образом, при течении по трубке большого по сравнению с $1/q$ радиуса формула (43,8) будет справедлива везде, за исключением лишь очень тонкого (толщина порядка шага геликоидальной структуры) пристеночного слоя.

§ 44. Упругие свойства смектиков

По принятой терминологии к категории *смектических* жидких кристаллов (или *смектиков*) относятся анизотропные жидкости разнообразной слоистой структуры. По крайней мере некоторые из них представляют собой тела с микроскопической функцией плотности молекул, зависящей только от одной координаты (скажем, z) и периодической по ней, $\rho = \rho(z)$. Напомним (см. V, § 128), что функцией плотности определяется распределение вероятностей различных положений частиц в теле; в данном случае можно говорить о различных положениях молекул как целого, т. е. $\rho\, dV$ есть вероятность центру инерции отдельной молекулы находиться в элементе объема dV. Тело с функцией плотности $\rho(z)$ можно представлять себе как состоящее из свободно смещающихся друг относительно друга плоских слоев, расположенных на одинаковых расстояниях друг от друга. В каждом из слоев расположение центров инерции молекул беспорядочно, и в этом смысле каждый из них представляет собой «двумерную жидкость», жидкие слои, однако, могут быть как изотропными, так и анизотропными. Это различие может быть связано с характером упорядоченной ориентации молекул в слоях. В простейшем случае анизотропия распределения ориентаций задается всего одним направлением $\mathbf{n}$ (скажем, направлением «длинной оси» молекулы). Если это направление перпендикулярно плоскости слоев, слои изотропны, так что ось z является осью аксиальной симметрии тела; такова, по-видимому, структура так называемых *смектиков A*. Если же направление $\mathbf{n}$ наклонно к плоскости x, y, то в этой плоскости появляется избранное направление и осевая симметрия исчезает; такова, по-видимому, структура так называемых *смектиков C*.

Мы будем рассматривать ниже только более простые смектики A (и говорить о них просто как о смектиках). Во всех известных смектиках A, помимо аксиальной симметрии вокруг оси z, имеет место также и эквивалентность обоих направлений оси z. Если смектик обладает еще и центром инверсии, то его макроскопическая симметрия (т. е. точечная группа симметрии) такая же, как у нематиков; микроскопическая же симметрия, а с нею и механические свойства, конечно, совершенно разные.

По поводу сказанного до сих пор надо сделать следующую очень важную оговорку. Существование структуры с непостоянной вдоль объема тела функцией плотности предполагает достаточную малость смещений, испытываемых малыми участками тела в резуль-

тате тепловых флуктуаций. Между тем для структуры с $\rho = \rho(z)$ эти флуктуационные смещения неограниченно растут при увеличении размеров тела (см. V, § 137). Строго говоря, это означает невозможность существования одномерной периодической структуры в неограниченной по своим размерам среде. Фактически, однако, смысл этого утверждения оказывается весьма условным ввиду медленности (всего логарифмической) возрастания флуктуаций при увеличении размеров тела. Оценки (использующие типичные значения материальных констант известных смектиков) показывают, что разрушение одномерной периодической структуры могло бы произойти лишь при практически нереальных огромных размерах и, таким образом, в любой реальной постановке вопроса структура $\rho(z)$ оказывается осуществимой.

Подчеркнем в то же время, что с разрушенной флуктуациями структурой $\rho(z)$ (т. е. в которой стало уже $\rho = \text{const}$) среда отнюдь не становится обычной жидкостью. Принципиальное отличие состоит в свойствах корреляционной функции флуктуаций плотности в различных точках пространства: $\langle \delta\rho(\mathbf{r}_1)\, \delta\rho(\mathbf{r}_2)\rangle$. В обычной жидкости эта функция изотропна и убывает при $r = |\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1| \to \infty$ по экспоненциальному закону (см. V, § 116). В системе же с $\rho = \rho(z)$ корреляционная функция остается (при увеличении размеров тела) анизотропной и убывает при $r \to \infty$ лишь по медленному, степенному закону, причем тем медленнее, чем ниже температура (см. V, § 138).

Приступая к построению механики смектических сред, надо начать с отыскания выражения для плотности свободной энергии их деформации. Ввиду микроскопической однородности среды в плоскости x, y смещения ее точек в этой плоскости связаны с изменением энергии лишь постольку, поскольку они приводят к изменению плотности вещества. Имея это в виду, выберем в качестве основных гидродинамических переменных (помимо температуры, предполагающейся постоянной вдоль среды) плотность ρ и смещение $u_z \equiv u$ точек среды вдоль оси z. Энергия деформации зависит от изменения плотности $\rho - \rho_0$ (ρ_0 — плотность недеформированной среды) и от производных смещения u по координатам. При этом первые производные $\partial u/\partial x$, $\partial u/\partial y$ вообще не могут входить в квадратичную часть свободной энергии: если повернуть тело как целое вокруг осей x или y, то эти производные изменятся, между тем как энергия должна остаться неизменной [1]).

Как всегда в теории упругости, изменения всех величин в пространстве будут предполагаться достаточно медленными, так что энергия деформации определяется первыми неисчезающими членами разложения по степеням пространственных производных.

---

[1]) В упругую энергию твердых тел эти производные входят в комбинациях u_{xz} и u_{yz} с производными от u_x и u_y; эти комбинации при указанном повороте не изменятся.

Кроме того, однако, будет предполагаться еще и более далеко идущее условие: сами смещения u предполагаются настолько малыми, что слои остаются везде почти параллельными одной и той же плоскости x, y [1]).

В этих предположениях и с учетом симметрии среды свободная энергия деформации смектика дается следующим выражением:

$$F_d = F - F_0(T) =$$
$$= \frac{A}{2\rho_0}(\rho-\rho_0)^2 + C(\rho-\rho_0)\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{B\rho_0}{2}\left(\frac{\partial u}{\partial z}\right)^2 +$$
$$+ \frac{K_1}{2}(\Delta_\perp u)^2, \quad \Delta_\perp = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}. \qquad (44,1)$$

Член вида [2]) $(\partial u/\partial z)\,\Delta_\perp u$ запрещается предполагаемой здесь эквивалентностью обоих направлений оси z, т. е. симметрией по отношению к преобразованию $u \to -u$, $z \to -z$, $x, y \to x, y$ (отражение в плоскости x, y) или $u \to -u$, $z \to -z$, $y \to -y$, $x \to x$ (поворот вокруг горизонтальной оси второго порядка — оси x); по этой же причине отсутствует член вида $(\rho - \rho_0)\,\Delta_\perp u$. Учет первого члена разложения по вторым производным (отсутствующий в теории упругости твердых тел) необходим ввиду отсутствия в F_d первых производных по x и y. Условия устойчивости недеформированного состояния, т. е. условия положительности энергии (44,1), гласят

$$A > 0, \quad B > 0, \quad AB > C^2. \qquad (44,2)$$

Обозначение коэффициента K_1 в (44,1), совпадающее с обозначением в (36,1), выбрано не случайно. Действительно, деформацию слоистой структуры смектиков можно описывать распределением директора $\mathbf{n}(\mathbf{r})$, понимая его как нормаль к деформированным слоям, задаваемым уравнениями $u(\mathbf{r}) = \text{const}$. При малом искажении слоев

$$n_x \approx \frac{\partial u}{\partial x}, \quad n_y \approx \frac{\partial u}{\partial y}, \quad n_z \approx 1, \qquad (44,3)$$

и тогда $(\Delta_\perp u)^2 = (\operatorname{div}\mathbf{n})^2$, т. е. как раз та величина, которая фигурирует в соответствующем члене в (36,1). Коэффициенты же

---

[1]) В этом смысле область применимости развиваемой здесь механики смектиков более узка, чем для рассмотренной выше механики нематиков, в которой допускались поля директора $\mathbf{n}(\mathbf{r})$, сколь угодно сильно отличающиеся от недеформированного однородного распределения.

[2]) Такой член фигурировал в V, § 137.

B и C в (44,1) характерны для специфической кристаллической природы смектиков, отличающих их от нематиков [1]).

Обратим внимание на то, что в приближении (44,3) $\mathbf{n}\,\mathrm{rot}\,\mathbf{n} \approx \approx \mathrm{rot}_z\,\mathbf{n} = 0$. Поэтому член вида $\mathbf{n}\,\mathrm{rot}\,\mathbf{n}$ в свободной энергии (а тем самым и холестерическое искажение структуры — § 43) в смектиках отсутствует вне зависимости от наличия или отсутствия среди его элементов симметрии центра инверсии.

Уравнения равновесия смектика получаются минимизацией полной свободной энергии по переменным ρ и u при дополнительном условии $\int \rho\, dV = \mathrm{const}$, выражающем сохранение полной массы тела. Минимизируя разность

$$\int F_d\, dV - \lambda \int \rho\, dV$$

(где λ — постоянный множитель Лагранжа) по ρ, получим равенство

$$\frac{A}{\rho_0}(\rho - \rho_0) + C\frac{\partial u}{\partial z} = \lambda,$$

связывающее изменение плотности с деформацией слоев. Полагая, что ρ_0 есть плотность при $\partial u/\partial z = 0$, имеем $\lambda = 0$, и тогда

$$\rho - \rho_0 = -\rho_0 m \frac{\partial u}{\partial z}, \qquad m = \frac{C\rho_0}{A}. \tag{44,4}$$

Безразмерный коэффициент m связан с коэффициентом Пуассона σ для «стержня», вырезанного из смектика в направлении оси z. Действительно,

$$\frac{\rho - \rho_0}{\rho_0} = -\frac{V - V_0}{V_0} = -(u_{xx} + u_{yy} + u_{zz}),$$

(см. (1,6)), где $u_{zz} = \partial u/\partial z$, а u_{xx}, u_{yy} — компоненты тензора деформации в плоскости x, y. Полагая $u_{xx} = u_{yy}$, имеем

$$u_{xx} = -\frac{1-m}{2}u_{zz}$$

---

[1]) Подчеркнем, что директор $\mathbf{n}$ (понимаемый как избранное направление ориентации молекул в слоях) не является в смектиках (смектиках A) независимой гидродинамической переменной. Для переменной $\mathbf{n}$ в гидродинамике нематиков характерно, что однородный поворот поля $\mathbf{n}(\mathbf{r})$ во всем теле не связан с изменением энергии. Именно поэтому медленное изменение $\mathbf{n}$ вдоль тела связано лишь с малым изменением энергии, последняя зависит только от производных от $\mathbf{n}$ и может быть разложена по ним. В смектиках же всякий такой поворот меняет ориентацию относительно слоистой структуры и был бы связан со значительным изменением энергии. Отметим, что в смектиках C, где директор наклонен к нормали под некоторым определенным углом, однородный поворот направлений $\mathbf{n}$ вокруг нормалей с сохранением величины угла наклона снова не был бы связан с изменением энергии. Поэтому здесь снова появляется новая гидродинамическая переменная — проекция $\mathbf{n}$ на плоскость слоев.

и, сравнив с определением (5,4):

$$\sigma = (1-m)/2. \tag{44,5}$$

При $m = 0$ коэффициент σ принимает характерное для жидкости значение $\sigma = 1/2$.

Исключив из (44,1) изменение плотности с помощью (44,4), получим свободную энергию, выраженную только через u:

$$F_d = \frac{\rho_0 B'}{2}\left(\frac{\partial u}{\partial z}\right)^2 + \frac{K_1}{2}(\Delta_\perp u)^2, \tag{44,6}$$

где

$$B' = B - C^2/A. \tag{44,7}$$

Варьируя полную свободную энергию по u, найдем теперь после нескольких интегрирований по частям:

$$\delta \int F_d\, dV = -\int F_z \delta u\, dV, \tag{44,8}$$

где

$$F_z = \rho_0 B' \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} - K_1 \Delta_\perp^2 u. \tag{44,9}$$

Очевидно, что F_z есть (отнесенная к единице объема) сила, действующая в направлении оси z в деформированном смектике при условии, что изменение плотности уже «подстроилось» под деформацию.

В равновесии $F_z = 0$, так что смещение u удовлетворяет линейному дифференциальному уравнению

$$\rho_0 B' \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} - K_1 \Delta_\perp^2 u = 0. \tag{44,10}$$

Если на тело действуют еще и приложенные к нему объемные внешние силы, то они должны быть добавлены к левой стороне уравнения (ср. (2,8)).

Отношение $(K_1/B'\rho_0)^{1/2}$ имеет размерность длины и грубая его оценка есть: $(K_1/B'\rho_0)^{1/2} \sim a$, где a — период одномерной структуры (расстояние между слоями). Если смектик подвергнут деформации, существенно меняющейся в плоскости x, y на расстояниях $\sim l_\perp \gg a$, то из (44,10) следует, что в направлении оси z деформация испытывает существенное изменение лишь на расстояниях $l_\parallel \sim l_\perp^2/a \gg l_\perp$.

В качестве примера найдем гриновскую функцию уравнения (44,10), т. е. смещение $u = G_{zz}(\mathbf{r}) \equiv G(\mathbf{r})$ в переменной точке $\mathbf{r}$, вызванное единичной сосредоточенной силой, приложенной в точке $\mathbf{r} = 0$ и действующей в направлении оси z (ср. задачу к § 8). Эта функция удовлетворяет уравнению

$$\rho_0 B' \frac{\partial^2 G}{\partial z^2} - K_1 \Delta_\perp^2 G + \delta(\mathbf{r}) = 0. \tag{44,11}$$

Совершая над этим уравнением преобразование Фурье (т. е. умножив его на $e^{-i\mathbf{kr}}$ и проинтегрировав по d^3x), находим для фурье-компонент функции $G(\mathbf{r})$ выражение

$$G_{\mathbf{k}} = [\rho_0 B' k_z^2 + K_1 k_\perp^4]^{-1},$$

где $k_\perp^2 = k_x^2 + k_y^2$. Обратное фурье-преобразование дает искомую функцию в виде интеграла

$$G(\mathbf{r}) = \int \frac{e^{i\mathbf{kr}}}{\rho_0 B' k_z^2 + K_1 k_\perp^4} \frac{d^3k}{(2\pi)^3}. \qquad (44,12)$$

Этот интеграл логарифмически расходится при $\mathbf{k} \to 0$. Для придания ему определенного смысла надо исключить перемещение тела как целого, предположив закрепленной некоторую условно выбранную его точку, $\mathbf{r} = \mathbf{r}_0$; тогда в числителе подынтегрального выражения надо писать $e^{i\mathbf{kr}} - e^{i\mathbf{kr}_0}$ и расходимость устраняется.

Вернемся еще раз к вопросу о влиянии тепловых флуктуаций на свойства смектиков — на этот раз на их упругие свойства. Наиболее определенным образом вопрос может быть поставлен следующим образом: как меняется под влиянием флуктуаций деформация, создаваемая приложенной к телу сосредоточенной силой, т. е. как меняется гриновская функция $G(\mathbf{r})$? Оказывается, что это изменение сводится к замене в выражении (44,12) k_z^2 и $k_\perp^4$ соответственно на

$$k_z^2 \left(\ln \frac{1}{ak_z}\right)^{-4/5} \quad \text{и} \quad k_\perp^4 \left(\ln \frac{1}{ak_\perp}\right)^{2/5},$$

где a — величина порядка периода структуры [1]). В свою очередь такое изменение можно наглядно интерпретировать как изменение эффективных значений упругих модулей B' и K_1 при уменьшении характерных значений волнового вектора деформации (т. е. увеличении ее характерной протяженности $\sim 1/k$). Мы видим, что эффективное значение $B'_{\text{эфф}}$ убывает при $k_z \to 0$ как $[\ln(1/ak_z)]^{-4/5}$, а $K_{1\text{эфф}}$ растет при $k_\perp \to 0$ как $[\ln(1/ak_\perp)]^{2/5}$. Фактически, однако, эти эффекты могли бы стать существенными лишь при практически нереальных огромных размерах.

Укажем в заключение этого параграфа, что выражение (44,6) для упругой энергии смектика можно несколько обобщить включением в него некоторых членов более высокого порядка, но без введения при этом дополнительных коэффициентов.

Для этого заметим, что вклад в энергию, описываемый первым членом в (44,6), физически связан с изменением расстояния a

---

[1]) *Grinstein G., Pelcovits R. A.* — Phys. Rev. Lett., 1981, v. 47, p. 856; Phys. Rev, 1982, v. A26, p. 915; *Е. И. Кац.* — ЖЭТФ, 1982, т. 83, с. 1376. При исследовании необходимо учитывать также и члены третьего и четвертого порядков по u в разложении свободной энергии.

между слоями; производная $\partial u/\partial z$ совпадает с относительным изменением этого расстояния при смещении $u_z = u$, и потому этот член можно записать в виде $^1/_2\ \rho_0 B'\ (\delta a/a)^2$. Но расстояние между слоями может измениться не только из-за зависимости смещения u от координаты z, но и от его зависимости от x и y. Это легко понять, представив себе все слои одновременно повернутыми, скажем, вокруг оси y на угол θ таким образом, что величина периода структуры вдоль оси z остается равной a; расстояние же между слоями (измеренное по направлению нормалей к ним) оказывается при этом равным $a \cos\theta$. При малых углах θ изменение расстояния между слоями

$$\delta a = a(\cos\theta - 1) \approx -a\theta^2/2.$$

Поскольку в то же время смещение u при рассматриваемом повороте есть $u = \text{const} + x \operatorname{tg}\theta \approx \text{const} + x\theta$, то

$$\frac{\delta a}{a} = -\frac{1}{2}\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2.$$

В таком виде это выражение справедливо при любой зависимости u от x; если же u зависит также и от y, то вместо $(\partial u/\partial x)^2$ надо писать $(\nabla_\perp u)^2$.

Таким образом, с учетом описанного эффекта свободную энергию (44,6) надо писать в виде

$$F_d = \frac{\rho_0 B'}{2}\left[\frac{\partial u}{\partial z} - \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 - \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)^2\right]^2 + \frac{K_1}{2}(\Delta_\perp u)^2. \quad (44,13)$$

Это выражение используется в задаче к этому параграфу.

Задача

Слой смектика (толщины h) с плоскими границами, параллельными плоскостям слоистой структуры, подвергнут однородному растяжению вдоль перпендикулярной ему оси z. Найти критическую величину растяжения, за которым слоистая структура смектика становится неустойчивой по отношению к поперечным возмущениям (*W. Helfrich*, 1971) [1].

Решение. Однородное растяжение означает деформацию $u = \gamma z$, где постоянная $\gamma > 0$. Для исследования устойчивости полагаем $u = \gamma z + \delta u\ (x, z)$, где δu — малое возмущение, удовлетворяющее граничным условиям $\delta u = 0$ при $z = \pm h/2$ (плоскость x, y выбрана посередине слоя). С точностью до членов второго порядка, полная упругая энергия возмущения (отнесенная к единице длины вдоль оси y):

$$\int \delta F_d dx\, dz = \frac{1}{2}\int\left\{B'\rho_0\left(\frac{\partial \delta u}{\partial z}\right)^2 - B'\rho_0\gamma\left(\frac{\partial \delta u}{\partial x}\right)^2 + K_1\left(\frac{\partial^2 \delta u}{\partial x^2}\right)^2\right\} dx\, dz \quad (1)$$

(член с $\gamma\, \partial\delta u/\partial z$ выпадает при интегрировании по dz в силу граничных условий).

Будем рассматривать возмущения вида

$$\delta u = \text{const}\cdot\cos k_z z\cdot\cos k_x x, \quad k_z = \pi n/h, \quad n = 1, 2, \ldots$$

---

[1]) Эта неустойчивость аналогична рассмотренной в § 21 неустойчивости сжимаемого прямого стержня.

(поперечная модуляция слоистой структуры). Условие устойчивости структуры состоит в положительности энергии (1). Заменив все интегрируемые множители $\sin^2$, $\cos^2$ их средними значениями 1/2, получим это условие в виде

$$B'\rho_0\left(k_z^2-\gamma k_x^2\right)+K_1k_x^4>0.$$

Граница устойчивости (по мере увеличения γ) определяется появлением вещественного корня k_x^2 трехчлена в левой стороне этого неравенства (комплексные значения k_x не удовлетворяют условию конечности возмущения во всей плоскости x, y). Первое такое появление происходит для возмущения с $n=1$. Для него находим критическое растяжение и соответствующее значение $k_x=k_{\text{кр}}$ [1]):

$$\gamma_{\text{кр}}=\frac{2\pi}{h}\left(\frac{K_1}{\rho_0B'}\right)^{1/2},\quad k_{\text{кр}}=\frac{\pi}{4}\left(\frac{\rho_0B'}{K_1}\right)^{1/2}.$$

§ 45. Дислокации в смектиках

Понятие дислокации в смектике имеет тот же смысл, что и в обычном кристалле. Разница состоит лишь в том, что ввиду одномерной (вдоль оси z) периодичности микроскопической структуры смектиков вектор Бюргерса дислокации в них всегда направлен по оси z, а по величине равен целому кратному от периода a структуры.

С учетом этого замечания для деформации вокруг дислокации в смектике остается справедливой полученная в § 27 формула (27,10) — при надлежащем определении тензора модулей упругости λ_{iklm}. Для этого введем тензор напряжений в смектике σ_{ik} в соответствии с обычным определением, т. е. по формуле

$$F_z=\partial_k\sigma_{zk},\tag{45,1}$$

где F_z — объемная «сила внутренних напряжений» (44,9). Введем также тензор деформаций, отвечающий смещению $u_z=u$; отличные от нуля его компоненты:

$$u_{zz}=\frac{\partial u}{\partial z},\quad u_{xz}=\frac{1}{2}\frac{\partial u}{\partial x},\quad u_{yz}=\frac{1}{2}\frac{\partial u}{\partial y}.\tag{45,2}$$

Сила (44,9) может быть представлена в виде (45,1), если выразить тензор напряжений через тензор деформации формулами $\sigma_{ik}=\lambda_{iklm}\sigma_{lm}$ с [2])

$$\lambda_{zzzz}=\rho_0B',\quad \lambda_{zxzx}=\lambda_{zyzy}=-K_1\Delta_\perp,\quad \lambda_{zxzy}=\lambda_{zxxz}=\lambda_{zyyz}=0;\tag{45,3}$$

некоторые из этих компонент — операторы.

---

[1]) Значение $k_{\text{кр}}$ определяет лишь абсолютную величину «волнового вектора» возмущения в плоскости x, y, но не полную симметрию возникающей деформации. Определение последней требует выхода за границы приближения, отвечающего линейным (по δu) уравнениям равновесия (ситуация здесь аналогично той, которая имеет место для конвективной неустойчивости плоскопараллельного слоя жидкости — см. VI, § 57). См. *Delrieu J. M.* — Journ. Chem. Phys., 1974, v. 60, p. 1081.

[2]) Остальные компоненты λ_{iklm} можно выбрать так, чтобы было $F_x=F_y=0$; в формулу (45,4) эти компоненты не входят.