



ФИЗИЧЕСКАЯ ЭЛЕКТРОНИКА

Методические указания

по дисциплине

«Методы математического моделирования».

магистратура

преподаватель: И.И.Клебанов

2017

МЕТОДЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

(к.ф.-м.н.,доцент И.И.Клебанов)

Методические указания

Построение и анализ математической модели

Вопросы к защите индивидуального домашнего задания

1. На каких фундаментальных законах физики основана модель
2. Какие сделаны упрощающие предположения.
3. Вывод основных модельных уравнений.
4. Метод решения модельных уравнений.
5. Основные результаты моделирования.
6. Достоинства и недостатки модели, возможности развития модели.
7. Возможные практические применения полученных результатов.

Пример построения и анализа математической модели

Математическая модель топологических дефектов в капиллярной системе с нематическим жидким кристаллом в магнитном поле

1. Вывод уравнения равновесия поля директора

Рассмотрим нематик в цилиндрическом капилляре радиуса ρ и длины l . Компоненты вектора в полярной системе координат представим в виде:

$$\vec{n} = \cos \alpha(\rho, \varphi) \bar{e}_\rho + \sin \alpha(\rho, \varphi) \bar{e}_\varphi$$

$$\begin{cases} n_\rho = \cos \alpha(\rho, \varphi) \\ n_\varphi = \sin \alpha(\rho, \varphi) \end{cases}'$$

где α – угол между силовой линией директора и осью капилляра.

Плотность свободной энергии равна сумме плотностей упругой и магнитной составляющих

$$F = F_{\text{упр}} + F_{\text{магн}}$$

Магнитная энергия описывается уравнением:

$$F_{\text{магн}} = -\frac{1}{2} \Delta\chi (\vec{n} \cdot \vec{H})^2 \quad (28)$$

где $\Delta\chi$ – разность продольной и поперечной магнитной восприимчивости, \vec{H} – напряженность магнитного поля.

$$\vec{n} \cdot \vec{H} = H \cos(\alpha + \varphi)$$

$$F_{\text{магн}} = -\frac{1}{2} \Delta\chi H^2 \cos^2(\alpha + \varphi)$$

В одноконстантном приближении упругая энергия (свободная энергия

деформации) равна:

$$F_{\text{упр}} = \frac{K}{2} ((\text{div } \vec{n})^2 + (\text{rot } \vec{n})^2),$$

где K – модуль упругости Франка.

$$\text{div } \vec{n} = \frac{n_\rho}{\rho} \frac{\partial n_\rho}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial n_\varphi}{\partial \varphi} = \frac{\cos \alpha}{\rho} - \sin \alpha * \alpha_\rho + \frac{\cos \alpha}{\rho} * \alpha_\varphi$$

$$\text{rot } \vec{n} = \frac{n_\varphi}{\rho} \frac{\partial n_\varphi}{\partial \rho} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial n_\rho}{\partial \varphi} = \frac{\sin \alpha}{\rho} + \cos \alpha * \alpha_\rho + \frac{\sin \alpha}{\rho} * \alpha_\varphi$$

$$(\text{div } \vec{n})^2 + (\text{rot } \vec{n})^2 = \alpha_\rho^2 + \frac{(1 + \alpha_\varphi)^2}{\rho^2}$$

$$F_{\text{упр}} = \frac{K}{2} \left(\alpha_\rho^2 + \frac{(1 + \alpha_\varphi)^2}{\rho^2} \right)$$

Таким образом, полная свободная энергия равна:

$$\frac{\hat{F}}{l} = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^R \rho d\rho \left(\frac{K}{2} \left(\alpha_\rho^2 + \frac{(1 + \alpha_\varphi)^2}{\rho^2} \right) - \frac{1}{2} \Delta \chi H^2 \cos^2(\alpha + \varphi) \right),$$

где l – длина капилляра.

Заменяем переменную ρ следующим образом:

$$\xi = \ln \left(\frac{\rho}{R} \right), \quad \rho = R e^\xi, \quad \alpha_\rho = \alpha_\xi \frac{1}{\rho}, \quad d\rho = \rho d\xi$$

$$\frac{1}{lm^2} = \frac{\Delta \chi H^2}{K}, \quad \frac{R^2}{lm^2} = \varepsilon$$

где lm – магнитная длина когерентности.

$$\frac{\hat{F}}{l} = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-\infty}^0 d\xi \left(\frac{K}{2} \left(\alpha_\xi^2 + (1 + \alpha_\varphi)^2 \right) - \varepsilon e^{2\xi} \cos^2(\alpha + \varphi) \right)$$

Заменяем пределы интегрирования:

$$\xi = \ln \left(\frac{\rho}{R} \right), \quad 0 \leq \rho \leq R, \quad -\infty \leq \ln \left(\frac{\rho}{R} \right) \leq 0, \quad \rho \geq b,$$

$$\frac{\hat{F}}{\pi Kl} = \int_{\ln(\frac{b}{R})}^0 d\xi \left(\frac{K}{2} (\alpha_\xi^2 + (1 + \alpha_\varphi)^2) - \varepsilon e^{2\xi} \cos^2(\alpha + \varphi) \right)$$

Здесь b – «параметр ультрафиолетового обрезания» порядка молекулярных масштабов, на которых континуальная теория не применима.

Далее будем искать частное решение вида:

$$\alpha = f(\xi) - \varphi, \quad \alpha_\varphi = -1, \quad (1 + \alpha_\varphi)^2 = 0$$

$$f(\xi = 0) = 0 \Rightarrow \alpha(\xi = 0) = -\varphi$$

В итоге получили интеграл свободной энергии:

$$\frac{\hat{F}}{\pi Kl} = \int_{\ln(\frac{b}{R})}^0 (f_\xi^2 - \varepsilon e^{2\xi} \cos^2 f) d\xi$$

Минимизируя функционал (44), получим уравнение Эйлера-Лагранжа для функции f :

$$\alpha = f(\xi) - \varphi, \quad U = 2f, \quad U_{\xi\xi} = \varepsilon e^{2\xi} \sin U = 0$$

2. Решение уравнения равновесия.

Ищем частное решение уравнения равновесия с жесткими граничными условиями

$$U(\xi = 0) = 0.$$

Численное интегрирование уравнения приводит к следующим результатам, представленным на рисунках 2.1 – 2.6. Более подробные результаты расчётов можно увидеть в приложении.

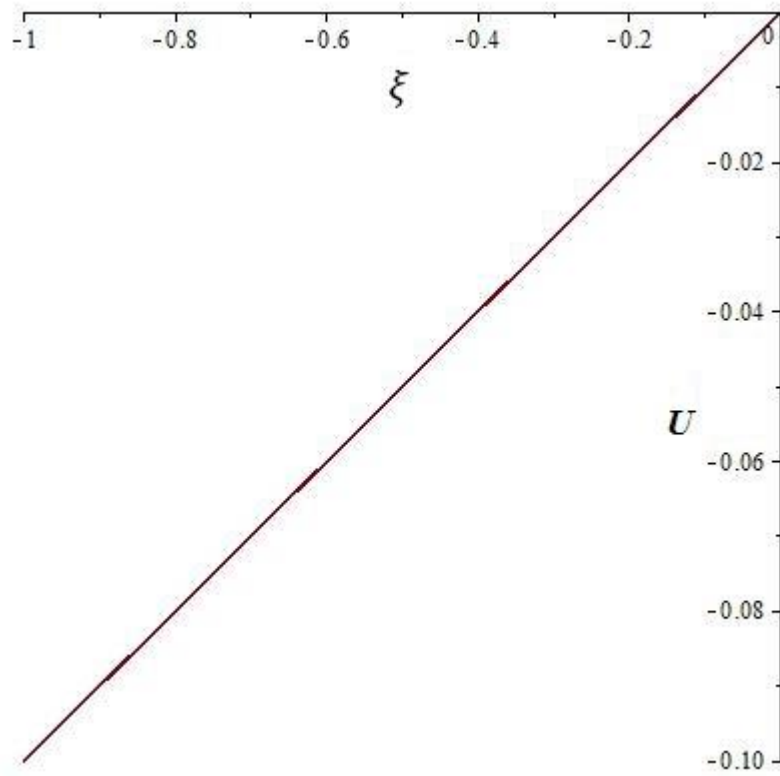


Рисунок 2.1 - Зависимость U от ξ при фиксированном $\varepsilon=0.01$

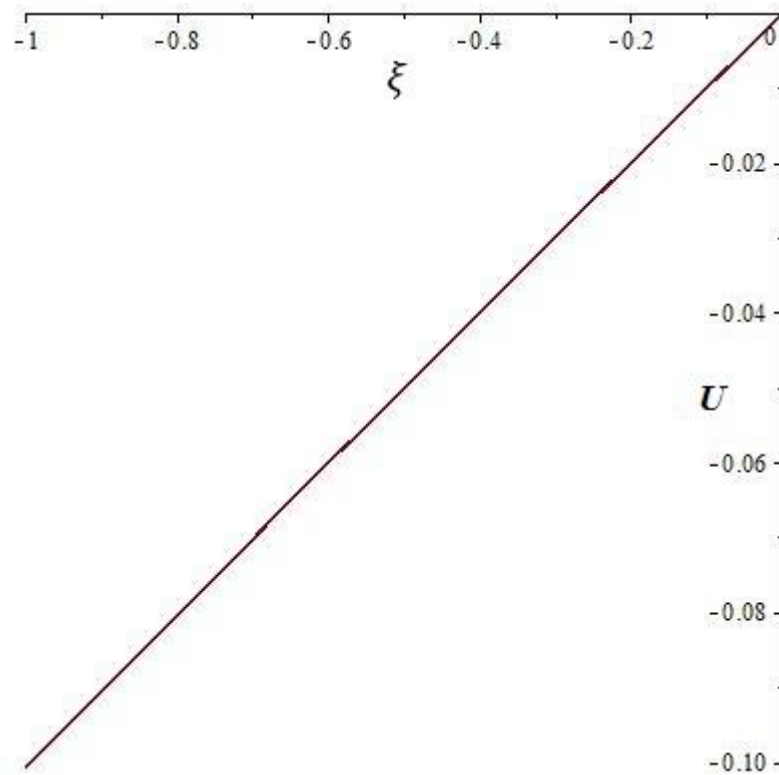


Рисунок 2.2 - Зависимость U от ξ при фиксированном $\varepsilon=0.1$

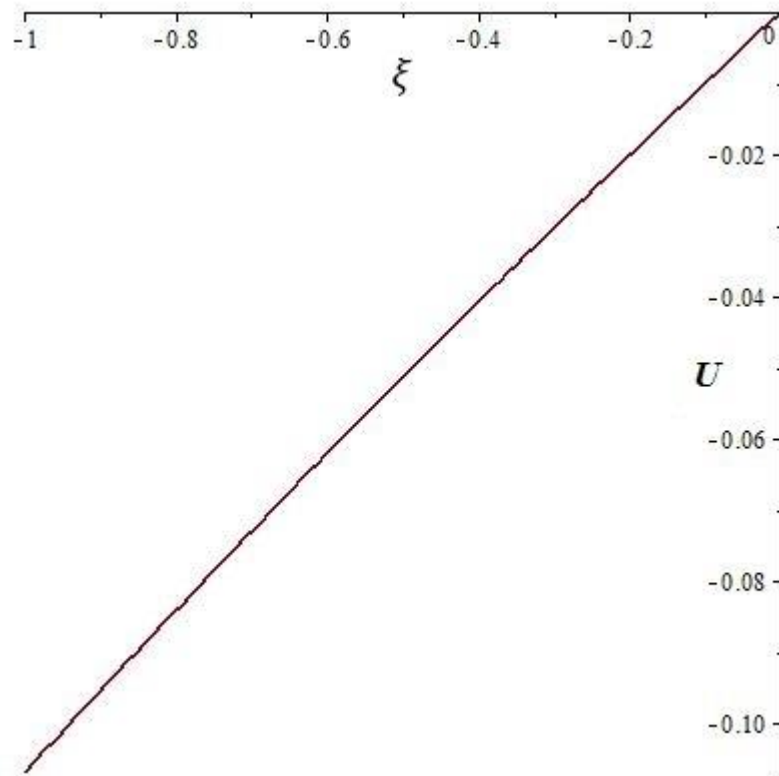


Рисунок 2.3 - Зависимость U от ξ при фиксированном $\varepsilon=1$

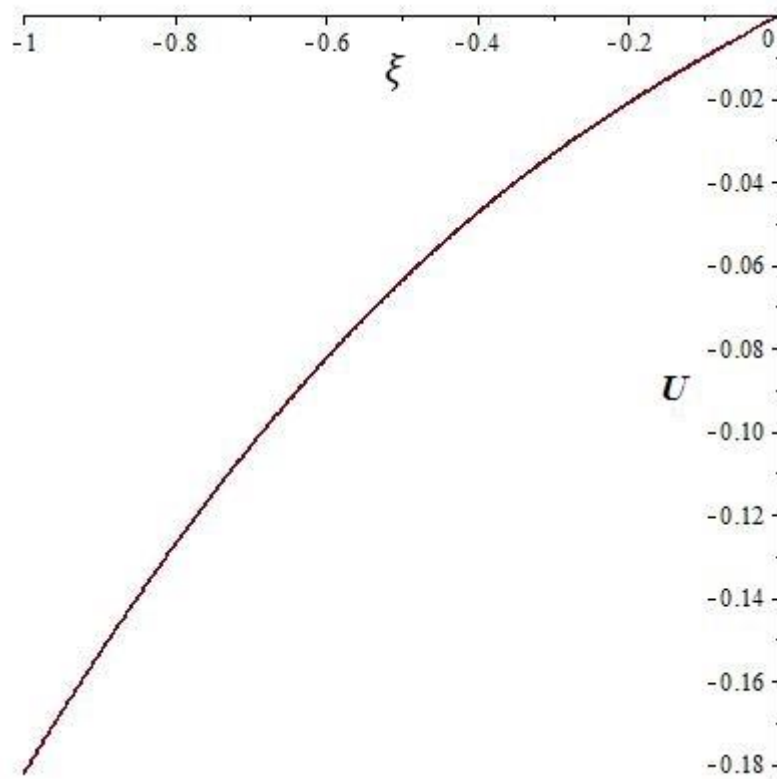


Рисунок 2.4 - Зависимость U от ξ при фиксированном $\varepsilon=10$

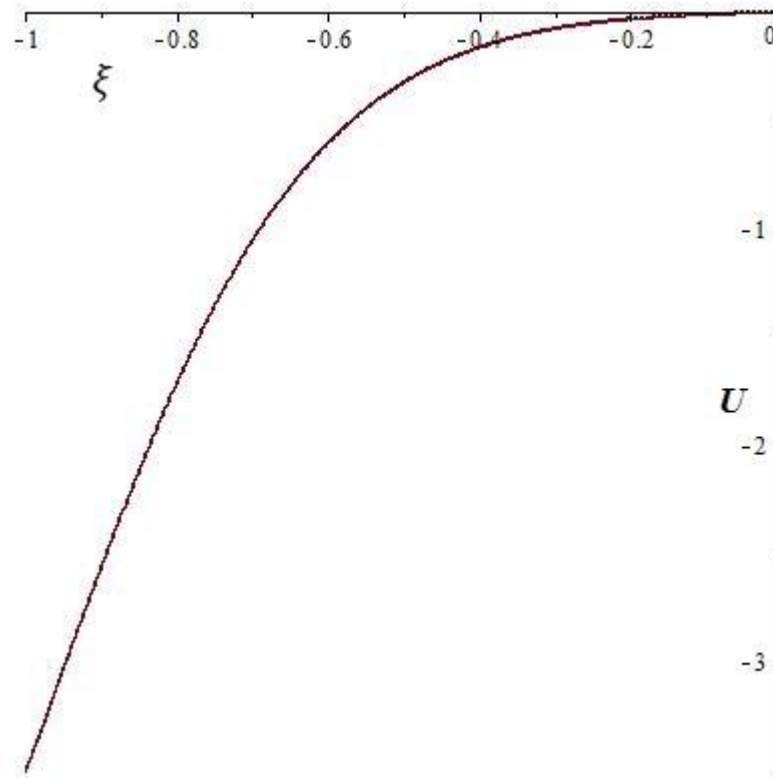


Рисунок.2.5 - Зависимость U от ξ при фиксированном $\varepsilon=100$

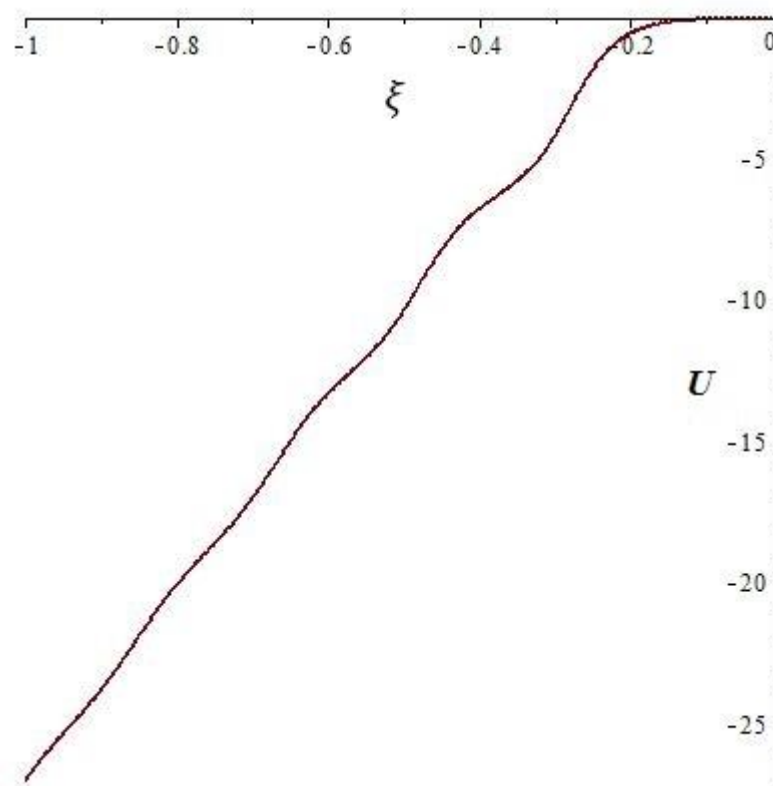


Рисунок 2.6 – Зависимость U от ξ при фиксированном $\varepsilon=0.01$

Численное интегрирование уравнения силовых линий при фиксированном $\varepsilon=5$ приводит к зависимости $\varphi(\rho)$, представленной на рисунке 2.7.

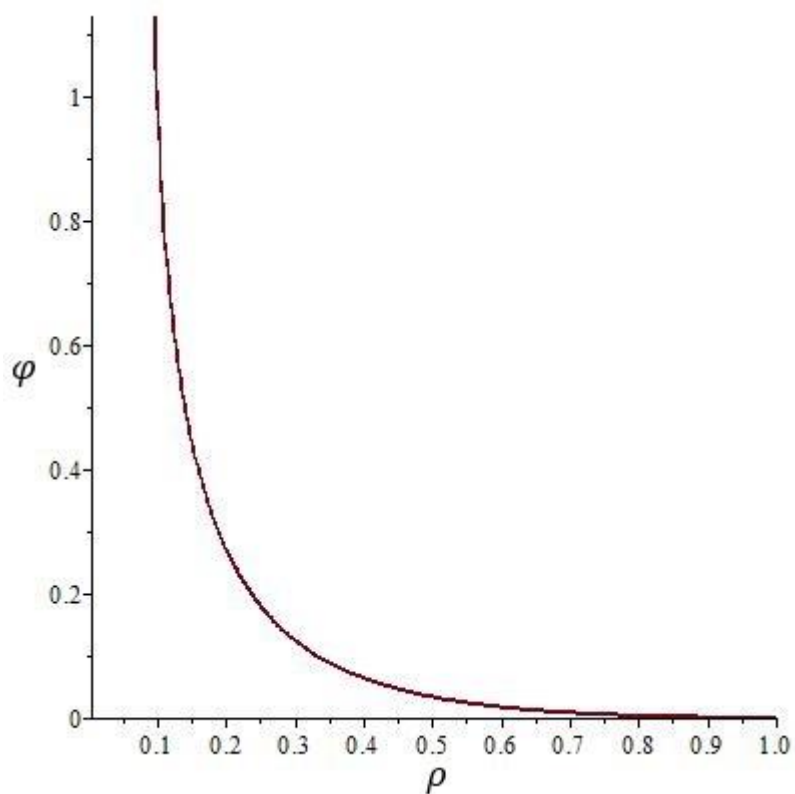


Рисунок 2.7 – Зависимость φ от ρ при фиксированном $\varepsilon=5$

График зависимости свободной энергии от параметра ε при фиксированном радиусе капилляра, полученный также в результате численных расчётов, представлен на рисунке.2.8.

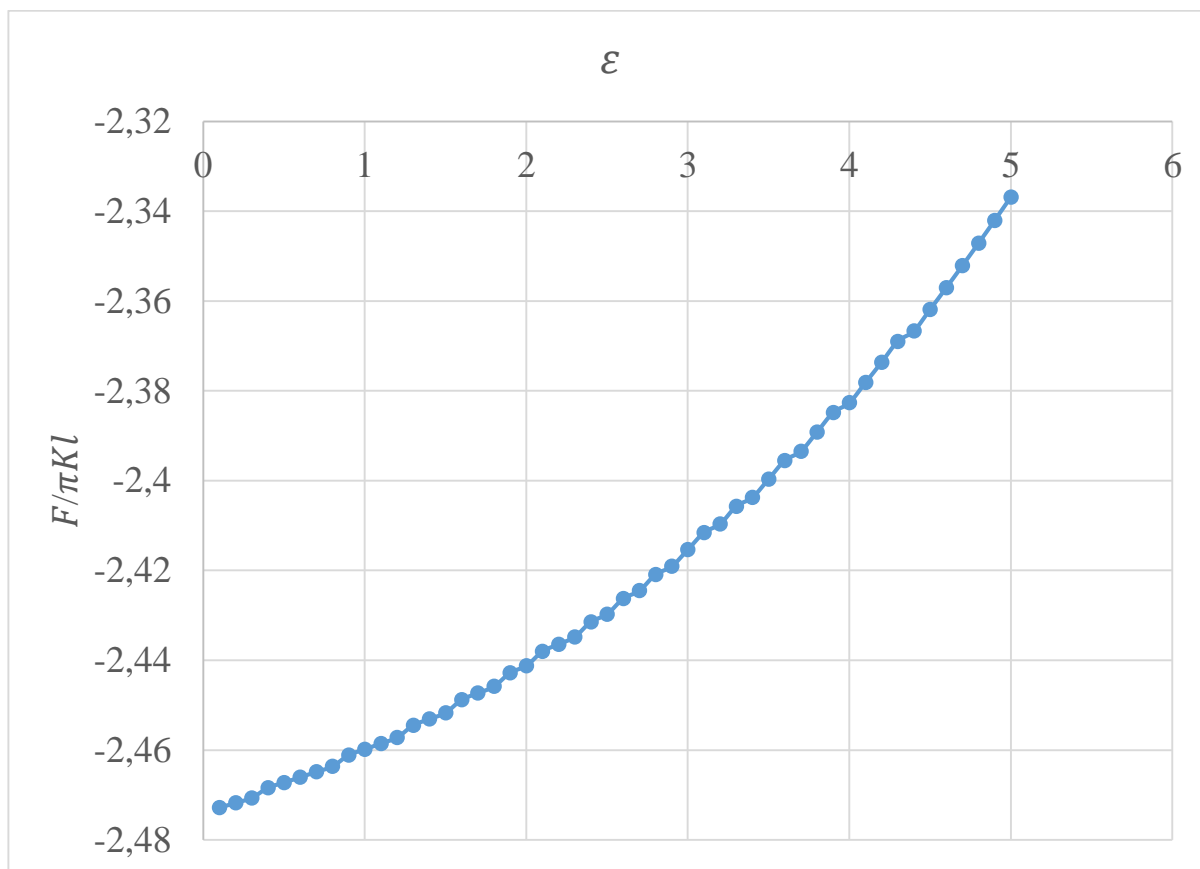


Рисунок 2.8 - Зависимость энергии от ε при фиксированном радиусе капилляра

3. Анализ результатов

Монотонный рост полярного угла φ с уменьшением полярного радиуса ρ свидетельствует о том, что в структуре упругого поля имеются поверхности, на которых полярный угол φ получает приращение кратное π , а значит, директор \bar{n} изменяет направление на противоположное. Данные поверхности дефектами не являются, в силу того, что для нематика направление n и $-n$ эквивалентны. На оси капилляра имеется дефект, названный в работе спиральной дисклинацией. (Спиральные дисклинации были экспериментально обнаружены в 2016 г. В отличие от случая нулевого магнитного поля, зависимость угла α от логарифма полярного радиуса $\ln(\rho)$ нелинейная, причем с ростом напряженности магнитного поля нелинейность увеличивается. Качественная картина упругого поля не меняется.

С ростом напряженности магнитного поля свободная энергия увеличивается. Это означает, что наличие магнитного поля, перпендикулярного оси капилляра, уменьшает устойчивость структуры со спиральной дисклинацией. Одной из возможностей стабилизации структуры является помещение образца в переменное магнитное поле. Построение математической модели этой задачи является предметом дальнейшего исследования.

Все сказанное выше справедливо для случая положительной магнитной анизотропии.

ВЫВОДЫ ПО РАБОТЕ

1. Получено уравнение равновесия нематика в цилиндрическом капилляре в однородном магнитном поле, направленном перпендикулярно оси капилляра, описывающее плоские структуры в случае положительной магнитной анизотропии.

2. Получено частное модельное решение с жесткими граничными условиями, моделирующее структуру со спиральной дисклинацией на оси капилляра.

3. В силу монотонного роста энергии с увеличением напряженности магнитного поля устойчивость структуры понижается.

