УДК 532.783

ОРИЕНТАЦИОННАЯ МЕХАНИКА ЖИДКИХ КРИСТАЛЛОВ. ПЕРЕХОД В ЛОКАЛЬНУЮ СИСТЕМУ КООРДИНАТ

С. И. Трашкеев

Институт лазерной физики СО РАН, 630090 Новосибирск
E-mail: sitrskv@mail.ru

Рассмотрены уравнения ориентационной механики жидких кристаллов, записанные в локальной вращательной системе координат, связанной с ориентацией директора. Получено условие, при котором решения, следующие из приближенной (одноконстантной) модели, качественно аналогичны решениям при исходной постановке задачи. Предложены уравнения, являющиеся более точным приближением к общей модели. Использование матриц при записи энергетических соотношений позволяет достаточно легко осуществлять переход в другие системы координат и исследовать более сложные модели для описания ориентационного состояния жидких кристаллов. Переход в локальную систему координат дает возможность проводить расчеты для трехмерных динамических жидкокристаллических структур на персональных компьютерах средней мощности.

Ключевые слова: жидкий кристалл, механика сплошной среды, группы вращения.

Введение. Уравнения, описывающие состояние жидких кристаллов (ЖК), следуют из континуальной теории механики анизотропной жидкости. Наиболее полно разработанным и часто используемым при изучении жидкокристаллического состояния считается подход Эриксена — Лесли [1, 2]. Ранее для описания многих явлений, происходящих в ЖК, достаточно было рассмотреть одно- или двумерную (как правило, в линейном приближении) модель с деформацией ориентации ЖК в одной плоскости. В настоящее время этого оказывается недостаточно. Потребность в рассмотрении более сложных моделей определяется прежде всего развитием нанотехнологий [3], основанных на изучении полимерных и жидкокристаллических композитов [4, 5]. При описании новых свойств таких композитов в большинстве случаев ставится трехмерная задача, решение которой необходимо для определения ориентационного состояния ЖК, содержащего малоразмерные или точечные дефекты.

Несмотря на завершенность теории Эриксена — Лесли, вывод полной системы уравнений равновесия для директора ЖК чрезвычайно громоздкий. Если такую процедуру выполнить (например, с помощью символьного языка MAPLE, так как в противном случае возможны ошибки) для трехмерного нематического жидкого кристалла (НЖК) без учета гидродинамики, то получится система уравнений, для записи которой потребуется несколько страниц. В этом случае провести даже предварительный анализ не представляется возможным. В данной работе предлагается матричный формализм, основные математические положения которого заимствованы из механики сплошной среды [6, 7]. При теоретическом исследовании предлагаемый подход позволяет использовать многие положения алгебры групп вращения SU(2), SO(3) [8] и записывать окончательные уравнения в достаточно компактной форме, существенно облегчающей как предварительный анализ, так и переход в другие системы координат. Рассмотрена модель, описывающая ориентационные (без учета движения жидкости) взаимодействия в ЖК.

Континуальные уравнения. В случае несжимаемой изотермической анизотропной жидкости основными неизвестными являются поле скоростей $\boldsymbol{v} = \boldsymbol{v}(t, \boldsymbol{r})$, директор $\boldsymbol{n} = \boldsymbol{n}(t, \boldsymbol{r})$ (для одноосной среды) и давление $p(t, \boldsymbol{r})$ (t — время; $\boldsymbol{r} = (x, y, z) \equiv (x_1, x_2, x_3)$ — радиус-вектор в декартовой системе координат). Систему уравнений для определения $\boldsymbol{n}$, $\boldsymbol{v}$, p можно записать в виде [2]

$$\begin{gathered}\frac{\partial}{\partial x_j}\,\frac{\partial F}{\partial\,(\partial n_i/\partial x_j)} - \frac{\partial F}{\partial n_i} - \lambda n_i = I\,\frac{\partial^2 n_i}{\partial t^2} + \gamma_1\Big(\frac{\partial n_i}{\partial t} - V_{ij} n_j\Big) + \gamma_2 n_j \Omega_{ji},\\ \operatorname{div}\boldsymbol{v} = \frac{\partial v_j}{\partial x_j} = 0,\\ \rho\Big(\frac{\partial v_i}{\partial t} + v_j\,\frac{\partial v_i}{\partial x_j}\Big) = f_i + \frac{\partial \Sigma_{ji}}{\partial x_j},\end{gathered} \tag{1}$$

где $\lambda = \lambda(t, \boldsymbol{r})$ — множитель Лагранжа, обеспечивающий выполнение условия нормировки $\boldsymbol{n}^2 = 1$; F, I, ρ — плотности свободной энергии и момента инерции, массовая плотность НЖК; f_i — компоненты вектора плотности объемной силы; Σ_{ji} — тензор напряжений. В случаях, не оговоренных особо, по повторяющимся индексам проводится суммирование. В рассматриваемых вариантах взаимодействия ЖК с внешними полями вкладом в f_j пондеромоторных или стрикционных сил можно пренебречь [2] и положить

$$f_j = -\frac{\partial p}{\partial x_j} \qquad (\boldsymbol{f} = -\nabla p).$$

Здесь p — внешнее давление. Тензор напряжений состоит из суммы упругой (члены, зависящие от F) и вязкой частей:

$$\begin{aligned}\Sigma_{ij} = -\frac{\partial F}{\partial\,(n_k/\partial x_i)}\,\frac{\partial n_k}{\partial x_j} + \mu_1 n_i n_j \Omega_{km} n_k n_m + \mu_2 n_i\Big(\frac{\partial n_j}{\partial t} - V_{jk} n_k\Big) + {}&\\ + \mu_3 n_j\Big(\frac{\partial n_i}{\partial t} - V_{ik} n_k\Big) + \mu_4 \Omega_{ij} + \mu_5 n_i n_k \Omega_{kj} + \mu_6 \Omega_{ik} n_k n_j&\end{aligned}$$

($\mu_1, \ldots, \mu_6$ — вязкие коэффициенты Лесли; $\gamma_1 = \mu_3 - \mu_2$; $\gamma_2 = \mu_6 - \mu_5$). Компоненты тензора градиента скоростей записываются в виде

$$\Omega_{ij} = \frac{1}{2}\Big(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} - \frac{\partial v_j}{\partial x_i}\Big), \qquad V_{ij} = \frac{1}{2}\Big(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i}\Big).$$

Плотность свободной энергии F определяется внутренними упругими силами, зависящими от n_i, градиентов $\partial n_i/\partial x_j$ и параметров внешнего воздействия. Если F рассматривать как функционал, то левая часть первого уравнения системы (1) является лагранжевой вариацией по переменным n_i и $\partial n_i/\partial x_j$ [1, 2].

Если ввести величину $\bar F$:

$$\bar F = F - I\Big(\frac{\partial \boldsymbol{n}}{\partial t}\Big)^2, \tag{2}$$

где $I(\partial\boldsymbol{n}/\partial t)^2$ — кинетическая вращательная энергия, и варьировать $\bar F$ по дополнительной переменной $\partial n_i/\partial t$, то общая вариация примет вид

$$\frac{\delta \bar F}{\delta n_i} = \frac{\partial}{\partial t}\,\frac{\partial \bar F}{\partial\,(\partial n_i/\partial t)} + \frac{\partial}{\partial x_j}\,\frac{\partial \bar F}{\partial\,(\partial n_i/\partial x_j)} - \frac{\partial \bar F}{\partial n_i} - \lambda n_i = 0, \tag{3}$$

где

$$\frac{\partial}{\partial t}\,\frac{\partial \bar F}{\partial\,(\partial n_i/\partial t)} = -I\,\frac{\partial^2 n_i}{\partial t^2}.$$

Остальные уравнения системы (1) записываются в прежнем виде с заменой $F \to \bar{F}$. В общем виде функционал $\bar{F}$ с обратным знаком является аналогом лагранжиана для вращательного движения твердого тела в аналитической механике.

Матричная форма записи выражения для свободной энергии. Для вывода уравнений выберем декартову систему координат и используем следующие обозначения: $\theta = \theta(t, \boldsymbol{r})$ и $\varphi = \varphi(t, \boldsymbol{r})$ — соответственно полярный и азимутальный углы, связанные с $\boldsymbol{n}$ соотношением

$$\boldsymbol{n} = (n_x, n_y, n_z) = (\sin\theta\cos\varphi, \sin\theta\sin\varphi, \cos\theta). \tag{4}$$

Для упрощения вычислений целесообразно ввести следующие обозначения:

$$\begin{gathered} S_\theta = \sin\theta, \qquad C_\theta = \cos\theta, \qquad S_\varphi = \sin\varphi, \qquad C_\varphi = \cos\varphi, \\ \boldsymbol{m} = (m_x, m_y, m_z) = \frac{\partial \boldsymbol{n}}{\partial \theta} = (C_\theta C_\varphi, C_\theta S_\varphi, -S_\theta), \\ \boldsymbol{p} = (p_x, p_y, p_z) = \frac{1}{S_\theta}\,\frac{\partial \boldsymbol{n}}{\partial \varphi} = (-S_\varphi, C_\varphi, 0), \\ (\boldsymbol{nm}) = 0, \qquad (\boldsymbol{np}) = 0, \qquad (\boldsymbol{mp}) = 0 \end{gathered} \tag{5}$$

($\boldsymbol{m}$, $\boldsymbol{p}$ — дополнительные единичные векторы, ортогональные к $\boldsymbol{n}$). Направления $\boldsymbol{n}$, $\boldsymbol{m}$, $\boldsymbol{p}$ образуют правую тройку векторов и удовлетворяют следующим соотношениям:

$$[\boldsymbol{mp}] = \boldsymbol{n}, \qquad [\boldsymbol{pn}] = \boldsymbol{m}, \qquad [\boldsymbol{nm}] = \boldsymbol{p}. \tag{6}$$

В случае деформированного состояния НЖК или холестерического жидкого кристалла (ХЖК) с учетом их неполярности (эквивалентности направлений $\boldsymbol{n}$ и $-\boldsymbol{n}$) выражение для плотности свободной энергии F записывается в виде суммы слагаемых, учитывающих различные типы взаимодействия в среде [1]. С учетом (2), опуская черту над F, запишем соотношение

$$F = -F_k + F_{el} + F_E + F_d + F_{sf}, \tag{7}$$

где

$$\begin{gathered} F_{el} = (1/2)\{K_1(\operatorname{div}\boldsymbol{n})^2 + K_2(\boldsymbol{n}\operatorname{rot}\boldsymbol{n} + q_0)^2 + K_3[\boldsymbol{n}\operatorname{rot}\boldsymbol{n}]^2\}, \\ F_k = I\Big(\frac{\partial \boldsymbol{n}}{\partial t}\Big)^2, \qquad F_E = -\frac{\varepsilon_a}{8\pi}\,(\boldsymbol{nE})^2, \qquad F_d = -(\boldsymbol{PE}). \end{gathered} \tag{8}$$

Для потенциальной энергии введем обозначение $F_p = F_{el} + F_E + F_d$. Здесь F_k, F_{el} — вращательная кинетическая и упругая энергии; F_E, F_d — соответственно анизотропный (электростатический) и флексоэлектрический (дипольный) вклады в энергию взаимодействия ЖК с электрическим полем $\boldsymbol{E} = \boldsymbol{E}(t, \boldsymbol{r})$; K_1, K_2, K_3 — константы Франка; $q_0 = 2\pi/h_0$ — волновое число невозмущенного ХЖК ($q_0 = 0$ соответствует нематическому состоянию); h_0 — шаг спирали; $\varepsilon_a = \varepsilon_{||} - \varepsilon_\perp$ и $\varepsilon_{||}$, $\varepsilon_\perp$ — параметры тензора диэлектрической проницаемости, который выражается через декартовы компоненты директора n_i в виде

$$\varepsilon_{ij} = \varepsilon_\perp \delta_{ij} + \varepsilon_a n_i n_j, \qquad i, j = \{x, y, z\}$$

(δ_{ij} — символ Кронекера). Вектор $\boldsymbol{P}$ (плотность дипольного момента) имеет вид [2]

$$\boldsymbol{P} = e_1 \boldsymbol{n}\operatorname{div}\boldsymbol{n} - e_3[\boldsymbol{n}\operatorname{rot}\boldsymbol{n}],$$

где e_1, e_3 — флексоэлектрические коэффициенты. Вклад поверхностной части энергии F_{sf} в итоговых уравнениях учитывается граничными условиями для директора $\boldsymbol{n}$, поэтому в настоящей работе задания F_{sf} в явном виде не требуется. Полная свободная энергия определяется объемным и поверхностным интегралами:

$$F_{tot} = \int\limits_V F\, dv + \int\limits_S F_{sf}\, ds \tag{9}$$

(V — объем, занимаемый ЖК; S — площадь, ограничивающая объем).

Уравнения ориентационного движения, определяющие зависимость $\boldsymbol{n} = \boldsymbol{n}(t, \boldsymbol{r})$, получаются из (1) при $\boldsymbol{v} \equiv 0$ или в результате минимизации полной свободной энергии (9) по отношению ко всем вариациям директора $\boldsymbol{n}$ (3) и феноменологического учета релаксационного члена с первой производной по времени. В результате получаем соотношение вида [2]

$$\begin{gathered} I\,\frac{\partial^2 n_j}{\partial t^2} + \gamma_1\,\frac{\partial n_j}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i}\,\frac{\partial F}{\partial\,(\partial n_j/\partial x_i)} - \frac{\partial F}{\partial n_j} - \lambda n_j, \\ \lambda(t, \boldsymbol{r}) = -I\,\frac{\partial n_j}{\partial t}\,\frac{\partial n_j}{\partial t} + \Big(n_j\,\frac{\partial}{\partial x_i}\,\frac{\partial F}{\partial\,(\partial n_j/\partial x_i)} - n_j\,\frac{\partial F}{\partial n_j}\Big). \end{gathered} \tag{10}$$

При использовании вариационного подхода для получения диссипативных уравнений движения в отсутствие гидродинамических потоков можно применить более строгий, чем феноменологический, подход, основанный на введении релаксационного потенциала [9]. В стационарном случае, когда неизвестные не зависят от времени, уравнение (10) принимает вид

$$0 = \frac{\partial}{\partial x_i}\,\frac{\partial F}{\partial\,(\partial n_j/\partial x_i)} - \frac{\partial F}{\partial n_j} - \lambda n_j, \tag{11}$$

при этом

$$\lambda(t, \boldsymbol{r}) = n_j\Big(\frac{\partial}{\partial x_i}\,\frac{\partial F}{\partial\,(\partial n_j/\partial x_i)} - \frac{\partial F}{\partial n_j}\Big).$$

В рамках тригонометрического представления директора $\boldsymbol{n}$ (2) отсутствует необходимость введения множителя Лагранжа, так как условия нормировки выполнены автоматически. Тогда вариационное соотношение (10) преобразуется в систему уравнений для углов θ и φ вида

$$\begin{gathered} \frac{\delta F}{\delta \theta} = \frac{\partial}{\partial t}\,\frac{\partial F}{\partial\,(\partial\theta/\partial t)} + \gamma_1\,\frac{\partial \theta}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_i}\,\frac{\partial F}{\partial\,(\partial\theta/\partial x_i)} + \frac{\partial F}{\partial \theta} = 0, \\ \frac{\delta F}{\delta \varphi} = \frac{\partial}{\partial t}\,\frac{\partial F}{\partial\,(\partial\varphi/\partial t)} + \gamma_1 S_\theta^2\,\frac{\partial \varphi}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_i}\,\frac{\partial F}{\partial\,(\partial\varphi/\partial x_i)} + \frac{\partial F}{\partial \varphi} = 0. \end{gathered} \tag{12}$$

Уравнения (10)–(12) следует дополнить граничными условиями для $\boldsymbol{n}$ или θ и φ в точках на S. Подставляя (4), (5) в выражение для упругой части плотности свободной энергии F_{el}, из (8) получаем

$$F_{el} = \frac{K_1}{2}\,[(\boldsymbol{m}\nabla\theta) + S_\theta(\boldsymbol{p}\nabla\varphi)]^2 + \frac{K_2}{2}\,[-(\boldsymbol{p}\nabla\theta) + S_\theta(\boldsymbol{m}\nabla\varphi) + q_0]^2 + \frac{K_3}{2}\,[\boldsymbol{m}(\boldsymbol{n}\nabla\theta) + S_\theta\boldsymbol{p}(\boldsymbol{n}\nabla\varphi)]^2.$$

Выражение для F_{el} целесообразно записать в виде суммы нематической части ($q_0 = 0$) и добавки, определяющей холестерический порядок ($q_0 \neq 0$):

$$F_{el} = F_{el}^0 + F_{el}^h.$$

Здесь

$$F_{el}^0 = \frac{K_1}{2}\,[(\boldsymbol{m}\nabla\theta) + S_\theta(\boldsymbol{p}\nabla\varphi)]^2 + \frac{K_2}{2}\,[-(\boldsymbol{p}\nabla\theta) + S_\theta(\boldsymbol{m}\nabla\varphi)]^2 + {} \\ + \frac{K_3}{2}\,[\boldsymbol{m}(\boldsymbol{n}\nabla\theta) + S_\theta\boldsymbol{p}(\boldsymbol{n}\nabla\varphi)]^2, \qquad (13)$$

$$F_{el}^h = K_2 q_0(\boldsymbol{n}\operatorname{rot}\boldsymbol{n}) = K_2 q_0[-(\boldsymbol{p}\nabla\theta) + S_\theta(\boldsymbol{m}\nabla\varphi)].$$

Аналогичные тригонометрические подстановки для $\boldsymbol{P}$, F_d дают соотношения вида

$$\boldsymbol{P} = e_1\boldsymbol{n}[(\boldsymbol{m}\nabla\theta) + S_\theta(\boldsymbol{p}\nabla\varphi)] + e_3[\boldsymbol{m}(\boldsymbol{n}\nabla\theta) + S_\theta\boldsymbol{p}(\boldsymbol{n}\nabla\varphi)].$$

Тогда

$$F_d = -e_1(\boldsymbol{n}\boldsymbol{E})[(\boldsymbol{m}\nabla\theta) + S_\theta(\boldsymbol{p}\nabla\varphi)] - e_3[(\boldsymbol{m}\boldsymbol{E})(\boldsymbol{n}\nabla\theta) + S_\theta(\boldsymbol{p}\boldsymbol{E})(\boldsymbol{n}\nabla\varphi)].$$

Электрическая часть свободной энергии остается без изменений, а кинетический член F_k преобразуется к виду

$$F_k = \frac{I}{2}\Big[\Big(\frac{\partial\theta}{\partial t}\Big)^2 + S_\theta^2\Big(\frac{\partial\varphi}{\partial t}\Big)^2\Big] = \frac{I}{2}\,(\dot\theta^2 + S_\theta^2\dot\varphi^2). \qquad (14)$$

Рассмотрим выражение для упругой части свободной энергии нематика ($q_0 = 0$) F_{el}^0. Раскрывая квадраты, получаем

$$F_{el}^0 = \frac{K_1}{2}\,[(\boldsymbol{m}\nabla\theta)^2 + S_\theta^2(\boldsymbol{p}\nabla\varphi)^2] + \frac{K_2}{2}\,[(\boldsymbol{p}\nabla\theta)^2 + S_\theta^2(\boldsymbol{m}\nabla\varphi)^2] + {} \\ + \frac{K_3}{2}\,[(\boldsymbol{n}\nabla\theta)^2 + S_\theta^2(\boldsymbol{n}\nabla\varphi)^2] + S_\theta[K_1(\boldsymbol{m}\nabla\theta)(\boldsymbol{p}\nabla\varphi) - K_2(\boldsymbol{p}\nabla\theta)(\boldsymbol{m}\nabla\varphi)]. \qquad (15)$$

Перекрестный член в (15) можно записать в симметричной форме, если использовать векторное тождество

$$S_\theta[(\boldsymbol{m}\nabla\theta)(\boldsymbol{p}\nabla\varphi) - (\boldsymbol{m}\nabla\varphi)(\boldsymbol{p}\nabla\theta)] = S_\theta(\boldsymbol{n}[\nabla\theta\nabla\varphi]) \qquad (16)$$

и учесть, что комплекс в правой части (16) не дает вклада в вариацию (12):

$$\frac{\delta}{\delta\theta}\,S_\theta(\boldsymbol{n}[\nabla\theta\nabla\varphi]) = \frac{\delta}{\delta\varphi}\,S_\theta(\boldsymbol{n}[\nabla\theta\nabla\varphi]) = \frac{\delta}{\delta\theta}\,(\boldsymbol{n}[\nabla\theta\nabla\varphi]) = \frac{\delta}{\delta\varphi}\,(\boldsymbol{n}[\nabla\theta\nabla\varphi]) = 0. \qquad (17)$$

В результате выражение для F_{el}^0 принимает вид

$$F_{el}^0 = \frac{K_1}{2}\,[(\boldsymbol{m}\nabla\theta)^2 + S_\theta^2(\boldsymbol{p}\nabla\varphi)^2] + \frac{K_2}{2}\,[(\boldsymbol{p}\nabla\theta)^2 + S_\theta^2(\boldsymbol{m}\nabla\varphi)^2] + {} \\ + \frac{K_3}{2}\,[(\boldsymbol{n}\nabla\theta)^2 + S_\theta^2(\boldsymbol{n}\nabla\varphi)^2] + \frac{K_1 - K_2}{2}\,S_\theta[(\boldsymbol{m}\nabla\theta)(\boldsymbol{p}\nabla\varphi) + (\boldsymbol{p}\nabla\theta)(\boldsymbol{m}\nabla\varphi)]. \qquad (18)$$

Для одноконстантного случая, когда $K_1 = K_2 = K_3 = K$, выражение (13) для $F_{el} = F_{el}^0 + F_{el}^h$ преобразуется в соотношение

$$F_{el} = (K/2)[(\nabla\theta)^2 + S_\theta^2(\nabla\varphi)^2] + Kq_0[-(\boldsymbol{p}\nabla\theta) + S_\theta(\boldsymbol{m}\nabla\varphi)],$$

вариация которого записывается следующим образом:

$$\frac{\delta F_{el}}{\delta\theta} = K[\Delta\theta - S_\theta C_\theta(\nabla\varphi)^2 + 2q_0 S_\theta(\boldsymbol{n}\nabla\varphi)], \\ \frac{\delta F_{el}}{\delta\varphi} = K[\operatorname{div}(S_\theta^2\nabla\varphi) - 2q_0 S_\theta(\boldsymbol{n}\nabla\theta)]. \qquad (19)$$

Вариация кинетической энергии вычисляется аналогично:

$$\begin{gathered}\frac{\delta F_k}{\delta\theta}=\frac{\partial}{\partial t}\,\frac{\partial F_k}{\partial\,(\partial\theta/\partial t)}-\frac{\partial F_k}{\partial\theta}=I\Big[\frac{\partial^2\theta}{\partial t^2}-S_\theta C_\theta\Big(\frac{\partial\varphi}{\partial t}\Big)^2\Big],\\ \frac{\delta F_k}{\delta\varphi}=\frac{\partial}{\partial t}\,\frac{\partial F_k}{\partial\,(\partial\varphi/\partial t)}-\frac{\partial F_k}{\partial\varphi}=I\,\frac{\partial}{\partial t}\Big(S_\theta^2\,\frac{\partial\varphi}{\partial t}\Big).\end{gathered}\tag{20}$$

Согласно (19), (20) уравнения ориентационного движения директора с учетом релаксационного члена при отсутствии внешнего воздействия принимают вид нелинейных гиперболических уравнений для затухающих волн [7]

$$\begin{gathered}I(\ddot\theta-S_\theta C_\theta\dot\varphi^2)+\gamma_1\dot\theta=K[\Delta\theta-S_\theta C_\theta(\nabla\varphi)^2+2q_0S_\theta(\boldsymbol{n}\nabla\varphi)],\\ I\,\frac{\partial}{\partial t}\,(S_\theta^2\dot\varphi)+\gamma_1S_\theta^2\dot\varphi=K\,\mathrm{div}\,[S_\theta^2\nabla\varphi-2q_0S_\theta(\boldsymbol{n}\nabla\theta)],\end{gathered}\tag{21}$$

где точка обозначает производную по времени.

Уравнения движения в тригонометрической форме (21) для случая пренебрежимо малой инерции приведены в [10]. При $I\approx 0$ уравнения (21) преобразуются в систему нелинейных параболических уравнений типа уравнений теплопроводности или диффузии [7]. В указанных работах и в [11–13] на основе численных расчетов рассматривалось взаимодействие ограниченных световых пучков с НЖК ($q_0=0$). В [14] исследовался частный случай стационарных уравнений (21) для расчета ориентационной структуры ХЖК ($q_0\neq 0$), находящегося в сферической капсуле. Уравнения в виде (21) достаточно простые, и в большинстве случаев их решения качественно не отличаются от точного описания ориентационных структур жидких кристаллов. Такое утверждение приводится обычно без доказательства [1]. Анализ этой ситуации требует подробного рассмотрения обоих подходов.

Выражение (18) запишем в матричной форме

$$F^0_{el}=\frac{1}{2}\Big(\frac{\partial\theta}{\partial x_i}\,T_{ij}\,\frac{\partial\theta}{\partial x_j}+S_\theta^2\,\frac{\partial\varphi}{\partial x_i}\,\Phi_{ij}\,\frac{\partial\varphi}{\partial x_j}+(K_1-K_2)\,S_\theta\frac{\partial\theta}{\partial x_i}\,\Lambda_{ij}\,\frac{\partial\varphi}{\partial x_j}\Big),\tag{22}$$

где

$$[T_{ij}]=\begin{pmatrix}(K_1C_\theta^2+K_3S_\theta^2)C_\varphi^2+K_2S_\varphi^2 & (K_1C_\theta^2+K_3S_\theta^2-K_2)S_\varphi C_\varphi & (K_3-K_1)S_\theta C_\theta C_\varphi\\ (K_1C_\theta^2+K_3S_\theta^2-K_2)S_\varphi C_\varphi & (K_1C_\theta^2+K_3S_\theta^2)S_\varphi^2+K_2C_\varphi^2 & (K_3-K_1)S_\theta C_\theta S_\varphi\\ (K_3-K_1)S_\theta C_\theta C_\varphi & (K_3-K_1)S_\theta C_\theta S_\varphi & K_1S_\theta^2+K_3C_\theta^2\end{pmatrix};\tag{23}$$

$$[\Phi_{ij}]=\begin{pmatrix}(K_2C_\theta^2+K_3S_\theta^2)C_\varphi^2+K_1S_\varphi^2 & (K_2C_\theta^2+K_3S_\theta^2-K_1)S_\varphi C_\varphi & (K_3-K_2)S_\theta C_\theta C_\varphi\\ (K_2C_\theta^2+K_3S_\theta^2-K_1)S_\varphi C_\varphi & (K_2C_\theta^2+K_3S_\theta^2)S_\varphi^2+K_1C_\varphi^2 & (K_3-K_2)S_\theta C_\theta S_\varphi\\ (K_3-K_2)S_\theta C_\theta C_\varphi & (K_3-K_2)S_\theta C_\theta S_\varphi & K_2S_\theta^2+K_3C_\theta^2\end{pmatrix};\tag{24}$$

$$[\Lambda_{ij}]=\begin{pmatrix}-2C_\theta C_\varphi S_\varphi & C_\theta(C_\varphi^2-S_\varphi^2) & S_\theta S_\varphi\\ C_\theta(C_\varphi^2-S_\varphi^2) & 2C_\theta C_\varphi S_\varphi & -S_\theta C_\varphi\\ S_\theta S_\varphi & -S_\theta C_\varphi & 0\end{pmatrix}.\tag{25}$$

Матрицы $T=[T_{ij}]$, $\Phi=[\Phi_{ij}]$, $\Lambda=[\Lambda_{ij}]$ симметричные. Упругая свободная энергия представлена в виде суммы двух квадратичных форм от градиентов $\partial\theta/\partial x_i$ и $\partial\varphi/\partial x_i$ и биквадратичной формы от тех же градиентов. Для T, Φ, Λ справедливы представления через ортогональные матрицы [6] в виде

$$T=Q^{\mathrm{т}}\tilde TQ,\qquad \Phi=Q^{\mathrm{т}}\tilde\Phi Q,\qquad \Lambda=Q^{\mathrm{т}}\tilde\Lambda Q,\qquad \det Q=1,$$

где индекс т означает транспонирование,

$$Q = [Q_{ij}] = \begin{pmatrix} m_x & m_y & m_z \\ p_x & p_y & p_z \\ n_x & n_y & n_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_\theta C_\varphi & C_\theta S_\varphi & -S_\theta \\ -S_\varphi & C_\varphi & 0 \\ S_\theta C_\varphi & S_\theta S_\varphi & C_\theta \end{pmatrix}. \qquad (26)$$

Для этой матрицы справедливо соотношение ортогональности $Q^{-1} = Q^{\text{т}}$. При этом матрицы $\tilde{T}$, $\tilde{\Phi}$, $\tilde{\Lambda}$ принимают вид

$$\tilde{T} = \begin{pmatrix} K_1 & 0 & 0 \\ 0 & K_2 & 0 \\ 0 & 0 & K_3 \end{pmatrix}, \qquad \tilde{\Phi} = \begin{pmatrix} K_2 & 0 & 0 \\ 0 & K_1 & 0 \\ 0 & 0 & K_3 \end{pmatrix}, \qquad \tilde{\Lambda} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Если биквадратичный член в выражении для упругой свободной энергии записать, не симметризуя его с помощью (16), то получится другое, эквивалентное для вариации выражение

$$F_{el}^0 = \frac{1}{2}\Big(\frac{\partial\theta}{\partial x_i}\, T_{ij}\, \frac{\partial\theta}{\partial x_j} + S_\theta^2\, \frac{\partial\varphi}{\partial x_i}\, \Phi_{ij}\, \frac{\partial\varphi}{\partial x_j} + 2S_\theta\, \frac{\partial\theta}{\partial x_i}\, \Pi_{ij}\, \frac{\partial\varphi}{\partial x_j}\Big),$$

где матрица Π представима в виде

$$\Pi = Q^{\text{т}}\tilde{\Pi}Q = Q^{\text{т}} \begin{pmatrix} 0 & K_1 & 0 \\ -K_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} Q.$$

Согласно [6] матрицы $\tilde{T}$, $\tilde{\Phi}$, $(K_1 - K_2)\tilde{\Lambda}$ являются тензорами деформации, матрица Q определяет вращение в трехмерном евклидовом пространстве, так как $\det Q = 1$, и может быть представлена как произведение двух ортогональных матриц:

$$Q = NM, \qquad N = \begin{pmatrix} C_\theta & 0 & -S_\theta \\ 0 & 1 & 0 \\ S_\theta & 0 & C_\theta \end{pmatrix}, \qquad M = \begin{pmatrix} C_\varphi & S_\varphi & 0 \\ -S_\varphi & C_\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Здесь $N = N(\theta)$, $M = M(\varphi)$, $Q = Q(\theta, \varphi)$ — элементы группы вращения SO(3) [8] на углы θ, φ.

Аналогичное представление записывается для остальных членов потенциальной части в выражении для свободной энергии (7), (8):

$$F_E = -\frac{\varepsilon_a}{8\pi}\,(\boldsymbol{nE})^2 = -\frac{\varepsilon_a}{8\pi}\, E_i L_{ij} E_j, \qquad L = Q^{\text{т}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} Q; \qquad (27)$$

$$F_d = -(\boldsymbol{PE}) = -E_i A_{ij}\, \frac{\partial\theta}{\partial x_j} - S_\theta E_i B_{ij}\, \frac{\partial\varphi}{\partial x_j}. \qquad (28)$$

Здесь

$$A = [A_{ij}] = \begin{pmatrix} (e_1+e_3)S_\theta C_\theta C_\varphi^2 & (e_1+e_3)S_\theta C_\theta S_\varphi C_\varphi & C_\varphi(e_3C_\theta^2 - e_1S_\theta^2) \\ (e_1+e_3)S_\theta C_\theta S_\varphi C_\varphi & (e_1+e_3)S_\theta C_\theta S_\varphi^2 & S_\varphi(e_3C_\theta^2 - e_1S_\theta^2) \\ C_\varphi(e_1C_\theta^2 - e_3S_\theta^2) & S_\varphi(e_1C_\theta^2 - e_3S_\theta^2) & -(e_1+e_3)S_\theta C_\theta \end{pmatrix}; \qquad (29)$$

$$B = [B_{ij}] = \begin{pmatrix} -(e_1+e_3)S_\theta S_\varphi C_\varphi & S_\theta(e_1C_\varphi^2 - e_3S_\varphi^2) & -e_3C_\theta S_\varphi \\ S_\theta(e_3C_\varphi^2 - e_1S_\varphi^2) & (e_1+e_3)S_\theta S_\varphi C_\varphi & e_3C_\theta C_\varphi \\ -e_1C_\theta S_\varphi & e_1C_\theta C_\varphi & 0 \end{pmatrix}. \qquad (30)$$

Матрицы A и B после ортогонального разложения принимают вид

$$A = Q^{\text{т}}\tilde{A}Q, \quad \tilde{A} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & e_3 \\ 0 & 0 & 0 \\ e_1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad B = Q^{\text{т}}\tilde{B}Q, \quad \tilde{B} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e_3 \\ 0 & e_1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Добавка к плотности свободной энергии F^h_{el}, обусловленная учетом холестерического порядка, записывается в виде суммы

$$F^h_{el} = K_2 q_0 \Big(-p_i \frac{\partial \theta}{\partial x_i} + S_\theta m_i \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} \Big). \tag{31}$$

Таким образом, исходное выражение для плотности свободной энергии (7), (8) представлено в виде линейных, квадратичных и биквадратичных форм в факторизованном виде относительно вариационных переменных θ, φ, $\dot{\theta}$, $\dot{\varphi}$, $\partial\theta/\partial x_i$, $\partial\varphi/\partial x_i$.

Помимо (17) справедливы также другие коммутационные соотношения, удовлетворяющие нулевой вариации и получающиеся циклической перестановкой единичных векторов. Дополнительно к (16) можно записать следующие выражения:

$$\begin{gathered} g_1 \equiv (\boldsymbol{p}\nabla\theta)(\boldsymbol{n}\nabla\varphi) - (\boldsymbol{p}\nabla\varphi)(\boldsymbol{n}\nabla\theta) = (\boldsymbol{m}[\nabla\theta\nabla\varphi]), \\ g_2 \equiv (\boldsymbol{n}\nabla\theta)(\boldsymbol{m}\nabla\varphi) - (\boldsymbol{n}\nabla\varphi)(\boldsymbol{m}\nabla\theta) = (\boldsymbol{p}[\nabla\theta\nabla\varphi]), \\ g_3 \equiv (\boldsymbol{m}\nabla\theta)(\boldsymbol{p}\nabla\varphi) - (\boldsymbol{m}\nabla\varphi)(\boldsymbol{p}\nabla\theta) = (\boldsymbol{n}[\nabla\theta\nabla\varphi]), \\ \boldsymbol{G} \equiv [\nabla\theta\nabla\varphi], \end{gathered} \tag{32}$$

для которых выполняются условия

$$\frac{\delta g_1}{\delta\theta} = \frac{\delta g_1}{\delta\varphi} = 0, \qquad \frac{\delta g_2}{\delta\theta} = \frac{\delta g_2}{\delta\varphi} = 0, \qquad \frac{\delta g_3}{\delta\theta} = \frac{\delta g_3}{\delta\varphi} = 0,$$
$$\frac{\delta\,(\boldsymbol{G}\boldsymbol{G})}{\delta\theta} = \frac{\delta\,(\boldsymbol{G}\boldsymbol{G})}{\delta\varphi} = 0, \qquad \frac{\delta G_i}{\delta\theta} = \frac{\delta G_i}{\delta\varphi} = 0, \qquad i = \{x, y, z\}.$$

Вариацию (12) всех слагаемых F (7) в матричной форме теперь можно провести, причем результат будет представлен в относительно компактном виде, так как все переменные разделены и дифференцирование выполняется тривиально. Производные от введенных матриц вычисляются следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial\theta} &= 2M^{\text{т}}N^{\text{т}}\tilde{T}\,\frac{\partial N}{\partial\theta}\,M = 2M^{\text{т}}\,\frac{\partial N^{\text{т}}}{\partial\theta}\,\tilde{T}NM, \\ \frac{\partial T}{\partial\varphi} &= 2M^{\text{т}}N^{\text{т}}\tilde{T}N\,\frac{\partial M}{\partial\varphi} = 2\,\frac{\partial M^{\text{т}}}{\partial\varphi}\,N^{\text{т}}\tilde{T}NM. \end{aligned} \tag{33}$$

Здесь

$$\frac{\partial N}{\partial\theta} = \begin{pmatrix} -S_\theta & 0 & -C_\theta \\ 0 & 0 & 0 \\ C_\theta & 0 & -S_\theta \end{pmatrix}, \qquad \frac{\partial M}{\partial\varphi} = \begin{pmatrix} -S_\varphi & C_\varphi & 0 \\ -C_\varphi & -S_\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Аналогично проводятся вычисления для остальных матриц Φ, L, A, B, если подставить их вместо T в (33). Тем не менее вычислительная процедура и окончательный вид уравнений остаются достаточно громоздкими. Для более компактной записи предлагается замена переменных, аналогичная используемому в механике сплошной среды переходу от эйлеровых координат к лагранжевым [6]. На возможность использования подобного перехода к криволинейным координатам указывал еще Дж. Эриксен [2], но детальный анализ с указанием конкретного вида преобразования до настоящего времени не проведен.

Переход в локальную систему координат. Квадратичная форма записи выражения для свободной энергии с использованием введенных матриц позволяет перейти в криволинейную локальную систему координат

$$(x, y, z) \equiv (x_1, x_2, x_3) \to (\xi_1, \xi_2, \xi_3) \equiv (\xi, \eta, \zeta) \tag{34}$$

с помощью преобразования

$$\frac{\partial \xi_i}{\partial x_j} = Q_{ij}, \qquad \xi_i = \int Q_{ij}\, dx_j + C_i,$$

где согласно правилам векторного анализа $\boldsymbol{C} = (C_1, C_2, C_3)$ является вектор-функцией, равной ротору от другой произвольной вектор-функции [7, 9], определяемой в каждом случае и зависящей от вида граничных условий. Для существования (34) необходимо, чтобы якобиан преобразования был отличен от нуля. Учитывая определение Q как матрицы вращения (26), имеем

$$\frac{\partial\,(\xi_1, \xi_2, \xi_3)}{\partial\,(x_1, x_2, x_3)} = \det\Big[\frac{\partial \xi_i}{\partial x_j}\Big] = \det Q = 1.$$

В новых переменных $(\xi_1, \xi_2, \xi_3) \equiv (\xi, \eta, \zeta)$ составляющие свободной энергии записываются следующим образом:

$$F^0_{el} = (1/2)[K_1\theta^2_\xi + K_2\theta^2_\eta + K_3\theta^2_\zeta + S^2_\theta(K_2\varphi^2_\xi + K_1\varphi^2_\eta + K_3\varphi^2_\zeta)] + (K_1 - K_2)S_\theta(\theta_\xi\varphi_\eta + \theta_\eta\varphi_\xi).$$

Здесь нижние греческие индексы у величин θ, φ означают дифференцирование по соответствующим координатам. Кинетическое слагаемое F_k остается без изменений (14). Холестерическая, диэлектрическая и флексоэлектрическая добавки соответственно принимают вид

$$F^h_{el} = K_2 q_0(-\theta_\eta + S_\theta\varphi_\xi),$$

$$F_E = -\varepsilon_a E^2_\zeta/(8\pi), \qquad F_d = -e_1 E_\zeta(\theta_\xi + S_\theta\varphi_\eta) - e_3(E_\xi\theta_\zeta + S_\theta E_\eta\varphi_\zeta),$$

где

$$\begin{pmatrix} E_\xi \\ E_\eta \\ E_\zeta \end{pmatrix} = Q \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_\theta C_\varphi & C_\theta S_\varphi & -S_\theta \\ -S_\varphi & C_\varphi & 0 \\ S_\theta C_\varphi & S_\theta S_\varphi & C_\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix}. \tag{35}$$

При вариации свободной энергии, записанной в исходной системе координат, вектор электрического поля $\boldsymbol{E}$ считается не зависящим от вариационных переменных [15]. В случае перехода к локальным координатам согласно (35) необходимо учитывать условия и свойства, следующие из определения единичных векторов (4)–(6):

$$\frac{\partial\,(\boldsymbol{mE})}{\partial\theta} = -(\boldsymbol{nE}), \qquad \frac{\partial\,(\boldsymbol{mE})}{\partial\varphi} = C_\theta(\boldsymbol{pE}), \qquad \frac{\partial\,(\boldsymbol{pE})}{\partial\theta} = 0, \qquad \frac{\partial\,(\boldsymbol{pE})}{\partial\varphi} = (\boldsymbol{lE}),$$

$$\frac{\partial\,(\boldsymbol{nE})}{\partial\theta} = (\boldsymbol{mE}), \qquad \frac{\partial\,(\boldsymbol{nE})}{\partial\varphi} = S_\theta(\boldsymbol{pE})$$

или

$$\frac{\partial E_\xi}{\partial\theta} = -E_\zeta, \qquad \frac{\partial E_\xi}{\partial\varphi} = C_\theta E_\eta, \qquad \frac{\partial E_\eta}{\partial\theta} = 0, \qquad \frac{\partial E_\eta}{\partial\varphi} = -S_\theta E_\xi - C_\theta E_\zeta,$$

$$\frac{\partial E_\zeta}{\partial\theta} = E_\xi, \qquad \frac{\partial E_\zeta}{\partial\varphi} = S_\theta E_\eta.$$

Операция дивергенции, необходимая при вычислении вариационных соотношений, в локальной системе координат записывается в виде

$$\operatorname{div}\boldsymbol{Z} \to \widetilde{\operatorname{div}}\tilde{\boldsymbol{Z}} + Z_\xi(-\theta_\zeta + C_\theta\varphi_\eta) - Z_\eta(C_\theta\varphi_\xi + S_\theta\varphi_\zeta) + Z_\zeta(\theta_\xi + S_\theta\varphi_\eta),$$

где $\boldsymbol{Z}$, $\tilde{\boldsymbol{Z}} = (Z_\xi, Z_\eta, Z_\zeta)$ — произвольный дифференцируемый вектор в исходной и локальной системах координат соответственно. Для упрощения соотношений целесообразно ввести вектор $\boldsymbol{\chi} = \boldsymbol{\chi}(x, y, z) \to \tilde{\boldsymbol{\chi}} = \tilde{\boldsymbol{\chi}}(\xi, \eta, \zeta)$. Тогда выражения для вариации потенциальной энергии в локальной системе координат принимают вид

$$\frac{\delta F_p}{\delta\theta} = \frac{\partial}{\partial x_i}\frac{\partial F_p}{\partial\,(\partial\theta/\partial x_i)} - \frac{\partial F_p}{\partial\theta} \to \frac{\partial}{\partial\xi_i}\frac{\partial F_p}{\partial\,(\partial\theta/\partial\xi_i)} + \tilde{\chi}_i\frac{\partial F_p}{\partial\,(\partial\theta/\partial\xi_i)} - \frac{\partial F_p}{\partial\theta},$$

$$\frac{\delta F_p}{\delta\varphi} = \frac{\partial}{\partial x_i}\frac{\partial F_p}{\partial\,(\partial\varphi/\partial x_i)} - \frac{\partial F_p}{\partial\varphi} \to \frac{\partial}{\partial\xi_i}\frac{\partial F_p}{\partial\,(\partial\varphi/\partial\xi_i)} + \tilde{\chi}_i\frac{\partial F_p}{\partial\,(\partial\varphi/\partial\xi_i)} - \frac{\partial F_p}{\partial\varphi}.$$

Здесь

$$\tilde{\boldsymbol{\chi}} \to Q\boldsymbol{\chi},$$

$$\boldsymbol{\chi} \equiv (\chi_x, \chi_y, \chi_z) = \boldsymbol{m}\operatorname{div}\boldsymbol{m} + \boldsymbol{p}\operatorname{div}\boldsymbol{p} + \boldsymbol{n}\operatorname{div}\boldsymbol{n} =$$
$$= \boldsymbol{m}[-(\boldsymbol{n}\nabla\theta) + C_\theta(\boldsymbol{p}\nabla\varphi)] - \boldsymbol{p}[C_\theta(\boldsymbol{m}\nabla\varphi) + S_\theta(\boldsymbol{n}\nabla\varphi)] + \boldsymbol{n}[(\boldsymbol{m}\nabla\theta) + S_\theta(\boldsymbol{p}\nabla\varphi)],$$
$$\tilde{\boldsymbol{\chi}} \equiv (\chi_\xi, \chi_\eta, \chi_\zeta) \equiv (-\theta_\zeta + C_\theta\varphi_\eta, -C_\theta\varphi_\xi - S_\theta\varphi_\zeta, \theta_\xi + S_\theta\varphi_\eta),$$

знак “$\sim$” означает, что соответствующая операция выполняется в локальной системе координат, а при выполнении преобразования векторы необходимо записывать в виде столбцов.

Полученные соотношения позволяют провести варьирование и найти выражения для ориентационного движения директора. Так, вклад упругой части свободной энергии записывается в виде

$$\frac{\delta F_{el}^0}{\delta\theta} = K_1[\theta_{\xi\xi} + C_\theta\varphi_\eta(\theta_\xi - S_\theta\varphi_\eta)] + K_2[\theta_{\eta\eta} - \theta_\eta(C_\theta\varphi_\xi + S_\theta\varphi_\zeta) + S_\theta\varphi_\xi(S_\theta\varphi_\zeta - C_\theta\varphi_\xi)] +$$
$$+ K_3[\theta_{\zeta\zeta} + S_\theta\theta_\zeta\varphi_\eta - S_\theta\varphi_\zeta(S_\theta\varphi_\xi + C_\theta\varphi_\zeta)] + (K_1 - K_2)S_\theta(\varphi_{\xi\eta} + C_\theta\varphi_\eta^2),$$

$$\frac{\delta F_{el}^0}{\delta\varphi} = K_1\Big[\frac{\partial}{\partial\eta}(S_\theta^2\varphi_\eta) - C_\theta\theta_\eta\theta_\xi\Big] + K_2\Big[\frac{\partial}{\partial\xi}(S_\theta^2\varphi_\xi) + (C_\theta\theta_\xi + S_\theta\theta_\zeta)\theta_\eta - S_\theta^2\varphi_\xi\theta_\zeta\Big] + \tag{36}$$
$$+ K_3\Big[\frac{\partial}{\partial\zeta}(S_\theta^2\varphi_\zeta) - S_\theta\theta_\eta\theta_\zeta + S_\theta^2\varphi_\zeta\theta_\xi\Big] + (K_1 - K_2)\Big[\frac{\partial}{\partial\eta}(S_\theta\theta_\xi) - S_\theta C_\theta\theta_\eta\varphi_\eta\Big].$$

Добавка, обусловленная холестерическим порядком, принимает вид

$$\frac{\delta F_{el}^h}{\delta\theta} = 2K_2q_0S_\theta\varphi_\zeta, \qquad \frac{\delta F_{el}^h}{\delta\varphi} = -2K_2q_0S_\theta\theta_\zeta. \tag{37}$$

Вариации диэлектрического (F_E) и флексоэлектрического (F_d) слагаемых записываются следующим образом:

$$\frac{\delta F_E}{\delta\theta} = \frac{\varepsilon_a}{4\pi}E_\xi E_\zeta, \qquad \frac{\delta F_E}{\delta\varphi} = \frac{\varepsilon_a}{4\pi}S_\theta E_\eta E_\zeta; \tag{38}$$

$$\frac{\delta F_d}{\delta\theta} = e_1\Big(E_\xi(\theta_\xi + S_\theta\varphi_\eta) - \frac{\partial E_\zeta}{\partial\xi}\Big) + e_3\Big(E_\eta(C_\theta\varphi_\zeta + S_\theta\varphi_\xi) - E_\zeta\theta_\zeta - S_\theta E_\xi\varphi_\eta - \frac{\partial E_\xi}{\partial\zeta}\Big),$$
$$\frac{\delta F_d}{\delta\varphi} = e_1S_\theta\Big(E_\eta(\theta_\xi + S_\theta\varphi_\eta) - \frac{\partial E_\zeta}{\partial\eta}\Big) + e_3S_\theta\Big(E_\xi\theta_\eta - E_\eta\theta_\xi - (C_\theta E_\xi + S_\theta E_\zeta)\varphi_\zeta - \frac{\partial E_\eta}{\partial\zeta}\Big). \tag{39}$$

Таким образом, получена система уравнений для ориентационного движения директора НЖК и ХЖК в локальной системе координат. При рассмотрении соответствующего взаимодействия необходимо суммировать вариационные соотношения (20), (36)–(39), которые позволяют учесть влияние как внешних геометрических и внутренних конфигурационных условий, так и электрических полей в достаточно общей постановке. Используя аналогичный подход, можно рассмотреть более сложные модели функционала свободной энергии (7), (8), учитывающие более старшие, чем квадратичные, члены разложения, например упругую модель Неринга — Заупе [16] или модель, включающую квадрупольное взаимодействие с электрическими полями [17].

Одноконстантное приближение. Определим, насколько описание ориентационных структур на основе одноконстантного приближения соответствует модели, учитывающей при деформации различие всех упругих коэффициентов. Предварительно сделаем следующее замечание. Если дифференцирование рассматривать как воздействие некоторых операторов, то формально можно записать

$$\begin{pmatrix} \partial/\partial\xi \\ \partial/\partial\eta \\ \partial/\partial\zeta \end{pmatrix} \leftrightarrow Q \begin{pmatrix} \partial/\partial x \\ \partial/\partial y \\ \partial/\partial z \end{pmatrix} \leftrightarrow \begin{pmatrix} (\boldsymbol{m}\nabla) \\ (\boldsymbol{p}\nabla) \\ (\boldsymbol{n}\nabla) \end{pmatrix} \tag{40}$$

и процедуру перехода из одной системы координат в другую свести к простой замене соответствующих операторов согласно (40). При этом полученные вариационные соотношения перейдут в аналогичные, записанные в исходной системе координат.

Для анализа одноконстантного случая запишем упругую часть вариации свободной энергии (36) при условии $K_1 = K_2 = K_3 = K$. Получаем

$$\frac{\delta F_{el}^0}{\delta\theta} = K\big[\tilde{\Delta}\theta - S_\theta C_\theta (\tilde{\nabla}\varphi)^2 + C_\theta \tilde{g}_3 - S_\theta \tilde{g}_1\big], \qquad \frac{\delta F_{el}^0}{\delta\varphi} = K\big[\widetilde{\operatorname{div}}\,(S_\theta^2 \tilde{\nabla}\varphi) - S_\theta^2 \tilde{g}_2\big]. \tag{41}$$

Здесь знак “$\sim$” означает, что соответствующая операция выполняется в локальной системе координат. Вектор $\tilde{\boldsymbol{g}} = (\tilde{g}_1, \tilde{g}_2, \tilde{g}_3) = (g_\xi, g_\eta, g_\zeta)$ представляет собой векторное произведение в локальной системе координат:

$$\tilde{\boldsymbol{g}} = [\tilde{\nabla}\theta\tilde{\nabla}\varphi] = (\theta_\eta\varphi_\zeta - \theta_\zeta\varphi_\eta, -\theta_\xi\varphi_\zeta + \theta_\zeta\varphi_\xi, \theta_\xi\varphi_\eta - \theta_\eta\varphi_\xi)$$

и связан с введенными выше векторами $\boldsymbol{g}$ и $\boldsymbol{G}$ (32) соотношением преобразования:

$$\tilde{\boldsymbol{g}} \to \begin{pmatrix} g_1 \\ g_2 \\ g_3 \end{pmatrix} = Q[\nabla\theta\nabla\varphi] = Q\boldsymbol{G} = \begin{pmatrix} (\boldsymbol{mG}) \\ (\boldsymbol{pG}) \\ (\boldsymbol{nG}) \end{pmatrix}.$$

Равенства (41), записанные в исходной системе координат, переходят в (19) при $q_0 = 0$. При этом необходимо учитывать векторные тождества, следующие из определения единичных векторов (4), (5):

$$\tilde{\Delta}\theta \to (\boldsymbol{m}\nabla(\boldsymbol{m}\nabla\theta)) + (\boldsymbol{p}\nabla(\boldsymbol{p}\nabla\theta)) + (\boldsymbol{n}\nabla(\boldsymbol{n}\nabla\theta)) = \Delta\theta - \theta_x\varphi_y + \theta_y\varphi_x = \Delta\theta - G_z,$$

$$\tilde{\Delta}\varphi \to (\boldsymbol{m}\nabla(\boldsymbol{m}\nabla\varphi)) + (\boldsymbol{p}\nabla(\boldsymbol{p}\nabla\varphi)) + (\boldsymbol{n}\nabla(\boldsymbol{n}\nabla\varphi)) =$$
$$= \Delta\varphi + S_\varphi(\theta_y\varphi_z - \theta_z\varphi_y) + C_\varphi(\theta_z\varphi_x - \theta_x\varphi_z) = \Delta\varphi + S_\theta G_x + C_\theta G_y,$$
$$(\tilde{\nabla}\theta)^2 \to (\boldsymbol{m}\nabla\theta)^2 + (\boldsymbol{p}\nabla\theta)^2 + (\boldsymbol{n}\nabla\theta)^2 = (\nabla\theta)^2,$$
$$(\tilde{\nabla}\varphi)^2 \to (\boldsymbol{m}\nabla\varphi)^2 + (\boldsymbol{p}\nabla\varphi)^2 + (\boldsymbol{n}\nabla\varphi)^2 = (\nabla\varphi)^2,$$

и определения компонент векторного произведения $\boldsymbol{G} = [\nabla\theta\nabla\varphi]$. Согласно (32) можно записать

$$\boldsymbol{G} = \boldsymbol{m}(\boldsymbol{mG}) + \boldsymbol{p}(\boldsymbol{pG}) + \boldsymbol{n}(\boldsymbol{nG}) = g_1\boldsymbol{m} + g_2\boldsymbol{p} + g_3\boldsymbol{n},$$

$$C_\theta g_3 - S_\theta g_2 = G_z, \qquad C_\varphi G_y - S_\varphi G_x = g_2,$$
$$\boldsymbol{G} \equiv [\nabla\theta\nabla\varphi] = (\theta_y\varphi_z - \theta_z\varphi_y, -\theta_x\varphi_z + \theta_z\varphi_x, \theta_x\varphi_y - \theta_y\varphi_x).$$

Отметим, что величины g_1, g_2, g_3 и компоненты вектора $\boldsymbol{G}$ при вариации дают нулевой вклад в уравнения движения. Иными словами, они являются функциями только координат и не зависят явно от времени. По аналогии с определениями аналитической механики их можно назвать интегралами движения, значения которых определяются согласованными начальными и граничными условиями. Данное обстоятельство имеет большое значение при интегрировании уравнений движения и особенно важно при численной реализации. Использование полученных интегралов движения сокращает временные затраты и объем машинной памяти в несколько раз.

Помимо величин g_i и G_i можно указать еще несколько интегралов движения, включающих внешнее воздействие, используя при этом рассуждения, основанные на рассмотрении функционала свободной энергии как некоторого обобщенного лагранжиана и на выводах из теоремы Нетер [18]. Матричный подход и переход в локальную систему координат позволяют формализовать и расширить поиск сохраняющихся величин, предложенный в [18].

Выполнить сравнение уравнений движения для НЖК ($q_0 = 0$) в одноконстантном приближении вида (21) и уравнений (20), (36)–(39) для случая $K_1 \neq K_2 \neq K_3$, записанных в исходной системе координат, достаточно сложно из-за большого объема вычислений. Целесообразно сделать это на основе сравнения соответствующих функционалов для упругой части свободной энергии, записанных в локальной системе координат. В многоконстантном и одноконстантном случаях выражение для F^0_{el} соответственно принимает вид

$$F^0_{el}(K_i) = (1/2)[K_1\theta_\xi^2 + K_2\theta_\eta^2 + K_3\theta_\zeta^2 + S_\theta^2(K_2\varphi_\xi^2 + K_1\varphi_\eta^2 + K_3\varphi_\zeta^2)] + \\ + S_\theta(K_1 - K_2)(\theta_\xi\varphi_\eta + \theta_\eta\varphi_\xi); \qquad (42)$$

$$F^0_{el}(K) = (K/2)\big[(\tilde\nabla\theta)^2 + S_\theta^2(\tilde\nabla\varphi)^2\big]. \qquad (43)$$

Введем операторы градиентов, в которых пространственные переменные имеют разный масштаб, согласно выражению

$$\tilde\nabla_0 = K^{1/2}\Big(\frac{\partial}{\partial\xi}, \frac{\partial}{\partial\eta}, \frac{\partial}{\partial\zeta}\Big),$$
$$\tilde\nabla_1 = \Big(K_1^{1/2}\frac{\partial}{\partial\xi}, K_2^{1/2}\frac{\partial}{\partial\eta}, K_3^{1/2}\frac{\partial}{\partial\zeta}\Big), \qquad \tilde\nabla_2 = \Big(K_2^{1/2}\frac{\partial}{\partial\xi}, K_1^{1/2}\frac{\partial}{\partial\eta}, K_3^{1/2}\frac{\partial}{\partial\zeta}\Big).$$

Тогда выражения (42) и (43) принимают вид

$$F^0_{el}(K_i) = (1/2)\big[(\tilde\nabla_1\theta)^2 + S_\theta^2(\tilde\nabla_2\varphi)^2\big] + S_\theta(K_1 - K_2)(\theta_\xi\varphi_\eta + \theta_\eta\varphi_\xi); \qquad (44)$$

$$F^0_{el}(K) = (1/2)\big[(\tilde\nabla_0\theta)^2 + S_\theta^2(\tilde\nabla_0\varphi)^2\big]. \qquad (45)$$

Из результатов сравнения соотношений (44) и (45) следует, что решения качественно согласуются только при равенстве нулю вариации от последнего слагаемого в (44) или при ее пренебрежимо малой величине. Добавка принимает точное нулевое значение, по крайней мере, в двух случаях: 1) искомые решения зависят только от одной координатной переменной; 2) деформированное состояние ЖК описывается плоской конфигурацией, т. е. один из углов, входящих в определение ориентации директора (4), тождественно равен константе. Исследованные в литературе ориентационные состояния ЖК в основном соответствуют этим частным случаям. В общем виде решения приближенной и точной моделей качественно согласуются, если для записи приближенных уравнений использовать соотношения вида

$$\frac{\delta F^0_{el}}{\delta\theta} = K[\Delta\theta - S_\theta C_\theta(\nabla\varphi)^2] + K_{12}S_\theta\varphi_{xy}, \qquad \frac{\delta F^0_{el}}{\delta\varphi} = K[\operatorname{div}(S_\theta^2\nabla\varphi)] + K_{12}S_\theta\theta_{xy}, \qquad (46)$$

где $\theta_{xy} = \partial^2\theta/\partial x\,\partial y$; $\varphi_{xy} = \partial^2\varphi/\partial x\,\partial y$; $K_{12} \sim (K_1 - K_2)$ и $K \sim (1/3)(K_1 + K_2 + K_3)$ — подгоночные параметры. При выводе (46) в перекрестных компонентах, пропорциональных разности $K_1 - K_2$, сохранены члены, не повторяющиеся в остальных слагаемых при коэффициентах K_i.

В заключение необходимо сделать замечание относительно переходов в другие системы координат. При использовании векторных уравнений движения, записанных относительно директора $\boldsymbol{n} = \boldsymbol{n}(t, \boldsymbol{r})$ в форме (3), замена переменных требует преобразования как координат, так и всех векторных величин, входящих в уравнения. Эта процедура, особенно в трехмерном варианте, приводит к достаточно громоздким вычислениям. Тригонометрическая форма записи уравнений движения (12) относительно скалярных величин $\theta = \theta(t, \boldsymbol{r})$ и $\varphi = \varphi(t, \boldsymbol{r})$, так же как и при переходе в локальную систему координат, позволяет преобразовать только координатные переменные, а искомые углы θ, φ оставить определенными в декартовой системе координат. Исключением является цилиндрический случай, так как переопределение угловых переменных сводится к простой замене

$$\theta_{cyl} = \theta_{car}, \qquad \varphi_{cyl} = \varphi_{car} - \alpha,$$

где α — угловая координата в цилиндрической системе $\boldsymbol{r} = (\rho, z, \alpha)$. В то же время переопределение функций углов в сферической системе координат приводит к нелинейным зависимостям вида

$$\cos\theta_{sph} = \cos\theta_{car}\cos\gamma - \sin\theta_{car}\sin\gamma\cos(\varphi_{car} - \alpha), \qquad \varphi_{sph} = \varphi_{car} - \alpha,$$

где γ, α — угловые полярная и азимутальная координаты в сферической системе $\boldsymbol{r} = (r, \gamma, \alpha)$. Индексы cyl, car, sph означают, что переменная определена в цилиндрической, декартовой или сферической системе координат.

При определении искомых угловых переменных в декартовой системе координат переход к новой системе координат осуществляется преобразованием введенных в выражение для свободной энергии матриц согласно соотношению

$$\tilde{W} = R^{\mathrm{T}} W R, \qquad \frac{\partial \tilde{x}_i}{\partial x_j} = R_{ij}.$$

Здесь $\tilde{x}_i$ — новые координаты; $R = [R_{ij}]$ — матрица перехода $x_i \to \tilde{x}_i$; W — одна из введенных выше матриц T, Φ, Λ, L, A, B (см. (23)–(25), (27), (29), (30)).

Таким образом, для случая отсутствия гидродинамических потоков предложен матричный подход и получена компактная система уравнений ориентационного движения директора НЖК и ХЖК в локальной системе координат, связанной с ориентацией самого директора. В результате анализа выведенных уравнений получено условие, необходимое для качественного согласия решений, следующих из приближенной (одноконстантной) модели, и решений при точной постановке задачи. Предложен обобщенный вид приближенных уравнений. Рассмотрена матричная форма записи уравнений, позволяющая достаточно просто осуществлять переход в другие системы координат и исследовать более сложные модели для описания ориентационного состояния ЖК. При этом процесс вывода необходимых уравнений легко алгоритмизуется с помощью символьных языков. Исследования с использованием локальной системы координат позволяют проводить расчеты для трехмерных динамических ЖК-систем даже на персональных компьютерах средней мощности. Численные эксперименты, выполненные для ряда частных случаев (с использованием одной и той же вычислительной программы), показали, что время, затраченное на расчет в локальной системе координат, может быть в 10 раз меньше по сравнению со временем интегрирования уравнений в исходной системе координат. Тестовые расчеты показали, что решения, следующие из приближенной модели (46), качественно не отличаются от результатов, полученных по точной модели, учитывающей различие всех упругих коэффициентов.

Автор выражает благодарность С. К. Годунову за консультации и поддержку данной работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Де Жен П.** Физика жидких кристаллов. М.: Мир, 1977.
2. **Пикин С. А.** Структурные превращения в жидких кристаллах. М.: Наука, 1981.
3. **Суздалев И. П.** Нанотехнология. М.: КомКнига, 2005.
4. **Nazarenko V. G., Nych A. B., Lev B. I.** Crystal structure in nematic emulsion // Phys. Rev. Lett. 2001. V. 87. P. 075504-1–075504-4.
5. **Jun-ichi-Fukuda, Holger Stark, Makoto Yoneya, Hiroshi Yokoyama.** Dynamics of a nematic liquid crystal around a spherical particle // J. Phys. Condens. Matter. 2004. V. 16. P. S1957–S1968.
6. **Годунов С. К.** Элементы механики сплошной среды. М.: Наука, 1978.
7. **Годунов С. К.** Уравнения математической физики. М.: Наука, 1971.
8. **Годунов С. К.** Представления группы вращений и сферические функции / С. К. Годунов, Т. Ю. Михайлова. Новосибирск: Науч. кн., 1998.
9. **Oseen C. W.** The theory of liquid crystals // Trans. Faraday Soc. 1933. V. 29. P. 883–899.
10. **Преображенский Н. Г., Трашкеев С. И.** Аналитические и численные методы расчета ориентационной нелинейности жидких кристаллов. Новосибирск, 1988. (Препр. / Ин-т теорет. и прикл. механики СО АН СССР; № 10-88).
11. **Золотько А. С., Китаева В. Ф., Преображенский Н. Г., Трашкеев С. И.** К теории эффекта Фредерикса в световом поле // Краткие сообщ. по физике. 1982. № 1. С. 12–18.
12. **Золотько А. С., Китаева В. Ф., Кроо Н. и др.** Численный расчет порога Фредерикса в поле световой волны обыкновенного типа // Краткие сообщ. по физике. 1984. № 10. С. 30–34.
13. **Преображенский Н. Г., Трашкеев С. И.** Светоиндуцированный переход Фредерикса в поле неплоской о-волны // Оптика и спектроскопия. 1987. Т. 62, вып. 1. С. 86–90.
14. **Жаркова Г. М., Трашкеев С. И.** Ориентация жидких кристаллов в сферическом объеме // Кристаллография. 1989. Т. 34, вып. 3. С. 695–701.
15. **Зельдович Б. Я., Табирян Н. В.** Теория светоиндуцированного перехода Фредерикса (СПФ) // Журн. эксперим. и теорет. физики. 1982. Т. 82, вып. 4. С. 1126–1146.
16. **Nehring J., Saupe A.** On the elastic theory of uniaxial liquid crystals // J. Chem. Phys. 1971. V. 54. P. 337–343.
17. **Prost J., Pershan P. S.** Flexoelectricity in nematic and smectic-A liquid crystals // J. Appl. Phys. 1976. V. 47. P. 2298–2312.
18. **Акопян Р. С., Зельдович Б. Я.** Законы сохранения и интегрирование уравнений равновесия жидких кристаллов // Журн. эксперим. и теорет. физики. 1982. Т. 83, вып. 6. С. 2137–2145.

Поступила в редакцию 3/V 2006 г.