РАЗРАБОТКА ИНТЕРАКТИВНОГО ПРИЛОЖЕНИЯ ДЛЯ МИНИМИЗАЦИИ ФУНКЦИОНАЛА СВОБОДНОЙ ЭНЕРГИИ ФЕРРОНЕМАТИКА В ПАКЕТЕ MAPLE

Д. Ф. Хайртдинов, Д. В. Макаров
Пермский государственный национальный исследовательский университет, 614990, Пермь, Букирева, 15

При расчете равновесной ориентационной структуры ферронематика (суспензии магнитных частиц в нематическом жидком кристалле), взаимодействующего с ограничивающими поверхностями и внешними полями, возникает необходимость минимизировать функционал полной свободной энергии такой суспензии $F = \int F_V dV$ [1–2]. В ряде простых случаев этот процесс может быть автоматизирован, а некоторые его этапы можно проводить в интерактивном режиме с помощью графического интерфейса пользователя. В настоящее время существуют системы компьютерной математики, такие как Maple или Mathematica [3], в которых предусмотрены средства, необходимые для создания подобного рода интерактивных приложений.

Целью настоящей работы является создание Maple-приложения с интерактивным графическим интерфейсом пользователя (Maplet'a), вычисляющего, во-первых, вклады в плотность свободной энергии ферронематика для заданной пользователем геометрии задачи, во-вторых, минимизирующего функционал полной свободной энергии ферронематика и выводящего на экран соответствующие уравнений ориентационного равновесия. Кроме того, в качестве примера будет решена задача о нахождении трехмерных деформаций поля директора в ферронематике.

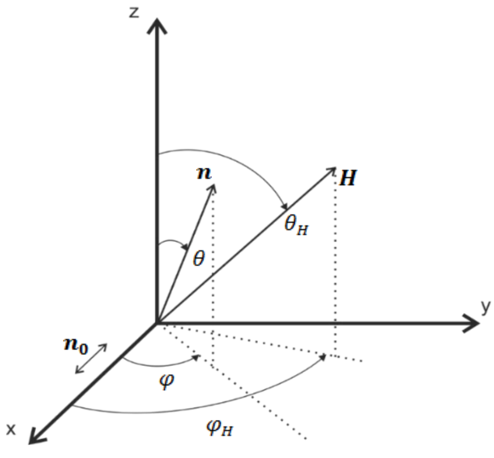

Рис. 1. *Геометрия задачи*

Рассмотрим ферронематик, находящийся в контакте с ориентирующей стенкой и помещенный в произвольно ориентированное однородное магнитное поле (Рис. 1). Сцепление жидкокристаллической матрицы со стенкой будем считать жестким и планарным, т.е. в отсутствие внешних полей единичный вектор $\boldsymbol{n}$ (директор), характеризующий направление преимущественной ориентации молекул жидкого кристалла, ориентирован вдоль оси x, лежащей в плоскости стенки (ось легкого ориентирования). Сцепление между директором и единичным вектором намагниченности суспензии также будем считать абсолютно жестким и планарным, в этом случае оба вектора определяются одним и тем же набором полярных и азимутальных углов. Магнитное поле $\boldsymbol{H}$ приложим под произвольным углом по отношению к ориентирующей стенке:

$$\boldsymbol{H} = H(\sin\theta_H \cos\varphi_H\,, \sin\theta_H \sin\varphi_H\,, \cos\theta_H). \qquad (1)$$

В этом случае отыскиваемое поле директора можно представить следующим образом:

$$\boldsymbol{n} = (\sin\theta(z)\cos\varphi(z),\ \sin\theta(z)\sin\varphi(z)\,,\ \cos\theta(z)). \qquad (2)$$

Полная свободная энергии ферронематика F в рассматриваемой задаче имеет вид [2, 5]:

$$F = \int F_V dV, \qquad (3)$$

$$F_V = \frac{1}{2}[K_{11}(\mathrm{div}\,\boldsymbol{n})^2 + K_{22}(\boldsymbol{n}\cdot \mathrm{rot}\boldsymbol{n})^2 + K_{33}(\boldsymbol{n}\times \mathrm{rot}\boldsymbol{n})^2] -$$
$$-\frac{1}{2}\chi_a(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{H})^2 - M_s f \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{H} + \frac{k_B T}{v} f\,\ln f.$$

Первый вклад в F_V (3) представляет собой потенциал Озеена-Франка, второй – плотность диамагнитной энергии ЖК-матрицы, третий – плотность энергии взаимодействия феррочастиц с магнитным полем, четвертый – вклад энтропии смешения «идеального газа» феррочастиц в суспензии; здесь $\chi_a > 0$ – это анизотропия магнитной восприимчивости ЖК, $\boldsymbol{H}$ – вектор напряженности магнитного поля, K_{ii} – константы Франка, M_s – намагниченность насыщения материала частицы, k_B – постоянная Больцмана, T – температура, v – объем феррочастицы, f – объемная доля феррочастиц в суспензии.

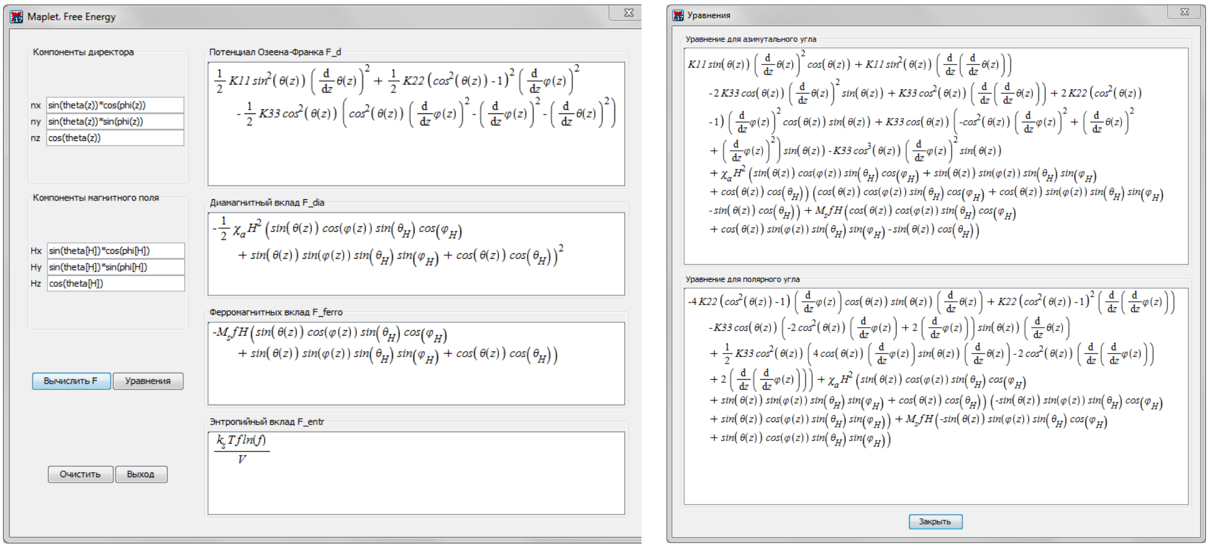

Рис. 2. *Диалоговые окна Maple-приложения*

В данной работе было создано Maple-приложение, предназначенное для вычисления плотности свободной энергии ферронематика и записи соответствующих уравнений Эйлера-Лагранжа [2, 4] по заданным пользователем компонентам внешнего поля и поля директора (в декартовой системе координат). Например, их можно задать в виде, представленном в (1) и (2). Для этого пользователь в главном окне приложения (Рис. 2, левое окно) в соответствующих интерактивных полях записывает компоненты директора и вектора напряженности магнитного поля. Затем нажимает кнопку «Вычислить F» и в специальных полях выводятся рассчитанные значения вкладов свободной энергии F_V (3). Чтобы получить систему уравнений ориентационного равновесия для углов поворота директора и намагниченности нужно нажать кнопку «Уравнения». После чего появляется отдельное окно (Рис. 2, правое окно), в котором отображаются соответствующие уравнения.

В рассматриваемой геометрии задачи (Рис. 1) с учетом (1)–(3) система уравнений Эйлера-Лагранжа имеет следующий «интеграл движения»:

$$f(\theta)(\theta')^2 + g(\theta)(\varphi')^2 + \chi_a H^2\, p^2(\theta,\varphi) + 2M_s f H p(\theta,\varphi) = \mathrm{const}, \qquad (4)$$

$$f(\theta) = K_{11}\sin^2\theta(z) + K_{33}\cos^2\theta(z),$$

$$g(\theta) = K_{22}\sin^4\theta(z) + K_{33}\sin^2\theta(z)\cos^2\theta(z),$$

$$p(\theta) = \sin\theta(z)\sin\theta_H\cos(\varphi(z)-\varphi_H) + \cos\theta(z)\cos\theta_H.$$

В одноконстантном приближении ($K = K_{11} = K_{22} = K_{33}$) [4] для малого угла отклонения вектора магнитного поля θ_H от ориентирующей плоскости xOy, осуществим разложение «интеграла движения» (4) по малому формальному параметру ε: $\theta = \frac{\pi}{2} - \theta_1\varepsilon - \cdots$, $\theta_H = \frac{\pi}{2} - \theta_{H1}\varepsilon - \cdots$. Нулевой и первый порядок разложения дают для поправок первого порядка замкнутую систему дифференциальных уравнений, которая может быть проинтегрирована:

$$\int_0^{\varphi(z)} \frac{d\alpha}{\sqrt{[2h + h^2(1+\cos(\alpha-\varphi_H))][1-\cos(\alpha-\varphi_H)]}} = \zeta, \qquad (4)$$

$$\int_{\frac{\pi}{2}}^{\theta(\zeta)} A^{-1/2}d\alpha = \zeta, \qquad (5)$$

$$A = [h + h^2\cos(\varphi-\varphi_H)]\left[\left(\frac{\pi}{2}-\theta_H\right)^2\cos(\varphi-\varphi_H) - 2\left(\frac{\pi}{2}-\alpha\right)\left(\frac{\pi}{2}-\theta_H\right)\right] + \left(\frac{\pi}{2}-\alpha\right)^2[h^2+2h-h\cos(\varphi-\varphi_H)],$$

здесь введены безразмерная напряженность магнитного поля $h = \frac{H\chi_a}{M_s f}$ и безразмерная координата $\zeta = \frac{M_s f}{\sqrt{K\chi_a}}z$.

Результаты численное решение системы интегральных уравнений (4) – (5) представлены на рисунках 3 и 4. На рисунке 3 построены зависимости углов θ и φ от координаты ζ, определяющей расстояние до ориентирующей плоскости, для различных значений углов φ_H и θ_H, которые задают ориентацию магнитного поля. Видно, что чем больше углы φ_H и θ_H, тем сильнее закручивается (деформируется) структура ферронематика. По мере удаления от плоскости углы ориентации директора и намагниченности асимптотически стремятся к направлению магнитного поля. Пример трехмерной визуализации деформированной ориентационной структуры ферронематика при $\theta_H = 0$ и двух значений угла φ_H показан на рисунке 4.

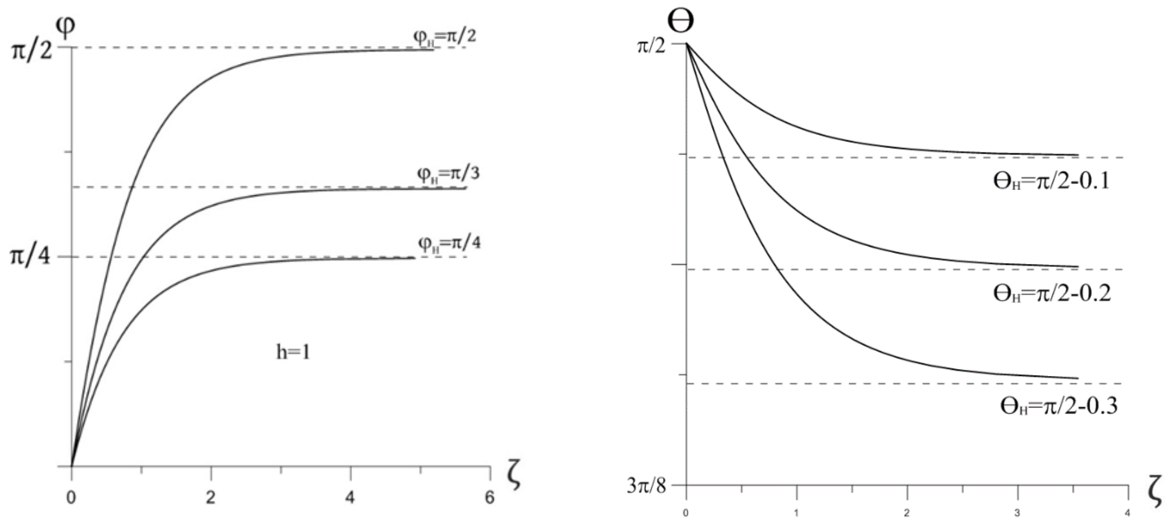

Рис. 3. *Пространственные зависимость углов φ и θ, задающих направление директора и вектора намагниченности ферронематика*

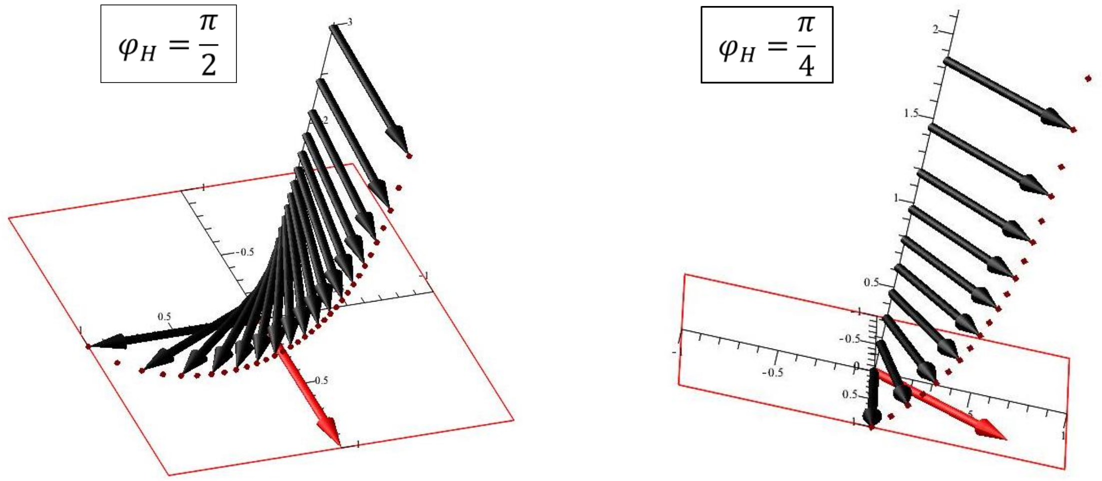

Рис. 4. *3D-визуализация деформаций ориентационной структуры ферронематика в магнитном поле. Красной стрелкой показано направление напряженности поля*

Работа выполнена при частичной поддержке Министерства образования и науки РФ (проект № 2014-153-643).

Список литературы

1. *Garbovskiy Y. A, Glushchenko A. V.* Liquid Crystalline colloids of nanoparticles: preparation, properties and applications // Solid State Physics. 2010. Vol. 62. P. 1-74.
2. *Brochard F., de Gennes P. G.* Theory of magnetic suspensions in liquid crystals. // J. Phys. (France). 1970. Vol. 31. P. 691-708.
3. *Дьяконов В. П.* Maple 10/11/12/13/14 в математических расчетах. М.: ДМК Пресс, 2014. 800 с.
4. *Блинов Л. М.* Жидкие кристаллы. М.: Либроком, 2013. 480 с.
5. *Burylov S. V., Raikher Yu. L.* Macroscopic properties of ferronematics caused by orientational interactions on the particle surfaces. I. Extended continuum model. // Mol. Cryst. Liq. Cryst. 1995. Vol. 258. P. 107-122.