образом, дислокации — топологически устойчивые неустойчивые особые линии, а их векторы Бюргерса — топологические инварианты.

§ 40. Уравнения движения нематиков

Состояние движущейся нематической среды определяется распределениями в пространстве четырех величин: директора n , плотности массы ρ , скорости v и плотности энтропии S . Соответственно этому полная система гидродинамических уравнений движения нематика состоит из четырех уравнений, определяющих производные по времени от указанных величин (*J. L. Eriksen, 1960; F. M. Leslie, 1966*)²⁾.

Начнем с уравнения для директора. Если нематик находится в равновесии (так что $h = 0$) и движется как целое с постоянной по пространству скоростью, то это уравнение должно выражать собой просто тот факт, что и значения n переносятся в пространстве с той же скоростью. Другими словами, каждая жидкая частица перемещается в пространстве со своим значением n . Это выражается равенством нулю полной (или, как говорят, субстанциональной) производной по времени

$$\frac{dn}{dt} = \frac{\partial n}{\partial t} + (v\nabla) n = 0. \quad (40,1)$$

В общем же случае произвольного движения в правой части уравнения появляются члены, зависящие от h и от производных

¹⁾ Подобно тому, как квадрат с попарно эквивалентными противоположными сторонами топологически эквивалентен двухмерной поверхности тора в трехмерном пространстве.

²⁾ Мы, частично, следуем изложению *D. Forster, T. C. Lubensky, P. G. Martin, J. Swift, P. S. Pershan* (1971).

скорости по координатам; в первом неисчезающем гидродинамическом приближении надо ограничиться членами, линейными по этим величинам. Производные $\partial v_i / \partial x_k$ составляют тензор, который можно разделить на симметричную и антисимметричную части:

$$v_{ik} = 1/2 (\partial_i v_k + \partial_k v_i), \quad \Omega_{ik} = 1/2 (\partial_i v_k - \partial_k v_i). \quad (40.2)$$

Для установления зависимости от Ω_{ik} достаточно заметить, что при равномерном вращении нематика как целого с угловой скоростью Ω , с той же скоростью будет вращаться и все поле $n(r)$. Такое вращение описывается уравнением

$$\frac{dn}{dt} = \frac{1}{2} [\text{rot } v \cdot n] \quad \text{или} \quad \frac{dn_i}{dt} = \Omega_{ki} n_k.$$

Действительно, скорость точек вращающегося как целое тела $v = [0r]$; тогда $\text{rot } v = 2\Omega$ и для скорости изменения директора получается такое же выражение $dn/dt = [\Omega n]$. Члены же, зависящие от v_{ik} , должны быть составлены с учетом требования $n dn/dt = 0$, следующего из постоянства квадрата $n^2 = 1$. Таким образом, приходим к следующему общему виду «уравнения движения директора»:

$$\frac{dn_i}{dt} = \Omega_{ki} n_k + \lambda (\delta_{il} - n_i n_l) n_k v_{kl} + N_i, \quad (40.3)$$

где ¹⁾

$$N = h/\gamma. \quad (40.4)$$

Член N описывает релаксацию директора к равновесию под действием молекулярного поля, а второй член в (40.3) — ориентирующее действие градиента скорости на директор. Коэффициент γ (с размерностью вязкости) и коэффициент λ (безразмерный) в этих членах имеют кинетическую (а не термодинамическую) природу ²⁾.

Уравнение для временной производной плотности жидкости есть уравнение непрерывности

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho v) = 0. \quad (40.5)$$

Отметим, что этим уравнением, по существу, определяется гидродинамическая скорость как плотность потока вещества, отнесенная к единице его массы.

Уравнение для временной производной скорости есть динамическое уравнение

$$\rho \frac{dv}{dt} = F, \quad (40.6)$$

¹⁾ Обозначение N введено для более ясного выявления структуры некоторых формул ниже, а также ввиду дальнейших обобщений в § 43.

²⁾ Отсутствие в правой стороне уравнения (40.3) членов с градиентами плотности и энтропии (или температуры) связано с требованиями инвариантности уравнений по отношению к пространственной инверсии и по отношению к изменению знака n . См. об этом подробнее в § 43.

где F — сила, действующая на единицу объема. В соответствии с изложенными в § 2 общими рассуждениями, объемные силы могут быть представлены в виде тензорной дивергенции

$$F_i = \partial_k \sigma_{ik},$$

где σ_{ik} — тензор напряжений. Тогда динамическое уравнение запишется в виде

$$\rho \frac{dv_i}{dt} \equiv \rho \left(\frac{\partial v_i}{\partial t} + (\mathbf{v} \nabla) v_i \right) = \partial_k \sigma_{ik}. \quad (40,7)$$

Вид тензора напряжений будет установлен ниже.

Наконец, остается еще уравнение для энтропии. В отсутствие диссипативных процессов движение жидкости было бы адиабатичным, причем адиабатичным в каждом элементе жидкости, которые передвигались бы со своими постоянными значениями энтропии. Уравнение, выражающее сохранение энтропии, записывалось бы просто в виде уравнения непрерывности для нее:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \operatorname{div}(S \mathbf{v}) = 0,$$

где S — энтропия единицы объема, а vS — плотность потока энтропии¹⁾. При учете диссипативных процессов энтропийное уравнение имеет вид

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \operatorname{div} \left(S \mathbf{v} + \frac{\mathbf{q}}{T} \right) = \frac{2R}{T}. \quad (40,8)$$

Здесь R — так называемая диссипативная функция; $2R/T$ определяет скорость возрастания энтропии²⁾; она представляет собой квадратичную форму, составленную из компонент тензора v_{ik} и векторов \mathbf{h} и градиента температуры ∇T . Вектор же \mathbf{q} — плотность потока тепла, связанного с теплопроводностью. Компоненты этого вектора — линейные функции компонент вектора градиента температуры

$$q_i = -\kappa_{ik} \partial_k T. \quad (40,9)$$

В нематической среде тензор коэффициентов теплопроводности κ_{ik} имеет две независимые компоненты и может быть представлен в виде

$$\kappa_{ik} = \kappa_{\parallel} n_i n_k + \kappa_{\perp} (\delta_{ik} - n_i n_k), \quad (40,10)$$

¹⁾ Это уравнение может быть представлено в эквивалентном виде

$$\frac{d}{dt} \frac{S}{\rho} = \frac{\partial}{\partial t} \frac{S}{\rho} + (\mathbf{v} \nabla) \frac{S}{\rho} = 0,$$

выражающем постоянство переносимой частицами жидкости энтропии, отнесенной к единице массы.

²⁾ Сама же функция $2R$ дает (как и в § 33) скорость диссипации механической энергии (ср. VI, § 79).

где κ_{\parallel} и κ_{\perp} описывают теплопроводность в продольном и поперечном (по отношению к n) направлениях.

Закон сохранения энергии в гидродинамике выражается уравнением вида

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{\rho v^2}{2} + E \right] + \operatorname{div} \mathbf{Q} = 0, \quad (40,11)$$

где E — плотность внутренней энергии, а \mathbf{Q} — плотность потока энергии. Плотность энергии $E = E_0 + E_d$, где $E_0(\rho, S)$ относится к недеформированной, однородной среде, а энергия E_d связана с искажением поля $n(r)$. Согласно сказанному в конце § 36 величина E_d совпадает со свободной энергией F_d (36,1), с той лишь разницей, что модули упругости K_1, K_2, K_3 подразумеваются выраженнымми через плотность и энтропию, а не температуру.

Закон сохранения энергии содержится, конечно, в уравнениях движения. Мы же воспользуемся им для установления связи между введенными выше функцией R , тензором σ_{ik} и вектором N .

Раскроем производную по времени в уравнении (40,11) с учетом термодинамических соотношений

$$\left(\frac{\partial E}{\partial S} \right)_{\rho, n} = T, \quad \left(\frac{\partial E}{\partial \rho} \right)_{S, n} = \mu,$$

где μ — химический потенциал¹⁾. Имеем

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{\rho v^2}{2} + E \right] = \frac{v^2}{2} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho v \frac{\partial v}{\partial t} + \mu \frac{\partial \rho}{\partial t} + T \frac{\partial S}{\partial t} + \left(\frac{\partial E_d}{\partial t} \right)_{\rho, S}. \quad (40,12)$$

Рассмотрим отдельно последний член. Введя обозначение π_{kl} из (36,6), пишем

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial E_d}{\partial t} \right)_{\rho, S} &= \left(\frac{\partial E_d}{\partial n_i} \right)_{\rho, S} \frac{\partial n_i}{\partial t} + \pi_{kl} \partial_k \frac{\partial n_l}{\partial t} = \\ &= \left(\frac{\partial E_d}{\partial n_i} - \partial_k \pi_{kl} \right) \frac{\partial n_i}{\partial t} + \partial_k \left(\pi_{kl} \frac{\partial n_l}{\partial t} \right) = -h \frac{\partial n}{\partial t} + \partial_k \left(\pi_{kl} \frac{\partial n_l}{\partial t} \right) \end{aligned}$$

(вместо H здесь написано h , поскольку продольная часть H сразу выпадает ввиду равенства $n \partial n / \partial t = 0$). Подставив сюда $\partial n / \partial t$ из (40,3), пишем:

$$\left(\frac{\partial E_d}{\partial t} \right)_{\rho, S} = (v_k \partial_k n_l + \Omega_{lk} n_k - \lambda v_{lk} n_k) h_l - Nh + \operatorname{div} (\dots)$$

¹⁾ Подчеркнем, что E относится к заданному (единичному) объему, а переменным является число N частиц (молекул) в этом объеме. В V химический потенциал везде относился к одной частице, т. е. определялся как $\mu = \partial E / \partial N$. Поскольку $N = \rho / m$ (m — масса молекулы), то принято здесь определение отличается от определения в V лишь множителем m . Во избежание недоразумений при сравнении с термодинамическим соотношением (3,2a), напомним, что здесь E есть внутренняя энергия единицы объема в точном смысле этого слова, между тем как в § 3 величина \mathcal{E} определена как энергия количества вещества, заключенного в единице объема недеформированного тела.

и после выделения еще одной полной дивергенций:

$$\left(\frac{\partial E_d}{\partial t} \right)_{\rho, S} = -\mathbf{Gv} - \frac{1}{\gamma} h^2 + \operatorname{div}(\dots), \quad (40,13)$$

где

$$G_i = -h_k \partial_i n_h + \frac{1}{2} \partial_k (n_i h_k - n_k h_i) - \frac{\lambda}{2} \partial_k (n_i h_k + n_k h_i). \quad (40,14)$$

Здесь и ниже мы не выписываем полностью выражение под знаком дивергенции с целью уменьшения громоздкости формул. Эти члены (к которым мы вернемся еще в конце параграфа) не существенны для решения поставленного вопроса.

Выражение (40,14) можно представить в виде

$$G_i = \partial_k \sigma_{ik}^{(r)} + (\partial_i E_d)_{\rho, S}, \quad (40,15)$$

где

$$\sigma_{ik}^{(r)} = -\pi_{kl} \partial_i n_l - \frac{\lambda}{2} (n_i h_k + n_k h_i) + \frac{1}{2} (n_i h_k - n_k h_i). \quad (40,16)$$

При преобразовании использовано равенство

$$(\partial_i E_d)_{\rho, S} = \frac{\partial E_d}{\partial n_k} \partial_i n_k + \pi_{ik} \partial_i \partial_k n_k.$$

Определение тензора $\sigma_{ik}^{(r)}$ неоднозначно: выражение (40,15) не изменится при добавлении к $\sigma_{ik}^{(r)}$ любого слагаемого вида $\partial_i \chi_{ilk}$, где χ_{ilk} — произвольный тензор, антисимметричный по последней паре индексов ($\chi_{ilk} = -\chi_{ikl}$). Хотя тензор (40,16) не симметричен, он может быть приведен к симметричному виду прибавлением члена указанного вида с надлежащим образом подобранным тензором χ_{ilk} . Фактическое проведение этой, довольно громоздкой, операции отложим до конца параграфа, а сейчас продолжим вывод уравнений движения, предполагая симметризацию $\sigma_{ik}^{(r)}$ уже произведенной.

Подставив (40,15) в (40,13) и выделяя в одном из членов полную дивергенцию (с учетом симметричности $\sigma_{ik}^{(r)}$), получим¹⁾

$$\left(\frac{\partial E_d}{\partial t} \right)_{\rho, S} = -\mathbf{Nh} + \sigma_{ik}^{(r)} v_{ik} - (\partial_i E)_{\rho, S} v_i + \operatorname{div}(\dots). \quad (40,17)$$

Наконец, подставим в (40,12) фигурирующие там производные по времени из (40,5), (40,7—8) и (40,17), причем частную (при постоянных ρ и S) производную от E выразим через полную производную согласно

$$\partial_i E = (\partial_i E)_{\rho, S} + \mu \partial_i \rho + T \partial_i S.$$

¹⁾ Поскольку $E_0 = E_0(\rho, S)$, то $(\partial_i E_d)_{\rho, S} = (\partial_i E)_{\rho, S}$.

После ряда преобразований (выделения полных дивергенций) получим в результате

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{\rho v^2}{2} + E \right] = -\sigma'_{ik} v_{ik} - Nh + \frac{1}{T} q \nabla T + 2R + \operatorname{div}(\dots), \quad (40,18)$$

где σ'_{ik} связано с σ_{ik} формулой

$$\sigma_{ik} = -p \delta_{ik} + \sigma_{ik}^{(r)} + \sigma'_{ik}, \quad (40,19)$$

а давление введено согласно его термодинамическому определению:

$$p = \rho \mu - E + TS \quad (40,20)$$

($\rho \mu = \Phi$ — термодинамический потенциал единицы объема вещества); как и должно быть, им определяется изотропная часть тензора напряжений.

Сравнив (40,18) с уравнением сохранения энергии (40,11), мы видим, что

$$2R = \sigma'_{ik} v_{ik} + Nh - \frac{1}{T} q \nabla T. \quad (40,21)$$

Эта функция определяет вызванное диссипативными процессами увеличение энтропии. Ясно поэтому, что введенный в (40,19) тензор σ'_{ik} представляет собой диссипативную («вязкую») часть тензора напряжений. Тензор же $\sigma_{ik}^{(r)}$ в (40,21) не входит; он представляет собой недиссипативную (помимо связанной с давлением) часть тензора напряжений¹⁾, специфическую для нематической (в отличие от обычной) жидкости.

Обратим также внимание на то, что в диссипативную функцию не входит коэффициент λ . Хотя описываемый этим безразмерным коэффициентом эффект имеет явно кинетическую (а не термодинамическую) природу, он не диссипативен²⁾.

Плотность объемных сил в движущейся нематической среде

$$F_i = -\partial_i p + \partial_k \sigma_{ik}^{(r)} + \partial_k \sigma'_{ik} \equiv -\partial_i p + F_i^{(r)} + F'_i.$$

В неподвижной равновесной (хотя и деформированной) среде $F' = 0$, а согласно условию равновесия (36,7) и $h = 0$. Согласно (40,14—15) при этом сила

$$F^{(r)} = -(\nabla E_d)_{\rho, S}, \quad F = -\nabla p - (\nabla E_d)_{\rho, S}.$$

Если считать модули упругости постоянными, не зависящими от ρ и S величинами, то $(\nabla E_d)_{\rho, S} = \nabla E_d$ и тогда сила $F = -\nabla(p + E_d)$. Но в равновесии должно быть также и $F = 0$.

¹⁾ Ее иногда называют реактивной частью (отсюда индекс (r) , которым мы снабдили ее обозначение).

²⁾ Эта ситуация не уникальна: напомним эффект Холла в электродинамике проводящих тел; он тоже ве связан с диссипацией.

Отсюда следует, что (в указанном предположении) распределение давления вдоль находящейся в равновесии нематической среды дается формулой¹⁾

$$\rho = \text{const} - E_d. \quad (40,22)$$

Произведем теперь в явном виде упомянутую выше операцию симметризации тензора $\sigma_{ik}^{(r)}$. Прежде всего, вычислим в явном виде антисимметричную часть этого тензора. При вычислении разности $\sigma_{ik}^{(r)} - \sigma_{ki}^{(r)}$ надо учесть, что выражение

$$B_{ik} = \frac{\partial E_d}{\partial n_i} n_k + \pi_{il} \partial_l n_k - \pi_{kl} \partial_l n_l$$

симметрично по индексам i, k . Проверить эту симметрию непосредственно нелегко. Проще сделать это косвенным путем, воспользовавшись тем, что энергия E_d — скаляр и тем самым инвариантна относительно произвольных вращений системы координат. При бесконечно малом повороте на угол $\delta\varphi$ координаты преобразуются как

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} + \delta\mathbf{r}, \quad \delta\mathbf{r} = [\delta\varphi \cdot \mathbf{r}],$$

т. е.

$$\delta x_i = e_{ik} x_k, \quad e_{ik} = e_{ilk} \delta\Phi_l = -e_{ki}.$$

Для изменения вектора \mathbf{n} и тензора $\partial_k n_i$ имеем соответственно

$$\delta n_i = e_{ii} n_i, \quad \delta(\partial_k n_i) = e_{il} \partial_k n_l + e_{kl} \partial_l n_i.$$

Инвариантность функции E_d при этом повороте означает, что $B_{ik} e_{ik} = 0$. Поскольку e_{ik} — произвольный антисимметричный тензор, то отсюда следует, что B_{ik} — симметричный тензор, что и требовалось доказать.

Имея это в виду, легко привести антисимметричную часть тензора $\sigma_{ik}^{(r)}$ к виду (2,11) с тензором

$$\Phi_{ikl} = n_i \pi_{lk} - n_k \pi_{li}.$$

После этого симметризованный тензор $\sigma_{ik}^{(r)}$ получается непосредственно по формуле (2,13). После некоторых приведений получим

$$\begin{aligned} \sigma_{ik}^{(r)} = & -\frac{\lambda}{2} (n_i h_k + n_k h_i) - \frac{1}{2} (\pi_{kl} \partial_l n_i + \pi_{il} \partial_k n_l) - \\ & - \frac{1}{2} \partial_l [(\pi_{ik} + \pi_{ki}) n_l - \pi_{kl} n_i - \pi_{il} n_k]. \end{aligned} \quad (40,23)$$

¹⁾ Если не делать указанных предположений, то силу \mathbf{F} при постоянной температуре можно привести к виду $\mathbf{F} = -\rho \nabla \mu$ так, что условие равновесия сводится к обычному $\mu = \text{const}$. Действительно, дифференцируя выражение (40,20) для давления и учитывая термодинамическое соотношение $dE = T dS + \mu dp + (dE_d)_p, S$, найдем $-\nabla p = -\rho \nabla \mu - SVT + (\nabla E_d)_p, S$, откуда при $T = \text{const}$ и получается указанное выражение для \mathbf{F} .

Отметим, что это выражение фактически содержит только поперечные (по индексу k) компоненты тензора π_{ik} . Если представить последний в виде

$$\pi_{ik} = \pi_{ik}^{(t)} + \pi_{il} n_k n_l$$

(так что $\pi_{ik}^{(t)} n_k = 0$), то в (40,23) останутся только члены с $\pi_{ik}^{(t)}$.

Наконец, вернемся к членам с полными дивергенциями, которые мы до сих пор не выписывали. Сравнив (40,18) с (40,11), видим, что выражение, стоящее под знаком div в совокупности этих членов, определит собой плотность потока энергии. Приведем здесь получающийся таким образом окончательный результат:

$$\begin{aligned} Q_i = & \left(W + \frac{v^2}{2} \right) v_i - \pi_{ik} \{ -v_l \partial_l n_k + \Omega_{ik} n_l + \lambda n_l (v_{kl} - n_k n_m v_{lm}) \} + \\ & + \frac{1}{2} (n_i h_k - n_k h_i) v_k + \frac{\lambda}{2} (n_i h_k + n_k h_i) v_k - \sigma'_{ik} v_k - \kappa_{ik} \partial_k T, \end{aligned} \quad (40,24)$$

где $W = p + E$ — тепловая функция. Первый член совпадает с выражением потока энергии в гидродинамике обычной жидкости.

§ 41. Диссипативные коэффициенты нематиков

Члены с N и σ'_{ik} в уравнениях движения выражают собой релаксационные процессы, возникающие вследствие термодинамической неравновесности среды; эта неравновесность в свою очередь связана с различными от нуля h и v_{ik} . В обычном гидродинамическом приближении неравновесность предполагается слабой, т. е. величины h , v_{ik} — в определенном смысле малыми. Тогда σ'_{ik} является их линейными функциями.

Однако при принятой нами форме записи уравнений движения зависящих от h членов в σ'_{ik} писать не надо. Действительно, такие члены, составленные из компонент h и n , имели бы вид $\text{const.} (n_i h_k + n_k h_i)$. Но член такого вида уже есть в недиссипативной части тензора напряжений $\sigma_{ik}^{(r)}$ (40,23); добавление подобного члена в σ'_{ik} сводилось бы поэтому лишь к переопределению коэффициента λ .

Общий вид линейной зависимости σ'_{ik} от v_{ik} :

$$\sigma'_{ik} = \eta_{iklm} v_{lm}, \quad (41,1)$$

причем тензор четвертого ранга η_{iklm} обладает очевидными свойствами симметрии (следствиями симметрии тензоров σ'_{ik} и v_{ik})

$$\eta_{iklm} = \eta_{kilm} = \eta_{ikml}. \quad (41,2)$$

Кроме того, этот тензор обладает и более глубокой симметрией, следующей из общего принципа симметрии кинетических коэффициентов Онсагера (см. V, § 120; как и в § 32, ниже в этом параграфе