

# Beschreibung nematischer Flüssigkristalle mit Hilfe der Oseen-Frank- und Landau-de-Gennes-Theorie

**Diplomarbeit**  
im Fach Mathematik

an der Universität Duisburg-Essen  
Campus Essen  
Fakultät für Mathematik

vorgelegt von  
Thomas Stenzel

Betreuer: Prof. Dr. Patrizio Neff  
Lehrstuhl für Nichtlineare Analysis und Modellierung

Essen, im September 2013

### Zusammenfassung

Flüssigkristalle haben einen molekularen Aufbau zwischen dem festen und dem flüssigen Aggregatzustand. Neben der Positionsordnung, die in der nematischen Phase der einer Flüssigkeit gleicht, spielt die Ordnung der Orientierungen eine bedeutende Rolle. Diese Orientierung kann mathematisch mit Hilfe der Matrix

$$\int_{\mathbb{S}^2} p \otimes p \, d\mu(p)$$

beschrieben werden. Einen Spezialfall stellt der isotrope Fall dar, für den gilt:

$$M_0 = \frac{1}{3} \mathbf{Id} \quad .$$

Die Abweichung vom isotropen Fall wird durch die de-Gennes-Matrix

$$Q = M - M_0$$

beschrieben. Da  $Q$  symmetrisch ist, gibt es eine Basis des  $\mathbb{R}^3$ , bestehend aus Eigenwerten von  $Q$ . Hieraus ergibt sich die Form

$$Q = \lambda_1(n^{(1)} \otimes n^{(1)}) + \lambda_2(n^{(2)} \otimes n^{(2)}) + \lambda_3(n^{(3)} \otimes n^{(3)}) \quad .$$

Da  $Q$  außerdem spurfrei ist, ergibt sich im uniaxialen Fall, d. h. wenn zwei Eigenwerte gleich sind

$$Q = s(\text{dev}(n \otimes n)) \quad .$$

Hierbei bestimmt  $s \in [-\frac{1}{2}; 1]$  den Zustand des Flüssigkristalls. Für  $s = 1$  sind alle Moleküle parallel zueinander angeordnet, für  $s = -\frac{1}{2}$  senkrecht zu einer bestimmten Achse und  $s = 0$  gibt den isotropen Fall an.

Die freie Energie im Flüssigkristall ist invariant unter Translation, Rotation und Parität, eine Funktion  $\psi$ , die die Energiedichte beschreibt, muss also isotrop sein, d. h. es muss gelten:

$$\psi(Q; D) = \psi(Q^*; D^*) \quad .$$

Hierbei ist

$$Q^* = RQR^T \quad \text{und} \quad (D^*)_{ijk} = \sum_{l,m,p} R_{il}R_{jm}R_{kp}D_{lmp}$$

für ein  $R \in O(3)$ . Beispiele für isotrope Funktionen sind die Funktionen

$$\begin{aligned} I_1 &= \|D\|^2 \\ I_2 &= \|\text{div}(Q)\|^2 \\ I_3 &= \sum_{i,j,k} D_{ijk}D_{ikj} \\ I_4 &= \sum_{i,j,k,l} D_{ijk}D_{ijl}Q_{kl} \quad . \end{aligned}$$

Nach de Gennes lässt sich der elastische Teil der Energiedichte als Kombination ebendieser Funktionen beschreiben:

$$\psi_E(Q; D) = \sum_{j=1}^4 L_j I_j \quad .$$

Außerdem sind Funktionen genau dann isotrop, wenn sie sich als Funktionen der Hauptinvarianten von  $Q$  schreiben lassen. Diese sind:

$$\text{tr}(Q) \quad ; \quad \text{tr}(\text{cof}(Q)) \quad ; \quad \det(Q) \quad .$$

In unserem Fall lassen sich die Hauptinvarianten durch die Spuren der Potenzen von  $Q$  ersetzen, die leicht zu berechnen sind, da gilt:

$$\text{tr}(Q^n) = \sum_{k=1}^3 \lambda_k^n \quad .$$

Ein Beispiel hierfür ist die folgende Funktion, die die Temperaturabhängigkeit des Hauptteils der Energie beschreibt:

$$\psi_H(Q; \vartheta) = a(\vartheta) \cdot \text{tr}(Q^2) + b \cdot \text{tr}(Q^3) + \frac{c}{2} (\text{tr}(Q^2))^2 \quad .$$

Es zeigt sich, dass diese Funktion ihr Minimum im uniaxialen oder isotropen Fall annimmt.

Es lassen sich leicht Bedingungen bestimmen, dafür dass

$$\infty > \int_{\Omega} \psi_E(Q; D) \, dx \geq c \int_{\Omega} \|Q\|^2 \, dx \quad .$$

Es zeigt sich außerdem ein direkter Zusammenhang zwischen der Energie nach de Gennes und der Frank'schen Formel:

$$\psi_E(Q; D) = \sum_{j=1}^4 L_j I_j = k_1 J_1 + k_2 J_2 + k_3 J_3 + (k_2 + k_4) J_4 = W(n; \nabla n)$$

mit

$$\begin{aligned} J_1 &:= (\text{div}(n))^2 \\ J_2 &:= \langle n; \text{curl}(n) \rangle \\ J_3 &:= \|n \times \text{curl}(n)\|^2 \\ J_4 &:= \text{tr}((\nabla n)^2) - (\text{div}(n))^2 \quad . \end{aligned}$$

Die  $k_i$  lassen sich in Abhängigkeit von den  $L_j$  schreiben. Die Frank'sche Formel ist genau dann positiv definit, wenn die Ericksen'schen Ungleichungen erfüllt sind:

$$\begin{aligned} 2k_1 &\geq k_2 + k_4 \\ k_2 &\geq |k_4| \\ k_3 &\geq 0 \quad . \end{aligned}$$

Beispiele hierfür sind

$$W(n; \nabla n) = \|\operatorname{dev}(\operatorname{sym}(\nabla n))\|^2$$

und

$$k_1 \|\nabla n\|^2 \quad .$$

Es zeigt sich außerdem, dass  $J_4 = I_3 - I_2$  ein Null-Lagrangian ist. Der Übergang von  $Q$  nach  $n$  ist nicht immer eindeutig möglich. Es gibt in jedem Punkt genau zwei verschiedene  $n$ , so dass

$$Q(n) = s\operatorname{dev}(n \otimes n) \quad .$$

Wir werden nach und nach zeigen, dass  $Q$  entlang von Wegen, Homotopien und schließlich auf einfach zusammenhängenden Gebieten orientierbar ist.

Im letzten Kapitel werden diese Ergebnisse mit topologischen Hilfsmitteln auf Überlagerungen verallgemeinert.

# Inhaltsverzeichnis

1	Was sind Flüssigkristalle?	6
2	Orientierung	9
3	Die de-Gennes-Ordnungsparameter-Matrix	16
4	Freie Energie	23
5	Orientierbarkeit	61
6	Topologie	75

# 1 Was sind Flüssigkristalle?

Jeder kennt die drei klassischen Aggregatzustände gasförmig, flüssig und fest. Was aber hat man sich unter einem Flüssigkristall vorzustellen? Sind Kristalle nicht Festkörper? Wie also kann ein Kristall flüssig sein? Flüssigkristalle (früher auch kristalline Flüssigkeiten genannt) sind Materialien, die sich in einem Zustand zwischen fest und flüssig befinden. Dieser Zustand wird auch als mesomorphe (mésos: Mitte ; morphé: Form) Phase oder kurz Mesophase bezeichnet. Diese Phasen haben sowohl Eigenschaften einer Flüssigkeit (z. B. Viskosität), als auch eines Festkörpers (z. B. optische Eigenschaften). Um den Aufbau von Flüssigkristallen einordnen zu können, betrachten wir zunächst Festkörper und Flüssigkeiten:

In einem Festkörper befinden sich die Schwerpunkte der Moleküle an festen Punkten eines dreidimensionalen Gitters (Abb. 1) (um genau zu sein oszillieren sie um diese Punkte, die das zeitliche Mittel des Aufenthaltsortes markieren). Diese Gitterpunkte werden in der Regel nicht verlassen und haben eine gewisse Periodizität, d. h. Abstände und Reihenfolge der Moleküle wiederholen sich. Außerdem zeigen alle Moleküle etwa in die gleiche Richtung.

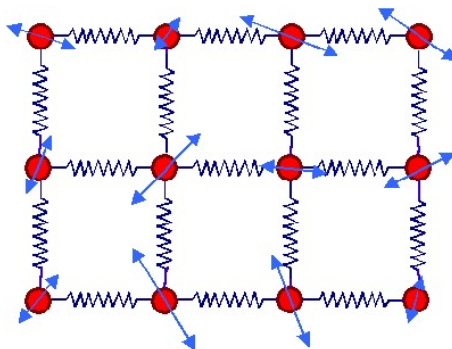


Abbildung 1: Moleküle schwingen in einem Kristallgitter [10] (Die Pfeile geben die Schwingungen der Moleküle an, nicht deren Orientierungen).

In einer Flüssigkeit gibt es kein solches Gitter. Die Moleküle können sich frei bewegen, sind also statistisch verteilt mit der Einschränkung, dass die Molekülabstände im Mittel konstant sind. Sie entsprechen in etwa den Abständen desselben Materials im festen Zustand. Auch die Orientierung der Moleküle ist völlig zufällig. Man spricht deshalb auch von isotropen Flüssigkeiten.

Wie bereits erwähnt, befinden sich Flüssigkristalle in einem Zustand zwischen fest und flüssig. Hierbei unterscheiden wir vier Phasen:

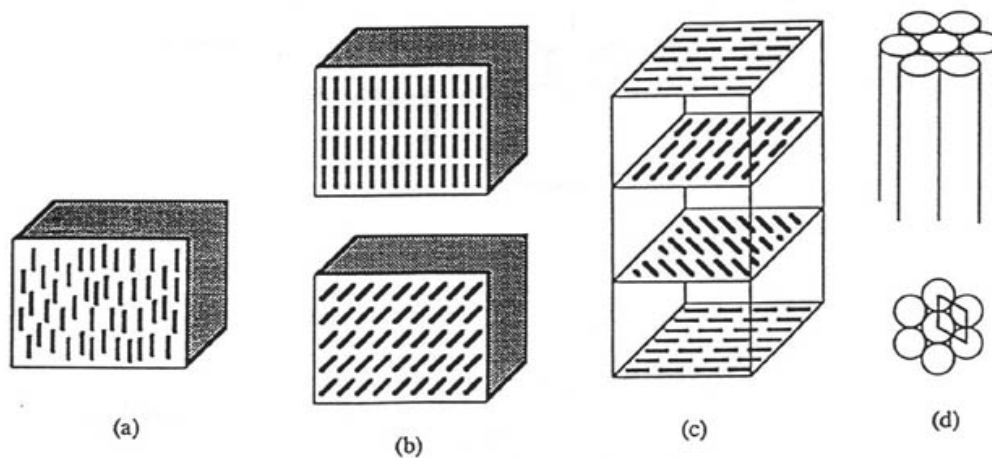


Abbildung 2: Darstellung der molekularen Ordnung von Flüssigkristallen:  
a) nematische Phase, b) smektische Phase, c) cholesterische Phase,  
d) kolumnare Phase [9]

### 1. Nematische Phasen:

Auf diese Phasen werden wir uns in dieser Arbeit konzentrieren. Die Positionsordnung gleicht der des flüssigen Zustandes, wir haben also eine statistische Verteilung bei konstantem mittleren Molekülabstand. Genau wie im Festkörper gibt es aber eine Orientierungsordnung, d. h. auch hier gibt es eine bevorzugte Richtung, in die die Moleküle zeigen (Abb 2a).

### 2. Cholesterische Phasen:

Diese Phasen werden häufig auch als eine Unterart der nematischen Phasen beschrieben. Die Verteilung der Moleküle ist genau so, wie in der nematischen bzw. isotrop-flüssigen Phase. Die Orientierungsordnung lässt sich am besten Schichtweise beschreiben (Abb. 2c): Es gibt eine ausgezeichnete Richtung, zu der sich die Moleküle senkrecht anordnen. Zerlegt man das betrachtete Gebiet in Scheiben so, dass die Normalenvektoren der Scheiben in diese Richtung zeigen, stellt man fest, dass zum einen alle Moleküle einer Schicht in die selbe Richtung zeigen und zum anderen die Orientierungen von Molekülen benachbarter Schichten nur minimal von einander abweichen. Entlang der Normalenvektoren betrachtet, ergibt sich also eine helikale (spiralförmige) Gestalt. Hierdurch ergibt sich auch in dieser Phase eine Periodizität.

3. Smektische Phasen:

Diese Phasen sind in Schichten aufgebaut, innerhalb derer sich die Moleküle frei bewegen können. Man könnte von einer zweidimensionalen Flüssigkeit sprechen. In der dritten Raumrichtung sind sie allerdings an fixe Koordinaten gebunden, die wie in einem Gitter feste Abstände zueinander haben. Daher gibt es auch eine entsprechende Periodizität in diese Richtung. Die Orientierung der Moleküle ist wie in der nematischen Phase angeordnet (Abb. 2b). Hierbei unterscheidet man verschiedene smektische Phasen, je nachdem, wie die Orientierungsrichtung zur Normalen der Schichten steht.

4. Kolumnare Phasen:

Diese Phasen bestehen, wie der Name schon sagt, aus Säulen, innerhalb derer die Moleküle statistisch verteilt sind. Diese Säulen sind in einem zweidimensionalen (meist hexagonalen) Gitter angeordnet, wodurch sich in diesen beiden Dimensionen wieder eine Periodizität ergibt (Abb. 2d).

Ein Kristall kann, abhängig von seiner Temperatur, verschiedene Phasen durchlaufen. Man spricht hierbei von thermotropen Flüssigkristallen. Die typische Reihenfolge ist (bei steigender Temperatur):

- fest
- smektisch oder kolumnar
- nematisch oder cholesterisch
- (isotrop-)flüssig

wobei je nach Aufbau des Kristalls auch einzelne Phasen ausgelassen werden können (die meisten bekannten Stoffe gehen ja direkt vom festen in den flüssigen Zustand über). Ein Übergang von einer cholesterischen zu einer nematischen Phase oder umgekehrt ist bisher noch nicht beobachtet worden.

Bei den sogenannten polymeren (d. h. aus verschiedenen Teilen bestehenden) Flüssigkristallen kann die Phase von den Mischverhältnissen abhängen. Solche Verbindungen werden als lyotrop bezeichnet.



## 2 Orientierung

Wie im vorherigen Kapitel bereits bemerkt, spielt die Orientierung der Moleküle bei Flüssigkristallen eine wichtige Rolle. Wir wollen im Folgenden eine Möglichkeit betrachten, diese mathematisch zu behandeln.

Die Moleküle eines nematischen Flüssigkristalls, auf die wir uns hier beschränken wollen, sind so aus ihren chemischen Bausteinen zusammengesetzt, dass sich eine längliche Stäbchenform ergibt. Außerdem sind die Moleküle symmetrisch. Man kann also ihre beiden Enden physikalisch nicht unterscheiden (genau genommen gibt es bestimmte nematische Flüssigkristalle, deren Moleküle ein magnetisches Dipolmoment haben, also nicht ganz symmetrisch sind, auf dem gesamten Kristall heben sich aber die Dipolmomente der verschiedenen Moleküle gegenseitig auf. Dieses Phänomen ist für unsere Betrachtungen unerheblich).

Zur Untersuchung der Orientierung können wir uns die Moleküle als Geraden im  $\mathbb{R}^3$  vorstellen. Verschiebt man eine solche Geraden in den Ursprung, so ändert sich die Orientierung nicht und man kann diese mit Hilfe der Schnittpunkte der Geraden mit der Einheitskugel

$$\mathbb{S}^2 := \{x \in \mathbb{R}^3 : |x| = 1\}$$

beschreiben. Diese Schnittpunkte sind dann logischerweise zwei einander gegenüber liegende Punkte  $p$  und  $-p$  auf  $\mathbb{S}^2$ . Man kann die Orientierung also mit Hilfe dieses Paares von Einheitsvektoren beschreiben.

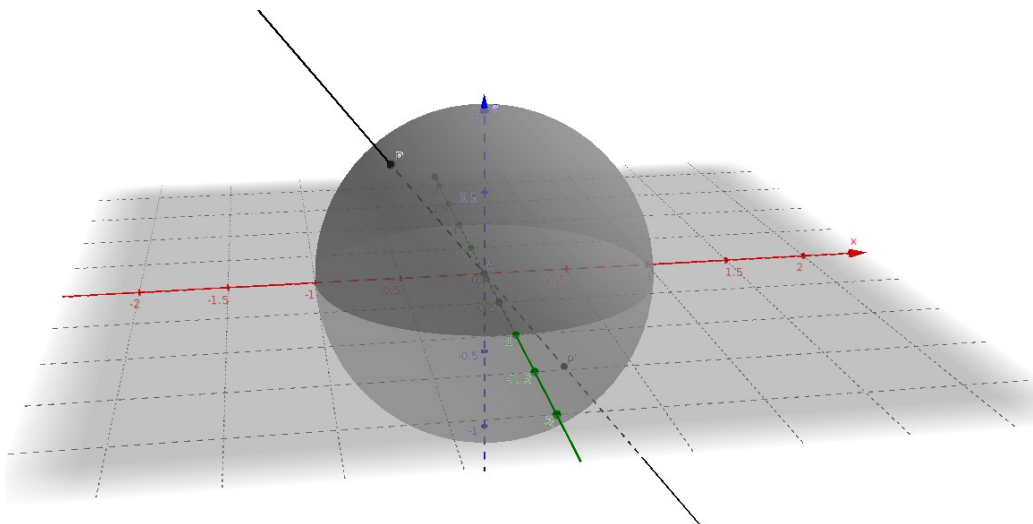


Abbildung 3: Schnitt der Orientierungsgeraden mit der Einheitskugel  $\mathbb{S}^2$

Da sich die beiden Enden der Moleküle physikalisch nicht unterscheiden, gibt es auch keinen Grund, einen dieser Vektoren dem anderen vorzuziehen.

Wir wollen nun die Wahrscheinlichkeiten verschiedener Orientierungen mathematisch ausdrücken. Hierfür benötigen wir zunächst noch einige Hilfsmittel:

**Schreibweise:** (Disjunkte Vereinigung)

$$M \dot{\cup} N \quad :\Leftrightarrow \quad M \cup N \quad \text{mit} \quad M \cap N = \emptyset$$

und entsprechend:

$$\dot{\bigcup}_{i \in I} M_i \quad :\Leftrightarrow \quad \bigcup_{i \in I} M_i \quad \text{mit} \quad M_j \cap M_k = \emptyset \quad \text{für} \quad j \neq k \in I \quad .$$

**Definition.** Sei  $\Omega$  eine beliebige Menge und  $P(\Omega)$  die Potenzmenge (d. h. die Menge aller Teilmengen) von  $\Omega$ .

Ein Maß auf  $\Omega$  ist eine Funktion  $\mu : P(\Omega) \rightarrow \mathbb{R}^+$  mit den Eigenschaften

1.  $\mu(\emptyset) = 0$
2. Für disjunkte Mengen  $A_i$  mit  $i \in I$  ist

$$\mu \left( \dot{\bigcup}_{i \in I} A_i \right) = \sum_{i \in I} \mu(A_i) \quad .$$

Man nennt  $\mu$  ein Wahrscheinlichkeitsmaß, falls zusätzlich gilt:

3.  $\mu(\Omega) = 1$ .

Aus der zweiten Eigenschaft folgt direkt:

$$A \subseteq B \in P(\Omega) \quad \Rightarrow \quad \mu(A) \leq \mu(B) \quad ,$$

was gemeinsam mit der dritten Eigenschaft den Wertebereich wie folgt festlegt:

$$\mu : P(\Omega) \rightarrow [0; 1] \quad .$$

Bezogen auf unser Problem sei nun  $\Omega = \mathbb{S}^2$  die Einheitssphäre und  $E_i$  eine endliche disjunkte Zerlegung selbiger für  $i = 1; \dots; n$ , d. h.

$$\mathbb{S}^2 = \dot{\bigcup}_{i=1; \dots; n} E_i \quad .$$

Dann gibt  $\mu(E_i)$  die Wahrscheinlichkeit an, dass die in einem vorher festgelegten, makroskopisch kleinen Gebiet liegenden Moleküle in diese Richtung orientiert sind, d. h. dass die sie repräsentierende Ursprungsgerade die Einheitssphäre in  $E_i$  schneidet.

Aus dieser Betrachtung wird klar, dass  $\mu$  symmetrisch sein muss, d. h. dass für zwei gegenüberliegende Teilmengen  $A$  und  $-A$  von  $\mathbb{S}^2$  gelten muss:

$$\mu(A) = \mu(-A) \quad . \quad (1)$$

Multipliziert man die Anzahl der Moleküle, die sich in dem betrachteten Gebiet befinden, mit der Wahrscheinlichkeit  $\mu(A)$ , so erhält man einen Erwartungswert für die Anzahl der Moleküle, die in Richtung der Menge  $A$  orientiert sind.

Die Wahrscheinlichkeit, dass ein Molekül in irgendeine Richtung orientiert ist, ist

$$\mu(\mathbb{S}^2) = \sum_{i=1}^n \mu(E_i) = 1$$

und entsprechend ist die Wahrscheinlichkeit, dass die Orientierungsgeraden die Sphäre  $\mathbb{S}^2$  in einer Menge  $A = \dot{\bigcup}_{j \in J} E_j$  für ein  $J \subseteq I$  schneidet

$$\mu(A) = \sum_{j \in J} \mu(E_j) \quad .$$

Geht man nun, wie bei der Konstruktion des Riemann-Integrals, von den  $E_i$  zu Punktmengen über, so ergibt sich

$$\mu(A) = \int_A d\mu(p)$$

für beliebige Mengen  $A \in \mathbb{S}^2$ , wobei  $p \in A$  die bereits erwähnten Einheitsvektoren sind.

**Beispiel:** (Kugelkoordinaten)

Zerlege die Einheitssphäre wie folgt:

$$E_{ij} = (1; [\varphi_{i-1}; \varphi_i]; [\vartheta_{j-1}; \vartheta_j]) \quad ,$$

wobei die Winkel für  $i = 0; \dots; n$  und  $j = 0; \dots; m$  folgendermaßen definiert sind:

$$\varphi_0 := -\pi \quad ; \quad \varphi_i := -\pi + \frac{2\pi i}{n} \quad \text{für } i = 1; \dots; n$$

und

$$\vartheta_0 := 0 \quad ; \quad \varphi_j := \frac{\pi j}{m} \quad \text{für } j = 1; \dots; m \quad .$$

Sei nun  $A$  beispielsweise eine Teilmenge von  $\mathbb{S}^2$  der Form

$$\left(1; [\hat{\varphi}; \tilde{\varphi}]; [\hat{\vartheta}; \tilde{\vartheta}]\right) \quad .$$

Lässt man nun  $m$  und  $n$  gegen  $\infty$  laufen, so erhält man das Integral

$$\mu(A) = \int_{\hat{\vartheta}}^{\tilde{\vartheta}} \int_{\hat{\varphi}}^{\tilde{\varphi}} \mu(\varphi; \vartheta) d\varphi d\vartheta = \int_A d\mu(p) \quad .$$

Diese Darstellung lässt sich auf beliebige Teilmengen von  $\mathbb{S}^2$  ausweiten.

Das Wahrscheinlichkeitsmaß  $\mu(p)$  kann verschiedene Formen annehmen. So ist beispielsweise ein stetige Verteilung denkbar:

$$d\mu := f(p) d\mathbb{S}^2 \quad ,$$

wobei  $f$  eine stetige Funktion ist mit

$$f(p) = f(-p) \quad ; \quad \int_{\mathbb{S}^2} f(p) d\mathbb{S}^2 = 1 \quad ; \quad f(p) \geq 0 \quad \text{für alle } p \in \mathbb{S}^2 \quad .$$

Ein Spezialfall hiervon wäre die gleichmäßige (isotrope) Verteilung:

$$d\mu := \frac{1}{4\pi} d\mathbb{S}^2 \quad .$$

Eine andere Möglichkeit wäre eine singuläre Verteilung:

$$\mu(p) := \frac{1}{2}(\delta_n + \delta_{-n}) \quad ,$$

was der perfekten Ausrichtung an einem Vektor  $n \in \mathbb{S}^2$  entspräche, wie sie in einem idealen nematischen Flüssigkristall vorkommt.

Ein naheliegender Gedanke wäre jetzt, den Erwartungswert (auch: das Moment erster Ordnung) der Orientierung

$$E(p) = \int_{\mathbb{S}^2} p d\mu(p)$$

auszurechnen. Dieser ist aber immer gleich Null, denn für alle  $p \in \mathbb{S}^2$  gilt wegen (1)

$$\mu(p) = \mu(-p)$$

und damit ist

$$E(p) = \frac{1}{2} \left( \int_{\mathbb{S}^2} p \, d\mu(p) + \int_{\mathbb{S}^2} -p \, d\mu(-p) \right) = \frac{1}{2} \int_{\mathbb{S}^2} p - p \, d\mu(p) = 0 \quad .$$

Wir wollen uns also stattdessen das Moment zweiter Ordnung anschauen. Hierzu benötigen wir das dyadische Produkt:

**Definition.** Seien  $a; b \in \mathbb{R}^n$  zwei Vektoren.

Das dyadische Produkt (Tensorprodukt) ist eine  $n \times n$ -Matrix (ein Tensor zweiter Stufe)  $C$  definiert durch

$$C = a \otimes b \quad ; \quad C_{ij} := a_i b_j \quad .$$

**Lemma 2.1.** Seien  $a; b; v \in \mathbb{R}^n$  und  $C = a \otimes b$ .

Dann gilt:

$$Cv = (a \otimes b)v = \langle b; v \rangle a \quad . \quad (2)$$

**Beweis:** Berechne komponentenweise:

$$(Cv)_i = \sum_{j=1}^n C_{ij} v_j = \sum_{j=1}^n a_i b_j v_j = a_i \sum_{j=1}^n b_j v_j = a_i \langle b; v \rangle \quad .$$

Hieraus folgt die Behauptung.

Das Moment zweiter Ordnung  $M$  ist der Erwartungswert der Matrix  $p \otimes p$ :

$$M := E(p \otimes p) = \int_{\mathbb{S}^2} p \otimes p \, d\mu(p)$$

bzw. ausgeschrieben in der Form

$$M = \int_{\mathbb{S}^2} \begin{pmatrix} p_1^2 & p_1 p_2 & p_1 p_3 \\ p_2 p_1 & p_2^2 & p_2 p_3 \\ p_3 p_1 & p_3 p_2 & p_3^2 \end{pmatrix} d\mu(p)$$

bei komponentenweiser Integration.

Wie leicht zu erkennen ist, ist die Matrix unter dem Integral symmetrisch. Das gleiche gilt somit auch für  $M$  (d. h.  $M = M^T$ ). Außerdem gilt  $\text{tr}(M) = 1$ , denn

$$\begin{aligned} \text{tr}(M) &= \left\langle \int_{\mathbb{S}^2} p \otimes p \, d\mu(p); \mathbf{Id} \right\rangle = \int_{\mathbb{S}^2} \langle p \otimes p; \mathbf{Id} \rangle \, d\mu(p) \\ &= \int_{\mathbb{S}^2} p_1^2 + p_2^2 + p_3^2 \, d\mu(p) = \int_{\mathbb{S}^2} \underbrace{|p|^2}_{=1} \, d\mu(p) \\ &= \int_{\mathbb{S}^2} d\mu(p) = 1 \quad . \end{aligned}$$

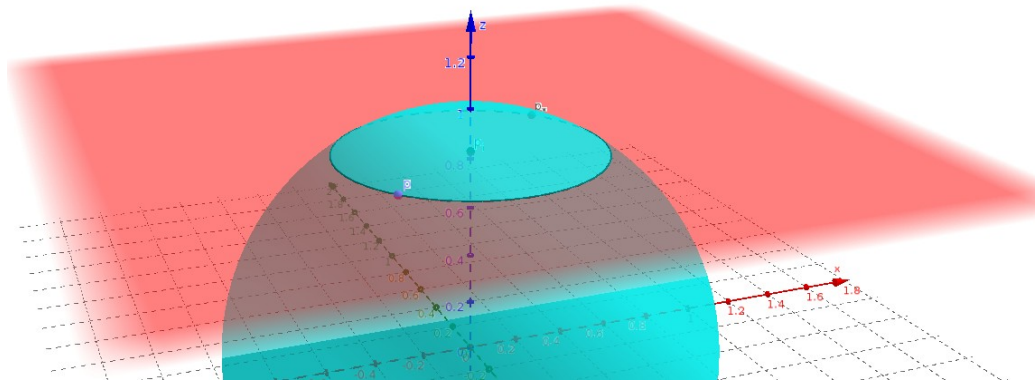


Abbildung 4: Mögliche Orientierungen für ein festes  $p_i$

Zur Veranschaulichung der geometrischen Bedeutung vom  $M$  betrachten wir folgendes Skalarprodukt für einen beliebigen Einheitsvektor  $e$ :

$$\begin{aligned}
 \langle e; Me \rangle &= \left\langle e; \left( \int_{\mathbb{S}^2} p \otimes p \, d\mu(p) \right) e \right\rangle = \int_{\mathbb{S}^2} \langle e; (p \otimes p)e \rangle \, d\mu(p) \\
 &\stackrel{(2)}{=} \int_{\mathbb{S}^2} \langle e; \langle p; e \rangle p \rangle \, d\mu(p) = \int_{\mathbb{S}^2} \langle e; p \rangle^2 \, d\mu(p) \\
 &= \int_{\mathbb{S}^2} \left( \cos(\alpha) \underbrace{|e|}_{=1} \cdot \underbrace{|p|}_{=1} \right)^2 \, d\mu(p) = \int_{\mathbb{S}^2} \cos(\alpha)^2 \, d\mu(p) \\
 &= E(\cos(\alpha)^2) \quad ,
 \end{aligned}$$

wobei  $\alpha$  hier der Winkel zwischen  $e$  und  $p$  ist. Es wird also gewissermaßen die mittlere Abweichung der Orientierung von der Richtung von  $e$  berechnet. Wir betrachten nun die isotrope Verteilung der Orientierungen genauer. Die zugehörige Matrix  $M_0$  sieht wie folgt aus:

$$M_0 = \frac{1}{4\pi} \int_{\mathbb{S}^2} \begin{pmatrix} p_1^2 & p_1 p_2 & p_1 p_3 \\ p_2 p_1 & p_2^2 & p_2 p_3 \\ p_3 p_1 & p_3 p_2 & p_3^2 \end{pmatrix} \, d\mathbb{S}^2$$

**Behauptung:**

$$\int_{\mathbb{S}^2} p_i p_j \, d\mathbb{S}^2 = 0 \quad \text{für alle } i \neq j \quad .$$

Denn hält man  $p_i$  fest (vgl. Abb. 4), so bewegt sich  $p$  auf einem Kreis um die  $i$ -te Koordinatenachse. Zu jedem möglichen Wert von  $p_j$  gibt

es also einen entgegengesetzten Wert  $p_j^*$ . Da wir das Lebesgue-Maß von  $\mathbb{S}^2$  betrachten, sind diese auch gleich gewichtet, d. h. sie löschen sich gegenseitig aus. Da dies für alle  $p_i$  gilt, ist folglich das gesamte Integral gleich null.

Außerdem ist aus Symmetriegründen klar, dass

$$\int_{\mathbb{S}^2} p_1^2 \, d\mathbb{S}^2 = \int_{\mathbb{S}^2} p_2^2 \, d\mathbb{S}^2 = \int_{\mathbb{S}^2} p_3^2 \, d\mathbb{S}^2 \quad .$$

Folglich hat  $M_0$  die Form

$$M_0 = \frac{1}{4\pi} \int_{\mathbb{S}^2} \lambda \mathbf{Id} \, d\mathbb{S}^2 = \frac{\lambda}{4\pi} \mathbf{Id} \quad \text{für ein } \lambda \in \mathbb{R} \quad .$$

Da  $M_0$  Moment zweiter Ordnung ist und somit  $\text{tr}(M_0) = 1$  sein muss, ergibt sich:

$$M_0 = \frac{1}{3} \mathbf{Id} \quad ,$$

also

$$\lambda = \frac{4}{3}\pi \quad .$$

### 3 Die de-Gennes-Ordnungsparameter-Matrix

Wir wollen nun die Abweichung vom isotropen Fall mathematisch ausdrücken. Zuvor führen wir noch eine Schreibweise ein:

**Definition.** Sei  $A \in \mathbb{R}^{m \times m}$ .

Dann nennt man

$$\text{dev}(A) := A - \frac{1}{n} \text{tr}(A) \mathbf{Id}$$

den spurfreien Anteil von  $A$ .

Nun betrachten wir die de-Gennes-Ordnungsparameter-Matrix  $Q$ :

$$\begin{aligned} Q &= M - M_0 = \int_{\mathbb{S}^2} p \otimes p \, d\mu(p) - \frac{1}{3} \mathbf{Id} \\ &= \int_{\mathbb{S}^2} p \otimes p \, d\mu(p) - \int_{\mathbb{S}^2} \frac{1}{3} \mathbf{Id} \, d\mu(p) = \int_{\mathbb{S}^2} \left( p \otimes p - \frac{1}{3} \mathbf{Id} \right) d\mu(p) \\ &= \int_{\mathbb{S}^2} \left( p \otimes p - \frac{1}{3} \underbrace{(p_1^2 + p_2^2 + p_3^2)}_{=1=\text{tr}(p \otimes p)} \mathbf{Id} \right) d\mu(p) = \int_{\mathbb{S}^2} \text{dev}(p \otimes p) \, d\mu(p) \quad . \end{aligned}$$

Diese Matrix ist als Differenz zweier symmetrischer Matrizen ebenfalls symmetrisch. Außerdem gilt

$$\text{tr}(Q) = \text{tr}(M) - \text{tr}(M_0) = 1 - 1 = 0 \quad .$$

Es sei an dieser Stelle bemerkt, dass  $Q = 0$  nicht unbedingt bedeutet, dass der isotrope Fall eintritt.

**Beispiel:** Sei  $\mu(p) = \frac{1}{6} \sum_{i=1}^3 (\delta_{e_i} + \delta_{-e_i})$ .

Dann ist

$$\begin{aligned} M &= \int_{\mathbb{S}^2} p \otimes p \, d\mu(p) = \frac{1}{6} \sum_{i=1}^3 (e_i \otimes e_i + (-e_i \otimes -e_i)) \\ &= \frac{1}{3} \sum_{i=1}^3 e_i \otimes e_i = \frac{1}{3} \mathbf{Id} \end{aligned}$$

und damit  $S = 0$ , obwohl die Moleküle hier nicht isotrop verteilt sind.

Wir erinnern uns zunächst an einige Eigenschaften symmetrischer Matrizen:



**Lemma 3.1.** Sei  $A$  eine reelle  $m \times m$ -Matrix.

$A$  ist genau dann symmetrisch, wenn  $A$  selbstadjungiert ist, d. h.

$$A = A^T \quad \Leftrightarrow \quad \langle Ax; y \rangle = \langle x; Ax \rangle \quad \text{für alle } x; y \in \mathbb{R}^m \quad .$$

**Beweis:** Sei  $A = a_{ij}$  und  $(e_1; \dots; e_m)$  die kanonische Basis von  $\mathbb{R}^m$ .

Dann gelten für alle  $i; j = 1; \dots; n$ :

$$\langle Ae_i; e_j \rangle = \left\langle \underbrace{\sum_{k=1}^m a_{ki} e_k}_{i\text{-ter Spaltenvektor}}; e_j \right\rangle = \sum_{k=1}^m a_{ki} \langle e_k; e_j \rangle = a_{ji}$$

und

$$\langle e_i; Ae_j \rangle = \left\langle e_i; \underbrace{\sum_{k=1}^m a_{kj} e_k}_{j\text{-ter Spaltenvektor}} \right\rangle = \sum_{k=1}^m a_{kj} \langle e_i; e_k \rangle = a_{ij} \quad .$$

Also gilt

$$A = A^T \quad \Leftrightarrow \quad \langle Ae_i; e_j \rangle = \langle e_i; Ae_j \rangle \quad .$$

Bleibt also noch zu zeigen, dass

$$\langle Ae_i; e_j \rangle = \langle e_i; Ae_j \rangle \quad \Leftrightarrow \quad \langle Ax; y \rangle = \langle x; Ax \rangle \quad \text{für alle } x; y \in \mathbb{R}^m \quad .$$

“ $\Leftarrow$ ” ist klar.

“ $\Rightarrow$ ”: Seien  $x = (x_1; \dots; x_m); y = (y_1; \dots; y_m) \in \mathbb{R}^m$  beliebig und gelte  $\langle Ae_i; e_j \rangle = \langle e_i; Ae_j \rangle$ .

Daraus folgt:

$$\begin{aligned} \langle Ax; y \rangle &= \left\langle A \sum_{i=1}^m x_i e_i; \sum_{j=1}^m y_j e_j \right\rangle = \left\langle \sum_{i=1}^m x_i A e_i; \sum_{j=1}^m y_j e_j \right\rangle \\ &= \sum_{i,j=1}^m x_i y_j \langle A e_i; e_j \rangle = \sum_{i,j=1}^m x_i y_j \langle e_i; A e_j \rangle \\ &= \left\langle \sum_{i=1}^m x_i e_i; \sum_{j=1}^m y_j A e_j \right\rangle = \left\langle \sum_{i=1}^m x_i e_i; A \sum_{j=1}^m y_j e_j \right\rangle \\ &= \langle x; A y \rangle \quad . \end{aligned}$$

**Lemma 3.2.** *Sei  $A$  eine reelle symmetrische Matrix.  
Dann zerfällt das charakteristische Polynom von  $A$  über  $\mathbb{R}$  in Linearfaktoren.*

**Beweis:**

Der Fundamentalsatz der Algebra besagt, dass über  $\mathbb{C}$  jedes Polynom in Linearfaktoren zerfällt. Daher genügt es zu zeigen, dass alle Nullstellen des charakteristischen Polynoms von  $A$  reell sind.

Sei nun also  $\lambda$  eine beliebige Nullstelle.

Da dies genau die Eigenwerte von  $A$  sind, gibt es einen Eigenvektor  $v \in \mathbb{C}^m$  zu  $\lambda$ , d. h. es gilt  $Av = \lambda v$ . Zerlege  $v$  in Real- und Imaginärteil:

$$v = u + iw \quad u; w \in \mathbb{R}^m$$

Da  $A$  reell ist, d. h. alle Komponenten von  $A$  reell sind, gilt

$$Av = Au + iAw \quad .$$

In der folgenden Gleichung wird das Standard-Skalarprodukt über  $\mathbb{C}^m$  verwendet:

$$\begin{aligned} \lambda \langle v; v \rangle &= \langle \lambda v; v \rangle = \langle Av; v \rangle = \langle Au + iAw; u + iw \rangle \\ &= \langle Au; u \rangle - i \langle Au; w \rangle + i \langle Aw; u \rangle + \langle Aw; w \rangle \\ &\stackrel{A \text{ symmetrisch}}{=} \langle u; Au \rangle - i \langle u; Aw \rangle + i \langle w; Au \rangle + \langle w; Aw \rangle \\ &= \langle u + iw; Au + iAw \rangle = \langle v; Av \rangle = \langle v; \lambda v \rangle \\ &= \bar{\lambda} \langle v; v \rangle \end{aligned}$$

Da  $\langle v; v \rangle \neq 0$  ist, folgt  $\lambda = \bar{\lambda}$ , also ist  $\lambda$  reell.

**Lemma 3.3.** *Sei  $A$  eine symmetrische  $m \times m$ -Matrix und  $U$  ein  $A$ -invarianter Unterraum des  $\mathbb{R}^m$ , d. h.  $Au \in U$  für alle  $u \in U$ .*

*Dann ist auch das orthogonale Komplement  $U^\perp$  von  $U$   $A$ -invariant, also  $Aw \in U^\perp$  für alle  $w \in U^\perp$ .*

**Beweis:** Sei  $w \in U^\perp$ .

Dann gilt für alle  $u \in U$ :

$$\langle u; Aw \rangle = \langle \underbrace{Au}_{\in U}; w \rangle = 0 \quad .$$

**Satz 3.4.** *Sei  $A$  eine reelle symmetrische  $m \times m$ -Matrix.*

*Dann gibt es eine Orthonormalbasis des  $\mathbb{R}^m$  bestehend aus Eigenvektoren von  $A$ .*

**Beweis:** Wegen Lemma 3.2 gibt es einen Eigenwert  $\lambda_1$  zu  $A$ .

Sei nun  $n_1$  ein zugehöriger, normierter Eigenvektor.

Dann ist auch jedes Vielfache von  $n_1$  Eigenvektor zu  $\lambda_1$ . Also ist  $\text{span}(n_1)$  invariant unter  $A$ . Nach Lemma 3.3 ist auch das orthogonale Komplement  $\text{span}(n_1)^\perp$   $A$ -invariant. Also gibt es wegen Lemma 3.2 einen Eigenwert  $\lambda_2 \in \text{span}(n_1)^\perp$  mit zugehörigem normierten Eigenvektor  $n_2$ . Wieder ist  $\text{span}(n_2)$  und damit auch  $\text{span}(n_1; n_2)$   $A$ -invariant. Das selbe gilt für das orthogonale Komplement  $\text{span}(n_1; n_2)^\perp$ . Per Induktion erhält man auf die Art ein Orthonormalsystem  $\{n_1 : \dots ; n_m\}$  aus Eigenvektoren von  $A$ .

Dieses Ergebnis wollen wir nun auf die de-Gennes-Ordnungsparameter-Matrix  $Q$  anwenden. Sei hierzu  $\{n_1; n_2; n_3\}$  eine solche Orthonormalbasis des  $\mathbb{R}^3$  aus Eigenvektoren von  $Q$ . Nun kann man jeden beliebigen Vektor  $v \in \mathbb{R}^3$  in seine Bestandteile, also seine Projektionen auf die  $n_i$ , zerlegen:

$$v = \langle v; n_1 \rangle n_1 + \langle v; n_2 \rangle n_2 + \langle v; n_3 \rangle n_3 \quad .$$

Wendet man hierauf  $Q$  an, so ergibt sich:

$$\begin{aligned} Qv &= Q\langle v; n_1 \rangle n_1 + Q\langle v; n_2 \rangle n_2 + Q\langle v; n_3 \rangle n_3 \\ &= \lambda_1 \langle v; n_1 \rangle n_1 + \lambda_2 \langle v; n_2 \rangle n_2 + \lambda_3 \langle v; n_3 \rangle n_3 \\ &\stackrel{\text{Lemma 2}}{=} \lambda_1 (n_1 \otimes n_1) v + \lambda_2 (n_2 \otimes n_2) v + \lambda_3 (n_3 \otimes n_3) v \quad . \end{aligned}$$

Dementsprechend gilt:

$$Q = \lambda_1 (n_1 \otimes n_1) + \lambda_2 (n_2 \otimes n_2) + \lambda_3 (n_3 \otimes n_3) \quad , \quad (3)$$

wobei  $\lambda_i$  die jeweils zu  $v_i$  gehörigen Eigenwerte sind. Da  $Q$  außerdem spurfrei ist, muss gelten:

$$\text{tr}(Q) = \lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 = 0 \quad .$$

Sind alle drei Eigenwerte verschieden, so wird  $Q$  biaxial genannt, falls zwei Eigenwerte gleich sind, so nennt man  $Q$  uniaxial. Dies sind Bezeichnungen aus der Optik. Tatsächlich ist es so, dass Flüssigkristalle, deren de-Gennes-Ordnungsparameter-Matrix biaxial ist, zwei optische Axen haben, uniaxiale nur eine. Wir beschränken uns in den folgenden Betrachtungen auf letzteren Fall. Sei also o.B.d.A.  $\lambda_1 = \lambda_2$ . Dann folgt:

$$\lambda_3 = -2\lambda_1 \quad .$$

Demnach gilt:

$$\begin{aligned} Q &= \lambda_1 ((n_1 \otimes n_1) + (n_2 \otimes n_2) - 2(n_3 \otimes n_3)) \\ &= \lambda_1 ((n_1 \otimes n_1) + (n_2 \otimes n_2) + (n_3 \otimes n_3) - 3(n_3 \otimes n_3)) \\ &= \lambda_1 (\mathbf{Id} - 3(n_3 \otimes n_3)) \quad . \end{aligned}$$

Mit den Bezeichnungen

$$s := -3\lambda_1$$

und

$$n := n_3$$

erhält man schließlich

$$Q = s \left( n \otimes n - \frac{1}{3} \mathbf{Id} \right) = s(\text{dev}(n \otimes n)) \quad . \quad (4)$$

Um die physikalische Bedeutung von  $s$  anschaulich nachzuvollziehen, betrachten wir folgende Gleichung:

$$\begin{aligned} Qn &= s \left( (n \otimes n)n - \frac{1}{3} \mathbf{Id} n \right) = s \left( \langle n; n \rangle n - \frac{1}{3} n \right) \\ &= s \left( \left( 1 - \frac{1}{3} \right) n \right) = \frac{2}{3} sn \quad . \end{aligned}$$

Damit gilt:

$$\langle n; Qn \rangle = \frac{2}{3} s \langle n; n \rangle = \frac{2}{3} s$$

Außerdem gilt:

$$\begin{aligned} \langle n; Qn \rangle &= \langle (n; M - M_0) n \rangle = \langle n; Mn \rangle - \langle n; M_0 n \rangle \\ &= \int_{\mathbb{S}^2} \langle n; p \rangle^2 d\mu(p) - \langle n; \frac{1}{3} \mathbf{Id} n \rangle = \int_{\mathbb{S}^2} \langle n; p \rangle^2 d\mu(p) - \frac{1}{3} \quad . \end{aligned}$$

Also folgt:

$$s = \frac{3}{2} \left( \int_{\mathbb{S}^2} \langle n; p \rangle^2 d\mu(p) - \frac{1}{3} \right) = \frac{3}{2} \int_{\mathbb{S}^2} \langle n; p \rangle^2 d\mu(p) - \frac{1}{2}$$

mit

$$\int_{\mathbb{S}^2} \langle n; p \rangle^2 d\mu(p) = E(\cos(\alpha)^2) \quad ,$$

wobei  $\alpha$  der Winkel zwischen  $p$  und  $n$  ist. Da dieses Integral nur Werte zwischen 0 und 1 annimmt, ist  $s$  auf das Intervall  $[-\frac{1}{2}; 1]$  beschränkt.

Was bedeuten also verschiedene Werte von  $s$ ? Zur Erinnerung:  $\mu(p)$  gibt die Wahrscheinlichkeit an, dass ein Molekül in Richtung  $p$  orientiert ist.

1. Sei  $s = 1$ .

Dann gilt:

$$1 = \frac{3}{2} \int_{\mathbb{S}^2} \langle n; p \rangle^2 d\mu(p) - \frac{1}{2} \quad ,$$

also

$$\int_{\mathbb{S}^2} \langle n; p \rangle^2 d\mu(p) = 1 \quad .$$

Das ist genau dann der Fall, wenn für alle  $p$  mit  $\mu(p) \neq 0$  gilt:

$$\langle n; p \rangle^2 = 1 \quad .$$

Also ist jedes dieser  $p$  parallel zu  $n$ , d. h.

$$\mu = \frac{1}{2} (\delta_n + \delta_{-n}) \quad .$$

Wir haben also eine perfekte Ausrichtung nach  $n$ , wie sie in einem idealen nematischen Flüssigkristall vorkommt.

2. Sei  $s = -\frac{1}{2}$ .

Dann gilt

$$-\frac{1}{2} = \frac{3}{2} \int_{\mathbb{S}^2} \langle n; p \rangle^2 d\mu(p) - \frac{1}{2} \quad ,$$

also

$$\int_{\mathbb{S}^2} \langle n; p \rangle^2 d\mu(p) = 0 \quad .$$

Das ist genau dann der Fall, wenn für alle  $p$  mit  $\mu(p) \neq 0$  gilt:

$$\langle n; p \rangle = 0 \quad .$$

wenn also alle Moleküle senkrecht zu  $n$  ausgerichtet sind. Dies ist beim idealen smektischen Flüssigkristall der Fall.

3. Sei  $s = 0$ .

Dann ist wegen (4)  $Q = 0$ . Dies tritt im isotropen Fall auf.

Man kann also grob sagen, dass man es für positive Werte von  $s$  mit einem nematischen, für negative mit einem smektischen Flüssigkristall zu tun hat. Je mehr sich  $s$  der Null nähert, desto ungeordneter sind die Orientierungen der Moleküle. Es sei noch erwähnt, dass die idealen Zustände bei  $s = 1$  bzw.  $s = -\frac{1}{2}$  nicht stabil sind. Eine gewisse Unordnung ist immer vorhanden.

So sind beispielsweise bei nematischen Phasen Werte zwischen 0,6 und 0,8 üblich (vgl. [4]).

Bei thermotropen Flüssigkristallen ist  $s$  temperaturabhängig. Genauer gesagt sinkt der Betrag von  $s$  bei steigenden Temperaturen bis der sogenannte Klärpunkt  $\vartheta_K$  erreicht ist. Ab diesem Punkt verhält sich der Flüssigkristall wie eine ganz normale isotrope Flüssigkeit. Dann liegt  $s$  sehr nahe bei Null.

## 4 Freie Energie

Die Freie Energie eines nematischen Flüssigkristalls auf einem Gebiet  $\Omega$ , welches in der Regel von einem Behälter begrenzt ist, lässt sich als Funktion  $I$  der de-Gennes-Ordnungsparameter-Matrix  $Q$  und deren Gradienten  $\nabla Q$  beschreiben. Jedem Punkt  $x \in \Omega$  ist eine freie Energiedichte  $\psi(Q(x); \nabla Q(x))$  zugeordnet. Die freie Energie  $I$  erhält man also durch Integration über  $x$ :

$$I(Q; \nabla Q) = \int_{\Omega} \psi(Q(x); \nabla Q(x)) \, dx \quad .$$

Um festzustellen, was man sich unter dem Gradienten einer matrixwertigen Funktion vorzustellen hat, erinnern wir kurz daran, wie der Gradient einer skalarwertigen bzw. einer vektorwertigen Funktion aussieht:

Sei  $f : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}$  eine differenzierbare Funktion und  $e_1; \dots; e_m$  die kanonische Basis des  $\mathbb{R}^m$ .

In Kartesischen Koordinaten lässt sich der Gradient wie folgt darstellen:

$$\nabla u = \sum_{j=1}^m \partial_j f e_j = \begin{pmatrix} \partial_1 f \\ \vdots \\ \partial_m f \end{pmatrix}$$

mit

$$\partial_j f := \frac{\partial f}{\partial x_j} \quad \text{für } j = 1; \dots; m \quad .$$

Sei  $u : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$  eine vektorwertige Funktion.

Dann entspricht der Gradient genau der Jacobi-Matrix dieser Funktion:

$$\nabla u = \begin{pmatrix} \partial_1 u_1 & \cdots & \partial_m u_1 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \partial_1 u_m & \cdots & \partial_m u_m \end{pmatrix} \quad .$$

Wir schreiben auch

$$u_{i,j} := \partial_j u_i \quad .$$

Mit dieser Schreibweise ist also

$$(\nabla u)_{ij} = u_{i,j} \quad .$$

Sei nun  $Q : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^{m \times m}$  eine matrixwertige Funktion.

Der Gradient ist nun ein Tensor dritter Stufe, für den dieselben Konstruktionsregeln, wie für die Jacobi-Matrix gelten. Komponentenweise bedeutet das:

$$(\nabla Q)_{ijk} = Q_{ij,k} := \partial_k Q_{ij} \quad .$$

Wir werden in Zukunft für den Gradienten der de-Gennes-Matrix schreiben:

$$\nabla Q =: D \quad .$$

Damit ergibt sich für die einzelnen Komponenten:

$$D_{ijk} = Q_{ij,k} \quad .$$

Einen Tensor dritter Stufe kann man sowohl auf eine Matrix, als auch auf einen Vektor anwenden. Zum Vergleich betrachten wir die Multiplikation einer Matrix  $M$  mit einem Vektor  $v$  (wir wenden die Matrix auf den Vektor an):

$$(M \cdot v)_i = \sum_{j=1}^m M_{ij} v_j \quad .$$

Analog hierzu ist auch die Multiplikation eines Tensors  $C$  dritter Stufe mit einer Matrix  $M$  bzw. einem Vektor  $v$  definiert:

$$(C \cdot M)_i = \sum_{j,k=1}^m C_{ijk} M_{jk} \quad ,$$

bzw.

$$(C \cdot v)_{ij} = \sum_{k=1}^m C_{ijk} v_k \quad .$$

Allgemein gilt: Wendet man einen Tensor  $p$ -ter Stufe auf einen Tensor  $q$ -ter Stufe (für  $q < p$ ) an, so erhält man einen Tensor  $(p - q)$ -ter Stufe.

Wir führen auf den Tensoren dritter Stufe eine Norm analog zur Frobeniusnorm bei Matrizen ein:

$$\|D\|^2 := \sum_{i,j,k=1}^m D_{ijk}^2 \quad .$$

Wie wir im vorherigen Kapitel bereits festgestellt haben, ist die de-Gennes-Matrix eine symmetrische, spurfreie  $3 \times 3$ -Matrix, d. h. es gelten

$$Q \in \mathbb{R}^{3 \times 3} \quad ,$$

sowie

$$Q_{ij} = Q_{ji} \quad \text{für alle } i, j \in \{1; 2; 3\} \quad (5)$$

und

$$\text{tr}(Q) = Q_{11} + Q_{22} + Q_{33} = 0 \quad . \quad (6)$$



Außerdem gilt für die Eigenwerte von  $Q$ :

$$\lambda_1 = \lambda_2 = -\frac{s}{3} \quad ; \quad \lambda_3 = -2\lambda_1 = \frac{2}{3}s$$

mit  $s \in [-\frac{1}{2}; 1]$  (siehe vorheriges Kapitel). Hieraus folgt:

$$\lambda_1 \in \left[ -\frac{1}{3}; \frac{1}{6} \right]$$

und

$$\lambda_3 \in \left[ -\frac{1}{3}; \frac{2}{3} \right] \quad ,$$

also insgesamt-

$$\lambda_i \in \left[ -\frac{1}{3}; \frac{2}{3} \right] \quad .$$

Was bedeutet das für den Gradienten  $D$ ? Wegen (5) gilt:

$$D_{ijk} = Q_{ij,k} = Q_{ji,k} = D_{jik} \quad \text{für alle } i; j; k \in \{1; 2; 3\} \quad .$$

Außerdem ist wegen (6)  $Q_{11}(x) + Q_{22}(x) + Q_{33}(x) = 0$  konstant, d. h. es gilt

$$\sum_{i=1}^3 D_{iik} = \sum_{i=1}^3 Q_{ii,k} = 0 \quad \text{für alle } k = 1; 2; 3 \quad .$$

Um den Definitionsbereich  $D_\psi$  von  $\psi$  zu bestimmen, definiere zunächst also die beiden Mengen

$$\mathcal{Q} := \{Q \in \mathbb{R}^{3 \times 3} \mid Q = Q^T; \operatorname{tr}(Q) = 0\}$$

und

$$\mathcal{D} := \left\{ D = (D_{ijk}) \mid D_{ijk} = D_{jik}; \sum_{i=1}^3 D_{iik} = 0 \right\} \quad .$$

Mit diesen Bezeichnungen gilt für den Definitionsbereich von  $\psi$ :

$$D_\psi = \left\{ (Q; D) \in \mathcal{Q} \times \mathcal{D} \mid \lambda_i(Q) \in \left[ -\frac{1}{3}; \frac{2}{3} \right] \right\} \quad .$$

Um  $\psi$  abzuleiten, kann es hilfreich sein, auch Elemente in der Nähe von  $D_\psi$  zu betrachten. Hierbei hilft uns die folgende Zerlegung:

**Definition.** Sei  $A \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$  beliebig.

Dann wird mit

$$A = \text{dev}(\text{sym}(A)) + \text{skew}(A) + \frac{1}{3}\text{tr}(A)\mathbf{Id}$$

die Cartan-Zerlegung bezeichnet. Hierbei ist

$$\text{sym}(A) = \frac{1}{2}(A + A^T)$$

der symmetrische Teil von  $A$  und

$$\text{skew}(A) = \frac{1}{2}(A - A^T)$$

der schiefsymmetrische Teil von  $A$ .

**Lemma 4.1.** Die Summanden der Cartan-Zerlegung sind orthogonal zueinander.

**Beweis:** Betrachte zunächst

$$\begin{aligned} \langle \text{dev}(\text{sym}(A)); \text{skew}(A) \rangle &= \left\langle \frac{1}{2}(A + A^T) - \frac{1}{3}\text{tr}(A)\mathbf{Id}; \frac{1}{2}(A - A^T) \right\rangle \\ &= \frac{1}{4} \langle (A + A^T); (A - A^T) \rangle \\ &\quad - \frac{1}{6} \text{tr}(A) \underbrace{\langle \mathbf{Id}; A - A^T \rangle}_{=0} \\ &= \frac{1}{4} (\langle A; A \rangle + \underbrace{\langle A^T; A \rangle}_{=0} - \langle A; A^T \rangle) \\ &\quad - \underbrace{\langle A^T; A^T \rangle}_{=\langle A; A \rangle} = 0 \quad . \end{aligned}$$

Außerdem gilt:

$$\begin{aligned} \langle \text{dev}(\text{sym}(A)); \frac{1}{3}\text{tr}(A)\mathbf{Id} \rangle &= \frac{1}{3}\text{tr}(A) (\langle \text{sym}(A); \mathbf{Id} \rangle \\ &\quad - \frac{1}{3}\text{tr}(A) \langle \mathbf{Id}; \mathbf{Id} \rangle) \\ &= \frac{1}{3}\text{tr}(A) (\text{tr}(A) - \text{tr}(A)) = 0 \end{aligned}$$

und schließlich ist

$$\langle \text{skew}(A); \frac{1}{3}\text{tr}(A)\mathbf{Id} \rangle = \frac{1}{3}\text{tr}(A) \langle \text{skew}(A); \mathbf{Id} \rangle = 0 \quad .$$

**Lemma 4.2.** Sei  $A \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$  beliebig.

Dann ist:

$$PA := \text{dev}(\text{sym}(A)) \in \mathcal{Q}$$

und

$$P^\perp A := \text{skew}(A) + \frac{1}{3} \text{tr}(A) \mathbf{Id} \in \mathcal{E}^\perp \quad .$$

**Beweis:** Sei  $A \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ .

Dann ist  $PA$  als Summe symmetrischer Matrizen selbst symmetrisch (denn  $A + A^T$  und  $\mathbf{Id}$  und alle skalaren Vielfachen davon sind offensichtlich symmetrisch).

Außerdem ist die Spur von  $\text{dev}(\text{sym}(A))$  nach Definition des spurfreien Anteils  $\text{dev}$  gleich Null. Also liegt  $PA$  in  $\mathcal{E}$ .

Bleibt noch zu zeigen, dass  $\langle PA; P^\perp B \rangle = 0$  für alle  $A; B \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ :

$$\begin{aligned} \langle PA; P^\perp B \rangle &= \left\langle \frac{1}{2}(A + A^T) - \frac{1}{3} \text{tr}(A) \mathbf{Id}; \frac{1}{2}(B - B^T) + \frac{1}{3} \text{tr}(B) \mathbf{Id} \right\rangle \\ &= \frac{1}{4} \langle A + A^T; B - B^T \rangle - \frac{1}{6} \text{tr}(A) \underbrace{\langle \mathbf{Id}; B - B^T \rangle}_{=\text{tr}(B - B^T) = 0} \\ &\quad + \frac{1}{6} \text{tr}(B) \underbrace{\langle A + A^T; \mathbf{Id} \rangle}_{=2\text{tr}(A)} - \frac{1}{9} \text{tr}(A) \text{tr}(B) \underbrace{\langle \mathbf{Id}; \mathbf{Id} \rangle}_{=3} \\ &= \frac{1}{4} (\langle A; B \rangle + \langle A^T; B \rangle - \underbrace{\langle A; B^T \rangle}_{=\langle A^T; B \rangle} - \underbrace{\langle A^T; B^T \rangle}_{=\langle A; B \rangle}) \\ &\quad + \frac{1}{3} \text{tr}(A) \text{tr}(B) - \frac{1}{3} \text{tr}(A) \text{tr}(B) = 0 \end{aligned}$$

und damit liegt  $P^\perp B$  in  $\mathcal{Q}^\perp$  für alle  $B \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ .

Analog gilt

$$PD \in \mathcal{D} \quad \text{für } (PD)_{ijk} = \frac{1}{2}(D_{ijk} + D_{jik}) - \frac{1}{3} \delta_{ij} \sum_{l=1}^3 D_{llk} \quad .$$

Man kann also eine Funktion

$$\tilde{\psi}(Q; D) := \psi(PQ; PD)$$

auf einer Umgebung von  $D_\psi$  definieren und mit dieser arbeiten.

Die freie Energiedichte eines nematischen Flüssigkristalls ist unabhängig von der Position eines Beobachters. Wir wollen uns daher anschauen, wie

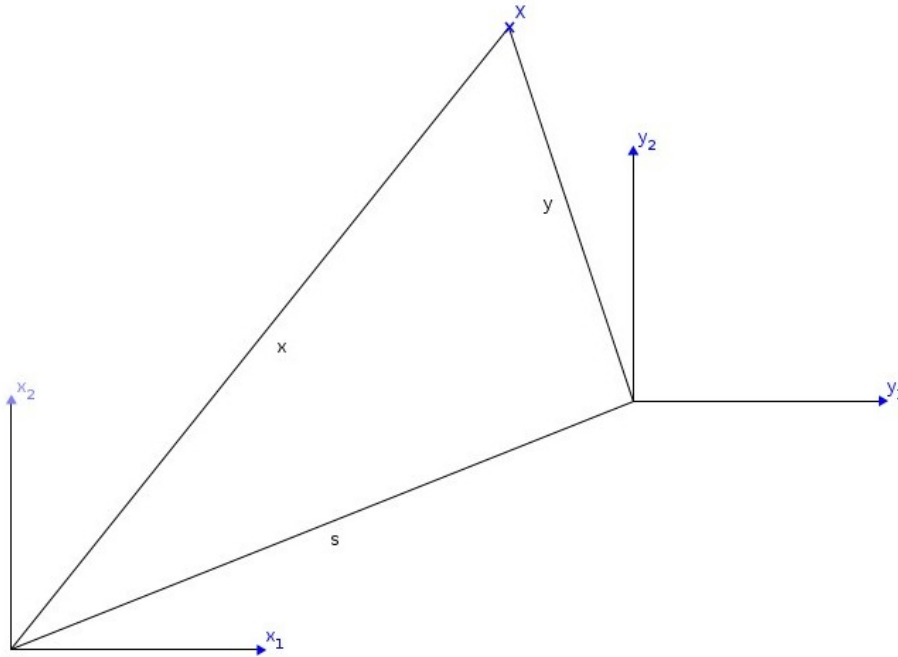


Abbildung 5: Verschiebung eines Koordinatensystems um den Vektor  $s$ .

die de-Gennes-Matrix in einem verschobenen und gedrehten Bezugssystem aussieht:

Seien hierfür zunächst  $(x_1; x_2; x_3)$  die Koordinaten eines Punktes  $x \in \Omega$  im ursprünglichen Koordinatensystem.

Betrachten wir ein hierzu um den Vektor  $s$  verschobenes Bezugssystem (vgl. Abb. 5), so ergeben sich für denselben Punkt die Koordinaten

$$(y_1; y_2; y_3) \quad \text{mit } y = x - s \quad .$$

Für  $x = 0$  ergibt sich beispielsweise  $y = -s$ .

Wir wollen zusätzlich eine Drehung zulassen. Diese wird durch eine Drehmatrix  $R \in \text{SO}(3)$  dargestellt, d. h. aus dem ursprünglichen Punkt  $x$  wird im neuen Bezugssystem der Punkt  $Rx$ . Kombiniert man Drehung und Verschiebung (Rotation und Translation), so ergibt sich für die neuen Koordinaten  $z$  des Punktes

$$z = Rx - s \quad .$$

Ziel ist nun, dass die freie Energiefunktion  $\psi$  unabhängig von der Wahl des Beobachters ist, d. h.

$$\psi(Q^*; \nabla_z Q^*) = \psi(Q; \nabla_x Q) \quad ,$$

wobei  $Q^*$  die de-Gennes-Matrix ist, die sich für den neuen Beobachter ergibt. Da, wie in Kapitel 2 beschrieben, bei der Untersuchung der Wahrscheinlichkeitsverteilung der Molekülorientierungen, die maßgeblich für die Gestalt der de-Gennes-Matrix ist, die Geraden, die die Moleküle repräsentieren in den Ursprung verschoben werden, brauchen wir uns hierbei um die Verschiebung um  $\hat{x}$  keine weiteren Gedanken zu machen. Welchen Einfluss aber hat die durch  $R$  dargestellte Drehung?

Sei  $p \in \mathbb{S}^2$  ein beliebiger Einheitsvektor und  $R \in \text{SO}(3)$ .

Nach der Drehung ergibt sich ein neuer Einheitsvektor

$$q = Rp \in \mathbb{S}^2 \quad .$$

Umgekehrt gilt:

$$p = R^T q \quad .$$

Sei jetzt  $A \subseteq \mathbb{S}^2$  eine Menge, betrachtet im neuen Bezugssystem. Diese entspricht dann im alten Bezugssystem der Menge  $R^T A$ . Insgesamt folgt hieraus für die Wahrscheinlichkeitsverteilung  $\mu^*$  im neuen System:

$$\mu^*(A) = \int_A d\mu^*(p) = \int_{R^T A} d\mu(p) = \int_A d\mu(R^T q) \quad .$$

Bevor wir nun die neue de-Gennes-Matrix  $Q^*$  ausrechnen, benötigen wir noch folgendes Hilfsmittel:

**Lemma 4.3.** Sei  $M \in \mathbb{R}^{m \times m}$  eine Matrix und  $u, v \in \mathbb{R}^m$  Vektoren.

Dann gilt:

$$u \otimes Mv = (u \otimes v)M^T \quad .$$

**Beweis:** Sei  $w$  ein weiterer beliebiger Vektor in  $\mathbb{R}^m$ .

Dann gilt:

$$(u \otimes Mv)w \stackrel{(2)}{=} \langle Mv; w \rangle u = \langle v; M^T w \rangle u \stackrel{(2)}{=} (u \otimes v)M^T w \quad .$$

Da  $w$  beliebig ist, folgt die Behauptung.

Außerdem gilt:

$$M(a \otimes b) = (Ma) \otimes b \quad ,$$

denn

$$(M(a \otimes b))_{ij} = \sum_{k=1}^n M_{ik}(a \otimes b)_{kj} = \sum_{k=1}^n M_{ik}a_k b_j = (Ma)_i b_j = (Ma) \otimes b \quad .$$

Nun können wir genaueres über die Matrix  $Q^*$  sagen:

**Lemma 4.4.** Sei  $Q$  die de-Gennes-Matrix im ursprünglichen Bezugssystem. Dann gilt für die de-Gennes-Matrix  $Q^*$  eines via  $R \in \text{SO}(3)$  gedrehten Bezugssystems:

$$Q^* = RQR^T \quad .$$

**Beweis:** Es gilt:

$$\begin{aligned} Q^* &= \int_{\mathbb{S}^2} (q \otimes q - \frac{1}{3} \mathbf{Id}) d\mu(R^T q) = \int_{\mathbb{S}^2} (Rp \otimes Rp - \frac{1}{3} \mathbf{Id}) d\mu(p) \\ &\stackrel{\text{Lemma 4.3}}{=} \int_{\mathbb{S}^2} R(p \otimes p)R^T - \frac{1}{3} R \mathbf{Id} R^T d\mu(p) \\ &= R \int_{\mathbb{S}^2} (p \otimes p) - \frac{1}{3} \mathbf{Id} d\mu(p) R^T = RQR^T \quad . \end{aligned}$$

Zur Erinnerung:

$$\nabla Q = D \quad \text{also} \quad Q_{ij,k} = D_{ijk} \quad .$$

**Lemma 4.5.** Seien  $Q; Q^*$  wie in Lemma 4.4 und  $D = \nabla_x Q$ . Dann gilt für  $D^* := \nabla_z Q^*$ :

$$D^*_{ijk} = R_{il} R_{jm} R_{kp} D_{lmp} \quad .$$

**Beweis:** Es gilt:

$$z = Rx - s \quad \Leftrightarrow \quad z + s = Rx \quad \Leftrightarrow \quad R^T(z + s) = x \quad .$$

Daher ist

$$\frac{dx}{dz} = R^T \quad \text{bzw.} \quad \frac{\partial x_i}{\partial z_j} = (R^T)_{ij} = R_{ji} \quad . \quad (7)$$

Mit

$$Q^*_{ij} = \sum_{l,m} R_{il} Q_{lm} R^T_{mj} = \sum_{l,m} R_{il} Q_{lm} R_{jm}$$

ergibt sich

$$\begin{aligned} \frac{\partial Q^*_{ij}(x)}{\partial z_k} &= \sum_{l,m} \frac{\partial}{\partial z_k} (R_{il} Q_{lm}(x) R_{jm}) \\ &= \sum_p \frac{\partial}{\partial x_p} \frac{\partial x_p}{\partial z_k} \sum_{l,m} (R_{il} Q_{lm}(x) R_{jm}) \\ &\stackrel{(7)}{=} \sum_{l,m,p} \frac{\partial}{\partial x_p} (R_{kp} R_{il} Q_{lm}(x) R_{jm}) = \sum_{l,m,p} R_{il} R_{jm} R_{kp} \frac{\partial Q_{lm}(x)}{\partial x_p} \\ &= \sum_{l,m,p} R_{il} R_{jm} R_{kp} Q_{lm,p} = \sum_{l,m,p} R_{il} R_{jm} R_{kp} D_{lmp} \quad . \end{aligned}$$

In obiger Rechnung kann die Reihenfolge der  $R$  und  $Q$  vertauscht werden, da es sich hier um Komponenten der jeweiligen Matrizen, also Skalare handelt.

Wir können also zusammenfassend sagen, dass für die freie Energiedichte  $\psi$  gelten muss:

$$\psi(Q; D) = \psi(Q^*; D^*)$$

mit

$$Q^* = RQR^T \quad \text{und} \quad (D^*)_{ijk} = \sum_{l,m,p} R_{il}R_{jm}R_{kp}D_{lmp} \quad \text{für } R \in \tilde{\text{SO}}(3) \quad .$$

Sind die genannten Bedingungen erfüllt, so nennt man  $\psi$  hemitrop.

Aufgrund der Symmetrie der Moleküle (mathematisch ausgedrückt: wegen  $\mu(p) = \mu(-p)$ ) kann man bei nematischen Flüssigkristallen für  $R$  nicht nur Drehungen, sondern auch Spiegelungen und damit auch Drehspiegelungen, also beliebige  $R \in O(3)$  zulassen. Zerlegt man nämlich ein solches  $R \in O(3)$  in eine Drehmatrix  $\hat{R} \in \text{SO}(3)$  und eine Spiegelmatrix  $\tilde{R}$  mit

$$R = \hat{R}\tilde{R} \quad ,$$

so gilt:

$$\mu(R^T q) = \mu(\tilde{R}^T \hat{R}^T q) = \mu(\hat{R}^T q)$$

und die Rechnungen, die zu Lemma 4.4 führen lassen sich auf beliebige  $R \in O(3)$  übertragen.

Für die freie Energiedichte bedeutet das:

$$\psi(Q; D) = \psi(Q^*; D^*)$$

mit

$$Q^* = RQR^T \quad \text{und} \quad (D^*)_{ijk} = \sum_{l,m,p} R_{il}R_{jm}R_{kp}D_{lmp} \quad \text{für } R \in O(3) \quad .$$

Funktionen, die diese Bedingungen erfüllen, nennt man isotrop. Bei smektischen oder kolumnaren Flüssigkristallen ist dies in der Regel nicht der Fall. Es ist klar, dass isotrope Funktionen auch hemitrop sind, da  $\text{SO}(3) \subset O(3)$  ist. Umgekehrt ist das in der Regel nicht der Fall.

**Bemerkung:** An dieser Stelle sollte man beachten, dass der Begriff der Isotropie bei Flüssigkristallen in zwei unterschiedlichen Zusammenhängen verwendet wird. Zum einen, wie an dieser Stelle, zur Beschreibung

Bezugssystem-unabhängiger Energiefunktionen, zum anderen, wie in der Einleitung und bei der de-Gennes-Ordnungsparameter-Matrix zur Beschreibung Bezugssystem-unabhängiger Orientierungen. Diese treten z. B. bei klassischen Flüssigkeiten auf, wo die Orientierungen zufällig im Raum verteilt sind. In dem Fall ist  $Q = 0$ . Flüssigkristalle in der nematischen Phase sind durch ihre Orientierung in eine bestimmte Richtung definiert, sind also in diesem Sinne nicht isotrop. Thermotrope (temperaturabhängige) Flüssigkristalle gehen, wie wir noch sehen werden, bei steigender Temperatur von der nematischen Phase in die isotrope Phase über, in der sie sich wie klassische Flüssigkeiten verhalten.

**Beispiel:**

Die folgenden Funktionen, die bei der Berechnung der freien Energie wichtige Rollen spielen, sind isotrop:

$$\begin{aligned}
 I_1 &:= \|\nabla Q\|^2 = \|D\|^2 = \sum_{i,j,k} D_{ijk} D_{ijk} \\
 I_2 &:= \|\operatorname{div}(Q)\|^2 = \sum_{i,j,k} D_{ijj} D_{ikk} \\
 I_3 &:= \sum_{i,j,k} D_{ijk} D_{ikj} \\
 I_4 &:= \sum_{i,j,k,l} D_{ijk} D_{ijl} Q_{kl} \quad .
 \end{aligned}$$

Den Beweis erhält man durch Einsetzen, wobei hier die Reihenfolge der  $R$ ,  $Q$  und  $D$  keine Rolle spielt, da es sich wieder um Komponenten handelt.

**Beweis:** Bevor wir mit dem Einsetzen beginnen, beachten wir folgendes:

Da  $R^T R = \mathbf{Id}$  ist, gilt:

$$\delta_{ij} = (R^T R)_{ki} = \sum_k R_{ik}^T R_{kj} = \sum_k R_{ki} R_{kj} \quad .$$

Hier haben wir das Kronecker-Delta verwendet, das wie folgt definiert ist:

$$\delta_{ij} := \left\{ \begin{array}{ll} 1 & \text{für } i = j \\ 0 & \text{für } i \neq j \end{array} \right\}$$



Damit ergibt sich nun:

$$\begin{aligned}
I_1^* &= \|\nabla Q^*\| = \|D^*\| = \sum_{i,j,k} D_{ijk}^* D_{ijk}^* \\
&= \sum_{i,j,k} \sum_{l,m,p} R_{il} R_{jm} R_{kp} D_{lmp} \sum_{s,t,u} R_{is} R_{jt} R_{ku} D_{stu} \\
&= \sum_{i,j,k,l,m,p,s,t,u} \underbrace{R_{il} R_{is}}_{=\delta_{ls}} \underbrace{R_{jm} R_{jt}}_{=\delta_{mt}} \underbrace{R_{kp} R_{ku}}_{=\delta_{pu}} D_{lmp} D_{stu} \\
&= \sum_{l,m,p,s,t,u} \delta_{ls} \delta_{mt} \delta_{pu} D_{lmp} D_{stu} = \sum_{l,m,p} D_{lmp} D_{lmp} = I_1 \\
I_2^* &= \sum_{i,j,k} \operatorname{div}(Q^*) = D_{ijj}^* D_{ikk}^* \\
&= \sum_i \sum_{j,l,m,p} R_{il} \underbrace{R_{jm} R_{jp}}_{=\delta_{mp}} D_{lmp} \sum_{k,s,t,u} R_{is} \underbrace{R_{kt} R_{ku}}_{=\delta_{tu}} D_{stu} \\
&= \sum_{i,l,m,p,s,t,u} \delta_{mp} \delta_{tu} \underbrace{R_{il} R_{is}}_{=\delta_{ls}} D_{lmp} D_{stu} = \sum_{l,m,t} D_{lmm} D_{ltt} = I_2 \\
I_3^* &= \sum_{i,j,k} D_{ijk}^* D_{ikj}^* = \sum_{i,j,k} \sum_{l,m,p} R_{il} R_{jm} R_{kp} \sum_{s,t,u} D_{lmp} R_{is} R_{kt} R_{ju} D_{stu} \\
&= \sum_{l,m,p,s,t,u} \delta_{ls} \delta_{mu} \delta_{pt} D_{lmp} D_{stu} = \sum_{l,m,p} D_{lmp} D_{lpm} = I_3 \\
I_4^* &= \sum_{i,j,k,l} D_{ijk}^* D_{ijl}^* Q_{kl}^* \\
&= \sum_{i,j,k,l} \sum_{a,b,c} R_{ia} R_{jb} R_{kc} D_{abc} \sum_{s,t,u} R_{is} R_{jt} R_{lu} D_{stu} \sum_{m,p} R_{km} Q_{mp} R_{pl}^T \\
&= \sum_{a,b,c,i,j,k,l,m,p,s,t,u} \underbrace{R_{ia} R_{is}}_{=\delta_{as}} \underbrace{R_{jb} R_{jt}}_{=\delta_{bt}} D_{abc} D_{stu} \underbrace{R_{kc} R_{km}}_{=\delta_{cm}} \underbrace{R_{lu} R_{lp}}_{=\delta_{up}} Q_{mp} \\
&= \sum_{a,b,c,u} D_{abc} D_{abu} Q_{cu} = I_4^* \quad .
\end{aligned}$$

**Beispiel:** Ein Beispiel für eine hemitrope, aber nicht isotrope Funktion ist die folgende:

$$I_5 := \sum_{i,j,k,l} \epsilon_{ijk} Q_{il} D_{jlk} \quad .$$

Hierbei ist  $\epsilon$  der Levi-Civita-Tensor, der analog zur Kronecker-Matrix  $\delta$

komponentenweise definiert ist:

$$\varepsilon_{ijk} = \left\{ \begin{array}{ll} 1 & \text{falls } ijk \text{ eine gerade Permutation von } 123 \text{ ist} \\ -1 & \text{falls } ijk \text{ eine ungerade Permutation von } 123 \text{ ist} \\ 0 & \text{sonst} \end{array} \right\}$$

Konkret bedeutet das:

$$\epsilon_{123} = \epsilon_{231} = \epsilon_{312} = 1$$

und

$$\epsilon_{132} = \epsilon_{213} = \epsilon_{321} = -1$$

und für alle anderen Fälle, d. h. falls zwei der Indizes gleich sind, gilt

$$\epsilon_{ijk} = 0 \quad .$$

**Beweis:** Wir zeigen zunächst eine Eigenschaft des Levi-Civita-Tensors, die für beliebige Matrizen  $M \in \mathcal{M}^{m \times m}(\mathbb{R})$  gilt:

$$\begin{aligned} \sum_{i,j,k} \epsilon_{ijk} M_{ia} M_{jb} M_{kc} &= M_{1a} M_{2b} M_{3c} + M_{2a} M_{3b} M_{1c} + M_{3a} M_{1b} M_{2c} \\ &\quad - (M_{1a} M_{3b} M_{2c} + M_{2b} M_{1a} M_{3c} + M_{3a} M_{2b} M_{1c}) \end{aligned}$$

Die rechte Seite erinnert stark an die Determinante von  $M$ , für die nach der Sarrus'schen Regel gilt:

$$\begin{aligned} \det(M) &= M_{11} M_{22} M_{33} + M_{12} M_{23} M_{31} + M_{13} M_{21} M_{32} \\ &\quad - (M_{31} M_{22} M_{13} + M_{32} M_{23} M_{11} + M_{33} M_{21} M_{12}) \quad . \end{aligned}$$

Setzt man in die erste Gleichung für  $(a; b; c)$  die geraden Permutationen, also  $(1; 2; 3)$ ,  $(2; 3; 1)$  oder  $(3; 1; 2)$  ein, so erhält man

$$\sum_{i,j,k} \epsilon_{ijk} M_{ia} M_{jb} M_{kc} = \det(M) \quad ,$$

setzt man die ungeraden Permutationen, also  $(1; 3; 2)$ ,  $(2; 1; 3)$  oder  $(3; 2; 1)$  ein, ergibt sich

$$\sum_{i,j,k} \epsilon_{ijk} M_{ia} M_{jb} M_{kc} = -\det(M) \quad .$$

Außerdem gilt für  $a = b$ ,  $b = c$  oder  $a = c$ :

$$\sum_{i,j,k} \epsilon_{ijk} M_{ia} M_{jb} M_{kc} = 0 \quad .$$

Diese Ergebnisse lassen sich zu folgender Gleichung zusammenfassen:

$$\sum_{i,j,k} \epsilon_{ijk} M_{ia} M_{jb} M_{kc} = \epsilon_{abc} \det(M) \quad . \quad (8)$$

Sei nun  $R \in SO(3)$ .

Dann gilt wegen  $\det(R) = 1$ :

$$\begin{aligned} I_5^* &= \sum_{i,j,k,l} D_{ijk}^* Q_{lj}^* \epsilon_{lik} = \sum_{i,j,k,l} \sum_{a,b,c} R_{ia} R_{jb} R_{kc} D_{abc} \sum_{s,t} R_{ls} Q_{st} R_{tj}^T \epsilon_{lik} \\ &= \sum_{a,b,c,i,k,l,s,t} \delta_{bt} D_{abc} Q_{st} \epsilon_{lik} R_{ls} R_{ia} R_{kc} \\ &\stackrel{(8)}{=} \sum_{a,b,c,s} D_{abc} Q_{sb} \epsilon_{sac} \det(R) = I_5 \quad . \end{aligned}$$

Es ist klar, dass diese Gleichung nicht für beliebige  $R \in O(3)$  gilt, da für diese auch  $\det(R) = -1$  gelten kann.

Wir zerlegen die freie Energiedichte in zwei Komponenten

$$\psi(Q; D) = \underbrace{\psi(Q; 0)}_{=\psi_H(Q)} + \underbrace{\psi(Q; D) - \psi(Q; 0)}_{=\psi_E(Q; D)}$$

und nennen  $\psi_H$  den Hauptteil und  $\psi_E$  den elastischen Teil von  $\psi$ . Da der Hauptteil unabhängig von  $D$  ist, ist er genau dann isotrop, wenn für alle  $R \in SO(3)$  gilt:

$$\psi_H(Q) = \psi_H(RQR^T) \quad .$$

**Lemma 4.6.** *Der Hauptteil  $\psi_H$  der freien Energiedichte ist genau dann isotrop, wenn er hemitrop ist.*

**Beweis:** “ $\Rightarrow$ ” ist klar.

“ $\Leftarrow$ ”: Sei  $R \in O(3) \setminus SO(3)$ . Dann gilt für  $\hat{R} := -R$

$$\det(\hat{R}) = -\det(R) \quad ,$$

da wir uns in  $\mathbb{R}^3$  befinden. Also ist  $\hat{R} \in SO(3)$  und es gilt, da  $\psi_H$  hemitrop ist:

$$\psi_H(Q) = \psi_H(\hat{R}Q\hat{R}^T) = \psi_H((-R)Q(-R)^T) = \psi_H(RQR^T) \quad .$$

Also ist  $\psi_H(Q)$  isotrop.

**Definition.** Als Hauptinvarianten einer Matrix  $A$  sind die Koeffizienten  $H_k(A)$  des Polynoms

$$\det(\mu \mathbf{Id} + A) = \mu^m + H_1(A)\mu^{m-1} + \cdots + H_{m-1}(A)\mu + J_m(A)$$

definiert (Vgl. Hierzu [8] Kap. 8-10).

Dieses Polynom entspricht dem charakteristischen Polynom mit alternierenden Vorzeichen. Insbesondere haben wir für symmetrische  $3 \times 3$ -Matrizen:

$$\begin{aligned} \det(\mu \mathbf{Id} + A) &= (\mu + a_{11})(\mu + a_{22})(\mu + a_{33}) + 2(a_{12}a_{23}a_{13}) \\ &\quad - a_{12}^2(\mu + a_{33}) - a_{13}^2(\mu + a_{22}) - a_{23}^2(\mu + a_{11}) \\ &= \mu^3 + \mu^2(a_{11} + a_{22} + a_{33}) + \mu(a_{11}a_{22} + a_{22}a_{33} + a_{11}a_{33}) \\ &\quad + a_{11}a_{22}a_{33} + 2(a_{12}a_{23}a_{13}) - \mu(a_{12}^2 + a_{23}^2 + a_{13}^2) \\ &\quad - (a_{12}^2a_{33} + a_{13}^2a_{22} + a_{23}^2a_{11}) \\ &= \mu^3 + \mu^2 \operatorname{tr}(A) \\ &\quad + \mu \left( a_{11}a_{22} + a_{22}a_{33} + a_{11}a_{33} + \frac{1}{2}(a_{11}^2 + a_{22}^2 + a_{33}^2) \right) \\ &\quad - \mu \left( \frac{1}{2}(a_{11}^2 + a_{22}^2 + a_{33}^2) + a_{12}^2 + a_{23}^2 + a_{13}^2 \right) + \det(A) \\ &= \mu^3 + \mu^2 \operatorname{tr}(A) + \mu \left( \frac{1}{2}((\operatorname{tr}(A))^2 - \|A\|^2) \right) + \det(A) \quad . \end{aligned}$$

Die Hauptinvarianten sind in dem Fall also

$$\begin{aligned} H_1(A) &= \operatorname{tr}(A) \\ H_2(A) &= \frac{1}{2}((\operatorname{tr}(A))^2 - \|A\|^2) \\ H_3(A) &= \det(A) \quad . \end{aligned}$$

Für beliebige (nicht notwendigerweise symmetrische) Matrizen gilt:

$$H_2(A) = \operatorname{tr}(\operatorname{cof}(A)) \quad .$$

Eine einfache Rechnung zeigt, dass dies für symmetrische Matrizen mit der hier verwendeten einfacheren Darstellung übereinstimmt: Aus obiger Rechnung erhält man

$$\frac{1}{2}((\operatorname{tr}(A))^2 - \|A\|^2) = a_{11}a_{22} + a_{22}a_{33} + a_{11}a_{33} - (a_{12}^2 + a_{23}^2 + a_{13}^2) \quad .$$

Dies stimmt überein mit

$$\begin{aligned} \operatorname{tr}(\operatorname{cof}(A)) &= \det \begin{pmatrix} a_{22} & a_{23} \\ a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} + \det \begin{pmatrix} a_{11} & a_{13} \\ a_{31} & a_{33} \end{pmatrix} + \det \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \\ &= a_{22}a_{33} - 2a_{23}^2 + a_{11}a_{33} - 2a_{13}^2 + a_{11}a_{22} - 2a_{12}^2 \quad . \end{aligned}$$

Wir werden zeigen, dass sich jede skalarwertige isotrope Funktion  $\phi(A)$  einer symmetrischen Matrix als Funktion der Hauptinvarianten darstellen lässt. Oft ersetzt man hierbei  $H_2(A)$  durch  $\|A\|^2$ , da man  $H_2(A)$  durch  $H_1(A)$  und  $\|A\|^2$  ausdrücken kann.

**Satz 4.7.** *Eine Funktion  $\phi : \text{Sym}(m) \rightarrow \mathbb{R}$  ist genau dann isotrop, wenn sie nur von den Hauptinvarianten abhängt, d. h. für  $m = 3$*

$$\phi(M) = f(\text{tr}(M); \|M\|^2; \det(M)) \quad \text{für ein } f : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R} \quad .$$

**Beweis:** Seien  $A$  und  $B$  zwei symmetrische Matrizen mit gleichen Hauptinvarianten.

Wir wissen, dass die Eigenwerte die Nullstellen des charakteristischen Polynoms

$$x^m - H_1(A)x^{m-1} + \dots + (-1)^m H_m(A)$$

sind. Die Koeffizienten dieses Polynoms sind genau die Hauptinvarianten von  $A$  bzw.  $B$ . Da diese übereinstimmen, gilt das, nach eventueller Umordnung auch für die Eigenwerte  $\mu_j$ . Nach Satz 3.4 gibt es sowohl eine Orthonormalbasis des  $\mathbb{R}^m$  aus Eigenvektoren  $n_j$  von  $A$ , als auch aus Eigenvektoren  $p_j$  von  $B$ . Dann gibt es auch eine eindeutig bestimmte Basiswechselmatrix  $R$ , so dass

$$Rn_j = p_j \quad \text{für alle } j = 1; \dots; m \quad .$$

Hieraus folgt:

$$RAn_j = \mu_j Rn_j = \mu_j p_j = Bp_j = BRn_j$$

und damit ist

$$B = RAR^T \quad .$$

Da es sich bei diesem Basiswechsel nur um eine Drehung handelt, ist  $R \in \text{SO}(m)$ .

Sei umgekehrt  $B = RAR^T$  für ein  $R \in \text{SO}(m)$ .

Dann gilt:

$$\begin{aligned} \det(\lambda \mathbf{Id} - B) &= \det(\lambda RR^T - RAR^T) = \det(\lambda R \mathbf{Id} R^T - RAR^T) \\ &= \det(R \lambda \mathbf{Id} R^T - RAR^T) = \det(R(\lambda \mathbf{Id} - A)R^T) \\ &= \underbrace{\det(R)}_{=1} \cdot \det(\lambda \mathbf{Id} - A) \cdot \underbrace{\det(R^T)}_{=1} = \det(\lambda \mathbf{Id} - A) \end{aligned}$$

Die Hauptinvarianten zweier symmetrischer Matrizen  $A$  und  $B$  sind also genau dann gleich, wenn es ein  $R \in \text{SO}(m)$  gibt, so dass

$$B = RAR^T$$

ist.

Also gilt für jede isotrope Funktion  $\psi$  genau dann  $\psi(A) = \psi(B)$ , wenn die Hauptinvarianten von  $A$  und  $B$  übereinstimmen.

Hieraus folgt die Behauptung.

Da  $\text{tr}(Q) = 0$  ist, hängt  $\psi_H(Q)$  nur von  $\|Q\|^2$  und  $\det(Q)$  ab, es gibt also ein  $F_H : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ , so dass

$$\psi_H(Q) = F_H(\|Q\|^2; \det(Q)) \quad .$$

**Lemma 4.8.** (*Eigenschaften der Hauptinvarianten*)

Sei  $A$  eine symmetrische Matrix und  $Q \in \mathcal{Q}$ , also eine symmetrische, spurfreie  $3 \times 3$ -Matrix.

Dann gelten:

$$\|A\|^2 = \text{tr}(A^2) \tag{9}$$

$$3 \det(Q) = \text{tr}(Q^3) \tag{10}$$

$$\text{tr}(Q^4) = \frac{1}{2} (\text{tr}(Q^2))^2 \tag{11}$$

$$\text{tr}(Q^m) = \sum_{k=1}^3 \lambda^m \tag{12}$$

Sei  $Q$  außerdem uniaxial. Dann gelten des weiteren:

$$\|Q\|^2 = \frac{2}{3}s^2 \tag{13}$$

$$\det(Q) = -\frac{2s^3}{27} \tag{14}$$

**Beweis:** zu (9): Es gilt:

$$(A^2)_{ij} = \sum_k a_{ik}a_{kj} = \sum_k a_{ik}a_{jk}$$

Hieraus folgt:

$$\text{tr}(A^2) = \sum_i (A^2)_{ii} = \sum_{i,k} a_{ik}a_{ik} = \|A\|^2$$

zu (10): Das charakteristische Polynom von  $Q$  ist nach Definition der Hauptinvarianten

$$\lambda^3 - \underbrace{\operatorname{tr}(Q)}_{=0} \lambda^2 + \frac{1}{2} (\underbrace{(\operatorname{tr}(Q))^2}_{=0} - \|Q\|^2) \lambda - \det(Q) = 0$$

und man erhält die charakteristische Gleichung

$$Q^3 - \frac{1}{2} \|Q\|^2 Q - \det(Q) \mathbf{Id} = 0 \quad .$$

Nimmt man von beiden Seiten die Spur, so ergibt sich

$$\operatorname{tr}(Q^3) - \frac{1}{2} \|Q\|^2 \underbrace{\operatorname{tr}(Q)}_{=0} - \det(Q) \operatorname{tr}(\mathbf{Id}) = \operatorname{tr}(0) = 0$$

und man erhält schließlich

$$\operatorname{tr}(Q^3) = -3 \det(Q) \quad .$$

zu (11): Multipliziert man die charakteristische Gleichung mit  $Q$ , so ergibt sich

$$Q^4 - \frac{1}{2} \|Q\|^2 Q^2 - \det(Q) Q = 0 \quad .$$

Wie oben erhält man

$$\operatorname{tr}(Q^4) - \frac{1}{2} \underbrace{\|Q\|^2}_{=\operatorname{tr}(Q^2)} \operatorname{tr}(Q^2) - \det(Q) \underbrace{\operatorname{tr}(Q)}_{=0} = 0$$

und es folgt

$$\operatorname{tr}(Q^4) = \frac{1}{2} (\operatorname{tr}(Q^2))^2$$

zu (12): Die Matrix  $Q$  lässt sich nach (3) in der Form

$$Q = \lambda_1(n^{(1)} \otimes n^{(1)}) + \lambda_2(n^{(2)} \otimes n^{(2)}) + \lambda_3(n^{(3)} \otimes n^{(3)})$$

schreiben.

Die einzelnen Komponenten lassen sich also wie folgt darstellen:

$$Q_{ij} = \sum_k \lambda_k n_i^{(k)} n_j^{(k)} \quad .$$

Für das Quadrat von  $Q$  bedeutet das:

$$\begin{aligned} (Q^2)_{il} &= \sum_j Q_{ij}Q_{jl} = \sum_{j,k,m} \lambda_k n_i^{(k)} n_j^{(k)} \lambda_m n_j^{(m)} n_l^{(m)} \\ &= \sum_{j,k,m} \lambda_k \lambda_m n_i^{(k)} n_l^{(m)} \underbrace{n_j^{(k)} n_j^{(m)}}_{=\delta_{km}} = \sum_k \lambda_k^2 n_i^{(k)} n_l^{(k)} \quad . \end{aligned}$$

Wir nehmen die Spur und erhalten:

$$\text{tr}(Q^2) = \sum_{i=1}^3 \lambda_k^2 n_i^{(k)2} = \lambda_1^2 + \lambda_2^2 + \lambda_3^2 \quad .$$

Wiederholt man diese Schritte, so erhält man induktiv die Behauptung. zu (13):

$$\|Q\|^2 \stackrel{(9)}{=} \text{tr}(Q^2) \stackrel{(12)}{=} \lambda_1^2 + \lambda_2^2 + \lambda_3^2$$

Wie in Kapitel 3 gezeigt, gilt im uniaxialen Fall:

$$\lambda_1 = \lambda_2 = -\frac{s}{3} \quad \text{und} \quad \lambda_3 = \frac{2}{3}s$$

und daraus folgt

$$\|Q\|^2 = \frac{s^2}{9} + \frac{s^2}{9} + \frac{4s^2}{9} = \frac{2}{3}s^2$$

(14) beweist man analog:

$$\det(Q) \stackrel{(10)}{=} \frac{1}{3} \text{tr}(Q^3) \stackrel{(12)}{=} \frac{1}{3} \left( -\frac{s^3}{27} - \frac{s^3}{27} + \frac{8s^3}{27} \right) = \frac{2s^3}{27}$$

**Bemerkung:** Da man in unserem Fall die Hauptinvarianten durch die Spuren der Potenzen von  $Q$  darstellen kann, die wegen (12) leicht zu berechnen sind, beschreibt man isotrope Funktionen gerne in Abhängigkeit dieser. Es gibt also ein  $f_H : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ , so dass

$$\psi_H(Q) = f_H(\text{tr}(Q^2); \text{tr}(Q^3))$$

Betrachten wir nun die Temperaturabhängigkeit von  $\psi_H$ . Hierfür ziehen wir ein einfaches Modell heran, das sich z. B. in [6] findet:

$$\psi_H(Q; \vartheta) := a(\vartheta) \cdot \text{tr}(Q^2) + b \cdot \text{tr}(Q^3) + \underbrace{c \cdot \text{tr}(Q^4)}_{=\frac{c}{2}(\text{tr}(Q^2))^2} \quad . \quad (15)$$



Hierbei ist  $a(\vartheta) = \alpha(\vartheta - \vartheta_S)$  ( $\alpha$  monoton wachsend) eine temperaturabhängige skalarwertige Funktion, wobei  $\vartheta_S$  die Schmelztemperatur ist, die den Übergang vom festen zum flüssigen Zustand markiert und  $b$  und  $c$  sind temperaturunabhängige positive Konstanten. Betrachten wir zunächst die Spur von  $Q$ .

**Satz 4.9.** *Sei  $\psi_H$  wie in (15).*

*Dann nimmt  $\psi_h$  sein Minimum für ein uniaxiales oder isotropes (d. h.  $Q = 0$ )  $Q$  an.*

**Beweis:**  $\psi_H$  kann nach (12) als Funktion von Eigenwerten dargestellt werden:

$$\begin{aligned}\psi_H(\lambda_1; \lambda_2; \lambda_3; \vartheta) &= a(\vartheta) \sum_{k=1}^3 \lambda_k^2 + b \sum_{k=1}^3 \lambda_k^3 + c \sum_{k=1}^3 \lambda_k^4 \\ &= a(\vartheta) \sum_{k=1}^3 \lambda_k^2 + b \sum_{k=1}^3 \lambda_k^3 + \frac{c}{2} \left( \sum_{k=1}^3 \lambda_k^2 \right)^2.\end{aligned}$$

Zur Untersuchung der kritischen Punkte unter der Berücksichtigung der Zwangsbedingung  $z := \lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 = 0$  verwenden wir die Methode der Lagrange'schen Multiplikatoren. Hierzu stellen wir uns "Höhenlinien", also Gebiete gleichen Wertes der Funktionen  $\psi_H(\lambda_1; \lambda_2; \lambda_3)$  vor. Diese werden dargestellt durch die Bedingung  $\psi_H = d$  mit einer beliebigen Konstanten  $d$ . Durchläuft man den durch die Zwangsbedingung  $z = 0$  vorgegebenen Raum in einem lokalen Minimum, so muss der Weg in diesem Minimum parallel zu einer Höhenlinie verlaufen. Andernfalls könnte man unter Beachtung der Zwangsbedingung zu einem niedrigeren Wert von  $\psi_H$  gelangen. Der Gradient von  $\psi_H$  muss also parallel zum Gradienten von  $z$  sein. In Formeln:

$$\begin{aligned}\nabla(\psi_H) &= \delta \nabla(z) \quad \text{bzw.} \\ \nabla L(\lambda_1; \lambda_2; \lambda_3; \delta) &:= \nabla(\psi_H - \delta \cdot (\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3)) = 0\end{aligned}$$

Hierbei nennt man  $\delta$  den Lagrange'schen Multiplikator und  $L$  die Lagrange-Funktion. Zur Lösung des Problems betrachten wir also:

$$\frac{\partial L}{\partial \lambda_k} = 2a(\vartheta)\lambda_k + 3b\lambda_k^2 + 2c\lambda_k \sum_{i=1}^3 \lambda_i^2 - \delta \quad .$$

Für die Differenz zweier solcher Gleichungen ergibt sich dann:

$$(\lambda_k - \lambda_l) \left( 2a + 3b(\lambda_k + \lambda_l) + 2c \sum_{i=1}^3 \lambda_i^2 \right) = 0 \quad \text{für } i \neq j \quad .$$

Angenommen, die Eigenwerte sind alle verschieden. Dann muss gelten:

$$2a + 3b(\lambda_1 + \lambda_3) + 2c \sum_{i=1}^3 \lambda_k^2 = 0 \quad (16)$$

$$2a + 3b(\lambda_2 + \lambda_3) + 2c \sum_{i=1}^3 \lambda_k^2 = 0 \quad (17)$$

Zieht man (17) von (16) ab, so erhält man:

$$b(\lambda_1 - \lambda_2) = 0$$

und damit wegen  $b > 0$

$$\lambda_1 = \lambda_2 \quad \not\Leftarrow \quad .$$

Also ist  $Q$  uniaxial, d. h. mit den Bezeichnungen aus Kapitel 3 gilt:

$$\lambda_1 = \lambda_2 =: \lambda \quad \text{und} \quad \lambda_3 = -2\lambda \quad .$$

Hieraus folgt:

$$\lambda_1^2 = \lambda_2^2 =: \lambda^2 \quad \text{und} \quad \lambda_3 = 4\lambda^2$$

und es ergibt sich für die Summe:

$$\sum_{i=1}^3 \lambda_i^2 = 6\lambda^2 \quad .$$

Setze in Gleichung (16) ein:

$$2a - 3b\lambda + 12c\lambda^2 = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \lambda^2 - \frac{b}{4c}\lambda + \frac{a}{6c} = 0 \quad .$$

Damit ergeben sich für die möglichen Extrema:

$$\lambda_{\pm} = \frac{b}{8c} \pm \sqrt{\frac{b^2}{64c^2} - \frac{a}{6c}} \quad . \quad (18)$$

Für eine weitere Interpretation wollen wir nun den Hauptteil der freien Energie als Funktion von  $\lambda$  betrachten. Vorher sei bemerkt, dass

$$\lambda_1^3 = \lambda_2^3 = \lambda^3 \quad \text{und} \quad \lambda_3^3 = -8\lambda^3 \quad .$$

und damit

$$\sum_{i=1}^3 \lambda_i^3 = -6\lambda^3$$

sowie

$$\left( \sum_{i=1}^3 \lambda_i^2 \right) = 36\lambda^4 \quad .$$

Damit ergibt sich:

$$\psi_H(\lambda) = 6a\lambda^2 - 6b\lambda^3 + 18c\lambda^4 \quad .$$

Im Punkt Null gilt für die zweite Ableitung:

$$\psi_H''(0) = 6a \quad .$$

Für  $a < 0$  liegt also in dem Punkt ein Maximum vor, für  $a > 0$  ein Minimum. Wie an (18) zu erkennen ist, gibt es für  $a < 0$  ein Extremum  $\lambda_- < 0$  und ein  $\lambda_+ > 0$ . Da im Punkt Null ein Maximum vorliegt, sind dies beides Minima. Für  $a = 0$  fallen die drei Extrempunkte zusammen. Außerdem sieht man, dass für  $a > \frac{3b^2}{32c}$  der einzige Extrempunkt (Minimum) bei  $\lambda = 0$  liegt. Betrachten wir nun also, was im Bereich  $a \in (0; \frac{3b^2}{32c})$  passiert. Wir schreiben

$$\psi_H(\lambda) = 18c\lambda^2 \left( \frac{3a}{c} - \frac{3b}{c}\lambda + \lambda^2 \right) \quad .$$

Neben der Null ergeben sich die Nullstellen:

$$\lambda^{(\pm)} = \frac{3b}{2c} \pm \sqrt{\frac{9b^2}{4c^2} - \frac{3a}{c}} \quad .$$

In dem für uns interessanten Bereich gibt es also zwei positive Nullstellen. Demnach ist  $\lambda_-$  hier ein Maximum und  $\lambda_+$  ein Minimum mit

$$\psi_H(\lambda_+) < 0 = \psi_H(0) \quad .$$

Wir fassen zusammen: Für Temperaturen unterhalb der Schmelztemperatur ist  $\phi_H(0)$ , was den isotropen und damit ungeordneten Zustand angibt maximal. Das lässt sich durch die hohe Ordnung im festen Kristallgitter erklären. Im flüssigen Zustand, der uns mehr interessiert, gibt es eine Temperatur  $\vartheta_K$  mit

$$\alpha(\vartheta_K - \vartheta_S) = a = \frac{3b}{32c}$$

ab der der energetisch günstigste Zustand wieder im isotropen Fall auftritt, d. h. der Flüssigkristall verhält sich wie eine gewöhnliche Flüssigkeit. Unterhalb dieser Temperatur liegt das Energieminimum im uniaxialen Zustand.

Wegen der damit verbundenen optischen Eigenschaften wird  $\vartheta_K$  auch die Klärtemperatur genannt.

Sei nun die Temperatur konstant. Wir definieren einen nicht-negativen Hauptteil  $\tilde{\psi}_H$  der freien Energiedichte wie folgt:

$$\tilde{\psi}_H(Q) = \psi_H(Q) - \min_{Q \in \mathcal{E}} \psi_H(Q) \geq 0 \quad .$$

und es gilt:

$$\tilde{\psi}_H(Q) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad Q \in \mathcal{Q} \text{ mit } Q = s \operatorname{dev}(n \otimes n) \quad .$$

Hierbei ergibt sich  $s$  aus  $Q$  durch (13) und (14):

$$s^2 = \frac{3}{2} \|Q\|^2 \quad ; \quad s^3 = -\frac{27}{2} \det(Q) \quad .$$

Es ist klar, dass  $\psi_H$  für genau die gleichen  $Q$  sein Minimum annimmt, wie  $\tilde{\psi}_H$ . Der Grund für die Wahl eines nicht-negativen  $\tilde{\psi}_H$  wird deutlich, wenn man (aus physikalischen Gründen) annimmt, dass der elastische Teil  $\psi_E$  viel kleiner ist als der Hauptteil  $\psi_H$ . Dann schreibt man

$$\psi(Q; D) = \psi_H(Q) + \varepsilon \tilde{\psi}_E(Q; D) \quad .$$

für sehr kleine  $\varepsilon > 0$  und positives  $\psi_E$ . Dann ergibt sich für die Energie:

$$I_\varepsilon(Q; D) = \int_{\Omega} \psi_H(Q) + \varepsilon \tilde{\psi}_E(Q; D) dx \quad .$$

Betrachtet man nun

$$\frac{1}{\varepsilon} I_\varepsilon(Q) = \int_{\Omega} \frac{1}{\varepsilon} \psi_H(Q) + \tilde{\psi}_E(Q; D) dx \quad ,$$

dann ergeben sich für alle  $\varepsilon > 0$  dieselben Minimierer, wie für  $I(Q; D)$ . Heuristisch kann man schon jetzt sagen, dass dieses Integral im Grenzübergang  $\varepsilon \rightarrow 0$  nur dann existieren kann, wenn  $\psi_H(Q) = 0$  ist. Daher ersetzen wir  $\psi_H$  durch  $\tilde{\psi}_H$ , denn dies ist genau dann gleich Null, wenn  $Q$  uniaxial ist, d. h.

$$\frac{1}{\varepsilon} \tilde{I}(Q) = \int_{\Omega} \frac{1}{\varepsilon} \tilde{\psi}_H(Q) + \tilde{\psi}_E(Q; D) dx$$

existiert für  $Q$  uniaxial und dann ist

$$\tilde{I}(Q) = \int_{\Omega} \tilde{\psi}_E(Q; D) dx \quad .$$

Wir brauchen uns also nur noch um den elastischen Teil zu kümmern.

Nach der Landau-de-Gennes-Theorie [2] gilt für uniaxiale nematische Flüssigkristalle

$$\psi_E(Q; D) = \sum_{j=1}^4 L_j I_j \quad .$$

Hierbei sind die  $I_j$  die in diesem Kapitel angegebenen Beispiele für isotrope Funktionen

$$I_1 := \|\nabla Q\|^2 = \|D\|^2 = \sum_{i,j,k} D_{ijk} D_{ijk}$$

$$I_2 := \|\operatorname{div}(Q)\|^2 = \sum_{i,j,k} D_{ijj} D_{ikk}$$

$$I_3 := \sum_{i,j,k} D_{ijk} D_{ikj}$$

$$I_4 := \sum_{i,j,k,l} D_{ijk} D_{ijl} Q_{kl}$$

und die  $L_i$  sind Materialkonstanten. Bei cholesterischen Flüssigkristallen kommt noch ein Summand  $L_5 I_5$  hinzu. Es ist klar, dass die Summe isotroper Funktionen wieder isotrop ist.

Außerdem existiert  $I(Q)$  genau dann, wenn  $Q \in W^{1,2}(\Omega; \mathcal{E})$  ist, denn genau dann ist

$$\int_{\Omega} I_j(Q; D) dx < \infty \quad \text{für } j = 1; \dots; 4 \quad .$$

Unter bestimmten, leicht zu bestimmenden Voraussetzungen an die  $L_j$  ist  $\psi_E$  koerziv, d. h. es gibt ein  $c > 0$ , so dass

$$\psi_E(Q; D) = \sum_{j=1}^4 L_j I_j \geq c \|D\|^2 \quad .$$

Seien z. B.  $L_1; L_2 > 0$  und  $L_3; L_4 = 0$ . Dann gilt

$$\psi_E(Q; D) \geq L_1 I_1 = L_1 \|D\|^2 \quad .$$

Man kann also leicht die Koerzivität von  $I(Q)$  nachweisen. Das Gebiet  $\Omega$ , in dem sich der Flüssigkristall befindet, ist selbstverständlich beschränkt. Bei fester Verankerung der Randwerte, d. h. bei vorgegebenem  $g(x) = Q|_{\partial\Omega}(x)$  kann man die Poincaré'sche Ungleichung anwenden:

$$\tilde{I}(Q) = \int_{\Omega} \tilde{\psi}_E(Q; D) dx \geq c \int_{\Omega} \|D\|^2 dx \geq \hat{c} \int_{\Omega} \|Q\|^2 dx \quad .$$

Diesen Spezialfall der Poincaré'schen Ungleichung wollen wir hier beweisen (Vgl. auch [3]):

**Satz 4.10.** Sei  $Q \in W_0^{1,2}(\Omega)$  und  $D = \nabla Q$ .

Dann gilt

$$\int_{\Omega} \|Q\|^2 dx \leq k \int_{\Omega} \|D\|^2 dx \quad .$$

Hierbei ist  $k$  eine Konstante, die nur von  $\Omega$  abhängt.

**Beweis:** Sei  $d := \text{diam}(\Omega) := \sup_{x,y \in \Omega} |x - y|$ ,  $x \in \Omega$  und  $y_1 \in \Omega$  so, dass gilt

$$(y_1, x_2, x_3) \in \partial\Omega \quad .$$

Dann gilt (zunächst mit  $Q \in C_0^1(\Omega)$ ):

$$Q(x) = \int_{y_1}^{x_1} \frac{\partial}{\partial x_1} Q(\xi, x_2, x_3) d\xi + Q(y_1, x_2, x_3) \quad .$$

Da  $Q \in C_0^1(\Omega)$  ist, folgt mit  $Q(y_1, x_2, x_3) = 0$ :

$$\begin{aligned} \|Q(x)\|^2 &= \left\| \int_{y_1}^{x_1} \frac{\partial}{\partial x_1} Q(\xi, x_2, x_3) d\xi \right\|^2 \\ &\leq \int_{y_1}^{x_1} \left\| \frac{\partial}{\partial x_1} Q(\xi, x_2, x_3) \right\|^2 d\xi \quad . \end{aligned}$$

Mit der Hölder-Ungleichung folgt:

$$\begin{aligned} \|Q(x)\|^2 &\leq \left( \left( \int_{y_1}^{x_1} d\xi \right)^{\frac{1}{2}} \left( \int_{y_1}^{x_1} \left\| \frac{\partial}{\partial x_1} Q(\xi, x_2, x_3) \right\|^2 d\xi \right)^{\frac{1}{2}} \right)^2 \\ &\leq d \int_{y_1}^{x_1} \left\| \frac{\partial}{\partial x_1} Q(\xi, x_2, x_3) \right\|^2 d\xi \\ &\leq d \int_{-\infty}^{\infty} \left\| \frac{\partial}{\partial x_1} Q(\xi, x_2, x_3) \right\|^2 d\xi \\ &\leq d \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{i=1}^3 \left\| \frac{\partial}{\partial x_i} Q(\xi, x_2, x_3) \right\|^2 d\xi \\ &= d \int_{-\infty}^{\infty} \|D(\xi, x_2, x_3)\|^2 d\xi \end{aligned}$$

Integrieren wir nun bezüglich  $x_1$  so ergibt sich:

$$\begin{aligned} \int_{y_1}^{y_1+d} \|Q(x)\|^2 dx_1 &\leq \int_{y_1}^{y_1+d} d \int_{-\infty}^{\infty} \|D(\xi, x_2, x_3)\|^2 d\xi dx_1 \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{y_1}^{y_1+d} d \|D(\xi, x_2, x_3)\|^2 dx_1 d\xi \\ &= d^2 \int_{-\infty}^{\infty} \|D(\xi, x_2, x_3)\|^2 d\xi \quad . \end{aligned}$$

Integration bezüglich  $x_2$  und  $x_3$  ergibt schließlich

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{y_1}^{y_1+d} \|Q(x)\|^2 dx_1 dx_2 dx_3 \leq d^2 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \|D(\xi, x_2, x_3)\|^2 d\xi dx_2 dx_3$$

und da  $Q$  und  $\|D\|$  außerhalb von  $\Omega$  gleich Null sind, folgt:

$$\int_{\Omega} \|Q(x)\|^2 dx \leq d^2 \int_{\Omega} \|D\|^2 dx \quad . \quad (19)$$

Sei nun allgemeiner  $Q \in W_0^{1,2}\Omega$ .

Da  $C_0^1(\Omega)$  dicht in  $W_0^{1,2}\Omega$  liegt, gibt es eine Folge  $Q_n \in C_0^1(\Omega)$ , die gegen  $Q$  konvergiert, d. h. :

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_{\Omega} \|Q_n - Q\|^2 dx = 0 \quad \text{und} \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{\Omega} \|\nabla Q_n - D\|^2 dx = 0 \quad .$$

Hiermit gilt:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \|Q\|^2 dx &\leq \lim_{n \rightarrow \infty} \underbrace{\int_{\Omega} \|Q - Q_n\|^2 dx}_{\rightarrow 0} + \int_{\Omega} \|Q_n\|^2 dx \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{\Omega} \|Q_n\|^2 dx \stackrel{(19)}{\leq} d^2 \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{\Omega} \|\nabla Q_n\|^2 dx \\ &\leq \lim_{n \rightarrow \infty} d^2 \underbrace{\int_{\Omega} \|\nabla Q_n - D\|^2 dx}_{\rightarrow 0} + d^2 \int_{\Omega} \|D\|^2 dx \\ &= \int_{\Omega} \|D\|^2 dx \quad . \end{aligned}$$

Genauere Überlegungen lassen sich leichter mit der Oseen-Frank Theorie anstellen. Diese verwendet zur Beschreibung der Orientierungen an Stelle

der de Gennes Matrix  $Q$  lediglich den Richtungsvektor  $n$ . Will man von der Landau-de-Gennes-Theorie zur Oseen-Frank-Theorie übergehen, steht man vor dem Problem, dass man der Matrix

$$Q = s \operatorname{dev}(n \otimes n)$$

kein eindeutiges  $n \in \mathbb{S}^2$  zuordnen kann. Es ist leicht einzusehen, dass

$$s(n \otimes n - \frac{1}{3}\mathbf{Id}) = s((-n) \otimes (-n) - \frac{1}{3}\mathbf{Id}) = Q$$

ist. Unter welchen Umständen man trotzdem eindeutig (unter Vorgabe eines Anfangswertes) von  $Q$  nach  $n$  übergehen kann (diese Eigenschaft wird Orientierbarkeit genannt), wird in den folgenden Kapiteln diskutiert.

**Definition.** Seien  $a; b \in \mathbb{R}^3$ .

Dann wird mit

$$\nabla a := \begin{pmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & a_{1,3} \\ a_{2,1} & a_{2,2} & a_{2,3} \\ a_{3,1} & a_{3,2} & a_{3,3} \end{pmatrix}$$

der Gradient von  $a$ , mit

$$a \times b := \begin{pmatrix} a_2 b_3 - a_3 b_2 \\ a_3 b_1 - a_1 b_3 \\ a_1 b_2 - a_2 b_1 \end{pmatrix}$$

das Kreuzprodukt von  $a$  und  $b$  und mit

$$\operatorname{curl}(a) := \begin{pmatrix} a_{3,2} - a_{2,3} \\ a_{1,3} - a_{3,1} \\ a_{2,1} - a_{1,2} \end{pmatrix}$$

die Rotation von  $a$  bezeichnet.

**Lemma 4.11.** Sei  $n \in \mathbb{S}^2$  und  $v \in \mathbb{R}^3$  beliebig. Dann gelten

$$\operatorname{curl}(n) \times n = (\nabla n)n \quad (20)$$

$$\|v\|^2 = \langle n; v \rangle^2 + \|n \times v\|^2 \quad (21)$$

$$\|\nabla n\|^2 = \operatorname{tr}((\nabla n)^2) + \langle n; \operatorname{curl}(n) \rangle^2 + \|n \times \operatorname{curl}(n)\|^2 \quad (22)$$

**Beweis** : zu (20): Bemerke zunächst:

$$\sum_{i=1}^3 n_i n_{i,j} = \frac{1}{2} \partial_j \underbrace{\left( \sum_{i=1}^3 n_i n_i \right)}_{=1} = 0 \quad . \quad (23)$$



Dann gilt

$$\begin{aligned}
\operatorname{curl}(n) \times n &= \begin{pmatrix} (n_{1,3} - n_{3,1})n_3 - (n_{2,1} - n_{1,2})n_2 \\ (n_{2,1} - n_{1,2})n_1 - (n_{3,2} - n_{2,3})n_3 \\ (n_{3,2} - n_{2,3})n_2 - (n_{1,3} - n_{3,1})n_1 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} n_{1,3}n_3 + n_{1,2}n_2 - \underline{n_{3,1}n_3} - \underline{n_{2,1}n_2} \\ n_{2,1}n_1 + n_{2,3}n_3 - \underline{n_{1,2}n_1} - \underline{n_{3,2}n_3} \\ n_{3,2}n_2 + n_{3,1}n_1 - \underline{n_{2,3}n_2} - \underline{n_{1,3}n_1} \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} n_{1,1}n_1 + n_{1,2}n_2 + n_{1,3}n_3 \\ n_{2,1}n_1 + \underline{n_{2,2}n_2} + n_{2,3}n_3 \\ n_{3,1}n_1 + n_{3,2}n_2 + \underline{n_{3,3}n_3} \end{pmatrix} \\
&= (\nabla n)n \quad ,
\end{aligned}$$

da sich wegen (23) die unterstrichenen Terme aufheben.

Zu (21):

$$\begin{aligned}
\langle n; v \rangle^2 + \|n \times v\|^2 &= (n_1v_1 + n_2v_2 + n_3v_3)^2 + (n_2v_3 - n_3v_2)^2 \\
&\quad + (n_3v_1 - n_1v_3)^2 + (n_1v_2 - n_2v_1)^2 \\
&= n_1^2v_1^2 + 2n_1n_2v_1v_2 + 2n_1n_3v_1v_3 + n_2^2v_2^2 \\
&\quad + 2n_2n_3v_2v_3 + n_3^2v_3^2 + n_2^2v_3^2 - 2n_2n_3v_2v_3 \\
&\quad + n_3^2v_2^2 + n_3^2v_1^2 - 2n_1n_3v_1v_3 + n_1^2v_3^2 \\
&\quad + n_1^2v_2^2 - 2n_1n_2v_1v_2 + n_2^2v_1^2 \\
&= (v_1^2 + v_2^2 + v_3^2) \underbrace{(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)}_{=1} \\
&= \|v\|^2 \quad .
\end{aligned}$$

Insbesondere gilt für  $v := \operatorname{curl}(n)$ :

$$\|\operatorname{curl}(n)\|^2 = \langle n; \operatorname{curl}(n) \rangle + \|n \times \operatorname{curl}(n)\|^2 \quad .$$

Zum Beweis von (22) zerlege zunächst  $\nabla n = S + W$  in ihren symmetrischen Teil

$$S = \frac{1}{2}(\nabla n + (\nabla n)^T)$$

und in ihren schief-symmetrischen Teil

$$W = \frac{1}{2}(\nabla n - (\nabla n)^T)$$

und berechne  $W$  explizit:

$$W = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & n_{1,2} - n_{2,1} & n_{1,3} - n_{3,1} \\ n_{2,1} - n_{1,2} & 0 & n_{2,3} - n_{3,2} \\ n_{3,1} - n_{1,3} & n_{3,2} - n_{2,3} & 0 \end{pmatrix} \quad .$$

Also gilt per definitionem

$$\operatorname{curl}(n) = 2 \begin{pmatrix} W_{32} \\ W_{13} \\ W_{21} \end{pmatrix}$$

und es folgt:

$$\|\operatorname{curl}(n)\|^2 = \left\| 2 \begin{pmatrix} W_{32} \\ W_{13} \\ W_{21} \end{pmatrix} \right\|^2 = 4 \left\| \begin{pmatrix} W_{32} \\ W_{13} \\ W_{21} \end{pmatrix} \right\|^2 = 2\|W\|^2 \quad .$$

Außerdem gilt mit dieser Zerlegung

$$(\nabla n)^2 = (S + W)^2 = S^2 + SW + WS + W^2$$

und

$$SW + WS = SW - W^T S^T = SW - (SW)^T$$

ist schiefsymmetrisch, also spurfrei. Hieraus folgt

$$\begin{aligned} \operatorname{tr}((\nabla n)^2) &= \operatorname{tr}(S^2) + \operatorname{tr}(W^2) \\ &= \langle S; S^T \rangle + \langle W; W^T \rangle \\ &= \langle S; S \rangle - \langle W; W \rangle \end{aligned} \quad (24)$$

und da außerdem gilt:

$$\begin{aligned} \langle \nabla n; \nabla n \rangle &= \langle S + W; S + W \rangle \\ &= \langle S; S \rangle + \underbrace{\langle S; W \rangle}_{=0} + \underbrace{\langle W; S \rangle}_{=0} + \langle W; W \rangle \\ &= \langle S; S \rangle + \langle W; W \rangle \quad . \end{aligned} \quad (25)$$

Insgesamt ergibt sich

$$\|\nabla n\|^2 = \operatorname{tr}((\nabla n)^2) + 2\|W\|^2 = \operatorname{tr}((\nabla n)^2) + \|\operatorname{curl}(n)\|^2 \quad .$$

Gemeinsam mit (21) folgt schließlich die Behauptung.

**Satz 4.12.** *Sei  $Q \in \mathcal{E}$  orientierbar und  $n \in SO(3)$  der aus  $Q$  hervorgehende Richtungsvektor.*

*Dann gilt für die isotropen Funktionen  $I_1; \dots; I_4$*

$$\begin{aligned} I_1 &= 2s^2 (\operatorname{tr}((\nabla n)^2) + \langle n; \operatorname{curl}(n) \rangle^2 + \|n \times \operatorname{curl}(n)\|^2) \\ I_2 &= s^2 ((\operatorname{div}(n))^2 + \|n \times \operatorname{curl}(n)\|^2) \\ I_3 &= s^2 (\|n \times \operatorname{curl}(n)\|^2 + \operatorname{tr}((\nabla n)^2)) \\ I_4 &= 2s^3 \left( \frac{2}{3} \|n \times \operatorname{curl}(n)\|^2 - \frac{1}{3} \operatorname{tr}((\nabla n)^2) - \frac{1}{3} \langle n; \operatorname{curl}(n) \rangle^2 \right) \quad . \end{aligned}$$

**Beweis:** Es gilt:

$$D_{ijk} = Q_{ij,k} = \partial_k \left( s(n_i n_j - \frac{1}{3} \delta_{ij}) \right) = s(n_i n_{j,k} + n_{i,k} n_j) \quad .$$

Nun lässt sich zeigen:

$$\begin{aligned} I_1 &= \|D\|^2 = \sum_{i,j,k} D_{ijk} D_{ijk} = s^2 \sum_{i,j,k} (n_i n_{j,k} + n_{i,k} n_j)(n_i n_{j,k} + n_{i,k} n_j) \\ &= s^2 \sum_{i,j,k} (\underbrace{n_i n_i}_{=1} n_{j,k} n_{j,k} + 2 \underbrace{n_i n_{i,k}}_{=0} \underbrace{n_j n_{j,k}}_{=0} + n_{i,k} n_{i,k} n_j n_j) \\ &= s^2 \sum_{i,j,k} (n_{j,k} n_{j,k} + n_{i,k} n_{i,k}) = 2s^2 \|\nabla n\|^2 \\ &\stackrel{(22)}{=} 2s^2 (\text{tr}((\nabla n)^2) + \langle n; \text{curl}(n) \rangle^2 + \|n \times \text{curl}(n)\|^2) \\ I_2 &= (\text{div}(Q))^2 = \sum_i \sum_j D_{ijj} \sum_k D_{ikk} \\ &= s^2 \sum_i \sum_j (n_i n_{j,j} + n_{i,j} n_j) \sum_k (n_i n_{k,k} + n_{i,k} n_k) \\ &= s^2 \sum_{i,j,k} (n_{j,j} n_{k,k} + n_{i,j} n_{i,k} n_j n_k) = s^2 \sum_{i,j,k} (n_{j,j} n_{k,k} + n_{i,j} n_k n_{i,k} n_j) \\ &= s^2 (\|\text{div}(n)\|^2 + \|n \times \text{curl}(n)\|^2) \\ I_3 &= \sum_{i,j,k} D_{ijk} D_{ikj} = s^2 \sum_{i,j,k} (n_i n_{j,k} + n_{i,k} n_j)(n_i n_{k,j} + n_{i,j} n_k) \\ &= s^2 \sum_{i,j,k} (n_{j,k} n_{k,j} + n_{i,k} n_j n_{i,j} n_k) \\ &= s^2 (\|n \times \text{curl}(n)\|^2 + \text{tr}((\nabla n)^2)) \\ I_4 &= \sum_{i,j,k,l} D_{ijk} D_{ijl} Q_{kl} \\ &= s^3 \sum_{i,j,k,l} (n_i n_{j,k} + n_{i,k} n_j)(n_i n_{j,l} + n_{i,l} n_j)(n_k n_l - \frac{1}{3} \delta_{k,l}) \\ &= s^3 \sum_{i,j,k,l} \left( n_{j,k} n_{j,l} n_k n_l + n_{i,k} n_{i,l} n_k n_l - \frac{1}{3} (n_{j,k} n_{j,k} + n_{i,k} n_{i,k}) \right) \\ &= 2s^3 \left( \|n \times \text{curl}(n)\|^2 - \frac{1}{3} \cdot \|\nabla n\|^2 \right) \\ &= 2s^3 \left( \frac{2}{3} \|n \times \text{curl}(n)\|^2 - \frac{1}{3} \text{tr}((\nabla n)^2) \right) \end{aligned}$$

**Folgerung 4.13.** Seien  $I_1; \dots; I_4$  und  $L_1; \dots; L_4$  wie oben und

$$\begin{aligned} J_1 &:= (\operatorname{div}(n))^2 \\ J_2 &:= \langle n; \operatorname{curl}(n) \rangle \\ J_3 &:= \|\operatorname{curl}(n)\|^2 \\ J_4 &:= \operatorname{tr}((\nabla n)^2) - (\operatorname{div}(n))^2 \quad . \end{aligned}$$

Dann gilt:

$$\psi_E(Q; D) = \sum_{j=1}^4 L_j I_j = k_1 J_1 + k_2 J_2 + k_3 J_3 + (k_2 + k_4) J_4 =: W(n; \nabla n) \quad .$$

Hierbei gelten die Beziehungen

$$\begin{aligned} k_1 &= s^2 \left( 2L_1 + L_2 + L_3 - \frac{2}{3} L_4 s \right) \\ k_2 &= s^2 \left( 2L_1 - \frac{2}{3} L_4 s \right) \\ k_3 &= s^2 \left( 2L_1 + L_2 + L_3 + \frac{4}{3} L_4 s \right) \\ k_4 &= s^2 L_3 \quad . \end{aligned}$$

**Beweis:** Einfaches Einsetzen unter Beachtung von

$$\operatorname{tr}((\nabla n)^2) = J_4 - J_1$$

ergibt direkt die Behauptung.

Die Formel  $W(n; \nabla n) = k_1 J_1 + k_2 J_2 + k_3 J_3 + (k_2 + k_4) J_4$ , auch Frank'sche Formel genannt, wird in der Oseen-Frank-Theorie auf andere Weise hergeleitet (Vgl. [11] Kap. 3.1-3.3). Wir haben also eine direkte Verbindung der Energieformeln beider Theorien gefunden.

Wir wollen zeigen, dass auch die Funktion  $W$  isotrop ist, d. h. dass gilt:

$$W(Rn; R(\nabla n)R) = W(n; \nabla n) \quad \text{für alle } R \in O(3) \quad .$$

Um zu sehen, dass diese Gleichung überhaupt sinnvoll ist benötigen wir die folgende Aussage:

**Lemma 4.14.** Sei  $n \in \mathbb{S}^2$ ,  $R \in O(3)$  und  $n^* := Rn$  und für alle  $x \in \mathbb{R}^3$  gebe es ein  $z \in \mathbb{R}^3$  mit  $z = Rx$ .

Dann gilt

$$\nabla_z n^* = R(\nabla_x n)R^T \quad .$$

**Beweis:** Wegen

$$x = R^T z$$

gilt

$$\frac{dx}{dz} = R^T \quad \text{bzw.} \quad \frac{\partial x_i}{\partial z_j} = (R^T)_{ij} \quad .$$

Hieraus ergibt sich

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_i^*}{\partial z_j} &= \frac{\partial}{\partial z_j} \sum_k (R_{ik} n_k(x)) = \sum_l \frac{\partial}{\partial x_l} \frac{\partial x_l}{\partial z_j} \sum_k (R_{ik} n_k(x)) \\ &= \sum_{k,l} \frac{\partial}{\partial x_l} (R_{lj}^T R_{ik} n_k(x)) = \sum_{k,l} R_{ik} \frac{\partial n_k(x)}{\partial x_l} R_{lj}^T \\ &= \sum_{k,l} R_{ik} n_{k,j} R_{lj}^T \quad . \end{aligned}$$

Also gilt:

$$\nabla_z n^* = R(\nabla_x n)R^T \quad .$$

**Satz 4.15.** Die Funktionen  $J_1, \dots, J_4$  sind isotrop.

**Beweis:** Mit  $\operatorname{div}(n) = \operatorname{tr}(\nabla n)$  ist die Aussage für  $J_1$  und  $J_4$  klar, da diese sich als Funktionen der Hauptinvarianten von  $\nabla n$  darstellen lassen.

Betrachte

$$J_3 = \|n \times \operatorname{curl}(n)\|^2 \stackrel{(20)}{=} \|(\nabla n)n\|^2 \quad .$$

Wegen

$$\begin{aligned} \|Q(\nabla n)Q^T Qn\|^2 &= \|Q(\nabla n)n\|^2 = \langle Q(\nabla n)n; Q(\nabla n)n \rangle^2 \\ &= \langle (\nabla n)n; (\nabla n)n \rangle^2 = \|(\nabla n)n\|^2 \end{aligned}$$

ist also  $J_3$  ebenfalls isotrop.

Außerdem gilt

$$\|Q(\nabla n)Q^T\|^2 = \langle Q(\nabla n)Q^T; Q(\nabla n)Q^T \rangle^2 = \langle \nabla n; \nabla n \rangle^2 = \|\nabla n\|^2$$

und damit ist  $J_4$  wegen (22) als Summe isotroper Funktionen ebenfalls isotrop.

**Folgerung 4.16.** Damit ist auch  $W(n; \nabla n)$  isotrop, wiederum als Summe isotroper Funktionen.

**Definition.** Sei  $n \in \mathbb{S}^2$ .

Definiere

$$L(n; \mathbb{R}^3) := \{A \in \mathbb{R}^{3 \times 3} | A^T n = 0\} \quad .$$

Für die folgenden Überlegungen erweitern wir den Definitionsbereich von  $W(n; \cdot)$  auf  $L(n; \mathbb{R}^3)$ . Das ist sinnvoll, da  $\nabla n \in L(n; \mathbb{R}^3)$  für alle  $n \in \mathbb{S}^2$  wegen  $n_{i,j}n_i = 0$ . Außerdem schreiben wir die Frank'sche Formel mit Hilfe der folgenden Zusammenhänge um:

$$\begin{aligned} J_1 &= (\operatorname{div}(n))^2 = (\operatorname{tr}(\nabla n))^2 \\ J_2 &\stackrel{(20);(22)}{=} \langle n; \operatorname{curl}(n) \rangle = \|\nabla n\|^2 - \operatorname{tr}((\nabla n)^2) - \|(\nabla n)n\|^2 \\ J_3 &\stackrel{(20)}{=} \|n \times \operatorname{curl}(n)\|^2 = \|(\nabla n)n\|^2 \\ J_4 &= \operatorname{tr}((\nabla n)^2) - (\operatorname{tr}(\nabla n))^2 \end{aligned}$$

Mit der Erweiterung des Definitionsbereiches ergibt sich die folgende Formel:

$$\begin{aligned} W(n; N) &= k_1(\operatorname{tr}(N))^2 + k_2(\|N\|^2 - \operatorname{tr}(N^2) - \|Nn\|^2) \\ &\quad + k_3\|Nn\|^2 + (k_2 + k_4)(\operatorname{tr}(N^2) - (\operatorname{tr}(N))^2) \end{aligned} \quad (26)$$

**Lemma 4.17.** *Sei  $W(n; \cdot)$  für ein  $n \in \mathbb{S}^2$  positiv definit auf  $L(n; \mathbb{R}^3)$ , d. h. es gilt*

$$W(n; N) \geq 0 \quad \text{für alle } N \in L(n; \mathbb{R}^3) \quad .$$

*Dann ist  $W(n^*; N^*)$  für alle  $n^* \in \mathbb{S}^2$  positiv definit auf  $N^* \in L(n^*; \mathbb{R}^3)$ .*

**Beweis:** Sei  $n^* \in \mathbb{S}^2$  beliebig.

Dann gibt es ein  $R \in \operatorname{SO}(3)$ , so dass

$$n^* = Rn \quad .$$

Sei  $N^* \in L(n^*; \mathbb{R}^3)$ .

Da ebenfalls  $R^T \in \operatorname{SO}(3)$  ist, gilt dann

$$W(n^*; N^*) = W(R^T n^*; R^T N^* R) = W(n; R^T N^* R)$$

mit  $R^T N^* R \in L(n; \mathbb{R}^3)$ , denn

$$(R^T N^* R)^T n = R^T (N^*)^T R n = R^T (N^*)^T n^* = 0 \quad .$$

Nach Voraussetzung gilt also

$$W(n^*; N^*) = W(n; R^T N^* R) \geq 0 \quad .$$

**Satz 4.18** (Die Ericksen'schen Ungleichungen). *Die Franck'sche Formel ist genau dann positiv definit, wenn die Koeffizienten die folgenden Ungleichungen erfüllen:*

$$2k_1 \geq k_2 + k_4 \quad (27)$$

$$k_2 \geq |k_4| \quad (28)$$

$$k_3 \geq 0 \quad . \quad (29)$$

**Beweis:** Wegen Lemma 4.17 genügt es, die Behauptung für ein beliebiges  $n \in \mathbb{S}^2$  zu zeigen. Wähle  $n := e_3$ . Dann muss für alle  $N \in L(e_1; \mathbb{R}^3)$  gelten:

$$\begin{pmatrix} N_{11} & N_{21} & N_{31} \\ N_{12} & N_{22} & N_{32} \\ N_{13} & N_{23} & N_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} .$$

Insbesondere gilt also

$$N_{31} = N_{32} = N_{33} = 0 .$$

Hieraus folgt:

$$\begin{aligned} \operatorname{tr}(N) &= N_{11} + N_{22} , \\ \|Nn\|^2 &= N_{13}^2 + N_{23}^2 \end{aligned}$$

und

$$(N^2)_{ij} = \sum_{k=1}^3 N_{ik} N_{kj} .$$

Daraus ergibt sich für die Spur:

$$\operatorname{tr}(N^2) = N_{11}^2 + 2N_{12}N_{21} + N_{22}^2 .$$

Schließlich gilt noch:

$$\begin{aligned} J_2 &= \|N\|^2 - \operatorname{tr}(N^2) - \|Nn\|^2 \\ &= N_{11}^2 + N_{12}^2 + N_{21}^2 + N_{22}^2 + N_{23} + N_{32} \\ &\quad - (N_{11}^2 + 2N_{12}N_{21} + N_{22}^2) - (N_{13}^2 + N_{23}^2) \\ &= N_{12}^2 - 2N_{12}N_{21} + N_{22}^2 \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} J_4 &= \operatorname{tr}(N^2) + (\operatorname{tr}(N))^2 \\ &= N_{11}^2 + 2N_{11}N_{22} + N_{22}^2 - (N_{11} + 2N_{12}N_{21} + N_{22}^2) \\ &= 2(N_{11}N_{22} - N_{12}N_{21}) . \end{aligned}$$

Hiermit ergibt sich für die Frank'sche Formel

$$\begin{aligned} W(n; N) &= k_1(N_{11}^2 + 2N_{11}N_{22} + N_{22}^2) + k_2(N_{12}^2 - 2N_{12}N_{21} + N_{21}^2) \\ &\quad + k_3(N_{13}^2 + N_{23}^2) + 2(k_2 + k_4)(N_{11}N_{22} - N_{12}N_{21}) . \end{aligned}$$

Umsortieren ergibt

$$\begin{aligned}
 W(n; N) &= \underbrace{k_1(N_{11}^2 + N_{22}^2) + 2(k_1 - k_2 - k_4)N_{11}N_{22}}_{:=S_1} \\
 &\quad + \underbrace{k_2(N_{12}^2 + N_{21}^2) + 2(k_4 + k_2 - k_2)N_{12}N_{21}}_{:=S_2} \\
 &\quad + \underbrace{k_3(N_{13}^2 + N_{23}^2)}_{:=S_3} .
 \end{aligned}$$

Diese Gleichung ist genau dann positiv definit, wenn die Summanden  $S_1$ ,  $S_2$  und  $S_3$  positiv definit sind. Dies sieht man ein, wenn man  $N_{11}$  und  $N_{22}$ , oder  $N_{12}$  und  $N_{21}$ , oder  $N_{13}$  und  $N_{23}$  gleich Null setzt.

Es ist leicht zu sehen, dass  $S_3$  genau dann positiv definit ist, wenn (29) erfüllt ist. Außerdem haben  $S_1$  und  $S_2$  beide die Form

$$S(x; y) = k(x^2 + y^2) + 2hxy \quad .$$

Für  $x = y = 0$  ist offensichtlich

$$S(x; y) = 0 \quad .$$

Diese Funktion ist also genau dann positiv definit, wenn sie in  $(0; 0)$  ihr globales Minimum hat. Berechne hierzu:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial S}{\partial x} = 2kx + 2hy = 0 \quad \text{und} \quad \frac{\partial S}{\partial y} = 2ky + 2hx = 0 \\
 \Leftrightarrow \quad kx = -hy \quad \text{und} \quad ky = -hx \quad .
 \end{aligned}$$

Mögliche Minima treten also entweder auf, wenn  $k = -h$  und  $x = y$  ist, oder wenn  $x = y = 0$  ist. Im ersten Fall ergibt sich

$$S(x; y) = k(x^2 - 2xy + y^2) = k(x - y)^2 \geq 0 \quad \text{für } k \geq 0 \quad .$$

$S$  kann also nur dann positiv definit sein, wenn  $k \geq 0$  ist. Betrachten wir nun die Hesse-Matrix

$$H = \begin{pmatrix} 2k & 2h \\ 2h & 2k \end{pmatrix}$$

Diese ist genau dann positiv definit, wenn gilt:

$$2k \geq 0 \quad \text{und} \quad \det(H) \geq 0 \quad .$$



Dies ist genau dann der Fall, wenn

$$k \geq 0 \quad \text{und} \quad k^2 \geq h^2$$

ist. Zusammenfassend kann man sagen, dass  $S$  genau dann positiv definit ist, wenn gilt:

$$k \geq |h| \quad .$$

Aus  $S_2 \geq 0$  folgt also (28). Hieraus folgt direkt:

$$k_2 - k_4 \geq 0 \quad . \tag{30}$$

Für  $S_1$  ergibt sich nun:

$$k_1 \geq |k_1 - (k_2 + k_4)| \quad .$$

1. Fall:  $k_1 \geq k_2 + k_4$

$$k_1 \geq k_1 - (k_2 + k_4)$$

steht im Widerspruch zu (30). 2. Fall:  $k_1 \leq k_2 + k_4$

$$k_1 \geq k_2 + k_4 - k_1$$

und es ergibt sich (27).

**Beispiel:** 1. Sei  $W(n; \nabla n) := \|\text{dev}(\text{sym}(\nabla n))\|^2$ .  
Dann sind die Ericksen'schen Ungleichungen erfüllt.  
Zum Beweis verwenden wir die Abkürzungen

$$\begin{aligned} N &:= \nabla n \\ S &:= \text{sym}(N) \\ W &:= \text{skew}(N) \quad . \end{aligned}$$

und stellen die Gleichungen (24) und (25) um:

$$\|S\|^2 = \|W\|^2 + \text{tr}(N^2) \quad \text{und} \quad \|S\|^2 = \|N\|^2 - \|W\|^2 \quad .$$

Hiermit ergibt sich:

$$\begin{aligned}
\|\text{dev}(S)\|^2 &= \left\langle S - \frac{1}{3}\text{tr}(\mathbf{Id}); S - \frac{1}{3}\text{tr}(\mathbf{Id}) \right\rangle \\
&= \|S\|^2 - \frac{1}{3}\text{tr}(S) \left( \underbrace{\langle S; \mathbf{Id} \rangle}_{=\text{tr}(S)} + \underbrace{\langle \mathbf{Id}; S \rangle}_{=\text{tr}(S)} \right) \\
&\quad + \frac{1}{9}(\text{tr}(S))^2 \cdot 3 \\
&= \frac{1}{2}(\|S\|^2 + \|S\|^2) - \frac{2}{3}(\text{tr}(S))^2 + \frac{1}{3}(\text{tr}(S))^2 \\
&= \frac{1}{2}(\|W\|^2 + \text{tr}(N^2) + \|N\|^2 - \|W\|^2) \\
&\quad - \frac{1}{3}(\text{tr}(S))^2 \\
&= \frac{1}{2}(\text{tr}(N^2) + \|N\|^2) - \frac{1}{3}(\text{tr}(N))^2 \\
&\stackrel{(22)}{=} \text{tr}(N^2) + \frac{1}{2}\langle n; \text{curl}(n) \rangle \\
&\quad + \frac{1}{2}\|n \times \text{curl}(n)\|^2 - \frac{1}{3}(\text{div}(n))^2 \\
&= \frac{2}{3}(\text{div}(n))^2 + \frac{1}{2}\langle n; \text{curl}(n) \rangle \\
&\quad + \frac{1}{2}\|n \times \text{curl}(n)\|^2 + (\text{tr}(N^2) - (\text{div}(n))^2) \\
&= \frac{2}{3}J_1 + \frac{1}{2}J_2 + \frac{1}{2}J_3 + J_4 \quad .
\end{aligned}$$

Dies entspricht der Frank'schen Formel mit

$$k_1 = \frac{2}{3} \quad ; \quad k_2 = k_3 = k_4 = \frac{1}{2} \quad .$$

Offensichtlich sind die Ericksen'schen Ungleichungen erfüllt, denn

$$\begin{aligned}
2k_1 &= \frac{4}{3} \geq 1 = k_2 + k_4 \\
k_2 &= \frac{1}{2} \geq \frac{1}{2} = |k_4| \\
k_3 &= \frac{1}{2} \geq 0 \quad .
\end{aligned}$$

2. Seien  $k_1 = k_2 = k_3$  und  $k_4 = 0$ .

Dieser Fall wird Abschätzung mit einer Konstanten genannt. Auch

hier sind offensichtlich die Ericksen'schen Ungleichungen erfüllt. Mit den so gewählten Koeffizienten bekommt die Frank'sche Formel die einfache Form

$$\begin{aligned} W(n; \nabla n) &= k_1(\operatorname{div}(n))^2 + k_1\langle n; \operatorname{curl}(n) \rangle^2 + k_1\|n \times \operatorname{curl}(n)\|^2 \\ &\quad + k_1(\operatorname{tr}(N^2) - (\operatorname{div}(n))^2) \\ &= k_1(\langle n; \operatorname{curl}(n) \rangle^2 + \|n \times \operatorname{curl}(n)\|^2 + \operatorname{tr}(N^2)) \\ &\stackrel{(22)}{=} k_1\|\nabla n\|^2 \quad . \end{aligned}$$

Diese ist sehr hilfreich bei ersten qualitativen Beschreibungen des Flüssigkristalls. Zum Beispiel ist in dieser Form das Integral

$$\int_{\Omega} W(n; \nabla n) \, dx$$

bereits koerziv und mit Hilfe der Poincaré'schen Ungleichung erhält man bei fester Verankerung

$$\int_{\Omega} W(n; \nabla n) \, dx = \int_{\Omega} k_1\|\nabla n\|^2 \, dx \geq \int_{\Omega} k\|\nabla n\|^2 \, dx \quad .$$

Des weiteren sieht man sehr schnell, dass der Flüssigkristall ohne Verankerung, d. h. wenn  $n$  am Rand beliebige Werte annehmen kann, sein Energieminimum für  $\nabla n = 0$  annimmt. Dies lässt sich auch in der Form (26) leicht nachprüfen, hier sieht man es aber direkt. Zur quantitativen Beschreibung ist diese Abschätzung allerdings eher wenig geeignet.

Zu guter Letzt wollen wir noch folgendes Ergebnis zeigen:

**Satz 4.19.** Sei  $n \in \mathbb{S}^2$ .

Dann ist

$$J_4 = \operatorname{tr}((\nabla n)^2) - (\operatorname{div}(n))^2$$

ein Null-Lagrangian, d. h.

$$\int_{\Omega} J_4 \, dx$$

ist nur von seinen Randwerten abhängig. Genauer gesagt gilt:

$$\int_{\Omega} J_4 \, dx = \int_{\partial\Omega} \langle (\nabla n)n - \operatorname{div}(n)n; v(x) \rangle \, dx \quad .$$

Hierbei ist  $v$  die äußere Flächennormale.

**Beweis:** Wir erinnern zunächst daran, dass

$$(\nabla n)^2_{ij} = \sum_k n_{i,k} n_{k,j}$$

und demnach

$$\text{tr}((\nabla n)^2) = \sum_{i,k} n_{i,k} n_{k,i} \quad .$$

Außerdem gilt:

$$\text{div}(n) = n_{i,i} \quad ,$$

also

$$(\text{div}(n))^2 = \sum_i n_{i,i} \sum_k n_{k,k} = \sum_{i,k} n_{i,i} n_{k,k} \quad .$$

Insgesamt ergibt sich also:

$$\begin{aligned} \text{tr}((\nabla n)^2) - (\text{div}(n))^2 &= \sum_{i,k} (n_{i,k} n_{k,i} - n_{i,i} n_{k,k}) \\ &= \sum_{i,k} (n_{i,k} n_{k,i} + \underbrace{n_i n_{k,ik} - n_i n_{k,ki} - n_{i,i} n_{k,k}}_{=0}) \\ &= \sum_{i,k} \left( \frac{\partial}{\partial x_k} (n_i n_{k,i}) - \frac{\partial}{\partial x_i} (n_i n_{k,k}) \right) \\ &= \sum_j \frac{\partial}{\partial x_k} \sum_i n_{k,i} n_i - \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} \sum_k (n_{k,k}) n_i \\ &= \text{div}((\nabla n)n - (\text{div}(n))n) \quad . \end{aligned}$$

Also gilt nach dem Gauß'schen Integralsatz

$$\int_{\Omega} \text{tr}((\nabla n)^2) - (\text{div}(n))^2 \, dx = \int_{\partial\Omega} \langle (\nabla n)n - (\text{div}(n))n; v(x) \rangle \, dx \quad .$$

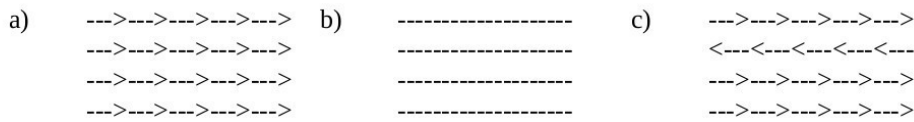
Ein Vergleich mit den isotropen Funktionen aus der Landau-de-Gennes-Theorie zeigt, dass

$$I_3 - I_2 = J_4$$

gilt. Damit ist gezeigt, dass auch  $I_3 - I_2$  ein Null-Lagrangian ist.

## 5 Orientierbarkeit

In diesem Kapitel wollen wir uns mit der bereits angesprochenen Orientierbarkeit befassen, d. h. wir stellen uns die Frage, unter welchen Umständen man ohne künstlich Defekte zu erzeugen von der Landau-de-Gennes-Theorie zu Osseen-Frank-Theorie übergehen kann. Letztere beschreibt die Orientierung der Moleküle mit Hilfe eines Vektors  $n$ , erstere mit Hilfe der de-Gennes-Matrix  $Q$ , die wie bereits beschrieben zwei gegenüberliegende Punkte der Einheitssphäre repräsentiert. Bildlich gesprochen stellen wir uns also die Frage, wie man von einem Geradenfeld zu einem Vektorfeld übergehen kann, ohne an Regularität einzubüßen. Umgekehrt ist das kein Problem, man muss nur die Vektorpfeile "ausradieren". Die folgende Graphik zeigt das Problem an einem einfachen Beispiel: Von a) nach b) kommt man ohne Probleme, will man aber b) in ein Vektorfeld umwandeln, kann es sein, dass man bei ungeschickter Wahl der Orientierung z. B. zu c) kommt und damit Unstetigkeiten erzeugt, die vorher nicht da waren.



Diese Frage wird in der Topologie unter dem Begriff der Liftung behandelt. Hiermit werden wir uns im nächsten Kapitel beschäftigen. In diesem Kapitel sei, wenn nicht anders definiert, stets  $\Omega \subseteq \mathbb{R}^m$  und

$$\tilde{n} : \Omega \rightarrow \mathbb{S}^{m-1} := \{y \in \mathbb{R}^m : |y| = 1\} \quad .$$

**Definition.** Sei  $Q : \mathbb{S}^{m-1} \rightarrow \mathbb{R}^{m \times m}$  eine stetige Abbildung.

Dann nennt man  $Q$  orientierbar, wenn es ein stetiges Vektorfeld  $n : \Omega \rightarrow \mathbb{S}^{m-1}$  gibt mit

$$Q(\tilde{n}(x)) = Q(n(x)) \quad \text{für alle } x \in \Omega \quad .$$

**Beispiel:** Sei  $m = 2$  und  $Q := \tilde{n} \otimes \tilde{n}$ .

Natürlich ist  $Q$  orientierbar, falls  $\tilde{n}$  bereits stetig ist. Betrachten wir also ein Beispiel, in dem  $\tilde{n}$  nicht stetig ist:

$$\tilde{n}(x) := \left\{ \begin{array}{ll} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} & \text{für } x \in \mathbb{Q} \\ \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix} & \text{für } x \in \mathbb{R} \setminus \mathbb{Q} \end{array} \right\} \quad .$$

Dann gilt

$$Q = \tilde{n} \otimes \tilde{n} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} .$$

Also ist  $Q$  orientierbar mit

$$n(x) := \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} .$$

**Lemma 5.1.** *Sei  $Q := \tilde{n} \otimes \tilde{n}$ .*

*Dann gibt es in jedem Punkt  $x \in \Omega$  genau zwei Möglichkeiten,  $n(x)$  so zu wählen, dass*

$$Q(n(x)) = Q(\tilde{n}(x)) ,$$

*genau genommen sind dies  $\tilde{n}(x)$  und  $-\tilde{n}(x)$ .*

**Beweis:** Sei  $x \in \Omega$  beliebig.

Es muss gelten:

$$n(x) \otimes n(x) = Q(x) = \tilde{n}(x) \otimes \tilde{n}(x) .$$

Für  $m = 2$  bedeutet das:

$$\begin{pmatrix} n_1^2(x) & n_1(x)n_2(x) \\ n_2(x)n_1(x) & n_2^2(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{n}_1^2(x) & \tilde{n}_1(x)\tilde{n}_2(x) \\ \tilde{n}_2(x)\tilde{n}_1(x) & \tilde{n}_2^2(x) \end{pmatrix} .$$

Für beliebige  $m \in \mathbb{N}$  ergeben sich entsprechend

$$|n_i(x)| = |\tilde{n}_i(x)| \quad \text{für } i = 1; \dots; m \quad (31)$$

$$n_i(x)n_j(x) = \tilde{n}_i(x)\tilde{n}_j(x) \quad \text{für } i \neq j . \quad (32)$$

Da  $\tilde{n}(x) \in \mathbb{S}^{m-1}$  ist, gibt es ein  $i \in \{1; \dots; m\}$  mit  $\tilde{n}_i(x) \neq 0$ . Für dieses  $i$  ist Gleichung (31) erfüllt, falls

$$n_i(x) = \pm \tilde{n}_i(x) .$$

Eingesetzt in (32) ergibt sich

$$\pm \tilde{n}_i(x)n_j(x) = \tilde{n}_i(x)\tilde{n}_j(x) ,$$

also gilt, da  $\tilde{n}_i(x) \neq 0$  ist

$$n_j(x) = \pm \tilde{n}_j(x) .$$

Damit ist Gleichung (31) auch für  $j$  erfüllt und es muss gelten:

$$n(x) = \pm \tilde{n}(x) .$$

In diesem, so wie im nächsten Kapitel betrachten wir  $s$  als Konstante in  $\mathbb{R}$ .

**Folgerung 5.2.** *Die Aussagen von Lemma 5.1 gelten analog auch für*

$$Q := s(\operatorname{dev}(n \otimes n)) = s \left( n \otimes n - \frac{1}{m} \mathbf{Id} \right) \quad .$$

**Beweis:** Sei  $x \in \Omega$  beliebig.

Dann muss gelten:

$$s \left( n(x) \otimes n(x) - \frac{1}{m} \mathbf{Id} \right) = s \left( \tilde{n}(x) \otimes \tilde{n}(x) - \frac{1}{m} \mathbf{Id} \right) \quad .$$

Hieraus ergeben sich direkt Gleichungen (31) und (32) und es folgt die Behauptung.

Ziel ist es nun, zu vorgegebenen  $n(x)$  und  $\tilde{n}(y)$ , das  $n(y)$  zu finden, das am nächsten an  $n(x)$  liegt, d. h. eher in Richtung  $n(x)$  orientiert ist, als  $-n(y)$ . Wie wir wissen, ist das Skalarprodukt zweier Vektoren, die in einem Winkel kleiner  $90^\circ$  zu einander stehen positiv, bei einem Winkel größer  $90^\circ$  negativ. Daher erscheint die Wahl des  $n(y)$  sinnvoll, für das

$$\langle n(x); n(y) \rangle > 0$$

ist.

**Lemma 5.3.** *Sei  $Q$  wie in Lemma 5.1,  $x_0$  ein Startpunkt mit festgelegtem  $n(x_0)$ ,  $\varepsilon \in (0; \sqrt{2})$  und  $x \in \Omega$  mit  $|Q(x_0) - Q(x)| < \varepsilon$ . Dann gibt es ein  $n^+(x)$  mit (31), (32) und*

$$\langle n(x_0); n^+(x) \rangle > \sqrt{1 - \frac{\varepsilon^2}{2}} > 0$$

und ein  $n^-(x)$  mit (31), (32) und

$$\langle n(x_0); n^-(x) \rangle < -\sqrt{1 - \frac{\varepsilon^2}{2}} < 0 \quad .$$

**Beweis:**  $n^+(x)$  und  $n^-(x)$  entsprechen natürlich  $\pm \tilde{n}(x)$  in jedem Punkt  $x$ , da nur  $\pm \tilde{n}(x)$  (31) und (32) erfüllen. Außerdem gilt:

$$|Q(x_0) - Q(x)| = |n(x_0) \otimes n(x_0) - n(x) \otimes n(x)| < \varepsilon \quad .$$

Daraus folgt:

$$\begin{aligned}
\varepsilon^2 &> |n(x_0) \otimes n(x_0) - n(x) \otimes n(x)|^2 \\
&= |\langle n(x_0); n(x_0) \rangle^2 - 2\langle n(x_0); n(x) \rangle^2 + \langle n(x); n(x) \rangle^2| \\
&= |1 - 2\langle n(x_0); n(x) \rangle^2 + 1| = |2(1 - \langle n(x_0); n(x) \rangle^2)| \\
&\stackrel{CSU}{=} 2(1 - \langle n(x_0); n(x) \rangle^2) > 0 \quad .
\end{aligned}$$

Also gilt:

$$\sqrt{1 - \frac{\varepsilon^2}{2}} < |\langle n(x_0); n(x) \rangle| \quad ,$$

und damit

$$\langle n(x_0); n(x) \rangle > \sqrt{1 - \frac{\varepsilon^2}{2}} > 0 \quad \vee \quad \langle n(x_0); n(x) \rangle < -\sqrt{1 - \frac{\varepsilon^2}{2}} < 0 \quad .$$

Wenn eine der beiden Möglichkeiten für  $n(x)$  gilt, so tritt wegen

$$\langle n(x_0); -n(x) \rangle = -\langle n(x_0); n(x) \rangle$$

für  $-n(x)$  die andere ein.

**Folgerung 5.4.** *Die Aussagen von Lemma 5.3 gelten analog auch für*

$$Q(x) := s(\text{dev}(\tilde{n}(x) \otimes \tilde{n}(x)) \quad ,$$

*allerdings ist  $\varepsilon$  mit  $|s| \cdot \varepsilon$  zu ersetzen.*

**Beweis:** Es gilt:

$$\begin{aligned}
|Q(x_0) - Q(x)| &= \left| s \left( n(x_0) \otimes n(x_0) - \frac{1}{m} \mathbf{Id} - n(x) \otimes n(x) + \frac{1}{m} \mathbf{Id} \right) \right| \\
&= |s(n(x_0) \otimes n(x_0) - n(x) \otimes n(x))| \\
&= |s| \cdot |n(x_0) \otimes n(x_0) - n(x) \otimes n(x)| < |s| \cdot \varepsilon \quad ,
\end{aligned}$$

hieraus folgt:

$$|n(x_0) \otimes n(x_0) - n(x) \otimes n(x)| < \varepsilon$$

und ab hier läuft der Beweis analog zu Lemma 5.3.

Wie man leicht sieht, lässt sich die Voraussetzung  $|Q(x_0) - Q(x)| < \varepsilon$  durch die Stetigkeit von  $Q$  regulieren. Der Gedanke liegt also nahe, dass  $n^+$  bei stetigem  $Q$  die gesuchte stetige Funktion ist. Dass dies aber nicht immer der Fall ist, zeigt Abb. 6. Hier liegt offenbar ein stetiges Geradenfeld vor.



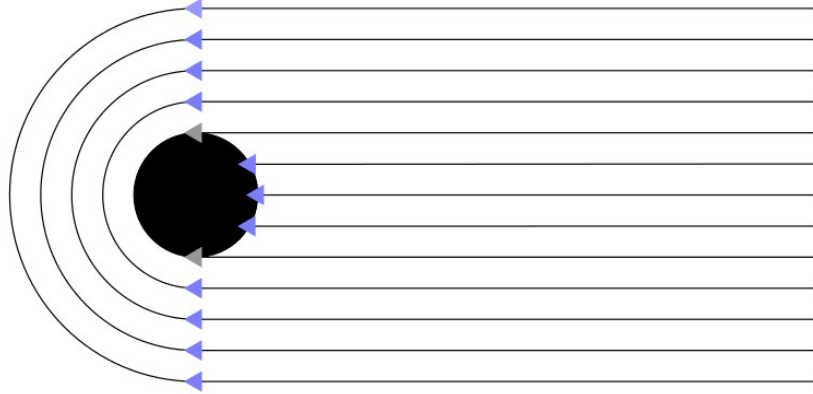


Abbildung 6: Stetiges Geradenfeld, das nicht orientierbar ist

Wollen wir hieraus ein stetiges Vektorfeld machen, so müssen die Moleküle rechts vom „Loch“ alle in dieselbe Richtung zeigen (in der Abbildung nach links). Umläuft man aber das „Loch“ entlang eines Weges, so kehrt sich die Orientierung hierbei um. Es lässt sich also kein stetiges Vektorfeld dieser Form konstruieren.

Offenbar hängt die Stetigkeit von  $n$  also nicht nur von  $Q$ , sondern auch von der Form von  $\Omega$  ab. Wir zeigen zunächst, dass  $n^+$  entlang eines Weges stetig ist.

**Definition.** Sei  $I := [a; b] \in \mathbb{R}$

Ein Weg in  $\mathbb{R}^m$  ist eine stetige Funktion  $\gamma : I \rightarrow \mathbb{R}^m$ .

In der Topologie ist es üblich, Wege so zu parametrisieren, dass  $I := [0; 1]$ . Das funktioniert problemlos über die Funktion  $s(t) := a(1 - t) + bt$  bzw. deren Umkehrfunktion  $s^{-1}$ .

**Lemma 5.5.**

Sei  $\gamma : [0; 1] \rightarrow \Omega$  ein Weg und  $Q(x) := s(\text{dev}(\tilde{n}(x) \otimes \tilde{n}(x)))$  stetig.

Dann ist  $Q$  entlang der Kurve  $\gamma(t)$  orientierbar, d. h. es gibt ein stetiges  $n$  mit

$$Q(\tilde{n}(x)) = Q(n(x)) \quad \text{für alle } x \in \gamma([0; 1]) \quad .$$

**Zusatz:** Seien zusätzlich  $\hat{x} \in \Omega$  und  $\delta$  so, dass für alle  $\hat{\tau} \in [\tau; \tau + \delta]$  mit  $\tau \in [0; 1)$  gilt:

$$|Q(\hat{x}) - Q(\gamma(\hat{\tau}))| < |\delta| \cdot \varepsilon \quad \text{für alle } \varepsilon \in (0; \sqrt{2})$$

und  $\hat{n}(\hat{x})$  mit  $Q(\tilde{n}(\hat{x})) = Q(\hat{n}(\hat{x}))$ .

Dann gilt entweder

$$|\hat{n}(\hat{x}) - n(\gamma(\hat{\tau}))| < \varepsilon \quad \text{für alle } \hat{\tau} \in [\tau; \tau + \delta]$$

oder

$$|\hat{n}(\hat{x}) + n(\gamma(\hat{\tau}))| > \varepsilon \quad \text{für alle } \hat{\tau} \in [\tau; \tau + \delta] \quad .$$

**Beweis:** Da  $Q$  und  $\gamma$  stetig sind, ist auch  $Q \circ \gamma$  stetig und, da auf einem kompakten Intervall definiert, sogar gleichmäßig stetig. Im Folgenden schreiben wir statt  $Q(\gamma(t))$  und  $n(\gamma(t))$  der besseren Übersicht halber  $Q(t)$  bzw.  $n(t)$ . Wegen der gleichmäßigen Stetigkeit gibt es ein  $\delta > 0$ , so dass für alle  $\tau \in [0; 1]$  gilt:

$$|Q(\tau) - Q(\hat{\tau})| < |s| \cdot \varepsilon \quad \text{für alle } \hat{\tau} \in [\tau; \tau + \delta] \quad . \quad (33)$$

Sei nun  $x_0 = \gamma(0)$  der Startpunkt der Kurve mit festgelegtem  $n(x_0)$  aus  $\{-\tilde{n}(x_0); \tilde{n}(x_0)\}$ .

Dann existiert wegen (33) auf dem Intervall  $[0; \delta]$  ein  $n^+$  wie in Lemma 5.3. Dieses  $n^+ =: n$  ist die eindeutig bestimmte stetige Fortsetzung von  $n(x_0)$  auf  $\gamma$ . Wählt man im Startpunkt die andere Möglichkeit  $-n(x_0)$ , die Lemma 5.3 erfüllt, so ist die stetige Fortsetzung genau  $-n$ .

Stetigkeit: Annahme:  $n^+$  ist nicht auf ganz  $[0; \delta]$  stetig.

Dann gibt es ein  $t \in [0; \delta]$  und eine Folge  $t_i \rightarrow t$ , so dass  $n^+(t_i)$  nicht gegen  $n^+(t)$  konvergiert. Da aber  $Q$  und  $\gamma$  stetig sind, gilt

$$Q(t_i) \rightarrow Q(t) \quad .$$

Also muss es wegen Lemma 5.3 eine Teilfolge  $t_{i_j} \rightarrow t$  geben, so dass

$$n^+(t_{i_j}) \rightarrow n^-(t) \quad .$$

Dann gilt aber auch

$$0 < \langle n(0); n^+(t_{i_j}) \rangle \rightarrow \langle n(0); n^-(t) \rangle$$

und daraus folgt:

$$\langle n(0); n^-(t) \rangle \geq 0 \quad .$$

Das steht allerdings im Widerspruch zu Lemma 5.3.

Eindeutigkeit:

Angenommen, es gäbe eine weitere stetige Fortsetzung  $n^*$  von  $n(x_0)$ ,

die nicht auf dem kompletten Intervall  $[0; \delta]$  mit  $n^+$  übereinstimmt.  
Dann definiere

$$\hat{t} := \inf_{t \in [0; \delta]} \{n^*(t) \neq n^+(t)\} \quad .$$

1. Fall:  $n^*(\hat{t}) = n^+(\hat{t})$ .

Dann gibt es nach Definition des Infimums für alle  $\delta_i > 0$  ein  $t_i \in [\hat{t}; \hat{t} + \delta_i]$  mit

$$n^*(t_i) \neq n^+(t_i) \quad .$$

Nach Lemma 5.3 gilt für diese  $t_i$

$$n^*(t_i) = n^-(t_i) \quad .$$

Für  $\delta_i \rightarrow 0$  ergibt sich eine Folge  $t_i \rightarrow \hat{t}$ , für die wegen der Stetigkeit von  $n^*$  gilt:

$$n^-(t_i) = n^*(t_i) \rightarrow n^*(\hat{t}) = n^+(\hat{t}) \quad .$$

Also gilt für  $\hat{t} + \delta_i < 1$ :

$$0 > \langle n(0); n^-(t_i) \rangle \rightarrow \langle n(0); n^+(\hat{t}) \rangle$$

und damit

$$\langle n(0); n^+(\hat{t}) \rangle \leq 0 \quad ,$$

was im Widerspruch zu Lemma 5.3 steht.

2. Fall:  $n^*(\hat{t}) \neq n^+(\hat{t})$ .

Dann ist wegen Lemma 5.3

$$n^*(\hat{t}) = n^-(\hat{t}) \quad .$$

und wegen der Stetigkeit von  $n^*$  und  $n^+$  gilt für  $t \leq \hat{t}$ :

$$n^*(\hat{t}) = \lim_{t \rightarrow \hat{t}} (n^*(t)) = \lim_{t \rightarrow \hat{t}} (n^+(t)) = n^+(\hat{t}) \quad \zeta \quad .$$

Setze die Funktion  $n^+$  auf diese Art schrittweise fort auf den Intervallen  $[\delta; 2\delta]; \dots; [j\delta; 1]$ , wobei  $j$  so gewählt sei, dass  $1 \in [j; j+1]$ .

**Beweis des Zusatzes:** Sei zunächst  $\hat{t}$  ein beliebiger Punkt in  $[\tau; \tau + \delta]$ .

Dann gibt es wegen Lemma 5.3 eine stetige Funktion  $n^+$  mit

$$\langle \hat{n}(\hat{x}); n^+(\hat{t}) \rangle > \sqrt{1 - \frac{\varepsilon^2}{2}} \quad .$$

Da  $n^+$  stetig ist, ist auch

$$\langle \hat{n}(\hat{x}); n^+(\cdot) \rangle$$

stetig. Daher kann es kein  $\hat{\tau} \in [\tau; \tau + \delta]$  geben, für das

$$\langle \tilde{n}(\hat{x}); n^+(\hat{\tau}) \rangle < -\sqrt{1 - \frac{\varepsilon^2}{2}}$$

gilt. Also gilt nach Lemma 5.3 für alle  $\hat{\tau} \in [\tau; \tau + \delta]$

$$\langle \tilde{n}(\hat{x}); n^+(\hat{\tau}) \rangle > \sqrt{1 - \frac{\varepsilon^2}{2}} \quad .$$

Hieraus folgt:

$$\begin{aligned} |\tilde{n}(\hat{x}) - n^+(\hat{\tau})|^2 &= ||\tilde{n}(\hat{x})|^2 - 2\langle \tilde{n}(\hat{x}); n^+(\hat{\tau}) \rangle + |n^+(\hat{\tau})|^2| \\ &= 2(1 - \langle \tilde{n}(\hat{x}); n^+(\hat{\tau}) \rangle) < 2\left(1 - \sqrt{1 - \frac{\varepsilon^2}{2}}\right) \\ &< 2\left(1 - \left(1 - \frac{\varepsilon^2}{2}\right)\right) = 2\left(\frac{\varepsilon^2}{2}\right) = \varepsilon^2 \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} |\tilde{n}(\hat{x}) + n^+(\hat{\tau})|^2 &= 2(1 + \langle \tilde{n}(\hat{x}); n^+(\hat{\tau}) \rangle) \\ &> 2\left(1 + \sqrt{1 - \frac{\varepsilon^2}{2}}\right) > 2 > \varepsilon^2 \end{aligned}$$

Nun ist entweder  $n = n^+$ , dann gilt

$$|\tilde{n}(\hat{x}) - n(\hat{\tau})| < \varepsilon \quad \vee \quad |\tilde{n}(\hat{x}) + n(\hat{\tau})| > \varepsilon \quad ,$$

oder  $n = n^- = -n^+$ , dann gilt

$$|\tilde{n}(\hat{x}) + n(\hat{\tau})| < \varepsilon \quad \vee \quad |\tilde{n}(\hat{x}) - n(\hat{\tau})| > \varepsilon \quad .$$

**Definition.** Seien  $\gamma_0, \gamma_1 : [0; 1] \rightarrow \Omega$  zwei Wege mit gleichem Anfangs- und Endpunkt, d. h.  $\gamma_0(0) = \gamma_1(0)$  und  $\gamma_0(1) = \gamma_1(1)$ .

$\gamma_0$  und  $\gamma_1$  heißen *homotop*, wenn es eine Abbildung  $H : [0; 1] \times [0; 1] \rightarrow \Omega$  gibt mit den Eigenschaften:

1.  $H$  ist stetig in beiden Variablen.
2. Für alle  $\lambda \in [0; 1]$  ist

$$H(\lambda; 0) = \gamma_0(0) = \gamma_1(0) \quad \text{und} \quad H(\lambda; 1) = \gamma_0(1) = \gamma_1(1) \quad .$$

3. Es gelten  $H(0;t) = \gamma_0(t)$  und  $H(1;t) = \gamma_1(t)$ .

$H$  nennt man dann eine Homotopie.

Häufig verwendet man die Bezeichnung

$$H_\lambda(t) := H(\lambda;t) \quad .$$

Die verschiedenen  $H_\lambda$  sind dann jeweils Wege mit gleichen Anfangs- und Endpunkten und es gilt:

$$\gamma_0 = H_0 \quad \text{und} \quad \gamma_1 = H_1 \quad .$$

Wie man leicht sieht, ist Homotopie eine Äquivalenzrelation.

Zeige die Transitivität: Sei  $\alpha \sim \beta$  und  $\beta \sim \gamma$ .

Dann gibt es Homotopien  $H^{(1)}$  zwischen  $\alpha$  und  $\beta$ , sowie  $H^{(2)}$  zwischen  $\beta$  und  $\gamma$ . Definiere

$$H(\lambda;t) := \left\{ \begin{array}{ll} H^{(1)}(2\lambda;t) & \text{für } \lambda \in [0; \frac{1}{2}] \\ H^{(2)}(2\lambda - 1;t) & \text{für } \lambda \in [\frac{1}{2}; 1] \end{array} \right\}$$

Dann ist  $H$  eine Homotopie zwischen  $\alpha$  und  $\gamma$ .

Außerdem sind  $\alpha$  und  $\gamma$  sogar homotop zu allen  $H_\lambda$ .

**Lemma 5.6.** Sei  $Q := s(\text{dev}(\tilde{n}(x) \otimes \tilde{n}(x)))$  stetig,  $\gamma : [0; 1] \rightarrow \Omega$  ein Weg,  $\gamma_j : [0; 1] \rightarrow \Omega$  eine Folge von Wegen mit

$$\gamma_j \rightarrow \gamma \quad \text{für alle } t \in [0; 1] \quad ,$$

$n_j; n$  gemäß Lemma 5.5 stetige Funktionen auf  $\gamma_j$ , bzw.  $\gamma$  und  $\hat{t} \in [0; 1]$  ein beliebiger Startpunkt.

Dann gibt es ein  $\delta$ , so dass für alle  $\tau \in [0; 1]$  mit  $|\tau - \hat{t}| < \delta$  gilt:

$$n^j(\hat{t}) \rightarrow n(\hat{t}) \quad \Rightarrow \quad n^j(\tau) \rightarrow n(\tau) \quad .$$

Also folgt aus der Konvergenz in  $\hat{t}$  die Konvergenz in der ganzen Umgebung  $U(\hat{t}; \delta)$ .

**Beweis:** Sei  $\varepsilon \in (0; \sqrt{2})$ .

Da  $Q$  und  $\gamma$  stetig sind, gibt es ein  $\delta > 0$ , so dass

$$|Q(\gamma(\hat{t})) - Q(\gamma(\tau))| < |s| \cdot \frac{\varepsilon}{2} \quad \text{für alle } \tau \in U(\hat{t}; \delta) =: U \quad .$$

Mit dem Zusatz von Lemma 5.5 und der Stetigkeit von  $n$  ergeben sich hieraus

$$|n(\hat{t}) - n(\tau)| < \varepsilon \quad \text{für alle } \tau \in U$$

und

$$|n(\hat{t}) + n(\tau)| > \varepsilon \quad \text{für alle } \tau \in U \quad . \quad (34)$$

Da außerdem die Folge  $\gamma_j$  gegen  $\gamma$  konvergiert, konvergiert auch  $Q(\gamma_j)$  gegen  $Q(\gamma)$ . Diese Konvergenz ist, da auf einem kompakten Intervall definiert, gleichmäßig. Also gibt es für alle  $\tau \in U$  ein  $j_0$ , so dass für alle  $k \geq j_0$  gilt:

$$|Q(\gamma_k(\tau)) - Q(\gamma(\tau))| < |s| \cdot \frac{\varepsilon}{2} \quad .$$

Hieraus folgt:

$$\begin{aligned} & |Q(\gamma_k(\tau)) - Q(\gamma(\hat{t}))| \\ & < |Q(\gamma_k(\tau)) - Q(\gamma(\tau))| + |Q(\gamma(\tau)) - Q(\gamma(\hat{t}))| \\ & = |s| \cdot \frac{\varepsilon}{2} + |s| \cdot \frac{\varepsilon}{2} = |s| \cdot \varepsilon \quad \text{für alle } \tau \in U(\hat{t}; \delta) \quad . \end{aligned}$$

Also gilt der Zusatz von Lemma 5.5 auf  $U$  für alle  $\gamma_k$  mit  $k \geq j_0$ . Falls nun gilt

$$n^j(\hat{t}) \rightarrow n(\hat{t}) \quad ,$$

so gibt es ein  $j_1$ , so dass für alle  $k \geq j_1$  gilt:

$$|n^k(\hat{t}) - n(\hat{t})| < \varepsilon \quad .$$

Hieraus folgt:

$$\begin{aligned} |n^k(\hat{t}) + n(\hat{t})| & = |n(\hat{t}) + n(\hat{t}) + n^k(\hat{t}) - n(\hat{t})| \\ & \geq |n(\hat{t}) + n(\hat{t})| - |n^k(\hat{t}) - n(\hat{t})| \\ & > 2|n(\hat{t})| - \varepsilon = 2 - \varepsilon \stackrel{\varepsilon < \sqrt{2}}{>} \varepsilon \quad . \end{aligned}$$

Also gilt nicht für alle  $\tau \in U$

$$|n^k(\tau) + n(\hat{t})| < \varepsilon \quad .$$

Nach dem Zusatz von Lemma 5.5 muss also gelten:

$$|n^k(\tau) - n(\hat{t})| < \varepsilon \quad \text{für alle } \tau \in U \quad .$$

Annahme: Es gibt ein  $\tau \in U$ , so dass  $n^j(\tau)$  nicht gegen  $n(\tau)$  konvergiert. Da aber  $Q(\gamma_j(\tau))$  gegen  $Q(\gamma(\tau))$  konvergiert, gibt es wegen Folgerung 5.2 eine Teilfolge  $\pi(j)$ , so dass

$$n^{\pi(j)}(\tau) \rightarrow -n(\tau) \quad .$$

Hieraus gilt wegen  $\varepsilon > |n^{\pi(j)}(\tau) - n(\hat{t})| \rightarrow |-n(\tau) - n(\hat{t})|$ :

$$|n(\tau) + n(\hat{t})| \leq \varepsilon \quad .$$

Dies steht im Widerspruch zu 34.

Also konvergiert  $n^j(\tau)$  gegen  $n(\tau)$  für alle  $\tau \in U$ .

**Folgerung 5.7.** Sei  $Q$  wie in Lemma 5.6,  $H : [0; 1] \times [0; 1] \rightarrow \Omega$  eine Homotopie und  $n^\lambda$  die jeweils gemäß Lemma 5.5 definierten stetigen Funktionen auf  $H_\lambda(t) := H(\lambda; t)$  mit gleichem Startwert  $n^\lambda(0) = m_0$  für alle  $\lambda \in [0; 1]$ . Dann ist  $h(\lambda; t) := n^\lambda(t)$  ebenfalls eine Homotopie, d. h.  $h$  ist auch bezüglich der ersten Variablen stetig und alle Wege haben den gleichen Endwert

$$n^\lambda(1) = m_1 \quad \text{für alle } \lambda \in [0; 1] \quad .$$

**Beweis:** Sei  $\lambda \in [0; 1]$  beliebig.

Da  $H$  eine Homotopie und damit stetig in der ersten Variablen ist, gibt es eine Folge  $H_{\lambda_j}$  mit

$$H_{\lambda_j} \rightarrow H_\lambda \quad \text{für} \quad \lambda_j \rightarrow \lambda \quad .$$

Da im Startpunkt 0 alle  $n_j^\lambda$  den gleichen Wert  $m_0$  annehmen, gilt

$$n^{\lambda_j}(0) = m_0 \rightarrow m_0 = n^\lambda(0) \quad .$$

Also gibt es laut Lemma 5.6 ein  $\delta > 0$ , so dass für alle  $\tau \in [0; \delta]$  gilt

$$n^{\lambda_j}(\tau) \rightarrow n^\lambda(\tau) \quad .$$

Also ist  $h(\cdot; \tau)$  für alle  $\tau \in [0; \delta]$  stetig. Wiederhole diese Prozedur, bis das ganze Intervall  $[0; 1]$  abgedeckt ist. Insbesondere ist  $h(\cdot; 1)$  stetig und da mit  $H(\lambda; 1)$  auch  $Q(H(\lambda; 1))$  unabhängig von  $\lambda$  ist, ergibt sich mit Folgerung 5.2:

$$n^\lambda(1) = m_1 \quad \text{für alle } \lambda \in [0; 1] \quad .$$

**Definition.** Sei  $\Omega \in \mathbb{R}^m$  (wie immer in diesem Kapitel).

Man nennt  $\Omega$  wegzusammenhängend, wenn es für je zwei beliebige Punkte  $x; y \in \Omega$  einen Weg  $\gamma : [0; 1] \rightarrow \Omega$  gibt, mit

$$\gamma(0) = x \quad \vee \quad \gamma(1) = y \quad .$$

**Definition.** Ein Weg  $\gamma : [0; 1] \rightarrow \Omega$  mit gleichem Anfangs- und Endpunkt  $\gamma(0) = \gamma(1)$  heißt geschlossen.

**Definition.** Ein geschlossener Weg  $\gamma : [0; 1] \rightarrow \Omega$  heißt nullhomotop, wenn es eine Homotopie  $H : [0; 1] \times [0; 1] \rightarrow \Omega$  gibt, so dass

$$H(0; t) = \gamma(t)$$

und

$$H(1; t) = \gamma(0) = \gamma(1) \quad ,$$

wenn sich  $\gamma$  also auf einen Punkt zusammenziehen lässt.

**Definition.** Sei  $\Omega \in \mathbb{R}^m$ .

Man nennt  $\Omega$  einfach zusammenhängend, wenn  $\Omega$  wegzusammenhängend ist und jeder geschlossene Weg nullhomotop ist.

Man kann einfach zusammenhängende Mengen auch als Mengen ohne „Löcher“ bezeichnen, in denen sich jeder geschlossene Weg wie eine Schlinge zusammenziehen lässt, ohne dass eine Menge, die nicht zu  $\Omega$  gehört, „im Weg“ ist.

**Schreibweise:** Sei  $\gamma : [0; 1] \rightarrow \Omega$  ein Weg.

Dann bezeichnet  $\gamma^{-1}$  den inversen Weg, definiert durch

$$\begin{aligned} \gamma^{-1} : [0; 1] &\rightarrow \Omega \\ t &\mapsto \gamma(1 - t) \quad , \end{aligned}$$

also die durch  $\gamma$  definierten Weg in umgekehrter Richtung.

Sei  $\alpha : [0; 1] \rightarrow \Omega$  ein weiterer Weg, dessen Anfangspunkt im Endpunkt von  $\gamma$  liegt, also

$$\alpha(0) = \gamma(1) \quad .$$

Dann wird mit  $\gamma \oplus \alpha$  die Aneinanderreihung der beiden Wege bezeichnet, dargestellt durch

$$\begin{aligned} \gamma \oplus \alpha : [0; 1] &\rightarrow \Omega \\ t &\mapsto \begin{cases} \gamma(2t) & \text{für } t \in [0; \frac{1}{2}] \\ \alpha(2t - 1) & \text{für } t \in [\frac{1}{2}; 1] \end{cases} \quad . \end{aligned}$$

Wegen  $\gamma(1) = \alpha(0)$  ist dieser Weg wohldefiniert.

**Satz 5.8.** Sei  $\Omega \in \mathbb{R}^m$  einfach zusammenhängend,  $Q = s(\text{dev}(\tilde{n} \otimes \tilde{n}))$  stetig und  $x_0$  ein beliebiger Startpunkt mit fest gewähltem  $n(x_0)$ , das (31) und (32) erfüllt.

Dann gibt es eine eindeutig bestimmte stetige Fortsetzung von  $n$  in ganz  $\Omega$ .



**Beweis:** Sei  $x \in \Omega$  beliebig.

Da  $\Omega$  wegzusammenhängend ist, gibt es einen Weg  $\gamma$  mit  $\gamma(0) = x_0$  und  $\gamma(1) = x$ . Auf diesem Weg gibt es nach Lemma 5.5 eine eindeutig bestimmte stetige Fortsetzung  $n$  von  $n(x_0)$ .

Wir zeigen zunächst, dass  $n(x)$  nicht von der Wahl des Weges abhängig ist:

Sei  $\hat{\gamma}$  ein weiterer Weg von  $x_0$  nach  $x$  und  $\hat{n}$  die eindeutig bestimmte stetige Fortsetzung von  $n$  auf  $\hat{\gamma}$ .

Annahme:  $n(x) \neq \hat{n}(x)$ .

Dann muss nach Folgerung 5.2 gelten:

$$n(x) = -\hat{n}(x) \quad .$$

Betrachtet man den geschlossenen Weg  $\Gamma := \gamma \oplus \hat{\gamma}^{-1}$ , so ergibt sich auch hier nach Lemma 5.5 eine eindeutig bestimmte stetige Fortsetzung  $N$  von  $n(x_0)$ , für die nach Konstruktion gilt:

$$N := \left\{ \begin{array}{ll} n & \text{auf } \gamma \\ -\hat{n} & \text{auf } \hat{\gamma}^{-1} \end{array} \right\} \quad ,$$

denn nur dann gelten (31), (32) auf ganz  $\Gamma$  und

$$N(\gamma(1)) = n(x) = -\hat{n}(x) = N(\hat{\gamma}(0)^{-1}) \quad .$$

Da  $x_0$  auf  $\hat{\gamma}^{-1}$  liegt, folgt hieraus

$$n(x_0) = N(0) \neq N(1) \quad . \tag{35}$$

Da aber  $\Omega$  einfach zusammenhängend ist, ist die geschlossene Kurve  $\Gamma$  nullhomotop, d. h. es gibt eine Homotopie  $H : [0; 1] \times [0; 1] \rightarrow \Omega$  mit  $H(0; t) = \Gamma(t)$  und  $H(1; t) = x_0$ . Die einzelnen Wege  $H_\lambda(t) := H(\lambda; t)$  sind ebenfalls geschlossen mit Start- und Endpunkt  $x_0$ . und nach Lemma 5.5 gibt es für jedes  $\lambda \in [0; 1]$  eine eindeutige stetige Fortsetzung  $n^\lambda$  von  $n(x_0)$ . Nach Folgerung 5.7 ist dann  $h(\lambda; t) := n^\lambda(t)$  mit  $h(0; t) = N(t)$  und  $h(1; t) = n(x_0)$  ebenfalls eine Homotopie. Insbesondere gilt für den Endpunkt

$$N(1) = h(0; 1) = h(\lambda; 1) = h(1; 1) = n(x_0) \quad ,$$

was im Widerspruch zu (35) steht. Also ist  $n(x)$  unabhängig von der Wahl des Weges.

Bleibt noch zu zeigen, dass ein auf diese Weise für jeden beliebigen Punkt  $x \in \Omega$  konstruiertes  $n(x)$  stetig ist.

Sei hierzu  $(y_i)_{i \in \mathbb{N}}$  eine Folge mit

$$y_i \rightarrow x \quad .$$

Da  $\Omega$  wegzusammenhängend ist, gibt es eine Folge von Wegen  $(\gamma_i)_{i \in \mathbb{N}}$  von  $x$  nach  $y_i$  mit

$$\gamma_i \rightarrow \tilde{\gamma} \equiv x$$

und hierauf definierten  $n^i(\gamma_i(t))$ . Da  $n(y_i)$  nicht von der Wahl des Weges abhängt, definiere gemäß Lemma 5.5 über den Weg  $\gamma \oplus \gamma_i$   $n(y_i) := n^i(\gamma_i(1))$ . Da dann  $n^i(\gamma_i(0))$  gegen  $n(\tilde{\gamma}(0)) = n(x)$  konvergiert, gibt es nach Lemma 5.6 ein  $i_0 \in \mathbb{N}$ , so dass für alle  $k \geq i_0$  gilt:

$$n^k(\gamma_k(\tau)) \rightarrow n(\tilde{\gamma}(\tau)) = n(x) \quad \text{für alle } \tau \in [0; 1] \quad .$$

Also konvergiert  $n(y_i) = n^i(\gamma_i(1))$  gegen  $n(x)$ .

## 6 Topologie

Alternativ wollen wir das vorliegende Problem mit topologischen Mitteln betrachten. Diese Herangehensweise ist zwar weniger anschaulich, dafür aber allgemeingültiger.

Wir erinnern zunächst an ein paar topologische Grundbegriffe. Diese können auch übersprungen werden, da wir es in unserem Fall ausschließlich mit metrischen Räumen zu tun haben. In dem Fall sollte man mit der Definition des Zusammenhang von Homöomorphismen fortfahren. Da die in diesem Kapitel getätigten Aussagen aber für allgemeine topologische Räume gelten und bei den Beweisen ausschließlich topologische Hilfsmittel verwendet werden, ist es hilfreich, sich an diese Grundbegriffe zu erinnern:

**Definition.** Ein topologischer Raum  $(X; \tau)$  ist eine Menge  $X$ , versehen mit einer Topologie  $\tau$ . Diese Topologie ist eine Familie von Teilmengen von  $X$ , die man auch als die offenen Mengen in  $X$  bezeichnet. Hierbei gelten:

1.  $X$  und  $\emptyset$  sind offen.
2. Der Durchschnitt zweier offener Mengen ist offen.
3. Die Vereinigung beliebig vieler offener Mengen ist offen.

In Formeln:

1.  $X ; \emptyset \in \tau$
2.  $U_1 ; U_2 \in \tau \Rightarrow U_1 \cap U_2 \in \tau$
3.  $U_i \in \tau$  für alle  $i \in I \Rightarrow \bigcup_{i \in I} U_i \in \tau$

Aus der zweiten Eigenschaft folgt direkt, dass der Durchschnitt endlich vieler offener Mengen wieder offen ist. Man muss nur diese Eigenschaft endlich oft anwenden.

**Beispiel:** Sei  $X$  ein metrischer Raum.

Definiere die offenen Mengen wie üblich als die Mengen, die nur innere Punkte enthalten, eine Menge  $U$  heißt also offen, wenn für alle  $\hat{x} \in U$  ein  $\varepsilon > 0$  existiert, so dass

$$U(x; \varepsilon) := \{x \in X \mid d(\hat{x}; x) < \varepsilon\} \subset U \quad .$$

Dann ist  $(X; d)$  ein topologischer Raum.

Beweise die Eigenschaften:

1. ist klar
2. Seien  $U_1$  und  $U_2$  offen und  $x \in U_1 \cap U_2$ .  
Dann ist  $x \in U_1$  und  $x \in U_2$ . Da  $U_1$  und  $U_2$  offen sind, gibt es  $\varepsilon_1$  und  $\varepsilon_2$ , so dass

$$U(x; \varepsilon_1) \in U_1 \quad \text{und} \quad U(x; \varepsilon_2) \in U_2 \quad .$$

Für  $\varepsilon := \min\{\varepsilon_1; \varepsilon_2\}$  ist dann

$$U(x; \varepsilon) \in U_1 \cap U_2 \quad .$$

3. Seien  $U_i \in \tau$  für alle  $i \in I$  und  $x \in \bigcup_{i \in I} U_i$ .  
Dann gibt es ein  $j \in I$ , so dass  $x \in U_j$ . Also gibt es ein  $\varepsilon$ , so dass

$$U(x; \varepsilon) \in U_j \subseteq \bigcup_{i \in I} U_i \quad .$$

Um zu zeigen, dass der Durchschnitt unendlich vieler offener Mengen nicht offen sein muss betrachten wir folgendes Beispiel:

$$U_n := \left(-\frac{1}{n}; \frac{1}{n}\right) \quad \text{sind offen, aber} \quad \bigcap_{n=1}^{\infty} U_n = \{0\} \quad \text{nicht.}$$

Im Beweis wird das Maximum verwendet. Dies ist bei unendlich vielen Mengen nicht mehr möglich. Im Beispiel konvergiert dieses Maximum gegen null.

Es gibt noch viele andere Beispiele für topologische Räume. Insbesondere können metrische Räume auch mit anderen Topologien versehen werden. In dieser Arbeit behandeln wir ausschließlich metrische Räumen, ausgestattet mit der üblichen Topologie. Die folgenden Ergebnisse gelten aber, wenn nicht anders beschrieben für beliebige topologische Räume. In Zukunft werden wir bei topologischen Räumen auf die Angabe der Topologie verzichten, da diese entweder beliebig, oder aus dem Zusammenhang klar ersichtlich ist. Wir schreiben also beispielsweise statt  $(X; \tau)$  nur noch  $X$ .

**Bezeichnungen:** Sei  $X$  ein topologischer Raum,  $x \in X$ .

1. Eine Menge  $V \subseteq X$  heißt Umgebung von  $x$ , wenn eine offene Menge  $U$  existiert, so dass

$$x \in U \subseteq V \subseteq X \quad .$$

Insbesondere sind dann  $U$  und  $X$  (offene) Umgebungen von  $x$ .

2. Eine Menge  $A \subseteq X$  heißt abgeschlossen, wenn  $X \setminus A$  offen ist.
3. Sei  $M \subseteq X$ .  
 Ein Punkt  $p \in X$  heißt Randpunkt von  $M$ , wenn weder  $M$ , noch  $X \setminus M$  Umgebung von  $p$  ist.  
 Die Menge aller Randpunkte von  $M$  wird mit  $\delta M$  bezeichnet.  
 Die Menge  $\bar{M} = M \cup \delta M$  nennt man den Abschluss von  $M$ .

In der Analysis werden Mengen der Form

$$U(x; \varepsilon) := \{x \in X \mid d(\hat{x}; x) < \varepsilon\}$$

häufig als Umgebungen von  $x$  bezeichnet. In der Topologie können Umgebungen allerdings beliebige Form annehmen, sind also nicht an diese Kugelgestalt gebunden. Um Verwechslungen zu vermeiden, werden wir deswegen in Zukunft diese  $\varepsilon$ -Umgebungen als Kugeln bezeichnen.

**Definition.** Seien  $X$  und  $Y$  topologische Räume.

Eine Abbildung  $f : X \rightarrow Y$  heißt stetig, wenn für alle offenen Mengen  $U \subseteq Y$  gilt:

$$f^{-1}(U) := \{x \in X \mid f(x) \in U\} \quad \text{ist offen,}$$

wenn also Urbilder offener Mengen selbst wieder offen sind.

**Definition.** Seien  $X$  und  $Y$  topologische Räume.

Eine Abbildung  $f : X \rightarrow Y$  heißt stetig in  $\hat{x} \in X$ , wenn für jede Umgebung  $V$  von  $f(\hat{x})$  eine Umgebung  $U$  von  $\hat{x}$  existiert, so dass

$$f(U) := \{f(x) \in Y \mid x \in U\} \subseteq V \quad .$$

**Satz 6.1.**

Seien  $X$  und  $Y$  topologische Räume und  $f : X \rightarrow Y$  eine Abbildung.  $f$  ist genau dann stetig, wenn  $f$  in allen  $x \in X$  stetig ist.

**Beweis:** “ $\Rightarrow$ ” Sei  $x \in X$  beliebig und  $\hat{V}$  eine Umgebung von  $f(x)$ .

Dann gibt es eine offene Menge  $V$  mit

$$f(x) \in V \subseteq \hat{V} \quad .$$

Wenn  $f$  stetig ist, dann ist  $f^{-1}(V) =: U$  offene Umgebung von  $x$ . Außerdem ist

$$f(f^{-1}(V)) = V \subseteq \hat{V} \quad .$$

Also ist  $f$  stetig in  $x$ .

“ $\Leftarrow$ ” Sei umgekehrt  $V$  eine offene Menge in  $Y$ .

Da die Menge  $V$  offen ist, ist sie per definitionem Umgebung jedes ihrer Elemente.

Sei o. B. d. A das Urbild  $f^{-1}(V)$  nichtleer (sonst ist  $f^{-1} = \emptyset$  offen) und  $x \in f^{-1}(V)$ .

Da  $f$  stetig in  $x$  ist, gibt es eine Umgebung  $\hat{U}(x)$  mit

$$f(\hat{U}(x)) \subseteq V \quad .$$

Also gibt es auch eine offene Menge  $U(x)$  mit  $x \in U(x) \subseteq \hat{U}(x)$  und es gilt

$$f(U(x)) \subseteq f(\hat{U}(x)) \subseteq V \quad .$$

Auf diese Art lässt sich für jedes  $x \in f^{-1}(V)$  eine Umgebung  $U(x)$  mit  $f(U(x)) \subseteq V$  finden.

Behauptung:

$$f^{-1}(V) = \bigcup_{x \in f^{-1}(V)} U(x)$$

“ $\subseteq$ ” Sei  $\hat{x} \in f^{-1}(V)$ . Dann ist

$$\hat{x} \in U(\hat{x}) \subseteq \bigcup_{x \in f^{-1}(V)} U(x) \quad .$$

“ $\supseteq$ ” Sei  $\hat{x} \in \bigcup_{x \in f^{-1}(V)} U(x)$ .

Dann ist  $\hat{x} \in U(\tilde{x})$  für ein  $\tilde{x} \in f^{-1}(V)$  und schließlich gilt:

$$f(\hat{x}) \subseteq f(U(\tilde{x})) \subseteq V \quad .$$

Damit ist  $f^{-1}(V)$  als Vereinigung offener Mengen selbst offen.

### **Definition.**

*Ein Homöomorphismus ist eine stetige, bijektive Abbildung, deren Umkehrabbildung ebenfalls stetig ist.*

### **Definition.**

*Seien  $X$  und  $Y$  topologische Räume und  $f : X \rightarrow Y$  eine stetige Abbildung. Dann nennt man  $f$  eine Überlagerung, wenn es für jedes  $y \in Y$  eine offene Umgebung  $V(y)$  von  $y$  und für alle  $x \in f^{-1}(y)$  Umgebungen  $U(x)$  gibt, so dass gelten:*

$$1. f^{-1}(V(y)) = \bigcup_{x \in f^{-1}(y)} U(x)$$

2.  $f|_{U(x)} : U(x) \rightarrow V$  ist Homöomorphismus für alle  $x \in f^{-1}(y)$

**Beispiel:** Sei  $\mathcal{Q} := \{Q \in \mathbb{R}^{3 \times 3} | Q = Q^T; \text{tr}(Q) = 0\}$ .

Dann ist  $Q : \mathbb{S}^2 \rightarrow \mathcal{Q}$  mit  $Q(n) = \text{dev}(n \otimes n)$  ist eine Überlagerung.

Denn sei  $A \in \mathcal{Q}$ .

Dann gibt es ein  $n \in \mathbb{S}^2$ , so dass

$$Q^{-1}(A) = \{n; -n\} \quad .$$

Betrachte die Kugeln

$$U_\delta(n) \quad \text{und} \quad U_\delta(-n) \quad .$$

Für genügend klein gewähltes  $\delta$ , z. B.  $\delta < 1$  sind diese disjunkt. Dann ist

$$V(A) := Q(U_\delta(n)) = Q(U_\delta(-n))$$

eine Umgebung von  $A$  mit den gesuchten Eigenschaften, denn

$$Q^{-1}(V(A)) = U_\delta(n) \dot{\cup} U_\delta(-n) \quad .$$

Die zweite Eigenschaft ist ebenfalls erfüllt, denn sei  $\hat{n} \in U_\delta(n)$ .

Da  $\delta < 1$  ist, gilt

$$-\hat{n} \notin U_\delta(n) \quad .$$

Damit sind

$$Q|_{U_\delta(n)} : U_\delta(n) \rightarrow \mathcal{Q} \quad \text{und} \quad Q|_{U_\delta(-n)} : U_\delta(-n) \rightarrow \mathcal{Q}$$

injektiv, also (da auch stetig und surjektiv) Homöomorphismen.

**Definition.** Sei  $X$  ein topologischer Raum.

Man sagt,  $X$  ist hausdorff'sch, wenn zu je zwei beliebigen Punkten aus  $X$  disjunkte Umgebungen existieren, d. h. wenn es für alle  $x; y \in X$ ,  $x \neq y$  Umgebungen  $U(x)$  und  $U(y)$  gibt, so dass

$$U(x) \cap U(y) = \emptyset \quad .$$

Man nennt  $X$  dann auch einen Hausdorff-Raum.

**Beispiel:** Sei  $X$  ein metrischer Raum.

Dann ist  $X$  hausdorff'sch.

Denn seien  $x; y \in X$ .

Wähle offene Kugeln  $U(x; r)$  um  $x$  und  $U(y; r)$  um  $y$  mit dem Radius  $r = \frac{1}{2}d(x; y)$ . Dann erfüllen diese Kugeln die oben genannten Bedingungen.

**Definition.** Sei  $X$  ein topologischer Raum.

Man nennt  $X$  zusammenhängend, wenn man ihn nicht als disjunkte Vereinigung zweier offener, nichtleerer Mengen schreiben kann, d. h. wenn es keine zwei offenen Mengen  $A; B \in X$  gibt, so dass

$$X = A \dot{\cup} B \quad A; B \neq \emptyset \quad .$$

**Beispiel:** Sei  $I := [a; b] \in \mathbb{R}$  ein Intervall.

Dann ist  $I$  zusammenhängend.

Denn seien  $A; B \in \mathbb{R}$  offen und nichtleer mit  $I = A \dot{\cup} B$  und o. B. d. A.  $a \in A$ .

Definiere  $s := \inf\{t \in B \mid a < t\}$ .

Da  $B$  offen ist, gibt es ein  $\delta > 0$ , so dass

$$(s; s + \delta) \in B \quad .$$

Außerdem ist

$$(a; s) \in A \quad .$$

Also ist  $s$  weder innerer Punkt von  $A$ , noch von  $B$ . Da aber  $A$  und  $B$  offen sind, liegt  $s$  zwar in  $I$ , aber in keiner dieser Mengen.  $\zeta$

**Lemma 6.2.** Sei  $X$  ein topologischer Raum und  $M \subseteq X$  abgeschlossen, offen und nichtleer.

Dann sind äquivalent:

1.  $X$  ist zusammenhängend
2.  $M = X$

**Beweis:** Da  $M$  abgeschlossen ist, ist das Komplement  $X \setminus M$  offen. Außerdem gilt

$$X = M \dot{\cup} (X \setminus M)$$

ist disjunkte Vereinigung zweier offener Mengen. Per definitionem gilt also:

$$X \text{ ist zusammenhängend} \quad \Leftrightarrow \quad X \setminus M = \emptyset$$

womit die Behauptung bewiesen wäre.

**Definition.** Sei  $X$  ein metrischer Raum und  $M \subseteq X$  eine beschränkte Teilmenge.

Dann wird mit

$$\text{diam}(M) := \max_{x; y \in M} d(x; y)$$

der Diameter (Durchmesser) von  $X$  bezeichnet.



**Lemma 6.3.** (Lebesgue)

Sei  $X$  ein kompakter metrischer Raum und  $(U_i)_{i \in I}$  eine offene Überdeckung von  $X$ .

Dann gibt es ein  $\delta > 0$ , so dass es für alle Teilmengen  $M$  von  $X$  mit  $\text{diam}(M) \leq \delta$  ein  $j \in I$  gibt mit

$$M \subseteq U_j \quad .$$

**Beweis:** Sei  $x \in X$  beliebig.

Dann gibt es ein  $j \in I$ , so dass  $x$  in  $U_j$  liegt. Da  $U_j$  offen ist, gibt es ein  $\varepsilon > 0$ , so dass

$$U(x; 2\varepsilon) \subseteq U_j \quad .$$

Auf die Art wird eine weitere offene Überdeckung  $(U(x_\lambda; \varepsilon_\lambda))_{\lambda \in \Lambda}$  konstruiert, wobei es für jedes  $\lambda \in \Lambda$  ein  $j \in I$  gibt, so dass

$$U(x_\lambda; 2\varepsilon_\lambda) \subseteq U_j$$

gilt. Da  $X$  kompakt ist, gibt es eine endliche Teilüberdeckung

$$(U(x_k; \varepsilon_k))_{k=1; \dots; n} \quad .$$

Definiere

$$\delta := \min_{k=1}^n \varepsilon_k \quad .$$

Sei nun  $M$  eine Teilmenge von  $X$  mit  $\text{diam}(M) \leq \delta$  und  $\hat{y} \in M$  beliebig. Dann gibt es ein  $k \in 1; \dots; n$  so dass

$$\hat{y} \in U(x_k; \varepsilon_k) \quad .$$

Außerdem gilt für alle  $y \in M$

$$d(y; \hat{y}) < \delta \leq \varepsilon_k$$

und hieraus folgt

$$d(y; x_k) \leq d(y; \hat{y}) + d(\hat{y}; x_k) < \varepsilon_k + \varepsilon_k = 2\varepsilon \quad .$$

Also gilt

$$M \subseteq U(x_k; \varepsilon_k) \subseteq U_j$$

für ein  $j \in I$ , was zu zeigen war.

**Definition.**

Seien  $X, Y$  und  $Z$  topologische Räume,  $f : Y \rightarrow Z$  und  $g : X \rightarrow Z$  stetige Abbildungen und  $y_0 \in Y$  und  $x_0 \in X$  zwei Punkte mit

$$f(y_0) = g(x_0) \quad .$$

Eine Liftung von  $g$  nach  $Y$  ist eine stetige Funktion  $h : X \rightarrow Y$  mit den Eigenschaften

1.  $f \circ h = g$
2.  $h(x_0) = y_0$ .

**Satz 6.4.** Seien  $Y$  und  $Z$  Hausdorff-Räume,  $\alpha : I := [a; b] \rightarrow Z$  ein Weg in  $Z$ ,  $f : Y \rightarrow Z$  eine Überlagerung und  $y_0 \in Y$  ein Punkt mit  $f(y_0) = \alpha(a)$ . Dann gibt es genau eine Liftung  $\beta : I \rightarrow Y$  von  $\alpha$  nach  $Y$ .

**Beweis:** Sei  $f$  eine Überlagerung.

Existenz:

Wähle für jedes  $z \in Z$  eine offene Umgebung  $V(z)$  aus mit den Eigenschaften aus der Definition der Überlagerung. Dann ist

$$\{\alpha^{-1}(V(z))\}_{z \in Z}$$

eine offene Überdeckung von  $I$ . Da  $I$  kompakt ist, gibt es eine endliche Teilüberdeckung

$$\{\alpha^{-1}(V(z_i))\}_{i=1; \dots; n} \quad .$$

Außerdem folgt aus dem Lemma von Lebesgue, dass es eine Partition

$$a =: a_0 \quad ; \quad a_1 \quad ; \quad \dots \quad ; \quad a_{m-1} \quad ; \quad a_m := b$$

gibt, so dass für jedes  $j = 1; \dots; m$  ein  $i \in \{1; \dots; n\}$  existiert mit

$$[a_{j-1}; a_j] \subseteq \alpha^{-1}(V(z_i)) \quad .$$

Insbesondere gibt es ein  $i_1 \in \{1; \dots; n\}$ , so dass

$$\alpha([a_0; a_1]) \subseteq V(z_{i_1}) \quad .$$

Außerdem gibt es nach Wahl von  $V(z_{i_1})$  für alle  $x \in f^{-1}(z_{i_1})$  Umgebungen  $U(y)$ , so dass

$$1. \quad f^{-1}(V(z_{i_1})) = \dot{\bigcup}_{y \in f^{-1}(z_{i_1})} U(y) \quad \text{und}$$

2.  $f|_{U(y)} : U(y) \rightarrow Z$  Homöomorphismus ist.

Da  $\alpha(a) = f(y_0)$  ebenfalls in  $V(z_{i_1})$  liegt, liegt  $y_0$  genau in einer dieser Umgebungen  $U(y_1)$  und

$$f|_{U(y_1)} : U(y_1) \rightarrow Z$$

ist ein Homöomorphismus, hat also insbesondere in dieser Umgebung eine stetige Umkehrabbildung. Definiere demnach

$$\beta|_{[a_0; a_1]} = f^{-1} \circ \alpha \quad .$$

Diese Abbildung ist als Verknüpfung stetiger Abbildungen selbst stetig. Auf diesem Wege erhält man schließlich per Induktion die gesuchte stetige Funktion  $\beta$ , jeweils mit den Startpunkten

$$\beta_{[a_{j-1}; a_j]}(a_{[j-1]}) := \beta_{[a_{j-2}; a_{j-1}]}(a_{[j-1]}) \quad ; \quad j = 2; \dots; m \quad .$$

Eindeutigkeit:

Seien  $\beta_1$  und  $\beta_2$  zwei Liftungen.

Definiere  $M := \{t \in I | \beta_1(t) = \beta_2(t)\}$ .

Wir wollen Lemma 6.2 auf  $M$  anwenden. Dazu überprüfen wir die Bedingungen:

1.  $I$  ist zusammenhängend.
2.  $M$  ist nichtleer, da  $\beta_1(a) = \beta_2(a) = y_0$  ist.
3.  $M$  ist offen. Sei hierzu  $\hat{t} \in M$  mit  $\beta_1(\hat{t}) = \beta_2(\hat{t}) =: \hat{y}$ .

Da  $f$  eine Überlagerung ist, gibt es eine Umgebung  $U(\hat{y})$ , so dass  $f|_{U(\hat{y})}$  ein Homöomorphismus ist. In dieser Umgebung sind also  $\beta_1 = \beta_2$  eindeutig bestimmt. Wegen der Stetigkeit dieser Funktionen gibt es eine Umgebung

$$U(\hat{t}) \subseteq M \quad .$$

also ist  $M$  offen.

4.  $M$  ist abgeschlossen. Sei nun  $\hat{t} \notin M$ .

Demnach ist

$$y_1 := \beta_1(\hat{t}) \neq \beta_2(\hat{t}) =: y_2 \quad .$$

Da  $Y$  ein Hausdorff-Raum ist, gibt es disjunkte Umgebungen  $U(y_1)$  und  $U(y_2)$ . Wiederum wegen der Stetigkeit von  $\beta_1$  und  $\beta_2$  gibt es eine Umgebung  $U(\hat{t})$  mit

$$\beta_1(U(\hat{t})) \subseteq U(y_1) \quad \text{und} \quad \beta_2(U(\hat{t})) \subseteq U(y_2) \quad .$$

Also ist  $Y \setminus M$  offen und demnach  $M$  abgeschlossen.

Nach Lemma 6.2 ist also  $I = M$  und demnach  $\beta_1 = \beta_2$ .

**Lemma 6.5.** *Seien  $X$  und  $Y$  topologische Räume,  $X$  zusammenhängend und  $f : X \rightarrow Y$  stetig.*

*Dann ist  $f(X)$  ebenfalls zusammenhängend.*

**Beweis:** Seien  $A; B \subseteq f(X)$  offen mit  $A \dot{\cup} B = f(X)$ .

Da  $f$  stetig ist, sind dann auch  $f^{-1}(A)$  und  $f^{-1}(B)$  offen. Außerdem ist

$$X = f^{-1}(f(X)) = f^{-1}(A) \dot{\cup} f^{-1}(B) \quad .$$

Da  $X$  zusammenhängend ist, muss also entweder  $f^{-1}(A) = \emptyset$  oder  $f^{-1}(B) = \emptyset$  gelten. Also ist entweder  $A$  oder  $B$  leer, d. h.  $f(X)$  ist zusammenhängend.

**Lemma 6.6.** *Seien  $X_1$  und  $X_2$  zusammenhängende Mengen.*

*Dann ist das kartesische Produkt  $X := X_1 \times X_2$  ebenfalls zusammenhängend.*

**Beweis:**

Sei  $A \subseteq X$  sowohl offen, als auch abgeschlossen, sei o. B. d. A.  $A \neq \emptyset$  (sonst betrachte  $X \setminus A$ ) und sei  $\hat{x} := (\hat{x}_1; \hat{x}_2) \in A$  beliebig.

Behauptung: Dann ist die Abbildung

$$\begin{aligned} h : X_1 &\rightarrow X_1 \times \{\hat{x}_2\} \\ x_1 &\mapsto (x_1; \hat{x}_2) \end{aligned}$$

ein Homöomorphismus.

Die Bijektivität der Abbildung ist klar.

Beweise die Stetigkeit in jedem Punkt.

Sei  $(x_1; \hat{x}_2) \in X_1 \times \{\hat{x}_2\}$ .

Dann gibt es in  $X_1 \times \{\hat{x}_2\}$  zu jeder Umgebung  $V_{(x_1; \hat{x}_2)}$  von  $(x_1; \hat{x}_2)$  eine Umgebung  $U_{x_1}$  von  $x_1$ , so dass

$$V_{(x_1; \hat{x}_2)} = U_{x_1} \times \{\hat{x}_2\}$$

ist und umgekehrt. Damit gilt:

$$h(U_{x_1}) = V_{(x_1; \hat{x}_2)} \quad \text{bzw.} \quad U_{x_1} = h^{-1}(V_{(x_1; \hat{x}_2)})$$

Also sind sowohl  $h$ , als auch  $h^{-1}$  stetig in jedem Punkt.

Nun ist  $A \cap (X_1 \times \{\hat{x}_2\})$  als Durchschnitt offener und abgeschlossener Mengen in  $X_1 \times \{\hat{x}_2\}$  offen und abgeschlossen und enthält  $\hat{x}$ , ist also nicht leer. Da außerdem  $X_1 \times \{\hat{x}_2\}$  nach Lemma 6.5 als Bild einer zusammenhängenden Menge unter einer stetigen Funktion selbst zusammenhängend ist, folgt hieraus wegen Lemma 6.2

$$A \cap (X_1 \times \{\hat{x}_2\}) = X_1 \times \{\hat{x}_2\} \quad .$$

Jede Scheibe der Form  $X_1 \times \{x_2\}$ , die auch nur ein Element von  $A$  enthält, ist also ganz in  $A$  enthalten. Dann enthält aber auch jede Scheibe der Form  $\{x_1\} \times X_2$  ein Element von  $A$  (nämlich zumindest  $(x_1; \hat{x}_2)$ ). Wiederholt man die Argumente für diese Scheiben, so ergibt sich schließlich:

$$A = X \quad .$$

Also ist  $X$  nach Lemma 6.2 zusammenhängend.

Wir wiederholen zur besseren Lesbarkeit noch einmal die folgende Definition aus dem vorhergehenden Kapitel:

**Definition.** Seien  $\gamma_0, \gamma_1 : [0; 1] \rightarrow \Omega$  zwei Wege mit gleichem Anfangs- und Endpunkt, d. h.  $\gamma_0(0) = \gamma_1(0)$  und  $\gamma_0(1) = \gamma_1(1)$ .

$\gamma_0$  und  $\gamma_1$  heißen homotop, wenn es eine Abbildung  $H : [0; 1] \times [0; 1] \rightarrow \Omega$  gibt mit den Eigenschaften:

1.  $H$  ist stetig in beiden Variablen.
2. Für alle  $\lambda \in [0; 1]$  ist

$$H(\lambda; 0) = \gamma_0(0) = \gamma_1(0) \quad \text{und} \quad H(\lambda; 1) = \gamma_0(1) = \gamma_1(1) \quad .$$

3. Es gelten  $H(0; t) = \gamma_0(t)$  und  $H(1; t) = \gamma_1(t)$ .

$H$  nennt man dann eine Homotopie.

**Satz 6.7.** Seien  $Y$  und  $Z$  Hausdorff-Räume,  $H : Q := [0; 1] \times [0; 1] \rightarrow Z$  eine Homotopie in  $Z$ ,  $f : Y \rightarrow Z$  eine Überlagerung und  $y_0 \in Y$  ein beliebiger Punkt mit  $f(y_0) \in H(Q)$ .

Dann gibt es genau eine Liftung  $h : Q \rightarrow Y$  von  $H$  nach  $Y$ .

Der Beweis hierzu verlauft sehr ahnlich zu dem Beweis von Satz 6.4.

**Beweis:**

Existenz: Sei zunachst  $f(y_0) = H(0; 0)$ .

Wahle zu jedem  $z \in Z$  eine offene Umgebung  $V(z)$  wie im Beweis von Satz 6.4. Dann gibt es eine endliche Uberdeckung

$$\{H^{-1}(V(z_\mu))\}_{\mu=1;\dots;k}$$

von  $Q$ . Nach dem Lemma von Lebesgue gibt es eine Partition von  $Q$  in Rechtecke

$$Q_{11} := [\lambda_0; \lambda_1] \times [t_0; t_1] \quad ; \quad \dots \quad ; \quad Q_{nm} := [\lambda_{n-1}; \lambda_n] \times [t_{m-1}; t_m]$$

mit  $\lambda_0 := 0$ ,  $\lambda_n := 1$ ,  $t_0 := 0$  und  $t_m := 1$ , so dass es fur jedes einzelne der  $Q_{ij}$  ein  $\mu \in \{1; \dots; k\}$  gibt mit

$$H(Q_{ij}) \subseteq V(z_\mu) \quad .$$

Insbesondere gibt es ein  $\mu_1$ , so dass

$$F(y_0) = H(0; 0) \in H(Q_{11}) \subseteq V(z_{\mu_1})$$

und, da  $f$  eine Uberlagerung ist, ein  $y_1 \in f^{-1}(z_{\mu_1})$  und eine Umgebung  $U(y_1)$ , so dass

$$y_0 \in U(y_1)$$

und

$$f|_{U(y_1)} : U(y_1) \rightarrow Z$$

ein Homoomorphismus ist (vgl. Beweis zu Satz 6.4). Definiere also die stetige Abbildung:

$$h|_{Q_{11}} := f^{-1} \circ H \quad .$$

Mit den so neu erhaltenen Eckpunkten des Teilrechtecks  $Q_{ii}$  setze  $h$  induktiv in den anliegenden Rechtecken fort.

Belibt noch zu zeigen, dass  $h$  auf den Seiten, auf denen sich zwei Rechtecke beruhren, wohldefiniert, also auf beiden Teilrechtecken gleich definiert, ist. Das folgt aber direkt aus Lemma 6.4, da man die Seiten als Wege mit den Eckpunkten als Startpunkt betrachten kann. Da die Eckpunkte aber nach Konstruktion in beiden Quadraten dieselbe Liftung  $h$  liefern, gibt es auf den Seiten nur eine mogliche Liftung  $h$ .

Sei nun  $f(y_0) \in H(Q)$  beliebig.

Falls  $f(y_0)$  auf dem Rand von  $Q$  liegt, verfahre symmetrisch wie oben.

Liegt  $f(y_0)$  im inneren von  $Q$ , so teile  $Q$  in vier Rechtecke mit dem gemeinsamen Eckpunkt  $f(y_0)$  und verfähre dann wie oben.

Der Beweis der Eindeutigkeit verläuft genau analog zum Beweis von Satz 6.4, wobei noch bemerkt werden sollte, dass  $Q$  wegen Lemma 6.6 zusammenhängend ist.

Wir kommen nun zu einer Verallgemeinerung der Sätze 6.4 und 6.7:

**Satz 6.8.** *Sei  $X$  ein einfach zusammenhängender Raum,  $Y$  und  $Z$  Hausdorff-Räume,  $f : Y \rightarrow Z$  eine Überlagerung,  $g : X \rightarrow Z$  eine stetige Abbildung und  $y_0 \in Y$  ein Punkt mit  $f(y_0) = g(x_0)$  für ein  $x_0 \in X$ . Dann gibt es genau eine Liftung  $h : X \rightarrow Y$  von  $g$  nach  $Y$ .*

Dieser Satz ist eine Verallgemeinerung von Satz 5.8. Die Beweisführung verläuft sehr ähnlich:

**Beweis:** Sei  $x \in X$  beliebig.

Da  $X$  einfach zusammenhängend und damit wegzusammenhängend ist, gibt es einen Weg  $\gamma : [0; 1] \rightarrow X$  von  $x_0$  nach  $x$ . Weil  $g$  stetig ist, ist die Verknüpfung  $g \circ \gamma : [0; 1] \rightarrow Z$  ebenfalls ein Weg mit

$$g(\gamma(0)) = g(x_0) = f(y_0) \quad .$$

Nach Satz 6.4 gibt es auf diesem Weg eine eindeutig bestimmte Liftung  $h \circ \gamma$  und damit definiert man  $h(x) := h(\gamma(1))$ . Zeige, dass  $h(x)$  nicht von der Wahl des Weges  $\gamma$  abhängt:

Sei  $\hat{\gamma} : [0; 1] \rightarrow X$  ein weiterer Weg von  $x_0$  nach  $x$ .

Da  $X$  einfach zusammenhängend ist, gibt es eine Homotopie  $H : [0; 1] \times [0; 1] \rightarrow X$  von  $\gamma$  nach  $\hat{\gamma}$ , d. h.  $H(0; t) = \gamma(t)$  und  $H(1; t) = \hat{\gamma}(t)$ . Für alle  $\lambda \in [0; 1]$  ist die Verknüpfung  $L_\lambda := g \circ H_\lambda$  wieder ein Weg und wegen der Stetigkeit von  $g$  auf ganz  $X$ , ist die durch  $L(\lambda; t) := L_\lambda(t)$  definierte Funktionenschar ebenfalls eine Homotopie. Nach Satz 6.7 gibt es also eine eindeutig bestimmte Liftung  $h \circ H$ . Insbesondere ist der Endpunkt  $h(H(0; 1)) = h(H(\lambda; 1)) = h(H(1; 1)) = h(x)$  eindeutig bestimmt.

Bleibt noch die Stetigkeit von  $h$  zu zeigen:

Sei  $x \in X$  weiterhin beliebig mit  $g(x) = z$  und  $h(x) = y$  und  $V$  eine beliebige Umgebung von  $y$ .

Dann genügt nach Satz 6.1 zu zeigen, dass es eine Umgebung  $U$  von  $x$  existiert, so dass

$$h(U) \subseteq V \quad .$$

Per definitionem von  $h(x)$  ist

$$f(h(x)) = f(y) = z \quad .$$

Da  $f$  eine Überlagerung ist, gibt es für jede Umgebung  $W$  von  $z$  eine Umgebung  $\hat{V}$  von  $y$ , so dass

$$f|_{\hat{V}} : \hat{V} \rightarrow W$$

ein Homöomorphismus ist. O.B.d.A. sei  $\hat{V} \subseteq V$ , sonst betrachte  $\tilde{V} := V \cap \hat{V}$ . Dann ist  $f|_{\tilde{V}}$  ebenfalls ein Homöomorphismus.

Definiere  $f(\hat{V}) =: \hat{W}$ .

Dann ist  $\hat{W}$  eine Umgebung von  $z$ , da  $\hat{V}$  eine Umgebung von  $y$  ist. Da  $g$  stetig in  $x$  ist, gibt es eine Umgebung  $U$  von  $x$ , so dass

$$g(U) \subseteq \hat{W} \quad . \quad (36)$$

Sei nun  $\tilde{x} \in U$  beliebig.

Da  $X$  einfach zusammenhängend ist, gibt es einen Weg  $\tilde{\gamma} : [0; 1] \rightarrow U$  von  $x$  nach  $\tilde{x}$ . Definiere  $h(\hat{x})$  für alle  $\hat{x} \in \tilde{\gamma}([0; 1])$  wie oben als eindeutige Liftung von  $g$  auf dem Weg  $\gamma \oplus \tilde{\gamma}$ . Da alle diese  $\hat{x}$  in  $U$  liegen, folgt aus (36):

$$g(\hat{x}) \in \hat{W} \quad \text{für alle } \hat{x} \in \tilde{\gamma}([0; 1]) \quad .$$

Insbesondere gilt dies auch für  $\tilde{x} = \tilde{\gamma}(1)$ . Da  $h$  die eindeutig bestimmte Liftung ist, gilt

$$h(\hat{x}) = f^{-1}(g(\hat{x}))$$

und da  $f|_{\hat{V}}$  ein Homöomorphismus ist, folgt

$$h(\hat{x}) \in \hat{V} \subseteq V \quad ,$$

womit die Stetigkeit von  $h$  in  $x$  bewiesen wäre.



## Literatur

- [1] John M. Ball. Liquid crystals. Lecture notes.
- [2] P. G. de Gennes und J. Prost. *The Physics of Liquid Crystals*. Oxford University Press, second edition, 1993.
- [3] Lawrence C. Evans. *Partial Differential Equations*. American Mathematical Society, second edition, 1998.
- [4] Arthur Lösche. Molekulare Ordnung und Orientierung, insbesondere bei Flüssigkristallen. *Sitzungsberichte der Sächsischen Akademie der Wissenschaften zu Leipzig, Mathematisch-Naturwissenschaftliche Klasse*, 121, 1990.
- [5] John M. Ball und Arghir Zarnescu. Orientability and energy minimization in liquid crystal models. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 202:493–535, 2011.
- [6] Nigel Mottram und Chris Newton. Introduction to q-tensor theory. Technical report, University of Strathclyde, 2004.
- [7] N. Schophol und T.J. Sluckin. Defect core structure in nematic liquid crystals. *Physical Review Letters*, 59(22):2582–2584, 1987.
- [8] Clifford Truesdell und Walter Noll. *An introduction to continuum mechanics*. Dordrecht, 1993.
- [9] [http://otech7.tuwien.ac.at/fkp\\_sk\\_d.html](http://otech7.tuwien.ac.at/fkp_sk_d.html)(Abbildung 2). [online, September 2013].
- [10] [http://www.tf.uni-kiel.de/matwis/amat/mw1\\_ge/kap\\_5/backbone/r5\\_2\\_1.html](http://www.tf.uni-kiel.de/matwis/amat/mw1_ge/kap_5/backbone/r5_2_1.html)(Abbildung 1). [online, September 2013].
- [11] Epifanio G. Virga. *Variational Theories for Liquid Crystals*. Chapman and Hall, first edition, 1994.