

УДК 538.9

Д. Н. Мигранова<sup>1</sup>, Д. В. Кондратьев<sup>2,3</sup>, Н. Г. Мигранов<sup>1</sup>

**МЕТОД ПРЯМЫХ В РЕШЕНИИ КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ ПУАССОНА  
ДЛЯ СМЕКТИКА SmC\* ВО ВНЕШНЕМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ**

<sup>1</sup>Башкирский государственный педагогический университет им. М. Акмуллы,  
ул. Октябрьской революции, 3а, 450000 Уфа, Россия

<sup>2</sup>Академия наук Республики Башкортостан, ул. Кирова, 15, 450008 Уфа, Россия

<sup>3</sup>Башкирский кооперативный институт (филиал) Российского кооперативного университета,  
ул. Ленина, 26, 450000 Уфа, Россия. E-mail: denis.kondratyev@bk.ru

*Рассматривается теоретическая модель поведения тонкого слоя образца раскрученного хирального смектического жидкого кристалла (ЖК) в геометрии «книжная полка» (bookshelf) в одноконстантном приближении  $K_i = K$ , ( $i = 1, 2, 3$ ), когда все константы упругости Франка равны между собой, во внешнем постоянном электрическом поле, прикладываемом под разными углами к смектическим слоям образца. Для решения задачи, описываемой двумерным уравнением – нелинейным уравнением Пуассона эллиптического типа, для распределения директора  $\mathbf{n}$  в ячейке смектического жидкого кристалла, с учетом периодических граничных условий был использован численный полуаналитический метод прямых, который содержит конечно-разностный подход для всех, входящих в рассматриваемую задачу независимых переменных, кроме одной, по которой и осуществляется аналитическое интегрирование. Для этого был выбран метод прямых, который обычно применяется для решения уравнений в частных производных параболического типа с использованием современных программ для численных расчетов. Однако он не подходит для решения дифференциальных уравнений эллиптического типа, к которому относится наше уравнение. Но применение в данной работе расширенного метода прямых на основе фиктивных временных переходов позволяет снять это ограничение путем введения новой переменной – псевдовремени, производная от которой входит как дополнительное слагаемое и переводит уравнение в параболическое.*

*Этот подход проиллюстрирован на примере процесса релаксации поля директора к равновесному состоянию. Показано появление соизмеримых макроструктур в объеме сегнетоэлектрического ЖК, обладающего спонтанной поляризацией  $P_s$ .*

**Ключевые слова:** сегнетоэлектрический жидкий кристалл, соизмеримость, несоизмеримость, периодические структуры, метод прямых, полуаналитический метод.

**DOI:** 10.18083/LCAppl.2016.3.58

D. N. Migranov<sup>1</sup>, D. V. Kondratyev<sup>2,3</sup>, N. G. Migranov<sup>1</sup>

**THE METHOD OF LINES FOR SOLVING THE POISSON BOUNDARY PROBLEM  
FOR SMECTIC SmC\* IN AN EXTERNAL ELECTRIC FIELD**

<sup>1</sup>Bashkir State Pedagogical University, 3a Oktjabr'skoj revoljucii St., Ufa, 450000, Russia

<sup>2</sup>Academy of Sciences of Republic Bashkortostan, 15 Kirova St., Ufa, 450008, Russia

<sup>3</sup>Bashkir Cooperative Institute (branch) of the Russian Cooperative University,  
26 Lenina St., Ufa, 450000, Russia. E-mail: denis.kondratyev@bk.ru

*The theoretical model of the unwound smectic liquid crystal (LC) chiral thin slab's behaviour in the «bookshelf» geometry under the influence of the various tilted electric fields to the smectic layers in the one-constant approximation  $K_i = K$ , ( $i = 1, 2, 3$ ) when all Frank elastic constants are equal to each other was*

proposed. For the solution of the director  $\mathbf{n}$  distribution problem in the smectic LC specimen, which is described by the two-dimensional nonlinear Poisson equation of the elliptic kind with periodic boundary conditions, the numeric semianalytic method of lines was applied. This approach uses the finite difference method for all variables in the problem under consideration except one permitting the analytical integration of it. The method of lines based on numeric calculus and used for parabolic kind of the partial differential equations (PDE) with the use of computer integration systems was adopted for this purpose. Our equation belongs to the elliptic kind of the PDE and approach mentioned above requires some development. The false transient method of lines for elliptic equations gives one possibility to avoid this restriction by introducing the fictive time variable. Then the time additional derivative transfers the PDE into the parabolic kind. The director field relaxation process towards its stable state is illustrated on the basis of such approach. The commensurate macrostructures appearance in the bulk of the ferroelectric LC possessing the spontaneous polarization was demonstrated.

**Key words:** ferroelectric liquid crystal, «bookshelf» geometry, commensurate structures, periodic structures, method of lines, semianalytic method.

## Введение

На протяжении нескольких десятилетий ведутся экспериментальные и теоретические исследования оптических материалов с малыми временами переключений. Такими характеристиками среди анизотропных и вязкоупругих образцов обладают жидкие кристаллы (ЖК). В отличие от нематического ЖК хиральная смектическая мезофаза ( $\text{SmC}^*$ ) обладает спонтанной поляризацией, чувствительной к внешнему электрическому полю и поэтому представляет собой вполне перспективный объект для фотоники и систем отображения информации. Несмотря на ряд недостатков у  $\text{SmC}^*$ : пока еще экспериментально трудновыполнимые переходные градиенты серого цвета, большая чувствительность к небольшим механическим воздействиям, определенные трудности в создании бездефектных смектических слоев, образование шевронов с понижением температуры – сегнетоэлектрические жидкие кристаллы с учетом развития современных технологий в производстве новых ЖК и оборудований в последнее время все больше привлекают к себе внимание исследователей. Поэтому изучение физических параметров  $\text{SmC}^*$ , его поведения в различных полях позволяют обнаружить новые грани и свойства такой мезофазы, которые могут оказаться полезными и востребованными для совершенствования упомянутых выше жидкокристаллических систем в технике и народном хозяйстве. Среди управляющих параметров в таких системах могут быть не только внешние воздействия: электрические, магнитные

поля, градиенты температур, но и концентрации ионов внутри ЖК, изменяющиеся коэффициенты вязкости, константы упругости, энергии взаимодействия смектического ЖК с граничными поверхностями – подложками, диэлектрическая постоянная, магнитная восприимчивость. Кроме фундаментального значения, физические характеристики сегнетоэлектрических жидких кристаллов имеют важное практическое значение. Например, они необходимы при расчете работы электрооптических элементов [1].

Результаты теоретического исследования влияния граничных поверхностей жидкокристаллической ячейки на деформацию и раскрутку спиральной структуры сегнетоэлектрического жидкого кристалла  $\text{SmC}^*$  представлены в [1]. Рассмотрение проведено в предположении, обоснованном ранее экспериментально, что внутрислойные константы упругости достаточно велики. Поэтому в области малых толщин измерительных ячеек (до 10 мкм) искажение поля директора внутри смектических слоев практически не наблюдается. Это позволило существенно упростить задачу и получить аналитическое выражение для критической толщины  $d_c$  жидкокристаллического слоя, при которой происходит раскрутка спирали  $\text{SmC}^*$ . Показано, что величина  $d_c$  прямо пропорциональна энергии сцепления и квадрату естественного шага спирали. Поэтому при экспериментальном исследовании раскрутки спирали  $\text{SmC}^*$  желательно выбирать вещества с шагом спирали несколько микрометров. Это позволяет достичь экспериментально наблюдаемых значений  $d_c$ .

В обзоре [2] рассмотрены проблемы в развитии дисплейных технологий с использованием НЖК и прогресс в разработке новых смектических ЖК-материалов с сегнетоэлектрическими свойствами ( $\text{SmC}^*$ ), приведший к созданию экспериментальных сегнетоэлектрических ЖК-ячеек с уникальными характеристиками: при модуляции света в прозрачной моде впервые достигнуты оптический отклик со временем 30–50 мкс и частота модуляции 7,0 кГц при напряжении  $\pm 1,5$  В и получена модуляционная характеристика с реализуемой физически непрерывной шкалой серого; при модуляции света в светорассеивающей моде впервые получен бистабильный режим рассеяния с временем отклика менее 100 мкс и временем памяти оптического состояния (прозрачного или рассеивающего) до нескольких десятков секунд или до прихода импульса обратной полярности. Эти результаты обеспечивают существенные инновационные преимущества  $\text{SmC}^*$  по отношению к НЖК и являются базой для многих перспективных применений сегнетоэлектрических жидких кристаллов.

Ряд исследований посвящен описанию поведения тонкого слоя образца смектического ЖК  $\text{SmC}^*$  в так называемой геометрии «книжная полка» («bookshelf») во внешнем постоянном электрическом поле, прикладываемом под разными углами к смектическим слоям образца. В работе [3] рассмотрены устойчивые состояния мезофазы и получены решения для периодических по «у» граничных условий. Полосчатые структуры в задаче Дирихле позволили получить новые устойчивые состояния смектического ЖК и обнаружить области соизмеримых и несоизмеримых фаз, когда на нижней и верхней границах задаются различные периоды страйп-структур. Распределение поля директора внутри одноосного нематика с периодическими граничными условиями, содержащими разные волновые числа на противоположных подложках, изложено в [4].

Теоретическое изучение поведения ЖК сводится к построению математической модели, предполагающей исследование дифференциальных уравнений в частных производных. Очевидно, что выбор методов решения таких уравнений напрямую зависит от вида уравнений. В данной работе рассматриваются дифференциальные уравнения эллиптического типа, для решения которых в [5] использовался метод прямых. Хорошо известно, что

методы решения краевых задач довольно разнообразны – это и точные аналитические методы, и приближенные, и численные. Развиваемый в данной работе метод решения краевой задачи эллиптического уравнения основан на решении фиктивной нестационарной задачи параболического типа за счет искусственно введенного времени  $t$ .

Что касается начального условия для фиктивной нестационарной проблемы, то его можно задать практически в произвольном виде, согласованном с граничными условиями, которые остаются стационарными, т. е. не зависящим от времени.

Процесс численного решения фиктивного параболического уравнения с граничными и начальными условиями состоит в переходе при  $t \rightarrow \infty$  от произвольного значения в начальном условии к искомому стационарному решению. Счет ведется до выхода решения на стационарный режим. Естественно, при решении ограничиваются некоторым достаточно большим  $t$ , если искомые значения на двух последовательных слоях совпадают с заданной степенью точности. Разностные схемы метода сеток используют конечно-разностные аппроксимации входящих в уравнения производных по всем переменным. В ряде случаев уравнение с частными производными удобно привести к системе обыкновенных дифференциальных уравнений, в которых оставлены производные искомой функции лишь по одной переменной.

Метод прямых, впервые предложенный в работе [6], является полуаналитическим и достаточно эффективен. Он обычно применяется для решения нелинейных уравнений в частных производных параболического типа с использованием современных программ для численных расчетов. Для решения нелинейного дифференциального уравнения эллиптического типа, которое рассматривается в данной работе, можно использовать расширенный метод прямых на основе фиктивных временных переходов. Это достигается путем введения в уравнение новой переменной – времени, производная от которой входит как дополнительное слагаемое и переводит уравнение в параболическое. Отметим, что указанный метод в численных расчетах является, например, уже стандартным инструментом для решения практических и теоретических задач для биомедицинских наук и в инженерии [7].

Известно, что обыкновенные дифференциальные уравнения легче анализировать и решать, чем дифференциальные уравнения в частных производных, куда входят много переменных. Аппроксимация задачи состоит в использовании одного из методов: конечно-разностного, метода конечных элементов, коллокации или при помощи разложения в ряд Фурье.

Данный метод прямых представляет собой особый метод конечных разностей, обладающий сравнительно высокой точностью получаемых результатов, и требует порой существенно меньше времени счета по сравнению со стандартными методами конечных разностей. Суть метода состоит в том, что дифференциальное уравнение в частных производных, как правило, расписывается для численных расчетов в дискретном виде, а одна из независимых переменных оставляется аналитической. Достоинство такого подхода состоит в том, что удастся свести поиск решения краевой задачи для рассматриваемого дифференциального уравнения к решению системы алгебраических уравнений относительно значений искомой функции на заданном множестве точек. Это достигается путем замены производных, входящих в дифференциальное уравнение, разностными схемами.

Кроме того, метод прямых имеет ряд преимуществ, которые оправдывают его использование:

- вычислительная эффективность, поскольку полуаналитический характер формулировки приводит к простому и компактному алгоритму, который дает точные результаты с меньшим усилием, чем при вычислении другими методами;

- устойчивость вычислительного процесса: путем отдельной дискретизации пространства и времени легко установить устойчивость и сходимость для широкого круга задач;

- снижение усилий на программирование: за счет использования современных хорошо описанных и надежных решателей обыкновенных дифференциальных уравнений усилия по программированию могут быть существенно снижены;

- сокращение времени вычислений: поскольку только небольшое количество линий дискретизации требует вычислений, нет необходимости в решении большой системы уравнений, а это уменьшает время вычислений.

Среди множества численных методов метод прямых [6], который, как было выше отмечено, используется для решения параболических уравнений в частных производных с применением хорошо разработанных численных решателей, показал свою эффективность. Адаптация этого метода к эллиптическим уравнениям существенно расширяет его горизонты. Метод фиктивных переходов [8, 9] (метод с использованием фиктивного времени), лежащий в основе нашего подхода, приводит рассматриваемое уравнение к параболическому типу. Однако следует отметить, что в некоторых случаях эта техника должна применяться осторожно для задач, например, когда решение неустойчивое.

Указанные выше достоинства метода прямых для численных расчетов дифференциальных уравнений в частных производных стали аргументом в пользу выбора данного метода в решении поставленной задачи.

В данной работе используется подход, основанный на дискретизации всех входящих в задачу (двух пространственных) переменных, в отличие от стандартного приема, когда одна переменная остается непрерывной и задача становится полуаналитической. Например, для уравнений параболического типа время не дискретизируется. Однако для уравнения эллиптического типа, которое мы исследуем в этой работе, такого прямого метода не существует. Можно воспользоваться методом фиктивных переходов [5], ввести искусственно псевдопроизводную по времени, свести задачу к параболическому типу и после получения решений устремить время к бесконечности. Но такой уже ставший стандартным подход очень чувствителен к решениям с неустойчивыми состояниями и может привести к расходимости. В нашей же работе мы развиваем другой подход, основанный на приближении, учитывающем возмущения, описываемые в рамках соответствующего якобиана.

### Постановка задачи

Рассмотрим тонкий слой сегнетоэлектрического жидкого кристалла  $\text{SmC}^*$  во внешнем электрическом поле, прикладываемом под разными углами к параллельным слоям смектика.

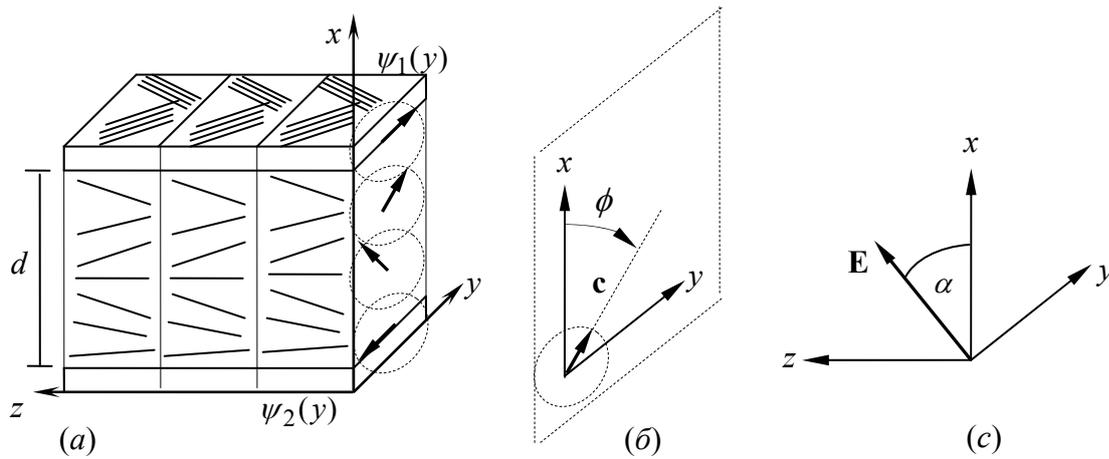


Рис. 1. Геометрия сегнетоэлектрического ЖК во внешнем электрическом поле (а) – страйп-структуры на подложках; (б)  $\phi$  – азимутальный угол; (с)  $\alpha$  – угол приложения электрического поля к образцу

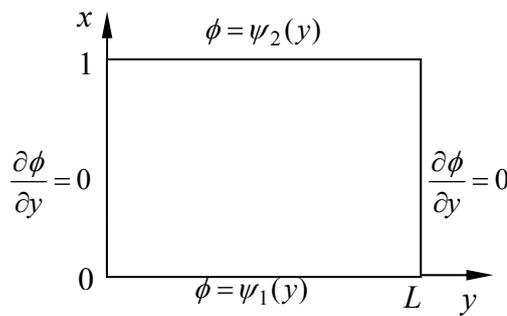


Рис. 2. Граничные условия, использованные для решения уравнения (1)

В образце сегнетоэлектрического ЖК  $SmC^*$  с раскрученным геликоидом в геометрии «bookshelf» (рис. 1) электрическое поле  $\vec{E}$  направлено под углом  $\alpha$  к нормали к плоскости смектических слоев. Вектор  $\vec{c}$ , представляющий единичный вектор проекции директора  $\vec{n}$ , описывается азимутальным углом  $\phi$ , показанным на рис. 1, б.

Распределение директора по верхней и нижней границам вдоль оси  $Oy$  имеет периодический характер, а нормаль  $\vec{a}$  к смектическим слоям направлена вдоль оси  $Oz$ .

В работе [3] было получено динамическое уравнение в одноконстантном приближении (когда все упругие константы Франка, входящие в свободную энергию смектика  $S$ , равны между собой  $K_i = K, i = 1, 2, 3$ ), описывающее перераспре-

деление поля директора СЖК во внешнем, наклонном к смектическим слоям электрическом поле:

$$2\lambda \frac{\partial \phi}{\partial t} = B \left( \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \right) - P_0 E \cos \alpha \cos \phi - \frac{\epsilon_0 \epsilon_a E^2}{4} \sin 2\alpha \sin 2\theta \sin \phi - \frac{\epsilon_0 \epsilon_a E^2}{2} \cos^2 \alpha \sin^2 \theta \sin 2\phi.$$

В обезразмеренном виде оно выглядит таким образом:

$$\frac{\partial \phi}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 \phi}{\partial \tilde{x}^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial \tilde{y}^2} - M_0 \cos \alpha \cos \phi - M_1 \sin 2\alpha \sin 2\theta \sin \phi - 2M_1 \cos^2 \alpha \sin^2 \theta \sin 2\phi, \tag{1}$$

здесь введены следующие константы и переменные:

$$M_0 = \frac{P_0 E d^2}{B}, \quad M_1 = \frac{\epsilon_0 \epsilon_a E^2 d^2}{4B}, \quad \tilde{x} = \frac{x}{d},$$

$$\tilde{y} = \frac{y}{d}, \quad \tau = \frac{t}{\tau_d}, \quad \tau_d = \frac{2\lambda d^2}{B} \quad (\text{для удобства далее}$$

тильду над переменными  $x$  и  $y$  будем опускать).  
В случае, когда азимутальный угол  $\phi$  явно не зависит от времени, уравнение (1) становится:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = M_0 \cos \alpha \cos \phi + \\ + M_1 \sin 2\alpha \sin 2\theta \sin \phi + \\ + 2M_1 \cos^2 \alpha \sin^2 \theta \sin 2\phi, \end{aligned} \quad (2)$$

анализ которого проведен авторами в работе [3].

Граничные условия для (1) запишем в виде:

$$\phi(0, y) = \psi_1(y), \quad \phi(1, y) = \psi_2(y) \quad (3)$$

$$\left. \frac{\partial \phi(x, y)}{\partial y} \right|_{y=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial \phi(x, y)}{\partial y} \right|_{y=L} = 0. \quad (4)$$

Условия (4) означают, что в рассматриваемой системе на границах  $y = 0$  и  $y = L$  отсутствуют потоки, хотя там нет жестких ограничивающих поверхностей.

### Общая формулировка полуаналитического метода прямых

Уравнение (1) может быть приведено к дискретной форме с использованием ряда методов, таких как конечных разностей, конечных элементов, конечных объемов или коллокаций. В общем виде результат дискретизации можно записать в виде системы алгебраических уравнений:

$$\mathbf{g}(\Phi) = 0,$$

где  $\Phi$  – вектор дискретизированных зависимых переменных. Полученное уравнение не решается прямыми методами в случае присутствия нелинейности. Оба рассматриваемых метода – метод ложного перехода и возмущений – вводят временную переменную следующим образом:

$$\mathbf{g}(\Phi(\tau)) = 0. \quad (5)$$

Для метода фиктивного перехода это делается посредством введения производной первого порядка по времени  $\tau$ :

$$\mathbf{g}(\Phi(\tau)) = \frac{d\Phi}{d\tau}. \quad (6)$$

Для того чтобы метод сходился, необходимо выполнение условия:

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{d\Phi}{d\tau} = 0. \quad (7)$$

При этом уравнение (6) переходит в (5). Условие (7) может нарушаться в неустойчивых системах. В таком случае метод фиктивного перехода может привести к неудовлетворительному результату. В альтернативном подходе вводится малый параметр возмущения по времени следующим образом:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \mathbf{g}(\Phi(\tau + \varepsilon)) = 0. \quad (8)$$

Левую часть выражения (8) разложим в ряд Тейлора:

$$\mathbf{g}(\Phi(\tau)) + \varepsilon \frac{d\mathbf{g}(\Phi(\tau))}{d\tau} + O(\varepsilon^2) = 0.$$

В предположении малости параметра  $\varepsilon$  и с учетом слагаемых до второго порядка малости получаем:

$$\mathbf{g}(\Phi(\tau)) + \varepsilon \frac{d\mathbf{g}(\Phi(\tau))}{d\tau} = 0. \quad (9)$$

Тогда полная производная в уравнении (9) перепишется в таком виде:

$$\mathbf{g}(\Phi(\tau)) + \varepsilon \left[ \frac{\partial \mathbf{g}}{\partial \Phi} \frac{\partial \Phi}{\partial \tau} + \frac{\partial \mathbf{g}}{\partial \tau} \right] = 0.$$

Обозначив в этом уравнении  $\partial \mathbf{g} / \partial \Phi = \mathbf{J}$ , где  $\mathbf{J}$  – якобиан рассматриваемой алгебраической системы, и учтя, что  $\mathbf{g}$  не зависит явно от времени, получим:

$$\mathbf{g}(\Phi(\tau)) = -\varepsilon \mathbf{J} \frac{\partial \Phi}{\partial \tau}. \quad (10)$$

Выбор параметра  $\varepsilon$  в некотором роде произвольный, и его значение должно быть достаточно малым, чтобы слагаемыми высших порядков можно было пренебречь.

Использование якобиана позволяет быть уверенным, что уравнение (10) более устойчивое, чем уравнение (6). Эта концепция может быть применена к нелинейным моделям с учетом собственных значений уравнения (10). Сходимость системы определяется собственными значениями якобиана.

### Дискретизация задачи

Численное решение может быть найдено при дискретизации уравнения (2) внутри прямоугольной области  $(N + 2) \times (M + 2)$ :

$$\frac{\partial^2 \phi(x, y)}{\partial x^2} \approx \frac{\phi_{m-1}^n - 2\phi_m^n + \phi_{m+1}^n}{(\Delta x)^2},$$

$$\frac{\partial^2 \phi(x, y)}{\partial y^2} \approx \frac{\phi_m^{n-1} - 2\phi_m^n + \phi_m^{n+1}}{(\Delta y)^2}.$$

Разностное уравнение

$$\frac{\phi_{m-1}^n - 2\phi_m^n + \phi_{m+1}^n}{(\Delta x)^2} + \frac{\phi_m^{n-1} - 2\phi_m^n + \phi_m^{n+1}}{(\Delta y)^2} = M_0 \cos \alpha \cos \phi_m^n +$$

$$+ M_1 \sin 2\alpha \sin 2\theta \sin \phi_m^n + 2M_1 \cos^2 \alpha \sin^2 \theta \sin 2\phi_m^n,$$

граничные условия Неймана примут следующий разностный вид:

$$\left. \frac{\partial \phi(x, y)}{\partial y} \right|_{y=0} \approx \frac{-\phi_2^n + 4\phi_1^n - 3\phi_0^n}{2\Delta y} = 0,$$

$$\left. \frac{\partial \phi(x, y)}{\partial y} \right|_{y=L} \approx \frac{-\phi_{M+1}^n + 4\phi_M^n - 3\phi_{M-1}^n}{\Delta y} = 0,$$

для  $n = \overline{0, N+1}$ .

Граничные условия Дирихле:

$$\phi_m^0 = \psi_1(y), \quad \phi_m^{N+1} = \psi_2(y), \quad \text{для } m = \overline{0, M+1}.$$

Полученная выше система для малых  $\phi$  может быть линеаризована и решена различными тривиальными методами. При использовании метода прямых мы получаем систему обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{d\phi_m^n}{d\tau} = & \frac{\phi_{m-1}^n - 2\phi_m^n + \phi_{m+1}^n}{(\Delta x)^2} + \frac{\phi_m^{n-1} - 2\phi_m^n + \phi_m^{n+1}}{(\Delta y)^2} - \\ & - M_0 \cos \alpha \cos \phi_m^n - M_1 \sin 2\alpha \sin 2\theta \sin \phi_m^n - \\ & - 2M_1 \cos^2 \alpha \sin^2 \theta \sin 2\phi_m^n, \end{aligned}$$

$$\frac{d\phi_0^n}{d\tau} = \frac{-\phi_2^n + 4\phi_1^n - 3\phi_0^n}{2\Delta y}, \quad \frac{d\phi_0^n}{d\tau} = \frac{-\phi_2^n + 4\phi_1^n - 3\phi_0^n}{2\Delta y},$$

$$\frac{d\phi_m^0}{d\tau} = \psi_1(y) - \phi_m^0, \quad \frac{d\phi_m^{N+1}}{d\tau} = \psi_2(y) - \phi_m^{N+1}.$$

При этом должно выполняться условие

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{d\phi_m^n}{d\tau} = 0.$$

### Численный эксперимент

В нашей постановке задачи рассмотрены два вида граничных условий:

$$\psi_1(y) = \frac{\pi}{2} - \pi \cdot \text{He}(\sin q_1 y),$$

$$\psi_2(y) = -\frac{\pi}{2} + \pi \cdot \text{He}(\sin q_2 y), \quad (11)$$

$$\psi_1(y) = \frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{2} \cdot \text{He}(\sin q_1 y),$$

$$\psi_2(y) = -\frac{\pi}{2} + \frac{\pi}{2} \cdot \text{He}(\sin q_2 y), \quad (12)$$

где функция Хевисайда  $\text{He}(\zeta)$  доопределена в точке  $\zeta = 0$ , т. е.  $\text{He}(0) = 0$ .

Расчеты проведены для следующих значений физических параметров системы:

$$\varepsilon_0 = 8.854 \cdot 10^{-12} \text{ Ф/м}, \quad B = 5 \cdot 10^{-12} \text{ Н}, \quad \varepsilon_a = -2,$$

$$P_0 = 80 \cdot 10^{-6} \text{ Кл/м}, \quad d = 10^{-5} \text{ м}, \quad \theta = 22.5^\circ, \quad \alpha = 15^\circ,$$

$$E = 5 \cdot 10^2 \text{ В/м}.$$

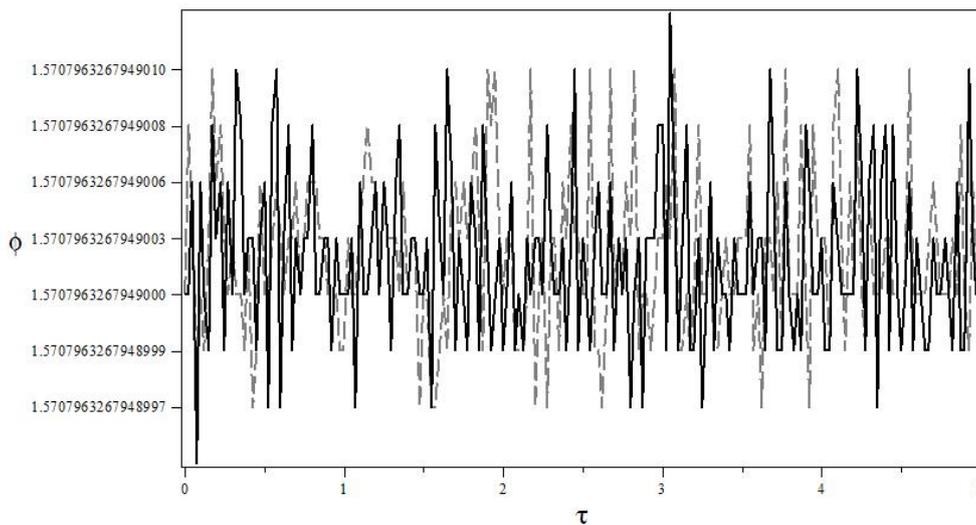


Рис. 3. Динамика граничной узловой точки для уравнения (1) с граничными условиями, заданными соотношениями (3), (4), (11)

На рис. 3 приведены результаты расчетов одной из узловых точек на границе. Полученная картина соответствует тепловым флуктуациям на границе. При этом такая тенденция сохраняется для всех разновидностей граничных условий, рассматриваемых в статье.

Результаты расчетов, приведенные на рис. 4, демонстрируют достаточно быструю сходимость. При этом метод возмущений (сплошная линия) дает удовлетворительный результат быстрее, чем метод фиктивных переходов (пунктирная линия).

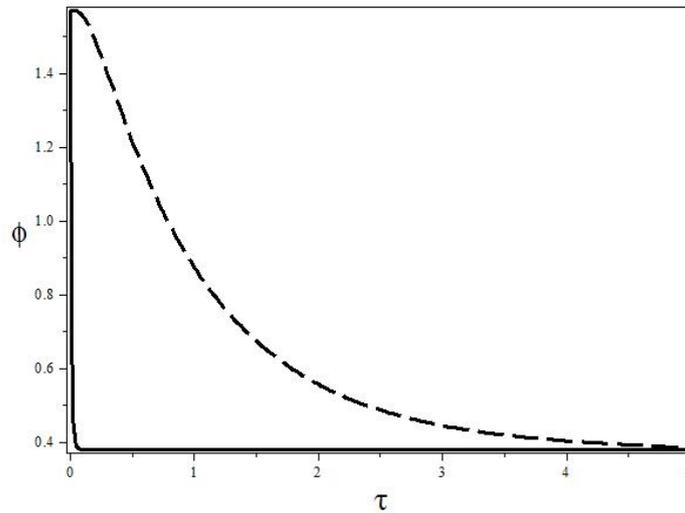


Рис. 4. Динамика центральной узловой точки для уравнения (1) с граничными условиями, заданными соотношениями (3), (4), (11)

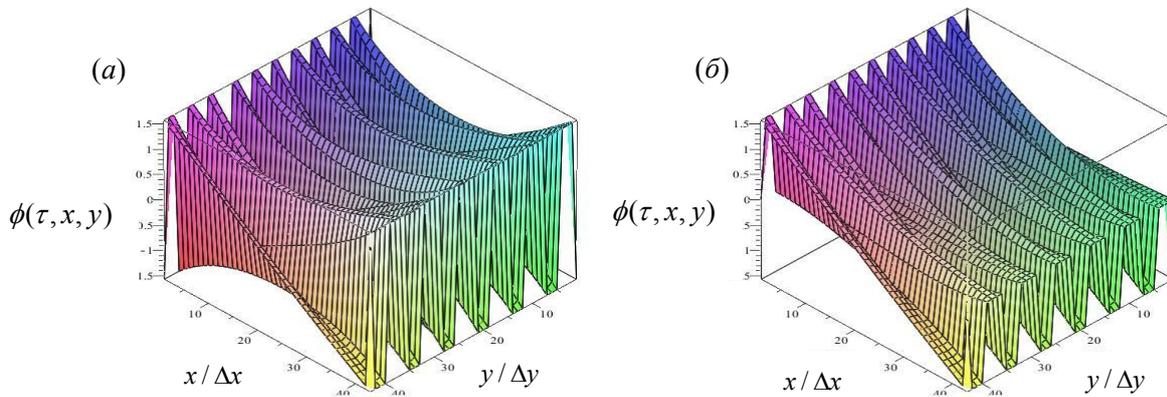


Рис. 5. Зависимость  $\phi(\tau, x, y)$ , рассчитанная по уравнению (1) с граничными условиями (3), (4) для вариантов периодики на границах, заданных соотношениями (11) – (а), (12) – (б) спустя 5 секунд

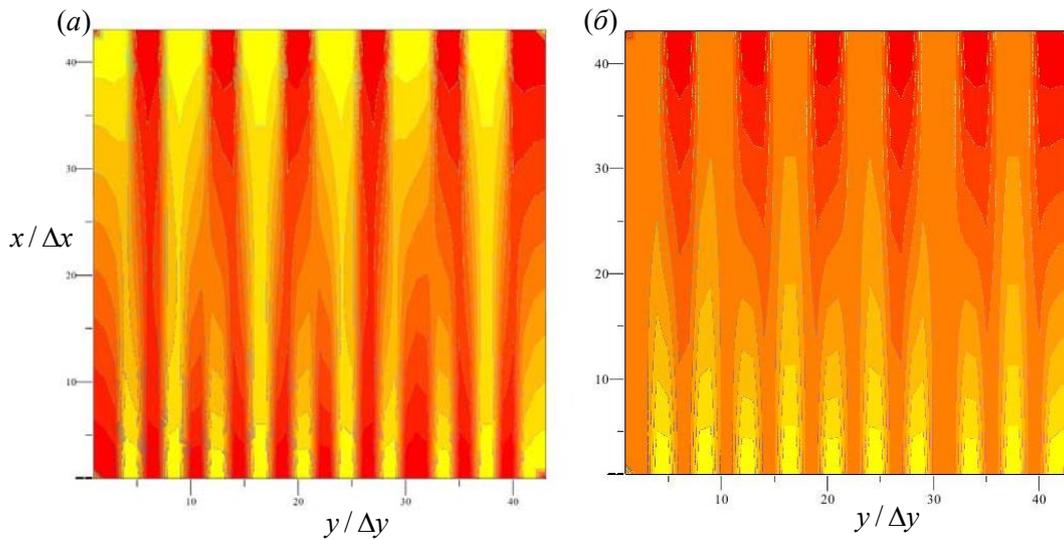


Рис. 6. Градиентное распределение поля директора в проекции, рассчитанное по уравнению (1) с граничными условиями (3), (4) для вариантов периодики на границах, заданных соотношениями (11) – (а), (12) – (б),  $\tau = 5$  с

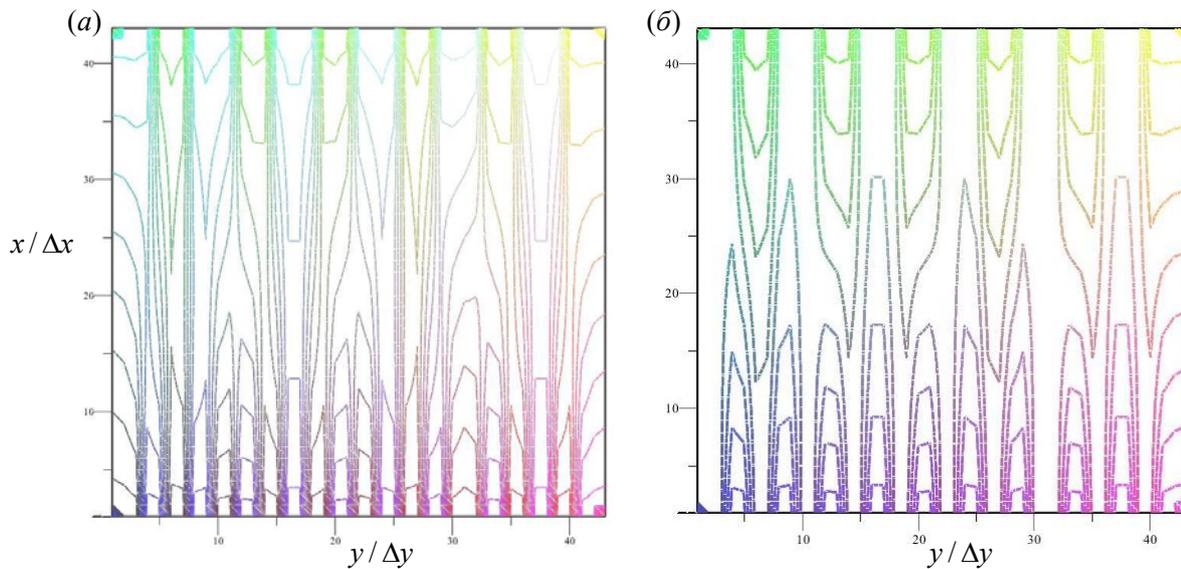


Рис. 7. Контуры распределения поля директора в проекции на плоскость  $xOy$  для периодик на границах, заданных соотношениями (11) – (а), (12) – (б) при  $\tau = 5$  с

Решения (рис. 5, а), полученные для задачи (1) с граничными условиями (3), (4), (11), согласуются с результатами, изложенными в работе [3]. Разные периоды в распределении директора на противоположных границах подложек приводят к появлению соизмеримых периодических структур в

объеме образца. В качестве примера рис. 5 иллюстрирует результаты численного расчета для распределения в пространстве поля директора  $\phi(\tau, x, y)$  спустя 5 секунд при заданных периодических граничных условиях в виде (11) и (12).

### Заключение

В данной работе исследовалось влияние периодических граничных условий в виде страйп-структур на ячейку поверхностно стабилизированного смектического ЖК в присутствии наклонного и постоянного электрического поля  $\vec{E}$ . С использованием полуаналитического метода (метод прямых с введенной фиктивной аналитической переменной – времени) было продемонстрировано образование недиссипативных макро-структур в объеме смектического ЖК, которые представлены в виде соизмеримых периодических образований, описывающих распределение проекции директора смектика на плоскость  $xOy$ .

Адаптированный для решения рассматриваемой задачи метод прямых оказался удобным, поскольку задача изначально формулировалась как нелинейная. Данный метод позволяет визуализировать возникающие периодические структуры. Он зависит от используемого малого параметра  $\varepsilon$  и имеет устойчивое решение в соответствии с [5].

Недостаток метода заключается в том, что он очень чувствителен к числу узловых точек и при увеличении числа узлов время счета резко возрастает.

Однако даже выбор не очень большого числа узлов позволяет прояснить возникающую картину взаимодействия поля директора с внешним электрическим полем.

Вне зависимости от выбора начальных условий, согласующихся с граничными условиями, метод прямых с возмущением якобиана [5] дает удовлетворительный результат. При этом установившееся решение идентично для разных начальных условий. Очевидно, что для различных электрических полей можно рассчитать свою устойчивую конфигурацию [10]. Подтверждается факт, что с помощью ориентирующих поверхностей (со страйп-структурами) можно получить устойчивые ориентационные конфигурации. Взаимодействие с ориентирующими плоскостями в поверхностно стабилизированном смектическом ЖК приводит к появлению двух устойчивых равновесных ориентационных конфигураций, этот эффект экспериментально обнаружен и описан в работе [11].

На рис. 6 и 7 видно, что влияние граничных условий, заданных с разными периодами на соответствующих противоположных подложках, приводит к образованию макроскопических структур

в объеме образца, которые носят соизмеримый характер. Вопрос о несоизмеримых структурах в рамках рассматриваемой модели в данной работе остается открытым, поскольку для их появления необходимо рассмотреть более тонкие ячейки и подобрать соответствующие волновые вектора на подложках, что было продемонстрировано авторами ранее в работе [3].

*Работа выполнена при поддержке Академии наук Республики Башкортостан и Российского фонда фундаментальных исследований в рамках проекта № 14-02-97026.*

### Список литературы / References

1. Казначеев А. В. Раскрутка спирального сегнето-электрического жидкого кристалла граничными поверхностями // *Жидк. крист. и их практич. использ.* 2015. Т. 15, № 1. С. 22–27. [Kaznacheev A.V. Boundaries induced helix uncoiling in ferroelectric liquid crystals. *Zhidk. krist. ikh prakt. ispol'z. = Liq. Cryst. and their Appl.* 2015, **15** (1), 22–27. (in Russ.)].
2. Андреев А. Л., Компанец И. Н. Применения сегнетоэлектрических жидких кристаллов – реальные и возможные (обзор) // *Жидк. крист. и их практич. использ.* 2015. Т. 15, № 3. С. 28–40. [Andreev A.L., Kompanets I.N. Applications of ferroelectric liquid crystals – real and possible (review). *Zhidk. krist. ikh prakt. ispol'z. = Liq. Cryst. and their Appl.* 2015, **15** (3), P. 28–40 (in Russ.)].
3. Мигранова Д. Н., Кондратьев Д. В., Мигранов Н. Г. Исследование устойчивости равновесных состояний наноматериалов на основе сегнетоэлектрических жидких кристаллов во внешнем электрическом поле // *Жидк. крист. и их практич. использ.* 2015. Т. 15, № 3. С. 125–133. [Migranov D.N., Kondratyev D.V., Migranov N.G. Investigation of equilibrium states stability of nanomaterials on the bases of ferroelectric liquid crystal in the external electric fields. *Zhidk. krist. ikh prakt. ispol'z. = Liq. Cryst. and their Appl.* 2015, **15** (3), 125–133 (in Russ.)].
4. Кондратьев Д. В., Мигранов Н. Г. Континуальный подход в теории жидких кристаллов : монография. Уфа : Гилем, Башк. энцикл., 2013. 164 с. [Kondratyev D.V., Migranov N.G. Continual approach to the theory of liquid crystals: a monograph. Ufa: Guillem, Bashkir Encycl., 2013, 164 p. (in Russ.)].
5. Northrop Paul W.C., Ramachandran P.A., Schieser W.E., Subramanian V.R. A robust false transient method of lines for elliptic partial differential equations. *Chemical Engineering Science*, 2013, **90**, 32–39.

6. Schiesser W.E. *The Numerical Method of Lines*. San Diego, CA: Academic Press, 1991, 326 p.
7. Schiesser W.E. *Method of lines PDE analysis in biomedical science and engineering*. John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey, 2016, 357 p.
8. Xu M. False transient method for determining effectiveness factors of high-temperature shift reaction catalyst. *J. Chem. Ind. Eng. China*. 1993, **44** (4), 465–471.
9. Lo D.C., Murugesan K., Young D.L. Numerical solution of three-dimensional velocity–vorticity Navier–Stokes equations by finite difference method. *Int. J. Numer. Methods Fluids*, 2005, **47** (12), 1469–1487. DOI:10.1002/flid.822
10. Романов В. П., Ульянов С. В., Черняк К. Г. Бистабильность «шеvronного» смектика C\* во внешнем электрическом поле // *Физика твердого тела*. 2010. Т. 52, вып. 9. С. 1849–1854. [Romanov V.P., Ul'yanov S.V., Chernyak K.G. Bistability of a «chevron» smectic C\* liquid crystal in an external electric field. *Physics of the Solid State*. 2010, **52** (9), 1985–1991. DOI: 10.1134/S1063783410090337].
11. Чилая Г. С., Чигринов В. Г. Оптика и электрооптика хиральных смектических C жидких кристаллов // *Успехи физ. наук*. 1993. Т. 163, вып. 10. С. 1–28. DOI: 10.3367/UFNr.0163.199310a.0001. [Chilaya G.S., Chigrinov V.G. Optics and electrooptics of chiral smectic C liquid crystals. *Phys. Usp.*, 1993, **36** (10), 909–932. DOI: 10.1070/PU1993v036n10ABEH002172].

*Поступила в редакцию 20. 07.2016 г.  
Received 20 July 2016*