

Министерство образования и науки Российской Федерации
Санкт-Петербургский национальный исследовательский
университет информационных технологий, механики и оптики

***НАНОСИСТЕМЫ:
ФИЗИКА, ХИМИЯ, МАТЕМАТИКА***

2011, том 2, № 4

Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics
2011, volume 2(4)



НАНОСИСТЕМЫ: ФИЗИКА, ХИМИЯ, МАТЕМАТИКА

РЕДАКЦИОННЫЙ СОВЕТ

Председатель – д.т.н., проф. В.Н. Васильев (*НИУ ИТМО, С.-Петербург*), академик РАН В.М. Иевлев (*ВГУ, Воронеж*), академик РАН А.И. Русанов (*СПбГУ, С.-Петербург*), академик РАН Ю.Д. Третьяков (*МГУ, Москва*)

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ

Главный редактор – академик РАН Н.Ф. Морозов (*СПбГУ, С.-Петербург*)

Зам. главного редактора – д.ф.-м.н., проф. И.Ю. Попов (*НИУ ИТМО, С.-Петербург*)

Зам. главного редактора по направлениям:

Физика – д.ф.-м.н., проф. В.М. Уздин (*СПбГУ, С.-Петербург*),

Химия – чл.-корр. РАН В.В. Гусаров (*СПбГТИ (ТУ), С.-Петербург*),

Механика – д.ф.-м.н., проф. А.К. Беляев (*ИПМаш РАН, С.-Петербург*),

Математика – д.ф.-м.н., проф. И.Ю. Попов (*НИУ ИТМО, С.-Петербург*).

Члены редколлегии:

академик РАН В.Н. Пармон (*НГУ, Новосибирск*); академик РАН П.Д. Саркисов (*МХТИ, Москва*); чл.-корр. РАН Е.А. Гудилин (*МГУ, Москва*); чл.-корр. РАН Д.А. Индейцев (*ИПМаш РАН, С.-Петербург*); чл.-корр. РАН П.С. Копьев (*ФТИ им. А.Ф.Иоффе РАН, С.-Петербург*); чл.-корр. РАН И.В. Мелихов (*МГУ, Москва*); д.ф.-м.н., проф. В.Г. Беспалов (*НИУ ИТМО, С.-Петербург*); д.ф.-м.н., проф. А.Я. Вуль (*ФТИ РАН, С.-Петербург*); д.ф.-м.н., проф. А.О. Голубок (*НИУ ИТМО, С.-Петербург*); д.х.н., проф. А.Л. Ивановский (*ИХТТ УрО РАН и УрГУ, Екатеринбург*); д.ф.-м.н., проф. С.А. Козлов (*НИУ ИТМО, С.-Петербург*); д.ф.-м.н., проф. Ю.Б. Кудасов (*ВНИИЭФ, Саров*); д.ф.-м.н., проф. С.Е. Кулькова (*ИФПМ СО РАН, Томск*); д.ф.-м.н., проф. В.А. Маргулис (*Морд. ГУ, Саранск*); д.ф.-м.н., проф. Г.П. Мирошниченко (*НИУ ИТМО, С.-Петербург*); д.ф.-м.н., проф. Б.С. Павлов (*СПбГУ и Оклендский университет, Новая Зеландия*); д.ф.-м.н., проф. В.П. Романов (*СПбГУ, С.-Петербург*); д.ф.-м.н., проф. В.Я. Рудяк (*НГАСУ, Новосибирск*); д.х.н., проф. В.М. Таланов (*ЮРГТУ, Новочеркасск*); д.ф.-м.н., с.н.с. А.В. Чижов (*ОИЯИ, Дубна*); к.х.н., доц. О.В. Альмяшева (*СПбГЭТУ «ЛЭТИ», С.-Петербург*); к.ф.-м.н., доц. С.А. Чивилихин (*НИУ ИТМО, С.-Петербург*).

Иностранцы члены редколлегии:

чл.-корр. НАН Украины А.В. Рагуля; д.ф.-м.н., проф. В.М. Адамян (*Одесский национальный университет, Одесса, Украина*); PhD, проф. А.А. Киселев (*Университет Висконсина, США*); проф. Х. Нейдхардт (*Институт прикладного анализа и стохастики имени Вейерштрасса, Берлин, Германия*); PhD, проф. К. Панкрашкин (*Университет Париж-Юг, Орсе, Франция*).

Редакторы:

к.т.н., доц. И.В. Блинова; к.ф.-м.н., доц. М.А. Скрябин; к.ф.-м.н., доц. Е.С. Трифанова (*НИУ ИТМО, С.-Петербург*).

Адрес: НИУ ИТМО, 197101, Санкт-Петербург, Кронверкский пр., 49, комн. 311.

Телефон: (812)232-67-65.

Электронная версия журнала размещена на сайте: <http://nanojournal.ifmo.ru/>

E-mail: ropov@mail.ifmo.ru



NANOSYSTEMS:

PHYSICS, CHEMISTRY, MATHEMATICS

EDITORIAL COUNCIL

V.N. Vasiliev (*St. Petersburg*),
Academician A.I. Rusanov (*St. Petersburg*),
Academician Yu.D. Tret'yakov (*Moscow*),
Academician V.M. Ievlev (*Voronezh*)

EDITORIAL BOARD

Editor-in-Chief – academician N.F. Morozov (*St. Petersburg*)

Vice Editor-in-Chief – I.Yu. Popov (*St. Petersburg*)

Section Co-Editors:

Physics – V.M. Uzdin (*St. Petersburg*),

Chemistry – Corresponding member of RAS V.V. Gusarov (*St. Petersburg*),

Mechanics – A.K. Belyaev (*St. Petersburg*),

Mathematics – I.Yu. Popov (*St. Petersburg*).

Members:

Academician V.N. Parmon (*Novosibirsk*); Academician P.D. Sarkisov (*Moscow*);
Corresponding member of RAS E.A. Gudilin (*Moscow*); Corresponding member of RAS
D.A. Indeitsev (*St. Petersburg*); Corresponding member of RAS P.S. Kop'ev (*St. Petersburg*);
Corresponding member of RAS I.V. Melikhov (*Moscow*); Corresponding member of NAN of
Ukraine A.V. Ragulya; V.M. Adamyan (*Odessa*); O.V. Al'myasheva (*St. Petersburg*);
V.G. Bespalov (*St. Petersburg*); S.A. Chivilikhin (*St. Petersburg*); A.V. Chizhov (*Dubna*);
A.O. Golubok (*St. Petersburg*); A.L. Ivanovskii (*Ekaterinburg*); A.A. Kiselev (*Wisconsin*);
S.A. Kozlov (*St. Petersburg*); Yu.B. Kudasov (*Sarov*); S.E. Kul'kova (*Tomsk*); V.A. Margulis
(*Saransk*); G.P. Mirosnichenko (*St. Petersburg*); H. Neidhardt (*Berlin*); K. Pankrashkin
(*Paris*); B.S. Pavlov (*St. Petersburg and Auckland*); V.P. Romanov (*St. Petersburg*);
V.Ya. Rudyak (*Novosibirsk*); V.M. Talanov (*Novocherkassk*); A.Ya. Vul (*St. Petersburg*).

Editors:

I.V. Blinova; M.A. Skryabin; E.S. Trifanova (*St. Petersburg*).

Address: SPbNRU ITMO, 197101, St. Petersburg, Kronverkskiy pr., 49, room 311

Phone: (812)232-67-65

Journal site: <http://nanojournal.ifmo.ru/>

E-mail: popov@mail.ifmo.ru

Aim and scope

The scope of the journal includes all areas of nano-sciences. Papers devoted to basic problems of physics, chemistry and mathematics inspired by nanosystems investigations are welcomed. Both theoretical and experimental works concerning to properties and behavior of nanosystems, problems of its creation and application, mathematical methods of nanosystem studies are considered.

The journal publishes scientific reviews (up to 30 journal pages), research papers (up to 15 pages) and letters (up to 5 pages). All manuscripts are reviewed. Authors are informed about the referee opinion and the Editorial decision.

Содержание / Content

МАТЕМАТИКА / MATHEMATICS

R. Adami, D. Noja*

**Nonlinearity-defect interaction: symmetry breaking bifurcation
in a NLS with a δ impurity** 5

M. Asorey, J.M. Muñoz-Castañeda*

Attractive or repulsive Casimir effect and boundary conditions 20

N. Bagraev, G.Martin, B. S. Pavlov, A. Yafyasov

Landau-Zener effect for a quasi-2D periodic sandwich 32

X.Y. Lu*

Bifurcation condition for optimal sets of the average distance functional 51

L. S. Pulkina*

A nonlocal problem with integral conditions for hyperbolic equation 61

Y. Saitō, T. Umeda*

Threshold eigenfunctions and threshold resonances of some relativistic operators 71

ФИЗИКА / PHYSICS

В.П. Романов, С.В. Ульянов, К.Г. Черняк

**Влияние электрического поля на структуру сегнетоэлектрических
шеvronных смектиков C***
K.G. Chernyak, V.P. Romanov, S.V. Ulyanov
Effect of electric field on the structure of the ferroelectric chevron smectics C* 78

В.Я. Рудяк, А.А. Белкин, В.В. Егоров, Д.А. Иванов

Моделирование течений в наноканалах методом молекулярной динамики
V.Ya. Rudyak, A.A. Belkin, V.V. Egorov, D.A. Ivanov
Simulation of flows in nanochannels by the molecular dynamics method 100

С. М. Аульченко, Е.В. Картаев, О.Б. Ковалев

**Моделирование образования наночастиц диоксида титана в проточном
плазмохимическом реакторе**
S.M. Aulchenko, E.V. Kartayev, O.B. Kovalev
**Numerical simulation of formation of the titan dioxide in the plasma-chemical reactor
of flowing-type** 113

ХИМИЯ / CHEMISTRY

М.А. Фролова, А.С. Тутыгин, А.М. Айзенштадт, В.С. Лесовик,

Т.А. Махова, Т.А. Пospelova

Критерий оценки энергетических свойств поверхности наноматериалов
M.A. Frolova, A.S. Tutygin, A.M. Aizenstadt, V.S. Lesovik, T.A. Makhova, T.A. Pospelova
Evaluation criteria of energy properties of surface of nanomaterials 120

А.Н. Бугров, О.В. Альмяшева

Формирование наночастиц Cr₂O₃ в гидротермальных условиях
A.N. Bugrov, O.V. Almyasheva
Formation of nanoparticles Cr₂O₃ in hydrothermal conditions 126

Информация и правила для авторов 133

Summaries 136

* marked works were presented at the conference "Operator theory & boundary value problems",
May 25 – 27, 2011, Orsay, France

UDC 517.958

NONLINEARITY-DEFECT INTERACTION: SYMMETRY BREAKING BIFURCATION IN A NLS WITH A δ' IMPURITY

R. Adami¹, D. Noja¹

¹Dipartimento di Matematica e Applicazioni, Università di Milano Bicocca, Italy

riccardo.adami@unimib.it, diego.noja@unimib.it

PACS 05.45.-a, 03.65.-W, 05.45.Yv

We illustrate some new results and comment on perspectives of a recent research line, focused on the stability of stationary states of nonlinear NLS with point interactions. We describe in detail the case of a “ δ' ” interaction, that provides a rich model endowed with a pitchfork bifurcation with symmetry breaking in the family of ground states. Finally, we give a direct proof of the stability of the ground states in the cases of a subcritical and critical (in the sense of the blow-up) nonlinearity power.

Keywords: nonlinear dynamics, quantum mechanics, solitons, symmetry breaking, pitchfork bifurcation.

1. A new range of application for point interactions

One of the most celebrated features of the point interactions (PI) lies in their capability of supplying exactly solvable models. For this reason, PI have been widely employed to construct toy models and for pedagogical purposes. Nonetheless, they prove useful also when used to model real physical systems: the more a physically relevant quantity (e.g. energy spectrum or time evolution) is explicitly known, the more information can be extracted. General theory and reference to physical applications with extended bibliography are in (see [10, 11]). In particular, PI fit well the needs of modeling the so-called defects, namely, small inhomogeneities in a medium where a wave propagates, under the hypothesis that the details of the internal structure of the inhomogeneity are not relevant, so that its action can be modeled as concentrated at a point. More precisely, the smallness of the inhomogeneity is to be evaluated with respect to the typical wavelength of the incoming waves, or equivalently, in the case of a quantum system, to the width of the wave function. In this paper we address the analysis of effects of the interaction between nonlinearity and point defects in the behaviour of solutions of nonlinear Schrödinger (NLS) equation. We prefer not to enter in a description of the vast field of application of the NLS equation, from the theory of integrable systems and inverse scattering to the propagation of amplitude envelope of waves. We cite just two relevant applications of the NLS as an effective model for real physical systems: dynamics of Bose-Einstein condensates (BEC) and laser beam propagation in nonlinear (Kerr) media. In both cases it is physically meaningful to consider the propagation of NLS waves in the presence of defects. In particular, the recent spectacular development of both theoretical research and experimental technology involving BEC (see [45] and references therein, and [13, 14, 16]) provides point interactions with a wide range of applications.

As widely known, in current experiments the formation of a BEC is induced in bounded region of spaces, usually delimited by magnetic and/or optical traps. In such situations, the condensate lies in a one-particle quantum state, whose corresponding wavefunction is characterized

as the minimizer of the Gross-Pitaevskii functional. When the trap is removed, the wavefunction of the BEC spreads out according to the evolution prescribed by the cubic Schrödinger equation

$$i\partial_t\psi(t, x) = -\partial_x^2\psi(t, x) + \alpha|\psi(t, x)|^2\psi(t, x), \quad (1.1)$$

where we denoted by ψ the wave function of the condensate, and the space variable x belongs to \mathbf{R} , \mathbf{R}^2 or \mathbf{R}^3 according to the fact that we are modeling a *cigar-shaped* or a *disc-shaped* or a genuinely three-dimensional BEC. We recall that the nonlinearity carries the information that, even though its state is an actual one-particle state, the condensate consists of a large number of interacting particles (in the experimentally realized condensates, at least thousands); the fact that the nonlinearity is cubic means that the dynamical effects of the two-particle interactions overwhelm the effects of many-body collisions. The strength of the nonlinear term, given by the constant α , is proportional to the scattering length of the two-body interaction between the particles. Here we do not summarize the progress in the derivation of (1.1) as an effective equation for a many-body quantum system. The interested reader is referred to [20–22] for the three-dimensional problem, to [34] for the two-dimensional case, and to [1, 2, 12] for the case of cigar-shaped condensates. In the following we focus on this last case, in which, on one hand, the nonlinearity is milder, while, on the other hand, the family of point interactions is richer.

A natural question in this context is the following: what happens when a wave (i.e. a condensate) is sent against a defect? One would guess (and it has been shown for some models, see e.g. [19, 29, 32, 44]) that the incoming wave splits into a reflected wave, a transmitted wave and a captured component. Similar results have been proven for propagation on graphs also (see [4]), in the case of a repulsive vertex, where no capture occurs. Indeed, it seems reasonable to conjecture that a capture can occur only if a nonlinear stationary state exists. Since equation (1.1) is dispersive, the presence of a nonlinear stationary state (or more than one) must be related to the defect. This is the reason why such possible stationary states are called *defect modes*. Even though at this stage it is an unproven fact, it is plausible to link the persistence of a captured wave with some sort of stability (in a sense to be made precise) of the defect mode. For this reason the interest in determining the stability of the defect modes lies not only in the problem itself, but extends to models of reality too.

As a short review on results on stability and instability of defect modes in the presence of a power nonlinearity $|\psi|^{2\mu}\psi$, we recall results proved in [26, 27, 40], where the effects of a δ -like defect are analysed. The first cited work deals with an attractive defect, and shows that, for any frequency ω above the proper frequency of the unique bound state of the delta potential, there is a unique defect mode that oscillates at frequency ω . It turns out that the wavefunction of such a defect mode is nothing but the nonlinear deformation of the linear bound state. The stability (more exactly, the *orbital* stability, see Definition 2.2) of such a mode depends on μ and ω : if $\mu \leq 2$, then the defect mode is stable for any ω ; if $\mu > 2$, then it becomes unstable at high frequencies. References [26, 40] extend the analysis to a repulsive delta-like defect. The situation becomes more involved in the case of a more singular defect, for instance, the so-called δ' defect. The following sections are devoted to this case. For more details see also the comprehensive review [7] and the forthcoming paper [6].

The established theoretical framework for the study of stability is provided by Weinstein and Grillakis-Shatah-Strauss theory (see [30, 31, 49, 50]) or, alternatively, by Lions concentration-compactness method (see [41, 42] and [17] for a review). The occurrence of bifurcation in the ground state has been investigated in [33] and more recently in [28, 35, 36, 43, 46].

2. Results

2.1. The δ' “potential”

The so-called δ' -defect, with strength $-\gamma$, located (just to be definite) at zero, is defined imposing the boundary condition

$$\psi(0+) - \psi(0-) = -\gamma\psi'(0+) = -\gamma\psi'(0-) \quad (2.1)$$

to the solutions to (1.1) (see [9, 23]). The parameter γ is real; when positive, the defect is called *attractive*, otherwise *repulsive*. More formally, one defines a *linear Hamiltonian operator* H_γ as the operator that acts as $-\partial_x^2$ on the domain $D(H_\gamma)$ made of functions in $H^2(\mathbb{R}^-) \oplus H^2(\mathbb{R}^+)$ satisfying (2.1). Note that the only continuous elements of the domain of H_γ have a vanishing derivative at the origin. The operator H_γ is a self-adjoint operator with the following spectral features: singular continuous spectrum is empty, absolutely continuous spectrum is given by the positive halfline and point spectrum is empty in the repulsive case, and coincides with $\{-4/\gamma^2\}$ in the attractive case. In the last case the corresponding (non-normalized) eigenfunction is

$$\varphi_\gamma(x) = \epsilon(x)e^{-\frac{2}{\gamma}|x|},$$

where we denoted the sign function by ϵ . Notice that φ_γ is odd. The quadratic form F_γ associated to H_γ is defined on the domain $Q := H^1(\mathbb{R}^+) \oplus H^1(\mathbb{R}^-)$ (we stress that Q is independent of γ) and reads

$$F_\gamma(\psi) = \|\psi'\|^2 - \gamma^{-1}|\psi(0+) - \psi(0-)|^2,$$

where we made the following abuse of notation

$$\|\psi'\|^2 := \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{\varepsilon}^{+\infty} |\psi'(x)|^2 dx + \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{-\varepsilon} |\psi'(x)|^2 dx,$$

that will be extensively repeated.

At variance with the delta potential, the Schrödinger operator with a δ' interaction cannot be derived from a form sum, because the δ' is not small with respect to the laplacian. Nevertheless it can be obtained as the norm-resolvent limit of the sum of three δ potentials (see [18, 24]) with a fine tuned rescaling, defined as follows

$$[H_\gamma + \nu]^{-1} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left[-\partial_x^2 - \left(\frac{1}{\gamma} + \frac{1}{2\varepsilon} \right) \delta(x - \varepsilon) - \left(\frac{1}{\varepsilon} + \frac{\gamma}{2\varepsilon^2} \right) \delta(x) - \left(\frac{1}{\gamma} + \frac{1}{2\varepsilon} \right) \delta(x - \varepsilon) + \nu \right]^{-1}$$

for any $-\nu$ in the resolvent set of H_γ (see Figure 1).

Moreover, since any delta potential, in its turn, can be approximated by a strong limit of rescaled regular potentials, then it is possible to interpret a δ' -prime potential as the suitable limit of rescaled, well-behaved potentials. Let us remark that if ψ belongs to the *operator domain* of H_γ , then the form associated to H_γ has the expression

$$(\psi, H_\gamma \psi) = \|\psi'\|_2^2 - \gamma |\psi'(0+)|^2,$$

which explains the questionable name of δ' .

2.2. Combining nonlinearity and defect

Once constructed the operator H_γ , the evolution in the presence of both a generic power nonlinearity and a defect is defined by

$$i\partial_t \psi(t, x) = H_\gamma \psi(t, x) + \alpha |\psi(t, x)|^{2\mu} \psi(t, x). \quad (2.2)$$

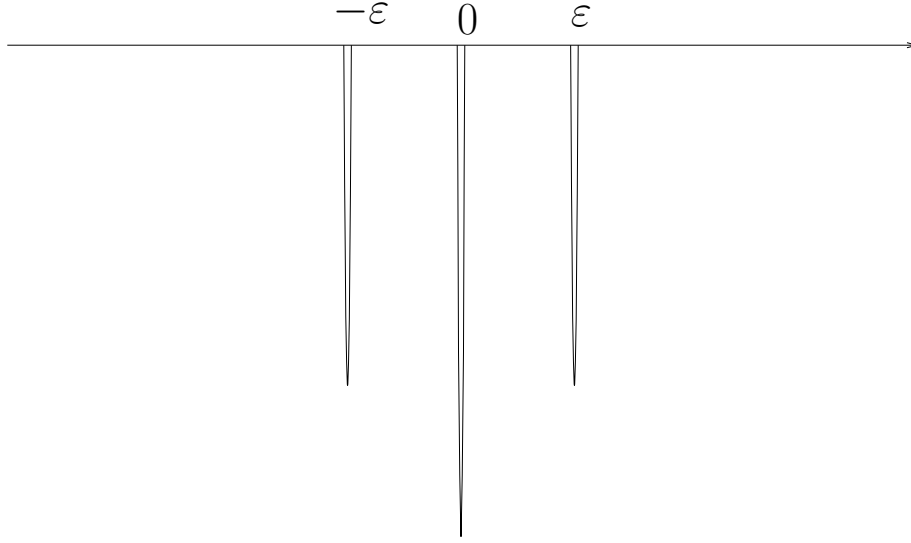


Fig. 1. A regular approximation for an attractive δ -prime potential centred at zero. To obtain an approximation for a repulsive δ -prime, one must reverse the central well.

For such equation it is possible to prove global well-posedness if $\mu < 2$ (see [3]), local well-posedness if $\mu \geq 2$ (see [6]), and to provide examples of blow-up for this last case (see [8]). However, until the solution exists, L^2 -norm and energy

$$\mathcal{E}(\psi) = \frac{1}{2}\|\psi'\|^2 - \frac{1}{2\gamma}|\psi(0+) - \psi(0-)|^2 - \frac{\lambda}{2\mu + 2}\|\psi\|_{2\mu+2}^{2\mu+2}$$

are conserved by time evolution.

Thanks to the existence of a conserved energy it is possible to introduce a notion of *nonlinear ground state*: intuitively, one would define it as a minimizer of the energy among the wavefunctions endowed with the same L^2 -norm, as this is the definition that naturally extends the more familiar notion of linear ground state.

As in the linear case, it is meaningful to search for *stationary states* of (2.2), i.e. solutions of the form

$$\psi(x, t) = e^{i\omega t}\psi_\omega(x) . \quad (2.3)$$

The amplitudes ψ_ω are solutions of the stationary equation

$$H_\gamma\psi_\omega + \omega\psi_\omega - \lambda|\psi_\omega|^{2\mu}\psi_\omega = 0. \quad (2.4)$$

This leads to the introduction of the so-called *action functional*

$$S_\omega(\psi) = \mathcal{E}(\psi) + \frac{\omega}{2}\|\psi\|^2, \quad (2.5)$$

defined on the energy domain Q . It is immediate indeed that Euler-Lagrange equations for S_ω are given just by (2.4). Note that the action (and the energy as well) is not bounded from below on Q . To overcome this problem, a *ground state* ψ_ω is usually defined as a minimizer of S_ω constrained on the *Nehari manifold*

$$I_\omega(\psi) = S'_\omega(\psi)\psi = (\psi, H_\gamma\psi - \lambda|\psi|^{2\mu}\psi + \omega\psi) = 0.$$

The above set is a codimension one manifold that obviously contains all stationary points of S_ω , and it turns out that on it the action is bounded from below.

The relation between the constrained variational problem for \mathcal{E} and S_ω is a byproduct of the Grillakis-Shatah-Strauss theory on stability of stationary states (see [30], [31]) applied to minimizers of S_ω : a minimizer ψ_ω of the action on the Nehari manifold is a local minimizer of the energy among the function with the same L^2 -norm $\|\psi_\omega\|$ *if and only if it is stable* (in the sense of Definition (2.2)).

The following preliminary result is obtained through variational techniques (we remove the subscript ω from ψ_ω when not needed to avoid ambiguity):

Theorem 2.1. *For any $\omega > \frac{4}{\gamma^2}$ there exists at least one minimizer of S_ω among all functions on the Nehari manifold. Furthermore, the minimizer solves the stationary Schrödinger equation with defect:*

$$H_\gamma \psi + \omega \psi - \lambda |\psi|^{2\mu} \psi = 0. \quad (2.6)$$

For $\omega \leq \frac{4}{\gamma^2}$, equation (2.6) admits no solutions in $D(H_\gamma)$.

The line of the proof is standard, except that: first, the functional space of reference Q is larger than $H^1(\mathbb{R})$; second, the problem is one-dimensional, so that one must cope with a lack of compactness when passing from weak convergence in Q to strong convergence in L^p ; third, the boundary condition to be reconstructed is non standard. A complete proof is in [6].

An important point about Theorem 2.1 is that, in order to find the ground states, it suffices to determine which one among the solutions of (2.6) has least action. This can be made directly, as the solutions to equation (2.6) can be explicitly found. It has been said, however, that the variational analysis provides information beyond the one obtainable through the direct ODE approach; for example, the minimum is constrained to a finite codimension (one in this case) manifold, an information which is important for stability issues.

2.3. Symmetry breaking

Equation (2.6) can be rephrased as follows:

$$-\partial_x^2 \psi + \omega \psi - \lambda |\psi|^{2\mu} \psi = 0, \quad (2.7)$$

with $\psi \in H^2(\mathbb{R}^+) \oplus H^2(\mathbb{R}^-)$ satisfying the boundary condition (2.1).

The only solutions to (2.7) that vanish at infinity are constructed by gluing together two pieces of a solitary wave for the NLS, namely

$$\psi_{\omega, \pm}^{x_1, x_2}(x) = \begin{cases} \pm \lambda^{-\frac{1}{2\mu}} (\mu + 1)^{\frac{1}{2\mu}} \omega^{\frac{1}{2\mu}} \cosh^{-\frac{1}{\mu}} [\mu \sqrt{\omega} (x - x_1)], & x < 0 \\ \lambda^{-\frac{1}{2\mu}} (\mu + 1)^{\frac{1}{2\mu}} \omega^{\frac{1}{2\mu}} \cosh^{-\frac{1}{\mu}} [\mu \sqrt{\omega} (x - x_2)], & x > 0 \end{cases}$$

where the parameters x_1 and x_2 are to be adjusted so that (2.1) is satisfied. Now, it is immediately seen by (2.5) that due to contribution of the point interaction energy, one has

$$S_\omega(\psi_{\omega, -}^{x_1, x_2}) < S_\omega(\psi_{\omega, +}^{x_1, x_2})$$

so we can restrict the search for minimizers to the functions $\psi_{\omega, -}^{x_1, x_2}$, i.e. solutions of (2.6) that *change sign* at the origin (and only there).

For any such function, the boundary condition (2.1) translates into the system

$$\begin{cases} t_1^{2\mu} - t_1^{2\mu+2} = t_2^{2\mu} - t_2^{2\mu+2} \\ t_1^{-1} + t_2^{-1} = \gamma \sqrt{\omega} \end{cases}, \quad 0 \leq t_i = |\tanh(\mu \sqrt{\omega} x_i)| \leq 1, \quad (2.8)$$

whose solutions can be depicted as the intersection of the full and the dashed lines in Figure 2. One immediately finds that for $\frac{4}{\gamma^2} < \omega \leq \frac{4}{\gamma^2} \frac{\mu+1}{\mu}$ the unique solution is given by $t_1 = t_2 = \frac{2}{\gamma \sqrt{\omega}}$,

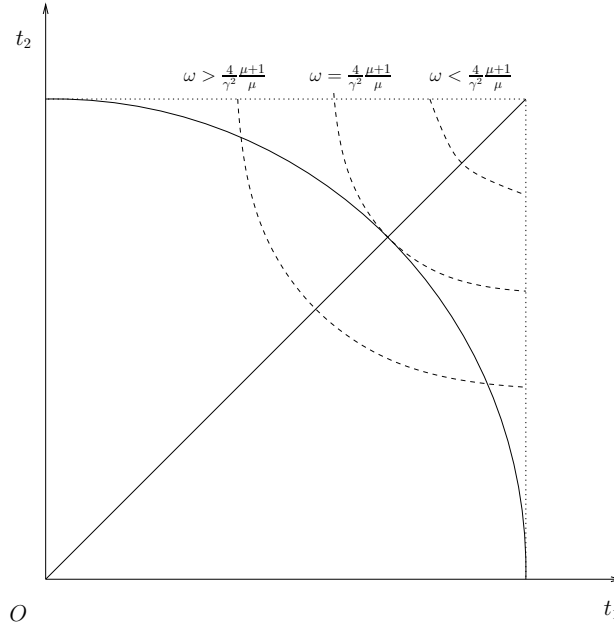


Fig. 2. The full lines represent the solutions to the first equation in (2.8): they consist of the line $0 \leq t_1 = t_2 \leq 1$, and of a curve, that is concave if μ is not too small. The dashed lines represent the solutions to the second equation of (2.8): they consist of a family of hyperbola parametrized by ω

that corresponds to an antisymmetric stationary state $\psi_\omega^{y,-y}$, where

$$y = x_1 = -x_2 = \frac{1}{2\mu\sqrt{\omega}} \log \frac{\gamma\sqrt{\omega} + 2}{\gamma\sqrt{\omega} - 2}.$$

At $\omega = \frac{4}{\gamma^2} \frac{\mu+1}{\mu}$ two new solutions arise, giving birth to two new branches of stationary states that persist for $\omega > \frac{4}{\gamma^2} \frac{\mu+1}{\mu}$; they correspond to the couple of asymmetric stationary states $\psi_\omega^{y_1, -y_2}$, $\psi_\omega^{y_2, -y_1}$, with both y_1 and y_2 positive but, except in the cubic case $\mu = 1$, not in explicit form. A direct computation yields, for these values of ω ,

$$S_\omega(\psi_\omega^{y_1, -y_2}) = S_\omega(\psi_\omega^{y_2, -y_1}) < S_\omega(\psi_\omega^{y, -y}).$$

We conclude that with the growth of the frequency ω there exist *two* branches of asymmetric ground states which bifurcate from the branch of (anti)symmetric ones. We are then in the presence of a spontaneous symmetry breaking of the set of ground states.

2.4. Stability: a pitchfork bifurcation

The study of the stability for such a system can be made by applying the Grillakis-Shatah-Strauss theory (see [30, 31]). This theory provides sufficient conditions for the *orbital stability* of stationary states, which is stability “up to the symmetries”. Roughly speaking, the notion of orbital stability coincides with the ordinary Ljapunov stability *for orbits instead of states*, where orbits are to be understood with respect to a symmetry group. In our case the symmetry group is $U(1)$, corresponding to the well known phase invariance of the NLS, which persists in the presence of point perturbation too. So, a stationary state ψ_ω is said to be *orbitally stable* if at any time a solution to (2.2) remains arbitrarily close *to the orbit* $\{e^{i\theta}\psi_\omega, \theta \in [0, 2\pi)\}$, provided that it started sufficiently close to it. More rigorously,

Definition 2.2. A stationary state ψ_ω is called *orbitally stable* if for any $\varepsilon > 0$ there exists a $\sigma > 0$ s.t.

$$\inf_{\theta \in [0, 2\pi)} \|\psi_0 - e^{i\theta} \psi_\omega\|_Q \leq \sigma \Rightarrow \sup_{t > 0} \inf_{\theta \in [0, 2\pi)} \|\psi_t - e^{i\theta} \psi_\omega\|_Q \leq \varepsilon,$$

where ψ_t is the solution corresponding to the initial condition ψ_0 .

A stationary state is called *orbitally unstable* if it is not orbitally stable.

The Grillakis-Shatah-Strauss theory (see [30, 31]) carries out a deep investigation of the orbital stability of stationary states of (infinite dimensional) hamiltonian systems with symmetries, generalizing previous work by the same authors and independently by Michael Weinstein (see [48–50]).

They succeeded in giving sufficient conditions for stability and instability by studying second-order approximation of the action (linearization) around a stationary state, and carefully controlling the nonlinear remainders exploiting symmetries and conservation laws. In the present situation, as it is well known, one gets a hamiltonian system from NLS equation passing to real variables $(\eta, \rho) = (\operatorname{Re}\psi, \operatorname{Im}\psi)$. We confine ourself to a brief operative summary of the method, and so we omit the (however important) connection with hamiltonian systems referring to the original literature for details.

Neglecting higher order terms, one has for the action expanded around the stationary state ψ_ω (we omit other superscripts for simplicity)

$$S_\omega(\psi_\omega + \eta + i\rho) \cong S_\omega(\psi_\omega) + \frac{1}{2} \left(S''_\omega(\psi_\omega) \begin{pmatrix} \eta \\ \rho \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \eta \\ \rho \end{pmatrix} \right).$$

The Hessian operator $S''_\omega(\psi_\omega)$ can be represented in matrix form as (we implicitly introduced the representation of a function $\eta + i\rho$ as the real vector function (η, ρ))

$$S''_\omega(\psi_\omega) := \begin{pmatrix} L_1 & 0 \\ 0 & L_2 \end{pmatrix},$$

where L_1 and L_2 are two selfadjoint operators with $D(L_1) = D(L_2) = D(H_\gamma)$ given by

$$\begin{aligned} L_1 &= H_\gamma + \omega - \lambda(2\mu + 1)|\psi_\omega|^{2\mu} \\ L_2 &= H_\gamma + \omega - \lambda|\psi_\omega|^{2\mu}. \end{aligned}$$

Now, were $S''_\omega(\psi_\omega)$ a positive operator, the (linear) stability of ψ_ω would be immediately established, as the situation would be analogous to what happens for a classical particle in a potential well. Unfortunately, this cannot be the case. First of all, the operator $S''_\omega(\psi_\omega)$ is endowed with a non trivial kernel that consists of the linear span of $(0, \psi_\omega)$, due to the symmetry. Second, recall that every ground state ψ_ω is a minimizer only on the constraint provided by the Nehari manifold, which has codimension one. On the space orthogonal to the Nehari manifold, $S''_\omega(\psi_\omega)$ is surely negative, as

$$(\psi_\omega, S''_\omega \psi_\omega) < 0.$$

It follows that there exists a cone on which $S''_\omega(\psi_\omega)$ is actually negative.

Nevertheless, it is possible that the dynamical constraints given by the conservation laws prevent the wave function from further evolving far inside that cone, finally forcing the solution to remain close to the orbit of the ground state. The Grillakis-Shatah-Strauss theory establishes that this is the case if a certain number of conditions are satisfied. In its easiest version, such a set of conditions can be collected as follows

i) Spectral conditions:

- (1) $\operatorname{Ker} L_2 = \operatorname{Span}\{\psi_\omega\}$,
- (2) $L_2 \geq 0$,

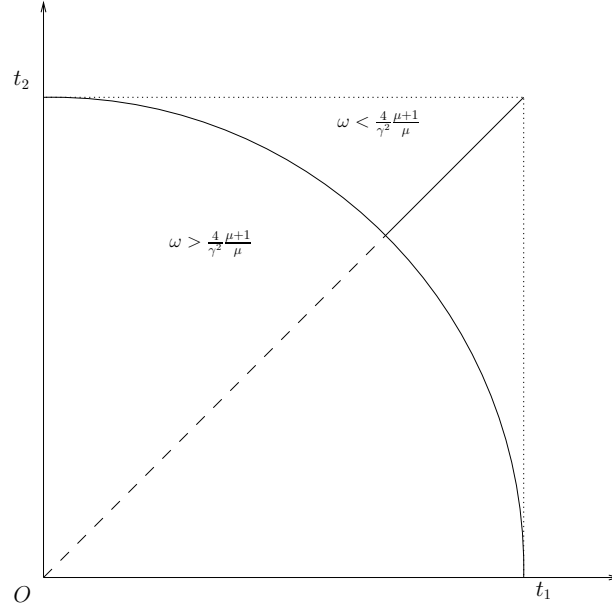


Fig. 3. Bifurcation diagram for $\mu \leq 2$. The full line denotes stable stationary states, while the dashed line represents unstable stationary states. Notice that ground states are always stable

(3) $\text{Ker}L_1 = \{0\}$,

(4) L_1 has exactly *one* negative eigenvalue.

ii) *Vakhitov-Kolokolov's criterion* (see [47]):

$$\frac{d\|\psi_\omega\|_2}{d\omega} > 0,$$

that, since $\frac{dS_\omega(\psi_\omega)}{d\omega} = \frac{1}{2}\|\psi_\omega\|_2^2$, is equivalent to

$$\frac{d^2S_\omega(\psi_\omega)}{d\omega^2} > 0. \quad (2.9)$$

In the case of interest, conditions *i*) and *ii*) are verified except for the stationary states in the branch $\psi_\omega^{y,-y}$ with $\omega > \frac{4}{\gamma^2} \frac{\mu+1}{\mu}$, where a more sophisticated version of conditions *i*) and *ii*) is needed, again provided by the Grillakis-Shatah-Strauss theory (see [31]).

The results on stability can be summed up as follows.

Theorem 2.3. *For any $\mu > 0$*

(1) *If $\omega < \frac{4}{\gamma^2} \frac{\mu+1}{\mu}$, then the unique (up to a phase) ground state $\psi_\omega^{y,-y}$ is orbitally stable.*

(2) *If $\omega > \frac{4}{\gamma^2} \frac{\mu+1}{\mu}$, then the stationary state $\psi_\omega^{y,-y}$ is orbitally unstable.*

For $0 \leq \mu \leq 2$, $\omega > \frac{4}{\gamma^2} \frac{\mu+1}{\mu}$, the two ground states $\psi_\omega^{y_1,-y_2}$, $\psi_\omega^{y_2,-y_1}$ are orbitally stable.

For $2 < \mu < \mu^ < 2.5$ there exist $\omega_1 > \frac{4}{\gamma^2} \frac{\mu+1}{\mu}$ and $\omega_2 > \omega_1$, such that, if $\frac{4}{\gamma^2} \frac{\mu+1}{\mu} < \omega < \omega_1$, then $\psi_\omega^{y_1,-y_2}$ and $\psi_\omega^{y_2,-y_1}$ are orbitally stable; if $\omega > \omega_2$, then $\psi_\omega^{y_1,-y_2}$ and $\psi_\omega^{y_2,-y_1}$ are orbitally unstable.*

For $\mu > \mu^$, there exist $\omega_1 > \frac{4}{\gamma^2} \frac{\mu+1}{\mu}$, $\omega_2 > \omega_1$, such that, if $\frac{4}{\gamma^2} \frac{\mu+1}{\mu} < \omega < \omega_1$ or $\omega > \omega_2$, then $\psi_\omega^{y_1,-y_2}$ and $\psi_\omega^{y_2,-y_1}$ are orbitally unstable.*

The bifurcation diagrams for the system are portrayed in Figures 3 and 4.

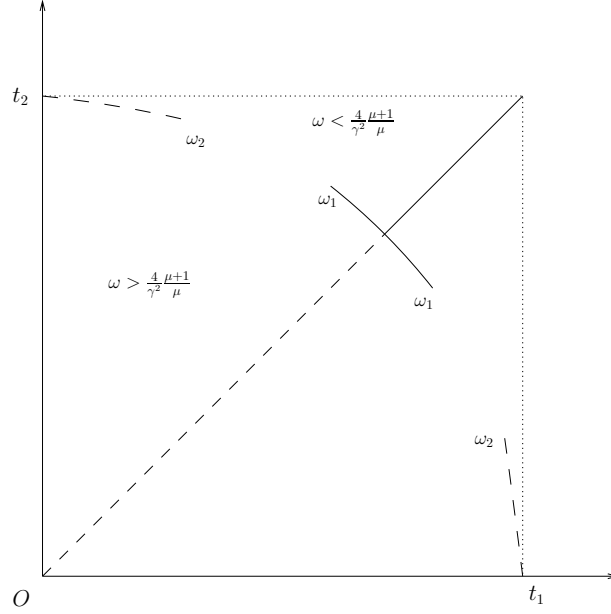


Fig. 4. Bifurcation diagram for $2 < \mu < \mu^*$. We have no results for the interval (ω_1, ω_2) , but we conjecture that it is always possible to choose $\omega_1 = \omega_2$

3. Proof of stability

The content of this section is technical. Here we give a proof of the stability of all ground states in the case $\mu \leq 2$. Under such a restriction, every ground state satisfies the Vakhitov-Kolokolov's criterion. The proof we present here differs from the one given in [6], as it does not use the Grillakis-Shatah-Strauss theory and so it does not refer to linearization. We decided to include in this report such a technical part in order to convey some information on the method of proofs and on the techniques employed. An analogous analysis is given for the case of a NLS with δ interaction in [27], and both are inspired by [25].

In order to proceed we need some preliminary definitions and results.

First, the definition of orbital stability can be reformulated using the notion of *orbital neighbourhood*.

Definition 3.1. The set

$$U_\eta(\phi) := \{\psi \in Q, \text{ s.t. } \inf_{\theta \in [0, 2\pi)} \|\psi - e^{i\theta} \phi\|_Q \leq \eta\}$$

is called the *orbital neighbourhood with radius η of the function ϕ* .

It is convenient to introduce a function that associates to any frequency $\omega > \frac{4}{\gamma^2}$ the value of the minimum attained by S_ω evaluated on functions in the Nehari manifold corresponding to that frequency. Namely,

$$d : \left(\frac{4}{\gamma^2}, +\infty \right) \rightarrow \mathbb{R}$$

$$\omega \mapsto d(\omega) := \min\{S_\omega(\phi), \phi \in Q, I_\omega(\phi) = 0\}.$$

It is then important to stress other points that we did not mention explicitly so far.

Remark 3.2.

(1) In the energy space Q the following norm is defined:

$$\|\phi\|_Q^2 := \|\phi\|_2^2 + \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{\varepsilon}^{+\infty} |\phi'|^2 dx + \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{-\varepsilon} |\phi'|^2 dx.$$

(2) For any $\theta \in [0, 2\pi)$ and any $\phi \in Q$, one has $S_\omega(e^{i\theta}\phi) = S_\omega(\phi)$. As a consequence, if ψ_ω is a ground state, then all the functions $e^{i\theta}\psi_\omega$ in its orbit are ground states too. In the proof of Theorem (3.4) we will make the phase explicit by denoting

$$\psi_\omega^{x_1, x_2, \theta} := e^{i\theta}\psi_\omega^{x_1, x_2, 0}.$$

The result we need to go through the proof are summarized in the following Proposition. Their proof is contained in [6].

Proposition 3.3.

(1) For any function ϕ in the Nehari manifold one has $S_\omega(\phi) = \tilde{S}(\phi)$, where \tilde{S} is the functional defined by

$$\tilde{S}(\phi) := \frac{\lambda\mu}{2\mu+2} \|\phi\|_{2\mu+2}^{2\mu+2}.$$

(2) Any minimizer ψ_ω of the functional S_ω on the Nehari manifold minimizes also the functional \tilde{S} on the region $I_\omega \leq 0$.

(3) Following Fibich and Wang (see [25]) we recall that the map

$$\widehat{\omega} : Q \longrightarrow \mathbb{R}, \quad \phi \mapsto d^{-1} \left(\frac{\lambda}{2} \frac{\mu}{\mu+1} \|\phi\|_{2\mu+2}^{2\mu+2} \right)$$

is well-defined. Notice that $\widehat{\omega}$ maps a function ϕ into the frequency of a ground state having the same $L^{2\mu+2}$ -norm as ϕ . Such a ground state may not be unique, but the $L^{2\mu+2}$ -norm always is.

(4) If ψ_ω minimizes S_ω on the Nehari manifold $I_\omega = 0$, then ψ_ω minimizes S_ω on the set $\{\phi \in Q, \|\phi\|_{2\mu+2} = \|\psi_\omega\|_{2\mu+2}\}$.

(5) For any $\omega > 0$, the function $\chi_{[0, +\infty)}\psi_\omega^{0,0}$ minimizes the functional

$$S_\omega^0(\phi) := \frac{1}{2} \|\phi'\|_2^2 + \frac{\omega}{2} \|\phi\|_2^2 - \frac{\lambda}{2\mu+2} \|\phi\|_{2\mu+2}^{2\mu+2}$$

among the functions in Q that satisfy

$$I_\omega^0(\phi) := \|\phi'\|_2^2 + \omega \|\phi\|_2^2 - \lambda \|\phi\|_{2\mu+2}^{2\mu+2} = 0.$$

(6) If $\mu \leq 2$, then any ground state satisfies the Vakhitov-Kolokolov's condition (2.9).

Now we can prove the

Theorem 3.4. *If $1 \leq \mu \leq 2$, then any ground state is stable.*

Proof. We specialize to the case with $\omega > \frac{4}{\gamma^2} \frac{\mu+1}{\mu}$, namely, beyond the frequency of bifurcation. In fact, for $\omega < \frac{4}{\gamma^2} \frac{\mu+1}{\mu}$, this proof can be easily adapted and one recovers essentially the argument given in [27].

Fix $\omega_0 > \frac{4}{\gamma^2} \frac{\mu+1}{\mu}$ and suppose that the stationary solution $e^{i\omega_0 t} \psi_\omega^{y_1, -y_2, 0}$ is orbitally unstable. This means that there exists $\varepsilon_0 > 0$ and a sequence $\varphi_k \in U_{\frac{1}{k}}(\psi_\omega^{y_1, -y_2, 0})$ such that

$$\sup_{t \geq 0} \inf_{\theta \in [0, 2\pi)} \|\varphi_k(t) - \psi_\omega^{y_1, -y_2, \theta}\|_Q \geq \varepsilon_0,$$

where $\varphi_k(t)$ is the solution to equation (2.2) with initial data φ_k .

With no loss of generality, we assume

$$\varepsilon_0 \leq \inf_{\theta \in [0, 2\pi)} \|\psi_{\omega_0}^{y_1, -y_2, 0} - \psi_{\omega_0}^{y_2, -y_1, \theta}\|_Q = \|\psi_{\omega_0}^{y_1, -y_2, 0} - \psi_{\omega_0}^{y_2, -y_1, 0}\|_Q. \quad (3.1)$$

Let t_k be the smallest positive time for which

$$\inf_{\theta \in [0, 2\pi)} \|\varphi_k(t_k) - \psi_{\omega_0}^{y_1, -y_2, \theta}\|_Q = \frac{\varepsilon_0}{2}, \quad (3.2)$$

and let us use the notation $\xi_k = \varphi_k(t_k)$. By conservation laws,

$$\begin{aligned} S_{\omega_0}(\xi_k) &= \mathcal{E}(\xi_k) + \frac{\omega_0}{2} \|\xi_k\|_2^2 = \mathcal{E}(\varphi_k) + \frac{\omega_0}{2} \|\varphi_k\|_2^2 \\ &\longrightarrow \mathcal{E}(\psi_{\omega_0}^{y_1, -y_2, 0}) + \frac{\omega_0}{2} \|\psi_{\omega_0}^{y_1, -y_2, 0}\|_2^2 = S_{\omega_0}(\psi_{\omega_0}^{y_1, -y_2, 0}) = d(\omega_0). \end{aligned} \quad (3.3)$$

where we used the fact that, by construction, the sequence φ_k converges to $\psi_{\omega_0}^{y_1, -y_2, 0}$ strongly in Q , that implies the convergence of the energy and of the L^2 -norm.

Let us denote $\omega_k = \widehat{\omega}(\xi_k)$. We recall the following result from [25], used in [27] also:

$$S_{\omega_k}(\xi_k) - S_{\omega_k}(\phi_0) \geq \frac{1}{4} d''(\omega_0) (\omega_k - \omega_0)^2 \quad (3.4)$$

where we denoted $\omega_k = \omega(\xi_k)$. The fact that the Vakhitov-Kolokolov's condition is satisfied (see [6]), together with (3.4) and (3.3), implies $\omega_k \rightarrow \omega_0$, and therefore, by the definition of the function $\widehat{\omega}$, we have

$$\|\xi_k\|_{2\mu+2} = \left[\frac{2\mu+2}{\lambda\mu} S_{\omega_k}(\psi_{\omega_k}) \right]^{\frac{1}{2\mu+2}} \longrightarrow \left[\frac{2\mu+2}{\lambda\mu} S_{\omega_0}(\psi_{\omega_0}) \right]^{\frac{1}{2\mu+2}} = \|\psi_{\omega_0}^{y_1, -y_2, 0}\|_{2\mu+2}. \quad (3.5)$$

We define the sequence $\zeta_k := \frac{\|\psi_{\omega_0}^{y_2, y_1, 0}\|_{\mu+2}}{\|\xi_k\|_{\mu+2}} \xi_k$. By (3.5),

$$\|\zeta_k - \xi_k\|_Q = \left| \frac{\|\psi_{\omega_0}^{y_2, y_1, 0}\|_{\mu+2}}{\|\xi_k\|_{\mu+2}} - 1 \right| \|\xi_k\|_Q \longrightarrow 0. \quad (3.6)$$

As a consequence, $S_{\omega_0}(\zeta_k) - S_{\omega_0}(\xi_k) \rightarrow 0$, so $S_{\omega_0}(\zeta_k) \rightarrow S_{\omega_0}(\psi_{\omega_0})$. For this reason, and as $\|\zeta_k\|_{2\mu+2} = \|\psi_{\omega_0}^{y_1, -y_2, 0}\|_{2\mu+2}$, point (4) in Proposition 3.3 implies that $\{\zeta_k\}$ is a minimizing sequence for the problem

$$\min\{S_{\omega_0}(\psi), \psi \in Q \setminus \{0\}, \|\psi\|_{2\mu+2} = \|\psi_{\omega_0}^{y_2, -y_1, 0}\|_{2\mu+2}\}.$$

By Banach-Alaoglu theorem there exists a subsequence, whose elements we denote by ζ_k too, that converges weakly in Q and therefore in $L^{2\mu+2}$. Let us call ζ_∞ its weak limit.

First, notice that $\zeta_\infty \neq 0$. Indeed, were it zero, then weak convergence in Q would imply $\zeta_\infty(0_\pm) \rightarrow 0$, and therefore $S_{\omega_0}(\zeta_k) - S_{\omega_0}^0(\zeta_k) \rightarrow 0$, so

$$\lim_{k \rightarrow \infty} S_{\omega_0}^0(\zeta_k) = \lim_{k \rightarrow \infty} S_{\omega_0}(\zeta_k) = \frac{\lambda}{2} \frac{\mu}{\mu+1} \|\psi_{\omega_0}^{y_1, -y_2, 0}\|_{2\mu+2}^{2\mu+2}.$$

Then, employing the fact that $\phi_0 := \chi_{[0, +\infty)} \psi_{\omega_0}^{0, 0}(0) \neq 0$, points (4) and (5) in Proposition 3.3 yield

$$\frac{\lambda}{2} \frac{\mu}{\mu+1} \|\psi_{\omega_0}^{y_1, -y_2, 0}\|_{2\mu+2}^{2\mu+2} = \lim_{k \rightarrow \infty} S_{\omega_0}^0(\zeta_k) \geq S_{\omega_0}^0(\chi_+ \phi_0) > S_{\omega_0}(\chi_+ \phi_0) \geq \frac{\lambda}{2} \frac{\mu}{\mu+1} \|\psi_{\omega_0}^{y_1, -y_2, 0}\|_{2\mu+2}^{2\mu+2},$$

which is absurd. So it must be $\zeta_\infty \neq 0$.

We claim that $I_{\omega_0}(\zeta_\infty) = 0$. We proceed by contradiction.

Suppose indeed that $I_{\omega_0}(\zeta_\infty) < 0$. Then, by point (2) in Remark 3.2 and points (1) and (2) in Proposition 3.3 we know that the minimizers of the functional \widetilde{S} on the region $I_{\omega_0} \leq 0$ are given

by $\psi_{\omega_0}^{y_1, -y_2, \theta}$ and $\psi_{\omega_0}^{y_2, -y_1, \theta}$, for all $\theta \in [0, 2\pi)$. Furthermore, all such functions lie on the set $I_{\omega_0} = 0$. As a consequence, recalling the definition of the functional \tilde{S} , one obtains

$$\|\zeta_\infty\|_{2\mu+2} = \left[\frac{2(\mu+1)}{\lambda\mu} \tilde{S}(\zeta_\infty) \right]^{\frac{1}{2\mu+2}} > \left[\frac{2(\mu+1)}{\lambda\mu} \tilde{S}(\psi_{\omega_0}^{y_1, -y_2, 0}) \right]^{\frac{1}{2\mu+2}} = \|\psi_{\omega_0}^{y_1, -y_2, 0}\|_{2\mu+2}.$$

But this is not possible, as ζ_∞ is the weak limit of functions having the same $L^{2\mu+2}$ -norm as $\psi_{\omega_0}^{y_1, -y_2, 0}$.

On the other hand, suppose that $I_{\omega_0}(\zeta_\infty) > 0$. By (3.3) and (3.5)

$$\begin{aligned} \lim_{k \rightarrow \infty} I_{\omega_0}(\xi_k) &= 2 \lim_{k \rightarrow \infty} S_{\omega_0}(\xi_k) - \frac{\lambda\mu}{\mu+1} \lim_{k \rightarrow \infty} \|\xi_k\|_{2\mu+2}^{2\mu+2} \\ &= 2S_{\omega_0}(\psi_{\omega_0}^{y_1, -y_2, 0}) - \frac{\lambda\mu}{\mu+1} \|\psi_{\omega_0}^{y_1, -y_2, 0}\|_{2\mu+2}^{2\mu+2} = I_{\omega_0}(\psi_{\omega_0}^{y_1, -y_2, 0}) = 0. \end{aligned}$$

Therefore, by (3.6),

$$\lim_{k \rightarrow \infty} I_{\omega_0}(\zeta_k) = 0.$$

From the following inequality (see [15])

$$\|u_n\|_p^p - \|u_n - u_\infty\|_p^p - \|u_\infty\|_p^p \longrightarrow 0, \quad \forall 1 < p < \infty. \quad (3.7)$$

one easily has

$$I_{\omega_0}(\zeta_k - \zeta_\infty) \longrightarrow -I_{\omega_0}(\zeta_\infty) < 0.$$

As a consequence, eventually in k we obtain $I_{\omega_0}(\zeta_k - \zeta) < 0$ and then, using point (2) in Proposition 3.3

$$\|\zeta_k - \zeta_\infty\|_{2\mu+2} > \|\psi_{\omega_0}^{y_1, -y_2, 0}\|_{2\mu+2}. \quad (3.8)$$

But from (3.7), and knowing that $\zeta_\infty \neq 0$, we have that the following inequality holds eventually in k

$$\|\zeta_k - \zeta_\infty\|_{2\mu+2} \leq \|\psi_{\omega_0}^{y_1, -y_2, 0}\|_{2\mu+2},$$

that contradicts (3.8).

We conclude that $I_{\omega_0}(\zeta_\infty)$ cannot be strictly positive and, as we already proved that it cannot be negative, it must vanish.

As a consequence, from point (2) in Proposition 3.3 again, we get $\|\zeta_\infty\|_{2\mu+2} \geq \|\psi_{\omega_0}^{y_1, -y_2, 0}\|_{2\mu+2}$. But, since ζ_∞ is a weak limit, it must be

$$\|\zeta_\infty\|_{2\mu+2} = \|\psi_{\omega_0}^{y_1, -y_2, 0}\|_{2\mu+2}.$$

This fact has the following relevant consequences:

- Owing to (3.7), the sequence $\{\zeta_n\}$ converges strongly to ζ_∞ in the topology of $L^{2\mu+2}$.
- The sequence $\{\zeta_k\}$ converges to ζ_∞ in the strong topology of Q . Indeed, by the convergence of $S_{\omega_0}(\zeta_k)$ to $S_{\omega_0}(\zeta_\infty)$, the weak convergence in Q , and the strong convergence of $\{\zeta_k\}$ in $L^{2\mu+2}$, we have

$$\|\zeta'_k\|^2 + \omega_0 \|\zeta_k\|^2 \longrightarrow \|\zeta'_\infty\|^2 + \omega_0 \|\zeta_\infty\|^2. \quad (3.9)$$

So the convergence is strong in the space Q endowed with the norm given by (3.9), that is equivalent to the usual Q -norm.

- The sequence $\{\xi_k\}$ also converges to ζ_∞ in the strong topology of Q . Indeed, applying (3.6), we have

$$\|\xi_k - \zeta_\infty\|_Q \leq \|\xi_k - \zeta_k\|_Q + \|\zeta_k - \zeta_\infty\|_Q \longrightarrow 0. \quad (3.10)$$

- The function ζ_∞ minimizes S_{ω_0} with the constraint $I_{\omega_0} = 0$, so, either $\zeta_\infty = \psi_{\omega_0}^{y_1, -y_2, \theta}$ or $\zeta_\infty = \psi_{\omega_0}^{y_2, -y_1, \theta}$ for some value of θ in $[0, 2\pi)$.

Let us suppose that $\zeta_\infty = \psi_{\omega_0}^{y_1, -y_2, \theta}$, for a certain value of θ . By (3.10) we obtain $\xi_k \rightarrow \psi_{\omega_0}^{y_1, -y_2, \theta}$ strongly in Q , that contradicts inequality (3.2), and thus the assumption of the orbital instability of the stationary state $\psi_{\omega_0}^{y_1, -y_2, 0}$ proves false.

On the other hand, consider the case with $\zeta_\infty = \psi_{\omega_0}^{y_2, -y_1, \theta}$ for some value of θ . By (3.2) there exists a sequence θ_k such that

$$\|\xi_k - \psi_{\omega_0}^{y_1, -y_2, \theta_k}\|_Q \leq \frac{2}{3}\varepsilon_0. \quad (3.11)$$

Using elementary triangular identity, (3.1) and (3.11), we obtain, for any $\theta \in [0, 2\pi)$,

$$\|\xi_k - \psi_{\omega_0}^{y_2, -y_1, \theta}\|_Q \geq \|\psi_{\omega_0}^{y_1, -y_2, \theta_k} - \psi_{\omega_0}^{y_2, -y_1, \theta}\|_Q - \|\psi_{\omega_0}^{y_1, -y_2, \theta_k} - \xi_k\|_Q \geq \frac{\varepsilon_0}{3}.$$

This contradicts (3.10), so the proof is complete. □

4. Perspectives

The interplay between nonlinearity and defects is, in our opinion, a promising and worth developing field. In particular, already in simple models highly non trivial behaviour can emerge. An enlightening example has been supplied by means of the δ' defect, in which the occurrence of a pitchfork bifurcation with symmetry breaking has been proved for the family of nonlinear ground states.

Such results have to be considered as the first achievements of our research project. Many non trivial variations on the theme could be given by studying the entire family of one-dimensional defects (a four parameters family, see [9]) and thus investigate the effect of various self-adjoint boundary conditions, in particular, of those that give rise to *two* bound states. We expect that, in the nonlinear problem, each of the two linear modes could be deformed into nonlinear modes for any frequency greater than the energy of the corresponding linear mode. Think, for instance, of a point interaction that, roughly speaking, is the sum of a δ and a δ' defect *at the same point*. It exhibits two bound states, one of which is even (as the ground state for a Dirac's delta), while the other is odd (as the ground state for a delta prime). A number of question then arises: how do the corresponding nonlinear mode interact? Does it exist a third family of stationary (possibly ground) states that does not preserve any parity symmetry?

However, all these steps are only preliminary to the problem of studying the detailed evolution of a travelling soliton that meets an impurity.

It remains completely open the problem of defining analogous models in higher dimension. We recall that in dimension two and three, the only point interaction is the delta interaction, and in dimension higher than three there are no point perturbations of the laplacian. For instance, in the three dimensional case a bare power nonlinearity seems to be too strong to be added to a Dirac's δ potential; so a different type of nonlinearity with a moderated behaviour at infinity should be considered. Conversely, in space dimension two the naïf power nonlinearity could be not necessarily in conflict with the domain of a delta interaction, but up to now no rigorous result exists on this problem.

Another related topic is given by quantum graphs (see [37–39] for the relevant definitions and analysis in the linear case). Also in the relatively simple case of a NLS on a star graph, the richer structure provides a larger number of nonlinear stationary states, for example two stationary states for a three edge star graph with a delta vertex, both attractive and repulsive, and the number increases with the number of edges (see [5]). In this respect, besides the determination of the ground state, it is an open interesting problem the analysis of stability of excited states, here

explicitly known. Nothing is known for the a star graph with more general vertex conditions, for example the boundary condition of δ' type.

References

- [1] Adami R., Bardos C., Golse, F, Teta A. Towards a rigorous derivation of the cubic NLSE in dimension one // *Asymp. An.* — 2004. — V. 40(2). — P. 93-108.
- [2] Adami R., Golse, F, Teta A.: Rigorous derivation of the cubic NLS in dimension one // *J. Stat. Phys.* — 2007. — V. 127. — P. 1193-1220.
- [3] Adami R., Noja D. Existence of dynamics for a 1-d NLS equation in dimension one // *J. Phys. A Math. Theor.* — 2009. — V. 42. — 495302, 19 p.
- [4] Adami R., Cacciapuoti C., Finco D., Noja D. Fast Solitons on Star Graphs // *Rev. Math. Phys.* — 2011. — V. 23(4).
- [5] Adami R., Cacciapuoti C., Finco D., Noja D. Stationary states of NLS on star graphs. — arXiv: 1104.3839, 2011.
- [6] Adami R., Noja D. Stability, instability and symmetry breaking bifurcation for the ground states of a NLS with a δ' interaction // arXiv.1112.1318, 2011.
- [7] Adami R., Noja D., Sacchetti A. On the mathematical description of the effective behaviour of one-dimensional Bose-Einstein condensates with defects // In: *Bose-Einstein Condensates: Theory, Characteristics, and Current Research.* — New York: Nova Publishing, 2010.
- [8] Adami R., Sacchetti A. The transition from diffusion to blow-up for a NLS equation in dimension one // *J. Phys. A Math. Gen.* — 2005. — V. 38. — P. 8379-8392.
- [9] Albeverio S., Brzeźniak Z., Dabrowski L. Fundamental solutions of the Heat and Schrödinger Equations with point interaction // *Journal of Functional Analysis.* — 1995. — V. 130. — P. 220-254.
- [10] Albeverio S., Gesztesy F., Hoegh-Krohn R., Holden H. *Solvable Models in Quantum Mechanics: Second Edition, With an Appendix by Pavel Exner.* — AMS Chelsea Publishing, Providence, 2005.
- [11] Albeverio S., Kurasov P. *Singular Perturbations of Differential Operators.* — Cambridge University Press, 2000.
- [12] Ammari Z., Breteaux S. Propagation of chaos for many-boson systems in one dimension with a point pair-interaction. — arXiv: 0906.3047, 2009.
- [13] Brazhnyi V., Konotop V., Perez-García V. Driving defect modes of Bose Einstein condensates in optical lattices // *Phys. Rev.Lett.* — 2006. — 96. 060403.
- [14] Brazhnyi V., Konotop V., Perez-García V. Defect modes of a Bose Einstein condensate in an optical lattice with a localized impurity // *Phys. Rev.A.* — 2006. — V. 74. — 023614.
- [15] Brezis H., Lieb E.H. A relation between pointwise convergence of functions and convergence of functionals // *Proc. Amer. Math. Soc.* — 1983. — V. 88. — P. 486-490.
- [16] Burioni R., Cassi D., Sodano P., Trombettoni A., Vezzani A. Soliton propagation on chains with simple nonlocal defects // *Physica D* — 2006. — V. 216. — P. 71-76.
- [17] Cazenave T. *Semilinear Schrödinger Equations.* — Courant Lecture Notes, 2003.
- [18] Cheon T., Shigehara T. Realizing discontinuous wave functions with renormalized short-range potentials // *Phys. Lett. A.* — 1998. — V. 243(22). — P. 111-116.
- [19] Datchev K., Holmer J. Fast soliton scattering by attractive delta impurities // *Comm. Part. Diff. Eq.* — 2009. — V. 34. — P. 1074-1113.
- [20] Erdős L., Schlein B., Yau H-T. Derivation of the Gross-Pitaevskii hierarchy for the dynamics of the Bose Einstein condensate // *Comm. Pure Appl. Math.* — 2006. — V. 59. — P. 1659-1741.
- [21] Erdős L., Schlein B., Yau H-T. Derivation of the cubic nonlinear Schrödinger equation from quantum dynamics of many body systems // *Invent. Math.* — 2007. — V. 167. — P. 515-614.
- [22] Erdős L., Schlein B., Yau H-T. Derivation of the Gross-Pitaevskii equation for the dynamics of the Bose Einstein condensate. // *Ann. Math.* — 2010. — V. 172(1). — P. 291-370.
- [23] Exner P., Grosse P. Some properties of the one-dimensional generalized point interactions (a torso). — mp-arc 99-390, math-ph/9910029, 1999.
- [24] Exner P. Neidhart H. Zagrebnev V.A. Potential approximations to δ' : an inverse Klaunder phenomenon with norm-resolvent convergence // *Comm. Math. Phys.* — 2001. — V. 224. — P. 593-612.
- [25] Fibich G., Wang X. P. Stability for solitary waves for nonlinear Schrödinger equations with inhomogenous nonlinearities // *Physica D.* — 2003. — V. 175. — P. 96-108.
- [26] Fukuizumi R., Jeanjean L.: Stability of standing waves for a nonlinear Schrödinger equation with a repulsive Dirac delta potential // *Disc. Cont. Dyn. Syst. (A).* — 2008. — 21. — P. 129-144.

- [27] Fukuizumi R., Ohta M, Ozawa T. Nonlinear Schrödinger equation with a point defect // *Ann. I.H.Poincaré, AN.* — 2008. — 25. — P. 837-845.
- [28] Fukuizumi R., Sacchetti A. Bifurcation and stability for Nonlinear Schroedinger equations with double well potential in the semiclassical limit, preprint arXiv:1104.1511 (2011).
- [29] Goodman R. H., Holmes P. J., Weinstein M. I. Strong NLS soliton-defect interactions // *Physica D.* — 2004. — 192. — P. 215-248.
- [30] Grillakis M. Shatah J. Strauss W. Stability theory of solitary waves in the presence of symmetry I. // *J. Func. An.* — 1987. — V. 74. — P. 160-197.
- [31] Grillakis M. Shatah J. Strauss W. Stability theory of solitary waves in the presence of symmetry II // *J. Func. An.* — 1990. — V. 94. — P. 308-348.
- [32] Holmer J., Marzuola J., Zworski M. Fast soliton scattering by delta impurities // *Comm. Math. Phys.* — 2007. — V. 274. — P. 187-216.
- [33] Jackson R.K, Weinstein M.I. Geometric analysis of bifurcation and symmetry breaking in a Gross-Pitaevskii equation // *J. Stat. Phys.* — 2004. — V. 116. — P. 881-905.
- [34] Kirkpatrick K., Staffilani G., Schlein B. Derivation of the two-dimensional nonlinear Schrödinger equation from many body quantum dynamics // *Am. J. of Math.* — 2011. — V. 133(1). — P. 91-130.
- [35] Kirr E.W., Kevrekidis P.G., Pelinovsky D. E. Symmetry-breaking bifurcation in the nonlinear Schrodinger equation with symmetric potentials. — arXiv:1012.3921, 2010.
- [36] Kirr E.W., Kevrekidis R.G., Shlizerman E., Weinstein M.I. Symmetry-breaking bifurcation in nonlinear Schrödinger/Gross–Pitaevskii equations // *SIAM J. Math. Anal.* — 2008. — V. 40. — P. 566-604.
- [37] Kostyrykin V., Schrader R. Kirchhoff’s rule for quantum wires // *J. Phys. A: Math. Gen.* — 1999. — V. 32(4). — P. 595-630.
- [38] Kuchment P. Quantum graphs. I. Some basic structures // *Waves Random Media.* — 2004. — V. 14(1). — S107–S128.
- [39] Kuchment P.: Quantum graphs. II. Some spectral properties of quantum and combinatorial graphs // *J. Phys. A: Math. Gen.* — 2005. — V. 38(22). — P. 4887-4900.
- [40] Le Coz S., Fukuizumi ., Fibich G., Ksherim B., Sivan Y.: Instability of bound states of a nonlinear Schrödinger equation with a Dirac potential // *Phys. D.* — 2008. — V. 237(8). — P. 1103–1128.
- [41] Lions, P.L. The concentration-compactness principle in the calculus of variations. The locally compact case. I // *Ann. Inst. H. Poincaré Anal. Non Linéaire.* — 1984. — 1. — P. 109-145.
- [42] Lions, P.L. The concentration-compactness principle in the calculus of variations. The locally compact case. II // *Ann. Inst. H. Poincaré Anal. Non Linéaire.* — 1984. — V. 1. — P. 223-283.
- [43] Pelinovsky D.E., Phan T. Normal form for the symmetry-breaking bifurcation in the nonlinear Schrödinger equation. — arXiv: 1101.5402v1, 2011.
- [44] Perelman G., A remark on soliton-potential interaction for nonlinear Schrödinger equations // *Math. Res. Lett.* — 2009. — V. 16(3). — P. 477-486.
- [45] Pitaevskii L., Stringari S. Bose-Einstein condensation. — Oxford University Press, 2003.
- [46] Sacchetti A. Universal Critical Power for Nonlinear Schrödinger Equations with a Symmetric Double Well Potential // *Phys. Rev. Lett.* — 2009. — V. 103. — 194101.
- [47] M. G. Vakhitov, A. A. Kolokolov: Stationary solutions of the wave equation in a medium with nonlinearity saturation // *Radiophys. Quantum Electron.* — 1973. — V. 16. — P. 783–789.
- [48] Weinstein M.: Nonlinear Schrödinger equations and sharp interpolation estimates // *Comm. Math. Phys.* — 1983. — V. 87. — P. 567-576.
- [49] Weinstein M. Modulational stability of ground states of nonlinear Schrödinger equations // *SIAM J. Math. Anal.* — 1985. — V. 16. — P. 472-491.
- [50] Weinstein M.: Lyapunov stability of ground states of nonlinear dispersive evolution equations // *Comm. Pure Appl. Math.* — 1986. — V. 39. — P. 51–68.

UDC 517.958

ATTRACTIVE OR REPULSIVE CASIMIR EFFECT AND BOUNDARY CONDITION

M. Asorey¹, J.M. Muñoz-Castañeda²

¹Departamento de Física Teórica, Facultad de Ciencias
Universidad de Zaragoza, Zaragoza, Spain

²Institut für Theoretische Physik, Universität Leipzig, Leipzig, Germany
asorey@unizar.es, jose.munoz-castaneda@uni-leipzig.de

PACS 11.10.Hi, 11.25.Hf

The Casimir force between two identical bodies, although highly dependent on their geometry and structure of boundaries, is always attractive. However, this force can become repulsive if the nature of the two boundaries is different. We analyze from a global perspective the analytic properties of the Casimir energy function in the space of the consistent boundary conditions \mathcal{M}_F for a massless scalar field confined between two homogeneous parallel plates. The analysis allow us to completely characterize the boundary conditions which give rise to attractive and repulsive Casimir forces. In the interface between both regimes there is a very interesting family of boundary conditions which do not generate any type of Casimir force. We also find Casimirless boundary conditions which are invariant under the renormalization group flow. The conformal invariant boundary conditions which do not generate a Casimir force have not yet been exploited in string theory but open new interesting possibilities.

Keywords: Casimir effect, vacuum energy, boundary conditions, boundary renormalization group flow.

1. Introduction

The Casimir effect is a genuine quantum phenomenon induced by the vacuum fluctuations of quantum fields. The pressure of quantum fluctuations on impermeable solid bodies generates a force between these bodies [1]. The characteristics of this force depend essentially on the type of field theory, the geometry of the bodies and the physical properties of the bodies boundaries [2–8]. However, the Casimir force between two identical bodies is always attractive due to the Kenneth-Klich theorem [9]. Now, if the boundary conditions of the bodies are different the Casimir force can become repulsive. In fact, new repulsive regimes of the Casimir effect have been found between dielectric plates and ingenious combinations of them, which give rise to a repulsive effect [10]. In this paper we analyze from a global viewpoint the dependence of the Casimir phenomenon on the physical properties of the boundary, i. e. on the boundary conditions satisfied by the quantum fields. Based on a new technique which highly simplifies the calculation of the vacuum energy for arbitrary boundary conditions we analyze the nature of Casimir force between two homogeneous parallel plates induced by the fluctuations of massless free scalar field.

In this geometry the only variable elements are the distance between the plates and the boundary conditions at the plates. The set of physically admissible boundary conditions is a four dimensional manifold which includes Dirichlet, Neumann, Robin, Zaremba, periodic, quasi-periodic and anti-periodic [11, 12]. Thus, we analyze the dependence of the Casimir force on these five variables and in particular, we analyze in great detail the transition from the attractive Casimir regime to the repulsive Casimir regime. We also analyze the role of Casimir energy as a finite size effect of the conformal anomaly and the role of boundary renormalization group flow. In particular, we search for boundary conditions which being invariant under renormalization

do not present finite size effects which generate Casimir energy. In the case of massless scalar fields we fully characterize the three parameter family of boundary conditions satisfying both requirements.

2. Quantum Fields in Bounded Domains

In quantum theories the unitarity principle imposes severe constraints on the boundary behavior of quantum states of systems confined in bounded domains [11]. The consistency of the quantum field theory imposes a much more stringent condition on the type of acceptable boundary conditions in order to prevent any type of pathological behavior. In relativistic field theories, causality imposes further requirements [13, 14]. The space of boundary conditions compatible with both constraints has interesting global geometric properties.

The dynamics of free complex scalar field ϕ is governed by the following Hamiltonian

$$H = \frac{1}{2} \int_{\Omega} d^3\mathbf{x} (|\pi(\mathbf{x})|^2 + \phi^*(\mathbf{x})(-\Delta + m^2)\phi(\mathbf{x})) \quad (1)$$

in terms of the Laplacian operator Δ and the canonical momenta π of the fields ϕ satisfying the standard canonical quantization rules

$$[\pi(\mathbf{x}), \phi(\mathbf{x}')] = -i \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad (2)$$

where we using natural units ($c = \hbar = 1$). The Hamiltonian (1) describes the dynamics of an infinite number of decoupled harmonic oscillators given by the Fourier modes of the operator $-\Delta + m^2$. When the fields are confined in a bounded domain $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ with regular boundary $\partial\Omega$ the modes of the oscillators become discretized and highly dependent on the boundary conditions of the fields specially for the low energy modes. The consistency conditions require that the corresponding oscillating frequencies must be real and positive, which can be fulfilled for any value of the mass if and only if all eigenvalues of the Laplacian operator $-\Delta$ are real and nonnegative, i.e. $-\Delta$ is a selfadjoint non-negative operator. This requirement imposes severe constraints on the conditions the fields must satisfy at the boundary $\partial\Omega$ in order to have a consistent quantum field theory. The positivity condition can be relaxed for a fixed geometry and given mass, but the boundary conditions which are consistent for any size of the domain Ω require the non-positivity of the selfadjoint extension of the Laplacian operator Δ .

The self-adjointness condition requires the cancellation of the probability flux across the boundary. This flux is given by

$$\Psi(\phi) = i \int_{\partial\Omega} [(\partial_n \phi^*)\phi - \phi^* \partial_n \phi]. \quad (3)$$

The set of boundary conditions which preserve the probability and have a null flux (3) across the boundary can be identified with the space of unitary operators U of $L^2(\partial\Omega)$, i.e. $U \in \mathcal{U}(L^2(\partial\Omega))$. This characterization is equivalent to that introduced by von Neumann, Krein [15–18] and by boundary triples approaches [19–24]. Each selfadjoint extension is characterized by the restriction of the adjoint operator of $-\Delta^\dagger$ of the Laplacian operating only on smooth functions of compact support in Ω , to the domain [11, 12]

$$\mathcal{D}_U = \{\psi \in \mathcal{D}(\Delta^\dagger); (\varphi, \tilde{\varphi}) \in H^{-\frac{1}{2}}(\partial\Omega) \times H^{\frac{1}{2}}(\partial\Omega); \underline{\varphi} - i\underline{\varphi} = U(\underline{\varphi} + i\underline{\varphi})\}, \quad (4)$$

where φ denotes the boundary value of ψ and $\tilde{\varphi}$ the boundary normal derivative of $(1 - \Delta^\dagger)^{-1}(\psi - \Delta^\dagger \psi)$ and

$$\underline{\varphi} = \frac{1}{\sqrt{\delta}} \left(-\Delta_{\partial\Omega}^\dagger + \frac{1}{\delta^2} \mathbb{I} \right)^{-\frac{1}{4}} \varphi \quad \text{and} \quad \underline{\varphi} = \sqrt{\delta} \left(-\Delta_{\partial\Omega}^\dagger + \frac{1}{\delta^2} \mathbb{I} \right)^{\frac{1}{4}} \tilde{\varphi}, \quad (5)$$

δ being an arbitrary dimensionfull parameter. The Sobolev space $H^k(\partial\Omega)$ is defined as the closure of the subspace $C^\infty(\partial\Omega)$ of differentiable functions, with respect to the Sobolev norm of class k

$$\|\varphi\|_k^2 = \int_{\partial\Omega} d^2x \sqrt{g_{\partial\Omega}} \varphi(x)^\dagger (-\Delta_{\partial\Omega} + \mathbb{I})^k \varphi(x). \quad (6)$$

The boundary conditions (4) define selfadjoint extensions of the Laplacian but the consistency of the quantum field theory also requires the positivity of the corresponding selfadjoint operator and this condition imposes further constraints. In particular, since [11]

$$-(\psi, \Delta_U \psi) = |\vec{\nabla} \psi|^2 - (\varphi, \dot{\varphi}) = |\vec{\nabla} \psi|^2 - (\underline{\varphi}, \underline{\dot{\varphi}}) = |\vec{\nabla} \psi|^2 - (\underline{\varphi}, A \underline{\varphi}),$$

where

$$A = -i \frac{\mathbb{I} - U}{\mathbb{I} + U}, \quad (7)$$

is the selfadjoint Cayley transform of U . Whenever A is well defined it must be selfadjoint and non-positive. Since all eigenvalues of unitary operators U are of the form $\lambda(\alpha) = e^{i\alpha}$ with $\alpha \in [0, 2\pi]$, the positivity condition of A translates into the following constraint on the eigenvalues of U

$$\tan\left(\frac{\alpha}{2}\right) \geq 0; \quad \text{i.e. } 0 \leq \alpha \leq \pi. \quad (8)$$

Thus, the space of boundary conditions \mathcal{M}_F which lead to consistent quantum field theories is given by [13, 14]

$$\mathcal{M}_F \equiv \{U \in \mathcal{U}(L^2(\partial M)); \lambda = e^{i\alpha} \in \sigma(U), 0 \leq \alpha \leq \pi\}. \quad (9)$$

In the particular case of a domain bounded by two parallel homogeneous plates the translation invariance along the plates imply that U should be constant on each plate. In that case the most general boundary condition for the fields is given by a two dimensional unitary matrix $U \in U(2)$, which can be written in terms of Pauli matrices $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$

$$U(\alpha, \beta, \mathbf{n}) = e^{i\alpha} (\cos(\beta)\mathbb{I} + i \sin(\beta) \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \quad (10)$$

$$\alpha \in [0, 2\pi], \quad \beta \in [-\pi/2, \pi/2],$$

and an unitary vector

$$\mathbf{n}(\theta, \chi) = (\sin(\theta) \cos(\chi), \sin(\theta) \sin(\chi), \cos(\theta)); \quad \theta \in [0, \pi], \chi \in [0, 2\pi]. \quad (11)$$

of the unit sphere S^2 satisfying the constraints $0 \leq \alpha \pm \beta \leq \pi$. The domain of the positive self-adjoint operator $-\Delta_U$ is given by

$$\begin{pmatrix} \varphi(0) - iL\dot{\varphi}(0) \\ \varphi(1) - iL\dot{\varphi}(1) \end{pmatrix} = e^{i\alpha} \begin{pmatrix} \cos \beta + in_3 \sin \beta & (in_1 + n_2) \sin \beta \\ (in_1 - n_2) \sin \beta & \cos \beta - in_3 \sin \beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi(0) + iL\dot{\varphi}(0) \\ \varphi(1) + iL\dot{\varphi}(1) \end{pmatrix},$$

where L is the distance between the plates. This property guarantees the positivity of the operator $-A$ and in consequence that of the corresponding selfadjoint extension of the Laplacian. Therefore, the space of consistent boundary conditions \mathcal{M}_F is [13, 14]

$$\mathcal{M}_F \equiv \{U(\alpha, \beta, \mathbf{n}) \in U(2) \mid 0 \leq \alpha \pm \beta \leq \pi\}. \quad (12)$$

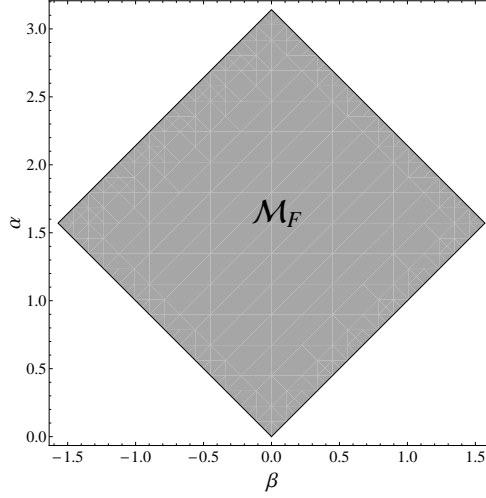


Fig. 1. Space of consistent boundary conditions for a scalar field theory confined between two homogeneous parallel plates

3. Boundary Renormalization Group Flow

Some symmetries of the classical theory can be broken upon quantization by quantum interactions. In the case of fields confined in bounded domains only the symmetries which leave the boundary invariant can be preserved for some boundary conditions. However, in the case of scale invariance ($x \rightarrow x/\Lambda$) the presence of the boundaries does not automatically imply the breaking of the symmetry at the quantum level because the rescaling involved in the Wilson renormalization group transformation restores the system back to the same boundary domain Ω . Now, the scale invariance in the massless quantum field theory can still be broken because not all boundary conditions preserve this symmetry. In fact, it has been shown in Refs. [25,26] that the renormalization group acts on the space of boundary conditions according to the flow

$$\Lambda U_{\Lambda}^{\dagger} \partial_{\Lambda} U_{\Lambda} = \frac{1}{2} (U_{\Lambda}^{\dagger} - U_{\Lambda}) \quad (13)$$

or

$$U_t^{\dagger} \partial_t U_t = \frac{1}{2} (U_t^{\dagger} - U_t) \quad (14)$$

for $\Lambda = \Lambda_0 e^t$.

The only boundary conditions which preserve scale invariance are the fixed points of the renormalization group flow (14), i.e. boundary conditions whose unitary operators U are hermitian unitary matrices $U^{\dagger} = U = U^{-1}$ [26].

In the parametrization given by (10) and using spherical coordinates (11) for the normal unit vector $\mathbf{n}(\theta, \varphi)$ the flow reads (see Fig. 2)

$$\alpha'(\Lambda) + \frac{1}{\Lambda} \sin(\alpha) \cos(\beta) = 0; \quad (15)$$

$$\beta'(\Lambda) + \frac{1}{\Lambda} \cos(\alpha) \sin(\beta) = 0; \quad (16)$$

$$\theta'(\Lambda) = \chi'(\Lambda) = 0, \quad (17)$$

which defines a vector field that can be extended to the whole group $U(2)$.

Thus all fixed points are located at the corners of the rhombus in figure 1 of \mathcal{M}_F . The upper and lower corners correspond to Dirichlet and Neumann ($U = \mp \mathbb{I}$) boundary conditions.

The other fixed points are located in the other two corners and correspond to a S^2 manifold given by

$$U = \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (18)$$

\mathbf{n} being an arbitrary unit vector of \mathbb{R}^3 , which includes pseudo-periodic and quasiperiodic boundary conditions.

For mixed boundary conditions the RG flows from Dirichlet boundary conditions (ultraviolet fixed point) toward Neumann boundary conditions (infrared fixed point) [25, 26].

$$U = e^{2i \arctan e^{-t}} \mathbb{I}. \quad (19)$$

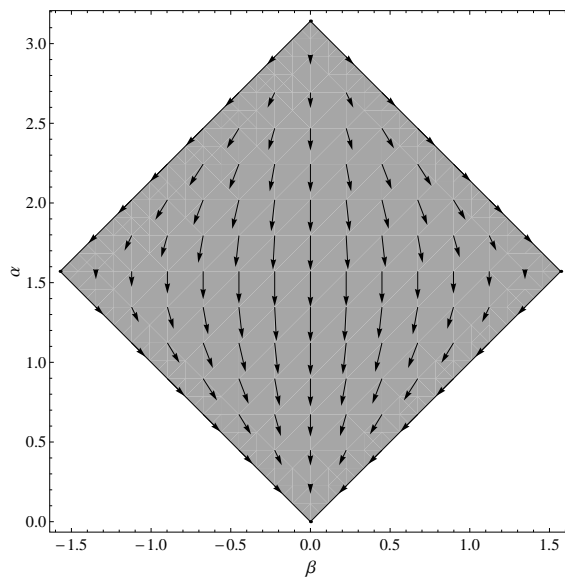


Fig. 2. Renormalization group flow in \mathcal{M}_F . Notice that fixed points are located at the corners of the rhombus. Neumann boundary conditions are at the lowest corner which is the only stable fixed point. This point is an attractor point of the whole renormalization group flow

4. Vacuum energy.

The Casimir effect in massless quantum theories is a consequence of the scale symmetry anomaly which arises in the form of finite size corrections to the vacuum energy. Within the global framework of boundary conditions formulated above it is possible to analyze with complete generality the characterization of attractive and repulsive regimes generated by this anomaly.

The scalar free field theory defined by a boundary condition U of \mathcal{M}_F has a unique vacuum state which in the functional Schrödinger representation corresponds to the Gaussian state

$$\Psi(\phi) = \mathcal{N} e^{-\frac{1}{2}(\phi, \sqrt{-\Delta_U} \phi)} \quad (20)$$

where \mathcal{N} is a normalization constant and (\cdot, \cdot) denotes the $L^2(\Omega)$ product. The corresponding vacuum energy given by the sum of the eigenvalues of $\frac{1}{2}\sqrt{-\Delta_U}$ is ultraviolet divergent, but the Casimir effect is associated to some finite volume corrections to the vacuum energy which are

UV finite and universal. It is convenient to regularize the UV divergences involved in the sum of the trace by means of the heat kernel method

$$E_U = E_U^{(L,\epsilon)} = \frac{1}{2} \text{tr} \sqrt{-\Delta_U} e^{\epsilon \Delta_U} \quad (21)$$

The Casimir energy can be identified from the asymptotic expansion in powers of $\frac{\sqrt{\epsilon}}{L}$ of the vacuum energy per unit plate area [27],

$$\frac{E_U^{(L,\epsilon)}}{A} = \frac{c_0}{\epsilon^2} L + \frac{c_1}{\epsilon^{3/2}} + \frac{c_U}{L^3} + \mathcal{O}\left(\frac{\sqrt{\epsilon}}{L}\right). \quad (22)$$

The eigenvalues $\lambda_n = (k^1)^2 + (k^2)^2 + k_n^2$ of the Laplacian operator $-\Delta_U$ are given in terms of the zeros k_n of the spectral function [14,28]

$$\begin{aligned} h_U(k) &= 4k \det U \cos kL - 2i(1+k^2) \det U \sin kL + 4k(U_{21} + U_{12}) \\ &\quad - 2i(1+k^2) \sin kL - 4k \cos kL + 2i(1-k^2) \text{tr} U \sin kL \\ &= 4ke^{2i\alpha} \cos kL - 2i(1+k^2)e^{2i\alpha} \sin kL + 8in_1 k e^{i\alpha} \sin \beta \\ &\quad - 2i(1+k^2) \sin kL - 4k \cos kL + 4i(1-k^2)e^{i\alpha} \cos \beta \sin kL. \end{aligned} \quad (23)$$

and two arbitrary real parallel components k^1, k^2 . The spectral function $h_U(k)$ is obtained from the determinant of the coefficients of the eigenvalue equation of $-\Delta_U$ for plane waves with momenta $(0, 0, k)$. Notice that the spectral function is not only dependent on the invariants of the boundary unitary matrix $\det U$ and $\text{tr} U$ but also in the entries U_{21} and U_{12} , which implies that the spectrum of the quantum theory may be different for matrices with the same spectrum if they are non-equivalent as matrices. The vacuum energy can be formally given in terms of the spectral function h_U [28] (see [29,30]) for an historical review) by

$$E_0 = \frac{1}{24\pi^2 i} \oint dz z^3 \partial_z \log h_U(z) \quad (24)$$

or equivalently

$$E_0 = -\frac{1}{12\pi^2} \int_0^\infty dk k^3 \frac{d}{dx} \log h_U(ik). \quad (25)$$

It is straightforward to extract the leading terms of the asymptotic expansion in $1/L$ by subtracting the divergent values for a fixed reference value $L_0 \ll L$ of the distance between the plates [13,14]

$$c_U = \frac{-L_0^3}{12\pi^2(L^3 - L_0^3)} \int_0^\infty dk k^3 \left[L - L_0 - \frac{d}{dk} \log \left(\frac{h_U^{(L)}(ik)}{h_U^{(L_0)}(ik)} \right) \right]. \quad (26)$$

From this expression it is possible to compute in a very efficient way the Casimir energy for arbitrary boundary conditions $U \in \mathcal{M}_F$.

In some cases the Casimir energy can be computed analytically [13,14,28,31–34]:

(1) In the case of pseudo-periodic boundary conditions

$$U_{\text{pp}} = \cos \xi \sigma_1 - \sin \xi \sigma_2; \quad \varphi(L) = e^{i\xi} \xi(0) \quad (27)$$

we have that

$$h_{\text{pp}} = -8k(\cos kL - \cos \xi) \quad (28)$$

and

$$E_{\text{pp}}(\xi) = \frac{A}{L^3} \left(-\frac{\pi^2}{90} + \frac{\xi^2}{12} - \frac{\xi^3}{12\pi} + \frac{\xi^4}{48\pi^2} \right); \quad \xi \in [0, 2\pi]. \quad (29)$$

They contain two special cases, when $\xi = 0$ we have periodic boundary conditions,

$$E_{\text{p}} = -\frac{\pi^2 A}{90L^3}, \quad (30)$$

where the Casimir force is attractive, and when $\xi = \pi$ anti-periodic boundary conditions with repulsive Casimir force

$$E_{\text{ap}} = \frac{7\pi^2 A}{720L^3}. \quad (31)$$

(2) In the case of Dirichlet boundary conditions

$$U_D = -\mathbb{I} \quad (32)$$

$$h_D = -8i \sin kL \quad (33)$$

the Casimir energy per unit area

$$E_D = -\frac{\pi^2 A}{1440L^3} = E_N \quad (34)$$

is the same as for Neumann boundary conditions

$$U_N = \mathbb{I} \quad (35)$$

with

$$h_N = -8ik^2 \sin kL. \quad (36)$$

In both cases the Casimir force is attractive.

(3) A different family of boundary conditions is provided by quasi-periodic boundary conditions

$$\begin{aligned} U_q &= \cos \theta \sigma_3 + \sin \theta \sigma_1 \\ \varphi(L) &= \tan \frac{\theta}{2} \varphi(0); \quad \partial_n \varphi(0) = \left(L \tan \frac{\theta}{2} \right)^{-1} \varphi(0), \end{aligned} \quad (37)$$

where

$$h_q = -8k(\cos kL - \sin \theta). \quad (38)$$

The Casimir energy per unit area in this case is

$$E_q = \frac{A}{L^3} \left(\frac{127\pi^2}{11520} - \frac{3\pi\theta}{32} - \frac{11\theta^2}{96} - \frac{4\theta^3 + |\pi - 2\theta|^3}{96\pi} + \frac{\theta^4}{48\pi^2} \right); \quad \theta \in [0, \pi]. \quad (39)$$

Here there are three special cases, $\theta = \frac{\pi}{2}$ which corresponds to periodic boundary conditions, with attractive Casimir force, $\theta = -\frac{\pi}{2}$ which corresponds to anti-periodic boundary conditions, with repulsive Casimir force and $\theta = 0$ to Zaremba boundary conditions also with repulsive behavior

$$E_z = \frac{7\pi^2 A}{11520L^3}. \quad (40)$$

In summary, many of the conditions (e.g. Dirichlet, Neumann, Periodic) give rise to attractive forces between the plates, others (e.g. antiperiodic, Zaremba) induce repulsive forces, and between these two types of boundary conditions there exist a family of boundary conditions

with no Casimir force [28]. In the case of quasi-periodic boundary conditions there are two values of the parameter θ_{cp}

$$\theta_{\text{cp}}^{\pm} = \pi \left(\frac{1}{2} \pm \left(1 - \sqrt{1 - 2\sqrt{\frac{2}{15}}} \right) \right). \quad (41)$$

where the Casimir energy vanishes which signals the boundary between attractive and repulsive regimes of the Casimir effect. Indeed, when $0 \leq \theta < \theta_{\text{cp}}^{-}$ and $\theta_{\text{cp}}^{+} \leq \theta < \pi$ the Casimir energy is positive, and hence the Casimir force between plates has a repulsive character. On the other hand, when $\theta_{\text{cp}}^{-} \leq \theta < \theta_{\text{cp}}^{+}$, the Casimir force between plates becomes attractive, which corresponds to a negative Casimir energy. Notice that for boundary conditions which correspond to identical plates, ($\beta = 0$) the Casimir energy is always negative which agrees with the Kenneth-Klich theorem [9].

Something similar occurs in the case of pseudo-periodic boundary conditions where there are two values of ξ with null Casimir energy, and therefore there is no force between plates

$$\xi_{\text{pp}}^{\pm} = \pi \left(1 \pm \sqrt{1 - 2\sqrt{\frac{2}{15}}} \right). \quad (42)$$

In this case, for $\xi_{\text{pp}}^{-} < \xi < \xi_{\text{pp}}^{+}$ the Casimir energy is negative, which leads an attractive Casimir force between plates, and for $-\pi < \xi < \xi_{\text{pp}}^{-}$ or $\xi_{\text{pp}}^{+} < \xi < \pi$, the Casimir energy is positive, and hence the force between plates is repulsive.

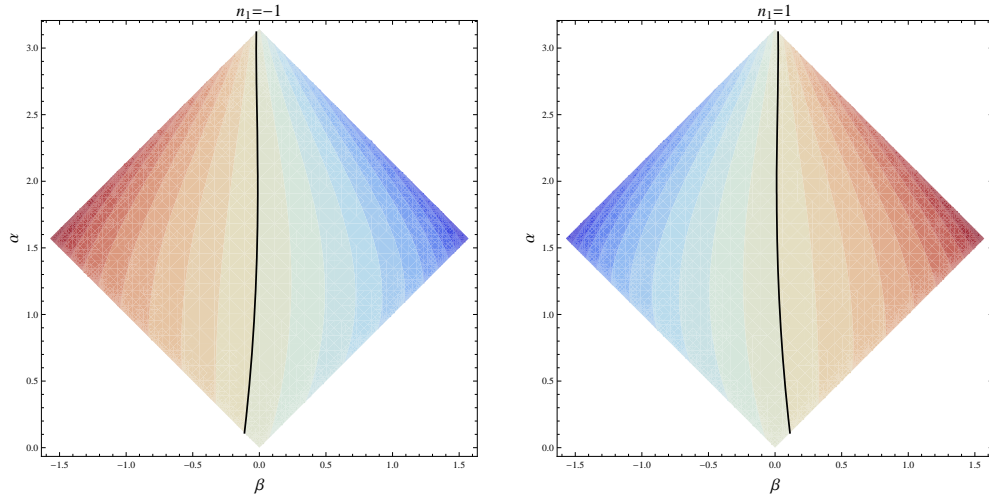


Fig. 3. [Color online] Behavior of the Casimir energy E_U in the consistency region $|\beta| < \alpha < \pi - |\beta|$, for $n_1 = \pm 1$. The Casimirless components are marked as thick lines. Blue colored regions correspond to negative values, and red colored to positive values

For more general boundary conditions it is possible to numerically evaluate the Casimir energy. In this way we find the complete set of boundary conditions which give rise to attractive Casimir forces and those which give rise to repulsive forces. The interface between both regimes correspond to boundary conditions which do not produce any Casimir force between the plates (*Casimirless boundary conditions*). The total set of Casimirless conditions is a connected subspace but its restriction for fixed values of n_1 can have one or two connected components.

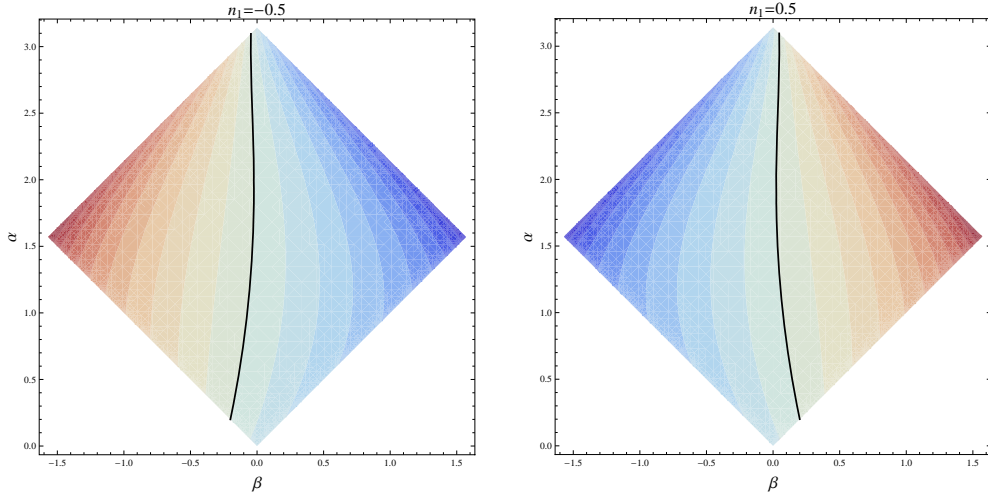


Fig. 4. [Color online] Behavior of the Casimir energy E_U in the consistency region $|\beta| < \alpha < \pi - |\beta|$, for $n_1 = \pm 0.5$. The Casimirless component appears as thick lines. Blue colored regions correspond to negative values, and red colored to positive values

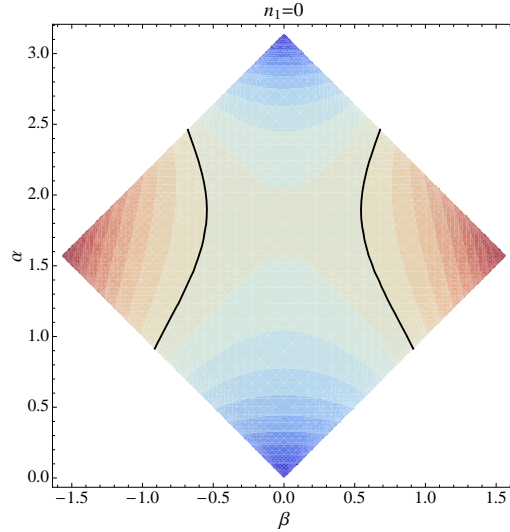


Fig. 5. [Color online] Behavior of the Casimir energy E_U in the consistency region $|\beta| < \alpha < \pi - |\beta|$, for $n_1 = 0$. The Casimirless components are marked with thick lines. Blue colored regions correspond to negative values, and red colored to positive values

Figures 3 and 4 show the behavior of the Casimir energy for the values $n_1 = \pm 1, \pm 0.5$, where there is only one connected component of Casimirless conditions.

The values of n_1 for which there are two connected components of Casimirless conditions are values close to $n_1 = 0$. In figure 5 can be seen in the case $n_1 = 0$, which has two Casimirless connected components. As long as n_1 goes towards to $n_1 = 0$ the subset of boundary conditions with zero Casimir energy changes its topology from one to two connected components. It is just

at the transition point

$$n_1 = \cos \pi \left(1 \pm \sqrt{1 - 2\sqrt{\frac{2}{15}}} \right), \quad (43)$$

where the change occurs.

One particular case of interest is the case of fixed points of the renormalization group which are saddle points and are located at left and right corners of the rhombus of \mathcal{M}_F , i.e. boundary conditions corresponding to the points on the unit sphere S^2 for values $\alpha = \pm\beta = \frac{\pi}{2}$. This includes periodic, anti-periodic, quasi-periodic, and pseudo-periodic boundary conditions. The Casimir energy per unit area

$$E_{\text{sp}}(n_1) = \frac{1}{L^3} \left(-\frac{\pi^2}{90} + \frac{(\arccos n_1)^2}{12} - \frac{(\arccos n_1)^3}{12\pi} + \frac{(\arccos n_1)^4}{48\pi^2} \right); \quad \arccos n_1 \in [0, 2\pi]. \quad (44)$$

has two attractive and repulsive regimes separated by a one dimensional circle of Casimirless boundary conditions given by

$$\alpha = \beta = \frac{\pi}{2}; \quad n_1 = \cos \pi \left(1 \pm \sqrt{1 - 2\sqrt{\frac{2}{15}}} \right). \quad (45)$$

We remark that in any case the submanifold of Casimirless boundary conditions only intersects the manifold of fixed points at the S^2 sphere of saddle fixed points of the renormalization group flow. Obviously, Dirichlet and Neumann boundary conditions have always a non-vanishing attractive Casimir energy. On the other hand, boundary conditions for identical plates correspond to $\beta = 0$ and from the numerical calculations it is shown that all these boundary conditions are always in the attractive regime as shown in figures 3 4 and 5, which in agreement with the Kenneth-Klich theorem [9].

In summary, the powerful method based on the use of the spectral function for the calculation of the Casimir effect permits to analyze from a global perspective the properties of the Casimir energy as a function over the space of consistent boundary conditions \mathcal{M}_F . Some of these global properties have a great physical interest. In particular, it is possible to find the extremal values of the Casimir energy $E_c(U)$ over the space \mathcal{M}_F . The continuity of $E_c(U)$ in \mathcal{M}_F and the compactness of \mathcal{M}_F imply the existence of at least two types of consistent boundary conditions where the Casimir energy attains its maximal and minimal values. In our case the minimum of Casimir energy corresponding to periodic boundary conditions whereas the maximum value of the Casimir energy corresponds to anti-periodic boundary conditions.

The fact that the maximum and the minimum of the Casimir energy are at the boundary of the space of consistent boundary conditions $\partial\mathcal{M}_F$ can be inferred from the analytic properties of the spectral function $h_U(k)$ which provides a bound for the Casimir energy $E_c(\alpha, \beta, n_1)$ in the interior of \mathcal{M}_F . The restriction of $h_U(k)$ to $\mathcal{M}_F \cap SU(2)$ is an harmonic function for any k and, thus, by the maximum principle all its local extrema must be at the boundary $\partial\mathcal{M}_F$. This behavior can be translated to the Casimir energy. The same argument implies the existence of extreme boundary conditions in the attractive and repulsive regimes of Casimir effect. In both cases the extreme values of E_c are reached in $\partial\mathcal{M}_F$, the minimum value corresponds to periodic boundary conditions which provide strongest attractive force between plates, and the maximum value is attained for anti-periodic boundary conditions which represents the strongest repulsive force between plates.

The global analysis of the dependence of infrared properties of field theories on the nature of boundary conditions also unveils many interesting physical effects. However, the characteristics of boundary conditions which encode the attractive or repulsive nature of the Casimir energy are still unknown, although the algorithm found in the previous section provides the simplest mechanism to determine such a character. On the other hand it will be very interesting to understand the special role of the Casimirless boundary conditions which are also fixed points of the renormalization group (45). Even if these Casimirless conformal invariant conditions are physically unstable under renormalization group flow they provide a new set of conformally invariant boundary conditions which are anomaly free (45). The existence of similar conditions in 1+1 dimensions opens a new approach for the study of string theory in non-critical dimensions. The role of such conformal boundary conditions in the corresponding string theory deserves further study.

References

- [1] Casimir H. B. G. // Proc. K. Ned. Akad. Wet. — 1948. — V. 51. — P.793
- [2] Miloni P. The Quantum Vacuum: An Introduction To Quantum Electrodynamics. — San Diego: Academic Press, 1994.
- [3] Grib A. A., Mamaev S. G., Mostepanenko V. M. Vacuum Quantum Effects in Strong Fields. — St. Petersburg: Friedman Laboratory Publishing, 1994.
- [4] Mostepanenko V. M., Trunov N. N. The Casimir effect and its applications. — Oxford: Clarendon, 1997.
- [5] Bordag M., Mohideen U., Mostepanenko V. M. // Phys. Rep. — 2001. — 353.
- [6] Milton K. A. The Casimir Effect: Physical Manifestations of Zero-point Energy, World Scientific, Singapore, 2001.
- [7] Klimchitskaya G. L., Mohideen U., Mostepanenko V. M. // Rev. Mod. Phys. — 2009. — V. 81. — P.1827.
- [8] Bordag M., Klimchitskaya G. L., Mohideen U., Mostepanenko V. M. Advances in the Casimir Effect. — Oxford University Press, 2009.
- [9] Kenneth O., Klich I. // Phys. Rev. Lett. — 2006. — V. 97. — P.160401
- [10] Munday J. N., Capasso F., Parsegian V. A. // Nature. — 2009. — V. 457. — P.170
- [11] Asorey M., Iborat A., Marmo G. // Int. J. Mod. Phys. A. — 2005. — V. 20. — P.1001.
- [12] Asorey M., Iborat A., Marmo G., Muñoz Castañeda J. M., In preparation.
- [13] Asorey M., Muñoz Castañeda J. M. // Intern. J. Theor. Phys. — 2011. — V. 50. — P.2211
- [14] Muñoz-Castañeda J.M. // Ph. D. dissertation Zaragoza U., 2009.
- [15] Kreĭn M. G. // Mat. Sb. — 1947. — V. 62. — P. 431 (In Russian).
- [16] Vishik V. I. // Trudy Mosc. Mat. Obsv. — 1952. — V. 1. — P. 187. Translated in Amer. Math. Soc. Transl. — 1963. — V. 24. — P. 107.
- [17] Grubb G. // Ann. Scuola Norm. Sup. Pisa. — 1968. — V. 22. — P. 425.
- [18] Grubb G. // Bull. Amer. Math. Soc. — 2006. — V. 43. — P. 227.
- [19] Kochubeĭ A. N. Math. Notes. — 1975. — V. 17. — P. 25.
- [20] Gorbachuk V. I., Gorbachuk M. L. Boundary value problems for operator differential equations. — Kluwer, Dordrecht, 1991.
- [21] Derkach V. A., Malamud M. M. On the Weyl function and Hermitian operators with gaps // Soviet Math. Doklady. — 1987. — V. 35. — P. 393–398.
- [22] Malamud M. M., Mogilevskii V. I. // Dop. Nation. Akad. Nauk. Ukr. — 1997. — V. 1. — P. 30.
- [23] Malamud M. M., Mogilevskii V. I. // Meth. Funct. Anal. Topology — 2002. — V. 8.
- [24] Bruening J., Geyler V., Pankrashkin K. // Rev. Math. Phys. — 2008. — V. 20.
- [25] Asorey M., Garcia-Alvarez D., Muñoz-Castañeda J.M. // J. Phys. — 2006. — A39. — P. 6127.
- [26] Asorey M., Garcia-Alvarez D., Muñoz-Castañeda J.M. // J. Phys. — 2006. — A40. — P. 6767.
- [27] Asorey M., Muñoz Castañeda J. M. // J. Phys. A — 2008. — V. 41. — P.304004
- [28] Asorey M., Marmo G., Muñoz-Castañeda J. M. The Casimir effect and Cosmology, Ed. Odintsov et al. — Tomsk State Ped. Univ. Press, 2009. — 153 p.
- [29] Emig T., Graham N., Jaffe R. L., Kardar M. // Phys. Rev. Lett. — 2007. — V. 99. — P. 170403.
- [30] Kirsten K., McKane A. J. // Ann. Phys. — 2003. — 308 — P.502; // J. Phys. — 2004. — A37. — P. 4649.
- [31] Elizalde E., Romeo A. // Phys. Rev. — 1989. — D40. — P. 436.

- [32] Elizalde E. Ten Physical applications of Spectral Zeta Functions // In: Lecture Notes in Physics, Vol. 35. — Berlin: Springer-Verlag, 1995.
- [33] Romeo A., Saharian A.A. // J.Phys. — 2002. — A35. — P. 1297.
- [34] Elizalde E. // J. Phys. — 2003. — A36. — P. 567.

LANDAU-ZENER EFFECT FOR A QUASI-2D PERIODIC SANDWICH

N. Bagraev¹, G. Martin², B. S. Pavlov^{2,3}, A. Yafyasov³

¹A. F. Ioffe Physico-Technical Institute, Russian Academy of Sciences, St. Petersburg, Russia

²NZ Institute for Advanced study, Massey University, Albany Campus, New Zealand

³V. Fock Institute for Physics at Physical Faculty of the St. Petersburg University, Russia

bagraev@mail.ioffe.ru, g.j.martin@massey.ac.nz,
pavlovenator@gmail.com, yafyasov@desse.phys.spbu.ru

Bloch-waves in 1D periodic lattices are typically constructed based on the transfer-matrix approach, with a complete system of solutions of the Cauchy problem on a period. This approach fails for the multi-dimensional Schrödinger equations on periodic lattices, because the Cauchy problem is ill-posed for the associated elliptic partial differential equations. In our previous work [8] we suggested a different procedure for the calculation of the Bloch functions for the 2D Schrödinger equation based on the Dirichlet-to-Neumann map substituted for the transfer -matrix. In this paper we suggest a method of calculation of the dispersion function and Bloch waves of quasi-2D periodic lattices, in particular of a quasi-2D sandwich, based on construction of a fitted solvable model.

Keywords: Landau-Zener effect, Bloch waves.

1. Transfer- matrix and DN-map approach to construction of Bloch- functions in 1D periodic lattices

The study of the basic quantum features of solids can be reduced to the one-body spectral problem on periodic lattices and construction of the quasi-periodic solutions of the one-body Schrödinger equation - Bloch-functions, see [16, 19]. In the 1D case Bloch-functions are constructed on the period $(0, a)$, $q(x + a) = q(x)$, as linear combinations $\chi = \theta + m\varphi$ of standard solutions of the Cauchy problem satisfying the initial conditions $\theta(0) = 1, \theta'(0) = 0, \varphi(0) = 0, \varphi'(0) = 1$:

$$-\theta'' + q\theta = \lambda\theta, \quad -\varphi'' + q\varphi = \lambda\varphi \quad (1)$$

A linear combination $\chi = \theta + \mu\varphi$ of the two above solutions, with Wronskian equal to 1, represents a *Bloch function*, if it satisfies the quasi-periodic boundary conditions

$$\chi(a) = \mu\chi(0), \quad \chi'(a) = \mu\chi'(0).$$

The corresponding spectral bands σ_s are defined by the condition $-1 \leq \mathcal{T}/2(\lambda) \leq 1$ imposed on the trace $\text{Tr } \mathcal{T}(\lambda) = [\theta(a) + \varphi'(a)]$ of the transfer matrix

$$\mathcal{T} = \begin{pmatrix} \theta(a) & \varphi(a) \\ \theta'(a) & \varphi'(a) \end{pmatrix} : \mathcal{T} \begin{pmatrix} u(0) \\ u'(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u(a) \\ u'(a) \end{pmatrix} = \mu \begin{pmatrix} u(0) \\ u'(0) \end{pmatrix}.$$

In fact the Bloch solution $\chi(x, p)$ is bounded on the real axis x , if $p^2 = \lambda$ is on the spectral bands and does not tend to zero at infinity, $|x| \rightarrow \infty$, that is only if $\mu = e^{ipa}$, with real quasi-momentum p .

In particular for the Bloch solution $\chi = \theta + m\varphi$ we have

$$\mathcal{T} \begin{pmatrix} 1 \\ m \end{pmatrix} = \mu \begin{pmatrix} 1 \\ m \end{pmatrix}.$$

Thus the Cauchy data $(1, m)$ of the Bloch function give an eigenvector of the transfer matrix with the eigenvalue μ :

$$\det \begin{pmatrix} \theta(a) - \mu & \varphi(a) \\ \theta'(a) & \varphi'(a) - \mu \end{pmatrix} = 0$$

thus $\mu^2 - [\theta(a) + \varphi'(a)]\mu + 1 = 0$.

Hence the dispersion $\lambda = \lambda(p)$ and the position of the spectral bands $\sigma : |\mu| = 1$ are defined by the trace of the transfer matrix, see Fig.1.

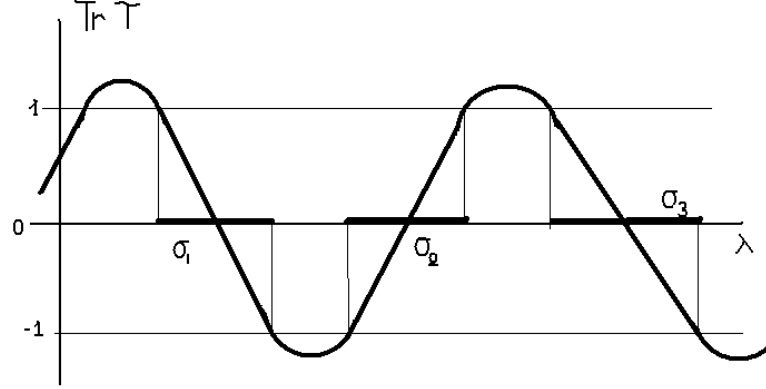


Fig. 1. The spectral bands σ_s of the 1D periodic problem found from the condition $-1 \leq \text{Tr } \mathcal{T} < 1$.

The above “transfer-matrix path” to the construction of Bloch functions fails in the case of multi-dimensional periodic lattices, because the Cauchy problem is ill-posed for these elliptic PDEs. Fortunately this is not the only way to calculate the dispersion function and the Bloch waves, even in the 1D case.

Indeed, we can obtain Bloch solutions from an analysis of a boundary problem, by consider, instead of the standard solutions θ, φ of the Cauchy problem, another pair of solutions ψ_0, ψ_a of the same Schrödinger equation $-\psi'' + q\psi = \lambda\psi$, with the boundary data $\psi_0(0) = 1, \psi_0(a) = 0$ and, respectively $\psi_a(0) = 0, \psi_a(a) = 1$, see Fig. 1 (1,2) below. These solutions ψ_0, ψ_a of the Schrödinger equation are linearly independent if λ is not an eigenvalue of the corresponding Dirichlet problem on the period.

$$W(\psi_0, \psi_a) \Big|_0 = -\psi_a'(0) = W(\psi_0, \psi_a) \Big|_a = \psi_0'(a) = W(\psi_0, \psi_a) \Big|_a.$$

Then the Bloch solution can be found as a linear combination of ψ_0, ψ_a in the form

$$\chi(x) = \chi(0)\psi_0(x) + \chi(a)\psi_a(x) = \chi(0) [\psi_0(x) + e^{ipa}\psi_a(x)] \quad (2)$$

which implies:

$$\chi'(a) = \chi(0) [\psi_0'(a) + e^{ipa}\psi_a'(a)] = e^{ipa} \chi(0) [\psi_0'(0) + e^{ipa}\psi_a'(0)].$$

Eventually, the quasi-momentum exponential $e^{ipa} = \mu$ will be found from the quadratic equation

$$[\psi_0'(a) + \mu\psi_a'(a)] = \mu [\psi_0'(0) + \mu\psi_a'(0)]$$

which can be re-written as

$$\mu^2 + \frac{\psi_0'(0) - \psi_a'(a)}{\psi_a'(0)} \mu - \frac{\psi_0'(a)}{\psi_a'(0)} = \mu^2 + \frac{\psi_0'(0) - \psi_a'(a)}{\psi_a'(0)} \mu + 1 = 0. \quad (3)$$

Here the coefficient in front of $-\mu$ is equal again to trace $\text{Tr } \mathcal{T} = \mu + \mu^{-1}$ of the transfer-matrix:

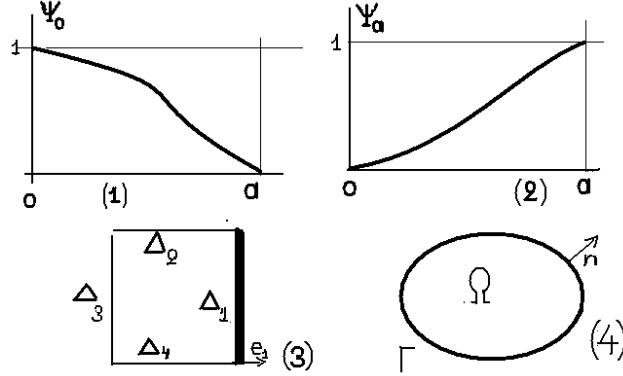


Fig. 2. Standard solutions ψ_0 (1) of the 1D boundary problem. Standard solutions ψ_{Δ^1} of the 2D boundary problem on the square period (3). Standard solutions of the boundary problems on the domain with a smooth boundary (4).

Thus the Bloch solution can be constructed of the standard solutions ψ_0, ψ_a as $\chi(0)[\psi_0 + \mu\psi_a]$.

This naive approach to the construction of the Bloch function, contrary to previous, based on the transfer matrix, can be extended to multidimensional lattices, because it is dealing with objects naturally defined in a multidimensional environment. Indeed, define the Dirichlet-to-Neumann map (DN-map) as the transformation of the Dirichlet boundary data $\psi(0), \psi(a)$ of the solution ψ on the boundary into the Neumann data $\psi'(0), \psi'(a)$, associated with the positive direction on the x -axis. Notice, that our definition of the 1D DN - map, in this section, is only slightly different from the standard one which is associated with the positive normal on the boundary of the domain, but not with the positive direction of the x -axis :

$$\mathcal{DN}_{stand} \begin{pmatrix} u(0) \\ u(a) \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} -u'(0) \\ u'(a) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u'(0) \\ u'(a) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \mathcal{DN} \begin{pmatrix} u(0) \\ u(a) \end{pmatrix}$$

Hence our DN-map transfers the Dirichlet data $(u(0), u(a))$ as follows:

$$\begin{pmatrix} \psi'_0(0) & \psi'_a(0) \\ \psi'_0(a) & \psi'_a(a) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u(0) \\ u(a) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u'(0) \\ u'(a) \end{pmatrix} \equiv \mathcal{DN} \begin{pmatrix} u(0) \\ u(a) \end{pmatrix}. \quad (4)$$

Then the quasi-periodic conditions imposed onto the boundary data $(1, \mu)\chi(0), (1, \mu)\chi'(0)$ of the Bloch function are represented as a homogeneous equation with respect to the independent variables $(u(0), u'(0))$:

$$\begin{pmatrix} \psi'_0(0) & \psi'_a(0) \\ \psi'_0(a) & \psi'_a(a) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ \mu \end{pmatrix} \chi(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ \mu \end{pmatrix} \chi'(0) \quad (5)$$

This can be considered as a homogeneous equation for Cauchy data $(\chi(0), \chi'(0))$ at the left border point $x = 0$ of the period. Then a nonzero solution of the problem exists under the determinant condition.

$$\det \begin{pmatrix} \psi'_0(0) + \mu\psi'_a(0) & -1 \\ \psi'_0(a) + \mu\psi'_a(a) & -\mu \end{pmatrix} = 0,$$

which coincides with (3).

This approach is based on the boundary problem and the Dirichlet-to-Neumann map, see next section for it's two-dimensional version. The Cauchy problem is present here just in the form of the data $(u(0), u'(0))$, which can be considered as independent coordinates characterizing the solution u , due to the uniqueness theorem: $(u(0) = 0, u'(0) = 0)$ involves vanishing of the corresponding solution of the Schrödinger equation $-u'' + qu - \lambda u = 0$.

2. DN-map approach to construction of Bloch- functions in quasi-2D periodic lattices

The proposed method of constructing of Bloch functions does not rely on the existence of solutions of the Cauchy problem. Instead, it uses the uniqueness of the solution of the Cauchy problem and the Dirichlet -to-Neumann map. Both details are present in the multidimensional case, although the existence of solutions of Cauchy problems is not guaranteed. Fortunately we do not need the existence here.

Really the only difference between the general multidimensional approach suggested from the one-dimensional version is the unified choice of the direction of the normal derivative on the boundary: the positive normal is defined in multidimensional case as an exterior normal, which involves changing signs of some matrix elements of the DN-map.

In the multidimensional case the roles of the basic solutions ψ_0, ψ_a of the boundary problems for the Schrödinger equation on the square 2D period are played by solutions associated with the boundary data forming an orthogonal basis $\{\psi_s^\Gamma\} \in L_2(\Gamma)$ on the boundary of the period $\Omega : \partial\Omega = \Gamma$, see Fig.2, (4):

$$-\Delta \psi_s + q\psi_s = \lambda\psi_s, \quad \psi_s \Big|_\Gamma = \psi_s^\Gamma, \quad \langle \psi_s^\Gamma, \psi_t^\Gamma \rangle_{L_2(\Gamma)} = \delta_{st}.$$

Due to the uniqueness theorem for these elliptic equations the solutions $\{\psi_s\}$ are linearly independent, and their linear combinations approximate a solution of any boundary problem with the boundary data u_Γ decomposed on the boundary basis.

This fact allows us to define and calculate the Dirichlet-to-Neumann map on the domain as an operator in the space of boundary values of smooth solutions transforming the Dirichlet boundary data u_Γ into the Neumann boundary data - the normal derivatives

$$\mathcal{DN} : u_\Gamma \longrightarrow \frac{\partial u}{\partial n} \Big|_\Gamma, \quad (6)$$

see [23] for a discussion of the appropriate Sobolev classes. To calculate the matrix of the DN-map with respect to an orthogonal basis $\{u_s\}$ on the smooth boundary Γ , consider the matrix element of the DN-map

$$\int_\Gamma \bar{u}_l \frac{\partial u_m}{\partial n} d\Gamma \equiv \langle u_l, \mathcal{DN} u_m \rangle$$

Then the Green's formula allows us to transform the matrix element into the bilinear form of the Schrödinger operator.

$$\langle u_l, \mathcal{DN} u_m \rangle = \int_\Omega [\nabla \bar{u}_l \nabla u_m + q \bar{u}_l u_m - \lambda \bar{u}_l u_m] d\Omega. \quad (7)$$

This formula now allows us to calculate effectively the trace of the DN-map in some finite-dimensional subspaces, if the spectral parameter λ is far from the eigenvalues of the Dirichlet problem on the domain Ω . When λ is close to a Dirichlet eigenvalue, it is more convenient to calculate the matrix elements of the Neumann-to-Dirichlet map. This is done based on the same

formula (7), but beginning from the solution of a sequence of Neumann problems for a smooth orthogonal basis $\{\rho_s\}$ in $L_2(\Gamma)$

$$-\Delta v_s + qv_s = \lambda v_s, \quad \left. \frac{\partial v_s}{\partial n} \right|_{\Gamma} = \rho_s.$$

Then the Green formula implies the following expression for the matrix elements of the Neumann-to-Dirichlet map

$$-\Delta v + qv - \lambda u, \quad \mathcal{ND} : \left. \frac{\partial u}{\partial n} \right|_{\Gamma} \longrightarrow v \Big|_{\Gamma}.$$

$$\langle \mathcal{ND} \rho_l, \rho_m \rangle = \int_{\Omega} [\nabla \bar{v}_l \nabla v_m + q \bar{v}_l v_m - \lambda \bar{v}_l v_m] d\Omega. \quad (8)$$

Once the Neumann-to-Dirichlet map is constructed, the Dirichlet-to-Neumann map, should it exist for given λ , can be obtained as the inverse of the former, $\mathcal{DN} \mathcal{ND} = I$.

Notice, that the DN map, associated with the outward positive normal, has a negative imaginary part in the upper halfplane $\Im \lambda > 0$, but the inverse \mathcal{ND} is a Nevanlinna-class function. Obviously choosing the inward positive normal results in \mathcal{ND} with the negative imaginary part and the Nevanlinna-class operator function \mathcal{DN} .

Consider the quasi- 2D periodic lattice with a cubic period, see Fig. 3, and the Schrödinger operator

$$Lu = -\Delta u + q(x)u \quad (9)$$

on the lattice, with periodic potential $q(x^1, x^2) = q(x^1 + ma, x^2 + na)$, $m, n = \pm 1, \pm 2, \dots$, zero boundary conditions on the lower and the upper lids $\Gamma_0^3 : x^3 = 0$, $\Gamma_h^3 : x^3 = h$ of the lattice.

In this way the whole spectral problem on the lattice is reduced to the spectral problem on the period, with the same boundary conditions on the lids $\Gamma_{0,h}^3$, and the quasi-periodic conditions on the vertical walls $\Gamma_{0,a}^{1,2}$.

The positive normal on $\Gamma_a^{1,2}$ is defined by e_1, e_2 , and the positive normals on the walls $\Gamma_0^{1,2}$ are $-e_1, -e_2$. The quasi-periodic boundary conditions permit us to eliminate the boundary data $u|_{\Gamma_0^{1,2}}, \frac{\partial u}{\partial n}|_{\Gamma_0^{1,2}}$ on the walls $\Gamma_0^{1,2}$:

$$u \Big|_{\Gamma_0^{1,2}} = e^{-ip_{1,2}a} u \Big|_{\Gamma_a^{1,2}}, \quad \frac{\partial u}{\partial n} \Big|_{\Gamma_0^{1,2}} = -e^{-ip_{1,2}a} \frac{\partial u}{\partial n} \Big|_{\Gamma_a^{1,2}}.$$

Then the quasi-periodic boundary conditions on the walls $\Gamma_{0,a}^{1,2}$ are reduced to a linear system with respect to the ‘‘independent variables’’ $\vec{u} = (u_a^1, u_a^2, \frac{\partial u}{\partial n} \Big|_{\Gamma_a^1}, \frac{\partial u}{\partial n} \Big|_{\Gamma_a^2})$, with a matrix composed of the components of the \mathcal{DN} on the walls:

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial u}{\partial n} \Big|_{\Gamma_0^1} \\ \frac{\partial u}{\partial n} \Big|_{\Gamma_0^2} \\ -e^{-ip_{1,2}a} \frac{\partial u}{\partial n} \Big|_{\Gamma_a^1} \\ -e^{-ip_{1,2}a} \frac{\partial u}{\partial n} \Big|_{\Gamma_a^2} \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \frac{\partial \vec{u}_a}{\partial n} \\ -\mu^{-1} \frac{\partial \vec{u}_a}{\partial n} \end{pmatrix} = \mathcal{DN} \begin{pmatrix} u \Big|_{\Gamma_a^1} \\ u \Big|_{\Gamma_a^2} \\ e^{-ip_1 a} u \Big|_{\Gamma_a^1} \\ e^{-ip_2 a} u \Big|_{\Gamma_a^2} \end{pmatrix} \quad (10)$$

$$\mathcal{DN} \begin{pmatrix} u \Big|_{\Gamma_a^1} \\ u \Big|_{\Gamma_a^2} \\ e^{-ip_1 a} u \Big|_{\Gamma_a^1} \\ e^{-ip_2 a} u \Big|_{\Gamma_a^2} \end{pmatrix} \equiv \mathcal{DN} \begin{pmatrix} \vec{u}_a \\ \mu^{-1} \vec{u}_a \end{pmatrix}. \quad (11)$$

Here $\mu = [\mu_1, \mu_2] = [e^{ip_1 a}, e^{ip_2 a}]$ is a diagonal matrix. The DN-map \mathcal{DN} can be represented in matrix form with 2×2 blocks $\mathcal{DN}_{\alpha\beta}^{ik}$ connecting the Dirichlet data on Γ_{β}^k to the Neumann data on Γ_{α}^i .

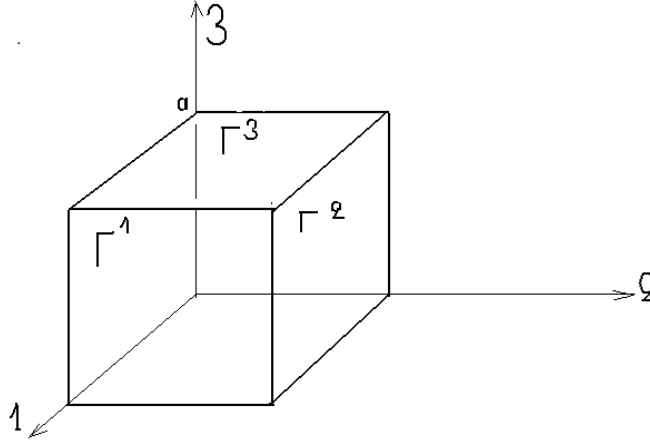


Fig. 3. 3D-period of the quasi-2D lattice, with zero boundary conditions on Γ_{α}^3 .

Matrix elements of the DN map connect the Dirichlet data on Γ_{α}^{ik} with Neumann data on $\Gamma_{\alpha'}^{jl}$.

$$\begin{pmatrix} \mathcal{DN}_{aa}^{11} & \mathcal{DN}_{aa}^{12} \\ \mathcal{DN}_{aa}^{21} & \mathcal{DN}_{aa}^{22} \end{pmatrix} \equiv \mathcal{DN}_{aa}, \quad \begin{pmatrix} \mathcal{DN}_{a0}^{11} & \mathcal{DN}_{a0}^{12} \\ \mathcal{DN}_{a0}^{21} & \mathcal{DN}_{a0}^{22} \end{pmatrix} \equiv \mathcal{DN}_{a0},$$

$$\begin{pmatrix} \mathcal{DN}_{0a}^{11} & \mathcal{DN}_{0a}^{12} \\ \mathcal{DN}_{0a}^{21} & \mathcal{DN}_{0a}^{22} \end{pmatrix} \equiv \mathcal{DN}_{0a}, \quad \begin{pmatrix} \mathcal{DN}_{00}^{11} & \mathcal{DN}_{00}^{12} \\ \mathcal{DN}_{00}^{21} & \mathcal{DN}_{00}^{22} \end{pmatrix} \equiv \mathcal{DN}_{00}.$$

Then the DN-map is represented by the block-matrix

$$\mathcal{DN} = \begin{pmatrix} \mathcal{DN}_{aa} & \mathcal{DN}_{a0} \\ \mathcal{DN}_{0a} & \mathcal{DN}_{00} \end{pmatrix}.$$

with blocks mapping the data \vec{u}_a, \vec{u}_0 onto the positive normal derivatives $\frac{\partial \vec{u}_a}{\partial n}, \frac{\partial \vec{u}_0}{\partial n}$. In particular, the 0-components of the Bloch function can be eliminated based on $\vec{u}_0 = \mu^{-1} \vec{u}_a, \frac{\partial \vec{u}_0}{\partial n} = \mu^{-1} \frac{\partial \vec{u}_a}{\partial n}$, which implies the following linear homogeneous system for the data $(\vec{u}_a, \frac{\partial \vec{u}_a}{\partial n})$ of the Bloch-function:

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial \vec{u}_a}{\partial n} \\ -\mu^{-1} \frac{\partial \vec{u}_a}{\partial n} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathcal{DN}_{aa} & \mathcal{DN}_{a0} \\ \mathcal{DN}_{0a} & \mathcal{DN}_{00} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{u}_a \\ \mu^{-1} \vec{u}_a \end{pmatrix}. \quad (12)$$

Eliminating $\frac{\partial \vec{u}_a}{\partial n}$ we conclude that a nontrivial solution of the equation (12) exists if and only if zero is an eigenvalue of the operator:

$$[\mu \mathcal{DN}_{0a}\mu + \mu \mathcal{DN}_{00} + \mathcal{DN}_{aa}\mu + \mathcal{DN}_{00}] \vec{u}_a = 0. \quad (13)$$

Then the Bloch function is obtained as a solution of the boundary problem for the Schrödinger equation

$$-\Delta \chi + q\chi = \lambda\chi. \quad \chi \Big|_{\Delta_a^{1,2}} = u_a^{1,2}, \quad \chi \Big|_{\Delta_0^{1,2}} = e^{-ip_{1,2}a} u_a^{1,2}.$$

Equation (13) is an analog of the quadratic equation (3), however questions concerning the existence of the corresponding solution of it in the general case is not yet completely understood, because we can't use the classical determinant condition of existence of non-trivial solutions of the homogeneous equation (13), see analysis of a general situation based on Schur complement - a matrix analog of the determinant — in [18].

Fortunately for us, the physically meaningful spectral problem on the cubic periodic lattice with romboidal periods and relatively narrow connecting channels Γ_α^i , $\alpha = 0, a$; $i = 1, 2$, gives a chance of simplification of the model down to the solvable level.

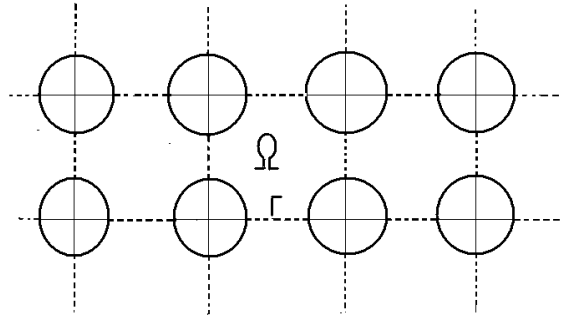


Fig. 4. 2D periodic lattice with romboidal periods

3. Finite-dimensional low-energy approximation for the dispersion surface of a quasi-2D periodic lattice

The structure of branches of the wave-functions on the links, connecting neighboring periods is determined mainly by the eigenfunctions of the conductivity band and by the covalent bonds formed from the upper filled orbitals on the period. Lower orbitals are essentially localized inside the period. This observation suggests that we substitute the spectral problem on the whole periodic lattice by one supplied with additional “partial” zero boundary conditions on the contacts Γ_α^i of the neighboring periods applied on the orthogonal complement $N^\perp \subset L_2(\Gamma)$ of the *contact space* N and the partial matching of eigenfunctions of the valent and conductivity bands on N :

$$P^N u \Big|_{\Gamma_0^i} = e^{-ip_{1a}} P^N u \Big|_{\Gamma_a^i}; \quad P^N \frac{\partial u}{\partial n} \Big|_{\Gamma_0^i} = -e^{-ip_{1a}} P^N \frac{\partial u}{\partial n} \Big|_{\Gamma_a^i}; \quad P_N^\perp u \Big|_{\Gamma_{0,a}^i} = 0. \quad (14)$$

The structure of the corresponding spaces N, N^\perp depends on the energy, however for low temperature the energy is defined by the Fermi level Λ_F of the material and thus, in this regime, N can be selected independently of the energy. Then the above boundary conditions (14) define, together with the potential q and the corresponding differential expression $Lu = -\Delta u + qu$, a selfadjoint operator L_N on the period, with *partial quasi-periodic* boundary condition in $N \subset L_2(\Gamma)$. In fact the contact space N is the main parameter of our one-body model of the 2D

periodic lattice. The freedom of choice of N here can be used in different ways to understand the structure and the functioning of the valent bonds and conductivity in solids.

The DN-map of the model Schrödinger equation with Dirichlet zero boundary condition on the complementary subspace and partial Dirichlet boundary condition in the contact space N

$$-\Delta u + qu = \lambda u, P_N^\perp u \Big|_{\Gamma^i} = 0, P^N u \Big|_{\Gamma^i} = u_\Gamma^N \in N. \quad (15)$$

is obtained via framing of the standard DN-map by the projections P^N onto the contact space N of the covalent bonds and conductivity channels.

$$\mathcal{DN}^N \equiv P^N \mathcal{DN} P^N.$$

Then the dispersion equation of the model with a chosen contact space N is obtained, as in (13), via substitution of the standard DN-map by the partial DN map

$$[\mu \mathcal{DN}_{0a}^N \mu + \mu \mathcal{DN}_{00}^N + \mathcal{DN}_{aa}^N \mu + \mathcal{DN}_{00}^N] \vec{u}_a = 0. \quad (16)$$

The ultimate equation, contrary to (13), is finite-dimensional. This allows us to obtain the dispersion equation for the model periodic quasi-2D lattice in explicit form as a determinant condition of existence of a nontrivial solution of the homogeneous equation. Indeed, assume that there exist a single resonance eigenvalue of the relative Dirichlet problem, situated close to the Fermi level Λ^F , $\lambda_1^D \approx \Lambda^F$, on the period, with an eigenfunction φ_1^D . Then, for low temperature, the relative DN-map can be replaced on the temperature interval near the Fermi level ($\Lambda^F - 2m\kappa T\hbar^{-2}, \Lambda^F + 2m\kappa T\hbar^{-2}$) by a sum of a one-dimensional polar term and a correcting term

$$\mathcal{DN}^N \approx \frac{P^N \frac{\partial \varphi_1^D}{\partial n} \rangle \langle P^N \frac{\partial \varphi_1^D}{\partial n}}{\lambda - \lambda_1^D} + P^N B P^N \equiv \frac{Q^N}{\lambda - \lambda_1^D} + B^N.$$

Hence (16) is represented in a matrix form, based on the decomposition $N = \sum_{i=1,2,\alpha=0,a} N(\Gamma_\alpha^i)$.

Elimination of the variable $P^N \frac{\partial v}{\partial n} \Big|_{\Gamma_a}$ gives a *finite-dimensional* equation for $P^N v \Big|_{\Gamma_a}$ similar to one above, see (13)

$$[\mu Q_{0a}^N \mu + \mu Q_{00}^N + Q_{aa}^N \mu + Q_{00}^N] \vec{u}_a + (\lambda - \lambda_1^D) [\mu B_{0a}^N \mu + \mu B_{00}^N + B_{aa}^N \mu + B_{00}^N] \vec{u}_a = 0, \quad (17)$$

with $\mu = (\mu_1, \mu_2) = (e^{ip_1 a}, e^{ip_2 a})$. The determinant condition for existence of a non-trivial solution to the ultimate equation gives the dispersion equation $\lambda = \lambda(p_1, p_2)$ for the model Hamiltonian L_N of the periodic lattice.

4. Landau-Zener phenomenon and Bloch-functions on a quasi-2D periodic sandwich

The essence of the 1D Landau-Zener phenomenon is easy to see from the simplest example of two parallel strings

$$\frac{1}{c_1^2} \frac{\partial^2 u^1}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 u^1}{\partial x^2} + \varepsilon u^2, \quad \frac{1}{c_2^2} \frac{\partial^2 u^2}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 u^2}{\partial x^2} + \varepsilon u^1,$$

manufactured from a magnetic material, weakly interacting due to their different or equivalent polarity. Re-writing the above linear system in terms of Fourier-dual variables τ, ξ (frequency and momentum) as

$$\frac{1}{c_1^2} \tau^2 \tilde{u}^1 = \xi^2 \tilde{u}^2 - \varepsilon \tilde{u}^2, \quad \frac{1}{c_a^2} \tau^2 \tilde{u}^2 = \xi^2 \tilde{u}^1 - \varepsilon \tilde{u}^1$$

yields a dispersion equation in the form of a determinant condition for the Fourier-dual variables $p^2 = c^{-2}\tau^2 + \varepsilon^2$. The branches $\lambda_{1,2}(\varepsilon)$ of the dispersion curve $p = \lambda_{1,2}(\varepsilon)\tau$ are just straight lines crossing at the origin of the (τ, p) plane, but form two branches of a hyperbola for $\varepsilon > 0$. The Landau-Zener effect is precisely the transformation of the crossing of the terms $\lambda_1(p), \lambda_2(p)$

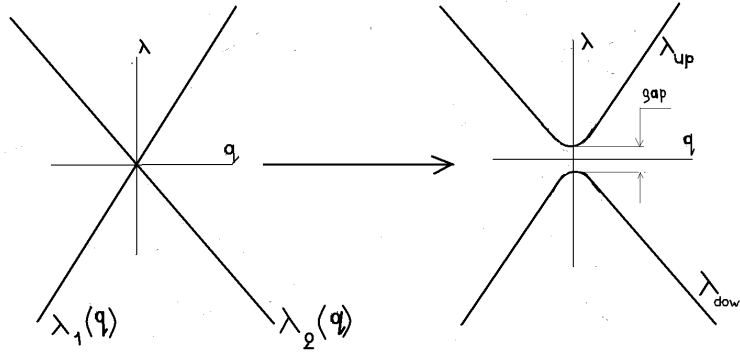


Fig. 5. One - dimensional Landau-Zener effect.

for $\varepsilon = 0$ into the “quasi-crossing” for $\varepsilon > 0$, as it is shown in Fig. 5. This effect was first observed in [31], see an extended analysis of the 1D case in [12]. It was noticed that the interaction of terms λ_s in solid-state quantum problems leads to pseudo-relativistic properties of the corresponding particles/quasi-particles. Fresh interest for quasi-relativism in solid state physics arose in connection with the discovery of the high mobility of charge carriers in graphen, see for instance [13,20,28]. The 1D Landau-Zener effect in the case of weakly-interacting lattices can be considered as a “blowup” of the 0-dimensional singularity at the crossing point of the terms, see Fig.6 (1,2). Physicists have not yet decided on the magnitude of the mass of the charge carrier in Graphen, but there are recent theoretical indications, see [13], that it is small, but non-zero. This would mean that the conic dispersion surface presented in [20], may be interpreted a blowup of the tip of the cone, see Fig. 6 (3,4) Unfortunately, this hypothesis would contradict to our previous observations concerning the 2D Landau-Zener effect, see Fig. 8 (2). It remains an important question if an essential anisotropy of the effective mass of electron in graphen could be measured, to support the idea of the blowup resolution if the conic singularity presented on the picture in [20], but the mathematical arguments support the anisotropic stance of the resolution of the singularity on the line of intersection of two 2D terms blowing up in a form of a gutter, see Fig. 8 (2).

Indeed, the Bloch functions of two electrons on a pair of remoted periodic lattices with romboidal periods, see Fig 7, separated by a potential barrier (or two holes on lattices, separated by a quantum well) can be obtained as the product of the the Bloch functions on the isolated lattices. The corresponding dispersion equation for a single electron (hole) on the remoted lattices is obtained as a product of dispersion functions on the lattices $[E - E_u(\vec{p})][E - E_d(\vec{p})] = 0$. But if the mutual positions of the lattices permit the electron (hole) to jump from one lattice to another, then the product of the dispersion functions is transformed into the perturbed product $[E - E_u(\vec{p})][E - E_d(\vec{p})] = \varepsilon(E, \vec{p})$ with a small term in the right-hand side.

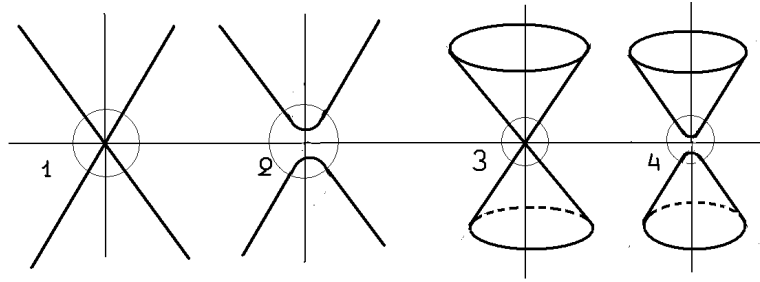


Fig. 6. The blowup of the zero-dimensional singularity for 1D terms (1,2) and 2D terms (3, 4)

Our aim is to calculate the perturbed equation based on the spectral data of the lattices and a model, see Fig. 8(1) of the interaction between lattices introduced via special assumptions about tunneling across the δ - barrier, see below. A naive physicist would easily see that the blowup of the intersection line of the dispersion surfaces $E = E_u(\vec{p})$, $E = E_d(\vec{p})$ of the upper and lower lattices with a barrier between them constitute a sandwich and would not give a cone (with a rounded top), see Fig. 8(4), but rather a gutter-like shape of the resulting dispersion surface, Fig. 8(3).

The final decision on the type of the blow-up (either the conic -like blowup or the gutter like blowup) must be recovered from experiments aimed at measurement of the effective mass anisotropy. But in this paper, based on our arguments above and also the modern analysis of blowup from 1D and 2D singularities in [24], we represent, see Fig. 8 (2), a theoretical analysis of the gutter-like blowup resolution of singularity localized of a curve obtained as an intersection of the 2D terms arising from the two neighboring periods of the upper and lower lattices of a quasi- 2D sandwich structure.

Our study is motivated by the recent discovery of the quasi-relativistic behavior of terms in the man-made sandwich of two periodic quasi-2D lattices, see [5]. We hope that the sandwich structures of two weak interacting quasi-periodic lattices can be used as a source of various artificial material structures with useful and interesting transport properties. The study of the Landau-Zener transformation in 2D case requires new analytic machinery, since, as we have noticed above, the 1D technique, based on the transfer-matrix, fails because of the “ill-posedness” of the Cauchy problem for Schrödinger equation on a square period. Thus we consider the periodic 2D sandwich based on Dirichlet-to-Neumann technique developed in the previous section.

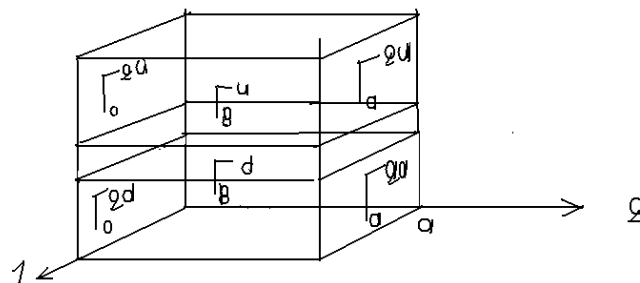


Fig. 7. Two-storied period of the periodic quasi-2D sandwich lattice

Originally we considered a 2-stordie period, see Fig. 7 with partial quasi-periodic boundary conditions on the vertical walls $\Gamma_{i,\alpha}^{u,d}$, $1 = 1, 2$, $\alpha = 0, a$, with the contact subspaces $N_{1,2}$, zero boundary conditions on the upper and lower lids Γ_h, Γ_{-h} and a bilateral potential barrier Γ_b^\pm ,

emulating the upper and lower layers of silicon heavily doped with borons and the intermediate layer of pure silicon, substituted by the δ -barrier.

This model is already soluble, but we make one more step to obtain further simplification by substitution of the rectangular barrier by a δ - barrier, see Fig. 8(1). Denoting by $n_b^{d,u}$ the outer normals on both sides $\Gamma_b^{u,d}$ of the δ - barrier, we represent the boundary condition on Γ_b as

$$P_{N_b} \left[\frac{\partial \Psi^u}{\partial n^u} \Big|_{\Gamma_b^u} + \frac{\partial \Psi^d}{\partial n^d} \Big|_{\Gamma_b^d} \right] + \beta V_b = 0, \quad \text{with } \Psi_b = P_{N_b} \Psi^d \Big|_{\Gamma_b^d} = P_{N_b} \Psi^u \Big|_{\Gamma_b^u}. \quad (18)$$

Here we assume the continuity condition of the wave-function on the potential barrier and a jump of the normal derivative $\frac{\partial \Psi^u}{\partial n^u} \Big|_{\Gamma_b^u} + \frac{\partial \Psi^d}{\partial n^d} \Big|_{\Gamma_b^d} \equiv \left[\frac{\partial \Psi}{\partial n} \right] \Big|_{\Gamma_b}$ depending on the value of the N_b - projection $P_{N_b} \Psi^u \Big|_{\Gamma_b^u}$ of the wave-function on the barrier.

Once the magnitude of the tunneling constant β is fixed, we may consider the DN-map of the two-storied period with the joint vertical walls $\Gamma_{i,\alpha} = \Gamma_{i,\alpha}^u \cup \Gamma_{i,\alpha}^d$, and $N_i = N_i^u \cup N_i^d$. Then the dispersion equation for the 2D sandwich is similar to previous formulae (16,17).

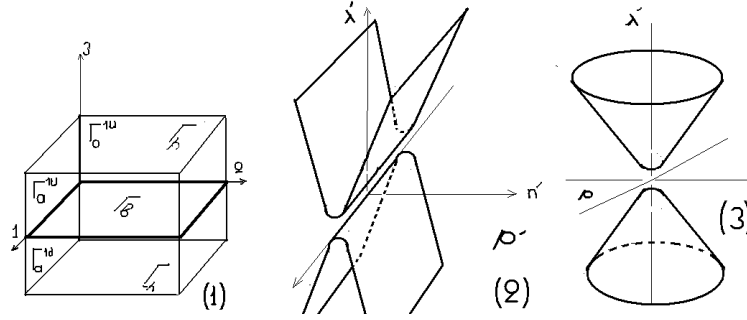


Fig. 8. Two-story period of the periodic quasi-2D sandwich lattice

It is interesting to observe the behavior of the dispersion surfaces in terms of the tunneling parameter β . To do this we consider the relative DN-maps of the upper and the lower stories Ω^u, Ω^d of the whole 2-story period Ω of the sandwich. Denote by N_1^u, N_i^d, N_b the contact subspaces associated with the corresponding walls $\Gamma_{\alpha,i}^u, \Gamma_{\alpha,i}^d, \Gamma_b$ and by $N_1^{u,\perp}, N_i^{d,\perp}, N_b^\perp$ the relevant orthogonal complements in the spaces of square-integrable functions on the walls.

$$\mathcal{DN}^u = \begin{pmatrix} \mathcal{DN}_{aa}^u & \mathcal{DN}_{a0}^u & \mathcal{DN}_{ab}^u \\ \mathcal{DN}_{0a}^u & \mathcal{DN}_{00}^u & \mathcal{DN}_{0b}^u \\ \mathcal{DN}_{ba}^u & \mathcal{DN}_{b0}^u & \mathcal{DN}_{bb}^u \end{pmatrix}, \quad (19)$$

with 2 blocks

$$\mathcal{DN}_{\alpha,\alpha'}^u = \begin{pmatrix} P_1^u \mathcal{DN}_{\alpha,\alpha'}^u P_1^u & P_1^u \mathcal{DN}_{\alpha,\alpha'}^u P_2^u \\ P_2^u \mathcal{DN}_{\alpha,\alpha'}^u P_1^u & P_2^u \mathcal{DN}_{\alpha,\alpha'}^u P_2^u \end{pmatrix}$$

and 2×1 , 1×2 and 1×1 blocks

$$\mathcal{DN}_{\alpha,b}^u = \begin{pmatrix} P_1^u \mathcal{DN}_{\alpha,b}^u P_b^u \\ P_2^u \mathcal{DN}_{\alpha,b}^u P_b^u \end{pmatrix}, \quad \mathcal{DN}_{b,\alpha}^u = (P_b^u \mathcal{DN}_{b,\alpha}^u P_1^u; P_b^u \mathcal{DN}_{b,\alpha}^u P_2^u), \quad \mathcal{DN}_{bb}^u = P_b^u \mathcal{DN}_{bb}^u P_b^u.$$

A similar representation is valid for \mathcal{DN}^d . The joint DN-map \mathcal{DN}_{2D} of the period with continuity condition in N_b on $\Gamma_b : P_{N_b}\Psi \Big|_{\Gamma_b^u} \equiv P_b\Psi \Big|_{\Gamma_b^d}$ and the tunneling condition on the barrier

$$\left[P_b \frac{\partial \Psi}{\partial n} \right] + \beta P_b \Psi \Big|_{\Gamma_b} = 0$$

is given by the block-matrix acting on the vector $(\Psi_a^u, \Psi_0^u, P_b\Psi_b, \Psi_0^d, \Psi_a^d)$, with 2D components

$$\Psi_a^u \equiv (\Psi_{a1}^u, \Psi_{a2}^u), \quad \Psi_0^u \equiv (\Psi_{01}^u, \Psi_{02}^u),$$

$$\Psi_a^d \equiv (\Psi_{a1}^d, \Psi_{a2}^d), \quad \Psi_0^d \equiv (\Psi_{01}^d, \Psi_{02}^d)$$

and 1D component $P_b\Psi_b$.

$$\mathcal{DN}_{2D} = \begin{pmatrix} \mathcal{DN}_{aa}^u & \mathcal{DN}_{a0}^u & \mathcal{DN}_{ab}^u & 0 & 0 \\ \mathcal{DN}_{0a}^u & \mathcal{DN}_{00}^u & \mathcal{DN}_{0b}^u & 0 & 0 \\ \mathcal{DN}_{ba}^u & \mathcal{DN}_{b0}^u & [\mathcal{DN}_{bb}^u + \mathcal{DN}_{bb}^d] & \mathcal{DN}_{b0}^d & \mathcal{DN}_{ba}^u \\ 0 & 0 & \mathcal{DN}_{0b}^d & \mathcal{DN}_{00}^d & \mathcal{DN}_{0a}^d \\ 0 & 0 & \mathcal{DN}_{ab}^d & \mathcal{DN}_{a0}^d & \mathcal{DN}_{aa}^d \end{pmatrix}. \quad (20)$$

Due to the partial zero condition on the walls and the lids with selected contact subspaces $N_1^u, N_2^u, N_1^d, N_2^d, N_b$ of the open channels, the components of the boundary vectors are selected from these subspaces and the matrix elements are framed by projections onto $N_1^u, N_2^u, N_1^d, N_2^d, N_b$. We omit the projections in the formula (20) for the DN-map. The quasi-periodic boundary conditions are represented, with the diagonal matrices $\mu_u = [\mu_1^u, \mu_2^u]$ and $\mu_d = [\mu_1^d, \mu_2^d]$ on the boundary vectors, as

$$\mathcal{DN}_{2D} \begin{pmatrix} \Psi_a^u \\ \mu_u^{-1} \Psi_a^u \\ \Psi_b \\ \mu_d^{-1} \Psi_a^d \\ \Psi_a^d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial V_a^u}{\partial n} \\ -\mu_u^{-1} \frac{\partial \Psi_a^u}{\partial n} \\ -\beta \Psi_b \\ -\mu_d^{-1} \frac{\partial \Psi_a^d}{\partial n} \\ \frac{\partial \Psi_a^d}{\partial n} \end{pmatrix} \quad (21)$$

The role of variables in these equations are played by the vectors $\Psi_a^u = (\Psi_{a1}^u, \Psi_{a2}^u) \in N_1^u \oplus N_2^u$, $\Psi_a^d = (\Psi_{a1}^d, \Psi_{a2}^d) \in N_1^d \oplus N_2^d$, $\frac{\partial \Psi_a^u}{\partial n} = (\frac{\partial \Psi_{a1}^u}{\partial n}, \frac{\partial \Psi_{a2}^u}{\partial n}) \in N_1^u \oplus N_2^u$, $\frac{\partial \Psi_a^d}{\partial n} = (\frac{\partial \Psi_{a1}^d}{\partial n}, \frac{\partial \Psi_{a2}^d}{\partial n}) \in N_1^d \oplus N_2^d$ and the vector $\Psi_b \in N_b$.

The vectors $\frac{\partial V_a^u}{\partial n}, \frac{\partial V_a^d}{\partial n}$ enter only into the right side of the last equation and can be easily eliminated, resulting in a homogeneous finite-dimensional linear system, which has a non-trivial solution under the determinant condition:

$$\det \begin{pmatrix} D_{11} & D_{12} & 0 \\ D_{21} & D_{22} & D_{23} \\ 0 & D_{32} & D_{33} \end{pmatrix} = 0 \quad (22)$$

, where

$$\begin{aligned}
D_{11} &= \mathcal{DN}_{aa}^u \mu_u + \mathcal{DN}_{a0}^u + \mu_u \mathcal{DN}_{0a}^u + \mu_u \mathcal{DN}_{00}^u, \\
D_{12} &= \mathcal{DN}_{ab}^u + \mu_d \mathcal{DN}_{0b}^u, \\
D_{21} &= \mathcal{DN}_{ba}^u \mu_u + \mathcal{DN}_{b0}^u, \\
D_{22} &= \mathcal{DN}_{bb}^u + \mathcal{DN}_{bb}^d + \beta I, \\
D_{23} &= \mathcal{DN}_{b0}^d + \mathcal{DN}_{ba}^d \mu_d, \\
D_{32} &= \mathcal{DN}_{ab}^d + \mu_d \mathcal{DN}_{0b}^d, \\
D_{33} &= \mathcal{DN}_{aa}^d \mu_d + \mathcal{DN}_{a0}^d + \mu_d \mathcal{DN}_{0a}^d + \mu_d \mathcal{DN}_{00}^d.
\end{aligned}$$

The determinant condition of existence of the nontrivial solution for large β takes the form:

$$\begin{aligned}
&\det[\mathcal{DN}_{aa}^u \mu_u + \mathcal{DN}_{a0}^u + m u_u \mathcal{DN}_{0a}^u + \mu_u \mathcal{DN}_{00}^u] \times \\
&\times \det[\mathcal{DN}_{aa}^d \mu_d + \mathcal{DN}_{a0}^d + m u_d \mathcal{DN}_{0a}^d + \mu_d \mathcal{DN}_{00}^d] = O\left(\frac{1}{\det[\mathcal{DN}_{bb}^u + \mathcal{DN}_{bb}^d + \beta I]}\right), \quad (23)
\end{aligned}$$

gives a dispersion equation for the quasi-2D periodic sandwich for large β , which is represented as a blow-up of the crossing of 2D terms of the upper and lower planes of the sandwich :

$$\begin{aligned}
&\det[\mathcal{DN}_{aa}^u \mu_u + \mathcal{DN}_{a0}^u + \mu_u \mathcal{DN}_{0a}^u + \mu_u \mathcal{DN}_{00}^u] \times \\
&\times \det[\mathcal{DN}_{aa}^d \mu_d + \mathcal{DN}_{a0}^d + \mu_d \mathcal{DN}_{0a}^d + \mu_d \mathcal{DN}_{00}^d] = 0. \quad (24)
\end{aligned}$$

Further simplification can be obtained via substitution of the matrix elements of \mathcal{DN}_{2D} by the corresponding rational approximations near the resonance eigenvalues $\lambda_1^u, \lambda_1^d \dots$ of the partial Dirichlet problem, similar to (16, 17) in previous section. If there is only one simple resonance eigenvalue λ_1^u, λ_1^d of the Schrödinger operator on each upper and low periods, then for the matrix elements of the upper and lower periods we have

$$\mathcal{DN}_{\alpha, \alpha'}^{u,d} \approx \frac{Q_{\alpha, \alpha'}^{u,d}}{\lambda - \lambda_1^{u,d}} + B_{\alpha, \alpha'}^{u,d},$$

which gives, due to finite dimension of the components, a rational equation for the dispersion function

$$\begin{aligned}
&\det[Q_{aa}^u \mu_u + Q_{a0}^u + \mu_u Q_{0a}^u + \mu_u Q_{00}^u + (\lambda - \lambda_1^u)(B_{aa}^u \mu_u + B_{a0}^u + \mu_u B_{0a}^u + \mu_u B_{00}^u)] \times \\
&\det[Q_{aa}^d \mu_d + Q_{a0}^d + \mu_d Q_{0a}^d + \mu_d Q_{00}^d + (\lambda - \lambda_1^d)(B_{aa}^d \mu_d + B_{a0}^d + \mu_d B_{0a}^d + \mu_d B_{00}^d)] = O(\beta^{-1}),
\end{aligned}$$

corresponding to the blowup of the intersection L of the dispersion surfaces of the upper and the lower components of the period. On a small neighborhood of a given point $(\lambda_l, \vec{p}_l \in L)$ of the intersection the blowup looks as a gutter oriented in the tangent direction of L , with curvature of the cross-section proportional to β , see Fig. 8(2). Thus the 2D Landau-Zener effect in the case of a sandwich defines a gutter-like dispersion surface, with a small effective mass in the direction orthogonal to the direction of the intersection L .

The practical receipt of construction of the dispersion surface for a two-storied quasi-2D lattice consists of several steps. Assuming that the two-storied period Ω is connected with neighboring ones by covalent bonds, we select the contact spaces $N_\Gamma \equiv N$ in a special way to reflect the structure of the covalent bonds on the boundary Γ of the period, and apply the partial zero boundary conditions on the orthogonal complements N^\perp of N at the boundary of the periods. Select the basis in N_Γ and construct the partial DN and ND -maps in N for the Schrödinger operator on the period for a temperature interval of the spectral parameter close to the

Fermi level. Due to uniqueness theorem of the Cauchy problem for the Schrödinger equation, the difficulties in construction of the partial DN-map near the eigenvalues of the Dirichlet problem can be avoided via construction of the corresponding ND- map and using the connection between them $\mathcal{DN}\mathcal{N}\mathcal{D} = I_N$. A one-pole (or, more generally, multi-pole) rational approximation of the DN-map on the energy interval near the Fermi level, taking into account the polar terms at the resonance eigenvalues on the interval and a regular approximation for the contribution from the complementary spectrum. This permits to find the finite-dimensional determinant condition of existence of nontrivial real quasimomenta and the corresponding “sandwich” Bloch functions obtained as a hybridization of the Bloch functions of the upper-lower layers of the sandwich.

5. Dispersion equation for a sandwich with a resonance barrier

More interesting physical picture arises when the barrier possess resonance properties, taken into account by the energy-dependence of the coefficient β , see [30]. The resonance properties may be caused by the size quantization on the space-charge region near the surface of the emitter, see for instance [29]. In the previous section we modeled a straight rectangular barrier by a δ barrier at the mutual boundary Γ_b of the upper and lower parts $\Omega^{u,d}$ of the two-storied period: $[\frac{\partial u}{\partial n}] + \beta u \Big|_{\Gamma_b} = 0$. In [7] the barrier has resonance properties defined by the sub-bands of 2D holes. Such a barrier can be modeled by the energy-dependent parameter β . This parameter arises in the course of the construction of a zero-range model of the resonance barrier. In this section we follow [21] when introducing the operator extension procedure for the finite positive matrix A - the inner Hamiltonian of the barrier

$$A = \sum_r \alpha_r^2 P_r : E \rightarrow E, \dim E = n < \infty.$$

Here $\alpha_r^2 > 0$ - the eigenvalues of the inner Hamiltonian of the barrier and $P_r = \nu_r \rangle \langle \nu_r$ are the corresponding orthogonal spectral projections. We will establish, as a result of our analysis, a duality between the eigenvalues and the dimension quantization levels, similar to the duality between the eigenvalues of the Dirichlet and Neumann problems on an interval. Restriction of the matrix A is equivalent to selection of the deficiency subspace for a given value of the spectral parameter. We choose the deficiency subspace \mathcal{N}_i as a generating subspace of

$$A : \bigvee_{k>0} A^k \mathcal{N}_i = E_A$$

such that

$$\frac{A + iI}{A - iI} \mathcal{N}_i \cap N_i = 0, \quad \dim \mathcal{N}_i = d.$$

Set

$$D_0^A = (A - iI)^{-1} (E_A \ominus \mathcal{N}_i)$$

and define the restriction of the inner Hamiltonian as $A \rightarrow A_0 = A|_{D_0^A}$. Then $N_i \subset E_A$ plays the role of the deficiency subspace at the spectral point i , $\dim \mathcal{N}_i = d$, $2d \leq \dim E_A$, and the dual deficiency subspace is $\mathcal{N}_{-i} = \frac{A+iI}{A-iI} \mathcal{N}_i$. The domain of the restricted operator A_0 is not dense in E_A , because A is bounded. Nevertheless, since the deficiency subspaces $\mathcal{N}_{\pm i}$ do not overlap, the extension procedure for the orthogonal sum $l_0 \oplus A_0$ can be developed, as in, for instance, [21]. In this case the “formal adjoint” operator for A_0 is defined on the defect $\mathcal{N}_i + \mathcal{N}_{-i} := \mathcal{N}$ by the von Neumann formula : $A_0^+ e \pm i e = 0$ for $e \in \mathcal{N}_{\pm i}$. Then the extension is constructed via restriction of the formal adjoint onto a certain plane in the defect where the boundary form vanishes (a

“Lagrangian plane”). According to the classical von Neumann construction all Lagrangian planes are parametrized by isometries $V : \mathcal{N}_i \rightarrow \mathcal{N}_i$ in the form

$$\mathcal{T}_V = (I - V) \mathcal{N}_i.$$

It follows from [21] that, once the extension is constructed on the Lagrangian plane, the whole construction of the extended operator can be finalized as a direct sum of the closure of the restricted operator and the extended operator on the Lagrangian plane.

Notice that the operator extension procedure may be developed without the non-overlapping condition also, see [17]. In particular, in the case $\dim E_A = 1$, which is not formally covered by the above procedure, was analyzed in [25] independently of [17]. The relevant formulas for the scattering matrix and scattered waves remain true and may be verified by direct calculation.

Choose an orthonormal basis in \mathcal{N}_i , say $\{f_s\}$, $s = 1, 2, \dots, d$, as a set of deficiency vectors of the restricted operator A_0 . Then the vectors $\hat{f}_s = \frac{A+iI}{A-iI} f_s$ form an orthonormal basis in the dual deficiency subspace \mathcal{N}_{-i} . Under the non-overlapping condition one can use the formal adjoint operator A_0^+ defined on the defect \mathcal{N} :

$$u = \sum_{s=1}^d [x_s f_s + \hat{x}_s \hat{f}_s] \in \mathcal{N}, \quad (25)$$

by the von Neumann formula, see [1],

$$A_0^+ u = \sum_{s=1}^d [-i x_s f_s + i \hat{x}_s \hat{f}_s]. \quad (26)$$

In order to use the symplectic version of the operator-extension techniques, we need to introduce in the defect a new basis $w_{s,\pm}$, on which the formal adjoint A_0^+ is correctly defined due to the non-overlapping condition above:

$$\begin{aligned} w_{s,+} &= \frac{f_s + \hat{f}_s}{2} = \frac{A}{A-iI} f_s \\ w_{s,-} &= \frac{f_s - \hat{f}_s}{2i} = -\frac{I}{A-iI} f_s, \end{aligned}$$

hence

$$A_0^+ w_{s,+} = w_{s,-} \quad A_0^+ w_{s,-} = -w_{s,+}$$

It is convenient to represent elements $u \in \mathcal{N}$ via this new basis as

$$u = \sum_{s=1}^d [\xi_{+,s} w_{s,+} + \xi_{-,s} w_{s,-}]. \quad (27)$$

Then, using the notation $\sum_{s=1}^d \xi_{s,\pm} f_s := \vec{\xi}_{\pm}$ we re-write the above von Neumann formula as

$$u = \frac{A}{A-iI} \vec{\xi}_+^u - \frac{1}{A-iI} \vec{\xi}_-^u, \quad A_0^+ u = -\frac{1}{A-iI} \vec{\xi}_+^u - \frac{A}{A-iI} \vec{\xi}_-^u \quad (28)$$

The following formula for “integration by parts” for abstract operators was proved in [21].

Lemma 5.1. *Consider the elements u, v from the domain of the (formal) adjoint operator A_0^+ :*

$$u = \frac{A}{A-iI} \vec{\xi}_+^u - \frac{1}{A-iI} \vec{\xi}_-^u, \quad v = \frac{A}{A-iI} \vec{\xi}_+^v - \frac{1}{A-iI} \vec{\xi}_-^v$$

with coordinates $\vec{\xi}_{\pm}^u, \vec{\xi}_{\pm}^v$:

$$\vec{\xi}_{\pm}^u = \sum_{s=1}^d \xi_{s,\pm}^u f_{s,i} \in N_i, \quad \vec{\xi}_{\pm}^v = \sum_{s=1}^d \xi_{s,\pm}^v f_s \in N_i.$$

Then, the boundary form of the formal adjoint operator is equal to

$$\mathcal{J}_A(u, v) = \langle A_0^+ u, v \rangle - \langle u, A_0^+ v \rangle = \langle \vec{\xi}_+^u, \vec{\xi}_-^v \rangle_N - \langle \vec{\xi}_-^u, \vec{\xi}_+^v \rangle_N. \quad (29)$$

One can see that the coordinates $\vec{\xi}_{\pm}^u, \vec{\xi}_{\pm}^v$ of the elements u, v play the role of the boundary values similar to $\{U'(0), U(0), V'(0), V(0)\}$ for the Schrödinger equation $-U'' + VU = \lambda U$ on $(0, a)$. We call these *symplectic coordinates* for the elements u, v . The next statement, proved in [21], is the main detail of the fundamental Krein formula [1], for generalized resolvents of symmetric operators. In our situation it is used in the course of the calculation of the scattering matrix.

Lemma 5.2. *The vector-valued function of the spectral parameter*

$$u(\lambda) = \frac{A + iI}{A - \lambda I} \vec{\xi}_+^u := u_0 + \frac{A}{A - iI} \vec{\xi}_+^u - \frac{1}{A - iI} \vec{\xi}_-^u, \quad (30)$$

satisfies the adjoint equation $[A_0^+ - \lambda I]u = 0$, and the symplectic coordinates $\vec{\xi}_{\pm}^u \in \mathcal{N}_i$ of it are connected by the formula

$$\vec{\xi}_+^u = P_{N_i} \frac{I + \lambda A}{A - \lambda I} \vec{\xi}_-^u \quad (31)$$

The matrix-function

$$P_{N_i} \frac{I + \lambda A}{A - \lambda I} P_{N_i} := \mathcal{M} : \mathcal{N}_i \rightarrow \mathcal{N}_i$$

has a positive imaginary part in the upper half-plane $\Im m \lambda > 0$ and serves an abstract analog of the celebrated Weyl-Titchmarsh function, see [1, 15]. It exists almost everywhere on the real axis λ with a finite number of simple poles at the eigenvalues α_r^2 of A . The boundary values ξ_{\pm}^u of the solution u of the adjoint equation $[A^+ - \lambda I]u = 0$ are connected via the abstract Weyl-Titchmarsh function as

$$\xi_- = \mathcal{M} \xi_+. \quad (32)$$

We obtain the zero-range model the resonance barrier Γ_b imposing of elements $\Psi = (\psi^d, \psi^b, \psi^u)$, $\psi^d \in L_2(\Omega^d), \psi^b \in E, \psi^u \in L_2(\Omega^u)$ boundary conditions at the barrier Γ_b . In what follows we restrict our analysis to the case of a one-dimensional defect, $d = 1$, that is scalar ξ_{\pm}, \mathcal{M} and the one-dimensional jump of the normal derivative $P_b \frac{\partial \Psi}{\partial n}$ at the barrier. Then, following [29] a selfadjoint boundary condition at the barrier can be selected based on a choice of 3D complex vector $\vec{\beta} = (1, \beta, 1)$ defining the Datta-Das Sarma boundary condition at the barrier imposed on the partial boundary values $\Psi|_{\Gamma_b} = (\psi^d, \xi_+, \psi^u)$, $\Psi'|_{\Gamma_b} = \left(P_b \frac{\partial \psi^d}{\partial n}, \xi_+, P_b \frac{\partial \psi^u}{\partial n} \right)$, with the normal directed outside the barrier:

$$\Psi'|_{\Gamma_b} \perp \vec{\beta}, \quad \Psi|_{\Gamma_b} \parallel \vec{\beta}.$$

For the selected above vector parameter $\vec{\beta} = (1, \beta, 1)$ this boundary condition looks like the condition at the δ -barrier:

$$P_b \frac{\partial \psi^d}{\partial n} \Big|_{\Gamma_b^d} + P_b \frac{\partial \psi^u}{\partial n} \Big|_{\Gamma_b^u} + \bar{\beta} \xi_+ = 0, \quad P_b \psi^d = P_b \psi^u = \beta^{-1} \xi_- \equiv \Psi_b. \quad (33)$$

Eliminating the inner components ξ_{\pm} of the boundary values based on (32), we obtain the boundary condition imposed on the partial jump $P_b \frac{\partial \psi^d}{\partial n} \Big|_{\Gamma_b^d} + P_b \frac{\partial \psi^u}{\partial n} \Big|_{\Gamma_b^u} \equiv \left[\frac{\partial \Psi}{\partial n} \right]_b$ of the wave-function:

$$\left[P_b \frac{\partial \Psi}{\partial n} \right]_b + |\beta|^2 \mathcal{M}^{-1} P_b \Psi_b = 0. \quad (34)$$

The dispersion equation for the sandwich with a resonance barrier is obtained from 21 via replacement of β^2 by $|\beta|^2 \mathcal{M}^{-1}$. In fact at each zero of \mathcal{M} the corresponding dispersion surface endures Landau-Zener effect, because the crossing of 2D terms is, in fact, transformed into quasi-crossing. Hence the zeros of \mathcal{M} play the role of resonance levels of the dimensional quantization. This defines the duality between the eigenvalues of the inner Hamiltonian of the barrier and the poles of \mathcal{M} which appear as resonance peaks corresponding to the sub-bands of 2D holes, similar to the duality revealed in our paper [29]. One can see that the resonance peaks at the sub-bands are dual to the eigenvalues of the inner Hamiltonian, which can be interpreted as the dimensional quantization levels, similarly to [29].

Suggested approach to calculation of the dispersion function and the Bloch waves is naturally extended to multidimensional lattices and sandwiches and forms a convenient analytical base for relevant computing. We postpone description of the corresponding material to the oncoming publications.

6. Superconductivity in a quasi-2D periodic sandwich: Landau- Zener gap enhancement

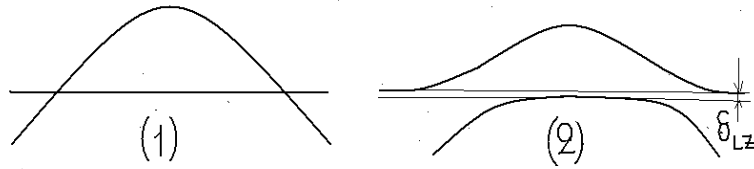


Fig. 9. Additional spectral gap arising from a simple and flat band overlapping: transformation of the band's crossing (1) into the quasi-crossing (2) (1D schematic figure)

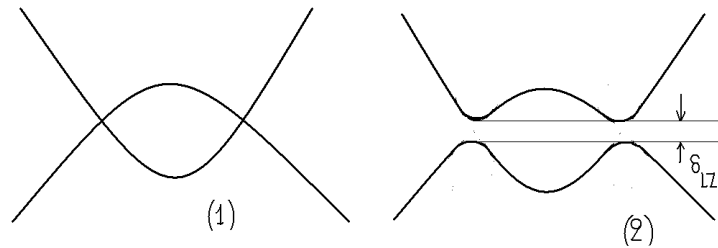


Fig. 10. Additional spectral gaps arising from the 2D Landau-Zener phenomenon: transformation of the crossing of the dispersion surfaces into the quasi-crossing (2) (the 2D section of the 3D gutter)

In [7] high-temperature superconductivity was observed in a Si-B sandwich. This is interpreted as a Josephson effect arising due to the interaction between the Bloch electrons on the upper and lower plates of the sandwich, defined by the boundary condition on the barrier Γ_b , see Fig. 10. The transformation of the crossing of the corresponding 2D terms into quasi-crossings — the Landau-Zener phenomenon — is similar to that discussed in [2] with the standard and flat bands overlapping, see Fig. 9. It was shown in [2] that in the one-dimensional model the spectral gap δ_{LZ} , arising due to the Landau-Zener phenomenon (Landau-Zener gap) causes the enhancement of the BCS gap and hence better high-temperature stability of the superconductivity phenomenon. In [7] additional electrodes were used to manipulate the positions of the sub-bands in the barrier, and the stable high-temperature conductivity effect was observed. The presence of the flat band is not essential for the theoretical interpretation of the superconductivity observed: the Landau-Zener gap arose due to the sandwich structure with a resonance barrier. But in the case [2] when the flat band is involved, the density of states $[\nabla_p \lambda]^{-1}$ is automatically large, while in the case of the SiB sandwich we do not have yet any theoretical estimation of the density of space to explain the HTSC effect. We hope to develop computing, based on above analysis, to obtain their estimation in further publications.

7. Acknowledgement

Authors are grateful to the Marsden Fund of the Royal Society of New Zealand for a generous support which allowed the personal contacts of our team over the mountains and across the oceans.

One of authors (B.P.) is grateful to the Russian Academy for the support from the grant RFBR 03-01-00090.

References

- [1] Akhiezer N.I., Glazman I.M. Theory of Linear Operators in Hilbert Space, Vol. 1. — New York: Frederick Ungar Publ., 1966. Translated from Russian by M. Nestel.
- [2] Adamyan V., Pavlov B. High-Temperature superconductivity as a result of a simple and flat bands overlapping // Solid State Physics. — 1992. — V. 34, No. 2. — P. 626–635.
- [3] Albeverio S., Gesztesy F., Hoegh-Krohn R., Holden H. Solvable models in quantum mechanics. — New York: Springer-Verlag, 1988.
- [4] Albeverio S., Kurasov P. Singular Perturbations of Differential Operators. — London Math. Society Lecture Note Series, Vol. 271. — Cambridge University Press, 2000.
- [5] Bagraev N., Buravlev A., Kljachkin L., Maljarenko A., Gehlhoff W., Romanov Yu., Rykov S. Local tunnel spectroscopy of silicon structures // Physics and Techniques of Semiconductors. — 2005. — V. 39, No. 6. — P. 716–727.
- [6] Bagraev N., Mikhailova A., Pavlov B., Prokhorov L., Yafyasov A. Parameter regime of a resonance quantum switch // Phys. Rev. B. — 2005. — V. 71. — 165308, pp. 1–16.
- [7] Bagraev N., Klyachkin L., Kudryavtsev A., Malyarenko A., Romanov V. Superconductor properties for silicon nanostructures // In: Superconductivity theory and application, Ed. by A. Luiz, SCIVO, Chapt. 4, 2010. — P. 69–92.
- [8] Bagraev N., Martin G., Pavlov B. Landau-Zener Phenomenon on a double of weakly interacting quasi-2d lattices // In: Progress in Computational Physics: Wave propagation in periodic Media, Bentham Science publications (PiCP), 2010.01.06. — P. 61–64.
- [9] Berezin F.A., Faddeev L.D. A remark on Schrödinger equation with a singular potential // Dokl. AN SSSR. — 1961. — V. 137. — P. 1011–1014.
- [10] Brüning J., Martin G., Pavlov B. Calculation of the Kirchhoff coefficients for the Helmholtz resonator // Russ. J. Math. Phys. — 2009. — V. 16, No. 2. — P. 188–207.
- [11] Callaway J. Energy band theory. — New York–London: Academic Press, 1964.
- [12] Demkov Y.N., Kurasov P.B., Ostrovski V.N. Double-periodical in time and energy solvable system with two interacting set of states // J. Physics A, Math. General, **28** (1995) p.434.

- [13] Firsova N., Kitorov S. Electron's scattering in the monolayer graphen with the short range impurities // *Phys. Letters A*. — 2010. — V. 174. — P. 1270–1273.
- [14] Fox C., Oleinik V., Pavlov B. A Dirichlet-to-Neumann approach to resonance gaps and bands of periodic networks // *Proceedings of the Conference: Operator Theory and mathematical Physics, Birmingham, Alabama, 2005*. In: *Contemporary Mathematics*. — 2006. — V. 412. — P. 151–169.
- [15] Gorbachuk V.I., Gorbachuk M.L. Boundary value problems for operator differential equations // *Translated and revised from the Russian, 1984. Mathematics and its Applications (Soviet Series), Vol. 48*. Dordrecht: Kluwer Academic Publishers Group, 1991.
- [16] Kittel C. *Quantum Theory of Solids*, Chapter 9. — New York—London: John Wiley & sons, inc., 1962.
- [17] Krasnosel'skij M.A. On selfadjoint extensions of Hermitian Operators // *Ukr. Mat. Zh.* — 1949. — V. 1. — P. 21–38.
- [18] Mennicken R., Shkalikov A. Spectral decomposition of symmetric operator-matrices // *Mathematische Nachrichten*. — 1996. — V. 179. — P. 259–273.
- [19] Madelung O. *Festkörpertheory*. Bd. I, II, Ch. IV. — Berlin, Heidelberg, New York: Springer Verlag, 1972.
- [20] Novoselov K., Geim A., Morozov S., Jiang D., Katsnelson I., Grigorieva I., Dubonos S. Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphen // *Nature*. — 2005. — V. 438. — P. 197–200.
- [21] Pavlov B. The theory of extensions and explicitly solvable models // *Uspekhi. Mat. Nauk.* — 1987. — V. 42, No. 6 (258). — P. 99–131.
- [22] Pavlov B. The spectral aspect of superconductivity- the pairing of electrons // *Vestnik Leningr. Uni. Math. Math.* — 1987. — V. 3. — P. 43–49.
- [23] Pavlov B. S-Matrix and Dirichlet-to-Neumann Operators // In: *Encyclopedia of Scattering*, ed. R. Pike, P. Sabatier, Academic Press, Harcourt Science and Tech. Company, 2001. — P. 1678–1688.
- [24] Pospescu-Pampu P. Resolution of curves and surfaces // *Lecture notes in Summer School of Resolution of Singularities*, June 2006, Trieste, Italy.
- [25] Shirokov J. Strongly singular potentials in three-dimensional Quantum Mechanics // *Teor. Mat. Fiz.* **42** 1 (1980) 45–49
- [26] Sylvester J., Uhlmann G. The Dirichlet to Neumann map and applications // *Proceedings of the Conference "Inverse problems in partial differential equations"*, Arcata, 1989. In: SIAM, Philadelphia. — 1990. — V. 101.
- [27] Titchmarsh E.C. *Eigenfunction expansion associated with second -order differential equation*, Part II, Chapter XXI. — Oxford at the clarendon press, 1958.
- [28] Yafyasov A., Bogevoľ'nov V., Zelenin C. Manifestation of dimensional quantization of space-charge region of Carbon on differential capacitance and surface conductivity measurements // *Russian Academy Doklady, Electrochemie*. — 1989. — V. 25. — P. 536–538.
- [29] Yafyasov A., Bogevoľ'nov V., Fursey G., Pavlov B., Polyakov M., Ibragimov A. Low-threshold emission from carbon nano-structures // *Ultramicroscopy*. — 2011. — V. 111. — P. 409–414.
- [30] Yafyasov A., Martin G., Pavlov B. Resonance one-body scattering on a junction // *Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics*. — 2010. — V. 1, No. 1. — P. 108–147.
- [31] Zener C. Non-adiabatic crossing of energy levels. — *Proc. Royal Soc. A*. — 1932. — V. 137. — P. 696.
- [32] Ziman J., Mott N., Hirsch P. *The Physics of Metals*. — London, Cambridge, 1969.
- [33] Ziman J. *Electrons and phonons: the theory of transport phenomena in solids*. — Oxford University Press, 1960.

UDC 517.958

BIFURCATION CONDITION FOR OPTIMAL SETS OF THE AVERAGE DISTANCE FUNCTIONAL

X. Y. Lu¹

¹Scuola Normale Superiore, Pisa, Italy
x.lu@sns.it

PACS 01.30.Cc

Consider the quasi-static irreversible evolution of a connected network, which minimizes the average distance functional. We look for conditions forcing a bifurcation, thus changing the topology. We would give here a sufficient conditions. Then we will give an explicit example of sets satisfying the bifurcation condition, and analyze this special case. Proofs given here will be somewhat sketchy, and this work is based on [9], in which more details can be found.

Keywords: optimal transport, Euler scheme, minimizing movements, average distance.

1. Introduction

Historically, the so-called “minimizing movement theory” was introduced by De Giorgi in [8] to study evolution processes with some kind of variational structure. In this paper we will consider the general quasi-static, rate independent, evolution for connected networks related to an average distance functional, and our main goal is to analyze whether optimal sets exhibit a bifurcation.

Given a domain Ω , $S \subset \Omega$ with $\dim_{\mathcal{H}} S = 1$, consider first these problems: given the system

$$\begin{cases} -\Delta_p u = 1 & \text{in } \Omega \setminus S \\ u = 0 & \text{on } S \end{cases},$$

we aim to minimize (among all S satisfying some length constraints) the associated energy, namely

$$F_p(S) := \left(1 - \frac{1}{p}\right) \int_{\Omega} \|\nabla u\|^p dx.$$

If we let $p \rightarrow \infty$, then the energy F_p Γ -converges to the so called average distance, i.e.

$$F(S) := \int_{\Omega} \text{dist}(x, S) dx.$$

This will be our main functional in the paper. As this energy operates on Hausdorff one-dimensional, connected, compact sets with limited Hausdorff length, we denote

$$A_l := \left\{ \mathcal{X} \subseteq \Omega : \mathcal{X} \text{ compact, connected and } \mathcal{H}^1(\mathcal{X}) \leq l \right\}, \quad A := \bigcup_{j \geq 0} A_j. \quad (1.1)$$

Both A_l and A depend on the domain Ω , but to simplify notations, when there will be no risk of confusion, we will omit this dependence.

The average distance functional has a sort of monotonicity:

Proposition 1.1. *Given a domain Ω , for any $S_1, S_2 \in A$, with $S_1 \subseteq S_2$, we have $F(S_1) \geq F(S_2)$.*

Proof. The proof is straightforward, by writing the thesis explicitly (in the integral form):

$$F(S_1) = \int_{\Omega} \text{dist}(x, S_1) dx, \quad F(S_2) = \int_{\Omega} \text{dist}(x, S_2) dx$$

and $S_1 \subseteq S_2$ implies $\text{dist}(x, S_1) \geq \text{dist}(x, S_2)$ thus integrating on Ω we have

$$\int_{\Omega} \text{dist}(x, S_1) dx \geq \int_{\Omega} \text{dist}(x, S_2) dx.$$

□

A consequence of this is that prescribing the maximum length is the same as prescribing the length: this helps when we have to pass to the limit, as for any fixed $l > 0$, A_l is sequentially compact, but $A_l \setminus \bigcup_{0 \leq j < l} A_j$ is not.

This paper will be structured as follows:

- in Section 2 we will present preliminaries, in particular results concerning regularity of optimal sets;
- in Section 3 we will analyze conditions sufficient to force a bifurcation;
- in Section 4 we will exhibit an explicit example, and use results from Section 3 in this particular case.

This paper is an extended version of the talk given during the conference “Operator theory and boundary value problems” in Orsay in May 2011, and some proofs are somewhat synthetic; we refer to [9] for more details.

Notations

In order to simplify notations, unless explicitly specified, if a notation is used in two different Definitions/ Propositions/ Lemma/ Theorems, there is no connection between them.

The only notable exceptions are:

- A_l (with $l \geq 0$), and A : if there is a given domain Ω , they always denote the sets defined after (1.1),
- F which always stands for the average distance functional
- $V(\cdot)$ which stands for the Voronoi cell of the point.

We will work only with compact connected domain in \mathbb{R}^2 with positive Lebesgue measure, and “domain” will always refer to a similar domain.

2. Geometry of optimal sets in the static case

In this section we present some results about the geometry of optimal sets in the static case, as they will be useful later in discussing the evolution case. All these results can be found on [4], [5] and [9].

The following are results concerning prohibited subsets of minimizers of the average distance functional:

Proposition 2.1. *Let be Ω a given domain, $l > 0$ a fixed quantity, and $\Sigma_{opt} \in \text{argmin}_{A_l} F$. Then Σ_{opt} cannot contain*

- (1) a loop (a subset homeomorphic to S^1);
- (2) a cross (a subset homeomorphic to $\{x^2 + y^2 \leq 1 : xy = 0\}$);
- (3) a triple point P with an angle among the three angles here that does not measure $\frac{2}{3}\pi$.

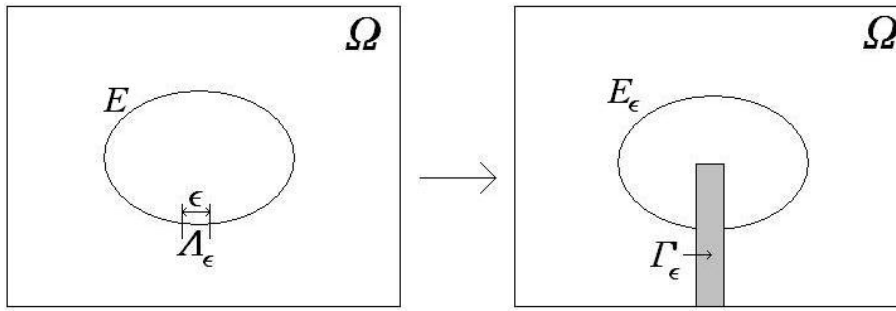


Fig. 1. This is a schematic representation of what happens if we remove the portion Λ_ϵ

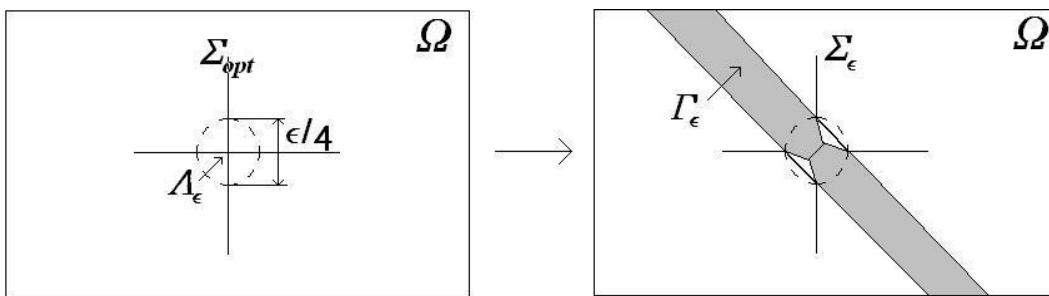


Fig. 2. Σ_ϵ is obtained from Σ_{opt} by replacing the infinitesimal cross Λ_ϵ with a slightly shorter Steiner graph

The proof rely on the “cut and paste” technique, in which we first remove a subset, estimate the variation in energy, and then add it elsewhere. These figures show what happens for cases (1) and (2) (case (3) is similar), and in both cases the loss in energy is comparable with ϵ^3 . The next result shows that the gain in energy by adding similar sets elsewhere, is larger:

Proposition 2.2. *Given a domain Ω , let be $S \subset \Omega$ be a connected set, if we add a segment λ_ϵ to a non endpoint of S (with $\mathcal{H}^1(\lambda_\epsilon) = \epsilon$), then the “gain” $F(S) - F(S_\epsilon)$ is comparable with $\epsilon^{3/2}$, where $S_\epsilon := S \cup \lambda_\epsilon$.*

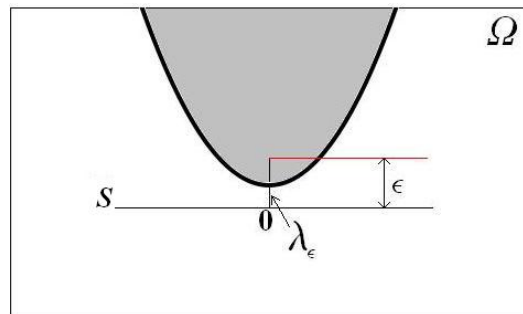


Fig. 3. All the shaded area, whose area is comparable with $\epsilon^{1/2}$, gains something in path

The detailed proof can be found in [9]. Here we limit to present a sketch:
Step 1: scale the configuration (see Fig. 4).

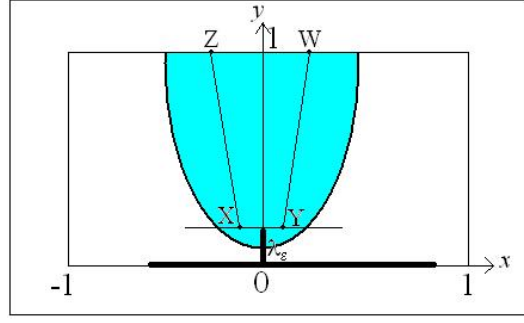


Fig. 4. After scaling, we can do all the computation in this configuration

Step 2: points (x, y) which project on $(0, \varepsilon)$ satisfy

$$|y| \geq \text{dist}((x, y), (0, \varepsilon)) = \sqrt{x^2 + (y - \varepsilon)^2},$$

which corresponds to the parabola, of area $O(\varepsilon^{1/2})$;

Step 3: consider the trapezium, its area is $O(\varepsilon^{1/2})$ while points on it gain $O(\varepsilon)$ in path, thus the total gain for the energy is $O(\varepsilon^{3/2})$.

Minimizing movements

Now we present the minimizing movement problem in our case:

let be Ω a given domain, we work on the space is A , endowed with the Hausdorff distance metric, and our kinetic term is

$$\mathcal{F}(t, \mathcal{X}_1, \mathcal{X}_2) := \begin{cases} F(\mathcal{X}_1) & \text{if } \mathcal{X}_2 \subseteq \mathcal{X}_1 \text{ and } \mathcal{X}_1 \in A_{t+\mathcal{H}^1(\Sigma_0)}, \\ \infty & \text{otherwise} \end{cases},$$

where $\Sigma_0 \in A$ is the initial datum.

So, given a positive time step $\eta > 0$ and an initial datum $S_0 \in A$, our Euler scheme is

$$\begin{cases} w(0) = S_0 \\ w(n+1) \in \text{argmin}_{\mathcal{H}^1(\mathcal{X}) \leq \mathcal{H}^1(S_0) + (n+1)\eta, w(n) \subseteq \mathcal{X}} F(\mathcal{X}) \end{cases}.$$

A minimizing movement can be thought as the limit case for $\eta \downarrow 0$ of Euler schemes:

Definition 2.3. Given $T > 0$, the function $u : [0, T] \rightarrow A$ is a minimizing movement associated with initial datum u_0 and kinetic term \mathcal{F} , and we will write $u \in MM(\mathcal{F}, A, u_0)$ if there exists a sequence $\varepsilon_n \downarrow 0$ for which

$$\forall t \in [0, T] \quad u_{\varepsilon_n}(t) \rightarrow u(t).$$

Existence is guaranteed by [2]: it states that limit functions exist if the following conditions are verified:

- the convergence in $(A_l, d_{\mathcal{H}})$ is sequentially compact;
- the irreversibility condition is compatible with the convergence;
- every nondecreasing function $\psi : \mathbb{R} \rightarrow (A_l, d_{\mathcal{H}})$ is continuous up to countably many points.

The first two conditions are easy to verify.

The third arises from the following argument: consider a generic nondecreasing function $\psi :$

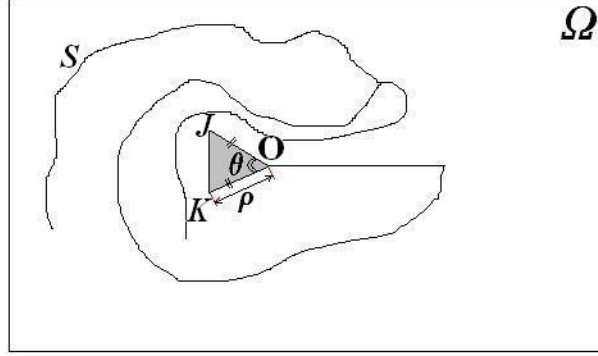


Fig. 5. The presence of the shaded triangle T' makes adding at an endpoint more convenient than at a non endpoint at least when the added portion has sufficient small length

$\mathbb{R} \rightarrow (A_l, d_{\mathcal{H}})$, and suppose that it has discontinuity points $\{x_i\}_{i \in I}$, with $x_i < x_j$ when $i < j$. As ψ is nondecreasing, we can write

$$\psi(x_1) \subset \psi(x_2) \subset \cdots \psi(x_i) \subset \psi(x_{i+1}) \subset \cdots \subset \psi(\sup_{i \in I} x_i),$$

and passing to the \mathcal{H}^1 measures,

$$\mathcal{H}^1(\psi(x_1)) < \mathcal{H}^1(\psi(x_2)) < \cdots \mathcal{H}^1(\psi(x_i)) < \mathcal{H}^1(\psi(x_{i+1})) < \cdots < \mathcal{H}^1(\psi(\sup_{i \in I} x_i)) < \infty,$$

which is possible only if I is at most countable, as being $\{x_i\}_{i \in I}$ discontinuity points, the difference $\mathcal{H}^1(\psi(x_{j+1})) - \mathcal{H}^1(\psi(x_j))$ are positive for any j .

3. Bifurcation condition

In this section we will try to find a condition sufficient to force a branching behavior. Several tools are needed.

Definition 3.1. Given a domain Ω , $S \in A$ a generic element, a non endpoint $P \in S$ is “smooth” if there exists $r > 0$ such that:

- (1) there exists an homeomorphism $f : B(P, r) \cap S \rightarrow (0, 1)$;
- (2) there exists a unique direction θ such that for any sequence $P_n \rightarrow P$ in $B(P, r)$ the directions of the line $L(P_n, P)$ converge to θ .

A subset of S is smooth is all its non endpoints are smooth.

For these points the estimate of Proposition 2.2 applies. The next results compares the gain for F when adding at smooth points with when adding at other points.

Proposition 3.2. Given a domain Ω , let $S \in A$ be a smooth set, and let it have an endpoint O which satisfies:

- (*) there exist $\rho, \theta > 0$ and a triangle $T' \subset V(O)$ with a vertex in O and sides $\rho, \rho, \rho\sqrt{2(1 - 2\cos\theta)}$ (the order is not relevant) that does not intersect S .

Then there exists ε_0 such for any $\varepsilon < \varepsilon_0$ adding a segment λ_ε at O , with $\mathcal{H}^1(\lambda_\varepsilon) = \varepsilon$ in O is more convenient that adding any connected set with same length at any non endpoint.

We present here a sketch of the proof. for more details we refer to [9]:

Step 1: adding a straight segment along the bisector of the angle in O , the gain is positive on at least half of the triangle T' (which has finite area), and it is comparable with $O(\varepsilon)$;

Step 2: from Proposition 2.2 we know that adding sets with length ε to smooth non endpoints the gain is comparable with $O(\varepsilon^{3/2})$, thus the choice in Step 1 is better.

3.1. Bifurcation

We investigate now the situations that may appear during the evolution. Given an initial datum $S_0 \in A$, $\Sigma : [0, T] \rightarrow A$ a minimizing movement function, a time $T_0 \in (0, T]$, we are interested in the following behaviors:

- (1) any point $X \in S_0$ has the same multiplicity as $i_t(X) \in \Sigma(t)$, where $i_t : S_0 \rightarrow \Sigma(t)$ denotes the identical inclusion, except for endpoints which have multiplicity 1 or 2 in $\Sigma(t)$;
- (2) there exists a non endpoint $X_0 \in S_0$, $t_0 > 0$ such that $i_{t_0}(X_0)$ has different multiplicity from X_0 , or some endpoint $X_1 \in S_0$ has $i_{t_0}(X_1) \in \Sigma(t)$ with multiplicity at least 3, with $i_{t_0} : S_0 \rightarrow \Sigma(t_0)$ denoting the identical inclusion.

In order to provide an upper bound to the branching (which falls into case (2), where a point increases its multiplicity) time, we need to establish when choice (2) becomes necessary preferable to choice (1).

Proposition 3.2 shows that under those conditions a branching is not optimal, so to obtain a contradiction, we must let the hypothesis of Proposition 3.2 fail. The only ways to reach a contradiction is admit the existence of non smooth points, or negate the existence of endpoints, or negate condition (*), i.e. all its endpoints do not satisfy (*). The last reads:

“for any endpoint O' , for any $\rho, \theta > 0$, for all triangles with a vertex in O' and sides $\rho, \rho, \rho\sqrt{2 - 4\cos\theta}$ the set $\Sigma(t)$ intersects that triangle”.

Let us try to negate condition (*).

These following tools will be used:

Definition 3.3. Let S be a compact connected set in a given domain Ω , $P \in S$ a point, and a positive value $\mathcal{R} > 0$. The “the inner radial projection” is the function

$$\pi_{P,\mathcal{R}} : B(P, \mathcal{R}) \rightarrow \partial B(P, \mathcal{R}), \quad \pi_{P,\mathcal{R}}(x) := \overline{\partial B(P, \mathcal{R})} \cap Px$$

where Px denotes the halfline starting from P and passing through x .

In other words the inner radial projection maps a point to the the point on the border having its same direction (when putting P as the center).

Now we can define the equivalent of a loop:

Definition 3.4. Given a domain Ω , let be Γ a curve, a subset $\gamma \subseteq \Gamma$ is “general loop” around a point $Q \in \Omega$ if it is a closed connected set satisfying:

- (1) There exists a \mathcal{R}' for which $\gamma \subseteq B(Q, \mathcal{R}')$ and $\pi_{Q,\mathcal{R}'}(\gamma \cap B(Q, \mathcal{R}')) = \partial B(Q, \mathcal{R}')$;
- (2) No connected proper subsets of γ satisfies the first condition.

Graphically a general loop may be thought as a minimal set that “wraps around” a point.

Using the above notations:

Definition 3.5. Given a domain Ω , let be Γ a curve, $P \in \Gamma$ an endpoint, and suppose that there exist a sequence $\{\rho_n\}_{n=0}^{\infty}$ with $\rho_n \downarrow 0$ such that for any n $\pi_{P,\rho_n}(\Gamma \cap B(P, \rho_n)) = \partial B(P, \rho_n)$.

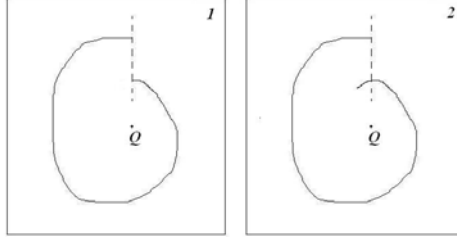


Fig. 6. (1) is what a general loop may look like, while (2) is not a general loop

Then if there exists a partition of Γ in general loops, namely $\Gamma = \bigcup_{n=0}^{\infty} L_n$ in which every L_n is a general loop and $P \notin L_0$ and for every n $\partial B(P, \rho_n)$ contains the farthest point of L_n from P and $L_n \subset \overline{B(P, \rho_n)} \setminus \overline{B(P, \rho_{n+1})}$, then $\{\rho_n\}_{n=0}^{\infty}$ is a “distance sequence” for P .

Not every endpoint has a distance sequence, and even if it had one, this is not unique, as a distance sequence can be arbitrary truncated at its beginning (i.e. if $\{r_n\}_{n \geq k}$ is a distance, then $\{r_n\}_{n \geq h}$ with $h \geq k$ is a distance sequence for the same point).

Theorem 3.6. Given a domain Ω , let be $S_0 \in A$ (A defined just after (1.1)) be the initial datum of e rate-independent evolution $\Sigma : [0, T] \rightarrow A$. Moreover, suppose the evolution does not stop.

Then, a change in topology occurs, i.e. $\Sigma(t)$ is not homeomorphic to $\Sigma(0)$ for any $t > 0$, if the following condition is satisfied:

(**) any endpoint $P' \in S_0$ has a distance sequence $\{\rho_n^{(P')}\}_{n=0}^{\infty}$ and a constant $Wr(P')$ which verifies

$$\limsup_{n \rightarrow \infty} \log_{\rho_n^{(P')}} \rho_{n+1}^{(P')} \leq Wr(P') < 2.$$

We need to prove it first for Euler schemes:

Proposition 3.7. Given a domain Ω , let be $S_0 \in A$ (A defined just after (1.1)) the initial datum, and consider the Euler scheme

$$\begin{cases} w(0) = S_0 \in A \\ w(k-1) \subseteq w(k) \\ w(k) \in \operatorname{argmin}_{\mathcal{H}^1(\mathcal{X})=k\varepsilon + \mathcal{H}^1(S_0)} F(\mathcal{X}) \end{cases}.$$

Then if condition (**) of Theorem 3.6 is verified, there exists ε_0 such that for $\varepsilon < \varepsilon_0$, $w(1)$ presents a bifurcation.

Proof. We assume first that $\Sigma(0) = S_0$ has an unique endpoint P . Let us analyze what happens if we add some set $J_{\varepsilon'}$ (with length $\varepsilon' > 0$ small) at P : we have to estimate the gain for the energy. As $J_{\varepsilon'} \subset B(P, \varepsilon')$, the gain is upper bounded by the quantity

$$\varepsilon' |B(P, \rho_{m(n)-1}^{(P)})|$$

where $\rho_{m(n)-1}$ will be explained in the following.

As the point P satisfies condition (**), there exists a maximum $m(n)$ for which $\rho_{m(n)}^{(P)} \leq \varepsilon' < \rho_{m(n)-1}^{(P)}$ so the total gain can be estimated by $\pi(\rho_{m(n)-2}^{(P)})^2 \varepsilon'$, and as

$$\rho_{m(n)}^{(P)} \leq \varepsilon' < \rho_{m(n)-1}^{(P)}$$

the logarithmic condition in (**) gives

$$\varepsilon'^2 < (\rho_{m(n)-2}^{(P)})^2 \leq (\rho_{m(n)}^{(P)})^{2/Wr(P)^2} \leq \varepsilon'^{2/Wr(P)^2} = o(\varepsilon'^{1/2})$$

and the total gain is an $O(\varepsilon'^{1+2/Wr(P)}) = o(\varepsilon'^{3/2})$.

So, considering the gain obtained in Proposition 2.2, adding $J_{\varepsilon'}$ in this way (when ε' becomes small enough) is not optimal. This argument can be generalized to S_0 having more endpoints (by applying it to all endpoints of S_0), so the proof is complete. \square

Now we can prove the result for the rate-independent case:

Proof. (of Theorem 3.6)

Step 1:

By hypothesis $\Sigma : [0, T] \rightarrow A$ is the minimizing movement with initial datum $\Sigma(0) = S_0$, i.e. there exists a sequence $\{\varepsilon_n\}_{n=0}^{\infty}$ with $\varepsilon_n \downarrow 0$ such that, put

$$\begin{cases} w(0, n) = S_0 \in A \\ w(k-1, n) \subseteq w(k, n) \\ w(k, n) \in \operatorname{argmin}_{\mathcal{H}^1(\mathcal{X})=k\varepsilon_n + \mathcal{H}^1(S_0)} F(\mathcal{X}) \end{cases},$$

$$\Sigma_{\varepsilon_n}(t) := w\left(\left\lfloor \frac{t}{\varepsilon_n} \right\rfloor, n\right),$$

and for any $t \in [0, T]$ $\Sigma(t) = \lim_{n \rightarrow \infty} \Sigma_{\varepsilon_n}(t)$; then by hypothesis $t = 0$ is the time at which condition (**) is satisfied, and let us analyze the topology of $\Sigma(t)$ for $t > 0$.

We assume first that $\Sigma(0) = S_0$ has a unique endpoint P .

Step 2:

Suppose that there exists $\delta' > 0$ such that $\Sigma(t)$ has the same topology for any $t \in [0, \delta')$ (obviously, if this is true for δ' , it holds for any positive $0 < \delta'' < \delta'$ too).

The proof of Proposition 3.7 shows that adding length in P is not optimal for Euler schemes with small enough time step. To pass to the limit, we need uniformity for the estimate, i.e. there is a positive ξ such that adding length in $B(P, \xi)$ is not optimal. This is done by considering that there is always a non point Z such that adding length ε here the gain is at least $B_Z \varepsilon^{3/2}$, with $B_Z > 0$ depending only on the geometry of $\Sigma(t)$ near Z , while adding near P the gain is $o(\varepsilon^{3/2})$ for sufficiently small ε , as P verifies condition (**).

Step 3:

This argument can be generalized to S_0 having more endpoints (by applying it to all endpoints of S_0). As the evolution does not stop, the new part added must be connected to the original set by a connected path, thus a bifurcation arises. \square

The entire proof relies on the fact that evolving too close to P becomes not optimal for the presence of the distance sequence.

4. Examples

In the previous section, we have found a condition (given by Theorem 3.6) sufficient to force a branching behavior, so now we look for an example in which Theorem 3.6 is applicable.

Let the logarithmic spiral S_0^* with proportion 3 (i.e. naming Y_1, Y_2, \dots the points as in Figure 8, $\frac{\mathcal{H}^1(OY_k)}{\mathcal{H}^1(OY_{k+1})} = 3$ for any k) be our initial datum (see Fig. 7).

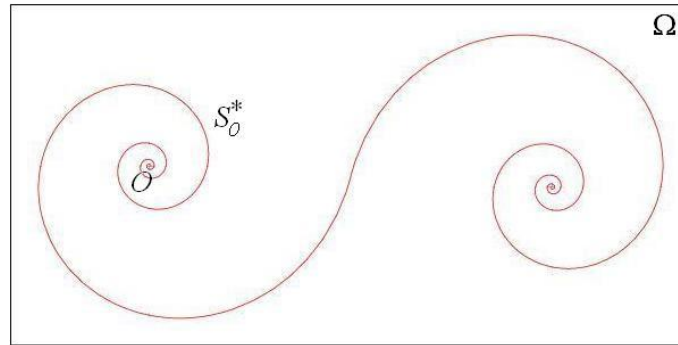


Fig. 7. This will be our datum, and it satisfies the conditions of Theorem 3.6

S_0^* has two endpoints, we do the computations on one of them. We impose the following two coordinate systems (a cartesian one and a polar one) (see Fig. 8).

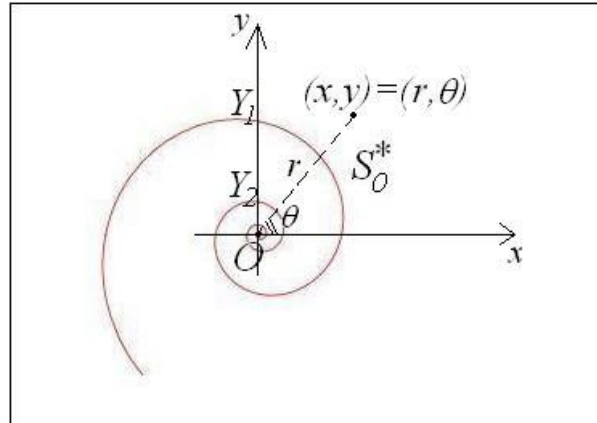


Fig. 8. Some computations are easier on cartesian coordinates, some on polar coordinates

Let us analyze the endpoint O : it verifies condition $(**)$ of Theorem 3.6, as its has a distance sequence $\{\rho_n^{(O)}\}$: if we divide the part around it into L_1, L_2, \dots , with L_k the piece between Y_k and Y_{k+1} , naming $\rho_n^{(O)} := \mathcal{H}^1(OY_n)$, we have

$$\pi_{O, \rho_n^{(O)}}(S_0^* \cap B(O, \rho_n^{(O)})) = \partial B(O, \rho_n^{(O)}) \quad \forall n$$

where $\pi_{\cdot, \cdot}$ denotes the inner radial projection. Moreover $Y_k \in L_k$ for any k , so the sequence $\{\rho_n^{(O)}\}_{n=1}^\infty$ is effectively a distance sequence, and it verifies

$$\log_{\rho_n^{(O)}} \rho_{n+1}^{(O)} \longrightarrow 1.$$

So hypothesis of Theorem 3.6 are all verified, and given any positive time T , any minimizing movement $\Sigma : [0, T] \rightarrow A$ with $\Sigma(0) = S_0^*$ will exhibit a bifurcation, at the very beginning, with $\Sigma(t)$ having different topology from S_0^* for any $t > 0$.

Notice that we can alter the set in any way, it suffices to keep conditions of Theorem 3.6 verified. The next example, not as regular as the one in Figure 7, has the same bifurcation property.

Let be $\Omega := D^2$ our domain, and points $Z_n := (0, \frac{1}{2^n})$ in Ω . Then we connect each Z_k with Z_{k+1} with an injective arc

$$\gamma_k : [0, 1] \rightarrow \{Z_k\} \cup \{Z_{k+1}\} \cup (\text{conv}(B((0, 0), 2^{-k})) \setminus \text{conv}(B((0, 0), 2^{-k-1})))$$

such that:

- $\gamma_k(0) = Z_k, \gamma_k(1) = Z_{k+1};$
- $\pi_{(0,0),2^{-k}}(\gamma_k([0, 1]) \cap B(0, 2^{-k})) = \partial B(0, 2^{-k}).$

Notice that these γ_k can be highly irregular.

These conditions are sufficient to force $\{\xi_n\}, \xi_n := 2^{-n}$ to be a distance sequence for $(0, 0)$, and the logarithmic condition is satisfied, as

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \log_{2^{-n}} 2^{-n-1} = 1 < 2.$$

So the same bifurcation result follows.

References

- [1] Bucur D., Buttazzo G. Irreversible quasistatic evolutions by minimizing movements // *J. Convex Analysis*. — 2008. — V. 15, No. 3. — P. 523-534.
- [2] Bucur D., Buttazzo G., Lux A. Quasistatic evolution in debonding problems via capacity methods // *Arch. Rational Mech. Anal.* — 2008. — V. 190. — P. 281-306.
- [3] Bucur D., Buttazzo G., Trebeschi P. An existence result for optimal obstacles // *J. Funct. Anal.* — 1999. — V. 162(1). — P. 96-119
- [4] Buttazzo G., Oudet E., Stepanov E. Optimal transportation problems with free Dirichlet regions Published Paper. // *Progress in Nonlinear Diff. Equations and their Applications*. — 2002. — V. 51. — P. 41-65.
- [5] Buttazzo G., Stepanov E. Minimization problems for average distance functionals // *Calculus of Variations: Topics from the Mathematical Heritage of Ennio De Giorgi, D. Pallara (ed.), Quaderni di Matematica, Seconda Universit  di Napoli, Caserta*. — 2004. — V. 14. — P. 47-83.
- [6] Buttazzo G., Stepanov E. Optimal transportation networks as free Dirichlet regions for the Monge-Kantorovich problem // *Ann. Sc. Norm. Sup. Pisa Cl. Sci.* — 2003. — V. II — P. 631-678.
- [7] Buttazzo G., Stepanov E. Transport density in Monge-Kantorovich problems with Dirichlet conditions // *Discrete Contin. Dyn. Syst.* — 2005. — V. 13, No. 4. — P. 607-628.
- [8] De Giorgi E. New problems on minimizing movements. In boundary value problems for partial differential equations // *Res. Notes Appl. Math.* — 1993. — V. 29. — P. 81-98.
- [9] Lu X. Y. Branching time estimates in quasi static evolution for the average distance functional, Preprint on CVGMT.

UDC 517.958

A NONLOCAL PROBLEM WITH INTEGRAL CONDITIONS FOR HYPERBOLIC EQUATION

L. S. Pulkina¹

¹Samara State University, Samara, Russia

louise@samdiff.ru

In this article, we consider two initial-boundary value problems with nonlocal conditions. The main goal is to show the method which allows to prove solvability of a nonlocal problem with integral conditions of the first kind. This method is based on equivalence of a nonlocal problem with integral conditions of the first kind and nonlocal problem with integral conditions of the second kind in special form. Existence and uniqueness of generalized solutions to both problems are proved.

Keywords: hyperbolic equation, nonlocal problem, integral conditions.

1. Introduction

In this paper, we consider a mixed problem with nonlocal integral conditions for a hyperbolic equation. Before considering a problem it will be convenient to recall certain features that are common to nonlocal problems.

Let Ω be a bounded domain in R^n with smooth boundary $\partial\Omega$, Q be the cylinder $\Omega \times (0, T)$, $T < \infty$, $S = \partial\Omega \times (0, T)$ be the lateral boundary of Q .

Consider an equation

$$u_{tt} - (a_{ij}(x, t)u_{x_i})_{x_j} + c(x, t) = f(x, t) \quad (1)$$

(repeated indices imply summation from 1 to n) and set a problem: find a function $u(x, t)$ that is a solution of (1) in Q , satisfies initial data

$$u(x, 0) = \varphi(x), \quad u_t(x, 0) = \psi(x) \quad (2)$$

and the following condition for $n > 1$:

$$\alpha \frac{\partial u}{\partial \nu} \Big|_S + \int_{\Omega} K(x, t)u(x, t)dx = 0. \quad (3)$$

Here $\frac{\partial u}{\partial \nu} \equiv a_{ij}(x, t)u_{x_i}(x, t)\nu_j \Big|_S$, $\nu(x) = (\nu_1, \dots, \nu_n)$ is outward normal to $\partial\Omega$ at the current point, $K(x, t)$ is given.

In a special case $n = 1$ the lateral boundary of $Q = (0, l) \times (0, T)$ separates into two parts: $x = 0$ and $x = l$. As a consequence the condition (3) separates into two conditions:

$$\begin{aligned} \gamma_1 u_x(0, t) + \rho_1 \int_0^l K_1(x, t)u(x, t)dx &= 0, \\ \gamma_2 u_x(0, t) + \rho_2 \int_0^l K_2(x, t)u(x, t)dx &= 0, \end{aligned} \quad (4)$$

where $\rho_1^2 + \rho_2^2 > 0$.

Note that (3) and (4) are nonlocal conditions. By nonlocal condition we mean any relation between values of required solution at boundary and interior points of the domain Q . If $\alpha = 0$

then condition (3) is called the nonlocal condition of the first kind, if $\alpha \neq 0$ — of the second kind. Likewise, each of (4) is the nonlocal condition of the first kind if $\gamma_i = 0$.

Let us remark here that nonlocal integral conditions of the form

$$\begin{aligned} u(0, t) + \rho_1 \int_0^l K_1(x, t)u(x, t)dx &= 0, \\ u(l, t) + \rho_2 \int_0^l K_2(x, t)u(x, t)dx &= 0 \end{aligned} \quad (5)$$

for $n = 1$, and

$$u(x, t) + \int_{\Omega} K(x, y, t)u(y, t)dy = 0, \quad (x, t) \in S$$

for $n > 1$ are also of interest and are considered in [14], [15] (see also references in these papers). Nonlocal problems with time-dependent Steklov's conditions — in [16, 17] for hyperbolic and parabolic equations respectively.

Recently, nonlocal boundary value problems for parabolic and hyperbolic equations with integral conditions have been actively studied. Such problems arise in mathematical physics in the study of heat-transfer processes (see [1–3]), plasma phenomena [4], certain technological processes [5], vibration of a media [6]. Note that inverse problems with integral overdetermination are closely related to nonlocal problems [7, 8]. Studies have shown that classical methods often do not work when we deal with nonlocal problems [3, 9, 13]. To date, several methods have been proposed for overcoming the difficulties arising from nonlocal conditions. The choice of method depends on a kind of nonlocal conditions. If $\alpha \neq 0$ in (3) then we can use compactness method. The major advantage of this approach is possibility to derive an identity that is a base of a definition of a solution to the problem. Using Sobolev's embedding theorems we obtain a priori estimates and prove solvability [10]. It is easy to see that this approach fails for $\alpha = 0$ in (3) or $\gamma_1 = \gamma_2 = 0$ in (4)

This difficulty can be overcome easily and with elegance by suggested in this paper approach when $n = 1$.

We are now equipped to state a main problem and prove solvability.

2. The Main Result

Let $Q = (0, l) \times (0, T)$, $l, T < \infty$.

Problem 1. Find a function $u(x, t)$ that is a solution of an equation

$$u_{tt} - u_{xx} + c(x, t)u = f(x, t) \quad (6)$$

in Q , satisfies the initial data (2) and nonlocal conditions

$$\int_0^l K_i(x)u(x, t)dx = 0, \quad i = 1, 2. \quad (7)$$

The main objective is to show that under certain conditions on data there exists the unique solution to Problem 1.

Theorem 1. *Let*

$$\begin{aligned} c(x, t) \in C(\bar{Q}), c_t(x, t) \in C(Q), \quad K_i(x) \in C^1[0, l] \cap C^2(0, l), \\ K_1(0)K_2(l) - K_1(l)K_2(0) \neq 0, \\ K_{1x}(0)K_2(0) - K_{2x}(0)K_1(0) = K_{1x}(l)K_2(l) - K_{2x}(l)K_1(l), \end{aligned}$$

$$\Delta \left\{ [K_{1x}(0)K_2(l) - K_{2x}(0)K_1(l)]\zeta_1^2 + 2[K_{2x}(l)K_1(l) - K_{1x}(l)K_2(l)]\zeta_1\zeta_2 - [K_{2x}(l)K_1(0) - K_{1x}(l)K_2(0)]\zeta_2^2 \right\} \geq 0 \quad \forall z = (\zeta_1, \zeta_2),$$

$$f(x, t) \in L_2(Q), f_t(x, t) \in L_2(Q), \varphi(x) \in W_2^1(0, l), \psi(x) \in L_2(0, l).$$

Then there exists a unique generalized solution to Problem 1.

(A definition of a solution to Problem 1 will be given later.)

We shall divide the proof of this statement into two steps:

1. Proof of equivalence of Problem 1 and the problem (name it problem 2) with integral conditions of the second kind.

2. Proof of solvability of Problem 2.

Now we begin to carry out this scheme.

Step 1. Equivalence.

Lemma. Let $u(x, t)$ satisfies equation (6), initial data (2),

$$c(x, t) \in C(\bar{Q}), f(x, t) \in L_2(Q), K_i(x) \in C^2[0, l],$$

$$\Delta \equiv K_1(0)K_2(l) - K_1(l)K_2(0) \neq 0$$

and consistency conditions hold:

$$\int_0^l K_i(x)\varphi(x)dx = 0, \quad \int_0^l K_i(x)\psi(x)dx = 0. \quad (8)$$

Then (7) are equivalent to the conditions of the second kind:

$$\begin{aligned} u_x(0, t) &= \alpha_1 u(0, t) + \beta_1 u(l, t) + \int_0^l M_1(x, t)u(x, t)dx + \int_0^l P_1(x)f dx, \\ u_x(l, t) &= \alpha_2 u(0, t) + \beta_2 u(l, t) + \int_0^l M_2(x, t)u(x, t)dx + \int_0^l P_2(x)f dx, \end{aligned} \quad (9)$$

where

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= \frac{K_{1x}(0)K_2(l) - K_{2x}(0)K_1(l)}{\Delta}, \quad \alpha_2 = \frac{K_{1x}(0)K_2(0) - K_{2x}(0)K_1(0)}{\Delta}, \\ \beta_1 &= \frac{K_{2x}(l)K_1(l) - K_{1x}(l)K_2(l)}{\Delta}, \quad \beta_2 = \frac{K_{2x}(l)K_1(0) - K_{1x}(l)K_2(0)}{\Delta}, \\ M_1(x, t) &= \frac{[K_{1xx}(x) - c(x, t)K_1(x)]K_2(l) - [K_{2xx}(x) - c(x, t)K_2(x)]K_1(l)}{\Delta}, \\ M_2(x, t) &= \frac{[K_{1xx}(x) - c(x, t)K_1(x)]K_2(0) - [K_{2xx}(x) - c(x, t)K_2(x)]K_1(0)}{\Delta}, \\ P_1(x) &= \frac{K_1(x)K_2(l) - K_2(x)K_1(l)}{\Delta}, \quad P_2(x) = \frac{K_1(x)K_2(0) - K_2(x)K_1(0)}{\Delta}. \end{aligned}$$

Proof. Let $u(x, t)$ satisfies equation (6), initial data (2) and conditions (7). Multiplying (6) by $K_i(x)$, integrating over $(0, l)$ and using (7) we get:

$$\begin{aligned} K_1(0)u_x(0, t) - K_1(l)u_x(l, t) &= K_{1x}(0)u(0, t) - K_{1x}(l)u(l, t) + \\ &+ \int_0^l (K_{1xx}(x) - c(x, t)K_1(x))u(x, t)dx + \int_0^l K_1(x)f(x, t)dx, \\ K_2(0)u_x(0, t) - K_2(l)u_x(l, t) &= K_{2x}(0)u(0, t) - K_{2x}(l)u(l, t) + \\ &+ \int_0^l (K_{2xx}(x) - c(x, t)K_2(x))u(x, t)dx + \int_0^l K_2(x)f(x, t)dx. \end{aligned} \quad (10)$$

As $\Delta \equiv K_1(0)K_2(l) - K_1(l)K_2(0) \neq 0$, we can solve this system with respect to $u_x(0, t)$ and $u_x(l, t)$. Then we immediately get (9).

Let now (9) holds for the solution $u(x, t)$ of (6). Obviously (10) also holds. Multiplying (6) by $K_i(x)$ and integrating over $(0, l)$ we get a system of ODE:

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \int_0^l K_i(x)u(x, t)dx = 0. \quad (11)$$

Consistency conditions (8) give initial data:

$$\int_0^l K_i(x)u(x, 0)dx = 0, \quad \int_0^l K_i(x)u_t(x, 0)dx = 0.$$

By virtue of uniqueness of a solution to the Cauchy problem

$$\int_0^l K_i(x)u(x, t)dx = 0.$$

This means that conditions (7) hold.

Problem 2. Find a function $u(x, t)$ that is a solution of (6) and satisfies (2) and (9).

Step 2. Solvability of Problem 2

Denote

$$\hat{W}_2^1(Q) = \{v(x, t) : v \in W_2^1(Q), v(x, T) = 0\},$$

where $W_2^1(Q)$ is Sobolev space.

Definition. Function $u(x, t) \in W_2^1(Q)$ is said to be a generalized solution to Problem 2 (as well as to Problem 1) if $u(x, 0) = \varphi(x)$ and identity

$$\begin{aligned} & \int_0^T \int_0^l (-u_t v_t + u_x v_x + cuv) dx dt + \int_0^T v(0, t) [\alpha_1 u(0, t) + \beta_1 u(l, t)] dt + \\ & + \int_0^T v(l, t) \int_0^l M_1(x, t) u(x, t) dx dt - \int_0^T v(l, t) [\alpha_2 u(0, t) + \beta_2 u(l, t)] dt - \\ & - \int_0^T v(l, t) \int_0^l M_2(x, t) u(x, t) dx dt = \int_0^l v(x, 0) \psi(x) dx + \\ & + \int_0^T \int_0^l f v dx dt + \int_0^T [v(0, t) \int_0^l P_1(x) f dx - v(l, t) \int_0^l P_2(x) f dx] dt \end{aligned} \quad (12)$$

holds for every $v(x, t) \in \hat{W}_2^1(Q)$.

Theorem 2. Let

$$c(x, t) \in C(\bar{Q}), \quad M_i(x, t) \in C(\bar{Q}), \quad M_{it}(x, t) \in C(\bar{Q}), \quad P_i(x) \in C[0, l],$$

$$f(x, t) \in L_2(Q), \quad f_t(x, t) \in L_2(Q), \quad \varphi(x) \in W_2^1(0, l), \quad \psi(x) \in L_2(0, l),$$

$$\alpha_2 + \beta_1 = 0, \quad \alpha_1 \zeta_1^2 + (\beta_1 - \alpha_2) \zeta_1 \zeta_2 - \beta_2 \zeta_2^2 \geq 0 \quad \forall z = (\zeta_1, \zeta_2).$$

Then there exists a unique generalized solution to Problem 2.

Proof. We start by choosing

$$v(x, t) = \begin{cases} \int_{\tau}^t u(x, \eta) d\eta, & 0 \leq t \leq \tau, \\ 0, & \tau \leq t \leq T \end{cases} \quad (13)$$

in the inequality (12) with $f(x, t) = 0$, $\psi(x) = 0$. After some simple manipulation we obtain:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \int_0^l [u^2(x, \tau) + v_x^2(x, 0)] dx + \frac{1}{2} [\alpha_1 v^2(0, 0) + (\beta_1 - \alpha_2) v(0, 0) v(l, 0) - \beta_2 v^2(l, 0)] = \\ = \int_0^{\tau} \int_0^l c v v_t dx dt - \\ - \int_0^{\tau} v(0, t) \int_0^l M_1(x, t) u(x, t) dx dt + \int_0^{\tau} v(0, t) \int_0^l M_2(x, t) u(x, t) dx dt. \end{aligned} \quad (14)$$

In order to derive a priori estimate note that

$$v^2(x, t) \leq \tau \int_0^{\tau} u^2(x, t) dt, \quad (15)$$

$$v^2(\xi_i, t) \leq 2l \int_0^l v_x^2(x, t) dx + \frac{2}{l} \int_0^l v^2(x, t) dx \quad (16)$$

where $\xi_1 = 0$, $\xi_2 = l$. These inequalities follow easily from (13) and a relation

$$v(\xi_i, t) = \int_0^{\xi_i} v_{\xi}(\xi, t) d\xi + v(x, t), \quad i = 1, 2.$$

Now by using Cauchy, Cauchy-Bunyakovskii inequalities as well as (15) and (16) under the conditions of Theorem 2 we get from (14):

$$\int_0^l [u^2(x, \tau) + v_x^2(x, 0)] dx \leq C_1 \int_0^{\tau} \int_0^l u^2(x, t) dx dt + 4l \int_0^{\tau} \int_0^l v_x^2(x, t) dx dt, \quad (17)$$

where $C_1 > 0$ depends only on $c(x, t)$, $K_i(x)$ and T .

Introduce a function $w(x, t) = \int_0^t u_x(x, \eta) d\eta$. It is easy to see that $v_x(x, t) = w(x, t) - w(x, \tau)$, $v_x(x, 0) = -w(x, \tau)$ and we get from (17) an inequality

$$\int_0^l [u^2(x, \tau) + w^2(x, \tau)] dx \leq C_2 \int_0^{\tau} \int_0^l [u^2(x, t) + w^2(x, t)] dx dt \quad (18)$$

that is true for $\tau : 1 - 8l\tau > 0$. Taking into account that τ is arbitrary set $\tau \in [0, \frac{1}{16l}]$. Then, by using the Gronwall lemma, we obtain: $u(x, t) = 0$ for $t \in [0, \frac{1}{16l}]$. At a subsequent step we get $u(x, t) = 0$ for $t \in [\frac{1}{16l}, \frac{1}{8l}]$. By repeating the above argument several times, it follows that (see [11], p.212)

$$u(x, t) = 0 \quad \forall (x, t) \in \bar{Q}.$$

This means that there exists at most one solution to Problem 2.

Let $w_k(x) \in C^2[0, l]$ be arbitrary system of linearly independent functions that is complete in $W_2^1(0, l)$. Without loss of generality we assume $(w_k, w_l)_{L_2(0, l)} = \delta_{kl}$.

We seek an approximate solution of Problem 2 in the form

$$u^m(x, t) = \sum_{k=1}^m c_k(t)w_k(x) \quad (19)$$

from relations

$$\begin{aligned} \int_0^l (u_{tt}^m w_j + u_x^m w_j' + c(x, t)u^m w_j) dx + w_j(0) \int_0^l K_1(x, t)u^m dx - \\ - w_j(l) \int_0^l K_2(x, t)u^m dx = \int_0^l f(x, t)w_j dx, \end{aligned} \quad (20)$$

in addition,

$$c_k(0) = \alpha_k, \quad c_k'(0) = \beta_k \quad (21)$$

where α_k, β_k are coefficients of the sums

$$\varphi^m(x) = \sum_{k=1}^m \alpha_k w_k(x), \quad \psi^m(x) = \sum_{k=1}^m \beta_k w_k(x),$$

approximating as $m \rightarrow \infty$ the functions $\varphi(x)$, $\psi(x)$ in the norms $W_2^1(0, l)$ and $L_2(0, l)$ respectively. Under the conditions of Theorem 2 the Cauchy problem (20)–(21) has a unique solution such that $c_k''(t) \in L_1(0, T)$. It follows that a sequence $u^m(x, t)$ is constructed.

Let us now prove that this sequence converges and its limit is a required solution to Problem 2. To this end we need to derive an estimate. Multiplying (20) by $c_l'(t)$, summing with respect to l from 1 to m and integrating over $(0, \tau)$ we obtain:

$$\begin{aligned} \int_0^\tau \int_0^l (u_{tt}^m u_t^m + u_x^m u_{xt}^m + c(x, t)u^m u_t^m) dx dt + \int_0^\tau u_t^m(0, t) \int_0^l M_1(x, t)u^m(x, t) dx dt - \\ - \int_0^\tau u_t^m(l, t) \int_0^l M_2(x, t)u^m(x, t) dx dt + \int_0^\tau u_t^m(0, t)[\alpha_1 u^m(0, t) + \beta_1 u^m(l, t)] dt - \\ - \int_0^\tau u_t^m(l, t)[\alpha_2 u^m(0, t) + \beta_2 u^m(l, t)] dt = \\ = \int_0^\tau \int_0^l f(x, t)[u^m(x, t) + u^m(0, t)P_1(x) - u^m(l, t)P_2(x)] dx dt. \end{aligned} \quad (22)$$

Consider first term in the left part of (22). Integrating by parts we obtain

$$\int_0^\tau \int_0^l (u_{tt}^m u_t^m + u_x^m u_{xt}^m + c(x, t)u^m u_t^m) dx dt = \int_0^\tau \int_0^l c u^m u_t^m dx dt +$$

$$+\frac{1}{2} \int_0^l [(u_t^m(x, \tau))^2 + (u_x^m(x, \tau))^2] dx - \frac{1}{2} \int_0^l [(u_t^m(x, 0))^2 + (u_x^m(x, 0))^2] dx.$$

Consider in more detail the terms generated by nonlocal conditions. At first we integrate by parts:

$$\begin{aligned} \int_0^\tau u_t^m(\xi_i, t) \int_0^l M_i(x, t) u^m(x, t) dx dt &= - \int_0^\tau u^m(\xi_i, t) \int_0^l M_i(x, t) u_t(x, t) dx dt - \\ &+ \int_0^\tau u^m(\xi_i, t) \int_0^l M_{it} u^m(x, t) dx dt + u^m(\xi_i, t) \int_0^l M_i(x, t) u^m(x, t) dx \Big|_0^\tau. \end{aligned} \quad (23)$$

Now we can derive following inequalities:

$$\begin{aligned} &\left| \int_0^\tau u^m(\xi_i, t) \int_0^l M_i(x, t) u_t^m(x, t) dx dt \right| \leq \\ &\leq \frac{1}{2} \int_0^\tau (u^m(\xi_i, t))^2 dt + \frac{m_i^0}{2} \int_0^\tau \int_0^l (u_t^m(x, t))^2 dx dt; \\ &\left| \int_0^\tau u^m(\xi_i, t) \int_0^l M_{it}(x, t) u_t^m(x, t) dx dt \right| \leq \\ &\leq \frac{1}{2} \int_0^\tau (u^m(\xi_i, t))^2 dt + \frac{m_i^1}{2} \int_0^\tau \int_0^l (u_t^m(x, t))^2 dx dt; \\ &\left| u^m(\xi_i, t) \int_0^l M_{it}(x, t) u_t^m(x, t) dx \Big|_0^\tau \right| \leq \frac{1}{2} (u^m(\xi_i, \tau))^2 + \frac{1}{2} (u^m(\xi_i, 0))^2 + \\ &+ \frac{m_i^0}{2} \int_0^l (u^m(x, \tau))^2 dx + \frac{m_i^0}{2} \int_0^l (u^m(x, 0))^2 dx, \end{aligned}$$

where $m_i^0 = \max_{[0, T]} \int_0^l M_i^2(x, t) dx$, $m_i^1 = \max_{[0, T]} \int_0^l M_{it}^2(x, t) dx$.

As (see [11])

$$\begin{aligned} (u^m(\xi_i, \tau))^2 &\leq \varepsilon \int_0^l (u_x^m(x, \tau))^2 dx + c(\varepsilon) \int_0^l (u^m(x, \tau))^2 dx, \\ \int_0^l (u^m(x, \tau))^2 dx &\leq 2\tau \int_0^\tau \int_0^l (u_t^m(x, t))^2 dx dt + 2 \int_0^l (u^m(x, 0))^2 dx \end{aligned} \quad (24)$$

then

$$\left| \int_0^\tau u_t^m(0, t) \int_0^l M_1(x, t) u^m(x, t) dx dt \right| + \left| \int_0^\tau u_t^m(l, t) \int_0^l M_2(x, t) u^m(x, t) dx dt \right| \leq$$

$$\begin{aligned}
&\leq \varepsilon \int_0^l (u_x^m(x, \tau))^2 dx + C_3 \int_0^\tau \int_0^l [(u_x^m(x, t))^2 + (u_t^m(x, t))^2 + (u^m(x, t))^2] dx dt + \\
&\quad + C_4 \int_0^l [u_x^m(x, 0)]^2 + (u^m(x, 0))^2 dx. \tag{25}
\end{aligned}$$

Consider now next two terms and after some manipulation we obtain:

$$\begin{aligned}
&\int_0^\tau u_t^m(0, t)[\alpha_1 u^m(0, t) + \beta_1 u^m(l, t)] dt - \int_0^\tau u_t^m(l, t)[\alpha_2 u^m(0, t) + \beta_2 u^m(l, t)] dt = \\
&= \frac{1}{2} [\alpha_1 (u^m(0, \tau))^2 + (\beta_1 - \alpha_2) u^m(0, \tau) u^m(l, \tau) - \beta_2 (u^m(l, \tau))^2] - \\
&\quad - \frac{1}{2} [\alpha_1 (u^m(0, 0))^2 + (\beta_1 - \alpha_2) u^m(0, 0) u^m(l, 0) - \beta_2 (u^m(l, 0))^2]. \tag{26}
\end{aligned}$$

Then using Cauchy inequality and (24) we get:

$$\begin{aligned}
&\left| \int_0^\tau \int_0^l f(x, t) [u^m(x, t) + u^m(0, t) P_1(x) - u^m(l, t) P_2(x)] dx dt \right| \leq \\
&\leq \frac{1}{2} \int_0^\tau \int_0^l (u^m(x, t))^2 dx dt + C_5 \int_0^\tau \int_0^l (u_x^m(x, t))^2 dx dt + \\
&\quad + \frac{3}{2} \int_0^\tau \int_0^l f^2(x, t) dx dt \tag{27}
\end{aligned}$$

where $C_5 = \max_i \left\{ \int_0^l P_i^2(x) dx \right\}$.

Letting now $\varepsilon = \frac{1}{4}$ in (25) we get from (22), (25), (26), (27) required estimate:

$$\|u^m(x, t)\|_{W_2^1(Q)} \leq L, \tag{28}$$

where L does not depend on m .

The above-proved estimate implies that we can extract a subsequence $\{u^{m_k}(x, t)\}$ from $\{u^m(x, t)\}$ such that $u^{m_k}(x, t)$ converges weakly to $u(x, t) \in W_2^1(Q)$. It remains to show that this limit function is the required solution to Problem 2. For this purpose multiply (20) by $d_l(t) \in C^2[0, T]$ with $d_l(T) = 0$. After summing over l from 1 to m_k and integrating over $[0, T]$ we get an equality

$$\begin{aligned}
&\int_0^T \int_0^l (-u_t^{m_k} \eta_t^k + u_x^{m_k} \eta_x^k + c u^{m_k} \eta^k) dx dt + \int_0^T \eta^k(0, t) [\alpha_1 u^{m_k}(0, t) + \beta_1 u^{m_k}(l, t)] dt + \\
&+ \int_0^T \eta^k(0, t) \int_0^l M_1(x, t) u^{m_k}(x, t) dx dt - \int_0^T \eta^k(l, t) [\alpha_2 u^{m_k}(0, t) + \beta_2 u^{m_k}(l, t)] dt - \\
&\quad - \int_0^T \eta^k(l, t) \int_0^l M_2(x, t) u^{m_k}(x, t) dx dt = \int_0^l \eta^k(x, 0) u^{m_k}(x, 0) dx +
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \int_0^T \int_0^l f(x, t) \eta^k(x, t) dx dt + \\
& + \int_0^T [\eta^k(0, t) \int_0^l P_1(x) f dx - \eta^k(l, t) \int_0^l P_2(x) f(x, t) dx] dt
\end{aligned} \tag{29}$$

that is true for every $\eta^k(x, t) = \sum_{l=1}^{m_k} d_l(t) w_l(x)$.

By taking into account the above-proved weak convergence of the subsequence $\{u^{m_k}(x, t)\}$ in $W_2^1(Q)$, one can pass in (29) to the limit as $m_k \Rightarrow \infty$ and certain $\eta^k(x, t)$ is fixed. Denote the set of all $\eta^k(x, t)$ by \mathcal{M}_k . Since $\bigcup_{k=1}^{\infty} \mathcal{M}_k$ is dense in $\hat{W}_2^1(Q)$ ([11], p.215) it follows that (29) holds for any $v(x, t) \in \hat{W}_2^1(Q)$ which implies that the required solution to Problem 2 exists.

The solvability of the main problem 1 follows from Lemma and Theorem 2. The proof of Theorem 1 is completed.

Remark. All results are true for more general hyperbolic equation $u_{tt} - (a(x, t)u_x)_x + c(x, t)u = f(x, t)$ if $a(x, t), a_t(x, t) \in L_2(Q)$.

Acknowledgements

The author wish to thank the referee for his/her careful reading of the manuscript and valuable suggestions.

References

- [1] Cannon J.R. The solution of the heat equation subject to the specification of energy // *Quart. Appl. Math.* — 1963. — V. 21. — P. 155-160.
- [2] Kamynin L.I. On a boundary problem in the theory of heat conduction with a nonclassical boundary condition // *Zh. Vychisl. Math. Math. Fiz.* — 1964. — V. 4, No. 6 — P. 1006-1024.
- [3] Ionkin N.I. Solution of one boundary value problem of heat conduction theory with a nonclassical boundary condition // *Differ. Uravn.* — 1977. — V. 13, No. 2. — P. 294-304.
- [4] Samarskii A.A. On certain problems of the modern theory of differential equations // *Differ. Uravn.* — 1980. — V. 16, No. 11. — P. 1221-1228.
- [5] Muravei L.A., Filinovskii A.V. On a problem with nonlocal boundary condition for a parabolic equation // *Mathematics of the USSR-Sbornik.* — 1993. — V. 74, No. 1. — P. 219-249.
- [6] Gordeziani D.G., Avalishvili G.A. Solutions of nonlocal problems for one-dimensional oscillations of the medium // *Mat. Model.* — 2000. — V. 12, No. 1. — P. 94-103.
- [7] Kamynin V.L. Unique solvability of the inverse problem of determination of the leading coefficient in a parabolic equation // *Differ. Equ.* — 2011. — V. 47, No. 1. — P. 91-101.
- [8] Cannon J.R., Lin Y. An inverse problem of finding a parameter in a semi-linear heat equation // *J. Math. Anal. Appl.* — 1990. — V. 145. — P. 470-484.
- [9] Bouziani A. Solution forte d'un problem mixte avec condition non locales pour une classe d'equations hyperboliques // *Bull. de la Classe des Sciences, Academie Royale de Belgique.* — 1997. — V. 8. — P. 53-70.
- [10] Dmitriev V.B. Nonlocal problem with integral conditions for the wave equation // *Vestnik of Samara State University.* — 2006. — V. 42, No. 2. — P. 15-27.
- [11] Ladyzhenskaya O.A. *Boundary value problems of mathematical physics.* — Moscow: Nauka, 1973.
- [12] Steklov V.A. A problem on cooling of nonhomogeneous rigid bar // *Reports of Kharkov Math. Society.* — 1896. — V. 5, No. 3-4. — P. 136-181.
- [13] Pulkina L.S. A nonlocal problem with integral conditions for a hyperbolic equation // *Differ. Equ.* — 2004. — V. 40, No. 7. — P. 947-953.
- [14] Pulkina L.S. Initial-boundary value problem with a nonlocal boundary condition for a multidimensional hyperbolic equation // *Differ. Equ.* — 2008. — V. 44, No. 8. — P. 1119-1125.

- [15] Kozhanov A.I., Pulkina L.S. On the solvability of boundary value problems with a nonlocal boundary condition of integral form for multidimensional hyperbolic equations // *Differ. Equ.* — 2006. — V. 42, No. 9. — P. 1233-1246.
- [16] Kozhanov A.I. On solvability of certain spatially nonlocal boundary problems for linear parabolic equations // *Vestnik of Samara State University.* — 2008. — V. 62, No. 3. — P. 165-174 .
- [17] Pulkina L.S., Duzheva A.V. Nonlocal problem with time-dependent Steklov's boundary conditions for hyperbolic equation // *Vestnik of Samara State University.* — 2010. — V. 78, No. 4. — P. 56-64.

UDC 517.958

THRESHOLD EIGENFUNCTIONS AND THRESHOLD RESONANCES OF SOME RELATIVISTIC OPERATORS

Y. Saitō¹, T. Umeda²

¹University of Alabama at Birmingham, Birmingham, USA

²University of Hyogo, Himeji, Japan

saito@math.uab.edu, umeda@sci.u-hyogo.ac.jp

PACS 02.30.Jr, 02.30.Tb, 03.65.Pm

We give a review of recent developments on the study of threshold eigenfunctions and threshold resonances of magnetic Dirac operators and Pauli operators. Emphasis is placed on a proof of the non-existence of threshold resonances of the magnetic Dirac operators in a concise manner.

Keywords: Dirac operators, magnetic potentials, threshold energies, threshold resonances, threshold eigenfunctions, zero modes.

1. Threshold eigenfunctions

The relativistic operators we consider are magnetic Dirac operators

$$H_A = \alpha \cdot \left(\frac{1}{i} \nabla_x - A(x) \right) + m\beta, \quad x \in \mathbb{R}^3, \quad (1.1)$$

and Pauli operators

$$P_A = \sum_{j=1}^3 \left(\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial x_j} - A_j(x) \right)^2 - \sigma \cdot B, \quad x \in \mathbb{R}^3. \quad (1.2)$$

Here $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ is the triple of 4×4 Dirac matrices

$$\alpha_j = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \sigma_j \\ \sigma_j & \mathbf{0} \end{pmatrix} \quad (j = 1, 2, 3)$$

with the 2×2 zero matrix $\mathbf{0}$ and the triple of 2×2 Pauli matrices

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

and

$$\beta = \begin{pmatrix} I_2 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -I_2 \end{pmatrix}.$$

The constant m is assumed to be positive. $A(x) = (A_1(x), A_2(x), A_3(x))$ is a vector potential, and $B = \nabla \times A$ is the magnetic field. By $\alpha \cdot \left(\frac{1}{i} \nabla_x - A(x) \right)$ in (1.1), we mean

$$\sum_{j=1}^3 \alpha_j \left(\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial x_j} - A_j(x) \right),$$

and similarly by $\sigma \cdot B$ in (1.2) we mean $\sum_{j=1}^3 \sigma_j B_j$.

We need to make various assumptions on the vector potential in the present section. It is notable that all these assumptions share one common feature that each component of A is a

real-valued function decaying at infinity in a certain sense. Therefore, any of these assumptions assures that H_A is essentially self-adjoint on $[C_0^\infty(\mathbb{R}^3)]^4$. The unique self-adjoint realization in the Hilbert space $[L^2(\mathbb{R}^3)]^4$ will be denoted by H_A again. Note that the domain of the self-adjoint operator H_A is given by the Sobolev space of order 1, *i.e.* $\text{Dom}(H_A) = [H^1(\mathbb{R}^3)]^4$. It is straightforward that the spectrum of the self-adjoint operator H_A is given as follows:

$$\sigma(H_A) = (-\infty, -m] \cup [m, \infty).$$

By the threshold energies of H_A , we mean the values m and $-m$.

It is a natural question whether these threshold energies become eigenvalues of H_A . It is well-known that $\pm m$ are generically not the eigenvalues of H_A . Precise description of this fact is given as follows.

Theorem 1.1 (Balinsky-Evans-Saitō-Umeda). *The set*

$$\{ A \in [L^3(\mathbb{R}^3)]^3 \mid \text{Ker}(H_A \mp m) = \{0\} \}$$

contains an open and dense subset of $[L^3(\mathbb{R}^3)]^3$.

For the proof of Theorem 1.1, see Balinsky-Evans [3, Theorem 2], together with Saitō-Umeda [13, Corollary 2.1 and Theorem 4.2]. Theorem 1.1 says that the set of vector potentials which give rise to threshold eigenfunctions is sparse. A similar result in a different class of vector potentials also holds true. Actually, Elton [8] analyzed the structure of the set of vector potentials which produce threshold eigenfunctions.

Theorem 1.2 (Elton-Saitō-Umeda). *Let \mathcal{A} be the Banach space defined by*

$$\mathcal{A} := \{ A \in [C^0(\mathbb{R}^3)]^3 \mid |A(x)| = o(|x|^{-1}) \text{ as } |x| \rightarrow \infty \}$$

equipped with the norm

$$\|A\|_{\mathcal{A}} = \sup_x \{ \langle x \rangle |A(x)| \}.$$

Define

$$\mathcal{Z}_k^\pm = \{ A \in \mathcal{A} \mid \dim(\text{Ker}(H \mp m)) = k \}$$

for $k = 0, 1, 2, \dots$. Then

- (i) $\mathcal{Z}_k^+ = \mathcal{Z}_k^-$ for all k , and $\mathcal{A} = \bigcup_{k \geq 0} \mathcal{Z}_k^\pm$.
- (ii) \mathcal{Z}_0^\pm is an open and dense subset of \mathcal{A} .
- (iii) For any k and any open subset $\Omega (\neq \emptyset)$ of \mathbb{R}^3 there exists an $A \in \mathcal{Z}_k^\pm$ such that $A \in [C_0^\infty(\Omega)]^3$.
- (iv) For $k = 1, 2$ the set \mathcal{Z}_k^\pm is a smooth sub-manifold of \mathcal{A} with co-dimension k^2 .

For the proof of Theorem 1.2, see Elton [8, Theorems 1 and 2], together with Saitō-Umeda [13, Corollary 2.1 and Theorem 5.2].

By simple computations, one can see that $P_A = \{ \sigma \cdot (\frac{1}{i} \nabla - A) \}^2$. Hence one can define the Friedrichs extension in $[L^2(\mathbb{R}^3)]^2$ of P_A on $[C_0^\infty(\mathbb{R}^3)]^2$ under appropriate assumptions on A and B . Balinsky-Evans [2, Theorem 4.2] showed the following result.

Theorem 1.3 (Balinsky-Evans). *The set*

$$\{ B \in [L^{3/2}(\mathbb{R}^3)]^3 \mid \text{Ker}(P_A) = \{0\} \text{ and } \nabla \times A = B \}$$

contains an open and dense subset of $[L^{3/2}(\mathbb{R}^3)]^3$.

As was shown in [2, Lemma 2.2], there exists a unique vector potential A such that $A \in [L^3(\mathbb{R}^3)]^3$, $\nabla \times A = B$ and $\operatorname{div} A = 0$. Theorem 1.3 says that the set of magnetic fields which give rise to a *zero mode* of P_A (an eigenfunction of P_A corresponding to the eigenvalue 0) is sparse.

It is not only necessary but also important to mention examples of vector potentials $A(x)$ which yield threshold eigenfunctions of H_A as well as P_A . For this purpose, it is convenient to introduce Weyl-Dirac operator

$$W_A = \sigma \cdot \left(\frac{1}{i} \nabla_x - A(x) \right).$$

When A is sufficiently smooth, it is well-known (Thaller [16, p. 195, Theorem 7.1]) that

$$W_A \varphi = 0 \iff H_A \begin{pmatrix} \varphi \\ 0 \end{pmatrix} = m \begin{pmatrix} \varphi \\ 0 \end{pmatrix} \iff H_A \begin{pmatrix} 0 \\ \varphi \end{pmatrix} = -m \begin{pmatrix} 0 \\ \varphi \end{pmatrix}.$$

Since $P_A = W_A^2$ (see the paragraph before Theorem 1.3), it follows that

$$P_A \varphi = 0 \iff W_A \varphi = 0,$$

provided that A is in $[C^1(\mathbb{R}^3)]^3$ and satisfies an appropriate condition. Therefore, it is apparent that a zero mode of W_A provides a threshold eigenfunction of H_A corresponding to either one of the energies $\pm m$, as well as a threshold eigenfunction of P_A corresponding to the energy 0.

Example 1.1 (Loss-Yau). Define

$$A(x) = 3\langle x \rangle^{-4} \{ (1 - |x|^2)w_0 + 2(w_0 \cdot x)x + 2w_0 \times x \} \quad (1.3)$$

where $\langle x \rangle = \sqrt{1 + |x|^2}$, $\phi_0 = {}^t(1, 0)$, and

$$w_0 = \phi_0 \cdot (\sigma \phi_0) := ((\phi_0, \sigma_1 \phi_0)_{\mathbb{C}^2}, (\phi_0, \sigma_2 \phi_0)_{\mathbb{C}^2}, (\phi_0, \sigma_3 \phi_0)_{\mathbb{C}^2}).$$

Note that $w_0 \cdot x$ and $w_0 \times x$ denotes the inner product and the exterior product of \mathbb{R}^3 respectively. Then

$$\varphi(x) := \langle x \rangle^{-3} (I_2 + i\sigma \cdot x) \phi_0 \quad (1.4)$$

is a zero mode of the Weyl-Dirac operator W_A .

Following and developing the ideas in [9], Adam-Muratori-Nash [1] constructed a series of vector potentials which give rise to zero modes of the corresponding Weyl-Dirac operators. All of their vector potentials share the property that $|A(x)| \leq C\langle x \rangle^{-2}$ with the one given by (1.3).

Recently, Saitō-Umeda [14] found an interesting connection between the series of the zero modes constructed in [1] and a series of solvable polynomials.

It follows that the zero mode defined by (1.4) has the asymptotic limits $\varphi(x) \asymp |x|^{-2}$ as $|x| \rightarrow \infty$. According to Theorem 1.4 below, every zero mode exhibits the same asymptotic limit.

Theorem 1.4 (Saitō-Umeda). *Suppose that $|A(x)| \leq C\langle x \rangle^{-\rho}$, $\rho > 1$. Let φ be a zero mode of the Weyl-Dirac operator W_A . Then for any $\omega \in \mathbb{S}^2$, the unit sphere of \mathbb{R}^3 ,*

$$\begin{aligned} & \lim_{r \rightarrow +\infty} r^2 \varphi(r\omega) \\ &= \frac{i}{4\pi} \int_{\mathbb{R}^3} \{ (\omega \cdot A(y)) I_2 + i\sigma \cdot (\omega \times A(y)) \} \varphi(y) dy, \end{aligned}$$

where the convergence being uniform with respect to $\omega \in \mathbb{S}^2$.

See Saitō-Umeda [11] for the proof of Theorem 1.4.

Theorem 1.4 excludes the case $\rho = 1$. In Balinsky-Evans-Saitō [6], they were successful to derive estimates for zero modes of the Dirac operator of the form $H_Q = \alpha \cdot \frac{1}{i} \nabla + Q(x)$ with $Q(x) = O(|x|^{-1})$ as $|x| \rightarrow \infty$, where $Q(x)$ is a 4×4 -matrix-valued function. Their estimates are as follows:

$$\int_{|x| \geq 1} \{ |x|^{-2} |\varphi(x)| \}^k |x|^{-6} dx < \infty$$

for any $k \in [1, 10/3)$.

2. Threshold resonances

To define threshold resonances, we introduce a weighted Hilbert space

$$L^{2,-s}(\mathbb{R}^3) = \{ u \mid \| \langle x \rangle^{-s} u \|_{L^2} < \infty \}.$$

A \mathbb{C}^4 -valued function f is said to be an m -resonance (resp. a $-m$ -resonance) if and only if f belongs to $[L^{2,-s}(\mathbb{R}^3)]^4 \setminus [L^2(\mathbb{R}^3)]^4$ for some $s \in (0, 3/2]$ and satisfies $H_A f = mf$ (resp. $H_A f = -mf$) in the distributional sense. By a threshold resonance of H_A , we mean an m -resonance or a $-m$ -resonance.

Theorem 2.1 (Saitō-Umeda). *Suppose that $|A(x)| \leq C \langle x \rangle^{-\rho}$, $\rho > 3/2$. Let $f = {}^t(\varphi^+, \varphi^-) \in [L^{2,-s}(\mathbb{R}^3)]^4 = [L^{2,-s}(\mathbb{R}^3)]^2 \oplus [L^{2,-s}(\mathbb{R}^3)]^2$ for some s with $0 < s < \min(1, \rho - 1)$.*

- (i) *If f satisfies $H_A f = mf$ in the distributional sense, then $f \in [H^1(\mathbb{R}^3)]^4$ and $\varphi^- = 0$.*
- (ii) *If f satisfies $H_A f = -mf$ in the distributional sense, then $f \in [H^1(\mathbb{R}^3)]^4$ and $\varphi^+ = 0$.*

Theorem 2.1 implies the non-existence of the threshold resonance of H_A as far as $\rho > 3/2$ and $0 < s < \min(1, \rho - 1)$. As was mentioned in Section 1, the vector potentials by Loss-Yau [9] and by Adam-Muratori-Nash [1] satisfy the inequality $|A(x)| \leq C \langle x \rangle^{-2}$. Therefore, these vector potentials do not yield $\pm m$ -resonances.

As an easy corollary to Theorem 2.1, one can get the following result, which seems a more natural formulation of the non-existence of threshold resonances from the physics point of view.

Corollary 2.1. *Suppose that $f \in [L^2_{loc}(\mathbb{R}^3)]^4$ and that*

$$f(x) = C_1 |x|^{-1} + C_2 |x|^{-2} + o(|x|^{-2}) \text{ as } |x| \rightarrow \infty.$$

If f satisfies either of $H_A f = \pm mf$ in the distributional sense, then $C_1 = 0$.

We shall give an outline of the proof of Theorem 2.1. Although the reader can find the proof in Saitō-Umeda [13], it heavily relies on Saitō-Umeda [12], hence the whole story of the proof is separated into two different papers. For this reason, we believe that it is beneficial to illustrate the whole story in the present article in a concise manner.

Before giving the outline, we prepare two lemmas.

Lemma 2.1. *Let K be an integral operator define by*

$$K\varphi(x) = \int_{\mathbb{R}^3} i \frac{\sigma \cdot (x - y)}{4\pi |x - y|^3} \varphi(y) dy.$$

Then $K(\sigma \cdot \frac{1}{i} \nabla)\varphi = \varphi$ if $\varphi \in [L^{2,-3/2}(\mathbb{R}^3)]^2$ and $(\sigma \cdot \frac{1}{i} \nabla)\varphi \in [L^{2,t}(\mathbb{R}^3)]^2$ for some $t > 1/2$.

Proof. We give a formal proof. A rigorous proof can be found in [12, Section 4].

Note that $K = (\sigma \cdot \frac{1}{i}\nabla)I_2 = I_2(\sigma \cdot \frac{1}{i}\nabla)$, where I_2 denotes the Riesz potential (cf. Stein [15, Chapter V]). It follows that

$$K(\sigma \cdot \frac{1}{i}\nabla)\varphi = I_2(\sigma \cdot \frac{1}{i}\nabla)^2\varphi = I_2(-\Delta)\varphi = \varphi,$$

since $(\sigma \cdot \frac{1}{i}\nabla)^2 = -\Delta$. Here the anti-commutation relations $\sigma_j\sigma_k + \sigma_k\sigma_j = 2\delta_{jk}I_2$ were used. \square

Lemma 2.2. *If $t \geq 1$, then the Riesz potential I_1 is a bounded operator from $L^{2,t}(\mathbb{R}^3)$ to $L^2(\mathbb{R}^3)$.*

Proof. Let $\hat{u} \in C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$, where \hat{u} denotes the Fourier transform of u . Then

$$\|I_1 u\|_{L^2}^2 = \frac{1}{4\pi^2} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{|\xi|^2} |\hat{u}(\xi)|^2 d\xi \leq \frac{1}{\pi^2} \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla_\xi \hat{u}(\xi)|^2 d\xi \leq \frac{1}{\pi^2} \|u\|_{L^{2,1}}^2,$$

where we have used the Hardy inequality with respect to ξ variable. See, e.g., [5, p. 19] for the Hardy inequality. \square

Outline of the proof of Theorem 2.1. We shall give the proof only for an m -resonance. The proof for a $-m$ -resonance is similar and shall be omitted.

Let $f = {}^t(\varphi^+, \varphi^-)$ be in $[L^{2,-s}(\mathbb{R}^3)]^4$ and satisfy $H_A f = m f$ in the distributional sense. We then have

$$\begin{cases} m\varphi^+ + \sigma \cdot (\frac{1}{i}\nabla - A(x))\varphi^- = m\varphi^+ \\ \sigma \cdot (\frac{1}{i}\nabla - A(x))\varphi^+ - m\varphi^- = m\varphi^- \end{cases}$$

in the distributional sense, which is equivalent to

$$\begin{cases} \sigma \cdot (\frac{1}{i}\nabla - A(x))\varphi^- = 0 \\ \sigma \cdot (\frac{1}{i}\nabla - A(x))\varphi^+ = 2m\varphi^- \end{cases} \quad (2.1)$$

in the distributional sense. Since $\varphi^- \in [L^{2,-s}(\mathbb{R}^3)]^2$, it follows from the first equation in (2.1) that

$$(\sigma \cdot \frac{1}{i}\nabla)\varphi^- = (\sigma \cdot A)\varphi^- \in [L^{2,\rho-s}(\mathbb{R}^3)]^2, \quad (2.2)$$

where $\rho - s > 1$. Hence Lemma 2.1 is applicable to φ^- , and we have

$$\varphi^- = K(\sigma \cdot \frac{1}{i}\nabla)\varphi^- = K(\sigma \cdot A)\varphi^-. \quad (2.3)$$

It follows from (2.3) that

$$|\varphi^-(x)| \leq \int_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{4\pi|x-y|^2} |(\sigma \cdot A)(y)\varphi^-(y)| dy = \frac{\pi}{2} I_1(|(\sigma \cdot A)\varphi^-|)(x). \quad (2.4)$$

The inequality (2.4), together with Lemma 2.2, implies that $\varphi^- \in [L^2(\mathbb{R}^3)]^2$. Noting that $(\sigma \cdot \frac{1}{i}\nabla)\varphi^- \in [L^2(\mathbb{R}^3)]^2$ by (2.2), we can conclude that $\varphi^- \in [H^1(\mathbb{R}^3)]^2$.

On the other hand, it follows from the second equation of (2.1) that

$$(\sigma \cdot \frac{1}{i}\nabla)\varphi^+ = 2m\varphi^- + (\sigma \cdot A)\varphi^+ \in [L^2(\mathbb{R}^3)]^2. \quad (2.5)$$

To conclude that $\varphi^- = 0$, we need to show that

$$((\sigma \cdot \frac{1}{i}\nabla)\varphi^+, \varphi^-)_{[L^2]^2} = ((\sigma \cdot A)\varphi^+, \varphi^-)_{[L^2]^2}, \quad (2.6)$$

(see Remark 2.1 below). In fact, combining (2.5) with (2.6) and noting that $m > 0$, we can conclude that $\varphi^- = 0$.

The fact that $\varphi^- = 0$, together with the second equality in (2.1), implies that $\sigma \cdot (\frac{1}{i}\nabla - A)\varphi^+ = 0$. It is now evident that one can repeat the same arguments above for φ^- to conclude that $\varphi^+ \in [H^1(\mathbb{R}^3)]^2$. \square

Remark 2.1. A rigorous proof of (2.6) can be found in [13, Lemma 6.1], where the condition $s < 1$ is used. Since the proof of (2.6) is lengthy, we prove it by a formal argument as follows:

$$\begin{aligned} ((\sigma \cdot \frac{1}{i}\nabla)\varphi^+, \varphi^-)_{[L^2]^2} &= (\varphi^+, (\sigma \cdot \frac{1}{i}\nabla)\varphi^-)_{[L^2]^2} \\ &= (\varphi^+, (\sigma \cdot A)\varphi^-)_{[L^2]^2} \\ &= ((\sigma \cdot A)\varphi^+, \varphi^-)_{[L^2]^2}. \end{aligned} \tag{2.7}$$

Here we have made integration by part in a formal manner in the first equality in (2.7), and in the second equality in (2.7) we have used the first equality in (2.1).

As for the non-existence of zero-resonances of Pauli operators, Morita [10] recently obtained the following result.

Theorem 2.2 (Morita). *Suppose that $A \in [C^\infty(\mathbb{R}^3)]^3$ and that*

$$|A_j(x)| + |\nabla A_j(x)| \leq C\langle x \rangle^{-\rho}, \quad \rho \geq 2$$

for $j = 1, 2, 3$. If $\varphi \in [H^{1,-s}(\mathbb{R}^3)]^2$ for some s with $0 < s \leq 1$ and satisfies $P_A\varphi = 0$ in the distributional sense, then $\varphi \in [H^1(\mathbb{R}^3)]^2$. Here

$$H^{1,-s}(\mathbb{R}^3) = \{u \mid \|\langle x \rangle^{-s}u\|_{L^2} + \|\langle x \rangle^{-s}\nabla u\|_{L^2} < \infty\}.$$

One should note that $L^2(\mathbb{R}^3) \not\subset H^{1,-s}(\mathbb{R}^3)$, but $H^{1,-s}(\mathbb{R}^3) \setminus L^2(\mathbb{R}^3) \neq \emptyset$. Obviously, there is room for improvement in Theorem 2.2.

3. Acknowledgements

TU is supported by Grant-in-Aid for Scientific Research (C) No. 21540193, Japan Society for the Promotion of Science.

References

- [1] Adam C., Muratori B., Nash C. Zero modes of the Dirac operator in three dimensions // Phys. Rev. D. — 1999. — V. 60. — 125001, 8 p.
- [2] Balinsky A.A., Evans W.D. On the zero modes of Pauli operators // J. Funct. Anal. — 2001. — V. 179. — P. 120–135.
- [3] Balinsky A.A., Evans W.D. On the zero modes of Weyl-Dirac operators and their multiplicity // Bull. London Math. Soc. — 2002. — V. 34. — P. 236–242.
- [4] Balinsky A.A., Evans W.D. Zero modes of Pauli and Weyl-Dirac operators // Advances in differential equations and mathematical physics (Birmingham, AL, 2002), 1–9, Contemp. Math., 327, Amer. Math. Soc., Providence, Rhode Island, 2003.
- [5] Balinsky A.A., Evans W.D. Spectral analysis of relativistic operators. — London: Imperial College Press, 2011.
- [6] Balinsky A.A., Evans W.D. and Saitō. Dirac-Sobolev inequalities and estimates for the zero modes of massless Dirac operators // J. Math. Phys. — 2008. — V. 49. — 043514, 10 p.
- [7] Edmunds D.E., Evans W.D. Hardy operators, functions spaces and embeddings. — Springer, 2004.
- [8] Elton D.M. The local structure of zero mode producing magnetic potentials. // Commun. Math. Phys. — 2002. — V. 229. — P. 121–139.
- [9] Loss M., Yau H.T. Stability of Coulomb systems with magnetic fields. III. Zero energy bound states of the Pauli operators // Commun. Math. Phys. — 1986. — V. 104. — P. 283–290.

- [10] Morita T. Non-existence of zero resonances of Pauli operators // *Funkcialaj Ekvacioj*. — 2011. — V. 327. — P. 367–381.
- [11] Saitō Y., Umeda T. The asymptotic limits of zero modes of massless Dirac operators // *Lett. Math. Phys.* — 2008. — V. 83. — P. 97-106.
- [12] Saitō Y., Umeda T. The zero modes and zero resonances of massless Dirac operators // *Hokkaido Math. J.* — 2008. — V. 37. — P. 363–388.
- [13] Saitō Y., Umeda T. Eigenfunctions at the threshold energies of magnetic Dirac operators // *Rev. Math. Phys.* — 2011. — V. 23. — P. 155-178.
- [14] Saitō Y., Umeda T. A sequence of zero modes of Weyl-Dirac operators and an associated sequence of solvable polynomials // In: *Spectral Theory, Function Spaces and Inequalities. — Operator Theory: Advances and Applications*, Birkhauser, 2011. — V. 219. — P. 197–210.
- [15] Stein E.M. *Singular integrals and differential properties of functions*. — Princeton, New Jersey: Princeton University Press, 1970.
- [16] Thaller B. *The Dirac equation*. — Berlin: Springer-Verlag, 1992.

ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ НА СТРУКТУРУ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ШЕВРОННЫХ СМЕКТИКОВ C^*

В. П. Романов¹, С. В. Ульянов^{1,2}, К. Г. Черняк¹

¹Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

²Санкт-Петербургский торгово-экономический институт, Санкт-Петербург, Россия

vromanov@mail.ru

PACS 61.30.Dk, 61.30.Gd, 42.79.Np, 42.70.Df

Проведено теоретическое описание ориентации директора и слоевой структуры шевронного сегнетоэлектрического смектика C^* в ограниченной ячейке во внешнем электрическом поле. В подобных системах, обладающих ориентационной бистабильностью, были рассчитаны пространственные распределения директора. В слабых электрических полях описан переход между двумя равновесными конфигурациями при изменении величины и направления внешнего поля, который имеет характер гистерезиса. Оценена величина порогового поля, приводящего к переориентации директора. Расчеты показали, что изменение слоевой структуры происходит лишь в сильных полях, когда нельзя пренебрегать квадратичным по полю вкладом в свободную энергию. В этом случае была рассчитана пространственная и ориентационная структура шевронного смектика C^* при различных соотношениях между главными значениями тензора диэлектрической проницаемости. Показано, что в некоторых случаях увеличение внешнего поля должно приводить к переходу к структуре «книжной полки».

Ключевые слова: шевронный сегнетоэлектрический смектик, тонкие пленки, бистабильность, пороговые поля.

1. Введение

В последнее время большой интерес проявляется к исследованию структурных изменений сегнетоэлектрических смектиков C^* при различных внешних воздействиях. В зависимости от расположения смектических слоев и ориентации директора на ограничивающих поверхностях в ячейке смектика C^* возникают различные типы структурной и ориентационной упорядоченности. Одной из наиболее интенсивно исследуемых является шевронная структура смектика C^* . Если ориентирующие поверхности расположены поперек смектических слоев в A -фазе (так называемая, структура «книжной полки»), то при понижении температуры и переходе в C^* фазу, возникает шевронная структура, в которой смектические слои располагаются под некоторым углом к ориентирующим поверхностям и имеют излом в середине ячейки. Форма шеврона и ориентация директора в ячейке определяются условиями на ограничивающих поверхностях. Особый интерес вызывает исследование влияния внешних электрических полей на ориентацию директора в таких структурах. Это в значительной мере обусловлено возможностью использования ячеек шевронного смектика C^* в качестве оптических переключателей.

Хотя со времени открытия шевронной структуры в ограниченном смектике C^* прошло более 20 лет [1], описание ориентационной и пространственной структуры подобных систем по-прежнему привлекает внимание исследователей и ещё далеко до завершения. Первая модель для описания шевронной структуры в смектике C^* , помещенном между

двумя плоскопараллельными пластинами была предложена в работе [2]. В этой модели пространственная ориентация директора предполагалась непрерывно меняющейся по направлению от одной ограничивающей плоскости к другой, в то время как угол наклона смектических слоёв скачком менялся в середине между ограничивающими пластинами, и оставался постоянным при приближении к каждой из пластин. В дальнейшем описание ориентационных и трансформационных свойств подобных систем проводилось в основном численными методами с использованием разных моделей для свободной энергии искажения смектика C^* . В работах [3–5] учитывалась энергия искажения поля вектора директора и энергия сжатия-разрежения смектических слоев с жесткими [3, 4] или мягкими [5] условиями на ориентирующих плоскостях. В работе [3] было получено аналитическое решение системы уравнений Эйлера-Лагранжа, написанных в приближении малых углов поворота вектора директора. В работе [4] была учтена возможность отличия угла наклона смектических слоев по отношению к нормали к ориентирующим поверхностям от угла наклона директора относительно нормали к слоям. Также там была предложена итерационная процедура для учета конечной величины угла поворота вектора директора. В ряде работ, исходя из модели Ландау-Де Жена для свободной энергии, [6–11] рассматривалось изменение ориентационной и пространственной упорядоченности в различных смектиках при переходе от геометрии «книжной полки» к шевронному смектику.

Воздействие внешнего электрического поля на шевронный смектик C^* изучалось в ряде работ, из которых укажем лишь некоторые [11–19]. Было обнаружено, что в слабых внешних полях, когда главным является линейный по полю вклад, ответственный за взаимодействие со спонтанной поляризацией [12], не происходит изменений в слоевой структуре шеврона, в то время как ориентация директора существенно зависит от величины и направления внешнего поля [14]. По рассеянию рентгеновских волн на шевронных смектиках C^* в [18] было найдено, что в сильных внешних полях, когда главным становится квадратичный по полю вклад, связанный с анизотропией диэлектрической восприимчивости, происходит разрушение шевронной структуры. Расчеты пространственной ориентации директора в слабых внешних полях выполнялись численными методами в работах [11, 13], на основе модели типа Ландау-Де Жена для свободной энергии. Разрушение шеврона в сильных полях анализировалось в [19], исходя из предложенной авторами полумикроскопической модели, в которой искажение слоевой структуры связывалось с возникновением во внешнем поле крутящего момента, который ориентирует молекулы вдоль направления вектора поляризации. Несмотря на большое внимание к воздействию внешнего электрического поля на структуру шевронного смектика C^* , задача корректного описания эффектов пороговой переориентации и изменения слоевой структуры до конца не решена.

Настоящая работа посвящена детальному исследованию процессов переориентации и изменения структуры смектиков C^* во внешнем электрическом поле. Расчеты выполнены численно путем минимизации свободной энергии системы и там, где это возможно, аналитически. Особое внимание уделяется поведению смектиков C^* вблизи порогов.

Работа построена следующим образом. Во втором разделе приведены основные уравнения, описывающие ориентацию и шевронную структуру смектиков C^* . Третий раздел посвящен анализу равновесной конфигурации шевронной структуры. В четвертом и пятом разделах исследуется ориентация и изменение направления директора во внешнем электрическом поле. В шестом разделе рассмотрена деформация шевронной структуры в сильных полях.

2. Основные уравнения

Шевронная структура смектика C^* возникает из структуры типа «книжной полки» для смектика A при понижении температуры и переходе в C^* фазу. Она образуется вследствие того, что при наклоне молекул длина слоя должна увеличиваться, а ограниченность размеров ячейки и закрепление молекул на границах приводит к изгибу слоев. При этом в системе возможны два типа ориентационного упорядочения молекул, как это показано на Рис. 1.

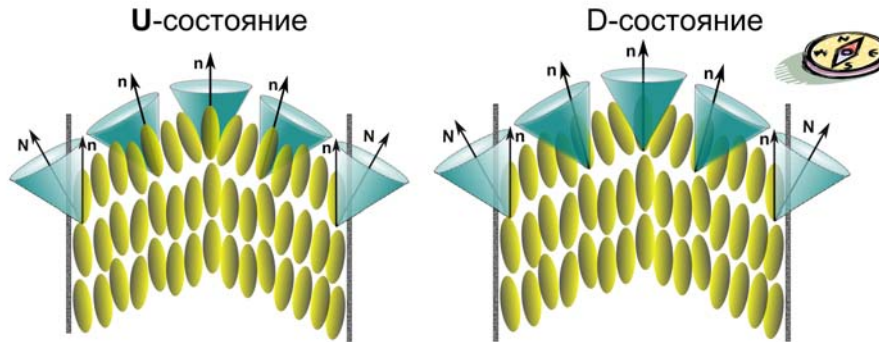


РИС. 1. Шевронная структура смектика C^* . В U -состоянии молекулы наклонены в южном направлении, в D -состоянии в северном.

Будем считать, что система находится в C^* фазе при фиксированной температуре. Для описания деформации слоёв и ориентаций молекул во внешнем электрическом поле представим свободную энергию F смектического ЖК в виде суммы трёх слагаемых. Первое слагаемое будет описывать искажения вектора директора \mathbf{n} , второе — деформации слоёв, третье — взаимодействие с внешним полем, $F = F_{fr} + F_u + F_E$.

Для вклада, отвечающего за искажения директора \mathbf{n} , используем выражение для плотности энергии Франка в одноконстантном приближении:

$$f_{Fr} = \frac{K_{Fr}}{2} [(\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + (\nabla \times \mathbf{n})^2], \quad (1)$$

где K_{Fr} — модуль Франка.

Плотность энергии деформации, связанной с искажением смектических слоёв, имеет вид [3]:

$$f_u = \frac{K_u}{2} (\Delta u)^2 + \frac{B}{8} [(\nabla u)^2 - (\mu\theta)^2]^2, \quad (2)$$

где K_u — модуль упругости, B — модуль сжатия слоёв, θ — угол наклона директора \mathbf{n} относительно нормали к слою \mathbf{N} , u — смещение слоёв относительно плоскости «книжной полки» (Рис. 2), μ — коэффициент, учитывающий отличие угла наклона шеврона δ от угла θ . Обычно его значение порядка 0.85, [5].

Вклад в плотность свободной энергии сегнетоэлектрического жидкого кристалла за счёт энергии внешнего электрического поля определяется двумя слагаемыми. Первое

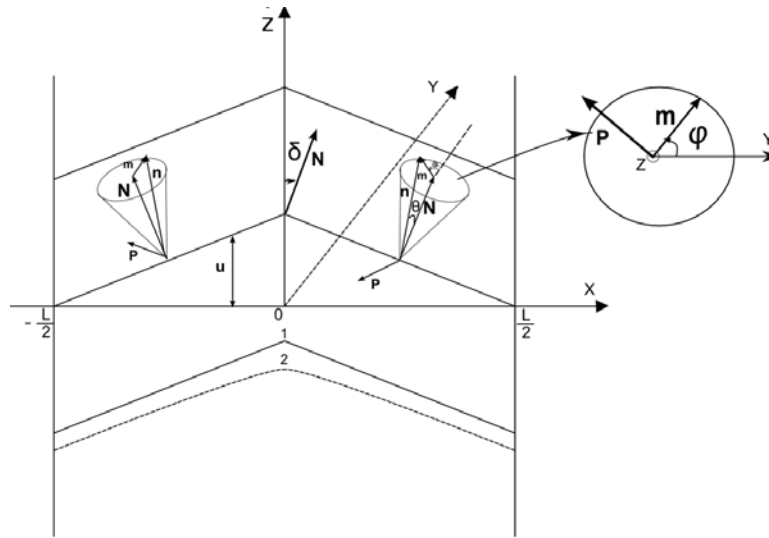


РИС. 2. Система координат для описания шевронной структуры смектика C^* . Здесь m – составляющая вектора директора n , перпендикулярная нормали к слою N , L – расстояние между ориентирующими поверхностями. Цифрами 1 и 2 обозначены формы смектического слоя в первой и второй моделях соответственно. Конусы определяют область разрешенных направлений директора n в каждой точке.

отвечает за взаимодействие внешнего поля со спонтанной поляризацией среды \mathbf{P} , а второе представляет собой энергию диэлектрика во внешнем поле, связанную с появлением индуцированного дипольного момента.

$$f_E = -(\mathbf{P} \cdot \mathbf{E}) - \frac{1}{8\pi}(\mathbf{D} \cdot \mathbf{E}), \quad (3)$$

где $\mathbf{D} = \hat{\epsilon} \cdot \mathbf{E}$, \mathbf{D} – вектор электрической индукции, $\hat{\epsilon}$ – тензор диэлектрической проницаемости.

Тензор $\hat{\epsilon}$ удобно представить в виде суммы проекций на направление вдоль и поперек директора. Для этого введём единичный вектор \mathbf{p} , который ортогонален директору и лежит в плоскости смектического слоя:

$$\mathbf{p} = \frac{[\mathbf{N} \times \mathbf{n}]}{[|\mathbf{N} \times \mathbf{n}|]}, \quad (4)$$

Тогда

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\alpha\beta} &= \varepsilon_1 n_\alpha n_\beta + \varepsilon_2 (\delta_{\alpha\gamma} - n_\alpha n_\gamma) p_\gamma p_\beta + \varepsilon_3 (\delta_{\alpha\gamma} - n_\alpha n_\gamma) (\delta_{\gamma\beta} - p_\gamma p_\beta) \\ &= \varepsilon_3 \delta_{\alpha\beta} + \Delta\varepsilon n_\alpha n_\beta + \partial\varepsilon p_\alpha p_\beta, \end{aligned} \quad (5)$$

где $\Delta\varepsilon = \varepsilon_1 - \varepsilon_3$, $\partial\varepsilon = \varepsilon_2 - \varepsilon_3$. $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3$ – главные значения тензора диэлектрической проницаемости.

Исходя из симметрии, вектор спонтанной поляризации смектика C^* обязан лежать в плоскости смектического слоя [20] аналогично вектору \mathbf{p} (4), тогда:

$$\mathbf{P} = P_0 \mathbf{p}, \quad (6)$$

где P_0 – величина спонтанной поляризации.

Для дальнейшего анализа удобно ввести декартову систему координат, изображенную на Рис. 2. Ось X направлена перпендикулярно ограничивающим поверхностям, а координатная плоскость YZ расположена посередине между ограничивающими поверхностями, причем ось Z направлена вдоль оси легкого ориентирования, определяющей ориентацию директора \mathbf{n} на границе. Поскольку в дальнейшем будут рассматриваться жесткие граничные условия, эффектом киральности будем пренебрегать.

Для описания ориентации директора и структуры шеврона введём угол наклона слоёв δ , относительно плоскости $z = 0$, и азимутальный угол φ , описывающий поворот директора \mathbf{n} вокруг нормали к слою, отсчитываемый от оси Y , (Рис. 2). Тогда для компонент вектора директора получим:

$$\mathbf{n} = (-\sin \theta \cos \delta \sin \varphi + \cos \theta \sin \delta, \sin \theta \cos \varphi, \sin \delta \sin \theta \sin \varphi + \cos \theta \cos \delta). \quad (7)$$

Считая углы θ и δ малыми, имеем [4]

$$\mathbf{n} = (-\theta \sin \varphi + \delta, \theta \cos \varphi, 1). \quad (8)$$

Будем предполагать, что угол θ зависит только от температуры, т.е. в нашей задаче он имеет постоянное значение. Угол наклона слоёв δ связан со смещением слоёв u соотношением:

$$\operatorname{tg} \delta \simeq \delta = -\frac{du}{dx} \quad (9)$$

Нормаль к плоскости слоя удобно выразить через угол δ :

$$\mathbf{N} = (\sin \delta, 0, \cos \delta) \quad (10)$$

Будем считать, что внешнее поле \mathbf{E} направлено по нормали к ограничивающим плоскостям $\mathbf{E} = E(1, 0, 0)$, т.е. вдоль оси X . Тогда полная энергия системы запишется в виде:

$$F = S \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} f dx \quad (11)$$

где $S = L_y L_z$ — площадь ячейки. Плотность энергии дается соотношением

$$f = \frac{K_{Fr}}{2} [\theta^2 (\varphi')^2 - 2\theta \delta' \varphi' \cos \varphi + (\delta')^2] + \frac{K_u}{2} (\delta')^2 + \frac{B}{8} [\delta^2 - (\mu\theta)^2]^2 - P_0 E \cos \delta \cos \varphi - \frac{E^2}{8\pi} [\Delta \varepsilon (-\sin \theta \cos \delta \sin \varphi + \cos \theta \sin \delta)^2 + \partial \varepsilon \cos^2 \varphi \cos^2 \delta] \quad (12)$$

Далее будем считать, что $K_{Fr} = K_u = K$ [21].

Условия на границах имеют вид:

$$\varphi \left(\pm \frac{L}{2} \right) = \pm \frac{\pi}{2}, \quad (13)$$

$$\delta \left(\pm \frac{L}{2} \right) = \pm \mu \theta. \quad (14)$$

Таким образом, для нахождения формы шеврона и ориентации директора следует минимизировать свободную энергию (11) по углам δ и φ с граничными условиями (13) и (14).

3. Равновесные конфигурации шевронной структуры

При отсутствии внешнего поля уравнения Эйлера-Лагранжа, которые описывают систему в равновесном состоянии, имеют вид:

$$\begin{cases} \varphi'' = \frac{1}{\theta} \cos \varphi \delta'' \\ 2\delta'' - \theta(\sin \varphi)'' = -\frac{B\mu^2\theta^2}{2K} \delta \left(1 - \frac{\delta^2}{\mu^2\theta^2}\right) \end{cases} \quad (15)$$

Аналитическое решение системы уравнений (15) с граничными условиями отнесенными на бесконечное расстояние от середины ячейки, было построено в работе [3] в предположении, что угол φ мал. В реальной ограниченной ячейке шевронного смектика C^* это предположение не выполняется, а аналитическое решение этой системы нелинейных уравнений в случае произвольных углов φ пока не найдено. Для решения системы уравнений (15) с граничными условиями (13) и (14) могут быть применены численные методы, однако, удобнее равновесную конфигурацию системы найти с помощью численной минимизации функционала свободной энергии (11). Одним из наиболее эффективных способов решения задачи минимизации является метод сеток, который и был применён для данной системы.

В работе [2] минимизировалась свободная энергия (11) в предположении, что угол наклона слоя $\delta = -\theta$, при $x < 0$ и $\delta = \theta$, при $x > 0$. При этом из условия непрерывности поля директора следовало, что в середине ячейки вектор директора \mathbf{n} должен лежать в плоскости YZ , т.е. $n_x(0) = 0$. Угол φ при этом может принимать только два значения:

$$\varphi(x \rightarrow \pm 0) = \pm\varphi_0 \quad (16)$$

и

$$\varphi(x \rightarrow \pm 0) = \pm(\pi - \varphi_0), \quad (17)$$

где $\varphi_0 = \arcsin(\operatorname{tg} \delta / \operatorname{tg} \theta)$. На Рис. 3 показана область соприкосновения конических поверхностей, на которых может лежать директор на плоскости $x = 0$. Для наглядности картина пересечения конусов представлена с двух разных сторон.

В рамках этой модели система уравнений (15) совместна, если угол φ — мал. При этом он удовлетворяет уравнению $\varphi'' = 0$, т.е. φ является линейной функцией x :

$$\varphi = \frac{2}{L} \left(\frac{\pi}{2} - \varphi_0 \right) x \pm \varphi_0, \quad (18)$$

где верхний знак даёт решение при $x > 0$, а нижний знак при $x < 0$.

Вторая модель, предложенная в работе [3], предполагала гладкое изменение угла наклона δ во всей ячейке, в том числе и в середине. Угол φ предполагался малым и считалось, что $|\delta| = \theta$ и $d\delta/dx = 0$, на достаточном расстоянии от середины шеврона. В этом случае решение для δ имеет вид:

$$\delta(x) = \theta \operatorname{th} \left(\frac{\theta}{2l} x \right) \quad (19)$$

где $l = \sqrt{K/B}$ — параметр, имеющий размерность длины, и по порядку величины совпадающий с расстоянием между смектическими слоями.

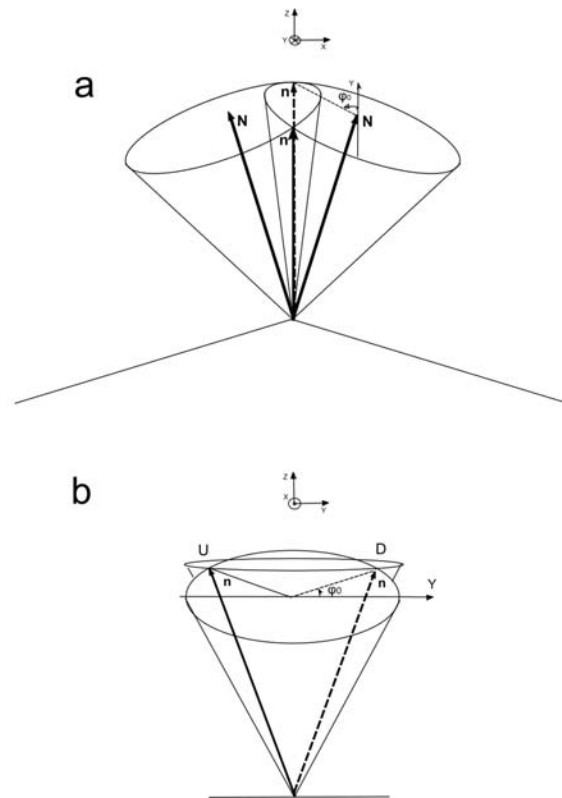


Рис. 3. Разрешенные положения директора \mathbf{n} на вершине шеврона в первой модели шеврона: a — вид вдоль оси Y , b — вид вдоль оси X .

Для ограниченной ячейки подстановка выражения (19) в первое уравнение системы (15) позволяет найти угол $\varphi(x)$, который оказывается равным:

$$\varphi = \operatorname{th} \left(\frac{\theta}{2l} x \right) + \frac{2x}{L} \left(\frac{\pi}{2} - \operatorname{th} \left(\frac{\theta L}{4l} \right) \right) \quad (20)$$

На рисунках 4 и 5 приведена зависимость угла наклона слоёв δ и азимутального угла φ от расстояния до середины ячейки, рассчитанная численно минимизацией выражения (11) в отсутствие внешнего поля с граничными условиями (13) и (14). Там же приведены результаты (18)-(20), полученные в рамках модельных представлений из работ [2, 3]. Из рисунков видно, что гладкое изменение угла наклона слоёв δ в середине ячейки, приводит к гладкому изменению азимутального угла φ .

Обратим внимание на удивительный факт совпадения численных расчетов с результатами, полученными аналитически в предположении малости угла φ .

В расчетах были использованы следующие значения параметров исследуемой системы: $\theta = 15^\circ$, $K = 4 \cdot 10^{-11} \text{ J/m}$, $L = 1 \text{ } \mu\text{m}$, $B = 8 \cdot 10^6 \text{ J/m}^3$, $\mu = 0.85$.

4. Расчет ориентации директора во внешнем электрическом поле

Вначале рассмотрим случай достаточно слабых полей, влияющих на ориентацию директора, и не оказывающих заметного влияния на структуру шеврона. На Рис. 6 приведена зависимость слагаемых плотности свободной энергии, связанных с воздействием внешнего электрического поля, от азимутального угла φ . Значение поля $E = 6 \text{ V}/\mu\text{m}$, выбрано таким образом, что слоевая структура не деформируется, в то время как азимутальный угол поворота директора изменяется значительно. Видно, что наибольший вклад

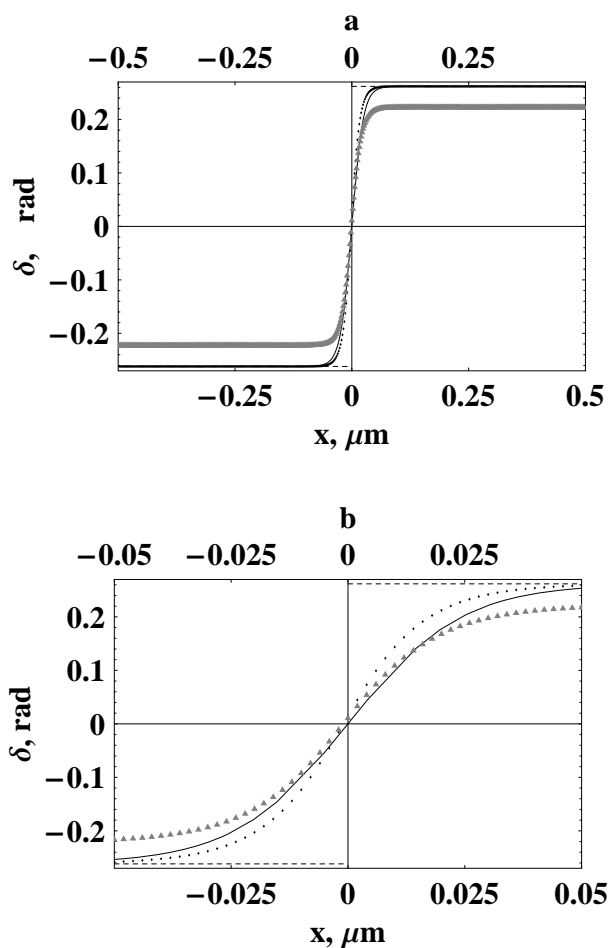


РИС. 4. Пространственные зависимости угла наклона слоёв δ , а — зависимости во всей ячейке, б — в её середине. Сплошной линией обозначена зависимость, соответствующая решению в модели Накагавы [3], пунктирной — в модели Кларка и Райкера [1, 2], точками и треугольниками — результаты проведенных нами расчетов. Точкам соответствует $\mu = 1$, а треугольникам — $\mu = 0.85$.

вносит линейное по полю слагаемое, связанное со спонтанной поляризацией. Вторым, по величине вносимого в энергию вклада, оказывается слагаемое, связанное с поперечным коэффициентом анизотропии диэлектрической проницаемости $\partial\epsilon$. Сравнивая эти два слагаемых, получим оценку для величин полей в которых квадратичными вкладами можно пренебречь.

$$E \ll E_W = \frac{8\pi P_0}{\partial\epsilon} \quad (21)$$

Для типичных значений параметров смектиков C^* имеем: $P_0 = 10^{-4} \text{ C/m}^2$, $\partial\epsilon = 0.2$ [22], в результате получим $E \ll 114 \cdot V/\mu\text{m}$.

Также как и в случае отсутствия поля расчеты будем выполнять для двух моделей описания структуры шеврона. В первой модели [2] единственным варьируемым параметром является угол φ , поскольку угол наклона смектических слоев практически не зависит от

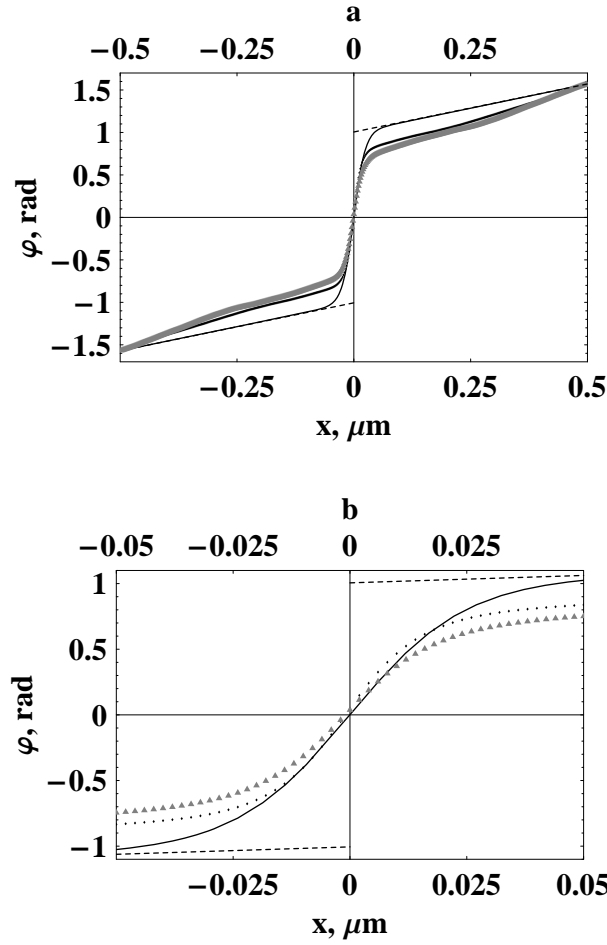


Рис. 5. Пространственные зависимости азимутального угла поворота директора φ , а — зависимости во всей ячейке, б - в её середине. Сплошной линией обозначена зависимость, соответствующая решению в модели Накагавы [3], пунктирной — в модели Кларка и Райкера [1, 2], точками и треугольниками — результаты проведенных нами расчетов. Точкам соответствует $\mu = 1$, а треугольникам — $\mu = 0.85$.

величины слабого внешнего поля. Свободная энергия деформации смектика C^* во внешнем электрическом поле в этом случае может быть записана в виде

$$F = SK\theta^2 \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \left(\frac{1}{2}(\varphi')^2 + a_E \cos \varphi \right) dx \quad (22)$$

где $a_E = P_0 E \cos \delta / (K\theta^2)$. Величина $l_E = 1/\sqrt{|a_E|}$ имеет смысл пространственного масштаба неоднородности распределения директора, вызванного внешним электрическим полем.

Минимизация свободной энергии приводит к следующему уравнению Эйлера-Лагранжа для угла φ :

$$\varphi'' = -a_E \sin \varphi \quad (23)$$

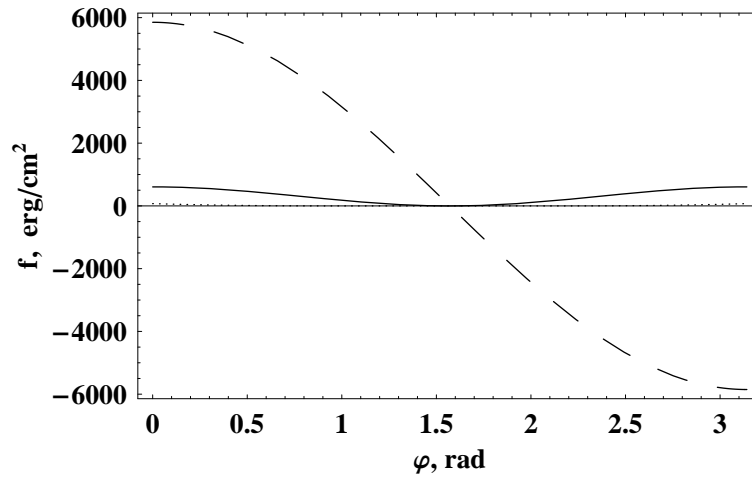


РИС. 6. Сравнение вкладов в плотность свободной энергии, которые связаны с воздействием внешнего электрического поля на жидкий кристалл, при различных значениях азимутального угла φ . Пунктирной линией обозначен вклад от спонтанной поляризации P_0 . Сплошной линией — вклад, связанный с поперечным коэффициентом анизотропии диэлектрической проницаемости $\partial\epsilon$. Линией, состоящей из точек — вклад от продольной анизотропии $\Delta\epsilon$. Зависимости построены при значении внешнего поля $E = 6 \text{ V}/\mu\text{m}$.

с граничными условиями (16) и (17) в середине шеврона и условиями (13) на ориентирующих плоскостях. Уравнение (23) может быть решено аналитически. Возможность существования двух разных направлений ориентации директора в середине шеврона, т.е. при $x = 0$, приводит к двум разным решениям уравнения (23). Будем называть, как это впервые было предложено в [2], D -состоянием поле директора с $n_y > 0$ при $x = 0$, что соответствует условию (16), U -состоянием распределение директора в случае $n_y < 0$ при $x = 0$, что обеспечивается условием (17).

Ориентация вектора директора в области $x \geq 0$, будет описываться уравнением (23) с условием

$$\varphi\left(\frac{L}{2}\right) = \frac{\pi}{2}, \quad (24)$$

на ориентирующей поверхности, и условием в середине шеврона

$$\varphi(0) = \varphi_0, \quad (25)$$

для D -состояния, и

$$\varphi(0) = \pi - \varphi_0, \quad (26)$$

для U -состояния. Уравнение (23) после умножения правой и левой частей на φ' и перехода к новой переменной $\psi = \varphi/2$ приобретает вид:

$$\left((\psi')^2\right)' = -a_E (\sin^2 \psi)'. \quad (27)$$

Внешнее поле будем считать направленным вдоль оси X , т.е. $E > 0$. Интегрируя уравнение (27), и записывая постоянную интегрирования в виде a_E/k^2 , имеем:

$$(\psi')^2 = \frac{a_E}{k^2} (1 - k^2 \sin^2 \psi). \quad (28)$$

Интегрирование этого уравнения позволяет выразить пространственную зависимость угла φ через нормальный эллиптический интеграл Лежандра первого рода [23, 24]

$$F(\psi, k) = \int_0^\psi \frac{dt}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 t}}. \quad (29)$$

Зависимость азимутального угла φ от координаты x в неявном виде задается уравнениями

$$F\left(\frac{\varphi}{2}, k_0\right) - F\left(\frac{\pi}{4}, k_0\right) = \pm \sqrt{\frac{a_E}{k_0^2}} \left(x - \frac{L}{2}\right), \quad (30)$$

где верхний знак в правой части соответствует D -состоянию, а нижний — U -состоянию. Параметр k_0 находится из граничных условий (25) и (26), которые приобретают вид

$$F\left(\frac{\varphi_0}{2}, k_0\right) - F\left(\frac{\pi}{4}, k_0\right) = -\frac{L}{2} \sqrt{\frac{a_E}{k_0^2}}, \quad (31)$$

для D -состояния, и

$$F\left(\frac{\pi - \varphi_0}{2}, k_0\right) - F\left(\frac{\pi}{4}, k_0\right) = \frac{L}{2} \sqrt{\frac{a_E}{k_0^2}}, \quad (32)$$

для U -состояния.

Если внешнее поле меняет направление на противоположное ($E < 0$), то при $x \geq 0$ ориентация директора задается уравнениями

$$F\left(\frac{\pi - \varphi}{2}, k_0\right) - F\left(\frac{\pi}{4}, k_0\right) = \pm \sqrt{\frac{|a_E|}{k_0^2}} \left(\frac{L}{2} - x\right), \quad (33)$$

где, как и в (30), верхний знак в правой части соответствует D -, а нижний U -состоянию. Параметр k_0 находится из условий

$$F\left(\frac{\pi - \varphi_0}{2}, k_0\right) - F\left(\frac{\pi}{4}, k_0\right) = \frac{L}{2} \sqrt{\frac{|a_E|}{k_0^2}}, \quad (34)$$

для D -состояния, и

$$F\left(\frac{\varphi_0}{2}, k_0\right) - F\left(\frac{\pi}{4}, k_0\right) = -\frac{L}{2} \sqrt{\frac{|a_E|}{k_0^2}}, \quad (35)$$

для U -состояния.

В области $-L/2 \leq x < 0$ распределение угла φ можно найти, пользуясь нечетностью его зависимости от x :

$$\varphi(-x) = -\varphi(x). \quad (36)$$

Результаты вычислений по формулам (30), (33) и (22) приведены на Рис. 7 и 8. На Рис. 7 показано распределение ориентаций директора, задаваемое азимутальным углом φ при разных значениях приложенного внешнего поля для U - и D -состояний для пленки толщиной $L = 1 \mu m$. Обратим внимание, что скачок азимутального угла φ при переходе с одной части шеврона на другую обеспечивает непрерывное изменение директора (Рис. 3).

Вторая модель, в которой как вектор директора \mathbf{n} , так и угол наклона слоев δ , предполагаются гладкими функциями координат, может быть проанализирована численно.

Результаты расчётов представлены на Рис. 8. Здесь показана зависимость азимутального угла φ от координаты x при разных значениях величины внешнего электрического поля E . Так же как и в первой модели можно выделить D - и U -состояния, только с углом $\varphi(0) = 0$ или $\varphi(0) = \pi$. Проведенные расчеты подтвердили, что зависимость угла δ , определяющего наклон смектического слоя, от расстояния до середины пленки в рассматриваемом

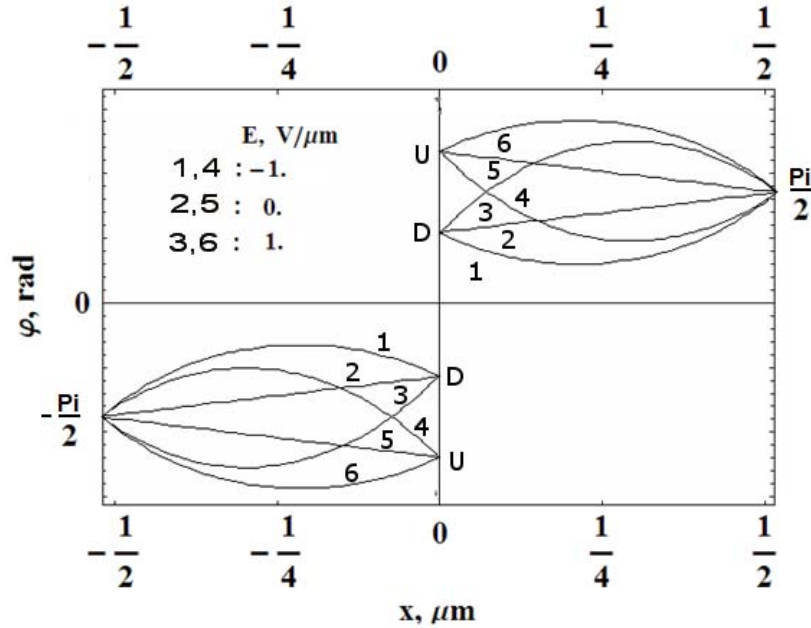


Рис. 7. Пространственные зависимости азимутального угла φ для D - и U -состояний при разных значениях напряженности внешнего электрического поля, найденная для модели Кларка и Райкера (22). Для D -состояния: 1 – $E = -1 \text{ V}/\mu\text{m}$, 2 – $E = 0 \text{ V}/\mu\text{m}$, 3 – $E = 1 \text{ V}/\mu\text{m}$. Для U -состояния: 4 – $E = -1 \text{ V}/\mu\text{m}$, 5 – $E = 0 \text{ V}/\mu\text{m}$, 6 – $E = 1 \text{ V}/\mu\text{m}$.

интервале значений электрического поля не оказывает влияние на форму шеврона, а влияет лишь на азимутальный угол φ , определяющего направление директора.

5. Переключение во внешнем электрическом поле

Для того, чтобы выяснить, какое из распределений ориентации директора, U или D , более выгодно при разных направлениях и величинах внешнего поля, была вычислена по формуле (22) свободная энергия системы. Результаты представлены на Рис. 9. Здесь изображена зависимость изменения свободной энергии системы, отнесенной к единице площади ячейки

$$\Delta G = (F(E) - F(0))/S \tag{37}$$

от величины и направления внешнего поля E для U - и D -состояний. Видно, что при $E > 0$ энергетически более выгодным будет U -состояние, а при $E < 0$ выгоднее D -состояние.

Исследование второй вариации

$$\delta^2 F = SK\theta^2 \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} ((\delta\varphi')^2 - a_E \cos\varphi(\delta\varphi)^2) dx \tag{38}$$

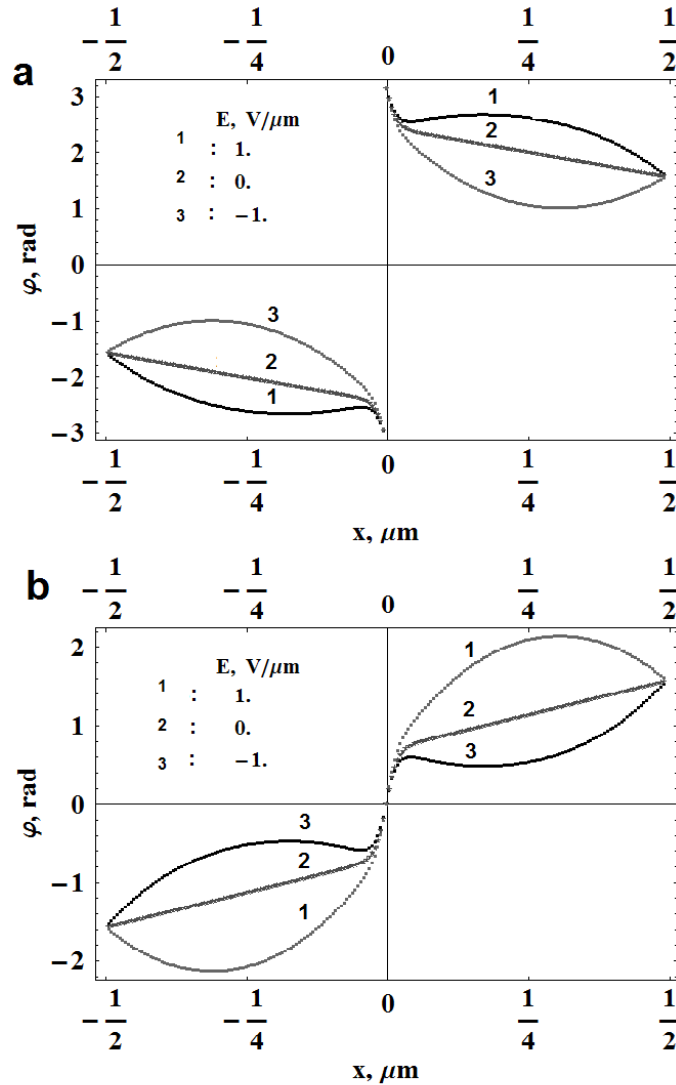


РИС. 8. Пространственные зависимости азимутального угла φ при разных значениях напряженности внешнего электрического поля найденная во второй модели шеврона: a — для U -состояния, b — для D -состояния. В обоих состояниях: 1 — $E = 1 \text{ V}/\mu\text{m}$, 2 — $E = 0 \text{ V}/\mu\text{m}$, 3 — $E = -1 \text{ V}/\mu\text{m}$.

показывает, что оба решения, даваемые выражениями (30) и (33), и описывающие D - и U -состояния, являются устойчивыми как при $E > 0$, так и при $E < 0$. Это означает, что даже энергетически менее выгодное состояние может существовать, как метастабильное. В действительности при переключении направления внешнего поля должен иметь место гистерезис [25]. Значение коэрцитивного поля E_{th} , при котором происходит изменение направления директора в центре шеврона при переходе из D -состояния в U -состояние, или наоборот, определяется величиной потенциального барьера между этими состояниями. При повороте директора, например, из D - в U -состояние, система проходит через потенциальный барьер. Величину этого барьера можно оценить, вычислив энергию системы, у которой директор в центре шеврона лежит в плоскости XZ . Однако, вычислить эту энергию, оставаясь в рамках первой модели, невозможно, поскольку как только в центре шеврона, т.е. при $x = 0$, директор отклоняется от плоскости YZ , так сразу в центре шеврона возникает

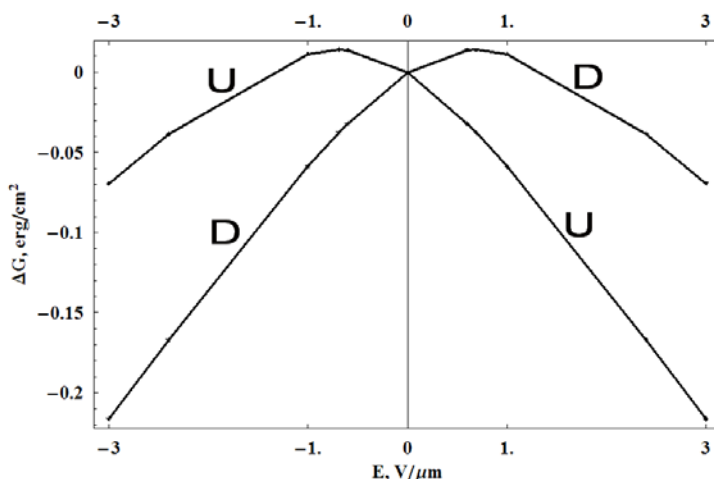


Рис. 9. Зависимость величины ΔG от напряженности внешнего электрического поля, для модели с острым углом

дисклинация, и при нахождении высоты потенциального барьера необходимо учитывать энергию этой дисклинации. Избежать эту трудность можно в рамках второй модели.

Предположим, что изначально система находится в D -состоянии. При переходе в состояние U , значение угла φ в середине ячейки изменится на 180° . При этом директор в вершине шеврона поворачиваться во конусу, проходя через энергетически менее выгодные состояния по сравнению с U и D . Среди этих состояний будет самое невыгодное, которое и определит высоту потенциального барьера W_{max} .

Для того чтобы вычислить величину W_{max} , найдём зависимость полной энергии системы F от положения азимутального угла в середине ячейки $\varphi(0)$. Задачу минимизации функционала (11) с фиксированной ориентацией азимутального угла поворота директора не только на краях, но и в середине ячейки, можно решить отдельно для каждой из областей $x \leq 0$ и $x \geq 0$. Для этого полную энергию системы удобно представить в виде суммы вкладов от половин ячейки с $x \leq 0$ и $x \geq 0$:

$$F = S \int_{-\frac{l}{2}}^0 f(\varphi_-, \delta_-) dx + S \int_0^{\frac{l}{2}} f(\varphi_+, \delta_+) dx, \quad (39)$$

где φ_+, δ_+ соответствуют пространственным распределениям азимутального угла поворота директора и угла наклона смектического слоя в области $x \geq 0$, а φ_- и δ_- распределение тех же углов в области $x \leq 0$.

В результате численной минимизации функционала свободной энергии (39), которая проводилась по изложенной выше схеме, были найдены равновесные конфигурации φ_+, δ_+ и φ_-, δ_- для разных значений азимутального угла в середине ячейки.

На Рис. 10 изображена вычисленная зависимость свободной энергии F , отнесенной к единице площади ячейки, от значения азимутального угла в середине пленки. Для удобства значения F отсчитываются от величины свободной энергии в D - или U -конфигурации, т.е. $W(\varphi(0)) = \frac{F_{\varphi(0)} - F_0}{S}$. Приведённая кривая $W(\varphi(0))$ имеет вид потенциального барьера, который надо преодолеть системе при переходе из D - в U -состояние или наоборот. Очевидно, что высота потенциального барьера определяется из соотношения

$$W_{max} = \frac{F_{\frac{\pi}{2}} - F_0}{S}, \quad (40)$$

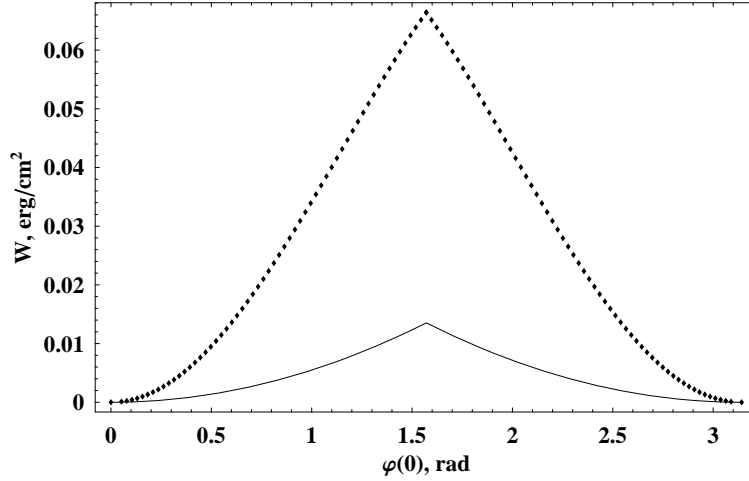


Рис. 10. Зависимость свободной энергии жидкого кристалла W , от значения азимутального угла поворота директора в середине «шеvronа» $\varphi(0)$. Прерывистая линия — результаты проведенных нами расчетов, сплошная — результаты расчетов в рамках линейризованной модели Накагавы [3]

где $F_{\frac{\pi}{2}}$ — соответствует свободной энергии системы с азимутальным углом в середине ячейки $\varphi(0) = \pi/2$, F_0 — свободная энергия начального состояния, U или D.

Отметим, что барьер не преодолим за счёт тепловых флуктуаций, вследствие которых директор способен отклониться на углы порядка $5-6^\circ$ [20].

Ранее уже отмечалось, что аналитические зависимости для углов δ и φ (19), (20), рассчитанные в приближении малых углов, удивительным образом хорошо согласуются с результатами точных численных расчетов, даже в области больших углов φ . В рамках этого приближения мы рассчитали высоту и форму потенциального барьера. Зависимость свободной энергии от угла $\varphi(0)$ имеет вид:

$$F^A(\varphi(0)) = \frac{K\theta^2(3l(4\varphi(0)^2 + (\pi - 2\mu\theta)^2) - L\mu^3\theta(2 + \frac{1}{\text{ch}(\frac{\mu\theta L}{4l})}) \text{th}(\frac{\mu\theta L}{4l}))}{6lL} \quad (41)$$

На Рис. 10 также приведен вид потенциального барьера, рассчитанного в рамках этого приближения.

$$W^A(\varphi(0)) = \frac{F^A(\varphi(0)) - F^A(0)}{S} = \frac{2K\pi^2\theta^2\varphi(0)^2}{LS} \quad (42)$$

Видно, что упрощенная модель (19), (20) даёт существенно другую высоту потенциального барьера. Это связано с тем, что в задаче определения высоты и формы барьера угол φ никак не может считаться малым.

Пороговое поле E_{th} может быть оценено из условия равенства полной энергии взаимодействия с электрическим полем, отнесенную к единице площади ячейки:

$$F_E = \int_{-L/2}^{L/2} P_0 E \cos \varphi \cos \delta \, dx$$

энергетическому барьеру W_{max} , найденному выше (40). При этом, исходя из общей формулы для определения свободной энергии (39), очевидно, что высота барьера есть функция

от толщины ячейки, т.е. $W_{max} = W_{max}(L)$. Оценив интеграл в полевом вкладе в свободную энергию максимальным значением, получим:

$$E_{th} = \frac{W_{max}(L)}{LP_0 \cos(\mu\theta)}. \quad (43)$$

Очевидно, что пороговое значение поля зависит как от параметров жидкого кристалла, так и от толщины пленки L . Для определения зависимости $E_{th}(L)$ задачу минимизации свободной энергии (39) необходимо решить для разных толщин пленки и фиксированных значениях азимутального угла φ не только на ограничивающих поверхностях, но и в середине пленки:

$$\begin{aligned} \varphi_{-, \frac{\pi}{2}} \left(-\frac{L}{2} \right) &= -\frac{\pi}{2}, & \varphi_{-, \frac{\pi}{2}}(0) &= -\frac{\pi}{2}, & \varphi_{+, \frac{\pi}{2}}(0) &= -\frac{\pi}{2}, & \varphi_{+, \frac{\pi}{2}} \left(\frac{L}{2} \right) &= \frac{\pi}{2}, \\ \varphi_{-, 0} \left(-\frac{L}{2} \right) &= -\frac{\pi}{2}, & \varphi_{-, 0}(0) &= 0, & \varphi_{+, 0}(0) &= 0, & \varphi_{+, 0} \left(\frac{L}{2} \right) &= \frac{\pi}{2}, \end{aligned} \quad (44)$$

где индексы $+$ и $-$ соответствуют левой и правой половинам пленки, индекс 0 — начальной, U - или D -конфигурации, а индекс $\pi/2$ соответствует конфигурации с наименее выгодным значением азимутального угла поворота директора в середине пленки. Для угла δ , как и прежде, использовались граничные условия (14). В результате решения задачи минимизации функционала свободной энергии (39) было обнаружено, что форма шеврона, т.е. распределение угла δ не зависит от значения азимутального угла φ в середине ячейки. Поэтому выражение для высоты потенциального барьера (40) можно представить в следующем виде:

$$\begin{aligned} W_{max}(L) &= \frac{SK}{2} \times \\ &\times \left\{ \int_{-\frac{L}{2}}^0 \left(\theta^2 \left((\varphi'_{-, \frac{\pi}{2}})^2 - (\varphi'_{-, 0})^2 \right) - 2\theta \left(\delta'_{-, \frac{\pi}{2}} \varphi'_{-, \frac{\pi}{2}} \cos \varphi_{-, \frac{\pi}{2}} - \delta'_{-, 0} \varphi'_{-, 0} \cos \varphi_{-, 0} \right) \right) dx + \right. \\ &\left. + \int_0^{\frac{L}{2}} \left(\theta^2 \left((\varphi'_{+, \frac{\pi}{2}})^2 - (\varphi'_{+, 0})^2 \right) - 2\theta \left(\delta'_{+, \frac{\pi}{2}} \varphi'_{+, \frac{\pi}{2}} \cos \varphi_{+, \frac{\pi}{2}} - \delta'_{+, 0} \varphi'_{+, 0} \cos \varphi_{+, 0} \right) \right) dx \right\}. \end{aligned} \quad (45)$$

Рассчитанная по формуле (45) высота потенциального барьера позволила найти зависимость порогового поля E_{th} от толщины пленки. Результаты расчетов представлены на Рис. 11. Прежде всего, следует отметить, что поле E_{th} намного быстрее убывает с ростом L , чем в эффекте Фредерикса, где $E_{th} \sim 1/L$. Особенно ясно это видно из зависимости порогового напряжения U_{th} от толщины пленки. В отличие от эффекта Фредерикса, где $U_{th} = const$, здесь явно видно монотонное убывание порогового напряжения с ростом толщины пленки. Отметим, что согласно формуле (43) такой тип зависимости от толщины пленки имеет и высота потенциального барьера $W_{max}(L)$. Убывание W_{max} с ростом L обусловлено уменьшением относительного вклада области излома шеврона в середине ячейки в свободную энергию.

На Рис. 12 построена зависимость свободной энергии ΔG , вычисленной по формулам (11), (12) и (37), от величины и направления приложенного поля E для U - и D -состояний. Расчеты проведены для пленки толщиной $1 \mu m$. На графике показаны значения порогового поля $\pm E_{th}$ при которых происходит переход из U - в D -состояние и наоборот. Видно, что полученная кривая имеет вид петли гистерезиса.

На Рис. 13 показано, как изменяется пространственное распределение азимутального угла φ при изменении направления внешнего поля и преодолении порогового значения напряженности электрического поля E_{th} при переходе из U - в D -состояние. Сравним

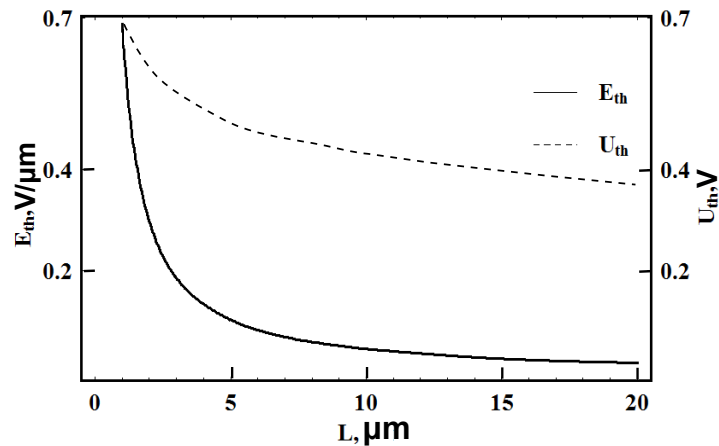


Рис. 11. Зависимость порогового поля E_{th} (сплошная кривая) и порогового напряжения U_{th} (пунктирная кривая) от толщины плёнки L .

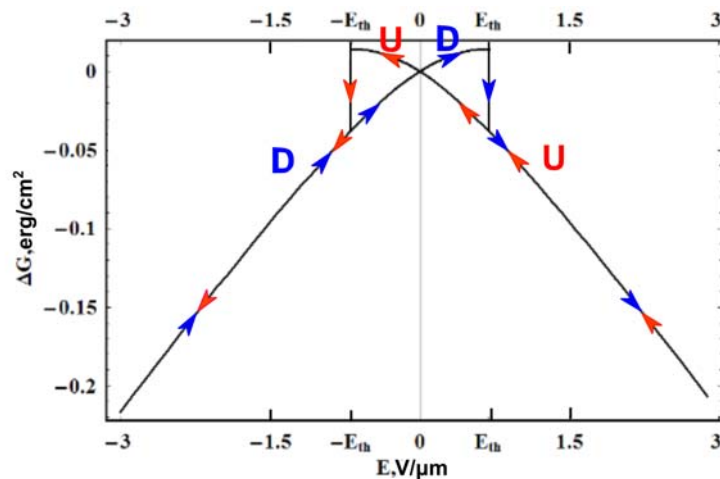


Рис. 12. Переход между U - и D -состояниями при изменении направления и величины внешнего электрического поля.

значение для порогового поля E_{th} , вычисленное по формуле (43), со значением, полученными в работе [13] для другой модели свободной энергии. Для расчетов были выбраны, используемые авторами [13], значения параметров системы: $L = 2 \mu m$, $\theta = 20^\circ$, $P_0 = 10^{-4} C/m^2$, $B = 10^6 J/m^3$. В соответствии с оценкой (43) было найдено значение порогового поля $E_{th} = 0.39 V/\mu m$, которое согласуется с величиной, найденной в работе [13] $E_{th} = 0.45 V/\mu m$. Приведённая оценка показывает, что пороговое напряжение необходимое для бистабильного переключения ячейки лежит в пределах 1 V.

6. Деформация слоевой структуры во внешнем электрическом поле

В соответствии с данными экспериментов [15, 16, 18], деформация слоевой структуры смектика C^* , происходит в очень сильных внешних электрических полях. Величины таких полей значительно превышают значение поля E_W , которое было приведено в оценке (21). Поэтому, кроме линейного по полю вклада, в свободной энергии для описания деформации слоевой структуры необходимо учитывать квадратичный вклад, связанный с

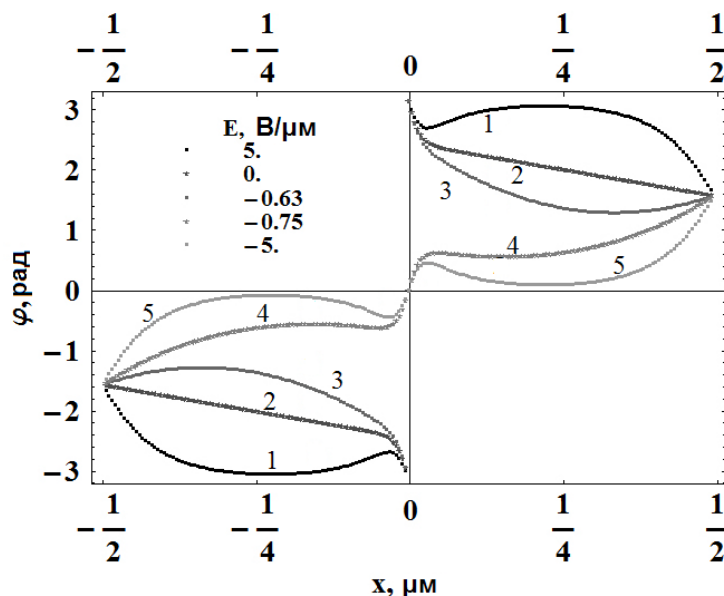


Рис. 13. Пространственные зависимости азимутального угла φ при переходе из U - в D -состояние, вызванном изменением величины и направления внешнего электрического поля: 1 — $E = 5 \text{ V}/\mu\text{m}$, 2 — $E = 0 \text{ V}/\mu\text{m}$, 3 — $E = -0.63 \text{ V}/\mu\text{m}$, 4 — $E = -0.75 \text{ V}/\mu\text{m}$, 5 — $E = -5 \text{ V}/\mu\text{m}$.

анизотропией диэлектрической проницаемости среды. Таким образом, свободная энергия системы описывается выражениями (11), (12).

Характер деформации слоевой структуры в электрическом поле зависит от соотношения между главными значениями тензора диэлектрической проницаемости $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3$ т.е. от того, какой знак имеют параметры анизотропии $\partial\varepsilon, \Delta\varepsilon$ в выражении (5). Всего возможно восемь различных вариантов комбинаций из $\Delta\varepsilon > 0, \Delta\varepsilon < 0, \Delta\varepsilon = 0$ и $\partial\varepsilon > 0, \partial\varepsilon < 0, \partial\varepsilon = 0$ (случай $\Delta\varepsilon = \partial\varepsilon = 0$ относится к изотропной среде).

Обратим внимание, что в сильных полях распределение углов δ и φ зависит от знаков параметров диэлектрической анизотропии. В частности, в случае $\partial\varepsilon < 0$ директор во всей ячейке ориентирован в плоскости XZ . При этом угол наклона смектических слоев может увеличиваться. Это, в частности, наблюдается для случая $\partial\varepsilon < 0$ и $\Delta\varepsilon > 0$.

Для одноосного жидкого кристалла с $\partial\varepsilon = 0$ распределение по углу φ не достигает предельных значений при выбранном значении поля.

Наиболее интересным представляется случай $\partial\varepsilon > 0$ и $\Delta\varepsilon \leq 0$, когда директор лежит в плоскости YZ , что соответствует углу $\varphi = 0$. При этих значениях анизотропии наблюдается переход от «шевронной» структуры к структуре «книжной полки». Это изменение слоевой структуры может быть описано аналитически.

Предполагая по аналогии с методом, предложенным в работе [3], что границы ячейки отнесены на бесконечность, подставим в выражение (11) $\varphi = 0$. Учитывая малость угла δ , получим следующие выражения для плотности свободной энергии:

$$f = K(\delta')^2 + \frac{B}{8}\delta^4 - \frac{B\alpha}{4}\delta^2, \quad (46)$$

где

$$\alpha = \mu^2\theta^2 - \frac{1}{B} \left[2P_0E + \frac{E^2}{2\pi}(\partial\varepsilon - \cos^2\theta\Delta\varepsilon) \right]. \quad (47)$$

Минимизация свободной энергии с плотностью (46) приводит к следующему уравнению:

$$\frac{d^2\delta}{d\xi^2} + \frac{\delta}{4}(\alpha - \delta^2) = 0, \quad (48)$$

где $\xi = x/l$. Это уравнение имеет два решения:

$$\delta(\xi) = \sqrt{\alpha} \operatorname{th} \left(\sqrt{\frac{\alpha}{2}} \xi \right), \quad (49)$$

$$\delta(\xi) = 0. \quad (50)$$

Из анализа плотности свободной энергии (46) следует, что для значений поля E при которых $\alpha > 0$, решением уравнения (48) будет выражение (49). Если же $\alpha < 0$, то минимум свободной энергии достигается при втором решении (50). Эти решения позволяют найти выражение для свободной энергии во внешнем электрическом поле. Для $\alpha > 0$ свободная энергия может быть найдена интегрированием (46) с пространственным распределением угла наклона слоев из уравнения (49). Эта зависимость имеет вид:

$$F = Sl \frac{B\sqrt{2}}{12} \alpha^{3/2} \left\{ 5 \operatorname{th} \left(\frac{L}{2l} \sqrt{\frac{\alpha}{2}} \right) \left[\operatorname{sech}^2 \left(\frac{L}{2l} \sqrt{\frac{\alpha}{2}} \right) + 2 \right] - 3 \left(\frac{L}{2l} \sqrt{\frac{\alpha}{2}} \right) \right\}. \quad (51)$$

В случае $\alpha < 0$ величина свободной энергии равна нулю.

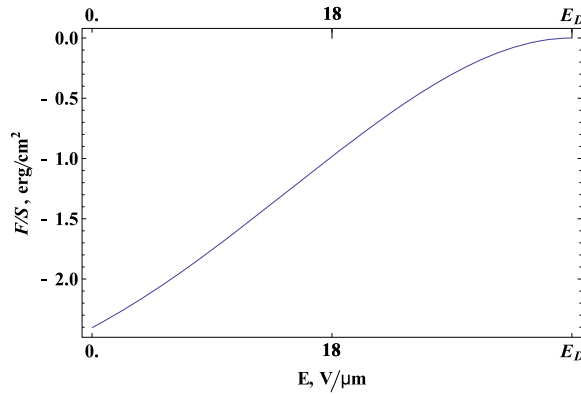


Рис. 14. Зависимость свободной энергии от внешнего электрического поля. При вычислениях были использованы следующие значения параметров: $K = 0.15 \cdot 10^{-9} \text{ N}$, $B = 0.5 \cdot 10^6 \text{ J/m}^3$, $P_0 = 10^{-4} \text{ C/m}^2$, $\partial\epsilon = 0.3$, $\Delta\epsilon = -1.03$, $\theta = \pi/9$, $\mu = 0.9$, $L = 4 \text{ μm}$.

Зависимость свободной энергии F от внешнего электрического поля представлена на Рис. 14. Из графика видно, что для небольших по величине полей «шеvronная» структура оказывается энергетически более выгодной. При повышении величины внешнего поля свободная энергия «шеvronного» смектика S^* возрастает и при некотором значении E_D достигает значения $F = 0$. С этого момента структура «книжной полки» с $\delta = 0$ становится предпочтительней. Как следует из выражения (51), равенство $F = 0$ возможно не только в случае $\alpha = 0$, но и при некотором положительном значении параметра α , для которого

выражение в фигурных скобках в (51) обращается в ноль. Это в свою очередь означает, что в соответствии с формулой (49) переход от структуры «шеврона» к «книжной полке» носит пороговый характер. Для того, чтобы найти значение параметра $\alpha = \alpha_D$ и пороговое поле E_D , заметим, что выражение в фигурных скобках в (51) обращается в ноль при больших значениях аргументов гиперболических функций. В этом случае можно заменить гиперболические функции их асимптотиками и тогда:

$$\alpha_D = \frac{800 l^2}{9 L^2}. \quad (52)$$

Это величина оказывается крайне малой и поэтому пороговое поле E_D может быть оценено из уравнения (47), в котором параметр α_D можно положить равным нулю:

$$E_D = \frac{-2\pi P_0 + \sqrt{4\pi^2 P_0^2 + 2\pi\mu^2\theta^2 B(\partial\varepsilon - \Delta\varepsilon \cos^2 \theta)}}{\partial\varepsilon - \Delta\varepsilon \cos^2 \theta}. \quad (53)$$

Переход от структуры «шеврона» к структуре «книжной полки» проходит в два этапа. На первом угол наклона слоевой структуры δ плавно уменьшается с ростом величины внешнего электрического поля. Когда поле достигает порогового значения E_D угол понижается до критической величины $\delta_D(\xi)$, описываемой уравнением (49) с параметром $\alpha = \alpha_D$. На втором этапе происходит ступенчатое уменьшение угла δ до нулевого значения при увеличении поля. Из выражений (49) и (52) следует, что пространственное распределение $\delta_D(\xi)$ зависит только от упругих характеристик жидкого кристалла и толщины ячейки.

На Рис. 15 показаны изменения «шеvronной» структуры для двух наборов параметров. Рисунок 15а демонстрирует результаты вычислений для систем с коротким шагом спирали и большим значением спонтанной поляризации P_0 , которые были исследованы в серии экспериментов, описанных в работе [18]. На Рис. 15b показаны результаты аналогичных вычислений, но для систем с длинным шагом спирали и низким значением спонтанной поляризации P_0 , как это было исследовано экспериментально в работе [15]. Характер деформации слоев в сильных полях качественно согласуется с результатами экспериментов [15, 18]. Величина порогового поля, наблюдаемая в экспериментах, значительно ниже расчетной. Это несоответствие может быть вызвано тем, что вычисления основывались на идеальной модели «шеvronной» структуры с жесткими условиями на границах, тогда как образцы исследуемые в эксперименте обычно содержат различные типы дефектов.

7. Заключение

Проведены расчеты ориентационной и пространственной структуры шевронного смектика C^* во внешнем электрическом поле. Описание проводилось для двух моделей шеврона с резким (22) и плавным (11), (12) изменение угла наклона слоев в середине ячейки. В результате проведенного анализа были получены следующие результаты.

Было обнаружено, что в отсутствии внешнего электрического поля предложенные ранее модели [3,4], в которых система уравнений (15) была линеаризована по азимутальному углу φ , дают достаточно хорошее описание бистабильной ориентационной структуры, даже для случая, когда угол φ не является малым.

В слабых внешних электрических полях было найдено аналитическое решение для распределения азимутального угла φ ориентации директора для модели [1,2] и численное решение для модели [3,4]. Оба решения были распространены на случай ограниченной ячейки.

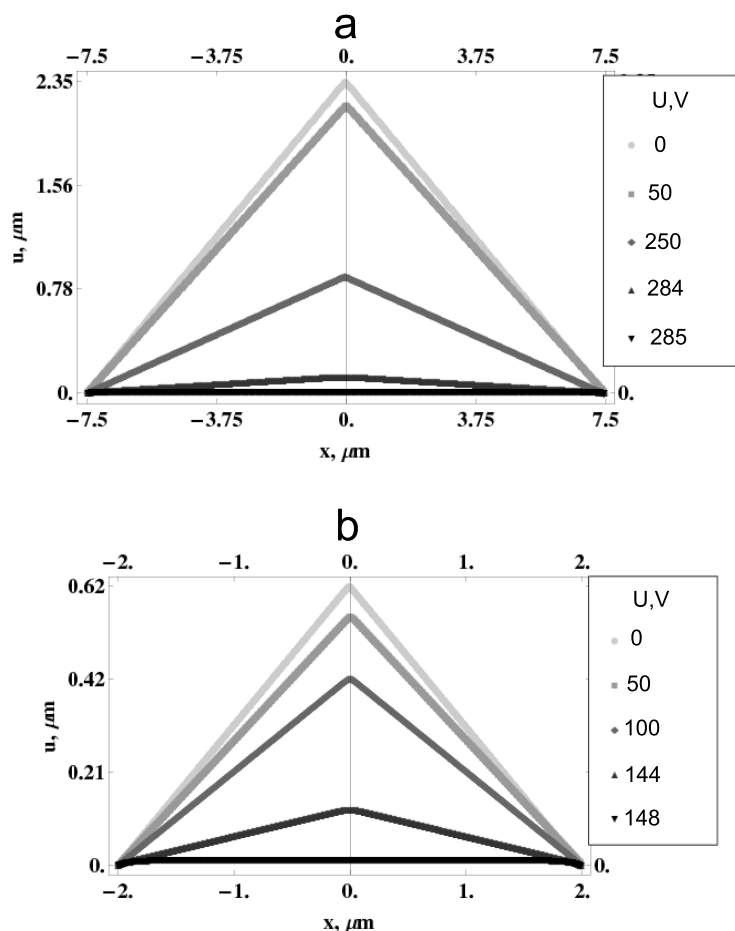


РИС. 15. Переход от «шевронной» структуры к структуре «книжной полки» под действием сильного внешнего электрического поля. На графиках приведены пространственные зависимости смещения слоев u , при различных значениях внешнего поля. При вычислениях были использованы следующие значения параметров: $K = 0.15 \cdot 10^{-9} \text{ N}$, $B = 0.5 \cdot 10^6 \text{ J/m}^3$, $\partial\epsilon = 0.3$, $\Delta\epsilon = -1.03$, $\theta = \pi/9$, $\mu = 0.9$. В части а: $P_0 = 11 \cdot 10^{-4} \text{ C/m}^2$, $L = 15 \text{ }\mu\text{m}$, в части б: $P_0 = 10^{-4} \text{ C/m}^2$, $L = 4 \text{ }\mu\text{m}$.

Была найдена зависимость свободной энергии системы от величины и направления внешнего электрического поля. Исследована форма и высота потенциального барьера, который должна преодолеть система при переходе из одного стабильного состояния в другое. Получена оценка для пороговой напряженности электрического поля, при которой происходит переход от одного стабильного распределения директора к другому при изменении направления внешнего поля.

В сильных внешних полях в системах с различными соотношениями между главными значениями тензора диэлектрической проницаемости найдены распределения ориентации директора и угла наклона шеврона по толщине ячейки. Показано, что при некоторых соотношениях между главными значениями тензора диэлектрической проницаемости, увеличение напряженности электрического поля приводит к переходу от шевронной структуры

к структуре «книжной полки». Получена оценка для пороговой напряженности внешнего поля, при которой происходит этот переход.

Проведенные расчеты позволили количественно описать ориентационные и структурные изменения в сегнетоэлектрическом шевронном смектике S^* во внешнем электрическом поле, что является важным для разработки оптических переключателей на шевронных ячейках.

Работа выполнена при поддержке гранта 0.37.138.2011 по программе развития СПбГУ.

Литература

- [1] Rieker T.P., Clark N.A., Smith G.S., Parmar D.S., Sirota E.B., Safinya C.R. // *Phys. Rev. Lett.* — 1987. — V. 59. — P. 2658.
- [2] Clark N.A., Rieker T.P. // *Phys. Rev. A* — 1988. — V. 37. — P. 1053 .
- [3] Nakagawa M. // *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* — 1989. — V. 174. — P. 65 .
- [4] Limat L. // *J. Phys. II.* — 1995. — V. 5. — P. 803 .
- [5] Diaz A., McKay G., Mottram N. // *Phys. Rev. E* — 2007. — V. 76. — 041705 .
- [6] Kralj S., Sluckin T.J. // *Phys. Rev. E.* — 1994. — V. 50. — P. 2940.
- [7] Vaupotic N. , Kralj S., Copic M., Sluckin T.J. // *Phys. Rev. E.* — 1996. — V. 54. — P. 3783 .
- [8] Vaupotic N. , Copic M. // *Phys. Rev. E.* — 2003. — V. 68. — 061705 .
- [9] Shalaginov A.N., Hazelwood L.D., Sluckin T.J. // *Phys. Rev. E.* — 1998. — V. 58. — P. 7455 .
- [10] Shalaginov A.N., Hazelwood L.D., Sluckin T.J. // *Phys. Rev. E.* — 1999. — V. 60. — P. 4199 .
- [11] Beldon S.M., Mottram N.J., Elston S.J. // *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* — 2001. — V. 365. — P. 729.
- [12] Willis P.C., Clark N.A., Safinya C.R. // *Liq. Cryst.* — 1992. — V. 11. — P. 581.
- [13] Vaupotic N., Grubelnik V., Copic M. // *Phys. Rev. E.* — 2000. — V. 62. — P. 2317.
- [14] Cluzeau P., Barois P., Nguyen H.T. // *Eur. Phys. J. E.* — 2002. — V. 7. — P. 23.
- [15] Bryant G.K., Gleeson H.F. // *Ferroelectrics* — 1998. — V. 214. — P. 35.
- [16] Gleeson H.F., Bryant G.K., Morse A.S. // *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* — 2001. — V. 362. — P. 203.
- [17] Clark N.A., Coleman D., Maclennan J.E. // *Liq. Cryst.* — 2000. — V. 27(7). — P. 985.
- [18] Watson S.J., Matkin L.S., Baylis L.J., Bowring N., Gleeson H.F., Hird M., Goodby J. // *Phys.Rev E.* — 2002. — V. 65. — 031705.
- [19] Hamaneh M.B., Gleeson H.F., Taylor P.L. // *Phys. Rev. E.* — 2003. — V. 68. — 051704.
- [20] De Gennes P. G., Prost J. *The Physics of Liquid Crystals.* — Oxford: Clarendon Press, 1993.— 597 p.
- [21] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. *Теория упругости.* — М.: Наука, 1986.
- [22] Brown C.V., Jones J.C. // *J. of Appl. Phys.* — 1999. — V. 86(6). — P. 3333.
- [23] Bateman H., Erdelyi A. *Higher transcendental functions.* — Mc Graw-Hill Book Company, 1953.
- [24] Korn G.A., Korn T.M. *Mathematical handbook for scientists and engineers.* — Dover Publication, 2000.
- [25] Clark N.A., Lagerwall S.T. // *Appl.Phys.Lett.* — 1980. — V. 36(11). — P. 899.
- [26] Jones J.C., Raynes E.P. // *Liq. Cryst.* — 1990. — V. 11(2). — P. 199.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕЧЕНИЙ В НАНОКАНАЛАХ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

В. Я. Рудяк¹, А. А. Белкин¹, В. В. Егоров¹, Д. А. Иванов¹

¹Новосибирский Государственный Архитектурно-Строительный Университет (Сибстрин),
Новосибирск, Россия
valery.rudyak@mail.ru

PACS 47.11.Mn 47.67.-k 62.25.-g

На основе метода молекулярной динамики предложен алгоритм, впервые позволяющий моделировать плоское течение флюида в наноканалах с перепадом давления. Взаимодействие молекул флюида моделировалось потенциалом твердых сфер или потенциалом Леннард-Джонса. Изучены свойства нанотечений. Показано, что структура флюида в наноканале существенно отличается от его структуры в объеме. Представлены данные о зависимости коэффициента трения флюида на стенке от чисел Кнудсена и Рейнольдса. Установлено, что падение давления существенно зависит от коэффициентов аккомодации (для флюида твердых сфер) или от параметров взаимодействия молекул стенки с молекулами флюида (для флюида Леннард-Джонса).

Ключевые слова: наноканалы, падение давления, сопротивление трения, метод молекулярной динамики, структура жидкости.

1. Введение

Активное изучение микротечений жидкости и газа, наблюдающееся в последнее десятилетие, мотивировано появлением большого числа микроэлектромеханических систем (МЭМС), а позднее и нанотехнологий. Данная тематика столь актуальна, что уже существуют специализированные монографии. И если в конце 80-х годов, когда интерес к этой тематике стал очевиден, основные ее приложения сводились к созданию различных МЭМС и биохимических систем типа *lab-on-chip*, то, уже начиная с 90-х, происходит ее диверсификация. Шире становится область применения, в том числе в медицине, фармакологии, биологии, теплоэнергетике, приборостроении, катализе и т.д. Уже в этом столетии проявился активный интерес и к нанотечениям. Связано это не только с созданием нанотехнологий различного назначения, но и с исследованиями в достаточно традиционных областях: биологии, геофизике, теплоэнергетике и т.д. До сих пор одним из самых загадочных процессов является перенос питательных веществ в растениях и живых организмах. Активно проводятся исследования по созданию различного рода микропористых покрытий и течений в них. Актуальность для России нефте- и газодобычи сегодня понятна всем, а типичные размеры пор в несущих формациях меняются от десятков нанометров до десятков или даже сотен микрон [1]. Таким образом, и здесь имеют место микро- и нанотечения.

Как известно, в обычных условиях течения жидкостей и не слишком разреженных газов вполне можно описывать методами механики сплошной среды. Однако в микроканалах ситуация существенно меняется. Микроканалами обычно называют каналы, один из характерных размеров которых h (например, высота плоского канала или диаметр цилиндрического) оказывается порядка от 1 до примерно 300 мкм. В этих условиях течения жидкости и газа, как правило, следует описывать по-разному. Действительно, если газ не слишком плотный (до давлений примерно 10–20 атм.) соответствующее число Кнудсена

Kn таких микротечений изменяется в пределах: $10^{-2} \leq Kn \leq 10^2$. В этом диапазоне чисел Кнудсена течение уже не описывается уравнениями гидродинамики. Точнее, на нижнем пределе все еще можно использовать уравнения Навье–Стокса, но с граничными условиями скольжения. Затем примерно до чисел Кнудсена $Kn \sim 10^{-1}$ необходимо применять уравнения Барнетта, а потом – кинетическое уравнение Больцмана. При этом стоит иметь в виду, что к использованию уравнений Барнетта необходимо относиться с осторожностью. Строго говоря, они не полные и не учитывают эффектов памяти [2].

Концепция сплошной среды для жидкостей работает, если можно выделить гидродинамический физически бесконечно малый масштаб r_h , чтобы флуктуациями внутри соответствующего объема можно было пренебречь. Для жидкости $r_h \sim \sqrt{dh}$ [2], где d – характерный размер молекулы жидкости. Если микроканал имеет высоту $h \sim 1$ мкм, то $r_h \sim 2 \cdot 10^{-6}$ см, что уже вполне сопоставимо с высотой канала. Поэтому при наличии в таком течении градиентов макроскопических переменных гидродинамическое описание будет давать сбои. Трудности вызывает даже просто введение макроскопических переменных, которые по определению есть средние по физически бесконечно малому объему соответствующих динамических переменных молекулярной системы. Таким образом, начиная примерно с 50 мкм, для моделирования микротечений нельзя применять обычные гидродинамические методы. Какова альтернатива?

При описании газов следует, прежде всего, иметь в виду, что в микроканалах необходимо анализировать несколько параметров подобия. Типичной является ситуация, когда число Кнудсена по ширине равно $Kn \leq 10^{-1}$, а по высоте – $Kn \geq 1$, в наноканалах – $Kn \geq 10$. Казалось бы, для моделирования можно использовать метод прямого статистического моделирования Монте–Карло (ПСМ) [3]. Однако скорости течений в микроканалах обычно не велики, а в этих условиях метод ПСМ работает не удовлетворительно. Реального продвижения можно ожидать, решая для данных задач полное уравнение Больцмана или применяя метод молекулярной динамики (МД). В последнее время достаточно активно развивается метод, в котором для описания течения газа в микроканале используется то или иное модельное кинетическое уравнение.

При моделировании течений плотных газов и жидкостей, как уже указывалось, для достаточно малых микроканалов нельзя использовать обычный гидродинамический подход. Фактически единственным методом моделирования, не вызывающим концептуальных возражений, является метод МД. Активное изучение свойств микротечений этим методом началось с середины восьмидесятых годов прошлого века (см., например, [4] и цитируемую там литературу), за это время было получено достаточно много интересных результатов. В основном объектом моделирования являлись микроскопические аналоги хорошо известных течений Куэтта и Пуазейля.

Течение Куэтта, как правило, моделируется с помощью ячейки, две границы которой представляют собой движущиеся в противоположные стороны пластины. Между ними находятся молекулы жидкости. Для такой системы были получены данные о профилях скорости и других характеристиках течения (см., например, [5]). Говоря о соответствии модели течения Куэтта и реальных течений такого рода, отметим, что скорости сдвига в МД моделировании в сотни раз превосходят реально достижимые, что связано с ограниченным быстродействием современных компьютеров. В остальном МД технология моделирования данного течения соответствует реальному течению Куэтта.

В то же время при МД моделировании течения Пуазейля для его генерации вводится некоторая фиктивная сила (см., например, [4–7] и цитированную там литературу). Часто эту силу называют гравитационной, но она на порядки превышает последнюю. С другой стороны, наличие постоянно действующей силы порождает ускорение молекул в

природе отсутствующее, поэтому приходится использовать различные методы коррекции их скоростей (так называемый термостат и т.п., см., например, [4, 7]). В результате использования столь искусственных процедур так и не удастся смоделировать реальное течение, возникающее в канале под действием перепада давления.

В данной работе предлагается новый МД алгоритм, позволяющий моделировать реальное плоское течение типа Пуазейля, характеризуемое определенным градиентом давления, и обсуждаются особенности плоских течений в наноканалах.

2. Методика моделирования течения

В данной работе моделируется плоское течение (вдоль оси x , см. рис. 1) молекулярного флюида в канале длиной L между двумя параллельными пластинами, расстояние между пластинами равно h . Ячейка моделирования представляет собой прямоугольный параллелепипед, нижняя и верхняя грани которого (перпендикулярные оси z) являются стенками канала. Размер ячейки вдоль оси y равен $b \geq h$ и в этом направлении используются обычные периодические граничные условия.

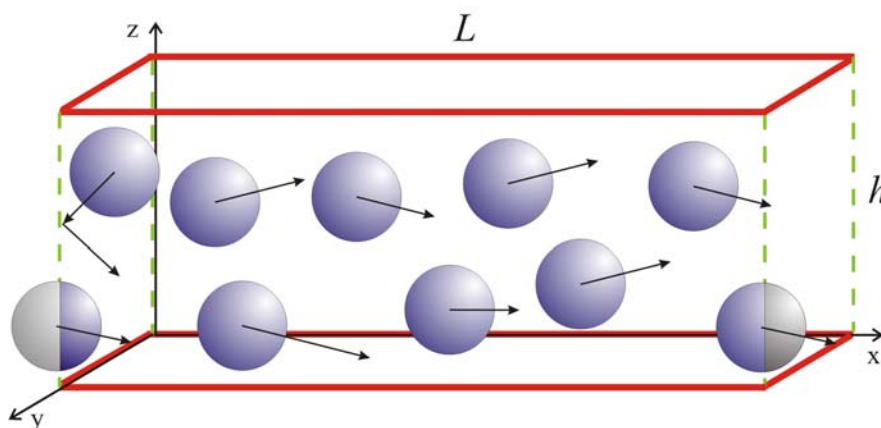


РИС. 1. Схема моделирования течения в плоском канале с псевдопериодическими граничными условиями

Чтобы организовать течение флюида, был разработан алгоритм, использующий специальным образом модифицированные периодические граничные условия на левой и правой гранях ячейки (перпендикулярных оси x). Молекулы, находящиеся внутри канала, не могут пересекать левую грань ячейки (например, молекула 1 на рис. 1), взаимодействие с ней задаётся зеркальным или диффузным граничными условиями (см. ниже). Правую грань молекулы могут пересекать, при этом для молекулы, проходящей правую границу (например, молекула 2a на рис. 1), создается копия на левой (2b на рис. 1). Координаты x центров молекулы и копии отличаются на L , остальные их координаты и скорости одинаковы. При решении уравнений движения такой молекулы учитываются ее взаимодействия с молекулами, находящимися как у левой границы, так и у правой, что соответствует периодическим граничным условиям. Когда молекула, пересекает правую грань ячейки и полностью выходит из канала, ее копия у левой грани остается. Её скорость разыгрывается случайным образом в соответствии с распределением Максвелла

$$\begin{aligned} f(v_i) &= \sqrt{\frac{m}{2\pi kT}} \exp\left(-\frac{mv_i^2}{2kT}\right), \quad i = x, y, z, \\ f(v) &= 4\pi \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{\frac{3}{2}} v^2 \exp\left(-\frac{mv^2}{2kT}\right), \end{aligned} \quad (1)$$

где T — температура левой стенки, k — постоянная Больцмана, m — масса молекулы, v_i — компонента скорости, v — модуль скорости. При этом проекция скорости молекулы на ось x всегда задается положительной. Таким образом, левую границу канала можно рассматривать как источник молекул, скорости которых распределены по закону (1). Полное число молекул в ячейке в данном алгоритме не меняется, что удобно для его программной реализации.

Для описания взаимодействия молекул флюида использовались потенциал Леннарда-Джонса (ЛД)

$$\Phi(r) = 4\varepsilon \left(\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right) \quad (2)$$

или потенциал твердых сфер (ТС)

$$\Phi(r) = \begin{cases} \infty, & r \leq d \\ 0, & r > d \end{cases}, \quad (3)$$

где σ , ε — параметры потенциала ЛД, а d — диаметр твердой сферы, моделирующей молекулу.

Взаимодействие молекул флюида со стенкой задавалось двумя различными способами, в зависимости от вида используемого межмолекулярного потенциала. В первом случае, для течения флюида ЛД молекул, каждая стенка моделировалась двумя рядами неподвижных молекул, расположенных в узлах кубической гранецентрированной решетки (принципиально возможно реализовать любую укладку). Взаимодействие молекул флюида с молекулами стенок задается потенциалом (2), параметры которого определялись с помощью комбинационных соотношений: $\sigma_{12} = \sqrt{\sigma_{11}\sigma_{22}}$, $\varepsilon_{12} = \sqrt{\varepsilon_{11}\varepsilon_{22}}$, где σ_{11} , ε_{11} — параметры взаимодействия молекул флюида, а σ_{22} , ε_{22} — молекул стенок. В расчетах, приведенных в этой работе, изучалось течение аргона: $\sigma_{11} = 3.405 \text{ \AA}$, $\varepsilon_{11}/k = 119.8 \text{ К}$ [8]. Параметры молекул стенок соответствовали углероду: $\sigma_{22} = 3.4 \text{ \AA}$, $\varepsilon_{22}/k = 28 \text{ К}$ [9].

Для течения флюида твердых сфер верхняя и нижняя стенки канала моделировались двумя твердыми параллельными поверхностями. Взаимодействие молекул флюида со стенками происходило мгновенно, их скорость после соударения со стенкой канала определялась либо зеркальным законом, либо диффузным, либо зеркально-диффузным. При зеркальном отражении молекула изменяет знак проекции скорости на нормаль к стенке v_z , проекции v_x и v_y не меняются. При диффузном отражении компоненты скорости молекулы разыгрываются по закону (1) с соответствующей температурой. Наконец, при зеркально-диффузном отражении доля молекул θ взаимодействовала диффузно, а $(1 - \theta)$ — зеркально. Отметим, что зеркальные граничные условия соответствуют нулевому значению коэффициента аккомодации импульса θ стенки, коэффициент аккомодации диффузных стенок равен единице.

В начальный момент времени молекулы флюида размещались в ячейке моделирования равномерно. Их плотность определялась параметром Ван-дер-Ваальса $\varepsilon_V = nd^3$ для ТС флюида и $\varepsilon_V = n\sigma^3$ для ЛД флюида, где n — числовая концентрация молекул. Скорости молекул в начальный момент задавались согласно распределению Максвелла (1). Затем рассчитывалась эволюция системы. Для системы ЛД молекул использовалась схема Шофилда, для ТС молекул — стандартный алгоритм МД моделирования [10]. Шаг интегрирования по времени равнялся $\Delta t = 10^{-12} \text{ с}$. Радиус действия ЛД потенциала во всех расчетах равен 2.35σ . После завершения релаксационных процессов, время которых зависит от размеров канала, плотности жидкости и условий взаимодействия со стенками, в канале устанавливается течение жидкости. Далее начинается расчёт нужных характеристик (полей концентрации, скорости, давления и т.д.).

Для определения давления ЛД молекул использовалась формула, являющаяся следствием теоремы вириала [11]

$$p = \frac{2}{3V} \sum_{i=1}^N \frac{\langle \mathbf{p}_i^2 \rangle}{2m} + \frac{1}{6V} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N \langle \mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{F}_{ij} \rangle.$$

Для ТС флюида потенциал взаимодействия и сила \mathbf{F}_{ij} сингулярны. В этом случае вириал силы $\langle \mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{F}_{ij} \rangle$ задается импульсом, переданным в столкновениях, и давление определяется формулой

$$p = \frac{2}{3V} \sum_{i=1}^N \frac{\langle \mathbf{p}_i^2 \rangle}{2m} + \frac{1}{6V} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N \left\langle r_{ij}^* \frac{\Delta p_{ij}}{\Delta t} \right\rangle.$$

Здесь r_{ij}^* — расстояние между молекулами, в момент столкновения оно равно их диаметру, Δp_{ij} — изменение модуля импульса i -ой молекулы за время Δt за счет ее столкновения с j -ой.

3. Характерные черты нанотечений в плоском канале

Описанный выше МД алгоритм впервые позволил смоделировать реальное плоское течение, в котором имеет место перепад давления вдоль канала. В процессе эволюции молекулярного флюида в канале устанавливается стационарное течение. Его характеристики, их зависимость от геометрии канала, характера взаимодействия молекул со стенками, структура флюида в канале будут описаны в данном разделе. Во всех случаях изучались течения в наноканалах. Высота канала варьировалась от 6 до 50 диаметров молекул, длина — от 60 до 250 диаметров, а ширина — от 6 до 20 диаметров (для ЛД молекул в качестве их диаметра выбирался параметр σ). Таким образом, самый длинный канал имел длину всего лишь чуть больше 70 нм, а его высота варьировалась от 2 до 15 нм. Плотность флюида изменялась в достаточно широких пределах: $\varepsilon_V = 0.0014 \div 0.88$.

3.1. Профиль скорости течения

Алгоритм моделирования, описанный в разделе 2, предполагает наличие входного и выходного участков течения, как это имеет место и в реальных течениях. Стационарное течение устанавливается на некотором расстоянии от входа (левой границы канала, представленного на рис. 1). Формируемый в течении профиль скорости обусловлен взаимодействием молекул флюида со стенкой. Для ЛД флюида во всех случаях формируется параболический профиль скорости вида

$$u = A(z^2 - zh - \delta h), \quad (4)$$

где A — некоторая константа, а δ — так называемая длина скольжения, определяемая соотношением $u(z=0, h) = \delta (\partial u / \partial z)|_{z=0, h}$.

Эффект скольжения наблюдался и ранее в известных работах по МД моделированию нанотечений ЛД флюида. Течение ТС флюида моделируется впервые. Здесь параболический профиль скорости вида (4) фиксируется, только если взаимодействие молекул со стенкой не является зеркальным. При зеркальном взаимодействии по всей длине канала наблюдается ударный профиль скорости.

В реальных макроскопических течениях жидкости обычно считается, что имеет место прилипание флюида на стенке, т.е. скорость течения на стенке равна скорости самой стенки. Скольжение фиксируется лишь для течений разреженного газа. В этом случае $\delta \sim l \sim Kn$, где l — длина свободного пробега молекулы [12]. Таким образом, обычно считается, что учет скольжения необходим, начиная с чисел $Kn \sim 5 \cdot 10^{-3}$. Поскольку длина

скольжения пропорциональна l , то в макроскопических течениях не слишком разреженного газа им, естественно, можно пренебречь. Совершаемая ошибка при малых числах Кнудсена будет мала.

Природа появления скольжения в течениях жидкостей сложнее, чем в течениях газов. И если для газов существует систематическая теория, определяющая длину скольжения, то для жидкостей соответствующего аналога нет. Тем не менее, экспериментально длина скольжения в микротечениях последние годы очень активно изучается. Регистрируются длины скольжения от нескольких нанометров до примерно двадцати микрометров [13]. При использовании гидрофобных и в особенности так называемых ультрагидрофобных покрытий длина скольжения может быть еще больше [14, 15]. Ясно, что наличие столь больших значений (впрочем, как и малых, порядка нескольких нанометров) длины скольжения нельзя объяснить с точки зрения кинетической теории.

При моделировании ЛД флюида с помощью описанного в разделе 2 алгоритма профиль скорости установившегося течения определяется лишь параметрами потенциала взаимодействия флюида с молекулами стенки. В проведенных расчетах длина скольжения уменьшалась с ростом плотности флюида. Поверхности моделировались системой молекул, расположенных в узлах кубической гранцентрированной решетки. Однако в общем случае характер взаимодействия молекул флюида со стенкой, а значит, и величина длины скольжения будет зависеть от типа кристаллической решетки твердых поверхностей, образующих канал. В частности, в работе [16] было установлено, что на длину скольжения оказывает влияние тип упаковки молекул стенок канала и угол ориентации потока жидкости относительно базисов образующей стенку кристаллической решетки. Таким образом, изменяя топологию стенок, можно регулировать сопротивление движению жидкости в наноканале.

Длина скольжения для течения ТС флюида зависела в первую очередь от коэффициента аккомодации θ и с его ростом уменьшалась. Так, если при $\theta = 0.5$ длина скольжения равнялась $1.7d$ (плотность флюида $\varepsilon_V = 0.88$), то при увеличении θ до единицы длина скольжения уменьшалась более чем в три раза и равнялась $0.5d$. Естественно, длина скольжения в общем случае увеличивается и с уменьшением плотности флюида. Так, при плотности флюида $\varepsilon_V = 0.0014$ она составляла около $10d$.

3.2. Падение давления

Обычное стационарное течение Пуазейля — это течение, формирующееся при заданном градиенте давления и, как следствие, с заданными значениями давления на входе и выходе. Падение давления вдоль канала обусловлено трением на стенках. До сих пор методом МД не удавалось смоделировать падение давления вдоль канала. Одним из достоинств предлагаемого алгоритма является реализация течения с линейным градиентом давления вдоль канала. Численные значения градиента давления зависят не только от геометрии канала (высоты и длины), но и в первую очередь от параметров взаимодействия флюида со стенками канала. На рис. 2 приведены типичные данные для падения давления при различных типах взаимодействия молекул флюида между собой и со стенками канала, давление нормировано на соответствующую величину на входе канала. Падение давления вдоль канала связано с сопротивлением, обусловленным взаимодействием молекул флюида со стенками. Поэтому при зеркальном отражении молекул ТС флюида давление вдоль канала остается неизменным (линия 1 на рис. 2). Величина градиента давления растет с увеличением коэффициента аккомодации (сравни линии 1 и 2).

Расход жидкости задается соотношением

$$Q = \frac{1}{S} \int_0^h \rho u(z) b dz,$$

где S , h и b — соответственно площадь поперечного сечения, высота и ширина канала, ρ , u — массовая плотность и скорость флюида. Средняя скорость течения, определяемая расходом, равна: $\bar{u} = Q/\rho$. Она, как и расход, зависит от геометрии канала. Влияние размеров канала обусловлено особенностями используемого алгоритма. Течение в канале создается за счет условий, формулируемых на левой и правой границах канала. С увеличением высоты канала их площадь растет, естественно растет и доля молекул, скорость которых увеличивается при взаимодействии с этими границами. Наоборот, с увеличением длины канала относительное количество таких молекул снижается, что приводит к уменьшению средней скорости течения.

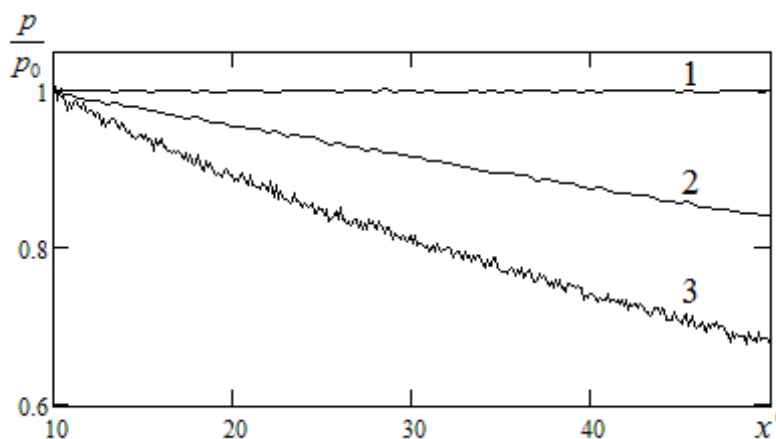


Рис. 2. Зависимость давления от продольной координаты канала. Линия 1 — ТС флюид, $\theta = 0$, линия 2 — ТС флюид, $\theta = 0.5$, линия 3 — ЛД флюид. $L = 60\sigma$, $h = 6\sigma$, $\varepsilon_V = 0.79$

3.3. Коэффициент сопротивления

Выявление отличий течения в наноканале от обычного гидродинамического чрезвычайно важно с практической точки зрения. Одной из важнейших характеристик течения является коэффициент гидравлического сопротивления, который определяется по формуле Дарси–Вейсбаха

$$\lambda = h \frac{dp}{dx} \frac{2}{\rho \bar{u}^2}.$$

В течении, реализованном посредством предложенного здесь МД алгоритма, не известна связь между градиентом давления и расходом. Поэтому сравнение коэффициента трения, полученного в МД моделировании, с гидродинамическим выполнялось при одинаковых перепадах давления или расходах. На рис. 3 представлены результаты сопоставления коэффициента трения, полученного в МД моделировании, с гидродинамическим коэффициентом при одинаковых перепадах давления. Здесь непрерывная кривая соответствует гидродинамическому коэффициенту сопротивления $\lambda_h = 24/Re$, а МД данным — крестики. Пунктирная кривая получена по МД данным методом наименьших квадратов. Обе кривые качественно подобны, но гидродинамические значения несколько выше. Следует заметить,

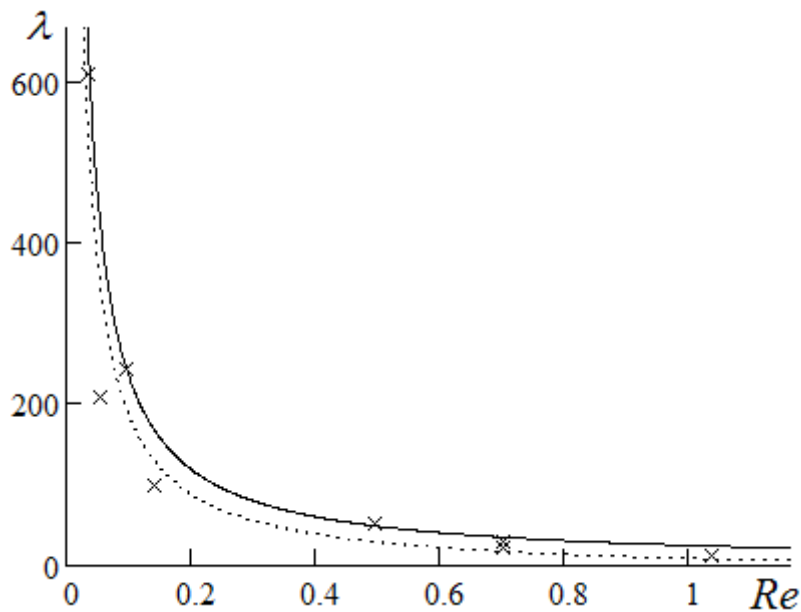


Рис. 3. Зависимость коэффициента сопротивления в наноканале от числа Рейнольдса. Непрерывная кривая — гидродинамическое значение, пунктирная кривая — МД данные

что эти значения получены только для малых чисел Рейнольдса. С другой стороны, именно эти числа Рейнольдса обычно и типичны для нанотечений.

Следующий график (рис. 4) показывает зависимость коэффициента сопротивления от числа Кнудсена. Здесь квадратики соответствуют коэффициенту аккомодации $\theta = 1$, а крестики — $\theta = 0.5$. Как и следовало ожидать, с ростом коэффициента аккомодации увеличивается и коэффициент сопротивления. В этой связи стоит отметить, что число Рейнольдса является более грубым параметром подобия и в некотором смысле более универсальным. Различным коэффициентам аккомодации просто будут соответствовать разные числа Рейнольдса.

4. О структуре жидкости в плоском канале

Несмотря на отмеченные во введении недостатки предложенных ранее алгоритмов моделирования течений, с их помощью были получены важные результаты по изучению структуры жидкости в наноканале. Было установлено, что вблизи стенок канала наблюдаются максимумы профиля плотности жидкости. Ранее, однако, не моделировались течения ТС флюида. На рис. 5 проведено сопоставление профилей плотности в одинаковом канале для ТС и ЛД флюидов.

В обоих случаях плотность квазипериодически меняется поперек канала. В ТС флюиде максимумы и минимумы профиля плотности проявляется значительно сильнее, существенно выше оказываются и первые максимумы плотности у стенок. Это связано в первую очередь с более явно выраженными зонами экранирования для ТС молекул у поверхности стенок. Наличие этих зон приводит к тому, что эффективный объем, занимаемый ЛД молекулами, больше, чем занимаемый ТС молекулами. По этой причине эффективная плотность ТС флюида несколько выше, чем ЛД флюида. С ростом же плотности эффекты структурирования флюида увеличиваются.

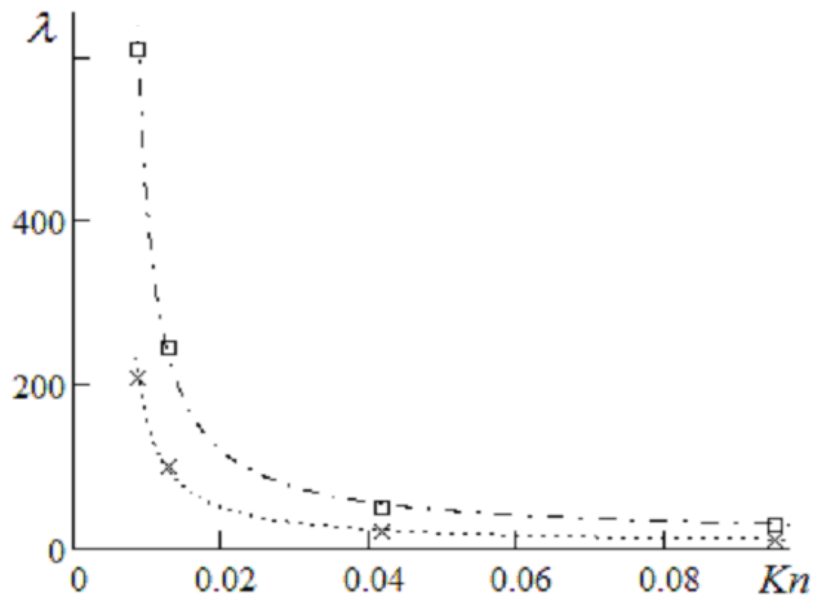


Рис. 4. Зависимость коэффициента сопротивления в наноканале от числа Кнудсена

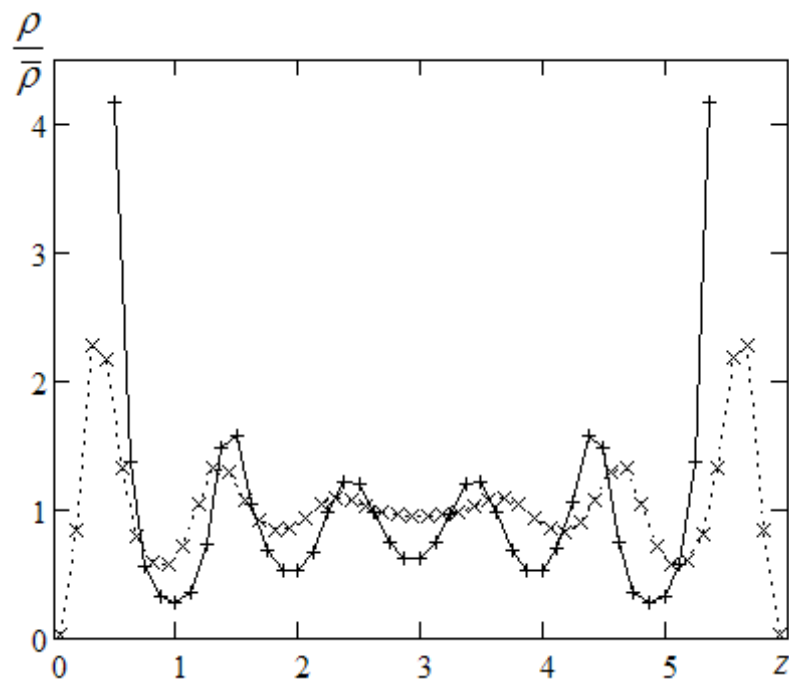


Рис. 5. Профиль плотности в поперечном сечении канала ТС молекулы (+), ЛД молекулы (×). $L = 60\sigma$, $h = 6\sigma$, $\varepsilon_V = 0.79$



Рис. 6. Поле плотности в наноканале. $L = 60d$, $h = 6d$, $\varepsilon_V = 0.79$

Структурирование флюида в канале является принципиальным фактом. Однако вдоль канала характер этого структурирования меняется. Падение давления в изотермических условиях должно вызывать соответствующее уменьшение плотности флюида. На рис. 6 представлено поле плотности вдоль канала. Хорошо видно, что структура поля плотности заметно меняется. Если вначале канала жидкость хорошо структурирована, то степень этого структурирования вдоль канала снижается. Связано это с тем, что плотность вдоль канала уменьшается. Флюид оказывается существенно сжимаемым. Средний расход флюида остается постоянным в любом поперечном сечении канала, поэтому снижение плотности приводит к росту средней скорости по мере удаления от начала канала. В этом смысле реализуется очень любопытная ситуация. Грубо говоря, параметры течения меняются от сечения к сечению при том, что течение является стационарным, оно повторяемо и реализуется с периодом L/\bar{u} . Таким образом, мы имеем специфическое стационарное течение. Изменение плотности вдоль канала связано, как уже отмечалось, с падением давления. Средняя плотность жидкости остается постоянной по всей длине канала лишь для случая зеркального взаимодействия со стенкой ТС-молекул.

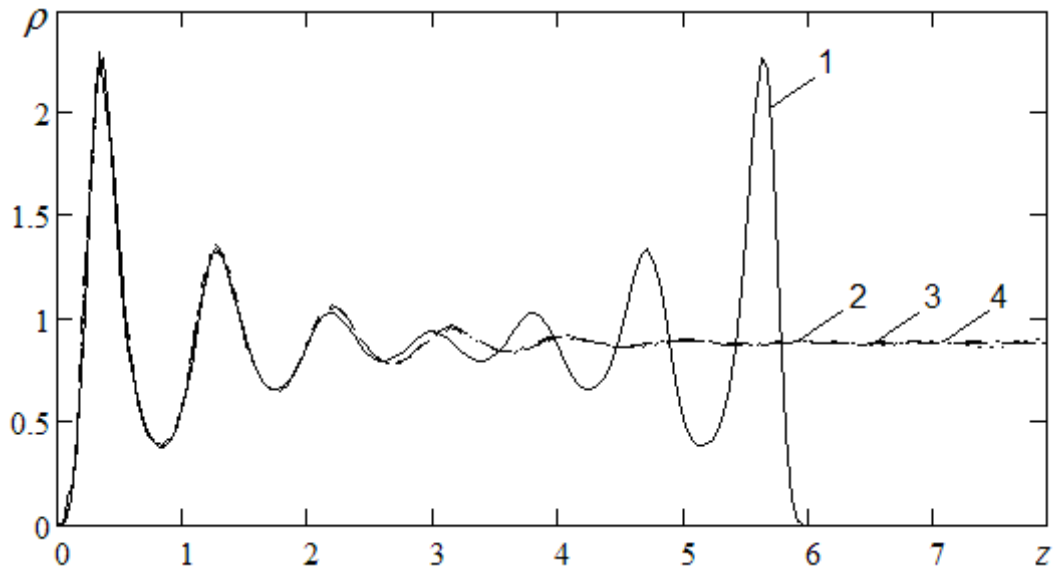


Рис. 7. Профили плотности в наноканалах различной высоты $\varepsilon_V = 0.88$,
 1 – $h = 6\sigma$, 2 – $h = 12\sigma$, 3 – $h = 24\sigma$, 4 – $h = 48\sigma$

Важно подчеркнуть, что упорядоченность жидкости вблизи стенок является характерной чертой течений в наноканалах, она не исчезает при увеличении расстояния между стенками канала. Это иллюстрирует рис. 7, где представлены профили плотности поперек

каналов с разной высотой. Здесь кривая 1 соответствует высоте $h = 6\sigma$, кривая 2 — $h = 12\sigma$, кривая 3 — $h = 24\sigma$ и кривая 4 — $h = 48\sigma$. Структурирование жидкости в канале практически перестает зависеть от его высоты при $h > 10\sigma$ и наблюдается на расстояниях порядка $5-6\sigma$.

Профиль плотности дает локальную информацию о структуре жидкости. Но анализ рис. 5–7 показывает, что в канале у жидкости меняется характер ближнего порядка. Это должно наблюдаться, по крайней мере, вблизи стенок канала. Характер структуры жидкости детектируется парной радиальной функцией распределения молекул

$$g_2(r) = \frac{dN}{4\pi nr^2 dr}, \quad (5)$$

где dN — число молекул в радиальном слое толщиной dr на расстоянии r от выделенной молекулы. Данная функция показывает, как распределена плотность молекул вокруг произвольной выделенной. Распределение плотности в наноканале неоднородное, поэтому, чтобы получить достаточно объективную информацию о структуре жидкости, радиальные функции распределения следует строить в слоях толщиной dh , параллельных стенкам канала и находящимся на разном расстоянии от них

$$g_2(r, h) = \frac{dN}{2\pi nr dr dh}. \quad (6)$$

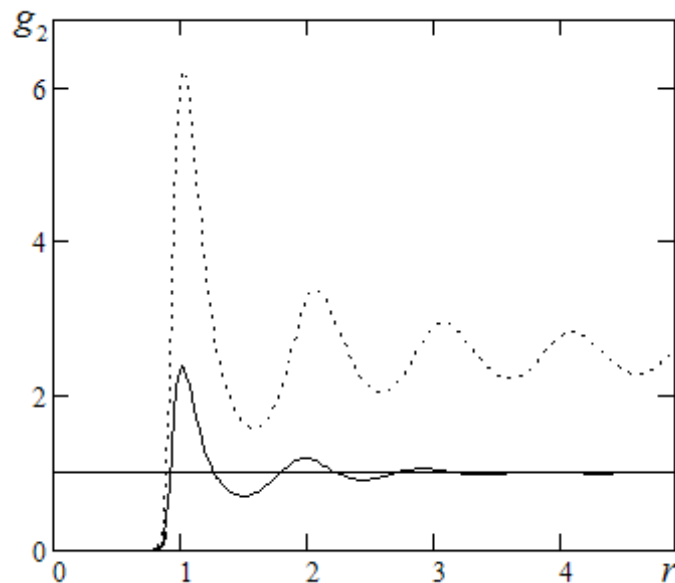


Рис. 8. Радиальная функция распределения g_2 в объеме (сплошная линия) и в слое первого максимума плотности жидкости в наноканале (пунктирная линия), $h = 6\sigma$, $\varepsilon_V = 0.88$

Характер получающейся радиальной функции распределения, построенной для первого максимума плотности (см. рис. 7), представлен на рис. 8 (пунктирная кривая). Здесь же для сопоставления приведена радиальная функция распределения для флюида той же плотности в объеме (непрерывная кривая). Расстояние на этом рисунке измеряется в единицах σ . Сопоставление этих функций показывает, что вблизи поверхности характер структуры жидкости существенно меняется. Если в объеме ближний порядок проявляется на расстояниях

порядка 1 нм ($3\sigma-4\sigma$), то вблизи поверхности фактически имеет место квазидальний порядок. Затухание радиальной функции распределения происходит на расстояниях, по крайней мере, на порядок больших, чем в объеме. Парная функция распределения (6) определяется для молекул, находящихся на одинаковом расстоянии от границы канала, то есть в зоне практически одинаковой концентрации. Если говорить о структуре жидкости во всем канале, то здесь ситуация существенно более сложная. Упорядоченность молекул обусловлена двумя факторами: наличием ближней структуры вокруг каждой молекулы и взаимодействием жидкости со стенками.

5. Заключение

Алгоритм МД моделирования, предложенный в настоящей работе, впервые позволил смоделировать течение с градиентом давления вдоль канала, аналогом которого является стационарное течение Пуазейля. Вместе с тем реализованное течение является необычным стационарным течением, его параметры меняются вдоль канала. В частности, изменяется плотность флюида, он ведет себя подобно сжимаемому газу даже при плотностях соответствующих жидкости. Его сжимаемость, однако, проявляется только в том случае, когда имеет место падение давления. Оно в свою очередь наблюдается лишь при диффузном или зеркально-диффузном законе отражения молекул от стенки. При зеркальном отражении молекул от стенки профиль скорости вдоль канала не меняется. И если на входе он был ударным, то таким и остается. Падение давления в этом случае также отсутствует. Таким образом, падение давления обусловлено исключительно законом взаимодействия молекул флюида со стенкой. Потери давления в свою очередь индуцируют снижение плотности (температура флюида остается практически постоянной).

Характер течения ЛД и ТС флюидов качественно одинаков. В обоих случаях имеет место перепад давления в канале. Градиент давления в канале с ЛД флюидом определяется параметрами потенциала взаимодействия молекул флюида с молекулами стенки. Существуют параметры, когда характеристики течения обоих флюидов оказываются идентичными. Это дает реальный инструмент для определения коэффициентов аккомодации [17].

Взаимодействие со стенкой существенно меняет и структуру флюида в канале. Вблизи стенок, на расстоянии в несколько размеров молекул плотность флюида значительно выше средней. Кроме того, жидкость на этих расстояниях оказывается структурированной, а вблизи стенки имеет место даже квазидальний порядок. Варьирование высоты канала показывает, что характер этого структурирования от нее практически не зависит. Таким образом, вблизи поверхности существует наноразмерный слой флюида толщиной один — два нанометра, обладающий особыми свойствами. По-видимому, именно наличие этого слоя и определяет в идеальных условиях длину скольжения. Этот слой играет роль слоя Кнудсена в разреженном газе. Его наличие, однако, никак не объясняет реально наблюдаемые в эксперименте длины скольжения в десятки и даже сотни нанометров. Из-за чего возникают столь большие длины скольжения? Если отвлечься от возможных «неидеальностей» реального флюида, например, его газонасыщенности, вследствие чего в некоторых случаях возникает «газовая смазка», то наиболее реальной причиной может явиться наличие неоднородностей на стенке. Фиксируемые шероховатости на твердых поверхностях имеют размер от нескольких нанометров. Безусловно, это будет менять характер взаимодействия со стенкой. И изучение этого вопроса является одной из наиболее актуальных задач физики микротечений.

Подводя итог, следует отметить, что разработанный для моделирования микротечений МД алгоритм не лишен недостатков. Главный из них состоит в том, что алгоритм не позволяет задавать непосредственно градиент давления, хотя его удастся предсказать с

неплохой точностью по известным размерам канала, свойствам жидкости и стенок. Еще одним недостатком является нефизичное дальнедействующее взаимодействие молекул, находящихся у выхода из канала, с молекулами на его входе. Это влияние не столь драматично, поскольку имеет место лишь в узких релаксационных зонах, на выходе из которых собственно и реализуется течение с градиентом давления.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (грант № 10-01-00074) и ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009 — 2013 годы» (Гос. контракты П230, 14.740.11.0579).

Литература

- [1] Nelson P.H. Pore-throat sizes in sandstones, tight sandstones, and shales // *AAPG Bulletin*. — 2009. — V. 93(3). — P. 329-340.
- [2] Рудяк В.Я. Нелокальное решение уравнения Больцмана // *ЖТФ*. — 1995. — Т. 65(11). — С. 29-40.
- [3] Bird G.A. *Molecular gas dynamics*. — Oxford: Clarendon Press, 1976. — 415 p.
- [4] Karnidakis G., Beskok A., Aluru N. *Microflows and nanoflows*. — *Interdisciplinary Applied Math.* 29. Springer Science+Business Media, Inc., 2005. — 817 p.
- [5] Thompson P. A., Robbins M.O. Shear flow near solids: Epitaxial order and flow boundary conditions // *Phys. Rev. A*. — 1990. — V. 41. — P. 6830-6837.
- [6] Koplik J., Banavar J.R., Willemsen J.F. Molecular dynamics of fluid flow at solid surfaces // *Phys. Fluids A*. — 1989. — V. 1. — P. 781-794.
- [7] Heinbuch U., Fischer J. Liquid flow in pores: Slip, no-slip, or multilayer sticking // *Phys. Rev. A*. — 1989. — V. 40. — P. 1144-1146.
- [8] Гиршфельдер Дж., Кертисс Ч., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей. — М.: Иностранная литература, 1961. — 930 с.
- [9] Xu L., Sedigh M.G., Sahimi M., Tsotsis T.T. Nonequilibrium molecular dynamics simulation of transport of gas mixtures in nanopores // *Phys. Rev. Lett.* — 1998. — V. 80. — P. 3511-3514.
- [10] Рудяк В.Я., Белкин А.А., Иванов Д.А., Егоров В.В. Моделирование процессов переноса на основе метода молекулярной динамики. Коэффициент самодиффузии // *ТВТ*. — 2008. — Т. 46(1). — С. 35-44.
- [11] Зубарев Д.Н. *Неравновесная статистическая механика*. — М.: Наука, 1971. — 415 с.
- [12] Рудяк В.Я. *Статистическая теория диссипативных процессов в газах и жидкостях*. — Новосибирск: Наука, 1987. — 271 с.
- [13] Lauga E., Brenner M.P., Stone H.A. *Microfluidics: the no-slip boundary condition* // *Handbook of Exper. Fluid Dynamics*. Ch. 19., N.Y.: Springer, 2007. — P. 1219-1240.
- [14] Ou J., Perot B., Rothstein J.P. Laminar drag reduction in microchannels using ultrahydrophobic surfaces // *Phys. Fluids*. — 2004. — V. 16(12). — P. 4635-4643.
- [15] Watts E.T., Krim J., Widom A. Experimental observation of interfacial slippage at the boundary of molecularly thin films with good substrate // *Phys. Rev. B*. — 1990. — V. 41(6). — P. 3466-3472.
- [16] Soong C.Y., Yen T.H., Tzeng P.Y. Molecular dynamics simulation of nanochannels flows with effects of wall lattice-fluid interactions // *Phys. Rev. E*. — 2007. — V. 76. — 036303.
- [17] Rudyak V., Belkin A., Egorov V., Ivanov D. Modeling of plane flow with a pressure gradient in a nanochannel // *Proc. of 1st European Conference on Microfluidics*. Bologna, CHF, 2008, μ FLU08-38.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ НАНОЧАСТИЦ ДИОКСИДА ТИТАНА В ПРОТОЧНОМ ПЛАЗМОХИМИЧЕСКОМ РЕАКТОРЕ

С. М. Аульченко, Е. В. Картаев, О. Б. Ковалев

Институт теоретической и прикладной механики им.С.А. Христиановича СО РАН

aultch@itam.nsc.ru

PACS 47.61.Jd

Проведено моделирование образования и роста частиц диоксида титана в рабочей зоне плазмохимического реактора. Изучено влияние гетерогенной реакции и процесса нуклеации на размер частиц. Проведены параметрические расчеты образования и роста частиц диоксида титана в зависимости от величины расхода и скорости вдува струи тетрахлорида титана.

Ключевые слова: наночастицы диоксида титана, плазмохимический реактор, односкоростная многокомпонентная среда, гомогенная и гетерогенная реакции, коагуляция.

1. Введение

В настоящее время новые разработки в металлургии титана, алюминия, кремния нацелены на удешевление процессов за счет прямого получения их порошков и сплавов, минуя стадию выплавки компактного металла [1]. Перспективным является плазмохимический способ восстановления металлов, преимуществом которого является то, что все процессы восстановления и синтеза сплавов и соединений происходят в газовой фазе, где отсутствуют ограничения на скорости реакций, связанные с медленной диффузией в случае реагентов в конденсированной фазе, что характерно для гетерофазных металлургических процессов. В общей постановке эта задача была рассмотрена в работе [2], где предложен механизм зарождения, роста и коагуляции частиц диоксида титана TiO_2 . Однако в [2] не учитывается влияние газодинамики течения реагентов, степени их перемешивания на характер распределения частиц диоксида титана по размерам в различных сечениях реактора.

В [3] на основе разработанного в [4–6] алгоритма смоделировано взаимодействие реагирующих струй кислорода и тетрахлорида титана в зоне смешения плазмохимического реактора. Проведены параметрические расчеты процесса образования газофазной компоненты диоксида титана в зависимости от величины расхода и места вдува струи тетрахлорида титана. Исследованы газодинамические аспекты процессов инъекции и смешения компонент смеси. Получены качественные и количественные характеристики процесса образования газофазной компоненты TiO_2 .

В данной работе на основе предложенных в [2, 7, 8] механизмов зарождения, роста и коагуляции частиц диоксида титана TiO_2 с учетом влияния на эти процессы газодинамики течения реагентов проведено моделирование образования и роста частиц диоксида титана в реакторе, форма и размеры которого соответствуют реальной лабораторной установке.

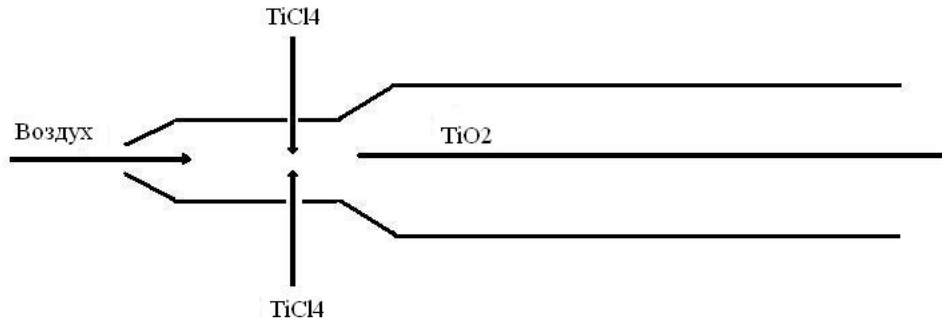
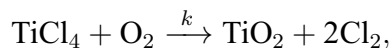


Рис. 1. Схема рабочей зоны проточного реактора

2. Постановка задачи

На рис. 1 показана схема рабочей зоны проточного реактора (реальное положение — вертикальное). Длина реактора 444 мм, диаметр 32 мм, длина канала 38 мм, диаметр 10 мм. Переход от канала к реактору осуществляется через конический участок длиной 33 мм и наклоном 15° . Боковая щель шириной $h = 2$ мм расположена на стенке канала. Через канал в рабочую зону со скоростью $u_1 = 100$ м/с втекает струя воздуха с температурой $T_1 = 3100$ К. Расход струи воздуха $Q_1 = 2.5$ г/с. Через боковую щель при температуре $T_2 = 400$ К подается тетрагидрид титана. Скорость боковой струи и расход варьируются. В зоне смешения идет реакция с образованием сначала газофазной компоненты TiO_2 , затем частиц TiO_2 . Далее по мере движения частиц вдоль реактора происходит их рост за счет поверхностной реакции и коагуляции.

Моделируется течение вязкой теплопроводной смеси газов. Компоненты смеси — O_2 , N_2 , $TiCl_4$, TiO_2 , Cl_2 . Две последние компоненты появляются в результате обобщенной химической реакции [4]:



протекающей при температуре $T \geq 1000$ К.

Рассматривается одножидкостный режим течения, которое моделируется с помощью системы квазигазодинамических уравнений (КГД), обобщающей систему уравнений Навье—Стокса и отличающейся от нее дополнительными диссипативными слагаемыми с малым параметром τ в качестве коэффициента [4]. С учетом внешних сил и источников тепла эта система имеет вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j}_m &= 0 \\ \frac{\partial (\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \operatorname{div} (\mathbf{j}_m \otimes \mathbf{u}) + \nabla p &= \rho \mathbf{F} + \operatorname{div} \mathbf{\Pi} \\ \frac{\partial (E)}{\partial t} + \operatorname{div} (\mathbf{j}_m H) + \operatorname{div} \mathbf{q} &= (\mathbf{j}_m \cdot \mathbf{F}) + \operatorname{div} (\mathbf{\Pi} \cdot \mathbf{u}) + Q \end{aligned} \quad (1)$$

Вектор плотности потока массы определен следующим соотношением:

$$\mathbf{j}_m = \rho \mathbf{u} - \tau [\operatorname{div} (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) + \nabla p - \rho \mathbf{F}].$$

здесь P — давление, ρ — плотность, \mathbf{u} — вектор скорости смеси, \mathbf{j}_m — вектор плотности потока массы, \mathbf{F} — вектор плотности массовой силы, Π — тензор вязких напряжений, E — полная энергия единицы объема; H — полная удельная энтальпия; Q — удельная теплота, τ — параметр релаксации.

К этой системе добавляются уравнения неразрывности для компонент смеси:

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j}_m^i = \sum_j J^{(ji)} \quad (2)$$

и объемной концентрации твердой фазы:

$$\frac{\partial c_p}{\partial t} + \operatorname{div} (c_p \mathbf{u}) = \sum_j J^{(jp)} \quad (3)$$

Здесь ρ_i — плотность i -й компоненты; c_p — объемная концентрация твердой фазы, \mathbf{j}_m^i — вектор плотности потока массы i -й компоненты, $J^{(ji)}$ — интенсивность превращения массы j -й компоненты в i -ю в единице объема смеси; $J^{(jp)}$ — интенсивность превращения массы j -й компоненты в твердую фазу в единице объема смеси. В правых частях уравнений (2)–(3) учтены следующие кинетические соотношения, описывающие изменение концентраций тетрахлорида титана, диоксида титана в газовой и твердой фазах за счет гомогенной, гетерогенной реакций и фазового перехода:

$$\begin{aligned} \frac{dC^1}{dt} &= -kC^1 = -(k_g + k_s A) C^1, \\ \frac{dC^2}{dt} &= k_g C^1 - k_p C^2, \\ \frac{dC^3}{dt} &= k_s C^1 A + k_p C^2. \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь C^1 , C^2 , C^3 — массовые концентрации тетрахлорида титана, диоксида титана в газовой фазе и диоксида титана в твердой фазе, k — скорость обобщенной реакции, k_g — скорость гомогенной реакции, k_s — скорость поверхностной реакции, k_p — скорость фазового перехода, A — относительная площадь частиц.

Дополнительные соотношения, замыкающие систему уравнений имеют вид:

$$p = \rho R_m T \frac{m_g}{1 - c_p}, \quad \alpha_i = \rho_i / \rho, \quad R_m = R_G \left(\sum_i \alpha_i / m_i \right),$$

где T — нормированная температура, R_m — удельная газовая постоянная смеси, R_G — удельная газовая постоянная, α_i — массовая доля i -й компоненты, m_g — массовая доля газа, m_i — молекулярный вес i -й компоненты.

Если к соотношениям (1)–(4) добавить уравнение для числа частиц [4]

$$\frac{dN}{dt} = k_g C^1 N_{av} - \frac{\beta N^2}{2} \quad (5)$$

где N — число частиц в единице объема; N_{AV} — число Авогадро, β — параметр коагуляции, то, с учетом известного их начального радиуса $R_0 = 0.2$ нм, можно рассчитать средний радиус частиц в элементарном объеме в произвольный момент времени. Величина начального радиуса соответствует объему мономера TiO_2 ($\sim 3.32 \times 10^{-23}$ см³), указанному в [7].

Для решения краевой задачи поставлены следующие граничные условия. На стенках реактора — условия прилипания, отсутствие потока тепла и равенство нулю нормальной производной от давления (это дополнительное условие вызвано спецификой КГД-системы).

Для струй задаются расход и температура. Для вычисления значений давления, плотности и скорости на входных границах струй используются граничные условия, основанные на использовании инвариантов Римана для уравнений Эйлера.

При численном интегрировании уравнений (1)–(3) они записываются в цилиндрической системе координат (задача осесимметричная) и приводятся к безразмерному виду. В качестве основных размерных параметров задачи выбираются: радиус канала, скорость звука покоящегося при температуре 300 К в реакторе в начальный момент времени воздуха и его плотность.

Для численного решения системы уравнений используется явная по времени разностная схема. Производные по времени аппроксимируются разностями вперед с первым порядком точности. Пространственные производные аппроксимируются центральными разностями со вторым порядком точности.

3. Результаты расчетов

Проведены расчеты для двух вариантов значений параметров струи тетрахлорида титана: 1 – $Q_2 = 1$ г/с, $u_2 = 22$ м/с; 2 – $Q_2 = 2$ г/с, $u_2 = 44$ м/с с использованием двух моделей – с учетом коагуляции и без учета. Значения констант в уравнениях (4)–(5) согласно [4] были заданы следующие:

$$k = 8.26 \times 10^4 \exp\left(\frac{-10681}{T}\right), \quad k_s = 4.9 \times 10^3 \exp\left(\frac{-8993}{T}\right),$$

$$k_p = 1.2 \times 10^{10} \exp\left(\frac{-10681}{T}\right), \quad \beta = 7.7 \times 10^{-10}.$$

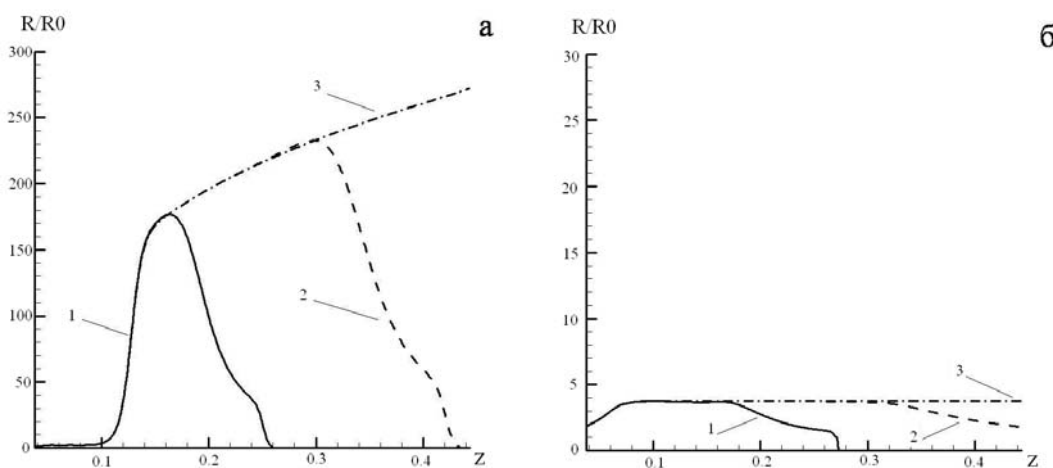


РИС. 2. Распределение вдоль реактора отношения средневзвешенного радиуса частиц начальному радиусу. а – модель с коагуляцией; б – модель без коагуляции. $Q_2 = 1$ г/с, $u_2 = 22$ м/с; 1 – $t = 0.1$ с, 2 – $t = 0.2$ с, 3 – $t = 0.35$ с – стационарное решение.

На рис. 2, 3 приведены распределения вдоль реактора отношения средневзвешенного радиуса частиц R_k начальному радиусу R_0 . Средневзвешенный радиус частиц определяется по формуле: $R = \frac{1}{N_i} \sum_j R_j N_j$, где $N_i = \sum_j N_j$, R_j – радиус частиц в j – й расчетной

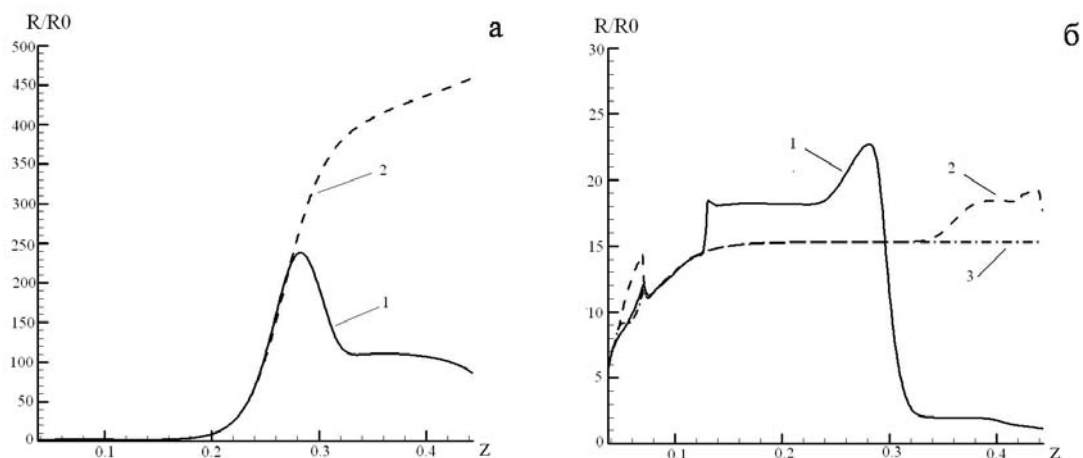


РИС. 3. Распределение вдоль реактора отношения средневзвешенного радиуса частиц начальному радиусу. а — модель с коагуляцией; б — модель без коагуляции. $Q_2 = 2$ г/с, $u_2 = 44$ м/с; для а: 1 — $t = 0.1$ с, 2 — $t = 0.25$ с — стационарное решение; для б: 1 — $t = 0.1$ с, 2 — $t = 0.2$ с, 3 — $t = 0.3$ с — стационарное решение

ячейке i — го сечения, N_i — число частиц в i — м сечении; N_j — число частиц в j — й расчетной ячейке i — го сечения. Вариант «а» соответствует модели с коагуляцией, вариант «б» — без коагуляции. Видно, что увеличение размера частиц за счет коагуляции на порядок превышает их рост за счет только поверхностной реакции. Это происходит потому, что процесс коагуляции идет во всей области реактора, тогда как рост частиц за счет гетерогенной реакции происходит в ограниченной области, примыкающей к выходу из канала, в которой еще имеется не прореагировавший тетрагидрид титана. При фиксированной длине реактора и без учета зависимости параметра коагуляции от температуры размер частиц определяется расходом вводимого в реактор $TiCl_4$: радиус частиц меняется от 60 нм до 100 нм при увеличении расхода в два раза (ср. рис. 2а и рис. 3а). На этих же рисунках видно существование областей, в которых процессы образования частиц TiO_2 и их рост за счет гетерогенной реакции сбалансированы, что приводит к примерно постоянному значению средневзвешенного радиуса (в начале этих областей есть небольшие участки роста, см. рис. 2б и рис. 3б). Протяженность этих областей, равная 0.1 для первого варианта входных параметров (рис. 2а) и 0.2 для второго варианта (рис. 3а), зависит от скорости потока и расхода $TiCl_4$. В первом варианте в сечении реактора $z = 0.1$ скорость смеси на оси равна 14 м/с, а во втором соответственно 23 м/с, что связано с разными скоростями вдува струй $TiCl_4$. Массовые доли тетрагидрида титана в этом сечении равны $5 \cdot 10^{-6}$ и $6 \cdot 10^{-3}$, что свидетельствует о продолжающемся процессе конверсии $TiCl_4$ во втором варианте расчета. Переход к области роста размера частиц за счет коагуляции характеризуется прекращением зарождения мономеров TiO_2 и, соответственно, уменьшением их доли при вычислении средневзвешенного радиуса. Время выхода на стационарный режим, при прочих равных условиях, зависит от параметров вдуваемой струи тетрагидрида титана.

На рис. 4 представлено распределение функции логарифма плотности числа частиц вдоль реактора для первого варианта параметров струи $TiCl_4$. Из сравнения рис. 4а и рис. 4б видно, что порядок числа частиц при учете процесса коагуляции уменьшается вдвое.

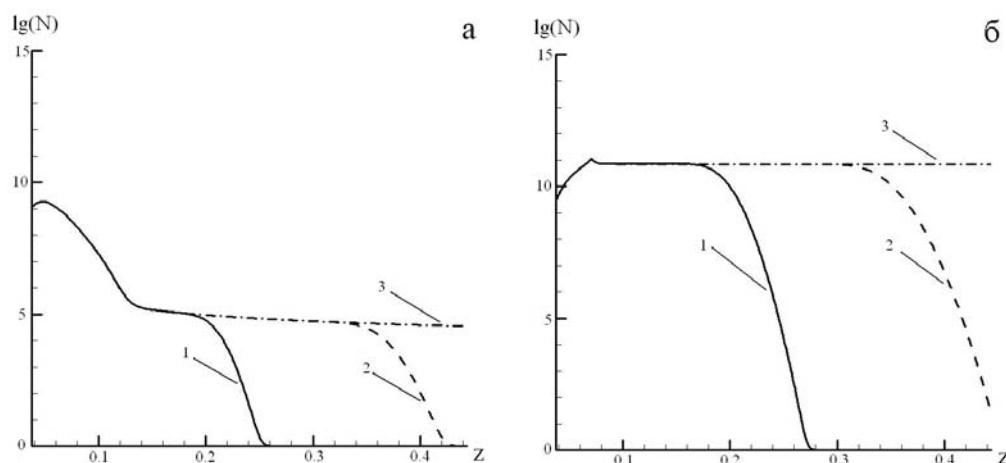


РИС. 4. Распределение вдоль реактора функции логарифм плотности числа частиц а — модель с коагуляцией; б — модель без коагуляции. $Q_2 = 1$ г/с, $u_2 = 22$ м/с; 1 — $t = 0.1$ с, 2 — $t = 0.2$ с, 3 — $t = 0.35$ с — стационарное решение

Параллельно с расчетами, на лабораторной установке по отработке технологической схемы электродугового процесса производства диоксида титана конверсией тетрахлорида титана в кислородной плазме было проведено несколько пробных пусков. Были получены образцы порошка диоксида титана. Для оценки размеров полученных частиц применялся метод БЭТ, позволяющий определить удельную поверхность порошка диоксида титана на основе низкотемпературной адсорбции инертного газа. Масса образца порошка диоксида титана составила 0.188 г. Согласно анализу порошка с помощью прибора «Сорби-М» площадь удельной поверхности образца составила 8.69 м²/г, средний размер частиц (считая их сферическими) — 164 нм. В экспериментах расход тетрахлорида титана получился равным $Q_2 = 3.42$ г/с, что превышало задаваемый в расчетах. Линейная экстраполяция полученных в расчетах данных о зависимости радиуса частиц от расхода $TiCl_4$ дает размер частиц 160 нм. Это позволяет говорить, в первом приближении, об удовлетворительном соответствии предложенной модели расчета образования и роста частиц диоксида титана реальному процессу.

Литература

- [1] Парфенов О. Г., Пашков Г. Л. Проблемы современной металлургии титана. — Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2008. — 279 с.
- [2] West R. H., Celnik M. S., Inderwildi O. R., Kraft M., Beran G. J. O., Green W. H. Toward a comprehensive model of the synthesis of TiO_2 particles from $TiCl_4$ // *Ind. Eng. Chem. Res.* — 2007. — V. 46, № 19. — P. 6147–6156.
- [3] Аульченко С. М. Моделирование процесса образования газовой компоненты TiO_2 в рабочей зоне плазмохимического реактора // *Инженерно-физический журнал.* — 2011. — Т. 84, № 3. — С. 610-614.
- [4] Елизарова Т. Г. Квазигазодинамические уравнения и методы расчета вязких течений. — М.: Научный мир, 2007. — 352 с.
- [5] Aulchenko S. M., Kartayev E. V., Kovalev O. B. Modeling of vapor-phase TiO_2 formation in working area of plasmachemical reactor // *International Conference on the Methods of Aerophysical. Research: Abstr. Pt. 1.* Novosibirsk, November 1-6, 2010.
- [6] Аульченко С. М., Картаев Е. В., Ковалев О. Б. Моделирование процесса образования газовой компоненты TiO_2 в рабочей зоне плазмохимического реактора // Тезисы докладов II Всероссийского семинара «Фундаментальные основы МЭМС-и нанотехнологий», Новосибирск, 6-8 апреля 2010 г.

- [7] Spicer P., Chaoul O., Tsantilis S., Pratsinis S. Titania formation by $TiCl_4$ gas phase oxidation, surface growth and coagulation // *J. Aerosol Science*. — 2002. — V. 33. — P. 17–34.
- [8] Аульченко С. М., Картаев Е. В., Ковалев О. Б. Моделирование процесса образования диоксида титана в рабочей зоне плазмохимического реактора // Тезисы докладов III Всероссийского семинара «Фундаментальные основы МЭМС- и нанотехнологий», Новосибирск, 25–27 мая 2011 г.

КРИТЕРИЙ ОЦЕНКИ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПОВЕРХНОСТИ

М. А. Фролова¹, А. С. Тутыгин¹, А. М. Айзенштадт¹,
В. С. Лесовик², Т. А. Махова¹, Т. А. Поспелова¹

¹Северный (Арктический) федеральный университет им. М. В. Ломоносова

²Белгородский государственный технологический университет им. В. Г. Шухова

tatiana-makhova2008@yandex.ru, aizenstadt@agtu.ru

Используя метод Зисмана, рассчитаны значения критического поверхностного натяжения жидкости (растворы этанола с различным содержанием воды) на границе с твердым телом (фракции песчаного грунта с различной степенью дисперсности). Показано, что с увеличением степени дисперсности, значительно возрастает запас свободной поверхностной энергии и усиление межчастичного взаимодействия. На основании проведенного исследования, в качестве критериев процесса формирования и характеристики состояния поверхности дисперсного сырья предлагается использовать постоянную Гамакера и критическое значение поверхностного натяжения. Это позволит оценить силу взаимосвязи композитов на основе наноструктур.

Ключевые слова: микрогетерогенные системы, поверхностное натяжение, площадь поверхности, постоянная Гамакера, наноразмерные структуры.

1. Введение

Наноразмерный материал характеризуется размером частиц, его составляющих, в пределах 10–100 нм. Эти системы по степени дисперсности являются промежуточными между истинными гомогенными растворами (размер частиц менее 1 нм) и микрогетерогенными системами (размер частиц более 1 мкм). По сути, наносистемы представляют собой структуры, в которых вещество находится в коллоидной степени дисперсности (10^5 – 10^7 см⁻¹). Данный факт делает возможным использовать основные законы коллоидной химии для описания свойств наносистем. В этом плане важной отличительной особенностью коллоидного состояния вещества является наличие громадной площади поверхности материала (свободной поверхностной энергии). Количественной мерой свободной поверхностной энергии в конденсированных системах, другими словами, критерием направленности и самопроизвольности трансформационных процессов служить величина изменения изобарно-изотермического потенциала (энергии Гиббса). Как известно из классической термодинамики в условиях постоянства давления и температуры изменение свободной поверхностной энергии системы определяется характеристической функцией (ΔG) и равно:

$$\Delta G = \sigma \cdot \Delta S_{\text{уд}} + S_{\text{уд}} \cdot \Delta \sigma$$

где σ – величина поверхностного натяжения (н/м); $S_{\text{уд}}$ – удельная площадь поверхности (кг/м²) [1-4].

В случае твердых тел, процесс образования твердой поверхности носит необратимый характер. Появление свободной поверхности в твердом теле связано с возникновением дефектов, которые разрывают массу вещества, благодаря чему частицы оказываются на поверхности. Данная работа производится только внешними механическими силами. Кроме того, если в жидкости поверхностное натяжение реализуется в виде стремления сократить поверхность с образованием сферических капель, то в твердом теле этому препятствуют механические силы жесткости кристаллической решетки. Поэтому, как отмечают авторы

[5], параметр σ для твердого тела является мерой накопления энергии в разуплотненном поверхностном слое (мерой свободной поверхностной энергии).

Реальное значение поверхностного натяжения твердого тела определить невозможно, вместе с тем, поверхностную энергию такого вещества можно рассчитать с помощью критического поверхностного натяжения жидкости (σ_k) на границе с твердым телом (метод Г.А. Зисмана) [6,7].

Для использования метода Зисмана на практике необходимо получить зависимость $\cos \theta = f(\sigma)$ для различных жидкостей и экстраполируя усредненную кривую до $\cos \theta = 1$, определить критическое значение поверхностного натяжения, σ_k , которое и является характеристикой поверхностной энергии единицы поверхности твердой фазы.

Целью данной работы является — экспериментальное определение значений критического поверхностного натяжения твердой поверхности, образованной частицами разной степени дисперсности (100 — 0,1 мкм) и расчет по экспериментальным данным для данных систем величины свободной поверхностной энергии и постоянной Гамакера — как критерия силы межчастичного взаимодействия за счет дисперсионных сил.

2. Экспериментальная часть

В качестве объекта исследований нами был выбран песчаный грунт, относящийся к числу грунтов — «пески пылеватые», предварительно отмывтый от глинистых включений и высушенный до постоянной массы при температуре 110⁰С. Из исходного сырьевого материала методом диспергирования были получены четыре фракции, отличающиеся степенью дисперсности вещества. Средний размер частиц фракции №1 определен ситовым анализом и составил 0,10±0,05 мм. Средние размеры частиц фракций № 2, № 3 и № 4 составили 2±1 мкм, 400±100 нм и 100±50 нм, соответственно. Фракция № 2 получена путем измельчения фракции № 1 на шаровой мельнице Retsch PM100 (время помола — 30 мин при 420 об/мин). Фракция № 3 получена дроблением водной суспензии фракции № 2 на коллоидной мельнице ИКА magic LAB (время помола — 30 мин при 20000 об/мин), а фракция № 4 — жидким помолом продолжительностью 5 часов фракции № 2 на планетарной шаровой мельницы при 420 об/мин. Размер частиц фракций №№ 2-4 определялся на установке Delsa Nano Series Zeta Potential and Submicron Particle Size Analyzers. Вместе с тем нельзя не отметить факт, изложенный в исследованиях [8], авторы которых отмечают, что только комплексный подход к определению размеров наночастиц, базирующийся на использовании широкого спектра методов может дать надежную информацию о размере частиц. Однако в нашем случае, мы считаем, можно ограничиться порядком данной величины, а не абсолютным значением этого параметра.

Фракционная плотность песчаных грунтов определялась стандартным методом [9]. Величина удельной поверхности и пористости материала рассчитывалась по экспериментальным результатам воздухопроницаемости поверхности, измеряемой методом Товарова [10]. Для фракций с размером частиц 400 и 100 нм удельная поверхность рассчитывалась исходя из размера частиц (допуская их плотную упаковку), так как метод Товарова в этом случае реализовать невозможно.

Для реализации метода Зисмана нами использовались растворы этанола с различным содержанием водной фракции, причем концентрация водной фракции в растворе не превышала 50%. Это связано с ограничениями метода: во-первых, для измерения краевого угла смачивания следует использовать лишь слабополярные жидкости; во-вторых, при величине поверхностного натяжения жидкости более 35 мДж/м² метод дает высокую погрешность [7]. Поверхностное натяжения водных растворов спирта (для исследований использовался спирт технический гидролизный, 96%) и угол смачивания поверхности дисперсных систем

измеряли при температуре 20⁰С на установке KRUSS Easy Drop. В табл. 1 представлены полученные значения поверхностных натяжений используемых водно-спиртовых растворов ($\sigma_{ж}$).

Для определения угла смачивания исследуемых фракций сыпучего материала нами были изготовлены испытательные образцы путем запрессовки соответствующей фракции грунта при нагрузке 1,5 кПа в металлическую форму, диаметром 10 мм.

ТАБЛИЦА 1. Значения поверхностного натяжения водно-этанольных растворов

№ п/п	Содержание воды, %	$(\sigma_{ж} \pm 0,02) \times 10^3$, н/м
1	0	24,74
2	10	26,61
3	20	27,34
4	30	28,11
5	40	28,42
6	50	31,31

Кроме того, при проведении экспериментов специализированной компьютерной программой выбиралось время первого контакта жидкости с твердой поверхностью сыпучего материала. Для всех случаев испытаний данное состояние системы считали псевдоравновесным. Кроме того, нами проведены аналогичные исследования с образцом недробленого природного кварца (плотность — 2,65 г/см³ [11]).

3. Результаты и их обсуждение

На рис. 1 представлена функциональная зависимость $\cos \theta = f(\sigma_{ж})$ для исследуемых образцов, полученная на основе экспериментальных данных, а в табл. 2 приведены значения коэффициентов линейных уравнений этой зависимости, величина удельной поверхности образцов и рассчитанные значения $\sigma_{к}$ и ΔG . На рис. 2 приведена зависимость $\Delta G = f(\text{размер частиц})$, которая показывает значительное возрастание запаса свободной поверхностной энергии для наноразмерных структур.

Данные по измерению краевого угла показали, что для всех исследуемых образцов наблюдается линейная зависимость $\cos \theta = f(\sigma_{ж})$ с высоким значением коэффициента корреляции. Однако для фракций 1 и 2 (размер частиц 0,1мм и 2 мкм, соответственно) угол наклона линейной функции не соответствует характеристикам твердой поверхности, данный факт может быть свидетельством слабого межчастичного взаимодействия в этих системах. Вместе с тем, с увеличением степени раздробленности вещества зависимость $\cos \theta = f(\sigma_{ж})$ приближается к характеристикам, полученным для образца кварца (см. рис. 1, прямая 5).

Б.В. Дерягин с сотрудниками еще в [12] в теории молекулярного взаимодействия между микрообъектами предлагают метод расчета энергии взаимодействия между частицами, которая применительно к нашему случаю сводится к использованию следующего уравнения [13]:

$$\cos \Theta = 1 + \frac{A}{12\pi h_{\min}^2 \sigma_{ж}}$$

где h_{\min} — наименьшая толщина пленки, которая соответствует Ван-дер-Ваальсовому расстоянию (0,24 нм); $\sigma_{ж}$ — поверхностное натяжение жидкости; A — постоянная Гамакера при

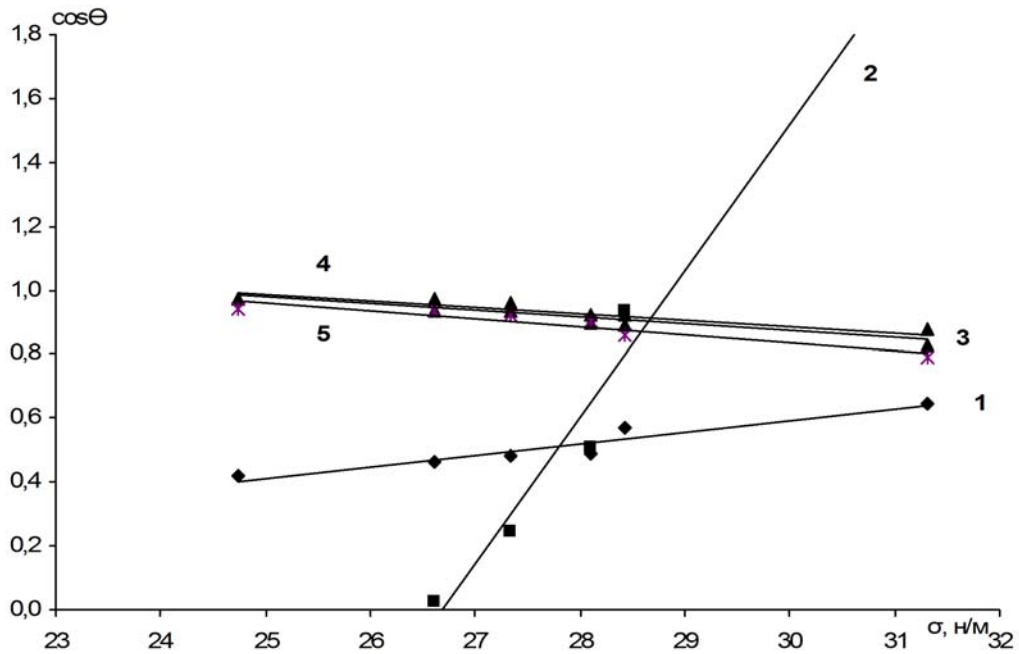


РИС. 1. Функциональная зависимость $\cos \Theta = f(\sigma_{\text{ж}})$: 1 – фракция № 1 (0,1мм); 2 – фракция № 2 (2мкм); 3 – фракция № 3 (400нм); 4 – фракция № 4 (100нм); 5 - кварц

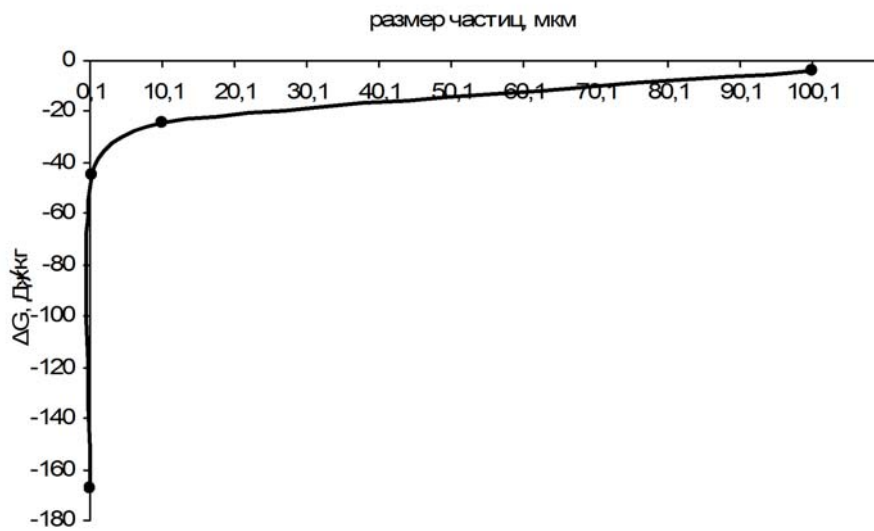


РИС. 2. Изменение параметра ΔG в зависимости от размера частиц

ТАБЛИЦА 2. Значение коэффициентов в уравнении $\cos \theta = a\sigma_{ж} + b$, $\sigma_{ж}$ и ΔG

Фракция	Коэффициент		Коэффициент корреляции, r	$\sigma_{ж} \cdot 10^3$, н/м	$S_{уд}$, м ² /кг	ΔG , Дж/кг
	a	b				
Кварц	-0,025	1,6	0,93	24,0	-	-
100 нм	-0,027	1,6	0,91	23,7	11320	-167,2
400 нм	-0,021	1,5	0,96	25,0	3644*	-44,9
2 мкм	0,26	-6,4	0,95	28,5	1337*	-24,2
0,10 мм	0,04	-0,5	0,96	37,5	70*	-3,6

* значения фракционной плотности для образцов фракций №№ 1, 2 и 3 равны 2,61; 2,74 и 3,49 г/см³ (соответственно). Значение плотности для фракции №4 составило 2,65 г/см³ (для природного кварца)

взаимодействию жидкости с твердым телом на границе с воздухом. Следовательно, постоянная A может служить критерием оценки приближения раздробленного состояния вещества к состоянию поверхности твердого тела.

Для расчета постоянной Гамакера нами построены функциональные зависимости $\cos \theta - 1 = f(1/\sigma_{ж})$ для всех серий эксперимента, которые имеют линейный характер. На рис. 3 представлены данные зависимости для фракций с размером частиц 400, 100 нм и кварца.

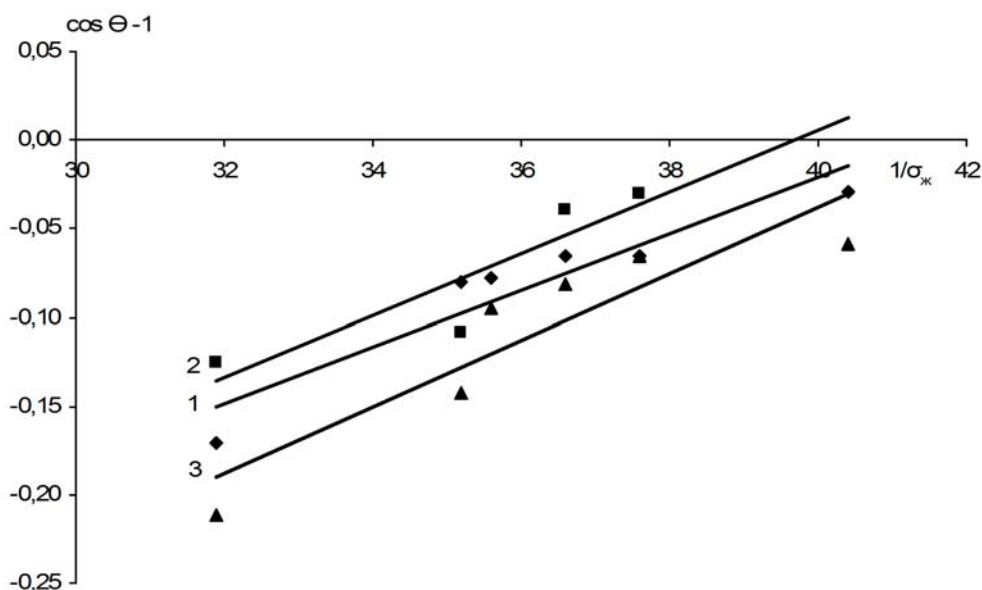


Рис. 3. Функциональная зависимость вида $\cos \theta - 1 = f(1/\sigma_{ж})$: 1 — фракция 400 нм; 2 — фракция 100 нм; 3 — кварц

В табл. 3 приведены значения коэффициентов линейных уравнений данной зависимости. Кроме того, в этой же таблице представлены рассчитанные значения константы Гамакера (A), причем полученные результаты для кварца ($4,1 \cdot 10^{-20}$ Дж) хорошо совпадают с литературными данными ($4,5 \cdot 10^{-20}$ Дж) [14]. Отрицательные значения константы A для фракций 1 и 2, на наш взгляд, объясняется пористостью поверхности образцов в связи с не плотной упаковкой частиц и, в следствии этого, слабым дисперсионным взаимодействием.

ТАБЛИЦА 3. Значение коэффициентов в уравнении $\cos \theta - 1 = a\sigma_{ж} + b$

Фракция	Коэффициент		Коэффициент корреляции, r	$A \cdot 10^{20}$, Дж
	a	b		
Кварц	0,019	-0,79	0,91	4,1
100 нм	0,018	-0,78	0,93	3,9
400 нм	0,016	-0,66	0,94	3,4
2 мкм	-0,180	6,17	0,94	-32,8
0,1 - 0,25 мм	-0,028	0,52	0,95	-18,0

Резюмируя полученные результаты, следует отметить, что уменьшение критического значения поверхностного натяжения образцов при увеличении степени дисперсности, на наш взгляд, связано с компенсацией запаса свободной энергии системы на усиление межчастичного взаимодействия. Увеличение константы Гамакера может свидетельствовать о приближении силы взаимодействия между частицами в нанодисперсном состоянии к твердой поверхности. Метод Зисмана можно применять для определения критерия процесса формирования и характеристики состояния поверхности дисперсного сырья при оценке силы взаимосвязи композитов на основе наноструктур. В качестве критериев предлагается использовать постоянную Гамакера и критическое значение поверхностного натяжения.

Работа выполнена при поддержке Федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 годы.

Литература

- [1] Рыжонков Д.И., Левина В.В., Дзидзигури Э.Л. Наноматериалы. — М.: БИНОМ, 2008. — 365 с.
- [2] Воюцкий С.С. Курс коллоидной химии. — М.: Химия, 1984. — 573 с.
- [3] Королев В.А. Термодинамика грунтов: Учебное пособие. — М.: МГУ, 1997. — 168 с.
- [4] Гельфан М.И., Ковалевич О.В., Юстратов В.П. Коллоидная химия // СПб.: Изд-во «Лань», 2008. — 336 с.
- [5] Поверхностное натяжение и свободная поверхностная энергия вещества. URL: <http://nanostr.ru>
- [6] Ролдунгин В.И. Физикохимия поверхности: Учебник-монография. — Долгопрудный: Изд. дом «Интеллект», 2008. — 508 с.
- [7] Волков В.А. Коллоидная химия. — М., 2001. URL: <http://www.xumuk.ru>
- [8] Альмяшева О.В., Федоров Б.А., Смирнов, Гусаров В.В. Размер, морфология и структура частиц нанопорошка диоксида циркония, полученного в гидротермальных условиях // Наносистемы: физика, химия, математика. — 2010. — Т. 1, № 1. — С. 26–36.
- [9] ГОСТ 5180-84 Грунты. Методы лабораторного определения физических характеристик.
- [10] Никитин Ю.И., Петасюк Г.А. Методы, приборы и результаты определения удельной поверхности алмазных порошков // Сверхтвердые материалы. — 2008. — № 1. — С. 77–93.
- [11] Грунтоведение. Под ред. Сергеева Е.М. — М.: МГУ, 1983. — 392 с.
- [12] Дерягин Б.В., Абрикосова И.И., Лифшиц Е.М. Молекулярное притяжение конденсированных тел // Усп. физ. наук. — 1958. — Т. LXIV, вып. 3. — С. 494–526.
- [13] Дерягин Б.Д., Чураев Н.В. Смачивающие пленки // М.: Изд-во «Наука», 1984. — 160 с.
- [14] Тищенко А.И., Корнеев И.А., Агапов М.Н. Оценка прочности индивидуального контакта между твердыми структурными элементами лессовых оснований зданий массовой серийной застройки // Ползуновский вестник. — 2007. — № 1–2. — С. 55–57.

УДК 54.057

ФОРМИРОВАНИЕ НАНОЧАСТИЦ Cr_2O_3 В ГИДРОТЕРМАЛЬНЫХ УСЛОВИЯХ

А. Н. Бугров¹, О. В. Альмяшева^{1,2}

¹Институт высокомолекулярных соединений РАН

²Санкт-Петербургский государственный технологический институт
(технический университет)

bugrov.an@mail.ru, almjasheva@mail.ru

PACS 61.46.Nk

Показано влияние химической предистории гидроксида хрома на процессы дегидратации и кристаллизации в системе $\text{Cr}_2\text{O}_3\text{-H}_2\text{O}$ в условиях термо- и гидротермальной обработки. Определены условия гидротермальной обработки, позволяющие получить нанокристаллы Cr_2O_3 .

Ключевые слова: наночастицы, нанопорошок, оксид хрома, гидротермальный синтез.

1. Введение

Оксид хрома Cr_2O_3 являясь огнеупорным материалом с высокой температурой плавления и стойкостью к окислению [1], широко применяется для получения керамики [2], служит носителем для катализаторов или входит в их состав, что дает возможность применять такие катализаторы вплоть до 1000°C , без заметного изменения состава [3].

В работе [4] отмечается, что использование в качестве исходного наноразмерного порошка Cr_2O_3 , позволяет получать материалы со значительно большей площадью поверхности, улучшенными механическими, структурно-прочностными и каталитическими свойствами.

В связи с этим представляет интерес изучение процессов формирования нанокристаллического оксида хрома и исследования его свойств.

Для синтеза наноразмерных материалов в настоящее время используется ряд методов [5–10], в том числе метод дегидратации гидроксидов металлов в гидротермальных условиях, позволяющий получать нанокристаллические слабоагломерированные оксидные материалы с достаточно узким распределением частиц по размерам [9, 10]. Вместе с тем, как можно заключить из анализа результатов работ [11, 12], существует некоторая несогласованность данных относительно условий дегидратации в системе $\text{Cr}_2\text{O}_3\text{-H}_2\text{O}$ при повышенном давлении. Таким образом, уточнение Р-Т-диаграммы химических превращений в системе $\text{Cr}_2\text{O}_3\text{-H}_2\text{O}$ и получение нанокристаллов оксида хрома является актуальной задачей.

2. Экспериментальная часть

В качестве исходных веществ, для гидротермальной обработки использовали гидроксид хрома, полученный различными методами: 1) осаждением из 0.3 М раствора хлорида (хч) хрома, 12 М раствором NH_4OH (осч); 2) осаждением из 0.3 М раствора нитрата (чда) хрома, 12 М раствором NH_4OH (осч). Осадок $\text{Cr}(\text{OH})_3$ промывали до нейтрального рН и отрицательной реакции на хлорид или нитрат ионы, затем сушили при температуре 75°C .

Дегидратацию гидроксида хрома в гидротермальных условиях проводили в широком диапазоне значений температуры ($T = 300\text{--}500^\circ\text{C}$), давления ($p = 0.1\text{--}50$ МПа) и продолжительности изотермической выдержки ($\tau = 1\text{--}24$ ч) по методике, описанной в [9]. В качестве гидротермальной среды использовалась дистиллированная вода.

Для определения элементного состава образцов использовали метод энергодисперсионного микрорентгеноспектрального анализа (микронзондовая приставка к сканирующему электронному микроскопу Oxford Link). Погрешность определения содержания элементов составляла в среднем ± 0.3 мас. %.

Фазовый состав полученных образцов определяли методом рентгенофазового анализа на дифрактометре ДРОН-3М (CuK_α -излучение).

Размер частиц определяли в соответствии с рекомендациями работы [13] по уширению линий рентгеновской дифракции образцов с использованием формулы Шеррера и методом просвечивающей электронной микроскопии (микроскоп ЭМ-125 с $U_{\text{уск}}=75$ кВ).

Исследование влияния температурной обработки на фазовый состав и структуру наночастиц Cr_2O_3 проводили методом комплексного термического анализа, включающего дифференциально-сканирующую калориметрию, термогравиметрию, масс-спектрометрию, (синхронный термоанализатор STA 429 CD фирмы NETZSCH, совмещенный с масс-спектрометром QMS 403C), а также путем нагрева образца до заданной температуры со скоростью $10^\circ/\text{мин}$, быстрого охлаждения и дальнейшего рентгенофазового анализа.

Площадь удельной поверхности определяли методом тепловой десорбции азота.

3. Результаты и обсуждение

Результаты рентгенофазового анализа образцов, полученных осаждением гидроксида хрома из растворов хлорида и нитрата хрома, свидетельствуют, что в обоих случаях образцы являются рентгеноаморфными. Данные комплексного термического анализа (рис. 1) показывают, что при нагревании образца, полученного осаждением из раствора CrCl_3 , на кривой ДСК (рис. 1.1а) в диапазоне температур $75\text{--}500^\circ\text{C}$ наблюдается широкий эндотермический эффект сопровождающийся значительной потерей массы (рис. 1.1б, $\Delta m = 33\%$) и двумя накладывающимися пиками на кривой масс-спектрометрии (рис. 1.1в), соответствующими соединению с молекулярной массой 18, что, по-видимому, отвечает выделению воды. При этом, судя по результатам рентгенофазового анализа, образец остается рентгеноаморфным. Таким образом, при нагревании гидроксида хрома, полученного из раствора CrCl_3 в диапазоне температур $75\text{--}500^\circ\text{C}$ наблюдается протекание процесса дегидратации с образованием аморфного Cr_2O_3 . Причем, следует отметить, что удаление воды, по-видимому, происходит в два этапа: $\text{Cr}(\text{OH})_3 \xrightarrow{80\text{--}310^\circ\text{C}} \text{CrOOH} \xrightarrow{310\text{--}500^\circ\text{C}} \text{Cr}_2\text{O}_3$ (см. рис. 1.1).

Дальнейшее повышение температуры до 590°C приводит к появлению на термограмме интенсивного экзотермического эффекта сопровождающегося достаточно резкой, однако не значительной ($\Delta m = 0.43\%$) потерей массы (рис. 1.1б) и фиксацией на кривой масс-спектрометрии (рис. 1.1в) пиков соответствующих выделению воды и следового количества соединения с молярной массой 32, возможно кислорода. По-видимому, удаление из оксида хрома воды и кислорода инициировано процессом кристаллизации Cr_2O_3 .

При нагревании образца, полученного осаждением из $\text{Cr}(\text{NO}_3)_3$, характер кривой ДСК сохраняется (рис. 1.2а). В диапазоне температур соответствующих эндотермическому эффекту на кривых потери массы и масс-спектрометрии фиксируются накладывающиеся пики, отвечающие удалению воды: $\text{Cr}(\text{OH})_3 \rightarrow \text{CrOOH}$ — до 250°C и $\text{CrOOH} \rightarrow \text{Cr}_2\text{O}_3$ — $250\text{--}400^\circ\text{C}$, а также пики, по-видимому, соответствующие выделению примесных ионов, вошедших в структуру в ходе осаждения $\text{Cr}(\text{OH})_3$. Следует отметить, что температурный

диапазон протекания первого процесса, т.е. дегидратации гидроксида хрома, полученного осаждением из нитрата хрома, совпадает с температурным диапазоном протекания процесса дегидратации в случае нагревания $\text{Cr}(\text{OH})_3$, полученного осаждением из раствора хлорида хрома. Тогда как температура начала второго этапа дегидратации ($\text{CrOOH} \rightarrow \text{Cr}_2\text{O}_3$) значительно ниже ($200\text{--}400^\circ\text{C}$), по сравнению с образцом, полученным из хлорида хрома ($350\text{--}500^\circ\text{C}$).

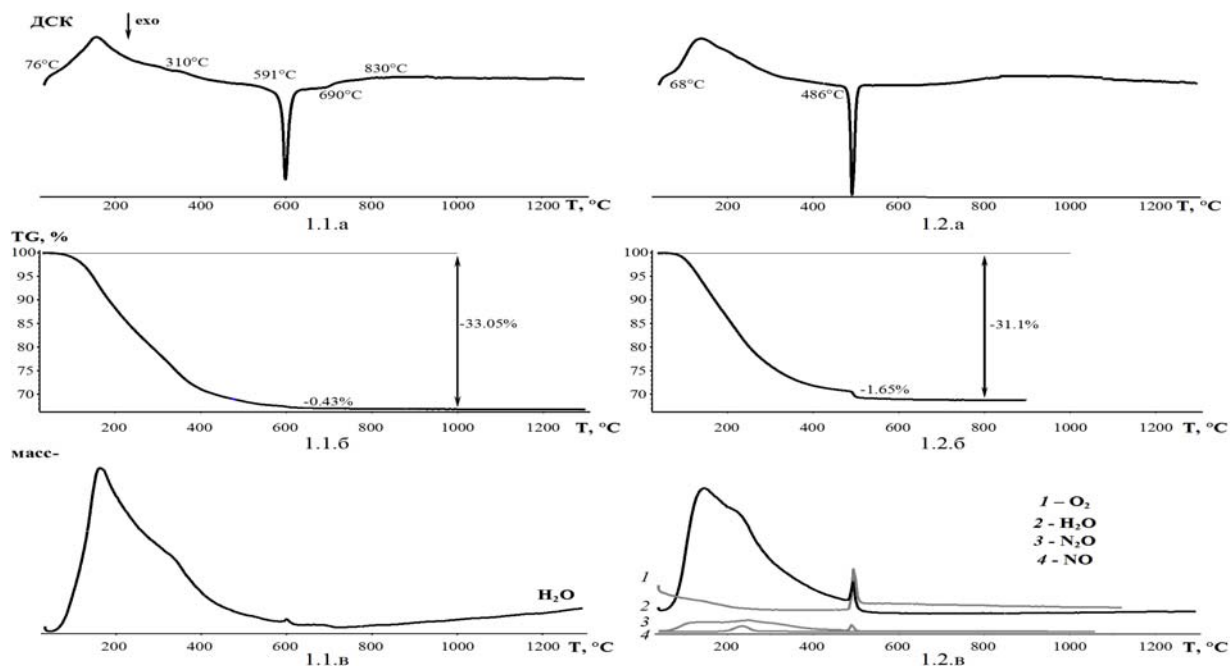


РИС. 1. Результаты комплексного термического анализа $\text{Cr}(\text{OH})_3$, полученного осаждением из растворов CrCl_3 (1) и $\text{Cr}(\text{NO}_3)_3$ (2): а — дифференциальная сканирующая калориметрия; б — термогравиметрический анализ; в — масс-спектрометрический анализ газовой фазы при нагревании $\text{Cr}(\text{OH})_3$.

Интенсивный экзотермический эффект также смещается в область более низких температур примерно на 110°C (490°C). Экзотермический эффект в данном случае сопровождается более ярко выраженной степенью потери массы $\Delta m = 1.65\%$, по сравнению с гидроксидом хрома, полученным из раствора CrCl_3 . На кривой масс-спектрометрии, данный эффект сопровождают пики соответствующие выделению воды, кислорода, оксидов азота I и II (рис. 1.2в).

Появление в масс-спектре обоих образцов линий, отвечающих выделению кислорода, может быть вызвано процессами восстановления Cr^{6+} , находящегося в поверхностном слое, инициированными кристаллизацией Cr_2O_3 .

Смещение тепловых эффектов на кривой ДСК в более высокотемпературную область в случае $\text{Cr}(\text{OH})_3$, полученного из раствора CrCl_3 , по-видимому, можно объяснить наличием в его структуре ионов хлора, которые вероятно стабилизируют CrOOH , замещая часть OH^- -групп ($\text{CrO}(\text{OH})_{1-x}\text{Cl}_x$).

Гидроксид хрома, полученный осаждением из раствора хлорида хрома, подвергался гидротермальной обработке при температуре $450\text{--}500^\circ\text{C}$, давлении $30\text{--}50$ МПа и продолжительности изотермической выдержки от 0.5 до 4 часов. На основании результатов РФА можно заключить, что в случае гидротермальной обработки, также как и при термообработке на воздухе процесс образования нанокристаллов оксида хрома протекает в две

стадии. При температуре 450°C и изотермической выдержки от 1 до 3 час на рентгеновской дифрактограмме фиксируются рефлексы соответствующие оксигидроксиду хрома (рис. 2, кривые 2–5), через 3.5 часа появляются пики, отвечающие следовому количеству оксида хрома, а выдержка в течение 4 часов приводит к образованию в качестве кристаллической модификации только оксида хрома (рис. 2, кривая 7). Однако, фиксируемое на кривой 7 в области малых углов гало, как правило, соответствующее наличию вещества в аморфном состоянии и анализ данных электронной микроскопии (рис. 3а), по-видимому, свидетельствуют о том, что в указанных условиях после дегидратации CrOOH кристаллизуется лишь незначительная часть Cr_2O_3 . Следует отметить, что согласно диаграмме фазовых превращений $\text{Cr}_2\text{O}_3\text{-H}_2\text{O}$, представленной в [15], формирование кристаллического оксида хрома начинается при более высокой температуре — 500°C , а при повышении давления до 50МПа, температура дегидратации CrOOH повышается до 600°C .

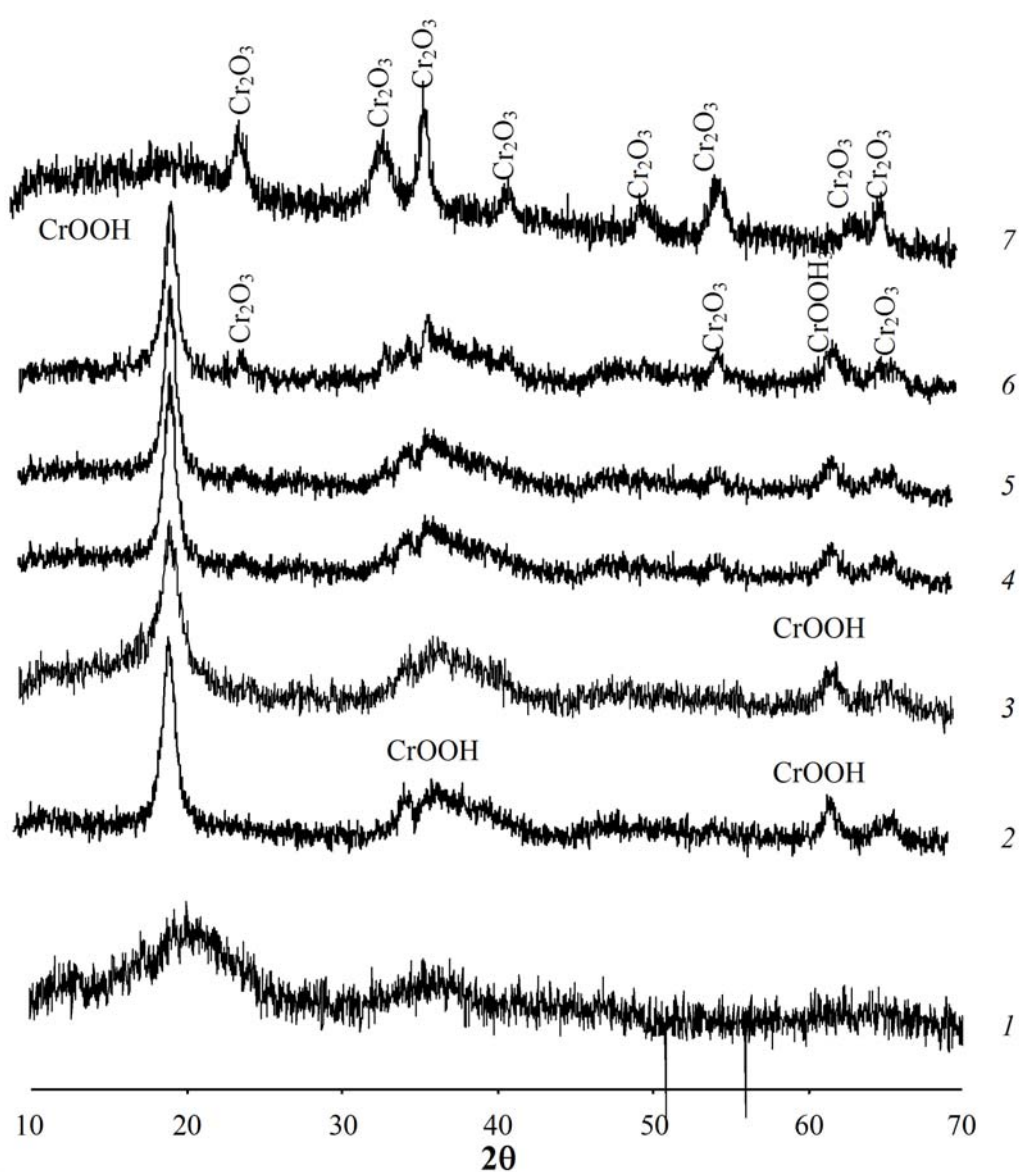


РИС. 2. Рентгеновские дифрактограммы образцов, полученных в ходе гидротермальной обработки $\text{Cr}(\text{OH})_3$ при температуре 450°C в течение: 1 — 0.5 ч; 2 — 1 ч; 3 — 1.5 ч; 4 — 2 ч; 5 — 3 ч; 6 — 3.5 ч; 7 — 4 ч.

Повышение температуры гидротермальной обработки до 500°C при изотермической выдержке в течение 3 ч приводит к образованию нанокристаллического оксида хрома (рис. 4, кривая 2). Наночастицы имеют форму сплюснутого эллипса со средним размером около 35 нм (рис. 3б). Следует отметить, что размер ОКР полученных наночастиц, рассчитанный на основании анализа уширения рентгеновских максимумов, составляет 30 нм и в пределах погрешности совпадает с данными электронной микроскопии (рис. 3).

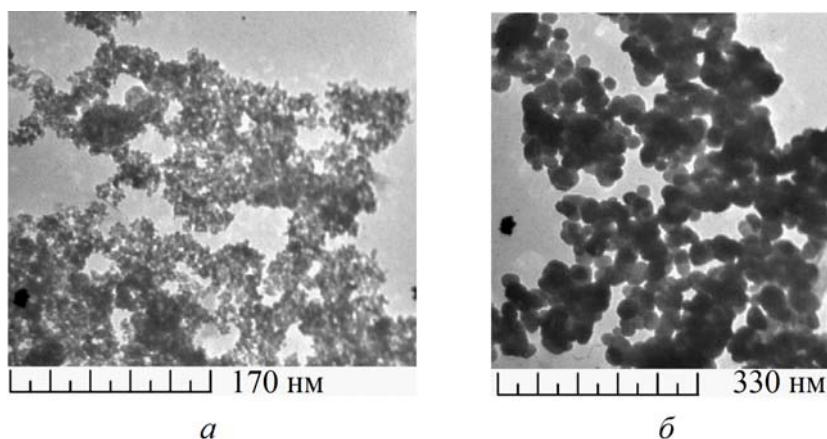


Рис. 3. Микрофотографии Cr_2O_3 после гидротермальной обработки при температуре 400°C (а) и 500°C (б) в течение 4 и 3 часов соответственно.

Исследование влияния давления на процесс кристаллизации Cr_2O_3 в гидротермальных условиях проводилось при температуре обработки 500°C и продолжительности изотермической выдержки 3 часа. Рентгеновские дифрактограммы образцов прошедших обработку при давлении 0.1 МПа (термообработка при атмосферном давлении), 10 МПа и 50 МПа представлены на рис. 4. Анализ результатов представленных на рис. 4 свидетельствует о том, что фазовый состав конечного продукта в большой степени зависит от давления гидротермальной обработки.

Так термообработка гидроксида хрома при атмосферном давлении приводит к образованию исключительно кристаллического Cr_2O_3 с размером частиц около 40 нм. При увеличении давления до 10 МПа фазовый состав продуктов реакции не изменяется, на рентгеновской дифрактограмме фиксируются пики отвечающие оксиду хрома, однако размер ОКР заметно уменьшается до 20 нм. В случае гидротермальной обработки $\text{Cr}(\text{OH})_3$ при давлении 50 МПа на рентгеновских дифрактограммах наряду с максимумами Cr_2O_3 наблюдается появление пиков соответствующих оксигидроксида хрома (рис. 4). Причем размер ОКР как Cr_2O_3 , так и CrOOH несколько выше, чем в случае гидротермальной обработки при меньшем давлении и составляет 47 нм (Cr_2O_3), 20 нм (CrOOH).

В случае дегидратации гидроксида хрома, полученного осаждением из раствора $\text{Cr}(\text{NO}_3)_3$, скорость процесса дегидратации и средний размер образующихся частиц Cr_2O_3 значительно выше, чем при дегидратации $\text{Cr}(\text{OH})_3$, полученного осаждением из раствора CrCl_3 . Это, по-видимому, вызвано тем, что при гидротермальной обработке данного образца в гидротермальный раствор переходят ионы NO_3^- в значительной степени изменяя рН раствора и ускоряя процессы перекристаллизации, приводящие к росту частиц оксида хрома.

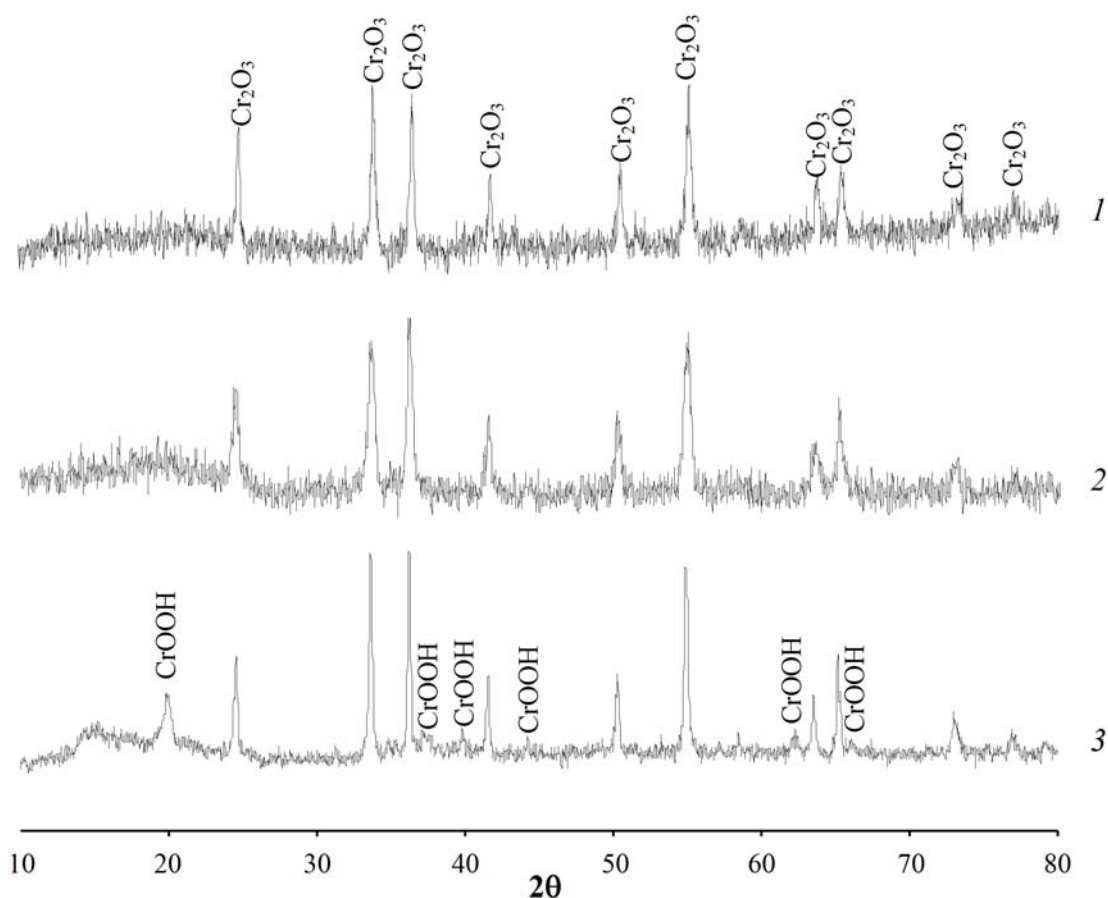


РИС. 4. Рентгеновские дифрактограммы Cr_2O_3 , полученного в ходе обработки гидроксида хрома при температуре 500°C , времени изотермической выдержки 3 ч, и давлении: 1 — 1 атм; 2 — 100 атм; 3 — 500 атм.

4. Заключение

Таким образом, показано влияние химической предыстории гидроксида хрома на процессы дегидратации и кристаллизации в системе $\text{Cr}_2\text{O}_3\text{-H}_2\text{O}$ в условиях термо- и гидротермальной обработки. Определены условия образования Cr_2O_3 в ходе гидротермальной обработки. Показано, что образование нанокристаллического Cr_2O_3 в гидротермальных условиях наблюдается при более низкой температуре, чем указано в работе [14].

Авторы выражают искреннюю благодарность В. В. Гусарову за помощь в обсуждении и трактовке результатов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (Федеральная целевая программа «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007-2013 годы», ГК №. 16.516.11.6082) и Российского фонда фундаментальных исследований (грант №. 10-08-00267).

Литература

- [1] Ocana M. Nanosized Cr_2O_3 hydrate spherical particles prepared by the urea method // J. European Ceram. Soc. — 2001. — V. 21. — P. 931–939.

- [2] Li T., Brook R. J., Derby B. Fabrication of reaction-bonded Cr₂O₃ ceramics // J. European Ceram. Soc. — 1999. — V. 19. — P. 1651–1664.
- [3] Стайлз Э.Б. Носители и нанесенные катализаторы. Теория и практика. — М.: Химия, 1991. — 232 с.
- [4] Роде Т.В. Кислородные соединения хрома и хромовые катализаторы. — М.: Изд-во АН СССР, 1962. — 278 с.
- [5] Lima M.D., Bonadimann R., de Andrade M.J., Toniolo J.C., Bergmann C.P. Nanocrystalline Cr₂O₃ and amorphous CrO₃ produced by solution combustion synthesis // J. European Ceram. Soc.. — 2006. — V. 26. — P. 1213–1220.
- [6] Tsuzuki T., McCormick P.G. Synthesis of Cr₂O₃ nanoparticles by mechanochemical processing // Acta Materialia. — 2000. — V. 48. — P. 2795–2801.
- [7] Kim D.-W., Shin S.-I., Lee J.-D., Oh S.-G. Preparation of chromia nanoparticles by precipitation–gelation reaction // Materials Letters. — 2004. — V. 58. — P. 1894–1898.
- [8] Pei Z., Zhang Y. A novel method to prepare Cr₂O₃ nanoparticles // Materials Letters. — 2008. — V. 62. — P. 504–506.
- [9] Пожидаева О.В., Корыткова Э.Н., Романов Д.П., Гусаров В.В. Формирование нанокристаллов диоксида циркония в гидротермальных средах различного химического состава // Журн. общей химии. — 2002. — Т. 72, № 6. — С. 910–914.
- [10] Альмяшева О.В., Гусаров В.В. Образование наночастиц и аморфного оксида алюминия в системе ZrO₂-Al₂O₃-H₂O в гидротермальных условиях // Журн. неорганической химии. — 2007. — Т. 52, № 8. — С. 1194–1196.
- [11] Shafer M.W., Rustum R. Verbindungsbildung und phasengleichgewicht in den systemen Cr₂O₃-H₂O, Sc₂O₃-H₂O und Ti₂O₃-H₂O // Z. Anorg. Allg. Chem. — 1954. — V. 276. — P. 275–288.
- [12] Laubengayer A.W., McCune H.W. New crystalline phases in the system chromium (III) oxide-water // Depart. Chem. Cornell University. — 1951. — V. 74. — P. 2362–2364.
- [13] Альмяшева О.В., Федоров Б.А., Смирнов А.В., Гусаров В.В. Размер, морфология и структура частиц нанопорошка диоксида циркония, полученного в гидротермальных условиях // Наносистемы: физика, химия, математика. — 2010. — Т. 1, № 1. — С. 26–37.
- [14] Торопов Н.А., Барзаковский В.П., Лапин В.В., Курцева Н.Н. Диаграммы состояния силикатных систем. Справочник. — Л.: Наука, 1965. — Вып. 1. — 546 с.

ИНФОРМАЦИЯ И ПРАВИЛА ДЛЯ АВТОРОВ

Требования к оформлению статей для журнала «Наносистемы: физика, химия, математика»

Журнал принимает к публикации исследовательские и обзорные статьи, а также краткие научные сообщения, нигде ранее не опубликованные и не принятые к изданию в других журналах. Статьи могут быть предоставлены на русском или английском языке. Все статьи рецензируются, после чего при необходимости возвращаются автору на доработку. Плата за публикацию рукописей не взимается.

Предоставляемые материалы

1. Файл статьи на русском или английском языке, содержащий индекс УДК, название статьи, инициалы и фамилии авторов, полные названия мест работы, электронный адрес, аннотацию, ключевые слова, индекс PACS (рекомендовано), текст статьи, список литературы.
2. Файл Summary на английском языке, содержащий название статьи, фамилии и инициалы авторов, названия мест работы, адреса электронной почты, аннотацию статьи, ключевые слова, а также подробную информацию об авторах: Ф.И.О. полностью, место работы, должность, ученая степень, ученое звание.
3. Сопроводительное письмо (для русскоязычных авторов), содержащее на русском языке информацию о статье (название статьи, индекс УДК, ключевые слова, аннотацию, список литературы) и о всех авторах (фамилии, имена, отчества, полное название мест работы, почтовый адрес с индексом, номер контактного телефона с кодом города, электронный адрес).
4. Экспертное заключение о возможности опубликования статьи в открытой печати (для авторов из России).

Авторские материалы могут быть переданы в редакцию на любом электронном носителе, присланы на электронные адреса nanojournal.ifmo@gmail.com; porov@mail.ifmo.ru или представлены через электронный сайт журнала <http://nanojournal.ifmo.ru>

Требования к оформлению текста

Статьи принимаются в формате LaTeX (предпочтительно) или MS Word.

Рекомендованный объем кратких сообщений 4-6 страниц, исследовательских статей 6-15 страниц, обзоров до 30 страниц.

Формат страницы – А4, поля страницы: правое – 2 см, остальные – 2,5 см. Шрифт – Times New Roman, размер шрифта – 12 pt, межстрочный интервал – 1. Абзацный отступ – 1,5 см. Название статьи печатается заглавными буквами, размер шрифта 16 pt, полужирный, выравнивается по центру. Инициалы и фамилии авторов печатаются шрифтом 12 pt, обычный, выравнивается по центру. Название организации и электронный адрес печатается шрифтом 12 pt, обычный, выравнивается по центру. Аннотация печатается шрифтом 10 pt, обычный, выравнивается по ширине. Объем не

должен превышать 150 слов. Ключевые слова печатаются шрифтом 10 pt, обычный, выравнивается по ширине. Названия разделов печатаются шрифтом Times New Roman, 12 pt, полужирный, межстрочный интервал – 1, выравнивается по левому краю, отделяется от предыдущего раздела полуторной пустой строкой. Название подразделов печатаются шрифтом Times New Roman, 12 pt, полужирный, межстрочный интервал – 1, выравнивается по левому краю, отделяется от предыдущего подраздела пустой строкой. Подписи к рисункам печатаются шрифтом 10 pt, обычный, без абзацного отступа, выравнивается по ширине.

Оформление статьи в LaTeX

При подготовке статьи в LaTeX, пожалуйста, включайте в предоставляемые материалы как исходный текст LaTeX, так и откомпилированный PDF файл. Вы можете использовать любые пакеты LaTeX, которые входят в стандартные дистрибутивы. Если вы вынуждены использовать специфический пакет, вы должны приложить все необходимые для компиляции файлы. Определенные вами макросы не должны переопределять уже существующие.

Для включения рисунков в текст используйте стандартные команды, например, `\includegraphics`, или создавайте рисунки с помощью команд LaTeX. Обратите внимание, что использование команд PostScript для создания специальных эффектов непосредственно в тексте статьи запрещено.

Для набора выделенных формул используйте окружение `equation`, `gather`, `align`. Пожалуйста, не используйте окружения `array` и `eqnarray`.

Для ускорения процесса подготовки вашей статьи, подготовленной в LaTeX, вы можете использовать созданный нами класс `nsart.cls` (который можно запросить в редакции или скачать с сайта журнала <http://nanojournal.ifmo.ru/>).

Оформление статьи в MS Word

При оформлении статьи в MS Word формулы набираются в редакторе Math Type. Функции и символы химических элементов набираются шрифтом Times New Roman, прямой; переменные Times New Roman, наклонный; греческие буквы – Symbol, прямой; символы – Symbol, прямой; матрицы-вектора – Times New Roman, прямой, полужирный; числа – Times New Roman, прямой. Размеры: обычный – 14 pt, крупный индекс – 10 pt, мелкий индекс – 8 pt, крупный символ – 16 pt, мелкий символ – 12 pt. Нумерацию формул и ссылки на литературу желательно делать вручную.

Требования к иллюстрациям

Иллюстрации предоставляются отдельными файлами. Предпочтительнее использовать векторные форматы файлов (`eps`, `ps`). Если же используются растровые форматы файлов (`bmp`, `jpeg`, `png`), то разрешение файлов должно быть не менее 300 dpi. Иллюстрации должны быть контрастны, так как в печатной версии все иллюстрации будут черно-белыми. В электронной версии журнала сохраняются цветные иллюстрации.

Требования к названиям файлов

В названиях файлов используйте английский алфавит. Старайтесь выбирать названия файлов иллюстраций согласно их номерам в статье, например: `fig1.eps` и т.п.

Требование к оформлению списка литературы

Ссылки на список литературы даются только в тексте статьи цифрами в квадратных скобках (в LaTeX необходимо использовать автоматическую нумерацию с помощью команды `\cite{...}`).

Список литературы оформляется по следующему образцу:

- [1] Фамилия И.О., Фамилия И.О. Название книги. — СПб.: Наука, 2000. — 281 с.
- [2] Фамилия И.О., Фамилия И.О. Название статьи // Название журнала. — 2000. — Т. 1, № 5. — С. 17-23.
- [3] Фамилия И.О., Фамилия И.О. Название доклада // Сборник трудов конференции «Название конференции», место и дата проведения. — С. 17-23.
- [4] Фамилия И.О., Фамилия И.О. Название статьи. — 2010. URL/arXiv: <http://books.ifmo.ru/ntv>
- [5] Фамилия И.О., Фамилия И.О. Название патента // Патент РФ № 11111. — 2010. Бюл. № 33. — 5 с.
- [6] Фамилия И.О., Фамилия И.О. Название диссертации // Дис. докт. физ.-мат. наук. — СПб., 2000. — 105 с.

SUMMARIES

NONLINEARITY-DEFECT INTERACTION: SYMMETRY BREAKING BIFURCATION IN A NLS WITH A δ' IMPURITY

R. Adami, D. Noja

We illustrate some new results and comment on perspectives of a recent research line, focused on the stability of stationary states of nonlinear NLS with point interactions. We describe in detail the case of a " δ' " interaction, that provides a rich model endowed with a pitchfork bifurcation with symmetry breaking in the family of ground states. Finally, we give a direct proof of the stability of the ground states in the cases of a subcritical and critical (in the sense of the blow-up) nonlinearity power.

Keywords: nonlinear dynamics, quantum mechanics, solitons, symmetry breaking, pitchfork bifurcation.

Riccardo Adami – Dipartimento di Matematica e Applicazioni, Università di Milano Bicocca, Italy, Assistant Professor, riccardo.adami@unimib.it.

Diego Noja – Dipartimento di Matematica e Applicazioni, Università di Milano Bicocca, Italy, Assistant Professor, diego.noja@unimib.it.

ATTRACTIVE OR REPULSIVE CASIMIR EFFECT AND BOUNDARY CONDITIONS

M. Asorey, J.M. Muñoz-Castañeda

The Casimir force between two identical bodies, although highly dependent on their geometry and structure of boundaries, is always attractive. However, this force can become repulsive if the nature of the two boundaries is different. We analyze from a global perspective the analytic properties of the Casimir energy function in the space of the consistent boundary conditions \mathcal{M}_F for a massless scalar field confined between two homogeneous parallel plates.

The analysis allow us to completely characterize the boundary conditions which give rise to attractive and repulsive Casimir forces. In the interface between both regimes there is a very interesting family of boundary conditions which do not generate any type of Casimir force. We also find Casimirless boundary conditions which are invariant under the renormalization group flow. The conformal invariant boundary conditions which do not generate a Casimir force have not yet been exploited in string theory but open new interesting possibilities.

Keywords: Casimir effect, vacuum energy, boundary conditions, boundary renormalization group flow.

M. Asorey – Departamento de Física Teórica. Facultad de Ciencias. Universidad de Zaragoza, 50009 Zaragoza, Spain. Professor, asorey@unizar.es

J.M. Muñoz-Castañeda – Institut für Theoretische Physik, Universität Leipzig, G-04103, Leipzig, Germany. Postdoc, jose.munoz-castaneda@uni-leipzig.de

LANDAU-ZENER EFFECT FOR A QUASI-2D PERIODIC SANDWICH

N. Bagraev, G.Martin, B. S. Pavlov, A. Yafyasov

Bloch-waves in 1D periodic lattices are typically constructed based on the transfer-matrix approach, with a complete system of solutions of the Cauchy problem on a period. This approach fails for the multidimensional Schrödinger equations on periodic lattices, because the Cauchy problem is ill-posed for the associated elliptic partial differential equations. In our previous work we suggested a different procedure for the calculation of the Bloch functions for the 2D Schrödinger equation based on the Dirichlet-to-Neumann map substituted for the transfer -matrix. In this paper we suggest a method of calculation of the dispersion function and Bloch waves of quasi-2D periodic lattices, in particular of a quasi-2D sandwich, based on construction of a fitted solvable model.

Keywords: Landau-Zener effect, Bloch waves.

N. Bagraev – A.F.Ioffe Physico-Technical Institute, Russian Academy of Sciences, Saint Petersburg, Russia.

G.Martin – NZ Institute for Advanced study, Massey University, Albany Campus, New Zealand. Professor.

B. S. Pavlov – 1) NZ Institute for Advanced study, Massey University, Albany Campus, New Zealand; 2) V. Fock Institute for Physics at Physical Faculty of the St. Petersburg University, Saint Petersburg, Russia. Professor, DSc., pavlovenator@gmail.com.

A. Yafyasov – V. Fock Institute for Physics at Physical Faculty of the St. Petersburg University, Saint Petersburg, Russia. Professor, DSc.

BIFURCATION CONDITION FOR OPTIMAL SETS OF THE AVERAGE DISTANCE FUNCTIONAL

X.Y. Lu

Consider the quasi-static irreversible evolution of a connected network, which minimizes the average distance functional. We look for conditions forcing a bifurcation, thus changing the topology. We would give here a sufficient conditions. Then we will give an explicit example of sets satisfying the bifurcation condition, and analyze this special case. Proofs given here will be somewhat sketchy, and this work is based on the paper X.Y. Lu. Branching time estimates in quasi static evolution for the average distance functional, Preprint on CVGMT, in which more details can be found.

Keywords: Optimal transport, Euler scheme, minimizing movements, average distance.

X.Y. Lu – Scuola Normale Superiore, Pisa, Italy. PhD student in Mathematics, x.lu@sns.it

A NONLOCAL PROBLEM WITH INTEGRAL CONDITIONS FOR HYPERBOLIC EQUATION

L. S. Pulkina

In this article, we consider two initial-boundary value problems with nonlocal conditions. The main goal is to show the method which allows to prove solvability of a nonlocal problem with integral conditions of the first kind. This method is based on equivalence of a nonlocal problem with integral conditions of the first kind and nonlocal problem with integral conditions of the second kind in special form. Existence and uniqueness of generalized solutions to both problems are proved.

Keywords: Hyperbolic equation, nonlocal problem, integral conditions.

L. S. Pulkina – Samara State University, Samara, Russia. Professor, louise@samdiff.ru

THRESHOLD EIGENFUNCTIONS AND THRESHOLD RESONANCES OF SOME RELATIVISTIC OPERATORS

Y. Saitō, T. Umeda

We give a review of recent developments on the study of threshold eigenfunctions and threshold resonances of magnetic Dirac operators and Pauli operators. Emphasis is placed on a proof of the non-existence of threshold resonances of the magnetic Dirac operators in a concise manner.

Keywords: Dirac operators, magnetic potentials, threshold, energies, threshold resonances, threshold eigenfunctions, zero modes.

Yoshimi Saitō – Department of Mathematics, University of Alabama at Birmingham, Birmingham, USA, Emeritus Professor, saito@math.uab.edu.

Tomio Umeda – Department of Mathematical Sciences, University of Hyogo Himeji, Japan. Professor, umeda@sci.u-hyogo.ac.jp.

EFFECT OF ELECTRIC FIELD ON THE STRUCTURE OF THE FERROELECTRIC CHEVRON SMECTICS C*

K. G. Chernyak, V. P. Romanov, S. V. Ulyanov

We study the director orientation and variation of the layered structure of the chevron ferroelectric smectic C* in a bounded cell in presence of an external electric field. The spatial distribution of the director was calculated in systems possessing the orientational bistability. We analyze the transition between two equilibrium configurations in weak electric fields when the magnitude and direction of the field are changed. The transition has the form of a hysteresis loop. The value of the threshold field leading to the reorientation of the director was estimated. The variation of the layered structure occurs in strong fields when the contribution of the quadratic term of the field to the free energy is essential. In this case the spatial and orientational structure of smectic C* was obtained for different ratios between the

principal values of the permittivity tensor. It was shown that in some cases the increase of the external field should lead to the transition from the chevron to the "bookshelf" structure.

Keywords: Chevron ferroelectric smectic, thin films, bistability, the threshold fields

K. G. Chernyak – Saint Petersburg State University, Department of Physics, Saint Petersburg, Russia, spiritus00@gmail.com

V. P. Romanov – Saint Petersburg State University, Department of Physics, Saint Petersburg, Russia, vpromanov@mail.ru

S. V. Ulyanov – St. Petersburg Institute Commerce and Economics, Saint Petersburg, Russia, ulyanov_sv@mail.ru

SIMULATION OF FLOWS IN NANOCHANNELS BY THE MOLECULAR DYNAMICS METHOD

V. Ya. Rudyak, A. A. Belkin, V. V. Egorov, D. A. Ivanov

On the basis of molecular dynamics method the algorithm for the first time enables to simulate a plane flow in nanochannels with a pressure drop is proposed. Interaction between molecules of the fluid is simulated by the potential of hard spheres or the Lennard-Jones potential. The properties of nanoflows are studied. It is shown that the structure of fluids in nanochannels differs significantly from its structure in the bulk. Data on the dependence of friction coefficient on the Knudsen and Reynolds numbers are presented. It is established that the pressure drop depends strongly on the accommodation coefficients (for the fluid of hard spheres) or the parameters of the interaction of fluid molecules with molecules of the wall (for the Lennard-Jones fluid).

Keywords: nanochannels, pressure drop, friction head loss, molecular dynamics method, fluid structure.

V. Ya. Rudyak – 1) Novosibirsk State University of Architecture and Civil Engineering, Novosibirsk, Russia, Head of Department, 2) Kutateladze Institute of Thermophysics, Siberian Branch of the RAS, Novosibirsk, Russia, Leading Researcher; Doctor of Science, Professor, valery.rudyak@mail.ru

A. A. Belkin – 1) Novosibirsk State University of Architecture and Civil Engineering, Novosibirsk, Russia, Associate Professor, 2) Kutateladze Institute of Thermophysics, Siberian Branch of the RAS, Novosibirsk, Russia, Senior Researcher; PhD, Associate Professor, a_belkin@ngs.ru

V. V. Egorov – Novosibirsk State University of Architecture and Civil Engineering, Novosibirsk, Russia, Assistant Professor, v.v.egorov@bk.ru

D. A. Ivanov – 1) Novosibirsk State University of Architecture and Civil Engineering, Novosibirsk, Russia, Assistant Professor, 2) Kutateladze Institute of Thermophysics, Siberian Branch of the RAS, Novosibirsk, Russia, Engineer, divanov@list.ru

NUMERICAL SIMULATION OF FORMATION OF THE TITAN DIOXIDE IN THE PLASMA-CHEMICAL REACTOR OF FLOWING-TYPE

S.M. Aulchenko, E.V. KartaeV, O.B. Kovalev

Results of numerical simulation of formation and growth of particles of a titan dioxide in a working zone of the plasma-chemical reactor are presented. Influence of heterogeneous reaction and nucleation of the particles is studied. Parametrical calculations of formation and growth of particles of a titan dioxide depending on rate and velocity injection of the gas-phase of $TiCl_4$ are carried out.

Keywords: nanoparticles of a titan dioxide, plasma-chemical reactor, one-high-speed multicomponent fluid, homogeneous and heterogeneous reaction, coagulation.

Aulchenko Sergey Mihailovich – Khristianovich's Institute of Theoretical and Applied Mechanics, Siberian Branch of Russian Academy of Sciences, Novosibirsk, Russia, aultch@itam.nsc.ru.

KartaeV Evgeniy Vladimirovich – Khristianovich's Institute of Theoretical and Applied Mechanics, Siberian Branch of Russian Academy of Sciences, Novosibirsk, Russia.

Kovalev Oleg Borisovich – Khristianovich's Institute of Theoretical and Applied Mechanics, Siberian Branch of Russian Academy of Sciences, Novosibirsk, Russia.

EVALUATION CRITERIA OF ENERGY PROPERTIES OF SURFACE OF NANOMATERIALS

M. A. Frolova, A. S. Tutygin, A. M. Aizenstadt
V.S. Lesovik, T. A. Makhova, T. A. Pospelova

Values of the critical surface tension of the liquid (ethanol solution containing different amounts of water) on the boundary with the solid body (fraction of sandy soil with different dispersion) were calculated, using the method of Zisman. Greatly increased supply of surface free energy and the strengthening of inter-particle interaction with increasing of dispersion were established. Based on this research, were proposed to use a constant Hamaker and critical surface tension as a criteria for the formation and characteristics of the surface state of the dispersed material. This will allow us to estimate the strength of the relationship of composites based on nanostructures.

Keywords: microheterogeneous systems, surface tension, surface area, nanoscale structures.

M. A. Frolova – Northern (Arctic) Federal University named after M.V. Lomonosov, Arkhangelsk, Russia, Department of composite materials and environmental engineering, Assistant Professor, Ph.D. (Chemistry), aizenmaria@gmail.com

A. S. Tutygin – Northern (Arctic) Federal University named after M.V. Lomonosov, Arkhangelsk, Russia, Department of composite materials and environmental engineering, Head of Laboratory, tutygin@agtu.ru

A. M. Aizenstadt – Northern (Arctic) Federal University named after M.V. Lomonosov, Arkhangelsk, Russia, Head of department, Doctor of Chemistry Sciences, Professor, aizenstadt@agtu.ru

V.S. Lesovik – Belgorod State Technological University named after V.G. Shukhov, Belgorod, Russia, Department of building materials, components and structures, Head of department,

Doctor of Technical Sciences, Corresponding Member of RAACS, Professor,
lesovik@intbel.ru

T. A. Makhova – Northern (Arctic) Federal University named after M.V. Lomonosov,
Arkhangelsk, Russia, Department of composite materials and environmental engineering,
Senior Lecturer, tatiana-makhova2008@yandex.ru

T. A. Pospelova – Northern (Arctic) Federal University named after M.V. Lomonosov,
Arkhangelsk, Russia, Student, tanyaposp@gmail.com

FORMATION OF NANOPARTICLES Cr₂O₃ UNDER HYDROTHERMAL CONDITIONS

A. N. Bugrov, O. V. Almjasheva

It is shown that chemical prehistory of chromium hydroxide has an influence on dehydration and crystallization of Cr₂O₃-H₂O system under thermal and hydrothermal treatment. Parameters of hydrothermal treatment allowing one to obtain nanocrystals of Cr₂O₃ are determined.

Keywords: Nanoparticles, nanopowder, chromium oxide, hydrothermal synthesis.

A. N. Bugrov – Institute of macromolecular compounds RAS, postgraduate student,
Bugrov.an@mail.ru

O. V. Almjasheva – 1) Saint-Petersburg State Institute of Technology (Technical University),
2) Institute of macromolecular compounds RAS, Saint Peterburg, Russia, Senior Researcher,
Ph.D. in Chemistry, almjasheva@mail.ru



НАНОСИСТЕМЫ: **ФИЗИКА, ХИМИЯ, МАТЕМАТИКА**

Журнал зарегистрирован

Федеральной службой по надзору в сфере связи,
информационных технологий и массовых коммуникаций
(свидетельство ПИ № ФС 77-42762 от 25.11.2010 г.)
ISSN 2220-8054

Учредитель: федеральное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики»

Издатель: федеральное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики»

Отпечатано в учреждении «Университетские телекоммуникации»
Адрес: 197101, Санкт-Петербург, Кронверкский пр., 49

Подписка на журнал НФХМ

На 2012 год подписка осуществляется через ОАО Агентство «Роспечать»
Подписной индекс 57385 в каталоге «Издания органов научно-технической информации»