

ИТЕРАЦИОННЫЙ ПОДХОД В КОНСТРУИРОВАНИИ ОБОБЩЕННОГО ПОТЕНЦИАЛА ДЛЯ НЕМАТИЧЕСКОГО ЖИДКОГО КРИСТАЛЛА ВБЛИЗИ ПЕРВОЙ ТОЧКИ БИФУРКАЦИИ

А.В. Веревоичников, Н.Г. Мигранов¹

Целью работы являлось построение обобщенного термодинамического потенциала (ОТП), описывающего поведение нематического жидкого кристалла (НЖК) вдали от термодинамического равновесия. ОТП является аналогом свободной энергии для равновесных систем. Зная ОТП, путем его минимизации можно показать возможность существования различного рода диссипативных структур. Вблизи точки бифуркации гидродинамику НЖК можно упростить вследствие появления медленной моды, которая является доминирующей. Эта мода описывается медленно изменяющейся комплексной амплитудой w ; через которую выражаются все гидродинамические переменные и чье абсолютное значение и фаза связаны с интенсивностью и положением конвективных ролюв соответственно.

В последнее время очень много внимания уделяется проблеме образования различного рода диссипативных структур. Подобные структуры возникают, например, в задаче Бенара-Рэлея для жидкости. Главным условием возникновения диссипативных структур является подвод и диссипация энергии в системе. Поэтому методы равновесной термодинамики для рассматриваемых нами систем не применимы, поскольку наша система является сильно неравновесной и описывается нелинейными дифференциальными уравнениями в частных производных. Возникла необходимость в создании новых математических моделей, которые могли бы адекватно отображать физическую картину наблюдаемых явлений. Одним из подходов является метод обобщенных термодинамических потенциалов [1], успешно апробированный на изотропной жидкости в поле градиента температур. Получающиеся результаты позволили автору [1] не только выписать функционал (аналог функции Ляпунова для задач на исследование устойчивости решения, а физически его можно сравнить со свободной энергией для термодинамически равновесных систем). Как оказалось, этот метод можно с успехом применить и для такой довольно сложной физической системы, какой является нематический жидкий кристалл. Получающиеся при этом коэффициенты в функционале требовали очень громоздкого и утомительного счета. Используя методы компьютерной алгебры, авторам удалось в аналитическом

¹ Веревоичников Андрей Васильевич, Мигранов Наиль Галиханович. Кафедра общей физики Башкирского государственного университета

виде выписать коэффициенты, которые определяются материальными параметрами рассматриваемой системы. Экстремумы нашего функционала однозначно позволяют описать возникающие за порогом термоконвекции диссипативные структуры.

Рассмотрим бесконечный тонкий плоскопараллельный слой нематического жидкого кристалла (НЖК) толщины l , лежащий в плоскости XOY . Молекулы нематика ориентированы параллельно ограничивающим плоскостям. Полагаем, что директор $\mathbf{n}$ (вектор, характеризующий преимущественное направление длинных осей молекул, составляющих сам жидкий кристалл) лежит в плоскости XOZ , причем направления $\mathbf{n}$ и $-\mathbf{n}$ считаются неразличимыми с точки зрения математического описания. Так же полагаем, что выполняется соотношение $\mathbf{n}^2 = 1$, а нематическую жидкость, находящуюся в поле градиента температур, считаем несжимаемой. На нижней границе слоя поддерживается постоянная температура T_0 , на верхней – T_1 ($T_1 > T_0$).

Как известно, для обычных изотропных жидкостей, находящихся в поле градиента температур, можно ввести безразмерный параметр R – число Рэлея. При значениях R , больших R_c – критической величины, в системе возникают диссипативные структуры [2], которые можно описать с помощью функционала, играющего роль функции Ляпунова.

Теоретические проблемы тепловой конвекции в линеаризованных системах уравнений рассматривались в работах [4, 5]. В данной работе эти проблемы анализируются с привлечением идей скейлинга [3].

Система нелинейных дифференциальных уравнений включает в себя флуктуационные члены [6], которые приводят ее к уравнению Ланжевена. Считаем, что флуктуации удовлетворяют принципу детального равновесия и при вычислениях может быть использована формула Эйнштейна $W \sim e^{-\Phi}$ для равновесных систем, связывающая обобщенный термодинамический потенциал Φ и распределение вероятности флуктуаций W . В таком случае удастся построить функционал, который зависит от медленной переменной, являющейся, по сути, параметром порядка в точке перехода. По виду функционал похож на обобщенный функционал Гинзбурга-Ландау и позволяет рассчитать гидродинамические флуктуации вблизи порога термоконвекции.

Система дифференциальных уравнений, описывающих поведение НЖК в поле градиента температур, включает в себя [7]: а) уравнения Навье-Стокса, б) уравнение непрерывности; в) уравнение переноса тепла в НЖК; г) уравнение движения директора.

Положим $\tilde{T} = T - T_0$, $\tilde{p} = p - p_0$, где $p_0 = p_1 - \rho_0 g x_3 [1 + x_3 (C_v \beta \Delta T / l - \chi \rho_0 g) / 2]$, $T_0 = T_1 - \Delta T x_3 / l$, и β – коэффициент термического расширения, χ – изотермическая сжимаемость.

Рассмотрим уравнения движения для $\mathbf{v}, T, p, \mathbf{n}$ в приближении Буссинеска (значок тильды после обезразмеривания системы уравнений опускается). Считаем также, что значения коэффициентов Франка K_{ii} , входящих в уравнение Навье-Стокса, близки друг к другу – $K_{ii} \approx K$. Величина $\beta \Delta T$ считается малой, величина $\chi \rho_0 g l$ – исчезающе малой и в уравнении теплопроводности энергия вязкой диссипации не учитывается. Таким образом, для нашей задачи мы вводим семикомпонентный 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 виде $L(\mathbf{u}) = 0$. В обезразмеренную систему уравнений, по известному приему [8], 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:

$$L(\mathbf{u}) = I. \quad (1)$$

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

Отметим, что вследствие обезразмеривания в нашей системе уравнений также появляется безразмерный параметр – число Рэлея $R = \Delta T g \rho_0 \beta l^3 / (\alpha_4 / 2) \kappa_{\perp}$.

Для решения системы $L(\mathbf{u}) = 0$ оператор L записывался следующим образом: $L = L_0 + \epsilon^{1/2} L_{1/2} + \epsilon L_1 + \dots$, вектор $\mathbf{u}$ разлагался по степеням ϵ $\mathbf{u} = \epsilon(\mathbf{u}^{(0)} + \epsilon^{1/2} \mathbf{u}^{(1/2)} + \dots)$. Далее, зная решения $\mathbf{u}^{(0)}$ линейного уравнения $L_0(\mathbf{u}) = 0$ и последовательно собирая слагаемые при соответствующих степенях ϵ , мы находим решения $\mathbf{u}^{(1/2)}$, $\mathbf{u}^{(1)}$ и так далее до порядка ϵ^3 . Поскольку внешний вид выражений для L_i и $\mathbf{u}^{(i)}$ слишком громоздок, то мы их здесь не приводим.

В полученных нами соотношениях нет флуктуационных членов, поскольку они появляются только в высших порядках малости.

Для решения поставленной задачи было удобно выделить разные масштабы длины по координатным осям и времени (скейлинг). Введем новые "медленные" параметры: $x_1 = \xi/\epsilon$, $x_2 = \eta/\epsilon^{1/2}$, $t = \tau/\epsilon^2$ и сделаем следующую замену $w(t, x_1, x_2) \rightarrow w(\tau, \xi, \eta)$, где ϵ – малый параметр.

Согласно выбору масштабов ϵ является величиной порядка отклонения волнового числа k_1 от критического значения k_C вдоль оси OX : $\epsilon \sim \Delta k$.

Выбор масштабных изменений вдоль оси OY следует из геометрических соображений. Небольшие изменения проекции волнового вектора вдоль OY приводят к изменению проекции волнового вектора вдоль оси OX , выражающиеся величиной второго порядка малости $\Delta k_2 = |k_2| \sin \phi \approx k \phi$, $\Delta k_1 = \Delta k_2 \tan \phi \approx \Delta k_2 \phi \approx k \phi^2$, где $k = |k_1| = |k_2|$ и ϕ представляет собой угол отклонения волнового вектора в плоскости XOY от оси OX , по порядку совпадает с ϵ . Выбор временного изменения определяется из $\lambda_0 \sim |R - R_C| \sim \epsilon^2$.

Условие ортогональности приводит к выражению

$$\left(\mathbf{f}_0^*, L_{1/2} \left(\mathbf{u}^{(3/2)} \right) + L_1 \left(\mathbf{u}^{(1)} \right) + L_{3/2} \left(\mathbf{u}^{(1/2)} \right) + L_2 \left(\mathbf{u}^{(0)} \right) \right) = - \left(\mathbf{f}_0^*, I \right), \quad (2)$$

где $\mathbf{f}_0^*$ – собственный вектор сопряженного линейного оператора L_0^* .

Внешний вид операторов L_i очень громоздкий и был получен при помощи методов компьютерной алгебры (использовался прикладной пакет Maple V) в аналитическом виде, для чего была составлена довольно большая программа аналитического преобразования начальных обезразмеренных уравнений движения нематической мезофазы.

Подставляя в (2) выражения для L_i и раскрывая скалярное произведение, получаем уравнение Ланжевена

$$C_0 \partial_t w = \left(C_1 (R - R_C) + C_2 |w|^2 \right) w + C_3 \partial_{\xi}^2 w + i C_4 \partial_{\xi} \partial_{\eta}^2 w + C_5 \partial_{\eta}^4 w + 2 \left(\mathbf{f}_0^*, I \right). \quad (3)$$

Вследствие громоздкости коэффициентов C_i их вид здесь также не приводится.

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

Уравнению Ланжевена (3) соответствует уравнение Фоккера-Планка для распределения вероятности 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

$$C_0 \partial_t W = \int \int d^2 x \left[\{ \delta_{x_1}(\mathbf{x}) (C_1(R - R_C)w(\mathbf{x}) + C_2|w(\mathbf{x})|^2 w(\mathbf{x}) + C_3 \partial_{x_1}^2 w(\mathbf{x}) + \right. \\ \left. + iC_4 \partial_{x_1} \partial_{x_2}^2 w(\mathbf{x}) + C_5 \partial_{x_2}^4 w(\mathbf{x}) + Q) \times W \} + c.c. \right], \quad (4)$$

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, *c.c.* – означает комплексно сопряженную часть выражения. 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

$$\Phi(\{w\}) = Q^{-1} \int \int d^2 x \left[C_1(R - R_C)|w(\mathbf{x})|^2 + C_2|w(\mathbf{x})|^4/2 + C_3|\partial_{x_1} w(\mathbf{x})|^2 + \right. \\ \left. + iC_4(\partial_{x_1} w(\mathbf{x}) \partial_{x_2}^2 w^*(\mathbf{x}) - \partial_{x_1} w^*(\mathbf{x}) \partial_{x_2}^2 w(\mathbf{x})) + C_5|\partial_{x_2}^2 w(\mathbf{x})|^2 \right]. \quad (5)$$

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

Литература

- [1] Graham R. // Phys. Rev. Ser. A, 1974, V.10, N5, P.1762-1784.
- [2] Dubois-Violette E., Rothen F. // Journal de Physique, 1979, V.40, N10, P.1013-1023.
- [3] Newell A.C., Whitehead J.A. // J. Fluid Mech, 1969, V.38, N2, P.279-303.
- [4] Dubois-Violette B., Guyon E., Pieranski P. // Mol. Cryst, 1974, V.26, N1/4, P.193-212.
- [5] Myakawa K. // J. Phys. Soc. Japan, 1975, V.39, N3, P.628-633.
- [6] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. В 10 т. Т.6. Гидродинамика. 4-е изд. М.: Наука, 1988. 736с.
- [7] Пикин С.А. Структурные превращения в жидких кристаллах, М.: Наука, 1981. 336с.
- [8] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. В 10 т. Т.9. Ч.2. Статистическая физика. 3-е изд. М.: Наука, 1978. 448с.

THE ITERATIVE APPROACH IN CONSTRUCTION THE GENERALIZED POTENTIAL FOR NEMATIC LIQUID CRYSTALS NEAR TO THE FIRST POINT OF BIFURCATION

A.V. Verevochnikov, N.G. Migranov ²

The purpose of work was the construction of the generalized thermodynamic potential (GTP), circumscribing a behaviour nematic liquid crystal (NLC) far from a thermodynamic equilibrium. GTP is analogue free energy for equilibrium systems. Knowing GTP, by his minimization, it is possible to show a possibility of existence of a various sort of dissipative structures. Near to a point of bifurcation the hydrodynamics NLC can be simplified owing to appearance of a slow style, which is dominating. This style is described slowly by varying complex amplitude w , through which all hydrodynamic variables both whose absolute value express and phase are connected to intensity and position convective rolls accordingly.

²Verevochnikov Andrey Vasilevich, Migranov Naeel Galikhanovich, Dept. of Common Physics of Bashkir State University