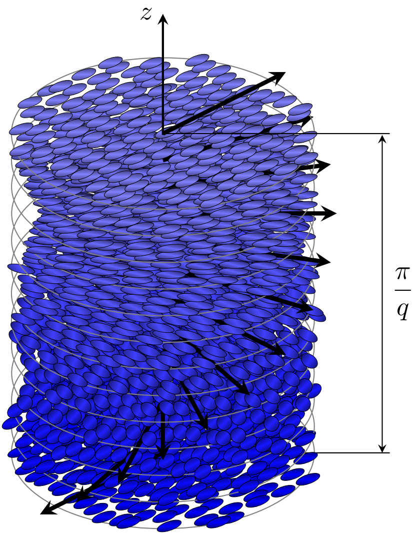
ПРЯМЫЕ МЕТОДЫ МИНИМИЗАЦИИ СВОБОДНОЙ ЭНЕРГИИ ФРАНКА

Белов Игорь Валерьевич

Санкт-Петербургский государственный университет
физический факультет
кафедра статистической физики

28 мая 2010 г.

Холестерические жидкие кристаллы



Директор — $\mathbf{n}(\mathbf{r})$

$$n_x = \cos(qz + \varphi_0)$$
$$n_y = \sin(qz + \varphi_0)$$
$$n_z = 0$$

Период спирали $P = \dfrac{\pi}{q}$

Свободная энергия Франка

Плотность ориентационной свободной энергии ХЖК

$$\mathcal{F}_o = \frac{1}{2}\left[\mathcal{K}_1(\operatorname{div}\mathbf{n})^2 + \mathcal{K}_2(\mathbf{n}\cdot\operatorname{rot}\mathbf{n} + q)^2 + \mathcal{K}_3(\mathbf{n}\times\operatorname{rot}\mathbf{n})^2\right],$$

где $\mathcal{K}_1$, $\mathcal{K}_2$, $\mathcal{K}_3$ — коэффициенты Франка, q — волновое число неоднородной структуры.

Вклады в плотность свободной энергии от внешних полей

$$\mathcal{F}_э = -\frac{1}{8\pi}\left[\varepsilon_\perp\mathbf{E}^2 + \varepsilon_a(\mathbf{n}\cdot\mathbf{E})^2\right] \quad \mathcal{F}_м = -\frac{1}{2}\left[\chi_\perp\mathbf{H}^2 + \chi_a(\mathbf{n}\cdot\mathbf{H})^2\right]$$

Свободная энергия образца в электрическом поле

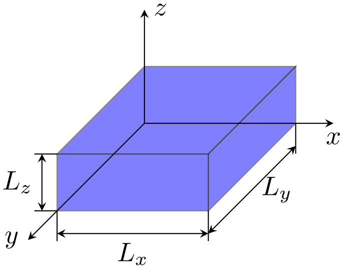
$$F = \int(\mathcal{F}_o + \mathcal{F}_э)d\mathbf{r}$$

Прямой метод минимизации

Ищем решение в виде

$$\mathbf{n} = \sum_{k\in\mathcal{N}} \boldsymbol{\nu}_k e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}},$$

где $\mathcal{N}$ — множество мульти-индексов,
$\boldsymbol{\nu}_k = (\xi_k, \eta_k, \zeta_k)$ — коэффициенты,
$\mathbf{K} = (2\pi k_1/L_x, 2\pi k_2/L_y, 2\pi k_3/L_z)$



Плотность свободной энергии примет вид

$$\mathcal{F} = \sum_k c_k e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} \quad \text{где } c_k = P_4(\{\xi_j\}, \{\eta_j\}, \{\zeta_j\}),\ j\in\mathcal{N}$$

Интеграл по ячейке

$$F = \int_V \mathcal{F} d\mathbf{r} = L_x L_y L_z c_0 \quad \text{т. к.} \quad \int_V e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r} = 0 \text{ при } k \neq 0$$

Прямой метод минимизации

Теперь энергия Франка выражена через неизвестные коэффициенты ξ_j, η_j, ζ_j:

$$F = P_4(\{\xi_j\}, \{\eta_j\}, \{\zeta_j\}), \; j \in \mathcal{N}$$

Чтобы найти минимум необходимо решить систему уравнений.

$$\begin{cases} \dfrac{\partial F}{\partial \xi_j} = 0 \\ \dfrac{\partial F}{\partial \eta_j} = 0 \quad j \in \mathcal{N} \\ \dfrac{\partial F}{\partial \zeta_j} = 0 \\ \mathbf{n} \cdot \mathbf{n} = 1 \\ \mathbf{n}\big|_{z=0} = \mathbf{n}_1 \\ \mathbf{n}\big|_{z=L_z} = \mathbf{n}_2 \end{cases}$$

Система состоит из уравнений необходимых для экстремума функции F, условия единичности директора, представленном в виде ряда, и граничных условий.

Полученная система будет алгебраической системой уравнений. Каждое уравнение будет полиномом не выше 4-й степени.

Результаты

Результаты

- Составлена система уравнений для поиска коэффициентов разложения
- Изучен алгоритм Бухбергера и результаты теории базисов Грёбнера

Дальнейший план

- Выполнить алгоритм Бухбергера над полученной системой аналитически
- В случае неуспеха использовать машинные методы преобразования системы
- Решение системы численными методами

Литература

- И. В. Аржанцев *Системы полиномиальных уравнений и базисы Гребнера* М.: МЦНМО (2002)
- С. А. Пикин *Структурные превращения в жидких кристаллах* М.: Наука (1981)
- В. В. Прасолов *Многочлены* М.: МЦНМО (2000)