Uniaxialer Ansatz und Taylor-Approximationen zum Q-Tensor-Modell (ohne Beweise)

Ingo Nitschke

5. September 2016

Bezeichner usw. siehe *Notizen zum Q-Tensor-Modell* und *Notizen zur Konvergenz der Frank-Oseen-Energie im Dünnschichtmodell gegen die Oberflächenformulierung*. Das Prozedere ist analog zum Vorgehen in *Notizen zur Konvergenz der Frank-Oseen-Energie im Dünnschichtmodell gegen die Oberflächenformulierung*.

Wir verfolgen hier den Ansatz[1] (voll covariant)

$$\widehat{\mathbf{Q}} = \widehat{s}\left(\widehat{\mathbf{p}} \otimes \widehat{\mathbf{p}} - \frac{1}{2}\widehat{\mathbf{g}}\right) \tag{1}$$

mit parallel-erweiterten und rein tangentialen Director, d.h. $\widehat{p}^I{}_{|\xi} = 0$ und $\widehat{p}^\xi = 0$. Dieser Ansatz ist äquivalent zum Ansatz $\widehat{Q}_{IJ|\xi} = 0$ und $\widehat{Q}_{I\xi} = 0$.

Taylor-Approximation liefert (voll covariant)

$$\widehat{\mathbf{Q}} = \mathbf{Q} - \xi\left(\mathbf{BQ} + \mathbf{QB}\right) + \mathcal{O}(\xi^2) \tag{2}$$

mit Oberflächen Q-Tensor $\mathbf{Q}$ und Shape-Operator $\mathbf{B}$. Somit ergeben sich die Spuren der Q-Tensor-Potenzen zu

$$\begin{aligned}
\mathrm{Tr}\widehat{\mathbf{Q}} = \mathrm{Tr}\widehat{\mathbf{Q}}^3 &= 0 && (3)\\
\mathrm{Tr}\widehat{\mathbf{Q}}^2 &= \mathrm{Tr}\mathbf{Q}^2 + \mathcal{O}(\xi) = \|\mathbf{Q}\|^2 + \mathcal{O}(\xi) && (4)\\
\mathrm{Tr}\widehat{\mathbf{Q}}^4 &= \frac{1}{2}\left(\mathrm{Tr}\widehat{\mathbf{Q}}^2\right)^2 = \mathrm{Tr}\mathbf{Q}^4 + \mathcal{O}(\xi) = \frac{1}{2}\|\mathbf{Q}\|^4 + \mathcal{O}(\xi) && (5)
\end{aligned}$$

und die Kontraktionen der Ableitung zu

$$\begin{aligned}
\left\|\nabla\widehat{\mathbf{Q}}\right\|^2 &= \|\nabla\mathbf{Q}\|^2 + 2\|\mathbf{BQ}\|^2 + \mathcal{O}(\xi) && (6)\\
&= 2\left(\|\mathrm{div}\,\mathbf{Q}\|^2 + \mathcal{K}\|\mathbf{Q}\|^2 + \|\mathbf{BQ}\|^2\right) + \mathcal{O}(\xi) && (7)\\
\left\|\mathrm{div}\,\widehat{\mathbf{Q}}\right\|^2 &= \|\mathrm{div}\,\mathbf{Q}\|^2 + \left(\mathrm{Tr}(\mathbf{BQ})\right)^2 + \mathcal{O}(\xi)\,. && (8)
\end{aligned}$$

[1] $\widehat{\mathbf{g}} \equiv \mathbf{I} - \nu\otimes\nu$ im Euklidischen $\mathbb{R}^3$

Folgen wir den Energiedichten in [ELW$^+$12] mit $\psi = 1$, dann ergibt sich (103) zu

$$
\begin{aligned}
f_{\mathrm{id}} &= \frac{17}{3} + \frac{4}{15}\mathrm{Tr}\widehat{\mathbf{Q}}^2 + \frac{8}{315}\mathrm{Tr}\widehat{\mathbf{Q}}^4 && (9)\\
&= \frac{17}{3} + \frac{4}{15}\mathrm{Tr}\mathbf{Q}^2 + \frac{8}{315}\mathrm{Tr}\mathbf{Q}^4 + \mathcal{O}(\xi) && (10)\\
&= \frac{17}{3} + \frac{4}{15}\left(\|\mathbf{Q}\|^2 + \frac{1}{21}\|\mathbf{Q}\|^4\right) + \mathcal{O}(\xi) && (11)
\end{aligned}
$$

und (105) zu ($\tilde{K}_2$ partiell integriert)

$$
\begin{aligned}
f^{(2)}_{\mathrm{exc}} &= A_1 + B_1\mathrm{Tr}\widehat{\mathbf{Q}}^2 + \tilde{K}_1\left\|\operatorname{div}\widehat{\mathbf{Q}}\right\|^2 - \tilde{K}_2\left\|\nabla\widehat{\mathbf{Q}}\right\|^2 && (12)\\
&= A_1 + B_1\|\mathbf{Q}\|^2 + \left(\tilde{K}_1 - 2\tilde{K}_2\right)\|\operatorname{div}\mathbf{Q}\|^2 + \tilde{K}_1\left(\mathrm{Tr}(\mathbf{B}\mathbf{Q})\right)^2 - 2\tilde{K}_2\left(\mathcal{K}\|\mathbf{Q}\|^2 + \|\mathbf{B}\mathbf{Q}\|^2\right) + \mathcal{O}(\xi) && (13)
\end{aligned}
$$

Folgen wir der Energiedichte in [MN12] (1.9), dann erhalten wir

$$
\begin{aligned}
f &= \frac{L}{2}\left\|\nabla\widehat{\mathbf{Q}}\right\|^2 - \frac{a}{2}\mathrm{Tr}\widehat{\mathbf{Q}}^2 - \frac{b}{3}\mathrm{Tr}\widehat{\mathbf{Q}}^3 + \frac{c}{2}\mathrm{Tr}\widehat{\mathbf{Q}}^4 && (14)\\
&= L\left(\|\operatorname{div}\mathbf{Q}\|^2 + \mathcal{K}\|\mathbf{Q}\|^2 + \|\mathbf{B}\mathbf{Q}\|^2\right) - \frac{a}{2}\|\mathbf{Q}\|^2 + \frac{c}{4}\|\mathbf{Q}\|^4 + \mathcal{O}(\xi) && (15)
\end{aligned}
$$

Literatur

[ELW$^+$12] H. Emmerich, H. Löwen, R. Wittkowski, T. Gruhn, G. I. Tóth, G. Tegze, and L. Gránásy. Phase-field-crystal models for condensed matter dynamics on atomic length and diffusive time scales: an overview. *Advances in Physics*, 61:665–743, January 2012.

[MN12] Domenico Mucci and Lorenzo Nicolodi. On the elastic energy density of constrained q-tensor models for biaxial nematics. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 206(3):853–884, 2012.