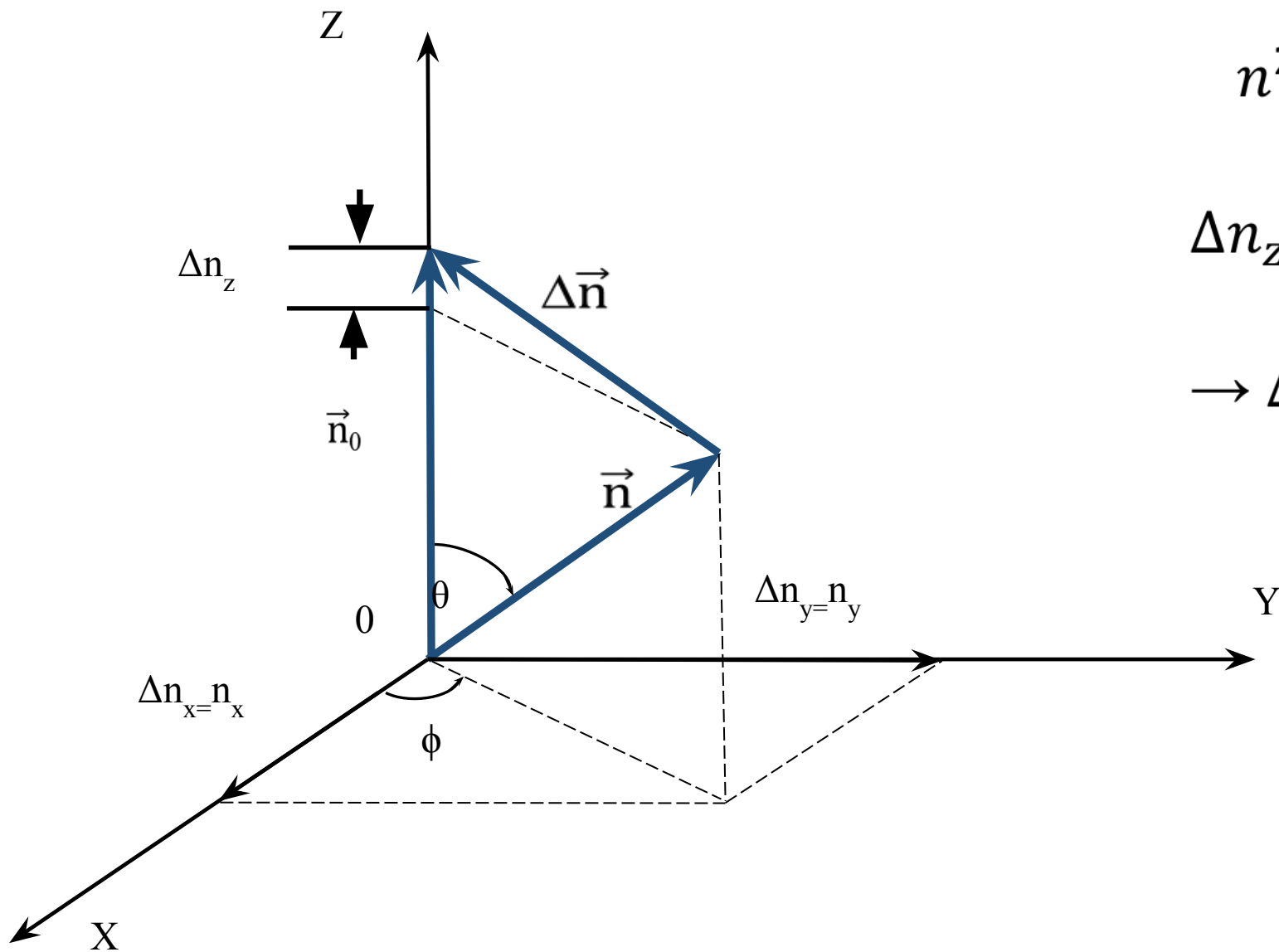


§4 Теория упругости. Основные уравнения.

От вектора \vec{n} перейдем к полю директоров $\vec{n}(\vec{r})$



$$n^2 = n_x^2 + n_y^2 + (n_0 - \Delta n_z)^2$$

$$\Delta n_z \sim (n_x^2 + n_y^2) / 2 \approx n_x \cdot n_y \rightarrow$$

$\rightarrow \Delta n_z$ можно пренебречь

Начальное (\vec{n}_0) и деформированное (\vec{n})
положение директора

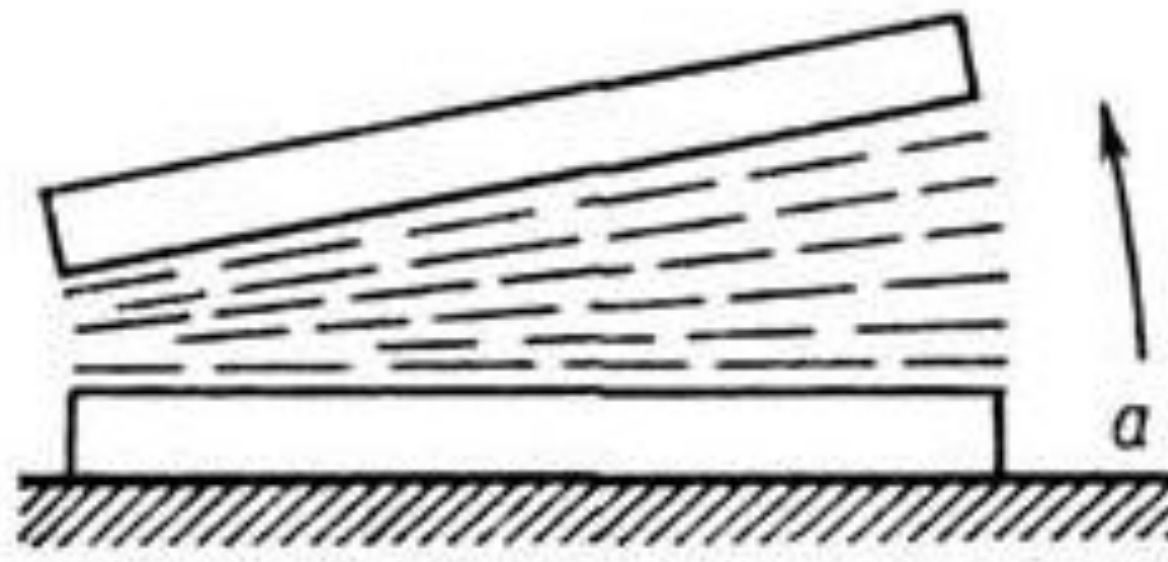
$$\begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} = \frac{\begin{array}{|c|} \hline \square \Delta \square \\ \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array}}{\begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array}} \quad (4-1)$$

$$\begin{array}{ccc} \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} 1 & \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} 2 & \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} 3 \\ \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} 4 & \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} 5 & \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} 6 \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \\ 0 & 0 & 0 \end{array} \quad (4-2)$$

где $\Delta n_1 = \Delta n_x = n_x$, $\Delta n_2 = \Delta n_y = n_y$, $g_1 = x$, $g_2 = y$, $g_3 = z$

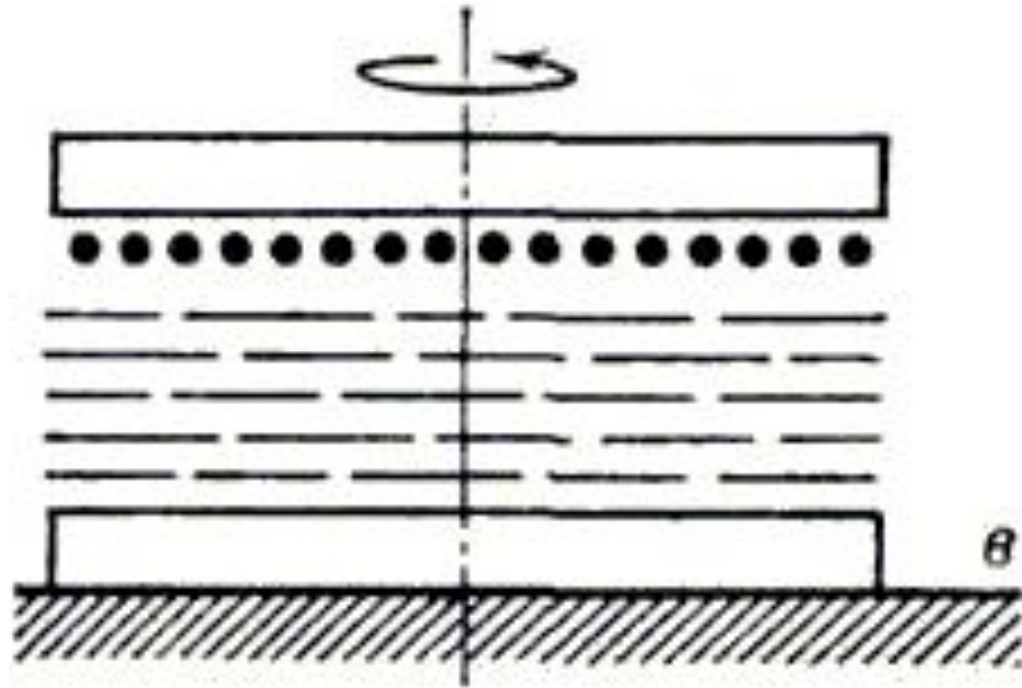
$$\frac{\partial n_x}{\partial x} = a_1$$

$$\frac{\partial n_y}{\partial y} = a_5$$



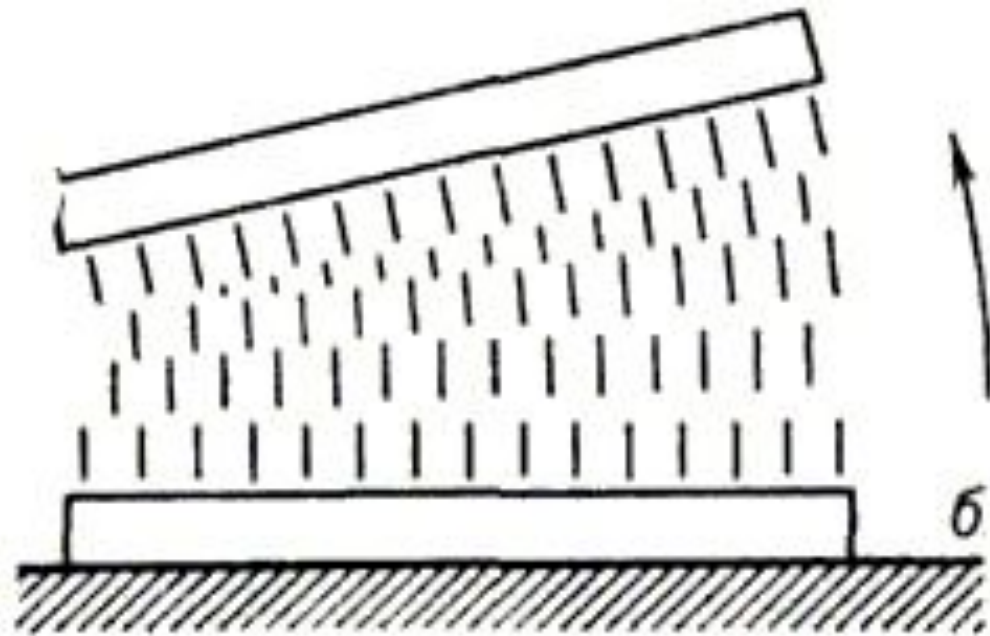
Деформация поперечного изгиба
(spray – деформация, S -
деформация)

$$\frac{\partial n_x}{\partial y} = a_2$$
$$-\frac{\partial n_y}{\partial x} = a_4$$



Деформация кручение (twist – деформация, T - деформация)

$$\frac{\partial n_x}{\partial z} = a_3$$
$$\frac{\partial n_y}{\partial z} = a_6$$



Деформация продольного изгиба
(bend – деформация, В -
деформация)

$$F = F_0 + \Delta F \quad (4-3)$$

F - свободная энергия деформированного тела, F_0 - свободная энергия недеформированного тела, ΔF дополнительная свободная энергия.

$$\mathcal{F} = \int_V \Phi dV \quad (4-4)$$

Φ - плотность свободной энергии деформированного тела, V – объем образца.

$$\Phi = \Phi_0 + k_i a_i + \frac{1}{2} k_{ij} a_i a_j \quad (4-5)$$

а) Точечная симметрия среды ∞ , $\vec{n} \neq -\vec{n}$

$$\begin{vmatrix} k_1 & k_2 & 0 \\ -k_1 & k_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{vmatrix} \quad (4-6)$$

Матрица тензора k_i

$$\begin{vmatrix}
 k_{11} & k_{12} & 0 & -k_{12} & (k_{11} - k_{22} - k_{24}) & 0 \\
 k_{12} & k_{22} & 0 & k_{24} & k_{12} & 0 \\
 0 & 0 & k_{33} & 0 & 0 & 0 \\
 -k_{12} & k_{24} & 0 & k_{22} & -k_{12} & 0 \\
 (k_{11} - k_{22} - k_{24}) & k_{12} & 0 & -k_{12} & k_{11} & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & k_{33}
 \end{vmatrix} \quad (4-7)$$

Матрица тензора k_{ij}

б) Точечная симметрия среды $\infty/2$, $\vec{n} = -\vec{n}$

$$k_1 = 0, k_{12} = 0$$

в) Точечная симметрия среды ∞/mmm ,

$$k_2 = 0, k_{12} = 0$$

$$\begin{aligned}
\Phi = & \Phi_0 + k_1(a_1 + a_5) + k_2(a_2 - a_4) + \frac{1}{2}k_{11}(a_1 + a_5)^2 + \\
& \frac{1}{2}k_{22}(a_2 - a_4)^2 + \frac{1}{2}k_{33}(a_3^2 + a_6^2) + k_{12}(a_1 + a_5)(a_2 - a_4) - (k_{22} \\
& + k_{24})(a_1a_5 - a_2a_4) \quad (4-8)
\end{aligned}$$

$$\left\{ \begin{aligned}
(a_1 + a_5) &= \frac{\partial n_x}{\partial x} - \frac{\partial n_y}{\partial y} = \operatorname{div} \vec{n} = \nabla \cdot \vec{n} \\
-(a_2 - a_4) &= \frac{\partial n_y}{\partial x} - \frac{\partial n_x}{\partial y} = \vec{n} \cdot \operatorname{rot} \vec{n} = \vec{n} \cdot (\nabla \times \vec{n}) \\
(a_3^2 + a_6^2) &= \left(\frac{\partial n_x}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial n_y}{\partial z} \right)^2 = (\vec{n} \times \operatorname{rot} \vec{n})^2 = [\vec{n} \cdot (\nabla \times \vec{n})]^2
\end{aligned} \right. \quad (4-9)$$

$$\Phi = \Phi_0 + k_1 \operatorname{div} \vec{n} + k_2 (\vec{n} \cdot \operatorname{rot} \vec{n}) + \frac{1}{2} k_{11} (\operatorname{div} \vec{n})^2 + \frac{1}{2} k_{22} (\vec{n} \cdot \operatorname{rot} \vec{n})^2 + \frac{1}{2} k_{33} (\vec{n} \times \operatorname{rot} \vec{n})^2 + k_{12} (\vec{n} \cdot \operatorname{div} \vec{n} \cdot \operatorname{rot} \vec{n}) \quad (4-10)$$

Введем для упрощения:

$$S_0 = -\frac{k_1}{k_{11}}, \quad t_0 = -\frac{k_2}{k_{22}}$$

Тогда (4-10) перепишется в следующем виде:

$$\Phi = \Phi_0 + \frac{1}{2}k_{11}(\operatorname{div}\vec{n} - S_0)^2 + \frac{1}{2}k_{22}(\vec{n} \cdot \operatorname{rot}\vec{n} + t_0)^2 + \frac{1}{2}k_{33}(\vec{n} \times \operatorname{rot}\vec{n})^2 - k_{12}(\vec{n} \cdot \operatorname{div}\vec{n} \cdot \operatorname{rot}\vec{n}) + \frac{1}{2}k_{11}S_0^2 - \frac{1}{2}k_{22}t_0^2$$

(4-11)

Перепишем (4-11), оставив только компоненты, связанные с деформацией:

$$\Phi = \frac{1}{2}k_{11}(\operatorname{div}\vec{n} - S_0)^2 + \frac{1}{2}k_{22}(\vec{n} \cdot \operatorname{rot}\vec{n} + t_0)^2 + \frac{1}{2}k_{33}(\vec{n} \times \operatorname{rot}\vec{n})^2 - k_{12}(\vec{n} \cdot \operatorname{div}\vec{n} \cdot \operatorname{rot}\vec{n})$$

(4-12)

Проинтегрируем (4-11) по объему, получим основное уравнение теории упругости:

$$\mathcal{F} = \frac{1}{2} \int_V [k_{11}(\operatorname{div} \vec{n} - S_0)^2 + k_{22}(\vec{n} \cdot \operatorname{rot} \vec{n} + t_0)^2 + k_{33}(\vec{n} \times \operatorname{rot} \vec{n})^2 - 2k_{12}(\vec{n} \cdot \operatorname{div} \vec{n} \cdot \operatorname{rot} \vec{n})] dV \quad (4-13)$$

Плотность упругой энергии ЖК в одноконстантном приближении ($k_{11} = k_{12} = k_{22} = k_{33} = k$):

$$\Phi = \frac{1}{2}k [(\operatorname{div}\vec{n})^2 + (\operatorname{rot}\vec{n})^2] \quad (4-14)$$

Или в координатной записи:

$$\Phi = \frac{1}{2}k \left[\frac{\partial n_x}{\partial x} \frac{\partial n_y}{\partial y} - \frac{\partial n_x}{\partial y} \frac{\partial n_y}{\partial x} \right] \quad (4-15)$$

Упругие постоянные k имеют размерность силы и порядок величины

$$k = \frac{u}{a} \approx \frac{2 \text{ ккал / моль}}{14 \text{ \AA}} = 10^{-6} \text{ дин} = 10^{-11} \text{ Н},$$

где u – энергия взаимодействия молекул, a – размер молекул.

Точечная симметрия среды ∞/mmm : $k_1 = k_2 = k_{12} = 0$, ур-е (4-12) примет вид:

$$\Phi = \frac{1}{2}k_{11}(\operatorname{div}\vec{n})^2 + \frac{1}{2}k_{22}(\vec{n} \cdot \operatorname{rot}\vec{n})^2 + \frac{1}{2}k_{33}(\vec{n} \times \operatorname{rot}\vec{n})^2 \quad (4-16)$$

Условие минимума Φ :

$$\begin{cases} \operatorname{div}\vec{n} = 0 \\ \vec{n} \cdot \operatorname{rot}\vec{n} = 0 \\ \vec{n} \times \operatorname{rot}\vec{n} = 0 \end{cases} \rightarrow \text{нематическая мезофаза}$$

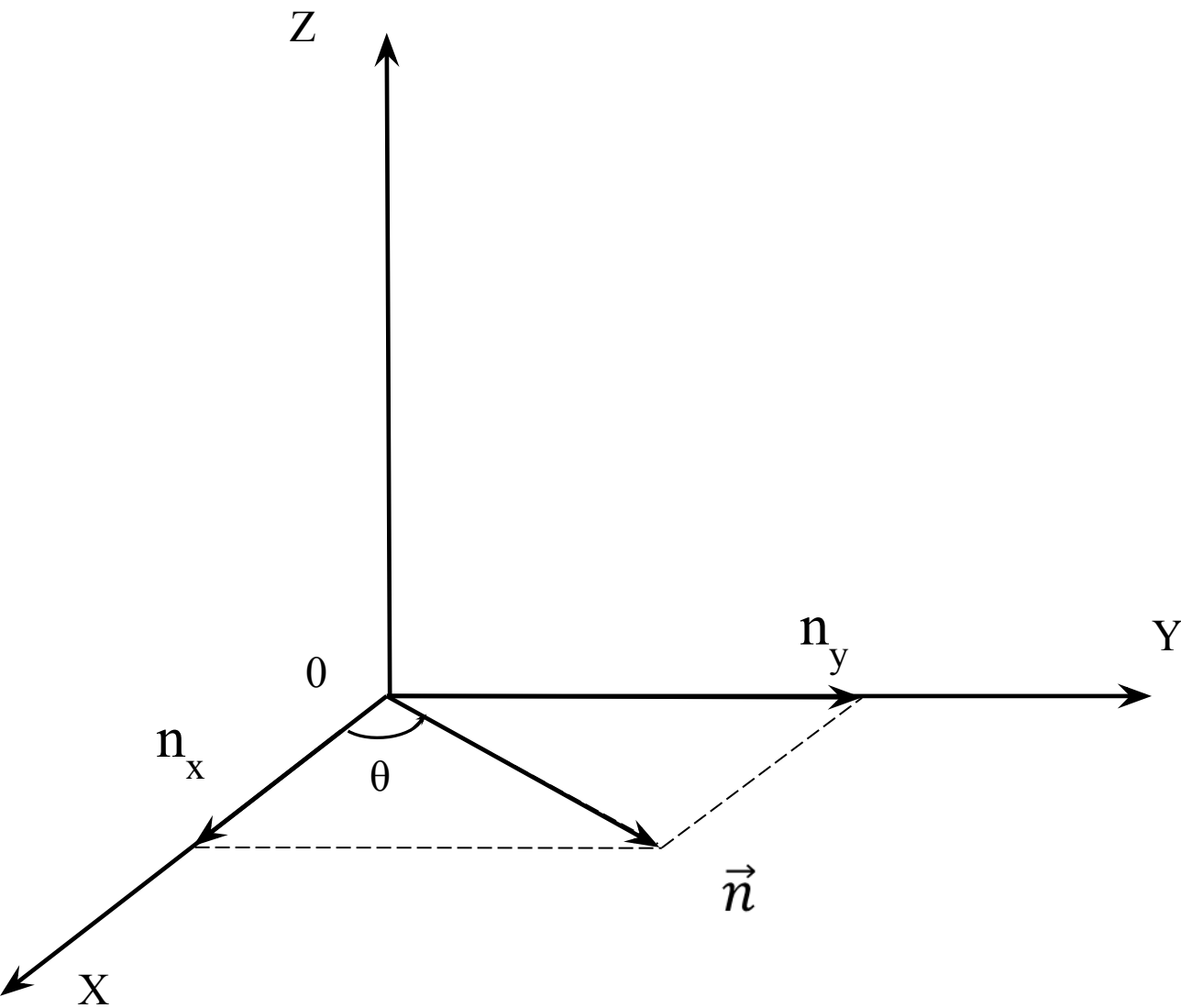
Молекулы неполярны, хиральны (точечная симметрия среды $\infty 2$): $k_1 = k_{12} = 0$, ур-е (4-12) принимает вид:

$$\Phi = \frac{1}{2}k_{11}(\operatorname{div}\vec{n})^2 + \frac{1}{2}k_{22}(\vec{n} \cdot \operatorname{rot}\vec{n} + t_0)^2 + \frac{1}{2}k_{33}(\vec{n} \times \operatorname{rot}\vec{n})^2 \quad (4-17)$$

Условие минимума Φ :

$$\begin{cases} \operatorname{div}\vec{n} = 0 \\ \vec{n} \cdot \operatorname{rot}\vec{n} + t_0 = 0 \\ \vec{n} \times \operatorname{rot}\vec{n} = 0 \end{cases} \quad (4-18)$$

Пусть директор лежит в плоскости XY:



Решение второго уравнения системы (4-18):

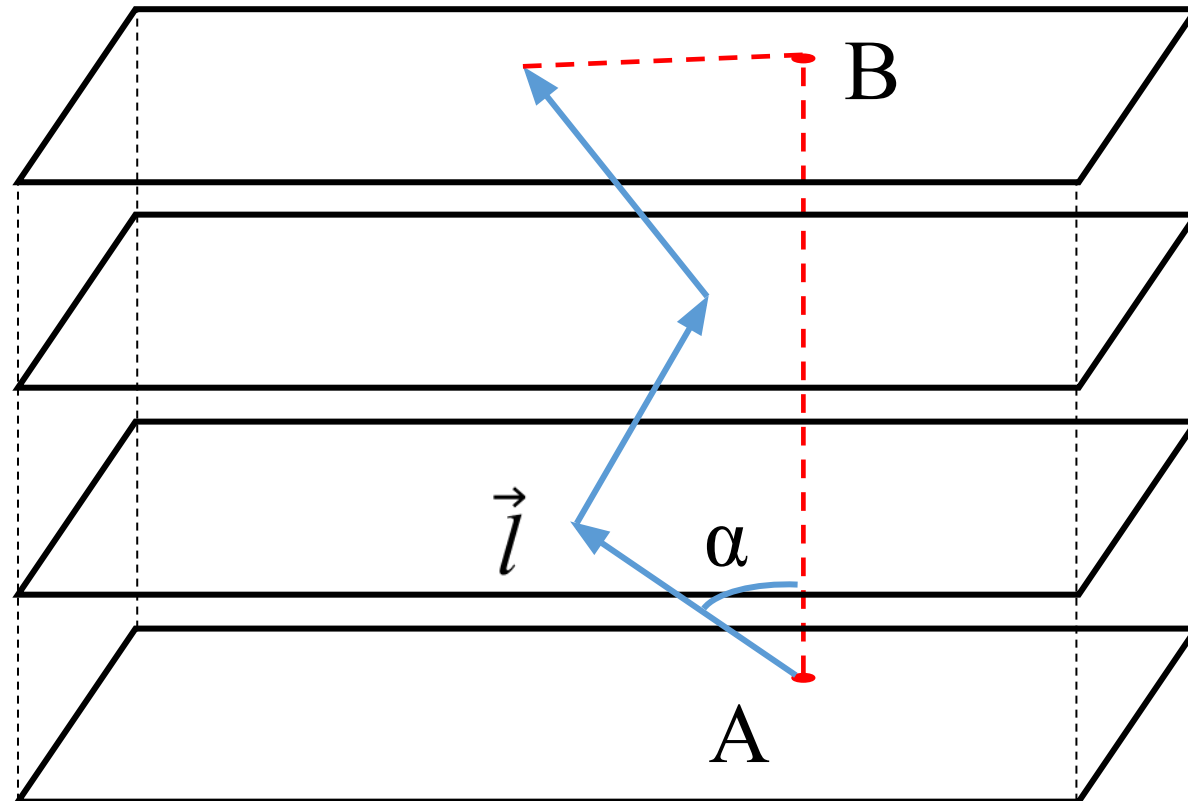
$$\frac{\partial \theta}{\partial z} = t_0 \rightarrow \theta = z t_0 + C \quad (4-19)$$

Уравнение (4-19) описывает спираль с шагом $p_0 = \frac{\pi}{2 t_0}$, следовательно мы имеем *холестерик*

$$\frac{1}{l} \int_B^A \vec{n} \cdot d\vec{l} = N \quad (4-22)$$

l – расстояние между слоями, N – количество пересекаемых слоев.

$$\int_B^A \vec{n} \cdot d\vec{l} = \int_B^A |\vec{n}| \cdot |d\vec{l}| \cdot \cos(\vec{n} \wedge d\vec{l}) = \int_B^A |d\vec{l}| \cdot \cos(\alpha) = AB \quad (4-23)$$

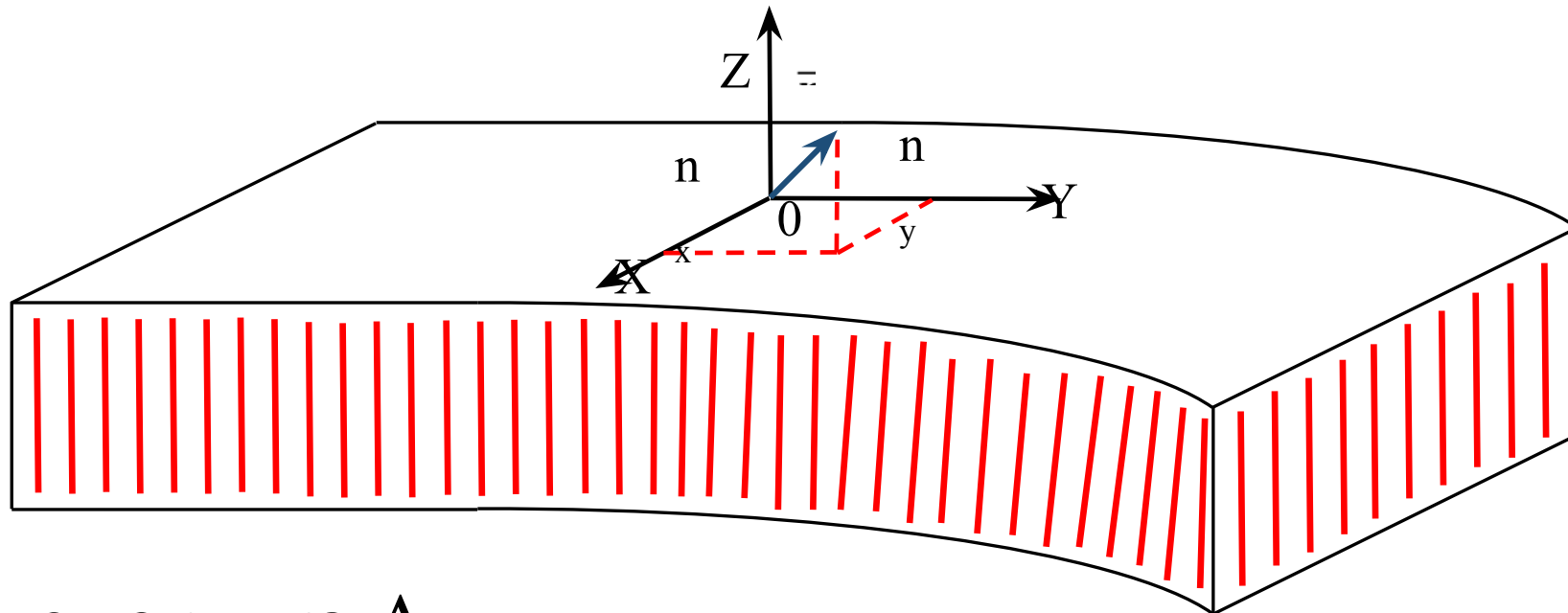


$$\int_B^A \vec{n} \cdot d\vec{l} = \mathbf{N} \cdot \vec{l} = \text{const}$$

Следовательно поле консервативное:

$$\text{rot} \vec{n} = 0$$

$$\Phi = \Phi_0 + \frac{1}{2} k_{11} (\text{div} \vec{n})^2 \quad (4-25)$$



Деформация смектика А