01

Функциональный подход к проблеме Бенара–Рэлея для нематического жидкого кристалла

© А.В. Веревочников, Н.Г. Мигранов, А.Н. Чувыров

Башкирский государственный университет

Поступило в Редакцию 25 июня 1997 г.
В окончательной редакции 25 февраля 1998 г.

Предложен вывод функционала — обобщенного термодинамического потенциала — аналога свободной энергии для открытой системы, какой является нематический жидкий кристалл в поле градиента температур. Вблизи порога термоконвекции все гидродинамические переменные удается описать одной комплексной амплитудой w — параметром порядка системы, которая позволяет определить интенсивность вращения возникающих роллов и их местоположение в пространстве. Из условия ортогональности решений удалось получить уравнение Эйлера, по которому был восстановлен обобщенный термодинамический потенциал, экстремумы которого соответствуют наиболее вероятным реализациям диссипативных структур.

Целью настоящей работы являлось развитие идеи Грэхэма [1] об установлении макроскопической теории, которая могла бы заменить термодинамику нематического жидкого кристалла, вдали от термодинамического равновесия. В частности, удалось найти приемлемое определение обобщенного термодинамического потенциала для неравновесных устойчивых состояний, который сохраняют наиболее важные свойства термодинамически равновесного потенциала (например, свободной энергии). Главным остается предположение о малости флуктуационных процессов в системе нематического жидкого кристалла, и это допущение, скорее всего, выполняется для рассматриваемых нами начальных бифуркационных процессов.

Попытка описать поведение нематического жидкого кристалла на языке функционала, во внешнем электрическом поле, была предпринята в работах [2,3], но к проблеме Бенара–Рэлея в нематическом жидком кристалле, как нам кажется, метод обобщенного термодинамического потенциала еще не применялся.

Рассмотрим систему нелинейных уравнений нематодинамики, описывающих поведение бесконечного тонкого плоскопараллельного слоя нематика толщиной l, лежащего в плоскости XY, в поле градиента температур [4]. Предположим, что все переменные, описывающие поведение нематика в поле градиента температур, зависят только от координат x_1 и x_3.

Рассмотрим уравнения движения нематического жидкого кристалла в приближении Буссинеска (в частности, считается, что коэффициенты теплопроводности $\kappa_\perp$ и $\kappa_\parallel$ не зависят от температуры). Не меняя физического смысла, можно положить, что значения коэффициентов Франка K_{ii}, входящих в уравнение Навье–Стокса [4], близки друг к другу — $K_{ii} \approx K$ (одноконстантное приближение). Величина $\beta\Delta T$ считается малой, величина $\chi\rho_0 gl$ — исчезающе малой и в уравнении теплопроводности нематического жидкого кристалла энергия вязкой диссипации не учитывается [4], здесь β — коэффициент термического расширения, χ — изотермическая сжимаемость, ρ_0 — плотность кристалла, g — ускорение свободного падения.

Система уравнений нематодинамики в поле градиента температур принимает следующий вид:

$$\begin{aligned}\frac{\partial v_i}{\partial t} + v_j\frac{\partial v_i}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_j}\Bigg(&K\frac{\partial n_k}{\partial x_i}\frac{\partial n_k}{\partial x_j}\\ &+ 2\alpha_2 n_j\left[\frac{\partial n_i}{\partial t} + v_k\frac{\partial n_i}{\partial x_k} + \frac{n_k}{2}\left(\frac{\partial v_k}{\partial x_i} - \frac{\partial v_i}{\partial x_k}\right)\right]\\ &+ 2\alpha_3 n_i\left[\frac{\partial n_j}{\partial t} + v_k\frac{\partial n_j}{\partial x_k} + \frac{n_k}{2}\left(\frac{\partial v_k}{\partial x_j} - \frac{\partial v_j}{\partial x_k}\right)\right]\\ &+ \left[\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i}\right] + \alpha_5\left[n_j n_k\left(\frac{\partial v_k}{\partial x_i} + \frac{\partial v_i}{\partial x_k}\right)\right]\\ &+ (\alpha_2 + \alpha_3 + \alpha_5)\left[n_i n_k\left(\frac{\partial v_k}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_k}\right)\right] + \sqrt{R}T\delta_{i3}\Bigg),\end{aligned} \qquad (1)$$

$$\frac{\partial v_i}{\partial x_i} = 0, \qquad (2)$$

$$\Pr\left(\frac{\partial T}{\partial t}+v_j\frac{\partial T}{\partial x_j}\right)=\sqrt{R}v_3+\kappa_\perp\frac{\partial^2 T}{\partial x_j^2}+(\kappa_\parallel-\kappa_\perp)\frac{\partial}{\partial x_j}\left(n_j n_k\frac{\partial T}{\partial x_k}\right), \quad (3)$$

$$\begin{aligned}
&Kn_3\frac{\partial^2 n_1}{\partial x_j^2}+2(\alpha_2-\alpha_3)n_3\left(\frac{\partial n_1}{\partial t}+v_k\frac{\partial n_1}{\partial x_k}+\frac{n_k}{2}\left[\frac{\partial v_k}{\partial x_1}-\frac{\partial v_1}{\partial x_k}\right]\right)\\
&\qquad-(\alpha_3+\alpha_2)n_3n_k\left(\frac{\partial v_1}{\partial x_k}+\frac{\partial v_k}{\partial x_1}\right)=Kn_1\frac{\partial^2 n_3}{\partial x_j^2}\\
&\qquad+2(\alpha_2-\alpha_3)n_1\left(\frac{\partial n_3}{\partial t}+v_k\frac{\partial n_3}{\partial x_k}+\frac{n_k}{2}\left[\frac{\partial v_k}{\partial x_3}-\frac{\partial v_3}{\partial x_k}\right]\right)\\
&\qquad-(\alpha_3+\alpha_2)n_1n_k\left(\frac{\partial v_3}{\partial x_k}+\frac{\partial v_k}{\partial x_3}\right), \qquad (4)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&Kn_1\frac{\partial^2 n_2}{\partial x_j^2}+2(\alpha_2-\alpha_3)n_1\left(\frac{\partial n_2}{\partial t}+v_k\frac{\partial n_2}{\partial x_k}+\frac{n_k}{2}\left[\frac{\partial v_k}{\partial x_2}-\frac{\partial v_2}{\partial x_k}\right]\right)\\
&\qquad-(\alpha_3+\alpha_2)n_1n_k\left(\frac{\partial v_2}{\partial x_k}+\frac{\partial v_k}{\partial x_2}\right)=Kn_2\frac{\partial^2 n_1}{\partial x_j^2}\\
&\qquad+2(\alpha_2-\alpha_3)n_2\left(\frac{\partial n_1}{\partial t}+v_k\frac{\partial n_1}{\partial x_k}+\frac{n_k}{2}\left[\frac{\partial v_k}{\partial x_1}-\frac{\partial v_1}{\partial x_k}\right]\right)\\
&\qquad-(\alpha_3+\alpha_2)n_2n_k\left(\frac{\partial v_1}{\partial x_k}+\frac{\partial v_k}{\partial x_1}\right). \qquad (5)
\end{aligned}$$

В выписанной обезразмеренной системе за масштаб длины бралась толщина пластины l, а времена определялись выражением $2\rho l^2/\alpha_4$. Вследствие указанной прецедуры в нашей задаче появились два параметра: числа Рэлея $R = \Delta T g\rho_0\beta l^3/(\alpha_4/2)\kappa_\perp$ и Прандтля $P=(\alpha_4/2)/\rho_0\kappa_\perp$.

На границах слоя нематического жидкого кристалла ($l = 0, 1$) все переменные принимаем равными нулю.

Таким образом, для нашей задачи мы вводим вектор, содержащий семь гидродинамических переменных $\mathbf{u}=(\mathbf{v}, T, p, n_2, n_3)$, n_1 определяется из соотношения $\mathbf{n}^2 = 1$.

Определяя нелинейный матричный оператор L, действующий на вектор $\mathbf{u}$, система уравнений, без учета флуктуационного слагаемого, может быть записана в следующем виде

$$L(\mathbf{u}) = 0. \tag{6}$$

В обезразмеренную систему уравнений, по известному приему [5], включается флуктуационное слагаемое $I = (\partial_j, s_{1j}, \partial_j s_{2j}, \partial_j s_{3j}, -\partial_j q_j, 0, r_{1j}, r_{2j})$, где s_{ij}, q_j, r_{ij} — флуктуационные члены. Тогда система будет выглядеть следующим образом

$$L(\mathbf{u}) = I. \tag{7}$$

Для достаточно малых значений R поведение системы определяет главным образом теплопроводность. И мы можем линеаризовать обезразмеренную систему. Рассматриваемая задача с неоднородными граничными условиями является не самосопряженной, в отличие от задачи Бенара в жидкости.

Собственные функции, соответствующие однородной задаче, ищем в виде $u_n(t) = u_n^{(0)} \exp(-\lambda_n(R)t)$. Как оказалось, при $R \to R_C$ в системе возникает мягкая мода, которая приводит к срыву устойчивости, и $\lambda_0(R_C) = 0$.

Нулевые решения рассматриваемой задачи имеют вид

$$\mathbf{u}^{(0)} = \exp[ik_C x_1]\Bigg(\frac{i\pi}{k_C} w\cos(\pi x_3), 0, w\sin(\pi x_3), \frac{\sqrt{R_C}}{-\pi^2\kappa_\perp - \kappa_\parallel k_C^2} w\sin(\pi x_3),$$

$$\left(\frac{(-1-\alpha_5-2\alpha_3-\alpha_2)\pi^3}{k_C^2} + (-2\alpha_3-\alpha_2-1-3\alpha_5)\pi\right) w\cos(\pi x_3), 0,$$

$$\frac{-2i(k_C^2\alpha_2 - \pi^2\alpha_3)}{k_C K(\pi^2 + k_C^2)} w\ \sin(\pi x_3)\Bigg) + c.\,c., \tag{8}$$

где $c.\,c.$ означает комплексно сопряженное выражение.

Теперь, делая подстановку $\mathbf{u}^{(0)}$ в (6), получим критические значения $R_C = 840.44$, $k_C = 1.57$.

Для достаточно больших времен, вблизи порога термоконвекции, все нормальные моды затухают, кроме $\mathbf{u}^{(0)}$. А это означает, что все гидродинамические переменные можно описать одной комплексной амплитудой w. В полученных соотношениях нет флуктуационных членов, поскольку они появляются только в высших порядках малости.

Для решения поставленной задачи вблизи порога термоконвекции нематического жидкого кристалла будет удобно выделить стандартным способом [1,4] разные масштабы длин по координатным осям и времени (скейлинг)[6]. Введем новые "медленные" параметры: $x_1 = \xi/\epsilon$, $x_2 = \eta/\sqrt{\epsilon}$, $t = \tau/\epsilon^2$, и делаем следующую замену: $w(t, x_1, x_2) \to \epsilon w(\tau, \xi, \eta)$, где ϵ — малый параметр. Делая указанную подстановку в обезразмеренную систему (1)–(5) $\partial_1 \to \partial_1 + \epsilon\partial_\xi$, $\partial_2 \to \partial\sqrt{\epsilon}\partial_\eta$, $\partial_t \to \epsilon^2\partial_\tau$ и собирая члены при одинаковых степенях ϵ, мы можем записать оператор L в уравнении (7) в виде разложения по степеням ϵ

$$L = L_0 + \epsilon^{1/2}L_{1/2} + \epsilon L_1 + \epsilon^{3/2}L_{3/2} + \epsilon^2 L_2 + \ldots \tag{9}$$

Вследствие громоздкости коэффициентов L_i в отличие от аналогичных операторов для жидкости, возникла необходимость в использовании современных методов компьютерной алгебры (в частности, программа аналитических преобразований системы нелинейных уравнений (1)–(5) была написана на языке MAPLE V и позволила получить результаты в аналитическом виде). Будем искать решения уравнения (7) в виде разложения по степеням ϵ [1]:

$$\mathbf{u} = \epsilon\left(\mathbf{u}^{(0)} + \epsilon^{1/2}\mathbf{u}^{(1/2)} + \epsilon\mathbf{u}^{(1)} + \epsilon^{3/2}\mathbf{u}^{(3/2)} + \epsilon^2\mathbf{u}^{(2)} + \ldots\right). \tag{10}$$

Подставляя это разложение в уравнение (7), с учетом того, что $L = L_0 + \epsilon^{1/2}L_{1/2}$, получаем в первом порядке по ϵ следующее уравнение:

$$L_0(\mathbf{u}) = 0. \tag{11}$$

Решение этого уравнения известно (8). Собирая члены при $\epsilon^{3/2}$, получим уравнение $L_0(\mathbf{u}^{(1/2)}) + L_{1/2}(\mathbf{u}^{(0)}) = 0$, из которого находим $\mathbf{u}^{(1/2)}$. Продолжая действовать аналогичным образом, находим $\mathbf{u}^{(1)}$, $\mathbf{u}^{(3/2)}$, $\mathbf{u}^{(2)}$. Процесс итерации завершается для ϵ^2, так как для высших степеней ϵ в уравнении (7) появляется флуктуационный член.

Эти решения существуют, если уравнения, которые мы получили, ортогональны нулевому собственному вектору сопряженного оператора L_0^*. Собственные функции оператора L_0^* определяются из условия $L_0^*(\mathbf{f}^{(0)}) = 0$. Решение этого уравнения можно записать в виде

$\mathbf{f}^{(0)} = w\mathbf{f}_0 \exp(ik_C x_1) + w^* \mathbf{f}_0^* \exp(-ik_C x_1)$, где

$$\mathbf{f}_0^* = \exp[ik_C x_1] \Bigg(\frac{i\pi}{k_C} \cos(\pi x_3), 0, \sin(\pi x_3),$$

$$\frac{\sqrt{R_C}}{-\pi^2 \kappa_\perp - \kappa_\| k_C^2} \sin(\pi x_3), \Big(\pi(1 + \alpha_2 + 3\alpha_5 + 2\alpha_3)$$

$$+ \frac{\pi^3 (2\alpha_3 + \alpha_5 + \alpha_2 + 1)}{k_C^2} \Big) \cos(\pi x_3), 0, 0 \Bigg) + c.\,c. \qquad (12)$$

Условие ортогональности приводит к выражению

$$\Big(\mathbf{f}_0^*, L_{1/2}\big(\mathbf{u}^{(3/2)}\big) + L_1\big(\mathbf{u}^{(1)}\big) + L_{3/2}\big(\mathbf{u}^{(1/2)}\big) + L_2\big(\mathbf{u}^{0}\big)\Big) = -\big(\mathbf{f}_0^*, I\big). \qquad (13)$$

Подставляя в (13) выражения для L_i и раскрывая скалярное произведение, получаем уравнение Ланжевена

$$C_0 \partial_t w = \big(C_1 \nu + C_2 |w|^2\big)\, w + C_3 \partial_\xi^2 w + iC_4 \partial_\xi \partial_\eta^2 w + C_5 \partial_\eta^4 w + 2(\mathbf{f}_0^*, I), \qquad (14)$$

где $\nu = (R - R_C)/R_C$, здесь $2(\mathbf{f}_0^*, I)$ означает случайный член.

Вследствие громоздкости коэффициентов C_i их вид здесь и далее не приводится.

Так как, дойдя до ϵ^3, мы остановили итерационный процесс, то теперь нет необходимости различать временные и пространственные масштабы. Формально положим $\epsilon = 0$ и будем иметь $\xi = x_1$, $\eta = x_2$, $\tau = t$ [1].

Уравнению Ланжевена (14) соответствует уравнение Фоккера–Планка для распределения вероятности W флуктуации амплитуды медленной моды w. Поскольку w — функция пространственных переменных x_1 и x_2, то распределение вероятности должно быть функционалом этого поля и соответственно уравнение Фоккера–Планка будет функциональным уравнением.

Уравнение Фоккера–Планка, соответствующее уравнению Ланжевена, запишется в виде

$$C_0 \partial_t W = \int d^2x \Bigg(\Big\{ \delta_{x_1}(\mathbf{x}) \big[(C_1 \nu + C_2 \big| w(\mathbf{x}) \big|^2) w(\mathbf{x}) + C_3 \partial_{x_1}^2 w(\mathbf{x})$$

$$+ iC_4 \partial_{x_1} \partial_{x_2}^2 w(\mathbf{x}) + C_5 \partial_{x_2}^4 w(\mathbf{x}) + Q \big] \times W \Big\} + c.\,c. \Bigg), \qquad (15)$$

где $W(\{w\}, t)$ — плотность вероятности обнаружения в функциональном пространстве (w, w^*) комплексных функций $w(\mathbf{x})$ и $w^*(\mathbf{x})$ в момент времени t, значение Q определяется материальными параметрами среды. Таким образом, W является функционалом $w(\mathbf{x})$, $w^*(\mathbf{x})$ и функцией времени t.

Из условий, которым удовлетворяет уравнение Фоккера–Планка [1], легко восстановить сам функционал:

$$\Phi\big(\{w\}\big) = Q^{-1} \int d^2x \Big[C_1 \nu R_C \big|w(\mathbf{x})\big|^2 + C_2\big|w(\mathbf{x})\big|^4/2$$
$$+ C_3\big|\partial_{x_1} w(\mathbf{x})\big|^2 + iC_4\Big(\partial_{x_1} w(\mathbf{x})\partial^2_{x_2} w^*(\mathbf{x})$$
$$- \partial_{x_1} w^*(\mathbf{x})\partial^2_{x_2} w(\mathbf{x})\Big) + C_5\big|\partial^2_{x_2} w(\mathbf{x})\big|^2\Big]. \qquad (16)$$

Поскольку экстремумы обобщенного термодинамического потенциала соответствуют наиболее вероятным реализациям диссипативных структур, то полученный функционал позволяет исследовать поведение системы вдали от термодинамического равновесия.

Список литературы

[1] *Graham R.* // Phys. Rev. Ser. A. 1974. V. 10. N 5. P. 1762–1784.
[2] *Белоцкий Е.Д., Томчук П.М.* // ЖЭТФ. 1985. Т. 88. В. 5. С. 1634–1640.
[3] *Belotskii E.D., Migranov N.G., Tomchuk P.M.* // Liquid Crystals. 1988. V. 3. N 10. P. 1327–1338.
[4] *Пинкин С.А.* Структурные превращения в жидких кристаллах. М.: Наука, 1981. 336 с.
[5] *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теоретическая физика. В 10 т. Т. 9. Ч. 2. Статистическая физика. 3-е изд. М.: Наука, 1978. 448 с.
[6] *Dubois-Violette B, Guyon E., Pieranski P.* // Mol. Cryst. 1974. V. 26. N 1/4. P. 193–212.