Calcul des variations/*Calculus of Variations*

Minima de la fonctionnelle énergie libre des cristaux liquides

Frédéric HÉLEIN

Résumé — On étudie la minimisation de la fonctionnelle

$$E(u)=(1/2)\int_B [K_1(\operatorname{div} u)^2+K_2(u.\operatorname{rot} u)^2+K_3(u\wedge \operatorname{rot} u)^2]\,dx$$

où u est une application de la boule unité B de $\mathbf{R}^3$ dans la sphère unité S^2 de $\mathbf{R}^3$ qui vérifie $u(x)=x/|x|$ sur ∂B, et où K_1, K_2, K_3 sont des constantes réelles strictement positives. On montre que $u_*(x)=x/|x|$ ne minimise pas E si $8(K_2-K_1)+K_3<0$. On exhibe une application qui minimise E dans le cas dégénéré $K_2=K_3=0$.

Minima of the free energy functional of liquid crystals

Abstract — *We study the minimization of the functional*

$$E(u)=(1/2)\int_B [K_1(\operatorname{div} u)^2+K_2(u.\operatorname{rot} u)^2+K_3(u\wedge \operatorname{rot} u)^2]\,dx$$

where u is a map from the unit ball B of $\mathbf{R}^3$ into the unit sphere S^2 of $\mathbf{R}^3$ which satisfies $u(x)=x/|x|$ on ∂B, and where K_1, K_2, K_3 are strictly positive constants. We show that $u_*(x)=x/|x|$ does not minimize E if $8(K_2-K_1)+K_3<0$. We exhibit a map which minimizes E in the degenerate case $K_2=K_3=0$.

$B=\{x\in\mathbf{R}^3\,|\,|x|=R\leqq 1\}$ est la boule unité de $\mathbf{R}^3$, $S^2=\{x\in\mathbf{R}^3\,|\,|x|=1\}$ la sphère unité de $\mathbf{R}^3$. On représente un point x de B par ses coordonnées orthonormées (x_1, x_2, x_3). On se place dans l'espace $H^1(B, \mathbf{S}^2)$ des applications u de $H^1(B, \mathbf{R}^3)$ qui vérifient $u(x)\in\mathbf{S}^2$ p. p. On note u_* l'élément de $H^1(B, \mathbf{S}^2)$ défini par $u_*(x)=x/|x|=x/R$.

On pose $\mathscr{A}(u_*)=\{u\in H^1(B, \mathbf{S}^2)\,|\,u(x)=u_*(x) \text{ p. p. } x\in\partial B\}$.

Pour K_1, K_2, K_3 réels strictement positifs, on définit la fonctionnelle

$$E(u)=(1/2)\int_B [K_1(\operatorname{div} u)^2+K_2(u.\operatorname{rot} u)^2+K_3(u\wedge \operatorname{rot} u)^2]\,dx.$$

Si on modélise un cristal liquide nématique occupant un volume B de l'espace par une application u de $H^1(B, S^2)$, E représente l'énergie libre de ce cristal. On cherche l'application qui minimise E dans $\mathscr{A}(u_*)$. On pose $I(K_1, K_2, K_3)=\operatorname{Inf}\{E(u)\,|\,u\in\mathscr{A}(u_*)\}$.

On sait d'après R. Hardt, D. Kinderlehrer, F. H. Lin [2] qu'une telle application existe et est analytique réelle en dehors d'un ensemble de mesure de Hausdorff de dimension 1 nulle. H. Brezis, J.-M. Coron, E. Lieb ont montré dans [1] que dans le cas $K_1=K_2=K_3$, u_* était l'unique solution de ce problème, et la méthode de Lin [4] s'étend au cas $K_2\geqq K_1$. Nous allons montrer que u_* n'est pas toujours minimisant.

THÉORÈME 1. — *Si $8(K_2-K_1)+K_3<0$, alors u_* n'est pas minimisant.*

Démonstration. — Pour $v\in H_0^1(B, \mathbf{R}^3)\cap L^\infty(B, \mathbf{R}^3)$ et $\lambda>0$ suffisamment petit, on pose

$$u_\lambda=(u+\lambda v)/|u+\lambda v|\in H^1(B, \mathbf{S}^2).$$

Alors $u_\lambda=u_*+\lambda w_1+\lambda^2 w_2+o(\lambda^2)$ avec, en notant v_ω la composante orthogonale à u_* de v, et $u_R=v.u_*$,

$$w_1=v-(u_*.v)\,u_*=v_\omega$$

Note présentée par Haïm BREZIS.

0249-6291/87/03050565 $ 2.00 © Académie des Sciences

$$w_2=[(3(u_*.v)^2-v^2)u_*-2(u_*.v)v]/2=[(3v_R^2-v^2)u_*-2v_R v]/2.$$

D'où $E(u_\lambda)=E(u_*).v+\lambda E_1(u_*).v+(\lambda^2/2)E_2(u_*).(v,v)+o(\lambda^2)$ avec

$$E_1(u_*).v=\int_B[-K_1 \operatorname{grad}(\operatorname{div} u_*).w_1+K_2(u_*.\operatorname{rot} u_*)(u_*.\operatorname{rot} w_1+w_1.\operatorname{rot} u_*)$$
$$+K_3(u_*\wedge\operatorname{rot} u_*).(u_*\wedge\operatorname{rot} w_1+w_1\wedge\operatorname{rot} u_*)]\,dx$$

$$E_2(u_*).(v,v)=\int_B\{K_1[(\operatorname{div} w_1)^2-2\operatorname{grad}(\operatorname{div} u_*).w_2]$$
$$+K_2[(u_*.\operatorname{rot} w_1+w_1.\operatorname{rot} u_*)^2+2(u_*.\operatorname{rot} u_*)(u_*.\operatorname{rot} w_2+w_2.\operatorname{rot} u_*)]$$
$$+K_3[(u_*\wedge\operatorname{rot} w_1+w_1\wedge\operatorname{rot} u_*)^2+2(u_*\wedge\operatorname{rot} u_*).(u_*\wedge\operatorname{rot} w_2+w_2\wedge\operatorname{rot} u_*)]\}\,dx.$$

Utilisant les relations $\operatorname{grad}(\operatorname{div} u_*)=-2R^{-2}u_*$, $u_*.w_2=-v_\omega^2/2$, et $\operatorname{rot} u_*=0$, il vient

$$E_1(u_*).v=0$$

$$E_2(u_*).(v,v)=\int_B[K_1[(\operatorname{div} v_\omega)^2-2v_\omega^2R^{-2}]+K_2(u_*.\operatorname{rot} v_\omega)^2+K_3(u_*\wedge\operatorname{rot} v_\omega)^2]\,dx.$$

Il suffit donc de trouver un v tel que $E_2(u_*).(v,v)<0$ pour obtenir le résultat. Soit $\chi\in C^0([0,1],\mathbf{R})$, C^1 par morceaux, telle que $\chi(1)=0$. Alors $v(x)=\chi(R)(x_2,-x_1,0)$ définit une application v appartenant à $H_0^1(B,\mathbf{R}^3)\cap L^\infty(B,\mathbf{R}^3)$. Des calculs simples montrent alors que

$$E_2(u_*).(v,v)=\int_B\{K_1[-2(x_1^2+x_2^2)\chi(R)^2R^{-2}]+K_2(4x_3^2\chi(R)^2R^{-2})$$
$$+K_3(2\chi(R)R^{-1}+\chi'(R))^2(x_1^2+x_2^2)\}\,dx$$
$$=(4/3)\int_B[(K_2-K_1)\chi(R)^2+K_3/2(2\chi(R)R^{-1}+\chi'(R))^2]\,dx$$
$$=(8\pi/3)\int_0^1[(K_2-K_1)\chi(R)^2+(K_3/2)(2\chi(R)R^{-1}+\chi'(R))^2]R^2\,dR$$

Posons $f(R)=R^2\chi(R)$. Alors

$$E_2(u_*).(v,v)=(8\pi/3)\int_0^1[(K_2-K_1)f(R)^2R^{-2}+(K_3/2)f'(R)^2]\,dR.$$

Pour $A>0$, on prend

$$f_A(R)=0 \quad \text{sur } [0,\exp(-A\pi)]$$
$$f_A(R)=\sqrt{R}\sin[\operatorname{Log}(R)/A] \quad \text{sur } [\exp(-A\pi),1].$$

Alors sur l'intervalle $]\exp(-A\pi),1[$, $f''_A(A)=-(1/4+1/A^2)f_A(R)R^{-2}$, et

$$\int_{\exp(-A\pi)}^1 f'_A(R)^2\,dR=-\int_{\exp(-A\pi)}^1 f_A(R)f''_A(R)\,dR=(1/4+1/A^2)\int_{\exp(-A\pi)}^1 f_A(R)^2R^{-2}\,dR.$$

D'où

$$E_2(u_*).(v,v)=(8\pi/3)\int_{\exp(-A\pi)}^1[(K_2-K_1)+(1/8+1/2A^2)K_3]f_A(R)^2R^{-2}\,dR.$$

Et comme $8(K_2-K_1)+K_3<0$, il suffit de prendre A assez grand pour que $E_2(u_*).(v,v)<0$.

Remarque. — Comme pour tout u dans $\mathscr{A}(u_*)$, on a

$$2\,\mathrm{E}(u) \geqq \mathrm{K}_1 \int_{\mathrm{B}} (\operatorname{div} u)^2\,dx = \mathrm{K}_1 \int_{\mathrm{B}} [9 + 6 \operatorname{div}(u-x) + (\operatorname{div}(u-x))^2]\,dx$$

$$= \mathrm{K}_1 [12\pi + \int_{\mathrm{B}} [\operatorname{div}(u-x)]^2\,dx \geqq 12\pi\,\mathrm{K}_1,$$

on a toujours $\mathrm{I}(\mathrm{K}_1, \mathrm{K}_2, \mathrm{K}_3) \geqq 6\pi\,\mathrm{K}_1$. De plus $\mathrm{E}(u_*) = 8\pi\,\mathrm{K}_1$. On en conclut qu'on a toujours

$$8\pi\,\mathrm{K}_1 = \mathrm{E}(u_*) \geqq \mathrm{I}(\mathrm{K}_1, \mathrm{K}_2, \mathrm{K}_3) \geqq 6\pi\,\mathrm{K}_1.$$

Réciproquement, utilisant la continuité de $(\mathrm{K}_2, \mathrm{K}_3) \mapsto \mathrm{I}(1, \mathrm{K}_2, \mathrm{K}_3)$, une conséquence du corollaire du théorème 2 qui suit est que pour chaque valeur d'énergie e dans l'intervalle $]6\pi, 8\pi[$, il existe $\mathrm{K}_2, \mathrm{K}_3 > 0$ telles que $e = \mathrm{I}(1, \mathrm{K}_2, \mathrm{K}_3)$.

Introduisons maintenant la fonction $u_0 \in \mathrm{L}^\infty(\mathrm{B}, \mathrm{S}^2)$ définie par

$$u_0 = x + r^{-1}\sqrt{1-\mathrm{R}^2}\,(x_2, -x_1, 0)$$

où $r = \sqrt{x_1^2 + x_2^2}$. Notons $\Sigma = \{x \in \mathrm{B} \mid r \neq 0\}$. Alors sur $\mathrm{B} \setminus \Sigma$, u_0 est C^∞, $u_0(x) \in \mathrm{S}^2$, et $\operatorname{div} u_0 = 3$. Sur $\partial\mathrm{B}$, $u_0(x) = u_*(x)$. Donc $\int_{\mathrm{B}} (\operatorname{div} u_0)^2\,dx = 12\pi$, et u_0 minimise E dans le cas dégénéré $\mathrm{K}_2 = \mathrm{K}_3 = 0$. Mais u_0 n'appartient à aucun $\mathrm{W}^{1,p}(\mathrm{B}, \mathbf{R}^3)$ avec $p \in [1, +\infty[$. Toutefois, on a :

Théorème 2. — *Il existe une famille u_ε de $\mathrm{A}(u_*)$, pour $\varepsilon > 0$, qui tend vers u_0 pour la topologie $\mathrm{L}^\infty_{\mathrm{loc}}(\mathrm{B} \setminus \Sigma, \mathrm{S}^2)$ quand $\varepsilon \to 0$, et qui vérifie*

$$\int_{\mathrm{B}} (\operatorname{div} u_\varepsilon)^2\,dx \to \int_{\mathrm{B}} (\operatorname{div} u_0)^2\,dx = 12\pi.$$

Corollaire. — $\lim_{(\mathrm{K}_2, \mathrm{K}_3) \to 0} \mathrm{I}(1, \mathrm{K}_2, \mathrm{K}_3) = 6\pi.$

Démonstration du théorème 2. — On considère les fonctions ρ_ε, α_ε de $\mathrm{C}_0([0, 1], [0, 1])$, C^1 par morceaux, définies par

$$\rho_\varepsilon(\mathrm{R}) = \mathrm{R} \quad \text{sur } [0, 1-2\varepsilon]$$

$$\rho'_\varepsilon(\mathrm{R}) = 2 - \varepsilon \quad \text{sur } [1-2\varepsilon, 1-\varepsilon]$$

$$\rho_\varepsilon(\mathrm{R}) = 1 - (\mathrm{R}-1)^2 \quad \text{sur } [1-\varepsilon, 1]$$

$$\alpha_\varepsilon(r) = 1 \quad \text{sur } [0, \varepsilon]$$

$$\alpha'_\varepsilon(r) = -1/\varepsilon \quad \text{sur } [\varepsilon, 2\varepsilon]$$

$$\alpha_\varepsilon(r) = 0 \quad \text{sur } [2\varepsilon, 1].$$

On pose alors

$$u_\varepsilon(x) = [\alpha_\varepsilon(r) + (1-\alpha_\varepsilon(r))\,\rho_\varepsilon(\mathrm{R})]\,x/\mathrm{R} + \sqrt{1 - [\alpha_\varepsilon(r) + (1-\alpha_\varepsilon(r))\,\rho_\varepsilon(\mathrm{R})]^2}\;r^{-1}(x_2, -x_1, 0).$$

Il est immédiat que u_ε tend vers u_0 dans $\mathrm{L}^\infty_{\mathrm{loc}}(\mathrm{B} \setminus \Sigma, \mathrm{S}^2)$.

Pour tout $\varepsilon > 0$, sur $\mathrm{B}(0, \varepsilon)$, $u_\varepsilon(x) = x/\mathrm{R}$, et sur $\mathrm{B} \setminus \mathrm{B}(0, \varepsilon)$, u_ε est continue et C^1 par morceaux avec une dérivée bornée dans $\mathrm{L}^\infty(\mathrm{B} \setminus \mathrm{B}(0, \varepsilon), \mathbf{R}^9)$. Donc $u_\varepsilon \in \mathrm{H}^1(\mathrm{B}, \mathrm{S}^2)$. Il ne reste donc plus qu'à calculer $\operatorname{div} u_\varepsilon$:

$$\operatorname{div} u_\varepsilon = \operatorname{grad}\{[\alpha_\varepsilon + (1-\alpha_\varepsilon)\,\rho_\varepsilon]\,\mathrm{R}^{-1}\}.\,x + [\alpha_\varepsilon + (1-\alpha_\varepsilon)\,\rho_\varepsilon]\,\mathrm{R}^{-1} \operatorname{div} x + 0$$

$$= \{-[\alpha_\varepsilon + (1-\alpha_\varepsilon)\,\rho_\varepsilon]\,\mathrm{R}^{-3}\,x + [\alpha'_\varepsilon(1-\rho_\varepsilon)]\,\mathrm{R}^{-1}\,r^{-1}(x_1, x_2, 0)$$

$$+[(1-\alpha_\varepsilon)\,\rho_\varepsilon'']\,R^{-2}x\}\,.\,x+3\,[\alpha_\varepsilon+(1-\alpha_\varepsilon)\,\rho_\varepsilon]\,R^{-1}$$
$$=2\,[\alpha_\varepsilon+(1-\alpha_\varepsilon)\,\rho_\varepsilon]\,R^{-1}+[\alpha_\varepsilon'(1-\rho_\varepsilon')]\,R^{-1}+(1-\alpha_\varepsilon)\,\rho_\varepsilon'.$$

Sur $\Omega_1=\{x\in B\,|\,r\in[2\varepsilon,\,1],\ R\in[1,\,1-2\varepsilon]\}$, $\operatorname{div} u_\varepsilon=3$.
Sur $\Omega_2=\{x\in B\,|\,r\in[0,\,\varepsilon]\}$, $\operatorname{div} u_\varepsilon=2\,R^{-1}$.
Sur $\Omega_3=\{x\in B\,|\,r\in[\varepsilon,\,2\,\varepsilon]\}$, $|\operatorname{div} u_\varepsilon|\leqq 2\,R^{-1}+r\,\varepsilon^{-1}\,R^{-1}+2\leqq 2+4\,R^{-1}$.
Sur $\Omega_4=\{x\in B\,|\,r\in[2\,\varepsilon,\,1],\ R\in[1-2\,\varepsilon,\,1]\}$, $|\operatorname{div} u_\varepsilon|=|2\,\rho_\varepsilon\,R^{-1}+\rho_\varepsilon'|\leqq 6$.

Et $\left|\int_B(\operatorname{div} u_\varepsilon)^2\,dx-\int_B(\operatorname{div} u_0)^2\,dx\right|\leqq\int_{\Omega_2\cup\Omega_3\cup\Omega_4}|9-(\operatorname{div} u_\varepsilon)^2|\,dx.$

Comme $|9-(\operatorname{div} u_\varepsilon)^2|$ est intégrable, et comme la mesure de $\Omega_2\cup\Omega_3\cup\Omega_4$ tend vers 0, on conclut en utilisant le théorème de Lebesgue.

Démonstration du corollaire. — Pour tout $\beta\in]0,\,1]$, en prenant ε suffisamment petit, on peut avoir

$$\int_B(\operatorname{div} u_\varepsilon)^2\,dx\leqq(12+\beta)\,\pi\qquad\text{et}\qquad\|u_\varepsilon\|_{H^1(B)}<+\infty.$$

Donc en choisissant K_2, K_3 suffisamment petit, on a, pour $(1,\,K_2,\,K_3)$,

$$E(u_\varepsilon)\leqq(6+\beta)\,\pi\quad\Rightarrow\quad I(1,\,K_2,\,K_3)\leqq(6+\beta)\,\pi.$$

Remarque. — On constate que, dans le cas dégénéré $K_2=K_3=0$, il n'y a plus unicité du minimum puisque pour tout $\mathfrak{R}\in\mathbf{SO}(3)$, $\mathfrak{R}(u_0)$ minimise également E. De plus, toutes ces fonctions possèdent une symétrie cylindrique. On peut donc se demander si toutes les fonctions minimisant E dans le cas $8(K_2-K_1)+K_3<0$ ne sont pas des applications qui se déduisent les unes des autres par des rotations, et qui possèdent une symétrie cylindrique. On peut se demander également si u_* est minimisante dans le cas $8(K_2-K_1)+K_3\geqq 0$, et $K_2<K_1$.

Je remercie J.-M. Coron qui a attiré mon attention sur cette question.

Note reçue le 6 juillet 1987, acceptée le 17 juillet 1987.

RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

[1] H. BREZIS, J.-M. CORON, E. LIEB, Harmonic maps with defects, *Commun. Math. Phys.*, 107, 1986, p. 649-705.

[2] R. HARDT, D. KINDERLEHRER et F. H. LIN, Existence and partial regularity of static liquid crystal configurations, *Commun. Math. Phys.*, 105, 1986, p. 541-570.

[3] M. KLEMAN, *Points, lignes, parois*, Les éditions de physique, Orsay, 1977.

[4] F. H. LIN, *C. R. Acad. Sci. Paris* (à paraître).

Centre de Mathématiques, École Polytechnique, 91128 *Palaiseau Cedex.*