

# Dokumentáció

## I. Elméleti áttekintés

A feladat a nematikus folyadékkristályok térbeli direktoreloszlásának modellezése volt.

Folyadékkristályos mezofázisok egyensúlyi állapota jól jellemezhető a molekulák átlagos irányultságát leíró direktortér segítségével. Ha a rendszerünk adott hőmérsékletű hőtartállyal áll kapcsolatban, ahol csak hőtranszport engedélyezett, termodinamikai egyensúlyi állapot esetén a szabadenergia-sűrűség minimális. A folyadékkristályok szabadenergia-sűrűség funkcionálja külső terek és egyéb kölcsönhatások nélkül a rugalmas deformációhoz kapcsolódó tagokból áll:

$$\rho f_d = \frac{1}{2} K_1 (\bar{\nabla} \bar{n})^2 + \frac{1}{2} K_2 (\bar{n} (\bar{\nabla} \times \bar{n}))^2 + \frac{1}{2} K_3 (\bar{n} \times (\bar{\nabla} \times \bar{n}))^2 \quad (1.1)$$

ahol:  $\mathbf{n} = \mathbf{n}(\mathbf{r})$  a direktortér,  $K_1$   $K_2$   $K_3$  rugalmas állandók. További kölcsönhatások figyelembe vétele, mint például a külső terek hatásai (mágneses, elektromos) és a ferroelektromos kölcsönhatás után a szabadenergia minimumát variációs számítási módszerek segítségével határozhatjuk meg, rögzített határfeltételek mellett. Az ebből nyert differenciálegyenletet megoldva megkapjuk a direktoreloszlást a paraméterek függvényében. (pl. mágneses, elektromos tér, anyagi állandók).

Jelen esetben homogén mágneses tér jelenlétével is számoltunk, így megjelenik egy mágneses tag a szabadenergiasűrűségben. Összesítve tehát:

$$\rho f_d = \frac{1}{2} K_1 (\bar{\nabla} \bar{n})^2 + \frac{1}{2} K_2 (\bar{n} (\bar{\nabla} \times \bar{n}))^2 + \frac{1}{2} K_3 (\bar{n} \times (\bar{\nabla} \times \bar{n}))^2 - \frac{1}{2} \mu_0 \chi_a (\bar{n} \bar{H})^2 \quad (1.2)$$

A leírandó rendszerünket a következőképpen képzelhetjük el: Adott két párhuzamos síklap, egymástól  $d$  távolságra: Az egyik  $(x,z)$  sík  $y = 0$  -ban, a másik  $(x,z)$  sík  $y = d$  -ben. A lapokat először tekintjük végtelennek, hogy kihasználhassuk az ebből következő szimmetriákat. Ezek miatt csak egy 1 dimenziós problémát kell megoldanunk.  $\phi$  legyen a direktor és az  $x$  tengely által bezárt szög. A mágneses tér legyen homogén és párhuzamos az  $y$  tengellyel. Ekkor:

$$\phi \in \left[ 0, \frac{\pi}{2} \right] \quad (1.3)$$

$$\bar{n} = (\cos \phi, \sin \phi, 0) \quad (1.4)$$

$$\bar{H} = (0, H_y, 0) \quad (1.5)$$

Ha (1.3)-t, (1.4)-t, és (1.5)-t beírjuk (1.2)-be, az alábbi kapjuk:

$$\rho f_d = \frac{1}{2} K_1 \cos^2 \phi \left( \frac{d\phi}{dy} \right)^2 + \frac{1}{2} K_3 \sin^2 \phi \left( \frac{d\phi}{dy} \right)^2 - \frac{1}{2} \mu_0 \chi_a \sin^2 \phi H^2 \quad (1.6)$$

Egyensúlyi állapotban (1.6) funkcionál minimális. Ekkor  $\phi$  kielégíti a hozzá tartozó Euler-Lagrange egyenletet:

$$\frac{d}{dy} \frac{\partial \rho f_d}{\partial \phi'} - \frac{\partial \rho f_d}{\partial \phi} = 0 \quad (1.7)$$

Behelyettesítés után a következő nemlineáris közönséges differenciálegyenletet kapjuk:

$$\frac{d^2 \phi}{dy^2} (K_1 \cos^2 \phi + K_3 \sin^2 \phi) + \left( \frac{d\phi}{dy} \right)^2 (K_3 - K_1) \frac{\sin 2\phi}{2} + \frac{\chi_a}{\mu_0} \frac{\sin 2\phi}{2} B^2 = 0 \quad (1.8)$$

(1.8) peremérték problémájának numerikus megoldását keressük a következő feltételek mellett:

$$\phi(0) \wedge \phi(d) = \text{áll. (pl. 0)} \quad (1.9)$$

A direktoreloszlást közvetlenül nem lehet mérni, viszont bizonyos mennyiségek csatolódnak a direktorhoz. Pl. permittivitás. Megmutatható, hogy a dielektromos állandó lokálisan az alábbi módon függ  $\phi$ -től:

$$\varepsilon(\phi) = \varepsilon_m \cos^2 \phi + \varepsilon_p \sin^2 \phi \quad (1.10)$$

ahol  $\varepsilon_m$  és  $\varepsilon_p$  a dielektromos állandó, ha a direktorra merőlegesen ( $\phi = 0$ ) illetve azzal párhuzamosan ( $\phi = \text{Pi}/2$ ) mérjük. A dielektromos állandót kapacitásméréssel tudjuk meghatározni. Most tekintsük a fentebb leírt rendszerünket azzal a különbséggel, hogy a végtelen síkok helyett legyenek A területű négyzetek. A szél-effektusok elhanyagolása akkor ad jó közelítést, ha

$$\sqrt{A} \square d \quad (1.11)$$

Ebben az esetben egy üres cella (síkkondenzátor) kapacitása:

$$C_{\text{üres}} = \varepsilon_0 \frac{A}{d} \quad (1.12)$$

Folyadékkristállal töltve (térben változó direktoreloszlás mellett) pedig a következő összefüggés alapján számolhatjuk:

$$C = \varepsilon_0 A \left[ \int_0^d \frac{dy}{\varepsilon(y)} \right]^{-1} \quad (1.13)$$

Az eddigiek alapján megadjuk az effektív dielektromos állandóra vonatkozó képletet:

$$\varepsilon_{eff} = d \left[ \int_0^d dy \frac{1}{\varepsilon_m \cos^2 \phi(y) + \varepsilon_p \sin^2 \phi(y)} \right]^{-1} \quad (1.14)$$

A jelen elrendezésben a  $\phi$  fix (és 0) peremekhez képesti nem nulla megváltozását csak egy küszöbtér meghaladása után tapasztalhatjuk. A direktortér mágneses térrel való megváltoztatását (vagy akár a teljes átorientálást) mágneses Freedericksz-átmenetnek hívjuk. (1.18)-ből kiindulva adható egy jó becslés a küszöbtérre:

$$B_{crit(a)} = \frac{\pi}{d} \sqrt{\frac{\mu_0 K_1}{\chi_a}} \quad (1.15)$$

## II. Numerikus megoldás MATLAB segítségével

Az (1.8) egyenlet numerikus megoldását a *freedmo5* matlab függvény adja:

```
function [y phi eeff] = freedmo5(k3,k1,chia,ep,em,b,d,p0,pd)
```

Bemenet: rugalmas állandók (k3,k1), párhuzamos és merőleges dielektromos állandók (ep,em), mágneses szuszceptibilitás anizotrópiája (chia), mágneses indukcióvektor nagysága (b), a lemezek távolsága(d) és a peremfeltételek (p0,pd -  $\phi$  konstans értéke a két lemezen)

Kimenet: y(phi) vektorok, eeff az effektív permittivitás.

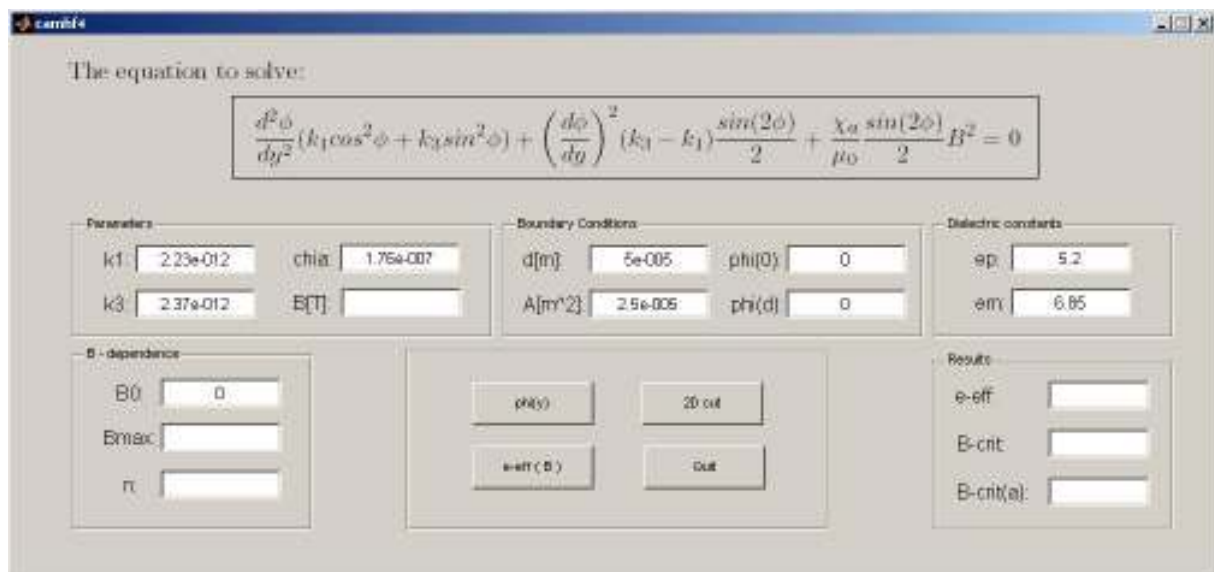
A peremérték-problémát az erre alkalmas matlab-solverrel (bvp4c) oldjuk meg. Ennek szüksége van a megoldáshoz közeli kezdeti *initial guess* -re. A tapasztalatok alapján ennek minél pontosabb megadása nagyban hozzájárul ahhoz, hogy minél meredekebb („*stiff*”) problémákat oldjuk meg pontosan és stabilan. Fizikai szemlélettel tekintve a problémát, sejtjük, ha nagyon nagy mágneses teret adunk a cellára, akkor az anyagban a direktor nagyrészt párhuzamos lesz a térrel (feltéve, hogy a mágneses szuszceptibilitás anizotrópiája pozitív), ezért a peremeknél nagyon éles változást kell, hogy szenvedjen. Az *initial guess*-t tehát egy megfelelően transzformált kapufüggvény Fourier-soraként adjuk meg.

A megoldandó (1.8) egyenletet át kellett írunk egy elsőfokú differenciálegyenlet-rendszerre, mert a solver ebben a formában tudja kezelni.

Az effektív permittivitást már a solver megoldásának felhasználásával, trapézformula segítségével az (1.14) alapján számoljuk.

### III. A grafikus felület ismertetése

A jobb kezelhetőség és áttekinthetőség érdekében a *freedom5* megoldómaghoz készült a *camhf4* nevű MATLAB GUI. A bejelentkező képernyő alább látható:



Megadhatjuk a különböző paramétereket, a numerikus értékek mindig SI-ben értendők. Az alapértelmezett adatok a CIPbis10BB jelű anyagra vonatkoznak. Sajnos a MATLAB grafikus objektumok *String* tulajdonságában nem működik a TeX/LaTeX támogatás ezért a gombokon és a paneleken nem lehetett görög betűket használni.

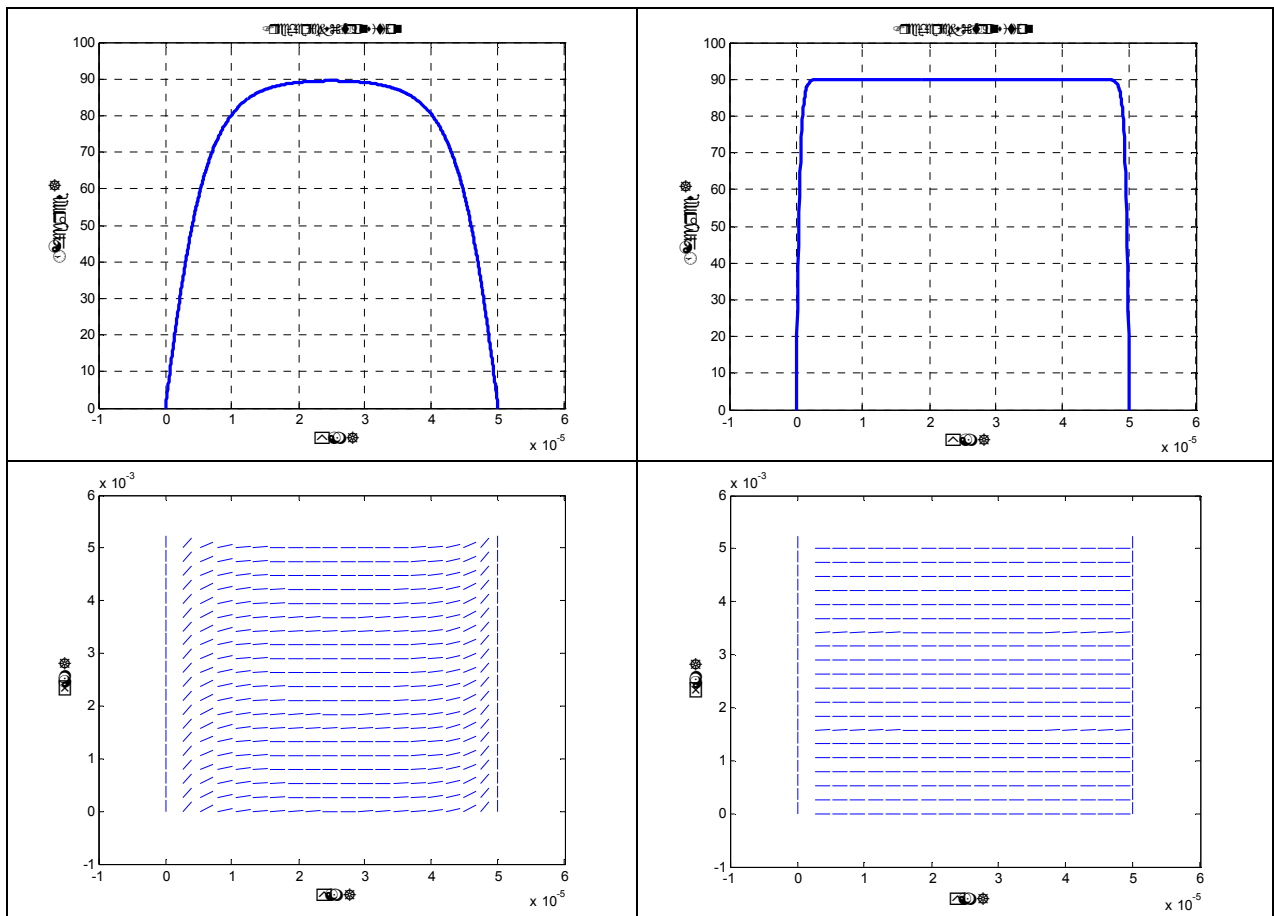
A mágneses indukció megadása után a *phi(y)* gombra kattintva láthatóvá válik a  $\phi$   $y$ -függése.

Az effektív permittivitás térfüggésének modellezéséhez meg kell adnunk a kezdeti ( $B0$ ), a végső ( $Bmax$ ) teret és az osztópontok számát ( $n$ ). Az *e-eff(B)* gomb lenyomása után egy kis idő múlva megjelenik a térfüggés grafikonja.

A *2D cut* gomb adott térnél szemlélteti a molekulák irányítottságát (vagyis a direktort) a cella egy 2 dimenziós metszetében. A *Results* panelen láthatók az eredményül kapott mennyiségek *e-eff* jelöli konstans térnél az effektív dielektromos állandót, *B-crit* jelöli az adott elrendezésben a Freedericksz-átmenethez tartozó, térfüggésből grafikusán számított küszöbteret. *B-crit(a)* az (1.15)-ből származó értéket jelöli.

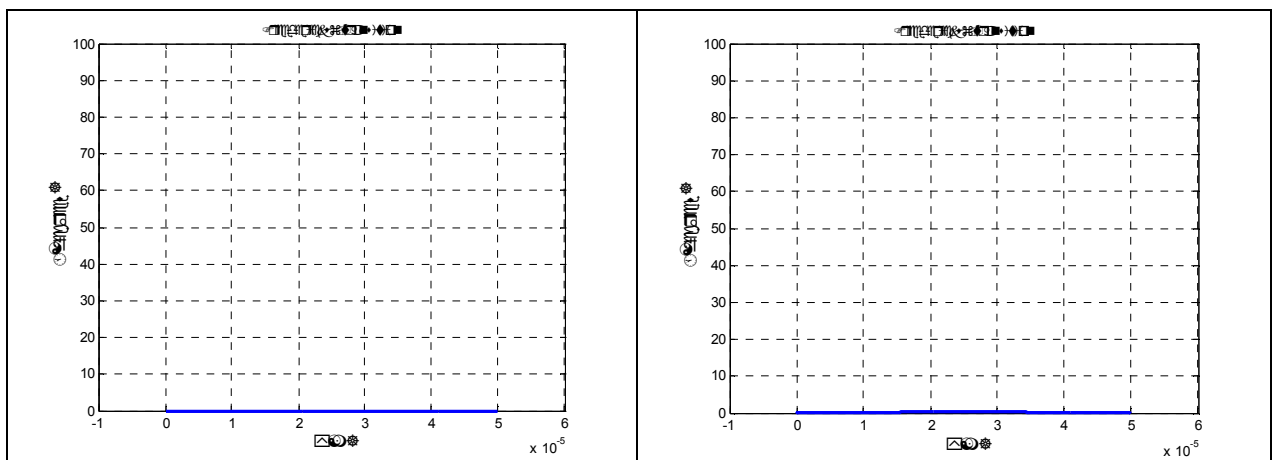
### IV. Eredmények

Szögprofil  $B = 1$  Tesla és  $B = 10$  Tesla tér mellett:

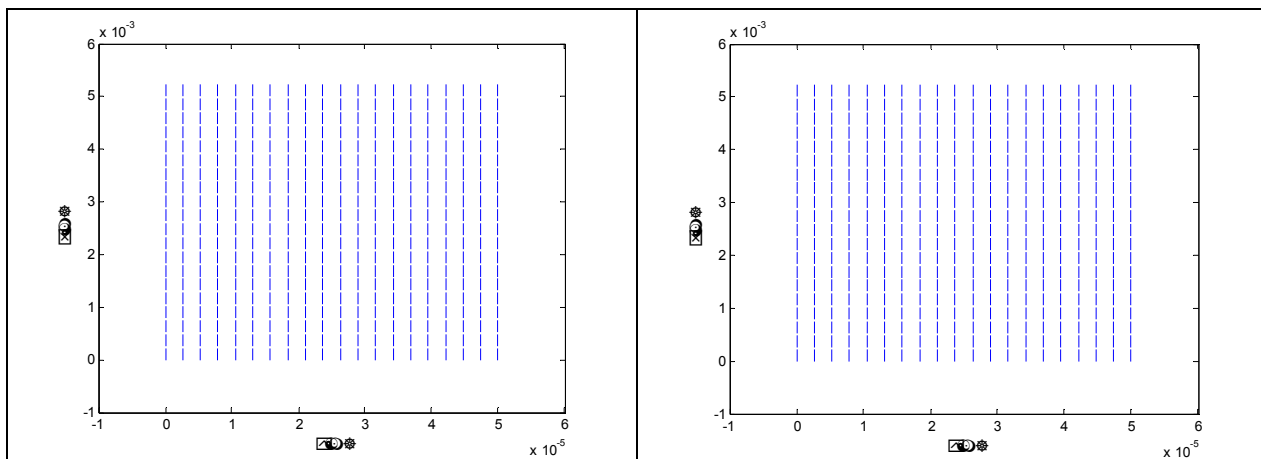


Látszik, hogy nagy tér mellett élessé válik az eloszlás.

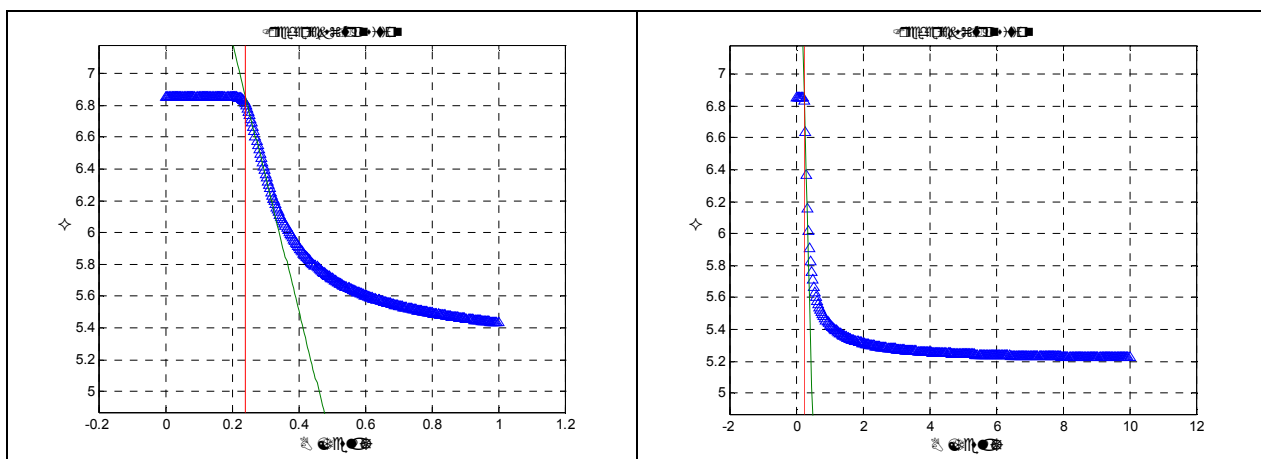
A küszög alatt nincs torzulás. Ezt szemlélteti az alábbi  $B = 0.1$  T és  $B = 0.2$  T beállítással készült grafikon:



A metszeteken jól látható a kezdeti planáris orientáció változatlansága:



A térfüggés eredményei,  $B_{\max} = 1 \text{ T}$  és  $B_{\max} = 10 \text{ T}$  esetén ( $n = 300$ ):



A küszöbtér meghatározásánál behúztuk a zöld egyenest, ami a görbe legmeredekebb „érintője” és megnéztük, hogy hol metszi a  $e\text{-eff} = e_p = \text{állandó}$  egyenest. A metszéspontba pirossal behúztuk a küszöbteret jelző aszimptotát.

Az irodalmi viselkedés kvalitatíve teljesen jól egyezik az fentebb számoltakkal.

## V. Felhasznált irodalom:

- Bata Lajos: Folyadékkristályok (Műszaki Kiadó)(1986)
- Buka Ágnes, Éber Nándor: Folyadékkristályok c. ea. jegyzet (ELTE) (2003)
- D. Wiant, N. Éber, T. Katona, A. Jákli, Phys. Rev. E72, 041712 (2005)