При рассмотрении взаимодействия между однородно ориентированными объемами ЖК, принято использовать приближение малости углового отклонения: считается, что изменение директора мало и энергию взаимодействия можно описать в линейном приближении. Используются только члены вида dn/dr вокруг точки dn=0. Т.е. удельный момент силы раскладывается в ряд МакЛорена по изменению координат директора.

M=ΣK∙( n1-n2)s

Разложение в ряд Фурье даёт принципиально новый подход к расчётам ориентации молекул жидкого кристалла.

M=ΣKsin(s( n1-n2)) ΣKcos(s( n1-n2))

Подобное представление (зависимость момента силы от угла между директорами и постоянным положением в пространстве центров единичных объёмов) следует назвать торсионным.

Теперь наличие областей с резкой сменой директора перестаёт являться разрывом функции n(r). Особенности функции (|n|=1) позволяют легко перейти от аппарата тригонометрических функций к алгебраическому:

sin(n1n2)=| n1 x n2|=|[ y1∙z2-z1∙y2 , z1∙x2-x1∙z2 , x1∙y2-y1∙x2]| (1)

cos(n1n2)= n1 ∙ n2 = x1∙ x2+ y1∙y2+ z1∙ z2  (2)

Ориентацию считаем итерационно: т.е. задаем малый момент времени, при котором моменты сил не изменяются. В качестве другого приближения считаем, что коэффициент вязкости одинаков при любом взаиморасположении директоров. Т.к. нас интересует конечная статическая картина векторного поля директора, подобное приближение вполне оправдано (нас не интересуют динамические картины переориентации).

Основная сложность по сравнению с традиционным обсчётом – невозможность линейного масштабирования коэффициентов упругости. При изменении размеров единичного объёма необходимо изменить все коэффициенты при тригонометрических функциях.

Введение в расчетный аппарат радиус-вектора (вектор соединяющий центры взаимодействующих единичных объёмов) усложняет вид ряда, добавлением новых членов.

Рассмотрим простейший случай взаимодействия двух малых объёмов ЖК, имеющих общую границу. Будем считать, что в них молекулы имеют преимущественную ориентацию описываемую директором **n**. Момент сил, действующий на молекулы, зависит от взаимного расположения объёмов и ориентации директоров.

Постулируем:

1. **n1** - ориентация директора в объеме V1, на который приложен момент сил **M**; **n2** - ориентация директора в соседнем объеме V2; **R** - вектор направленный от центра объема V1 к центру объема V2

2. Возникающий момент сил считаем параллельным [**n1×n2]**.

**

R - радиус-вектор между центральным и соседним объемами

α - угол между направлением директора в центральной ячейке и радиус-вектором.

β - угол между направлением директора в соседней ячейке и радиус-вектором

φ - угол между директорами центрального и соседнего объемов.

R2- пример, когда радиус-вектор параллелен директору.

R1- пример, когда радиус-вектор перпендикулярен директору.

, an,bn - функции от α, β и |R|.

Делаем упрощения, благодаря наблюдаемым физическим свойствам:

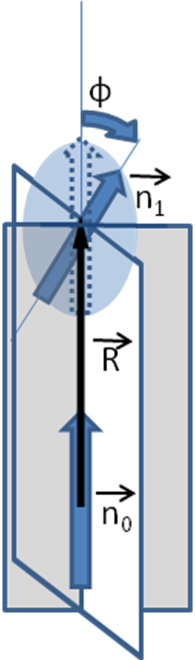
1. Для симметричных структур M(φ)=-M(-φ). Если соседний объем повернуть на угол противоположный нынешнему, то вектор момента сил изменит направление на противоположное, не изменив длины.

Четная часть функции подразумевает, что знак вектора не меняется при смене знака . Т.о. a0=a1=a2=0.

2. Для нематика M(n1,n2)= M(-n1,n2)= M(n1,-n2)= M(-n1,-n2). Смена направления директора не приводит к смене момента сил.(↑↓),( ↓↑),(↑↑),(↓↓) - равнозначные ориентации.

b1=0

Простейший случай для нематика:



Согласуем их с известными коэффициентами упругости. Для этого разложим K в ряд Фурье по и , сделав следующие допущения:

1. Знак K не меняется.

2.

с учётом основного тригонометрического тождества можно переписать:

Рассмотрим случай "полярного" расположения объёма V2, влияющего на момент **M**.

Из классических коэффициентов (при )

Второй случай - поворот вдоль радиус- вектора перпендикулярного директору **n1**.

n0

n1

φ

R

Из классических коэффициентов (при )

Третий случай - поворот в плоскости (n0R)

n0

R

n1

φ

Разложение в ряд Фурье на интервале (без модуля):

При (ограничиваясь первым членом ряда)

Из выражений получаем:

Здесь следует понимать, что потеря масштабируемого коэффициента произошла из-за использования достаточно грубых приближений. Поэтому использовать коэффициентов Франка в тригонометрических расчетах можно только для оценочных исследований. Нахождение множителей ряда Фурье мне представляется задачей как расчетной (исходя из первооснов - атом-атомное взаимодействие), так и экспериментальной.



