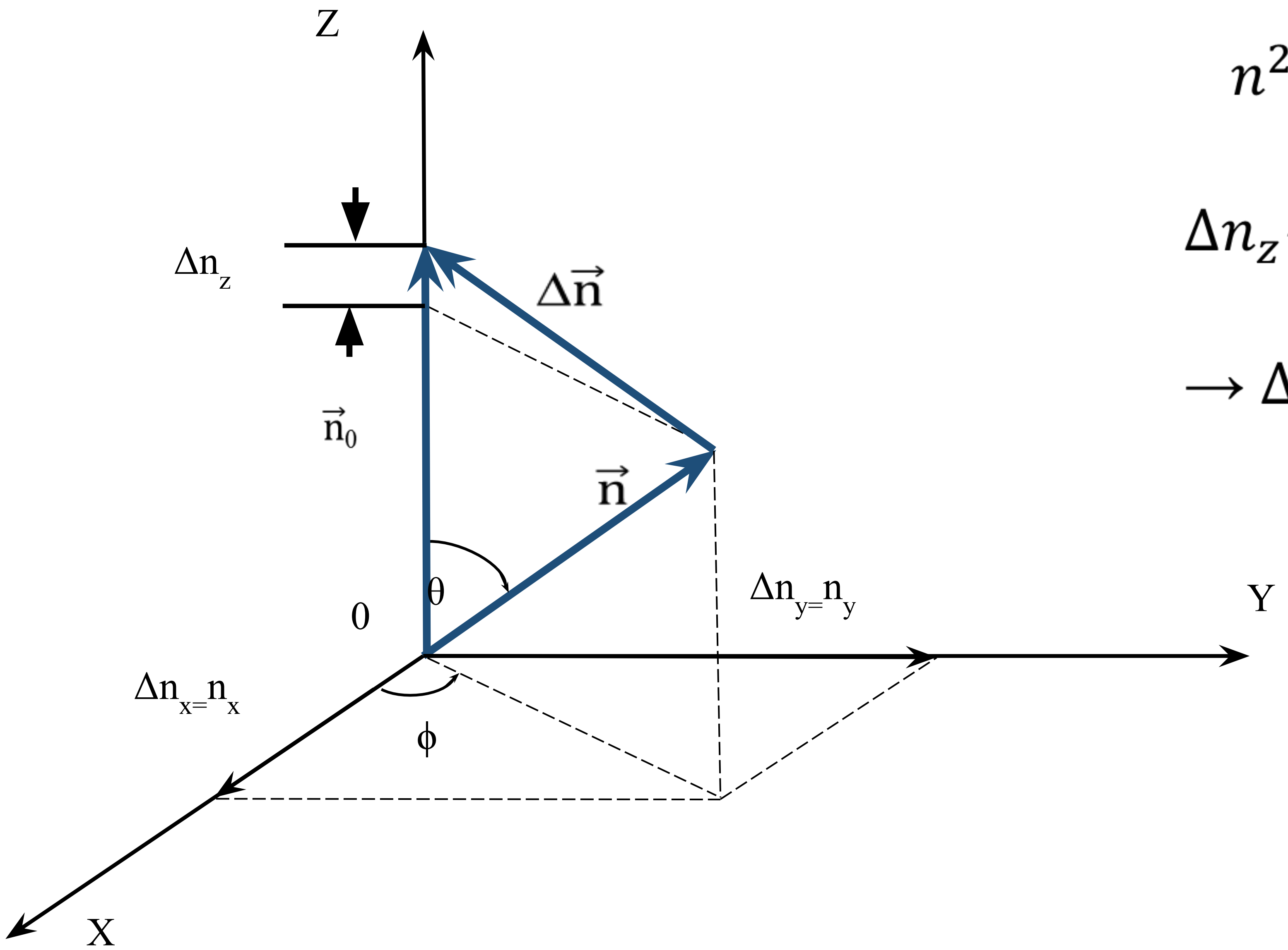
§4 Теория упругости. Основные уравнения.

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

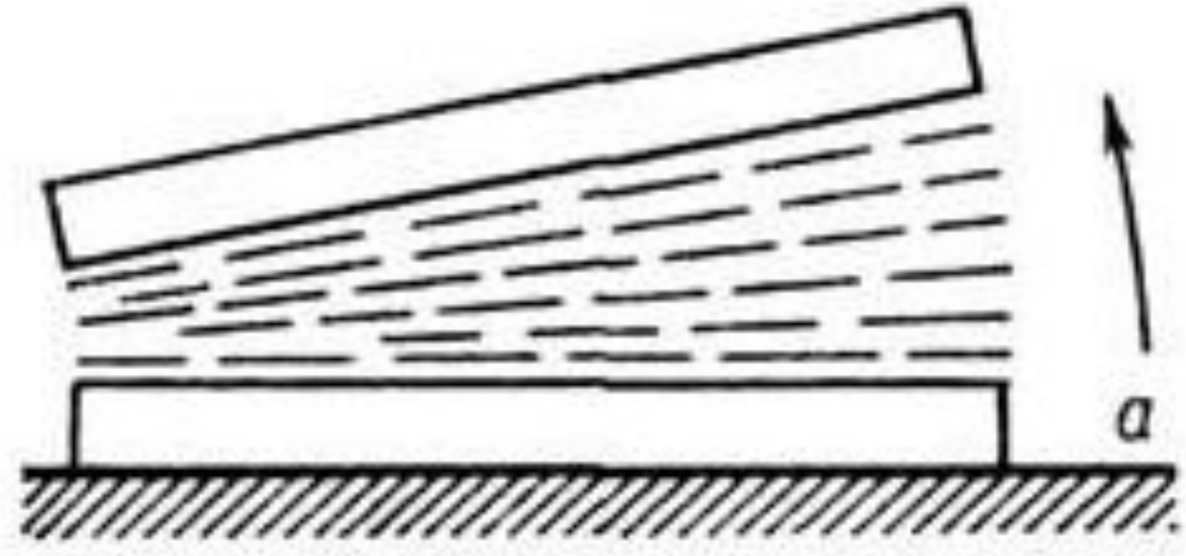
$$\square\square_{\square} = \frac{\square\square\Delta\square\square_{\square}}{\square\square\square\square_{\square}} \quad (4\text{-}1)$$

$$\begin{matrix} \square\square_{1} & \square\square_{2} & \square\square_{3} \\ \square\square\square_{4} & \square\square_{5} & \square\square_{6}\ \square \\ 0 & 0 & 0 \end{matrix} \quad (4\text{-}2)$$

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

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

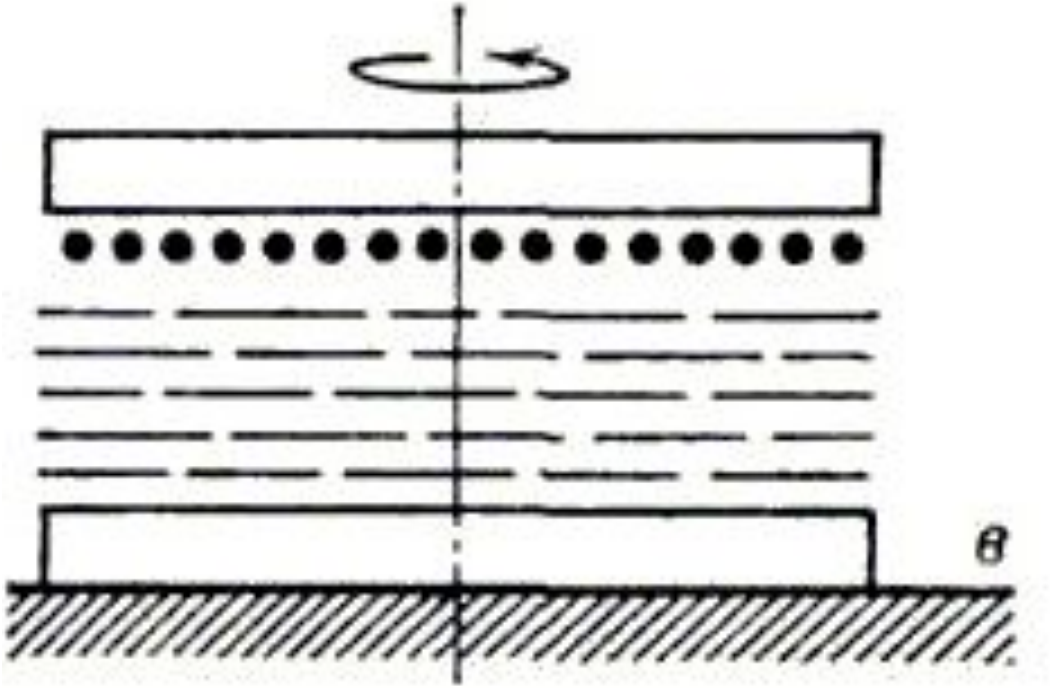
$$\frac{\partial n_y}{\partial y} = a_5$$



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

$$\frac{\partial n_x}{\partial y} = a_2$$

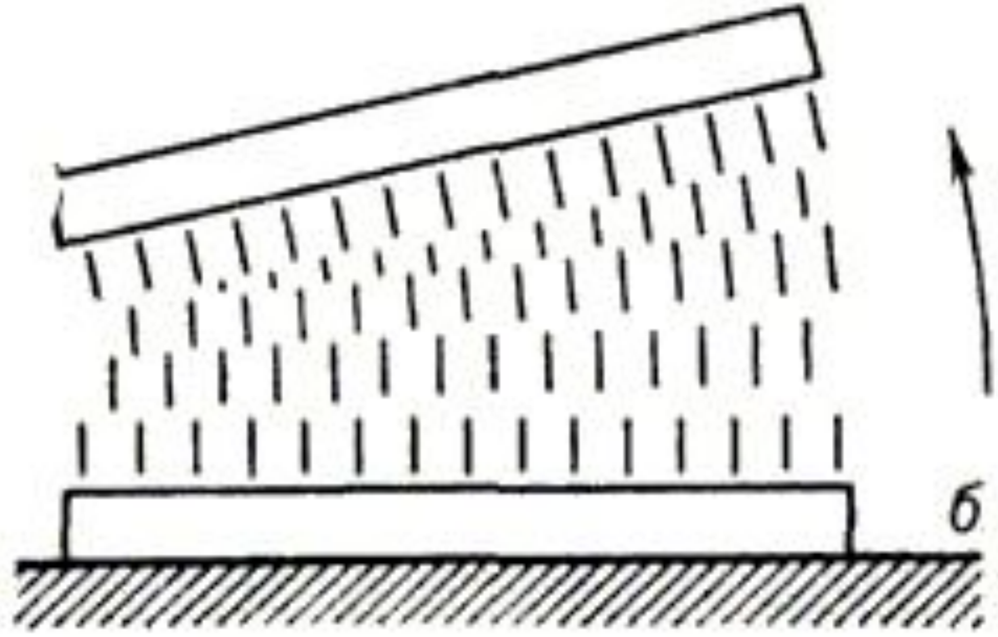
$$-\frac{\partial n_y}{\partial x} = a_4$$



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, B - деформация)

$$F = F_0 + \Delta F \qquad (4\text{-}3)$$

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

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

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

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

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

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

Матрица тензора k_i

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

Матрица тензора k_{ij}

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

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

в) Точечная симметрия среды ∞/mmm,

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

$$\Phi = \Phi_0 + k_1(a_1 + a_5) + k_2(a_2 - a_4) + \frac{1}{2}k_{11}(a_1 + a_5)^2 + \frac{1}{2}k_{22}(a_2 - a_4)^2 + \frac{1}{2}k_{33}(a_3{}^2 + a_6{}^2) + k_{12}(a_1 + a_5)(a_2 - a_4) - (k_{22} + k_{24})(a_1 a_5 - a_2 a_4) \qquad (4\text{-}8)$$

$$\begin{cases} (a_1 + a_5) = \dfrac{\partial n_x}{\partial x} - \dfrac{\partial n_y}{\partial y} = div\vec{n} = \nabla\vec{n} \\ -(a_2 - a_4) = \dfrac{\partial n_y}{\partial x} - \dfrac{\partial n_x}{\partial y} = \vec{n} \cdot rot\vec{n} = \vec{n} \cdot (\nabla \\ (a_3{}^2 + a_6{}^2) = \left(\dfrac{\partial n_x}{\partial z}\right)^2 + \left(\dfrac{\partial n_y}{\partial z}\right)^2 = (\vec{n} \times rot\vec{n})^2 = [\vec{n} \end{cases} \qquad (4\text{-}9)$$

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

Введем для упрощения:

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

Тогда (4-10) перепишется в следующем виде:

$$\Phi=\Phi_0 + \frac{1}{2}k_{11}(div\vec{n} - S_0)^2 + \frac{1}{2}k_{22}(\vec{n} \cdot rot\vec{n} + t_0)^2 + \frac{1}{2}k_{33}(\vec{n} \times rot\vec{n})^2 - k_{12}(\vec{n} \cdot div\vec{n} \cdot rot\vec{n}) + \frac{1}{2}k_{11}{S_0}^2 - \frac{1}{2}k_{22}{t_0}^2 \quad (4\text{-}11)$$

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

$$\Phi=\frac{1}{2}k_{11}(div\vec{n} - S_0)^2 + \frac{1}{2}k_{22}(\vec{n} \cdot rot\vec{n} + t_0)^2 + \frac{1}{2}k_{33}(\vec{n} \times rot\vec{n})^2 - k_{12}(\vec{n} \cdot div\vec{n} \cdot rot\vec{n}) \quad (4\text{-}12)$$

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

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

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

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

Или в координатной записи:

$$\Phi = \frac{1}{2}k\,[\frac{\partial n_x}{\partial x}\frac{\partial n_y}{\partial y} - \frac{\partial n_x}{\partial y}\frac{\partial n_y}{\partial x}] \qquad (4\text{-}15)$$

Упругие постоянные k имеют размерность силы и порядок величины

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

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

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

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

Условие минимума *Φ*:

$$\begin{cases} div\vec{n} = 0 \\ \vec{n}\cdot rot\vec{n} = 0 \\ \vec{n}\times rot\vec{n} = 0 \end{cases}$$

→ *нематическая* мезофаза

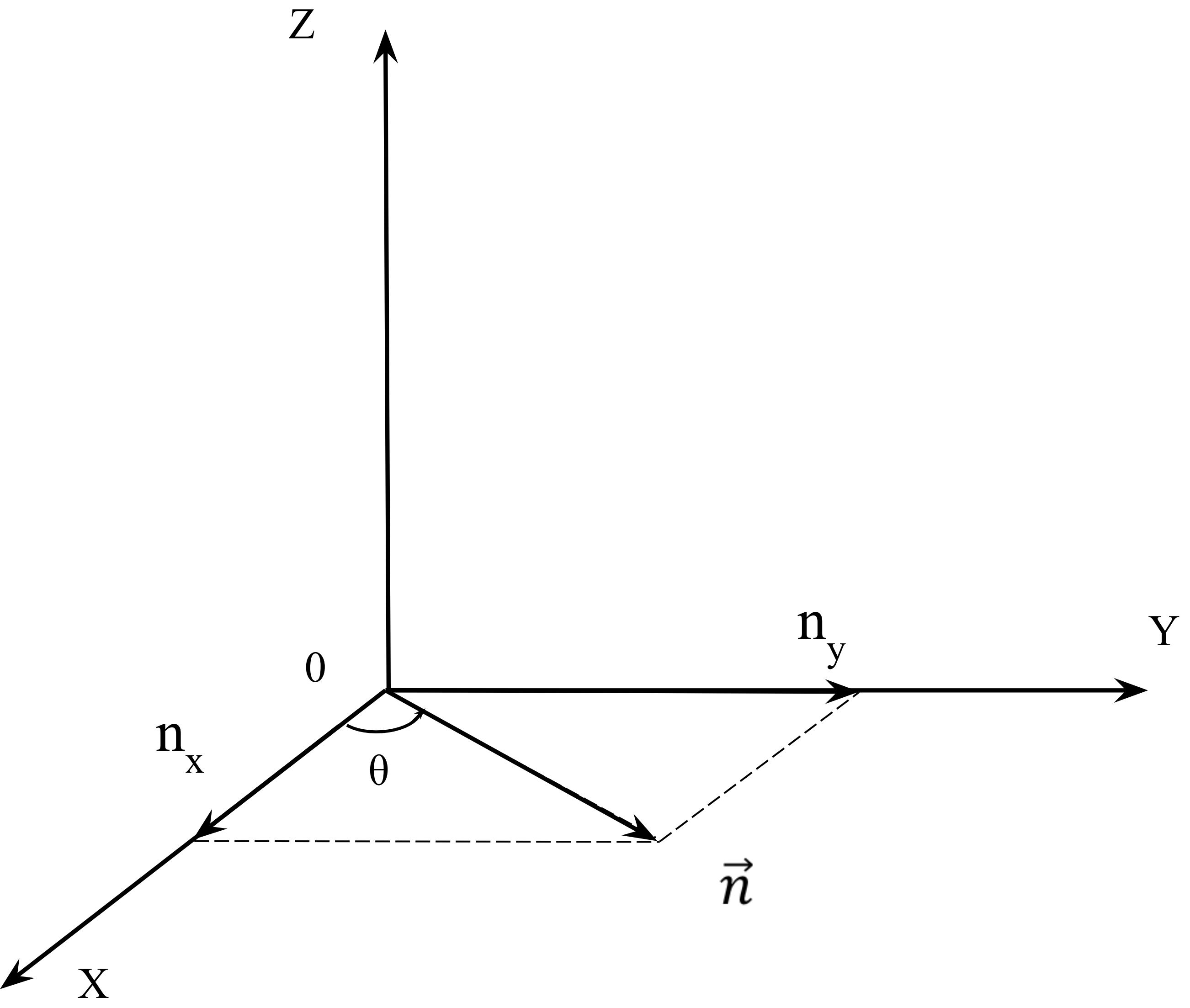
• Молекулы неполярны, хиральны (точечная симметрия среды $\infty 2$): $k_1 = k_{12} = 0$, ур-е (4-12) принимает вид:

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

Условие минимума Φ:

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

Пусть директор лежит в плоскости XY:



Решение второго уравнения системы (4-18):

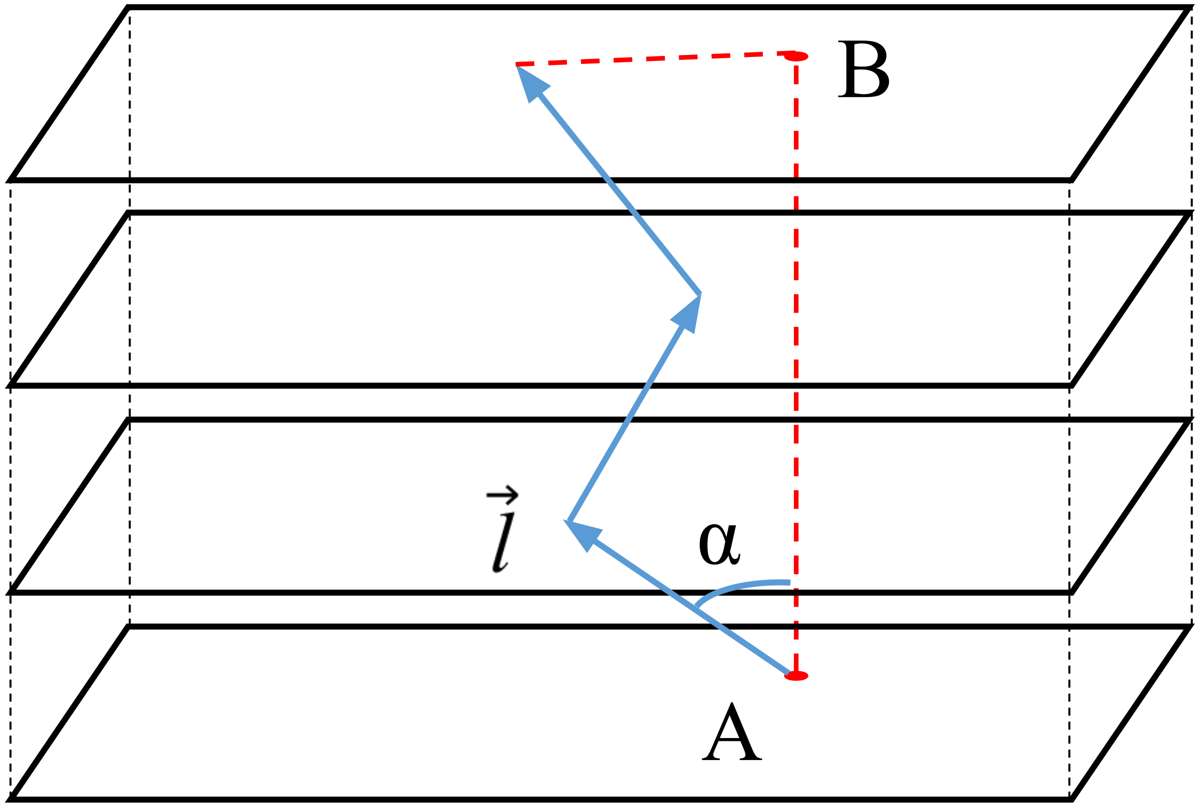
$$\frac{\partial \theta}{\partial z} = t_0 \rightarrow \theta = z t_0 + C \qquad (4\text{-}19)$$

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

$$\frac{1}{l}\int_{\mathrm{B}}^{A}\vec{n}\cdot dl = N \qquad (4\text{-}22)$$

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

$$\int_{\mathrm{B}}^{A}\vec{n}\cdot dl = \int_{\mathrm{B}}^{A}|\vec{n}|\cdot\left|d\vec{l}\right|\cdot cos(\vec{n}\,^\wedge\,d\vec{l}) = \int_{\mathrm{B}}^{A}\left|d\vec{l}\right|\cdot cos(\alpha) = \mathrm{AB} \qquad (4\text{-}23)$$

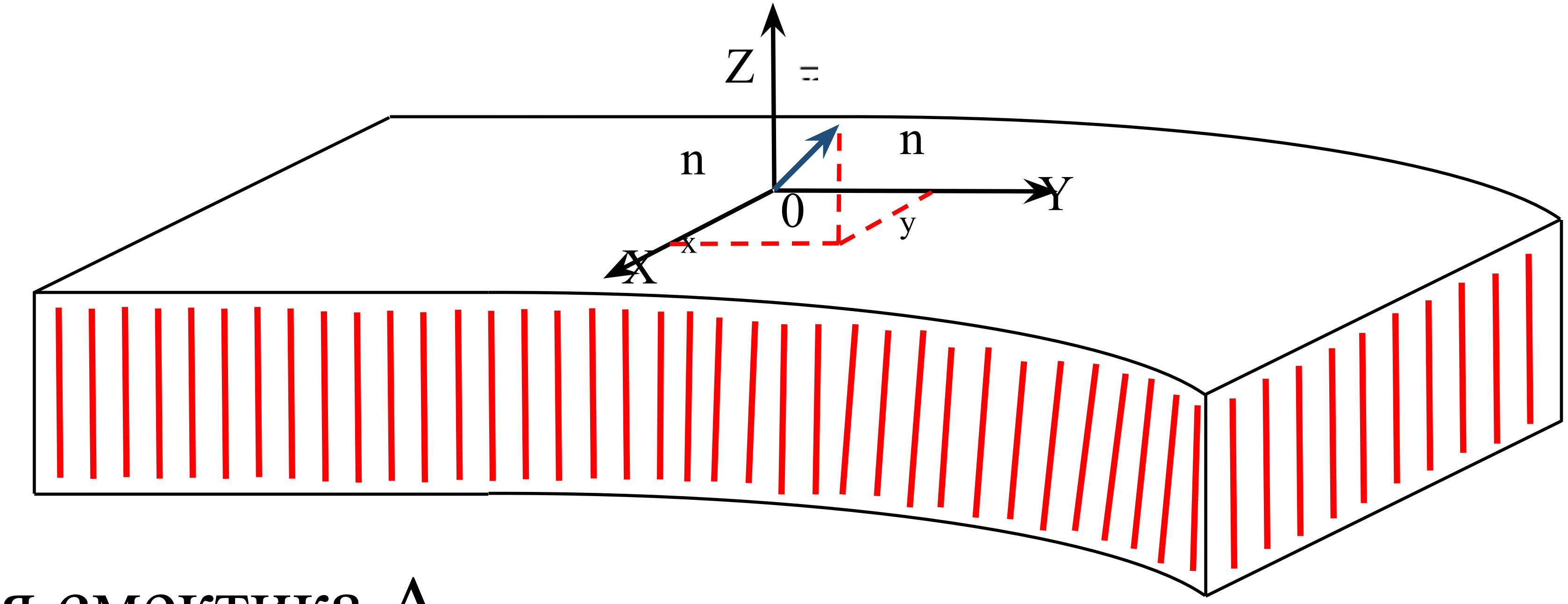


$$\int_{B}^{A} \vec{n} \cdot dl = N \cdot l = const$$

Следовательно поле консервативное:

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

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



Деформация смектика А