

Федеральное государственное автономное  
образовательное учреждение  
высшего образования  
«СИБИРСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Институт космических и информационных технологий  
Кафедра «Вычислительной техники»

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой

                     А.И. Легалов  
подпись                      инициалы, фамилия

« \_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 20 \_\_ г.

**МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ**

**ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ТЕХНИКИ ПРИ РАСЧЕТЕ  
ФИЗИЧЕСКИХ ЯВЛЕНИЙ НА ПРИМЕРЕ ОРИЕНТАЦИИ  
НЕМАТИЧЕСКОГО ЖИДКОГО КРИСТАЛЛА**

09.04.01 Информатика и вычислительная техника  
09.04.01.04 Технология разработки программного обеспечения

Научный руководитель                      к.т.н., доцент Н.Ю. Сиротинина  
подпись, дата                      должность, ученая степень                      инициалы, фамилия

Выпускник                      Е.Р. Буханов  
подпись, дата                      инициалы, фамилия

Рецензент                      к.т.н., Зав. Лаб ИХХТ А.М. Жижаев  
подпись, дата                      должность, ученая степень                      инициалы, фамилия

Консультант                      к.ф.-м.н., СНС ИФ А.В. Шабанов  
подпись, дата                      должность, ученая степень                      инициалы, фамилия

Нормоконтролер                      к.т.н., доцент В.И. Иванов  
подпись, дата                      должность, ученая степень                      инициалы, фамилия

Красноярск 2016

## СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ .....	4
1 Описание предметной области.....	6
1.1 Жидкие кристаллы и их свойства.....	6
1.2 Континуальная теория ориентации ЖК.....	8
1.3 Фотонные кристаллы с нематической подрешеткой.....	11
1.4 Фотонно-кристаллические структуры, организованные с использованием жидких кристаллов.....	16
2 Выбор математического аппарата.....	18
3 Проектирование и разработка программного продукта.....	25
3.1 Структура программы.....	25
3.2 Алгоритм вычислений.....	28
3.3 Описание интерфейса программы.....	34
3.3.1 Область ввода и корректировки параметров.....	37
3.3.2 Элементы управления процессом.....	38
3.3.3 Результаты моделирования.....	39
4 Результаты расчета.....	44
4.1 Классические эксперименты.....	44
4.1.1 Численное моделирование структуры «Ёж».....	44
4.1.2 Численное моделирование структуры «Буджум».....	46
4.2 Линзоподобная структура.....	51
4.3 Фотоннокристаллическая структура с жидким кристаллом.....	53
ЗАКЛЮЧЕНИЕ .....	57
СПИСОК СОКРАЩЕНИЙ .....	59
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ .....	60
ПРИЛОЖЕНИЕ А Листинг инициализации расчетных динамических массивов .....	65
ПРИЛОЖЕНИЕ Б Листинг заполнения маски в виде сферы.....	66
ПРИЛОЖЕНИЕ В Листинг заполнения расчетного массива.....	67
ПРИЛОЖЕНИЕ Г Листинг нормировки значений расчетного массива.....	68

ПРИЛОЖЕНИЕД Листинг расчетного модуля.....	69
ПРИЛОЖЕНИЕЕ Листинг преобразования изображения в оптический просвет в скрещенных поляризаторах .....	72

## ВВЕДЕНИЕ

Наука о жидких кристаллах – одна из самых молодых и наиболее трудных областей физики. Трудности обусловлены сложностью молекул, образующих эти вещества. Для объяснения свойств жидких кристаллов необходимо привлекать не только теорию обычных жидкостей, достаточно сложную по себе, но также и науки о твердых кристаллах, например кристаллографию и физику твердого тела [1].

В последнее время жидкие кристаллы находят всё большее применение в устройствах отображения информации и для визуализации физических полей различной природы. Сегодня на их основе как массовая коммерческая продукция выпускаются мониторы компьютеров, плоские телевизионные экраны и самые разнообразные индикаторные и информационные табло. Это обусловлено высокой оптической чувствительностью жидких кристаллов к внешнему воздействию при чрезвычайно малом управляющем напряжении и низкой величине потребляемой мощности. Помимо этого, в ЖК наблюдается необыкновенное многообразие физических эффектов, являющееся следствием их структуры – структуры анизотропной жидкости. Основу функционирования большинства вышеперечисленных устройств составляют процессы ориентационной релаксации, связанные с вращением молекул относительно их коротких осей.

Не всегда проведение экспериментов целесообразно. Иногда это может быть не выгодно по экономическим причинам, сравнивая рентабельность эксперимента и возможные доходы от него. В других случаях отсутствует возможность наблюдения эксперимента из-за сложной структуры объекта (например, реальное поведение ориентации жидкого кристалла в порах опала). В таких случаях математическое моделирование поведения ориентации поля директора является наилучшим решением.

Обычно описание ориентации жидкого кристалла требует введения эмпирических или заранее заданных параметров. Поскольку свойства

системы связаны с внутренней структурой, описание её строения на основе математического расчета ориентации единичных объемов жидкого кристалла (расчет поля директора) является важной задачей. Ее решение позволит проводить различные исследования на основе жидкого кристалла и смоделировать искомый результат без особых как финансовых, так и трудовых затрат. Таким образом, обуславливается актуальность выбранной для исследования темы.

Цель данной работы – создание программы для расчета ориентации поля директора жидкого кристалла в произвольном объеме.

В соответствии с поставленной целью ставились следующие задачи:

- обзор предметной области, определение специфики задачи и уточнение функционала программы;
- построение математической модели;
- определение аппроксимирующих коэффициентов расчетного алгоритма программы для классических ориентаций;
- адаптация математической модели для реализации;
- реализация программной модели с учетом требований к функционалу;
- апробация программной модели, проверка ее соответствия реальной ситуации.

**[изъято 51 страниц]**

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Вопросы о взаимодействии жидких кристаллов с кристаллическими, аморфными и полимерными поверхностями чрезвычайно актуальны, так как от их решения во многом зависит качество современных приборов и устройств, где требуется почти идеальная ориентация молекул. И это не только технологическая проблема, но и трудная научная задача изучения физики и химии поверхностей.

### **Выводы:**

Написана программа позволяющая рассчитывать ориентацию поля директора жидкого кристалла при различных граничных условиях.

Разработан алгоритм определения констант аппроксимирующих функции доворота директора исходя из известных экспериментальных данных.

Программа позволила получить результаты, хорошо согласующиеся с реальными экспериментальными данными.

По сравнению с ранее используемыми алгоритмами вычислений полученный результат позволил более детально просчитать сложные объектные структуры без вырезки отдельных фрагментов или введения единичных констант в расчетный объем.

Изменение граничных условий может приводить к радикальной перестройке внутренней конфигурации.

Расчет показал, что при заполнении пор опала жидким кристаллом, исчезает глобальная упорядоченность. В то же время при наличии дополнительных ориентирующих воздействий (здесь – изменение формы пор) в инверсном опале может существовать одинаковая ориентация ЖК в каждой ячейке.

### **Дальнейшее направление развития продукта:**

Реализовать вывод трехмерного изображения массива с возможностью вращения вдоль любой оси.

Полноценное распараллеливание расчетного процесса.

Так как в настоящий момент не существует полноценных качественных критериев оценки погрешности численного эксперимента, также остается открытым вопрос об их введении.

В результате работ рассматривали только нематические жидкие кристаллы, расчет конфигурации при иных мезофазных состояниях (смектики, холестерики) – цель дальнейших исследований.

## СПИСОК СОКРАЩЕНИЙ

ФК – фотонный кристалл.

НЖК – Нематический жидкий кристалл.

ФЗЗ – Фотонные запрещенные зоны.

ЖК – Жидкий кристалл.

КПЖК – Капсулированный в полимере жидкий кристалл.



## СПИСОК ИСПОЛЬЗУЕМЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Joannopoulos, J. Photonic Crystals / J. Joannopoulos, R. Meade, J. Winn. – Princeton : Princeton University, 1995. – 137 p.
2. Рытов, С.М. Электромагнитные свойства мелкослоистой среды / С. М. Рытов // Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики. – 1955. – Т. 29, № 11. – С. 25–34.
3. Рытов, С. М. Акустические свойства мелкослоистой среды / С. М. Рытов // Акустический журнал. – 1956. – Т. 2, № 2. – С. 71–77.
4. Бреховских, Л. М. Волны в слоистых средах : монография / Л. М. Бреховских. – Москва : Издательство АН СССР, 1957. – 501 с.
5. Булгаков, А. А. Поверхностные оптические колебания в органической слоисто-периодической среде / А. А. Булгаков // Оптика и спектр. – 1984. – №56. – С. 769–771.
6. Генерация второй оптической гармоники в жидком сегнетоэлектрическом кристалле / А.Н. Втюрин [и др.]. – Москва, 2003. – 142 с.
7. Yablonovitch, E. Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics / E. Yablonovitch // Physics Review Letters. – 1987. – Vol.58. – P. 2059–2063.
8. Быков, В.П. Излучение атомов вблизи материальных тел: некоторые вопросы квантовой теории : учебник / В. П. Быков. – Москва : Букинист, 1975. – Т. 4. – С. 861–866.
9. John, S. Strong localisation of photons in certain. Disordered dielectric superlattices / S. John // Physics Review Letters. – 1987. – Vol. 58. – P. 2486–2491.
10. Кособукин, В.А. Фотонные кристаллы / В. А. Кособукин // Окно в микромир, №44, 2002, режим доступа:<http://edu.ioffe.ru/wmw/n4/04.html>.
11. Bush, K. Photonic band gap formation in certain self-organizing systems/ K. Bush, S. John // Physics Review. – 1998. – Vol. 58. – P. 3896–3904.

12. Lin, S.Y. Experimental demonstration of guiding and bending of electromagnetic waves in a photonic crystal / S. Y. Lin, E. Chow, V. Hietala // *Science*. – 1998. – Iss. 282. – P. 284–289.
13. Виноградов, А. В. Рентгеновские поверхностные волны в сверхрешетке / А. В. Виноградов // *Письма в ЖЭТФ*. – 1984. – Т. 40, № 2. – С. 405–407.
14. Жаркова, Г. М. Жидкокристаллические композиты / Г. М. Жаркова, А. С. Сонин. – Новосибирск : Наука, 1994. – 214 с.
15. Шабанов, В. Ф. Фотонные кристаллы и нанокомпозиты : структурообразование, оптические и диэлектрические свойства / В. Ф. Шабанов, В. Я. Зырянов. – Новосибирск : Изд-во СО РАН, 2009. – 257 с.
16. Painter, O. Two-Dimensional Photonic Crystal Defect laser / O. Painter, R. K. Lee, A. Scherer // *Science*. – 1999. – Vol. 284. – P. 1819–1822.
17. Imada, M. Coherent two-dimensional lasing action in surface-emitting laser with triangular-lattice photonic crystal structure / M. Imada, S. Noda, A. Chutinan // *Physics Letters*. – 1999. – Vol. 75. – P. 316–322.
18. Yablonovitch, E. Photonic band structures: the base-centered cubic case employing non-spherical atoms / E. Yablonovitch, T. J. Gmitter, K. M. Leung // *Physics Review Letters*. – 1991. – Vol. 67. – P. 2295.
19. Joannopoulos, J. Photonic crystals: putting a new twist on light / J. Joannopoulos, P. R. Villeneuve, S. Fan // *Nature*. – 1997. – Vol. 386. – P. 143–146.
20. Китайгородский, А. И. Молекулярные кристаллы : учебное пособие / А. И. Китайгородский. – Москва : Наука, 1971. – 232 с.
21. Chen, W. Gap solutions and the nonlinear optical response of superlattices / W. Chen, P. L. Mills // *Physics Review Letters*. – 1987. – Vol. 58, № 2. – P. 160–163.
22. Mills, P.L. Gap solutions in nonlinear periodic structures / P. L. Mills, S. E. Trulinger // *Physics Review*. – 1987. – Vol. 36, № 2. – P. 947–952.

23. Желтиков, А. М. Компрессия световых импульсов в фотонных кристаллах : учебник / А. М. Желтиков // Квантовая электроника. – 1998. № 10. – С. 885–893.

24. Koroteev, N.I. Compression of ultrashort light pulses in photonic crystals: when envelopes to be slow / N. I. Koroteev, S. A. Magnitskii, A. V. Tarasishin // Optical Community. – 1999. – Vol. 159. – P. 191–198.

25. Желтиков, А. М. Фазовая самомодуляция и компрессия световых импульсов в нелинейных фотонных кристаллах / А. М. Желтиков, Н. И. Коротеев, С. А. Магницкий // Издание РАН. – 1999. – Т. 63. – С. 717–721.

26. Втюрин, А. Н. Нелинейные оптические свойства несоразмерной фазы сегнетоэлектрического кристалла / А. Н. Втюрин, В. Ф. Шабанов, К. С. Александров // ЖЭТФ. – 1979. – Т. 77, № 12. – С. 2358–2365.

27. Втюрин, А. Н. Генерация второй оптической гармоники в жидком сегнетоэлектрическом кристалле / А. Н. Втюрин, В. П. Ермаков, Б. И. Островский // Кристаллография. – 1981. – Т. 26, № 3. – С. 546–549.

28. Головань, Л. А. Генерация второй оптической гармоники в структурах с фотонной запрещенной зоной на основе пористого кремния / Л. А. Головань, А. М. Желтиков, П. К. Кошкарров // Письма в ЖЭТФ. – 1999. – Т. 59, № 4. – С. 274–279.

29. Беляков, В. А. Дифракционная оптика периодических сред сложной структуры: учебник / В. А. Беляков. – Москва: Наука, 1988. – 254 с.

30. Беляков, В. А. Об эффективном нелинейно-оптическом преобразовании частоты в периодических средах в условиях дифракции волновых полей / В. А. Беляков // Письма в ЖЭТФ. – 1999. – Т. 70, № 12. – С. 793–799.

31. Долгова, Т. В. Гигантская вторая гармоника в микрорезонаторах на основе фотонных кристаллов пористого кремния / Т. В. Долгова, А. И. Майдыковский, М. Г. Мартемьянов // Письма в ЖЭТФ. – 2001. – Т. 73, № 1. – С. 8–12.

32. Мартемьянов, М.Г. Генерация третьей оптической гармоники в одномерных фотонных кристаллах и микрорезонаторах / М. Г. Мартемьянов, Т. В. Долгова, А. А. Федянин // ЖЭТФ. – 2004. – Т. 125, № 3. – С 527–542.
33. Kosaka, H. Photonic crystals for microlightwave circuits using wavelength-dependent angular beam steering / H. Kosaka, T. Kawashima, A. Tomita // Physics Letters. – 1999. – Vol. 74, № 10. – P. 1370–1372.
34. Kosaka, H. Superprism phenomena in photonic crystals / H. Kosaka, T. Kawashima, A. Tomita // Physics Review. – 1998. – Vol. 58, № 16. – P.10096–10099.
35. Notomi, M. Theory of light propagation in strongly modulated photonic crystals: Refractionlike behavior in the vicinity of the photonic band gap / M. Notomi // Physics Review. – 2000. – Vol. 62, № 16. – P.10696–10705.
36. Luo, C. All-angle negative refraction in a three-dimensionally periodic photonic crystal / C. Luo, S. Johnson, G. Joannopoulos // Physics Letters. – 2002. – Vol. 81, № 13. – P. 2352–2354.
37. Веселаго, В.Г. Электродинамика веществ с одновременно отрицательными значениями  $\epsilon$  и  $\mu$  / В. Г. Веселаго // Успехи Физических Наук. – 1967. – Т. 92, № 3. – С. 517–525.
38. Веселаго, В.Г. О формулировке принципа Ферма для света, распространяющегося в веществах с отрицательным преломлением / В. Г. Веселаго // Успехи Физических Наук. – 2002. – Т. 172, №10. – С. 1215–1218.
39. Косевич, А.М. Блоховские осцилляции магнитных солитонов как пример динамической локализации квазичастиц в однородном внешнем поле / А. М. Косевич // ФНТ. – 2001. – Т. 27, № 7. – С. 699–737.
40. Malpuech, G. Theory of photon Bloch oscillations in photonic crystals / G. Malpuech, A. Kavokin, A. Di Carlo // Physics Review. – 2001. – Vol. 63. – P. 108–109
41. Pertsch, T. Optical Bloch oscillation in temperature tuned waveguide arrays / T. Pertsch, P. Pannberg, W. Elfle // Physics Review Letters. – 1999. – Vol. 83, № 23. – P. 4752–4755.

42. Marandotti, R. Experimental observation of linear and nonlinear optical Bloch oscillations / R. Marandotti, U. Peschel, I. S. Aitchison // *Physics Review Letters*. – 1999. – Vol. 83, № 23. – P. 4756–4759.
43. Блинов, Л. М. Электро- и магнитооптика жидких кристаллов: учебник / Л. М. Блинов. – Москва: Наука, 1978. – 384 с.
44. Ветров, С.Я. Поверхностные электромагнитные волны на границе раздела изотропной среды и сверхрешетки / С. Я. Ветров, А. В. Шабанов // *ЖЭТФ*. – 1992. – Т.101, № 4. – С.1340–1346.
45. Kee, C. Two-dimensional tunable metallic photonic crystals infiltrated with liquid crystals / C. Kee, H. Lim // *Physics Review*. – 2001. – Vol. 64. – P. 85–114.
46. Bush, R. Liquid crystal photonic band gap materials: the tunable electromagnetic vacuum / R. Bush, S. John // *Physics Review Letters*. – 1999. – Vol. 83, № 5. – P. 967–970.
47. Yang, F. Microwave crystal wavelength selector / F. Yang, T. R. Sambles // *Application Physics Letters*. – 2001. – Vol. 79, № 22. – P. 3717.
48. Коршунов, М.А. Изучение мезоморфного состояния 4-н'-пентил-4'-цианобифенила в микро- и нанокапсулах / М. А. Коршунов, Шабанов А. В., Крахалев М. Н. // *Физическая мезомеханика*. – 2011. – Т. 14, № 6. – С. 30-35
49. Perova, T.S. Orientation of discotic and ferroelectric liquid crystals in macroporous silicon matrix / T. S. Petrova, E. V. Astrova, S. E. Tsvetkov // *ФТТ*. – 2002. – Т. 44, № 6. – С. 1145–1150.
50. Kutzerow, H. Tunable photonic crystals / H. Kutzerow // *Liquid Crystals Today*. – 2002. – Vol. 11, № 4. – P. 3–7.
51. Де Жен, П. Физика жидких кристаллов / П. Де Жен; под ред. А. С. Сонина. – Москва: Мир, 1977. – 400 с.
52. Шлее, М. Профессиональное программирование на C++: учебное пособие / М. Шлее. – Санкт-Петербург :БВХ-Петербург, 2015. – 928 с.
53. Блинов, Л.М. Жидкие кристаллы / Л. М. Блинов; под ред. Л. Г. Асламазова. – Москва: Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1982. – 208с.

**[изъято 10 страниц]**