

Динамика переориентации нематиков, инкапсулированных в микроскопические объемы, под действием сильного электрического поля

© А.В. Захаров¹, А.А. Вакуленко¹, С.В. Пасечник²

¹ Институт проблем машиноведения РАН,
Санкт-Петербург, Россия

² Московский технологический университет,
Москва, Россия

E-mail: alexandre.zakharov@yahoo.ca

(Поступила в Редакцию 25 февраля 2016 г.)

Предложено теоретическое описание нового режима переориентации поля директора \hat{n} и скорости \mathbf{v} нематического жидкого кристалла (ЖК), инкапсулированного в прямоугольную ячейку, под действием сильного электрического поля \mathbf{E} , направленного под углом α ($\sim \pi/2$) к горизонтальным ограничивающим поверхностям ЖК-ячейки. Численные расчеты, выполненные в рамках нелинейного обобщения классической теории Эриксона–Лесли, показали, что при определенных соотношениях моментов и импульсов, действующих на единицу объема ЖК-фазы, и в случае $E \gg E_{th}$ в процессе переориентации \hat{n} могут возникнуть переходные периодические структуры, если соответствующая мода искажения обладает наивысшим откликом и таким образом подавляет все остальные моды, в том числе и однородные. На положение узлов этих периодических структур оказывают влияние величина поля E , угол α , а также характер сцепления ЖК-молекул с ограничивающими поверхностями. Расчеты, выполненные для нематика, образованного молекулами 4-п-пентил-4'-цианобифенила, указывают на то, что в ЖК-ячейке может формироваться несколько вихрей, вызванных переориентацией поля директора, а границы этих вихрей определяются положениями узлов периодической структуры.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 16-02-00041а) и Министерства образования и науки РФ (проект № 3.1921.2014/К проектной части государственного задания).

1. Введение

Наряду с широким использованием жидкокристаллических (ЖК) материалов в производстве ЖК-дисплеев не менее важной областью их применения является микро- и нанофлюидистика, т.е. наука о движении жидкостей в микро- и наноразмерных каналах и капиллярах. В течение последних десяти лет число публикаций, посвященных нанофлюидистике, удваивается приблизительно каждые два года [1,2], и эта тенденция, по-видимому, будет неуклонно возрастать, поскольку микро- и нанофлюидистика находит широкое применение в аналитической и экспериментальной химии и биохимии, а также в медицинской диагностике и фармакологии [3]. Отдельно следует отметить широкое использование методов микро- и нанофлюидистики при создании новых семейств сенсоров и датчиков на основе термо- и лиотропных ЖК-материалов [4–6]. Методы микро- и нанофлюидистики также находят широкое применение при исследовании процессов транспортировки и сортировки нанолитровых капель жидкостей [7] и ЖК-материалов в разветвленных каналах и капиллярах (lab-on-chip-system) под действием внешнего электрического поля (электрокинетика) [8,9]. Что касается ЖК-технологий, то внешние поля (электрические и магнитные), а также характер приповерхностной ориентации поля директора, т.е. усредненной ориентации ЖК-молекул на границе

раздела ЖК-фаза/твердое тело, сильно влияют на времена переориентации поля директора и тем самым на качество и надежность изображения на ЖК-дисплеях и экранах [10]. Поэтому всестороннее исследование динамических режимов переориентации поля директора в микроскопических объемах ЖК-фаз под действием сильного электрического поля ($\geq 1 \text{ V}/\mu\text{m}$) позволит улучшить как оптические, так и динамические характеристики сенсоров, терморегуляторов и датчиков, применяемых, например, в медицинской диагностике и биологических лабораториях на чипах.

Целью настоящей работы является описание процесса формирования новых режимов переориентации как поля директора $\hat{n}(\mathbf{r}, t)$, так и поля скорости $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$ (backflow), возникающего в процессе релаксации поля директора к его равновесному распределению по всему объему микроскопической ЖК-ячейки под действием сильного электрического поля \mathbf{E} . Поскольку внешнее электрическое поле \mathbf{E} стремится сориентировать молекулы ЖК-фазы вдоль \mathbf{E} , это приводит к возникновению конкуренции с приповерхностными силами, которые транслируются в объем ЖК-фазы посредством ориентационной упругости присущей всем ЖК-материалам. При значениях величины поля $E > E_{th}$ молекулы ЖК-фазы однородно разворачиваются в сторону вектора \mathbf{E} [11]. Здесь E_{th} — некоторое пороговое значение внешнего электрического

поля, при достижении которого начинается переориентация поля директора (переход Фредерика [11]). Эта величина зависит от конкретного ЖК-материала и его размеров. В случае $E \gg E_{th}$ ЖК-система может быть выведена из равновесного состояния, и любые малые отклонения начальной ориентации поля директора, вызванные, например, термофлуктуациями, могут начать экспоненциально расти с коэффициентами роста, обратно пропорциональными некоторой эффективной вращательной вязкости ЖК-материала [12]. При классическом переходе Фредерика однородный поворот молекул ЖК-фазы происходит в плоскости, образованной полем директора \hat{n} и полем \mathbf{E} , и характеризуется сравнительно большим эффективным коэффициентом вращательной вязкости и отсутствием течения ЖК-фазы. С другой стороны, в случае $E \gg E_{th}$ в процессе переориентации поля директора \hat{n} могут возникнуть переходные периодические структуры, если соответствующая мода искажения обладает наивысшим откликом и таким образом подавляет все остальные моды, в том числе и однородные [13,14]. При периодическом искажении ЖК-фазы появляется сдвиговая вязкость, уменьшающая общую эффективную вращательную вязкость, связанную с переориентацией поля директора. Возникающие при этом вращающиеся домены способствуют уменьшению эффективной вязкости, характеризующей скорость диссипации энергии, и тем самым создают более выгодные по сравнению с однородным поворотом режимы переориентации поля директора. Исследование этих новых состояний проведено нами в рамках нелинейного обобщения классической теории Эриксона–Лесли [15,16] с учетом балансов массы, импульсов и моментов, действующих на единицу объема ЖК-материала. Численные исследования характера переориентации поля директора и формирования гидродинамического течения в микрометровых ЖК-ячейках, образованных молекулами 4-пентил-4'-цианобифенила (5ЦБ), проведены для случая электрического поля \mathbf{E} , направленного практически ортогонально горизонтальным поверхностям ЖК-ячейки.

2. Основные уравнения

Рассмотрим длинную прямоугольную ЖК-ячейку с размерами $2L$ и $2d$ ($L \gg d$), ограниченную твердыми горизонтальными и вертикальными поверхностями. Допустим, что директор планарно ориентирован на горизонтальных ограничивающих поверхностях и гомотропно на вертикальных, причем рассмотрим два случая: 1) случай, характеризующийся жестким сцеплением ЖК-молекул со всеми твердыми поверхностями; 2) случай — мягкого сцепления ЖК-молекул с горизонтальными и жесткого сцепления с вертикальными ограничивающими поверхностями. В обоих случаях система координат отсчитывается от центра ЖК-ячейки так, что ось x и орт \hat{i} совпадают с направлением директора на нижней горизонтальной поверхности ($\hat{i} \parallel \hat{n}_{z=-d}$), в

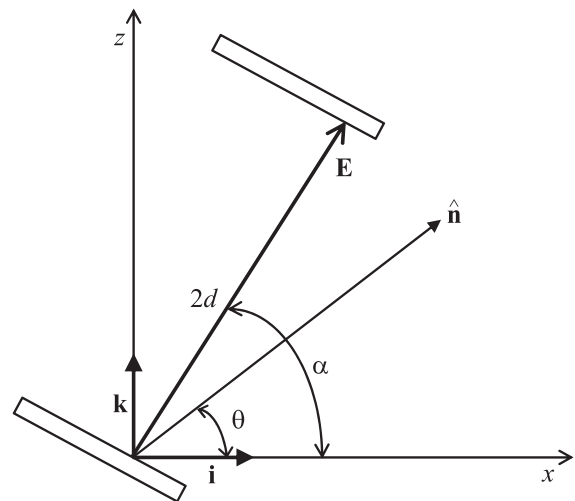


Рис. 1. Система координат, используемая при вычислениях. Орт \hat{i} направлен параллельно, а орт \hat{k} перпендикулярно нижней ограничивающей поверхности ЖК-ячейки. Вектор электрического поля \mathbf{E} и вектор поля директора \hat{n} направлены под углом α и углом θ к нижней горизонтальной ограничивающей поверхности ЖК-ячейки соответственно.

то время как ось z и орт \hat{k} направлены ортогонально ($\hat{k} \perp \hat{n}_{z=-d}$), а орт $\hat{j} = \hat{k} \times \hat{i}$ (рис. 1). Таким образом, в начальный момент времени мы имеем дело с планарно и однородно ориентированным жидким кристаллом, образованным молекулами 5ЦБ, при этом вектор электрического поля $\mathbf{E} = E_x \hat{i} + E_z \hat{k} = E(z) \cos \alpha \hat{i} + E(z) \sin \alpha \hat{k}$ направлен под углом α ($\sim \pi/2$) к горизонтальным поверхностям ЖК-ячейки. После включения электрического поля \mathbf{E} , направленного практически ортогонально к планарно и однородно ориентированному ЖК-образцу, в ЖК-фазе начинается переориентация полярных молекул и, как следствие, переориентация $\hat{n}(\mathbf{r}, t)$ вдоль направления вектора \mathbf{E} . Этот процесс переориентации сопровождается формированием поля скорости $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$ в объеме ЖК-фазы. Будем предполагать, что переориентация поля директора $\hat{n} = n_x \hat{i} + n_z \hat{k} = \cos \theta(x, z, t) \hat{i} + \sin \theta(x, z, t) \hat{k}$ под действием электрического поля \mathbf{E} осуществляется в плоскости xOz . Здесь θ — угол, образованный директором \hat{n} и ортом \hat{i} . Таким образом, формирование гидродинамического течения $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$, обусловленного переориентацией поля директора \hat{n} под действием сильного электрического поля \mathbf{E} , может быть описано в рамках нелинейного обобщения классической теории Эриксона–Лесли [15,16], которая учитывает баланс массы, импульсов и угловых моментов, действующих на единицу ЖК-фазы, а также закон сохранения зарядов. Принимая во внимание микроскопические размеры ЖК-ячейки, можно предположить, что плотность ЖК-системы постоянна и мы имеем дело с несжимаемой жидкостью. Условие несжимаемости ЖК-материала $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$, или $u_x + w_z = 0$, выполняется за счет вве-

дения безразмерной функции тока $\bar{\psi} = \frac{4\gamma_1}{\epsilon_0\epsilon_a} \frac{1}{U^2} \psi$, где безразмерные компоненты вектора скорости $\mathbf{v} = u\hat{\mathbf{i}} + w\hat{\mathbf{k}}$ выражены через ψ как $u = \frac{\partial\psi}{\partial z} = \psi_{,z}$ и $w = -\frac{\partial\psi}{\partial x} = -\psi_{,x}$ соответственно. Здесь и далее мы используем безразмерные пространственные переменные $\bar{x} = x/d$ и $\bar{z} = z/d$, а также безразмерное время $\tau = \frac{\epsilon_0\epsilon_a}{\gamma_1} \left(\frac{U}{2d}\right)^2 t$, причем в дальнейшем черта над пространственными переменными и функцией тока будет опущена, ϵ_0 — диэлектрическая проницаемость вакуума, ϵ_a — диэлектрическая анизотропия ЖК-системы, γ_1 и γ_2 — коэффициенты вращательной вязкости, а $U = 2Ed$ — величина напряжения. Баланс моментов, действующих на единицу объема ЖК-фазы, в безразмерном виде может быть записан как

$$\begin{aligned} \theta_{,t} = & \delta_1 [\Delta_1\theta_{,xx} + \Delta_2\theta_{,zz} + \Delta_3(-2\theta_{,xz} + \theta_{,x}^2 + \theta_{,z}^2) + \Delta_4\theta_{,x}\theta_{,z}] \\ & + \frac{1}{2} \bar{E}^2(z) \sin 2(\alpha - \theta) + \frac{1}{2} (\psi_{,xx} + \psi_{,zz}) - \psi_{,z}\theta_{,z} + \psi_{,x}\theta_{,x} \\ & + \gamma \left[\sin 2\theta\psi_{,xz} + \frac{1}{2} (\psi_{,xx} - \psi_{,zz}) \right], \end{aligned} \quad (1)$$

где $\Delta_1 = \sin^2\theta + K_{31}\cos^2\theta$, $\Delta_2 = \cos^2\theta + K_{31}\sin^2\theta$, $\Delta_3 = \frac{(1-K_{31})}{2} \sin 2\theta$, $\Delta_4 = (K_{31} - 1) \cos 2\theta$, $\gamma = \gamma_2/\gamma_1$, $K_{31} = K_3/K_1$, а K_1 и K_3 — коэффициенты упругости, соответствующие изгибным и продольным деформациям.

Безразмерное уравнение Навье–Стокса, записанное с помощью функции тока ψ , имеет вид

$$\delta_2 [(\Delta\psi)_{,t} + \psi_{,z}(\Delta\psi)_{,x} - \psi_{,x}(\Delta\psi)_{,z}] = \hat{\mathcal{L}}\psi + \mathcal{F}, \quad (2)$$

где $\Delta\psi = \psi_{,xx} + \psi_{,zz}$, а оба оператора $\hat{\mathcal{L}}$ и \mathcal{F} приведены в Приложении. Здесь $\delta_1 = \frac{4K_1}{\epsilon_0\epsilon_a U^2}$, $\delta_2 = \frac{\rho\epsilon_0\epsilon_a}{4\gamma_1^2} U^2$ — два параметра ЖК-системы.

В свою очередь безразмерное электрическое поле удовлетворяет основному уравнению электростатики для диэлектриков

$$\frac{\partial}{\partial z} \left[\left(\frac{\epsilon_{\perp}}{\epsilon_a} + \sin\theta \right) \bar{E}(z) \right] = 0, \quad \int_{-1}^1 \bar{E}(z) dz = 1, \quad (3)$$

где ϵ_{\perp} — величина диэлектрической проницаемости ЖК-материала в направлении, перпендикулярном полю директора $\hat{\mathbf{n}}$, а функция $\bar{E}(z) = \frac{2d}{U} \sin\alpha E(z)$ описывает безразмерное электрическое поле.

Будем рассматривать ЖК-ячейку с размерами $L/d = 10$, помещенную между двумя электродами таким образом, что вектор \mathbf{E} направлен под углом α к орту $\hat{\mathbf{i}}$. Будем изучать два случая сцепления ЖК-молекул с ограничивающими стенками: первый (A) — случай жесткого сцепления, когда граничные условия для угла θ могут быть записаны в виде

$$\theta_{-10 < x < 10, z = \pm 1} = \theta_{x = \pm 10, -1 < z < 1} = 0, \quad (4)$$

и второй (B) — случай мягкого сцепления на горизонтальных и жесткого сцепления на вертикальных ограничивающих поверхностях, когда граничные условия для угла θ могут быть записаны в виде

$$\begin{aligned} (\theta_{,z})_{-10 < x < 10, z = \pm 1} &= \pm \delta_3 \theta_{-10 < x < 10, z = \pm 1}, \\ \theta_{x = \pm 10, -1 < z < 1} &= 0, \end{aligned} \quad (5)$$

где $\delta_3 = \frac{\mathcal{A}d}{K_1}$ — еще один параметр системы, а \mathcal{A} — плотность энергии сцепления ЖК-молекул с горизонтальными ограничивающими поверхностями.

Поле скорости \mathbf{v} подчиняется условию прилипания на твердых ограничивающих поверхностях ЖК-ячейки, которое может быть записано с помощью безразмерной функции тока как

$$\begin{aligned} (\psi_{,z})_{-10 < x < 10, z = \pm 1} &= (\psi_{,z})_{x = \pm 10, -1 < z < 1} = 0, \\ (\psi_{,x})_{-10 < x < 10, z = \pm 1} &= (\psi_{,x})_{x = \pm 10, -1 < z < 1} = 0. \end{aligned} \quad (6)$$

Уравнения (1)–(3) необходимо дополнить начальными условиями как для поля директора, так и для поля скорости. Начальное условие для угла θ выберем в виде

$$\theta(x, z, 0) = \theta_0 \cos\theta(q_z z) \cos\theta(q_x x), \quad (7)$$

где θ_0 — амплитуда, а q_x и q_z — волновые числа соответствующей Фурье-моды. В случае A волновые числа q_x и q_z соответствующей Фурье-моды имеют вид

$$\begin{aligned} q_x &= \frac{\pi}{20} (2k + 1), \quad k = 0, 1, 2, \dots, \\ q_z &= \frac{\pi}{20} (2l + 1), \quad l = 0, 1, 2, \dots, \end{aligned} \quad (8)$$

в то время как в случае B эти волновые числа имеют вид

$$\begin{aligned} q_x &= \frac{\pi}{20} (2k + 1), \quad k = 0, 1, 2, \dots, \\ q_z &= \pm (\cot(q_z z))_{z = \pm 1}. \end{aligned} \quad (9)$$

В свою очередь начальное условие для скорости $v(x, z, 0) = 0$, записанное с помощью функции тока, принимает вид

$$\psi(x, z, 0) = 0. \quad (10)$$

Следует отметить, что в процессе переориентации поля директора под действием сильного электрического поля баланс импульсов и угловых моментов, действующих на единицу ЖК-объема, разворачивает поле директора к его равновесному распределению $\hat{\mathbf{n}}_{\text{eq}}$ по всему объему ЖК-фазы, которое описывается углом $\theta_{\text{eq}}(x, z)$. Время, необходимое для переориентации поля директора в положение $\theta_{\text{eq}}(x, z)$, есть время релаксации $\tau(\theta_0, A, B)$ системы, и его величина зависит от величины электрического поля \bar{E} , угла θ_0 , а также от характера сцепления ЖК-молекул с ограничивающими поверхностями. В свою очередь безразмерные волновые числа q_x

и q_z определяются исходя из условия минимума полной энергии $W = W_{\text{elast}} + W_{\text{el}}$, где

$$\begin{aligned} \frac{2}{\delta_1} W_{\text{elast}} = & \int dx \int dz \\ & \times \left[((\theta_{\text{eq}})_{,x}^2 + (\theta_{\text{eq}})_{,z}^2) (\sin^2 \theta_{\text{eq}} + K_{31} \cos^2 \theta_{\text{eq}}) \right] \\ & + \int dx \int dz (K_{31} - 1) \sin 2\theta_{\text{eq}} (\theta_{\text{eq}})_{,x} (\theta_{\text{eq}})_{,z} \end{aligned} \quad (11)$$

— вклад упругих сил, а

$$W_{\text{el}} = - \int dx \int dz E(\theta_{\text{eq}}) \cos^2(\theta_{\text{eq}} - \alpha) \quad (12)$$

— вклад электрических сил в общую энергию W соответственно.

Таким образом, система уравнений (1)–(3), (8), (9) и (11), (12), дополненная граничными (4)–(6) и начальными (7), (10) условиями, образует самосогласованную систему нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных, описывающих эволюцию как поля директора $\hat{\mathbf{n}}$, так и поля скорости \mathbf{v} к их равновесным распределениям по всему объему микрометровой ЖК-ячейки под действием сильного электрического поля \mathbf{E} , направленного под углом α к горизонтальным ограничивающим поверхностям.

3. Эволюция поля директора и скорости в ЖК-ячейке под действием сильного электрического поля

Когда сильное электрическое поле \mathbf{E} ($E \sim 100E_{\text{th}}$) включено в момент времени $\tau = 0$ и направлено под углом $\alpha (\sim \frac{\pi}{2})$ к горизонтальным ограничивающим поверхностям ЖК-ячейки, планарно и однородно ориентированный нематик, образованный молекулами 5ЦБ, стремится переориентироваться в направлении вектора \mathbf{E} . Этот процесс переориентации описывается углом $\theta(x, z, \tau)$, а инициируемое разворотом директора $\hat{\mathbf{n}}$ поле скорости $\mathbf{v} = u(x, z, \tau)\hat{\mathbf{i}} + w(x, z, \tau)\hat{\mathbf{k}}$ описывается системой нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных (1)–(3), (8), (9) и (11), (12), дополненных граничными (4)–(6) и начальными (7), (10) условиями как для угла θ , так и для функции тока ψ , а значения волновых чисел q_x и q_z определяются исходя из условия минимума полной энергии $W = W_{\text{elast}} + W_{\text{el}}$ [13,14]. Для случая нематика, образованного молекулами 5ЦБ, при температуре 300 К и плотности 10^3 kg/m^3 , а также величине напряжения $U = 200 \text{ V}$, приложенного поперек ЖК-ячейки толщиной $200 \mu\text{m}$, значения параметров, которые входят в описанные выше уравнения, составляют $\delta_1 = 8.6 \cdot 10^{-6}$, $\delta_2 = 0.19$, $\delta_3 = 19.5$, $\gamma = -1.1$ и $K_{31} = 1.17$. Следует отметить, что величина порогового напряжения в нашем случае равна $E_{\text{th}} \sim 1.05 \cdot 10^4 \text{ V/m}$, так что $E \sim 100E_{\text{th}}$.

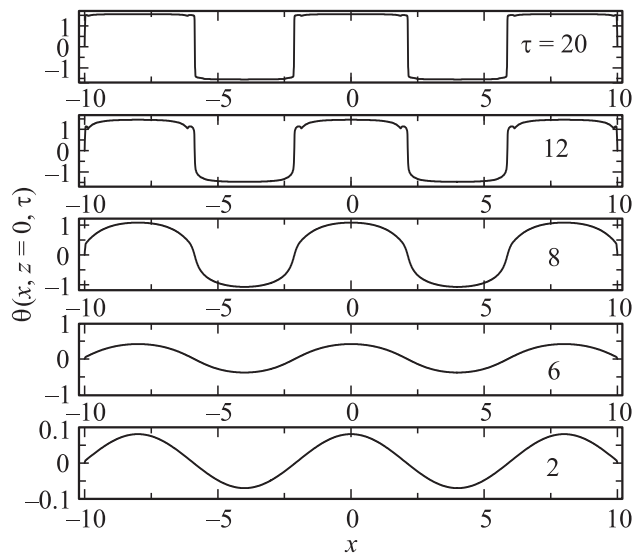


Рис. 2. Эволюция распределения угла поля $\theta(x, z = 0, \tau)$ вдоль оси $x \in [-10, 10]$ к равновесному распределению $\theta_{\text{eq}}(x, z = 0) = \theta_{\text{eq}}(x, z = 0, \tau = \tau_R(A) = 20)$ для случая А и $E > 0$. Представлены состояния, соответствующие временам $\tau = 2, 6, 8, 12$ и 20 .

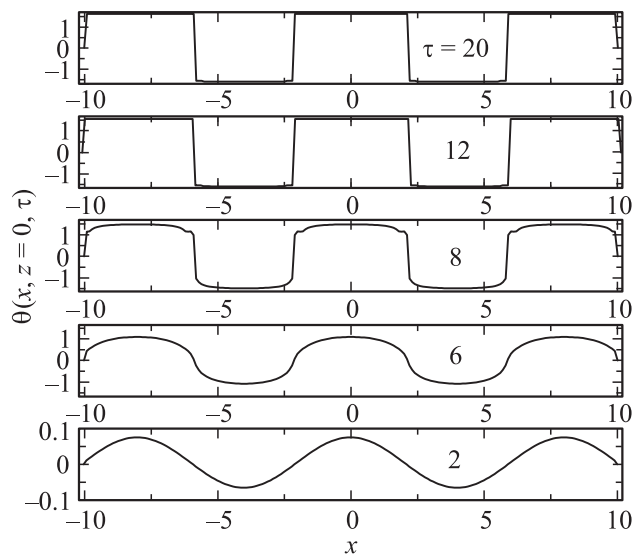


Рис. 3. То же, что на рис. 2, для случая В. Здесь $\tau_R(B) = 12$.

Приведенный нами ранее анализ подобных систем показал, что при определенном балансе упругих, вязких и электрических моментов и импульсов, действующих на единицу объема ЖК-фазы, существует пороговое значение амплитуды угла θ_0^{th} (см. (7)), выше которого характер переориентации поля директора претерпевает изменение [13,14]. Так, было показано, что при всех прочих равных условиях при $\theta < \theta_0^{\text{th}}$ поле директора $\hat{\mathbf{n}}(x, z, \tau)$ разворачивается в направлении вектора \mathbf{E} ($|\mathbf{E}| \sim 100E_{\text{th}}$) как единое целое, т.е. как монодомен. В то же время при значениях $\theta \geq \theta_0^{\text{th}}$ переориентация поля директора

характеризуется формированием периодических структур по всему объему, занимаемому ЖК-фазой [13,14]. На рис. 2 представлены результаты расчета эволюции распределения угла $\theta(x, z = 0, \tau)$ к равновесному распределению $\theta_{eq}(x, z = 0)$ вдоль оси $x \in [-10, 10]$, которое достигается спустя $\tau_R(A) = 20$ единиц безразмерного времени (~ 0.12 s). Эти расчеты были получены для случая жесткого сцепления ЖК-молекул с ограничивающими поверхностями (случай A). На рис. 3 представлены результаты расчета эволюции распределения угла $\theta(x, z = 0, \tau)$ к равновесному распределению $\theta_{eq}(x, z = 0)$ вдоль оси $x \in [-10, 10]$ для случая мягкого сцепления ЖК-молекул с горизонтальными и жесткого с вертикальными ограничивающими поверхностями (случай B). Время релаксации в этом случае практически в 2 раза меньше, чем в случае A, и достигается спустя $\tau_R(B) = 12$ единиц безразмерного времени (~ 72 ms). Оба расчета были проведены при значениях углов $\alpha = 1.57 (\sim 89.96^\circ)$ и $\theta_0 = 0.01 (\sim 1.1^\circ)$, а критерий сходимости итерационной процедуры был выбран равным $\epsilon = |(\theta_{(m+1)} - \theta_{(m)}) / \theta_{(m)}| \sim 10^{-4}$, итерационная процедура продолжалась до достижения заданной точности [17]. Состояния на обоих рисунках соответствуют временам $\tau = 2 (\sim 12$ ms), $6 (\sim 36$ ms), $8 (\sim 48$ ms), $12 (\sim 72$ ms) и $20 (\sim 0.12$ s). Здесь безразмерное время $\tau = \frac{\epsilon_0 \epsilon_a}{\gamma_1} \left(\frac{U}{2d}\right)^2 t$ отсчитывалось с момента включения электрического поля. В обоих случаях равновесное распределение угла $\theta_{eq}(x, z = 0)$ вдоль оси $x \in [-10, 10]$ характеризуется отчетливо выраженной периодической структурой с узлами в точках $x = \pm 2.175$ и ± 5.83 (случай A) и $x = \pm 2.19$ и ± 5.80 (случай B). Таким образом, на положение узлов периодической структуры, которая описывает равновесное распределение угла $\theta_{eq}(x, z = 0)$ вдоль оси $x \in [-10, 10]$, характер сцепления ЖК-молекул с ограничивающими поверхностями практически не влияет. Следует также отметить, что на релаксацию распределения угла $\theta(x = 0, z, \tau)$ вдоль оси $z \in [-1, 1]$ к его равновесному распределению $\theta_{eq}(x = 0, z)$ характер сцепления ЖК-молекул с ограничивающими поверхностями также практически не влияет (рис. 4 и 5). В обоих описанных выше случаях сцепления (A и B) время релаксации $\tau_R(A, B) = 12$ (~ 72 ms). Отметим, что величины волновых чисел q_x и q_z , которые обеспечивают минимум энергии $W_{elast} + W_{el}$, в случаях A и B равны $q_x = 0.785$ и $q_z = 64.336$ соответственно. Эволюция распределения безразмерных компонент вектора скорости $\mathbf{v} = u(x, z = 0, \tau)\hat{\mathbf{i}} + w(x, z = 0, \tau)\hat{\mathbf{k}}$ вдоль оси $x \in [-10, 10]$ для случая B представлена на рис. 6. Здесь кривые 1 соответствуют распределению вертикальной компоненты $w(x, z = 0, \tau)$, а кривые 2 — горизонтальной компоненты $u(x, z = 0, \tau)$ вектора скорости \mathbf{v} . Представлены состояния, соответствующие безразмерным временам $\tau = 2 (\sim 12$ ms), $\tau = 6 (\sim 36$ ms), $\tau = 8 (\sim 48$ ms), $\tau = 12 (\sim 72$ ms) и $\tau = 20 (\sim 0.12$ s). Обе безразмерные компоненты вектора скорости $u(x, z = 0, \tau)$ и $w(x, z = 0, \tau)$ растут

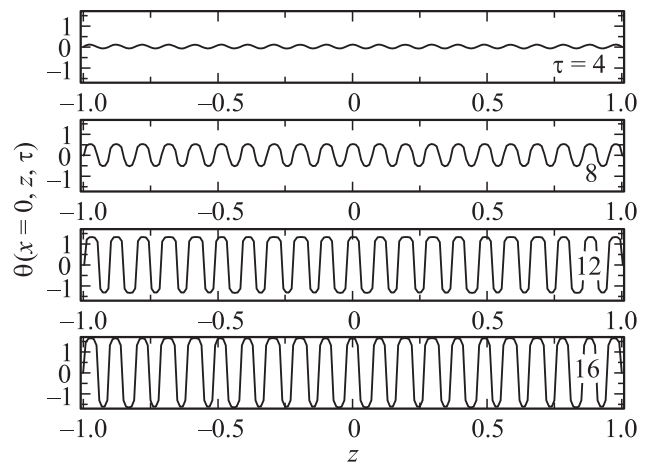


Рис. 4. Эволюция распределения угла $\theta(x = 0, z, \tau)$ вдоль оси $z \in [-1, 1]$ к равновесному распределению $\theta_{eq}(x = 0, z) = \theta_{eq}(x = 0, z, \tau = \tau_R(A) = 12)$ для случая A и $E > 0$. Представлены состояния, соответствующие временам $\tau = 4, 8, 12$ и 16 .

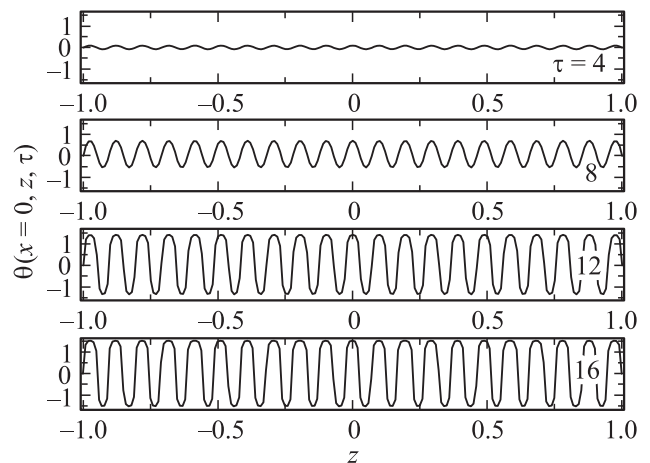


Рис. 5. То же, что на рис. 4, для случая B. Здесь $\tau_R(B) = 12$.

вплоть до максимальных значений, а затем начинают убывать так, что при $\tau_R(B) = 14$ обе компоненты обращаются в нуль. Максимальное значение вертикальной компоненты вектора скорости достигается вблизи узлов решетки $x = \pm 2.175$ и ± 5.83 . Так, вблизи узла $x = 2.175$ достигается абсолютный максимум вертикальной компоненты вектора скорости $w(x = 2.175, z = 0, \tau = 8) \approx 0.13$ (или ~ 5 mm/s). Также наши расчеты указывают на то, что в ЖК-ячейке формируется несколько вихрей, а границы этих вихрей задаются положениями узлов решетки. Так, согласно данным рис. 6, отчетливо наблюдается пять вихрей, вращающихся по часовой стрелке (см. рис. 6 для $\tau = 8$): $-10 < x < -5.83$, $-5.83 < x < -2.175$, $-2.175 < x < 2.175$, $2.175 < x < 5.83$ и $5.83 < x < 10$. Следует отметить, что характер сцепления ЖК-молекул с ограничивающими поверхностями оказывает пренебрежимо малое влияние на характер течения, возника-

ющего в ЖК-ячейке вследствие переориентации поля директора.

Предположим далее, что в момент времени $\tau = \tau_R(A) = 20 (\sim 0.12 \text{ s})$ электрическое поле будет выключено, т.е. $E = 0$. В этом случае поле директора $\hat{n}(x, z, \tau)$ под действием вязких, упругих и поверхностных сил и моментов, действующих на единицу объема ЖК-фазы, начинает переориентироваться из состояния, характеризующегося углом $\theta_{eq}(x, z)$, в состояние, характе-

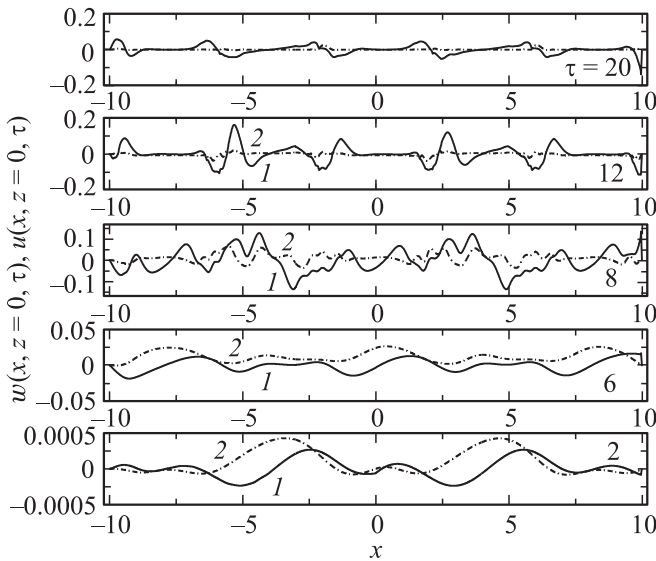


Рис. 6. Эволюция распределения компонент вектора скорости $\mathbf{v} = u(x, z = 0, \tau)\mathbf{i} + w(x, z = 0, \tau)\mathbf{k}$ вдоль оси $x \in [-10, 10]$ для случая B и $E > 0$. Представлены состояния, соответствующие временам $\tau = 2, 6, 8, 12$ и 20 . Кривые 1 отвечают вертикальной составляющей w , кривые 2 — горизонтальной составляющей u вектора скорости \mathbf{v} .

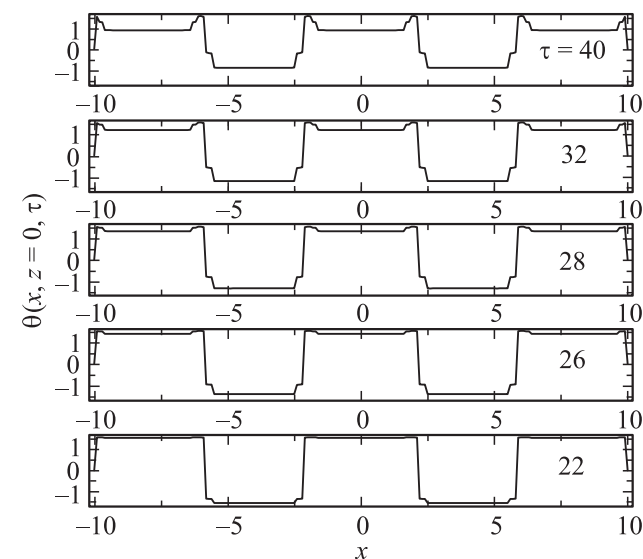


Рис. 7. Эволюция распределения угла $\theta(x, z = 0, \tau)$ вдоль оси $x \in [-10, 10]$ для случая A и $E = 0$. Представлены состояния, соответствующие временам $\tau = 22, 26, 28, 32$ и 40 .

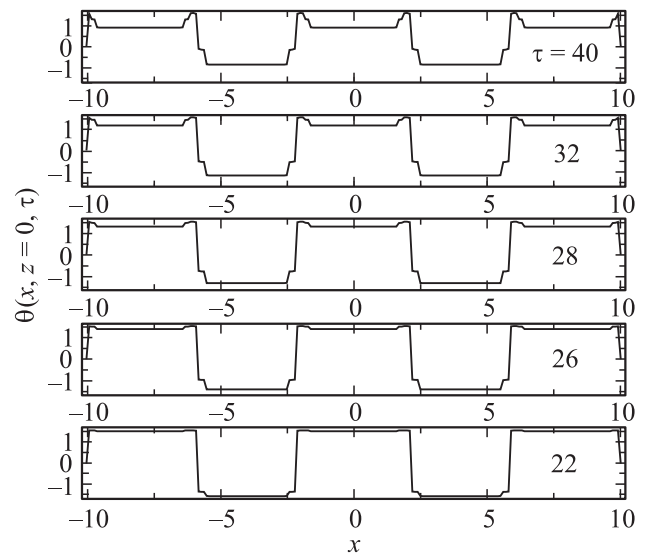


Рис. 8. То же, что на рис. 7, для случая B и $E = 0$.

ризующееся планарной ориентацией ЖК-ячейки, как в случае A , так и в случае B . При этом угол $\theta(x, z, \tau)$ должен стремиться к нулю. Следует отметить, что время релаксации $\tau_R(\text{off})$ в связи с малостью вязких, упругих и поверхностных сил и моментов по сравнению с электрическими значительно больше времен $\tau_R(A)$ и $\tau_R(B)$. На рис. 7 и 8 представлены результаты расчетов эволюции углов $\theta(x, z = 0, \tau)$ вдоль оси $x \in [-10, 10]$ для случаев A и B . Так, на рис. 7 представлена эволюция угла $\theta(x, z = 0, \tau)$ вдоль оси $x \in [-10, 10]$ для случая A для следующих после выключения электрического поля 20 единиц безразмерного времени, соответствующая временам $\tau = 22 (\sim 0.132 \text{ s})$, $\tau = 26 (\sim 0.156 \text{ s})$, $\tau = 28 (\sim 0.168 \text{ s})$, $\tau = 32 (\sim 0.192 \text{ s})$ и $\tau = 40 (\sim 0.24 \text{ s})$. На рис. 8 представлены результаты расчета эволюции угла $\theta(x, z = 0, \tau)$ вдоль оси $x \in [-10, 10]$ для случая B и тех же, что и на рис. 7, 20 единиц безразмерного времени, отсчитанных с момента выключения электрического поля. Результаты обоих расчетов указывают на то, что быстрее релаксируют области, удаленные от положений узлов периодической структуры, т.е. $x = \pm 2.175$ и ± 5.83 . Безразмерное время релаксации $\tau_R(\text{off})$ поля директора к планарно ориентированному распределению по всему объему ЖК-ячейки равно 400 (или $\sim 2.4 \text{ s}$).

4. Заключение

В работе представлено исследование эволюции как поля директора \hat{n} , так и поля скорости \mathbf{v} , инициируемого переориентацией поля директора в микроскопической, планарно ориентированной ЖК-ячейке под действием сильного электрического поля $E = 100E_{th}$, направленного под углом $\alpha \sim \pi/2$ к горизонтальным поверхностям

прямоугольной ЖК-ячейки. Численные расчеты, выполненные в рамках нелинейного обобщения классической теории Эриксона–Лесли, показали, что при определенных соотношениях моментов и импульсов, действующих на единицу объема ЖК-фазы, в процессе переориентации $\hat{\mathbf{n}}$ могут возникнуть переходные периодические структуры, если соответствующая мода искажения обладает наивысшим откликом и таким образом подавляет все остальные моды, в том числе и однородные. На положение узлов этих периодических структур оказывают влияние величина поля E , угол α , а также характер сцепления ЖК-молекул с ограничивающими поверхностями. Было показано, что в случае мягкого сцепления ЖК-молекул с горизонтальными и жесткого сцепления с вертикальными ограничивающими поверхностями ЖК-ячейки время, необходимое для релаксации поля директора к его равновесному распределению, практически в 2 раза меньше времени, необходимого для релаксации поля директора в случае жесткого сцепления. Расчеты, выполненные для нематика, образованного молекулами 4-п-пентил-4'-цианобифенила, указывают на то, что в ЖК-ячейке может формироваться несколько вихрей, вызванных переориентацией поля директора, а границы этих вихрей определяются положениями узлов периодической структуры. Следует отметить, что методы ЯМР-спектроскопии позволяют экспериментально исследовать переориентацию поля директора, описываемую углом $\theta(t)$, под действием сильного электрического поля E [18,19]. Это достигается тем, что ЖК-образец вначале ориентируется сильным магнитным полем \mathbf{V} с соответствующим расщеплением квадрупольного спектра $\Delta\bar{\nu}_0$. Если в какой-то момент времени включить сильное поперечное электрическое поле \mathbf{E} , то это ведет к убыванию величины расщепления квадрупольного спектра $\Delta\bar{\nu}$. При этом величина $\Delta\bar{\nu}(t)/\Delta\bar{\nu}_0 = P_2(\cos\theta(t))$ связана с углом отклонения $\theta(t)$ поля директора от направления магнитного поля \mathbf{V} . Здесь $P_2(x)$ — полином Лежандра второго порядка. Таким образом, ЯМР-спектроскопия позволяет проследить эволюцию угла $\theta(t)$ от его начального значения θ_0 до конечного θ_∞ . Располагая зависимостью $\theta(t)$ (или $\Delta\bar{\nu}(t)/\Delta\bar{\nu}_0$), можно сравнивать данные, полученные численными и экспериментальными методами. Что касается величины напряжения ~ 200 В и толщины ЖК-ячейки $2d = 200$ мкм, то эти значения близки к значениям этих параметров, использовавшимся при ЯМР-измерениях [12]. Мы полагаем, что данная работа проливает свет на неизученные аспекты динамики переориентации поля директора в микроскопических ЖК-ячейках под действием сильного электрического поля.

5. Приложение. Моменты и компоненты тензора напряжений

Рассмотрим нематический жидкий кристалл, где поле директора задано вектором $\hat{\mathbf{n}} = (n_x, 0, n_z)$

$= (\cos\theta, 0, \sin\theta)$, а баланс вращательных моментов, действующих на единицу объема ЖК-фазы, состоит из $\mathbf{T}_{\text{elast}} = T_{\text{elast}}\hat{\mathbf{j}} = \frac{\delta\mathcal{W}_F}{\delta\hat{\mathbf{n}}} \times \hat{\mathbf{n}}$ — упругого, $\mathbf{T}_{\text{vis}} = T_{\text{vis}}\hat{\mathbf{j}} = \frac{\delta\mathcal{R}^{\text{vis}}}{\delta\hat{\mathbf{n}}_t} \times \hat{\mathbf{n}}$ — вязкого, $\mathbf{T}_{\text{el}} = T_{\text{el}}\hat{\mathbf{j}} = \frac{\delta\psi_{\text{el}}}{\delta\hat{\mathbf{n}}} \times \hat{\mathbf{n}}$ — электрического вклада [13,14]. Здесь $\mathcal{W}_F = \frac{1}{2}[K_1(\nabla \cdot \hat{\mathbf{n}})^2 + K_3(\hat{\mathbf{n}} \times \nabla \times \hat{\mathbf{n}})^2]$ — плотность упругой энергии, приходящейся на единицу объема ЖК-фазы; $\psi_{\text{el}} = -\frac{1}{2}\epsilon_0\epsilon_a(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{E})^2$ — плотность электрической энергии;

$$\begin{aligned} \mathcal{R}^{\text{vis}} = & \alpha_1(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{D}_s \cdot \hat{\mathbf{n}})^2 + \gamma_1(\hat{\mathbf{n}}_t - \mathbf{D}_a \cdot \hat{\mathbf{n}})^2 \\ & + 2\gamma_2(\hat{\mathbf{n}}_t - \mathbf{D}_a \cdot \hat{\mathbf{n}}) \cdot (\mathbf{D}_s \cdot \hat{\mathbf{n}} - (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{D}_s \cdot \hat{\mathbf{n}})\hat{\mathbf{n}}) \\ & + \alpha_4\mathbf{D}_s : \mathbf{D}_s + (\alpha_5 + \alpha_6)(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{D}_s \cdot \mathbf{D}_s \cdot \hat{\mathbf{n}}) \end{aligned}$$

— вязкий вклад в полную функцию Рэлея $\mathcal{R} = \mathcal{R}^{\text{vis}}$; K_1 и K_3 — коэффициенты упругости, соответствующие изгибным и продольным деформациям; $\mathbf{D}_s = \frac{1}{2}[\nabla\mathbf{v} + (\nabla\mathbf{v})^T]$ и $\mathbf{D}_a = \frac{1}{2}[\nabla\mathbf{v} - (\nabla\mathbf{v})^T]$ — симметричный и антисимметричный вклады в тензор $\nabla\mathbf{v}$; $\hat{\mathbf{n}}_t = \frac{d\hat{\mathbf{n}}}{dt}$ — материальная производная; $\alpha_i (i = 1, \dots, 6)$ — коэффициенты вязкости Лесли, а $\gamma_1 = \alpha_3 - \alpha_2$, $\gamma_2 = \alpha_3 + \alpha_2$ — коэффициенты вращательной вязкости.

Безразмерный тензор напряжений (ТН) представляет собой сумму, состоящую из упругих (σ^{elast}), вязких (σ^{vis}) и электрических (σ^{el}) вкладов за вычетом $P\mathcal{J}$. Компоненты упругого ТН имеют вид

$$\begin{aligned} \sigma_{xx}^{\text{elast}} &= \delta_1(-\Delta_1\theta_{,x}^2 + \Delta_3\theta_{,x}\theta_{,z}), \\ \sigma_{zz}^{\text{elast}} &= \delta_1(-\Delta_2\theta_{,z}^2 + \Delta_3\theta_{,x}\theta_{,z}), \\ \sigma_{xz}^{\text{elast}} &= \delta_1(-\Delta_1\theta_{,x}\theta_{,z} + \Delta_3\theta_{,z}^2), \\ \sigma_{zx}^{\text{elast}} &= \delta_1(\Delta_2\theta_{,x}\theta_{,z} + \Delta_3\theta_{,x}^2), \end{aligned}$$

где $\Delta_1 = \sin^2\theta + K_{31}\cos^2\theta$, $\Delta_2 = \cos^2\theta + K_{31}\sin^2\theta$, $\Delta_3 = \frac{1-K_{31}}{2}\sin 2\theta$, $K_{31} = K_3/K_1$.

Безразмерные компоненты вязкого ТН имеют вид

$$\sigma_{ij}^{\text{vis}} = f_{ij}^{1,\text{vis}}\psi_{,xx} + f_{ij}^{2,\text{vis}}\psi_{,zz} + f_{ij}^{3,\text{vis}}\psi_{,xz} + f_{ij}^{4,\text{vis}}\psi_{,zx},$$

где

$$f_{xx}^{1,\text{vis}} = -\frac{\sin 2\theta}{4}\left(\frac{2\alpha_1}{\gamma_1} + \gamma^2 \cos 2\theta\right), \quad f_{xx}^{2,\text{vis}} = -f_{xx}^{1,\text{vis}},$$

$$f_{xx}^{3,\text{vis}} = \frac{1}{\gamma_1}[\alpha_1 \cos 2\theta \cos^2\theta + (\alpha_5 + \alpha_6) \cos^2\theta + \alpha_4]$$

$$- \frac{\gamma^2}{4} \sin^2\theta,$$

$$\begin{aligned} f_{xx}^{4,\text{vis}} = & -\frac{\gamma}{2}[\sin 2\theta(\Delta_1\theta_{,xx} + \Delta_2\theta_{,zz}) \\ & + \Delta_5(\theta_{,x}^2 + 2\theta_{,xz} - \theta_{,z}^2 - 2\theta_{,x}\theta_{,z})], \end{aligned}$$

$$f_{zz}^{1,\text{vis}} = -\frac{\sin 2\theta}{4} (2\frac{\alpha_1}{\gamma_1} \cos^2 \theta - \gamma^2 \cos 2\theta), \quad f_{zz}^{2,\text{vis}} = -f_{zz}^{1,\text{vis}},$$

$$f_{zz}^{3,\text{vis}} = \frac{1}{\gamma_1} [\alpha_1 \cos 2\theta \sin^2 \theta - (\alpha_5 + \alpha_6) \cos^2 \theta - \alpha_4]$$

$$+ \frac{\gamma^2}{4} \sin^2 \theta, \quad f_{zz}^{4,\text{vis}} = -f_{xx}^{4,\text{vis}},$$

$$f_{xz}^{1,\text{vis}} = \frac{1}{4\gamma_1} (-\alpha_1 \sin^2 2\theta + 2\gamma_2 \cos 2\theta - 2\alpha_4 - \alpha_5 - \alpha_6 - \gamma_1) + \Delta_6^2,$$

$$f_{xz}^{2,\text{vis}} = \frac{1}{4\gamma_1} (\alpha_1 \sin^2 2\theta + 2\alpha_4 + \alpha_5 + \alpha_6 - \gamma_1) + \Delta_7,$$

$$f_{xz}^{3,\text{vis}} = -\frac{\sin 4\theta}{4} (\frac{\alpha_1}{\gamma_1} + \gamma^2),$$

$$f_{xz}^{4,\text{vis}} = -\Delta_6 (\Delta_1 \theta_{,xx} + \Delta_2 \theta_{,zz}) - \Delta_3 \Delta_6 (\theta_{,x}^2 + 2\theta_{,xz} - \theta_{,z}^2 - 2\theta_{,x} \theta_{,z}),$$

$$f_{zx}^{1,\text{vis}} = -\frac{1}{4\gamma_1} (\alpha_1 \sin^2 2\theta + 2\alpha_4 + \alpha_5 + \alpha_6 - \gamma_1) + \Delta_6^2,$$

$$f_{zx}^{2,\text{vis}} = \frac{1}{4\gamma_1} (\alpha_1 \sin^2 2\theta + 2\gamma_2 \cos 2\theta + 2\alpha_4 + \alpha_5 + \alpha_6 + \gamma_1) - \Delta_8^2, \quad f_{zx}^{3,\text{vis}} = -f_{zx}^{3,\text{vis}},$$

$$f_{zx}^{4,\text{vis}} = \Delta_8 (\Delta_1 \theta_{,xx} + \Delta_2 \theta_{,zz}) + \Delta_8 \Delta_3 (\theta_{,x}^2 + 2\theta_{,xz} - \theta_{,z}^2 - 2\theta_{,x} \theta_{,z}),$$

где

$$\Delta_5 = \frac{1 - K_{31}}{2} \sin^2 2\theta, \quad \Delta_6 = \frac{1}{2} (1 - \gamma \cos 2\theta),$$

$$\Delta_7 = \frac{1}{4} (1 - \gamma^2 \cos^2 2\theta), \quad \Delta_8 = \frac{1}{2} (1 + \gamma \cos 2\theta).$$

Безразмерный аналог уравнения Навье–Стокса $\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}$ принимает вид

$$\delta_2 [(\Delta\psi)_{,r} + \psi_{,z} (\Delta\psi)_{,x} - \psi_{,x} (\Delta\psi)_{,z}] = \hat{\mathcal{L}}\psi + \mathcal{F},$$

где $\Delta\psi = \psi_{,xx} + \psi_{,zz}$, $\mathcal{F} = \mathcal{F}_{\text{elast}} + \mathcal{F}_{\text{el}}$, а

$$\mathcal{F}_{\text{elast}} = (\sigma_{xx}^{\text{elast}} + \sigma_{zz}^{\text{elast}})_{,xz} + (\sigma_{zx}^{\text{elast}})_{,zz} - (\sigma_{xz}^{\text{elast}})_{,xx},$$

$$\mathcal{F}_{\text{el}} = -(\sigma_{zz}^{\text{el}})_{,xz}, \quad \sigma_{zz}^{\text{el}} = \bar{E}^2 \sin \alpha \left(\frac{\epsilon_{\perp}}{\epsilon_a} + \sin^2 \theta \right).$$

Оператор

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{L}}\psi &= a_1 \psi_{,zzzz} + a_2 \psi_{,xzzz} + a_3 \psi_{,xxzz} + a_4 \psi_{,xxxx} \\ &+ a_5 \psi_{,xxxx} + a_6 \psi_{,zzzz} + a_7 \psi_{,xzzz} + a_8 \psi_{,xxzz} \\ &+ a_9 \psi_{,xxxx} + a_{10} \psi_{,zz} + a_{11} \psi_{,xz} + a_{12} \psi_{,xx}, \end{aligned}$$

где

$$a_1 = f_{zx}^{2,\text{vis}}, \quad a_2 = f_{zx}^{3,\text{vis}} + f_{xx}^{2,\text{vis}} - f_{zz}^{2,\text{vis}},$$

$$a_3 = f_{zx}^{1,\text{vis}} - f_{xz}^{2,\text{vis}} + f_{xx}^{3,\text{vis}} - f_{zz}^{3,\text{vis}},$$

$$a_4 = f_{xx}^{1,\text{vis}} - f_{zz}^{1,\text{vis}} - f_{xz}^{3,\text{vis}},$$

$$a_5 = -f_{xz}^{1,\text{vis}}, \quad a_6 = f_{xx,z}^{2,\text{vis}} - f_{zz,z}^{2,\text{vis}} + 2f_{zx,z}^{2,\text{vis}},$$

$$a_7 = f_{xx,z}^{2,\text{vis}} - f_{zz,z}^{2,\text{vis}} + f_{xx,x}^{3,\text{vis}} - f_{zz,x}^{3,\text{vis}} + 2f_{zx,x}^{3,\text{vis}} - 2f_{xz,x}^{3,\text{vis}},$$

$$a_8 = f_{xx,x}^{1,\text{vis}} - f_{zz,x}^{1,\text{vis}} + f_{xx,z}^{3,\text{vis}} - f_{zz,z}^{3,\text{vis}} + 2f_{zx,z}^{1,\text{vis}} - 2f_{xz,x}^{3,\text{vis}},$$

$$a_9 = f_{xx,z}^{1,\text{vis}} - f_{zz,z}^{1,\text{vis}} - 2f_{xz,x}^{1,\text{vis}},$$

$$a_{10} = f_{xx,xz}^{2,\text{vis}} - f_{zz,xz}^{2,\text{vis}} + f_{zx,xz}^{2,\text{vis}} - f_{xz,xx}^{2,\text{vis}},$$

$$a_{11} = f_{xx,xz}^{3,\text{vis}} - f_{zz,xz}^{3,\text{vis}} + f_{zx,xz}^{3,\text{vis}} - f_{xz,xx}^{3,\text{vis}},$$

$$a_{12} = f_{xx,xz}^{1,\text{vis}} - f_{zz,xz}^{1,\text{vis}} + f_{zx,xz}^{1,\text{vis}} - f_{xz,xx}^{1,\text{vis}}.$$

Список литературы

- [1] R.B. Shoch, J.Y. Han, P. Renaud. Rev. Mod. Phys. **80**, 839 (2008).
- [2] T.M. Squires, S.R. Quake. Rev. Mod. Phys. **77**, 977 (2005).
- [3] P. Hanggi, F. Marchesoni. Rev. Mod. Phys. **81**, 387 (2009).
- [4] S. Lee, R. An, J.A. Hunt. Nature Nanotechnol. **5**, 412 (2010).
- [5] S. Samitsu, Y. Takanishi, J. Yamamoto. Nature Mater. **9**, 816 (2010).
- [6] S.V. Pasechnik, V.G. Chigrinov, D.V. Shmeliova. Liquid crystals: viscous and elastic properties. Wiley-VCH (2009). 424 p.
- [7] H. Ren, S. Xu, S.-T. Wu. Lab Chip **13**, 100 (2013).
- [8] R. Daugla, S.C. Kayi, Ch.N. Baroud. Proc. Natl. Acad. Sci. **110**, 853 (2013).
- [9] W. Sparreboom, A. van den Berg, J.C.T. Eijkel. New J. Phys. **12**, 011 504 (2010).
- [10] D.K. Yang, S.T. Wu. Fundamentals of Liquid Crystal Devices. Wiley, N.Y. (2006). 387 p.
- [11] P.G. de Gennes, J. Prost. The physics of liquid crystals. Oxford Univ. Press, Oxford (1995). 400 p.
- [12] A. Sugimura, A.V. Zakharov. Phys. Rev. E **84**, 021 703 (2011).
- [13] A.A. Vakulenko, A.V. Zakharov. Phys. Rev. E **88**, 022 505 (2013).
- [14] A.V. Zakharov, A.A. Vakulenko. J. Chem. Phys. **139**, 244 904 (2013).
- [15] J.L. Ericksen. Arch. Ration. Mech. Anal. **4**, 231 (1960).
- [16] F.M. Leslie. Arch. Ration. Mech. Anal. **28**, 265 (1968).
- [17] И.С. Березин, Н.Р. Жидков. Методы вычислений. Физматгиз, М. (1964). 464 с.
- [18] R.Y. Dong. Nuclear magnetic resonance of liquid crystals. 2nd ed. Springer-Verlag, N.Y. (1997). 309 p.
- [19] A. Sugimura, G.R. Luckhurst. In: Nuclear magnetic resonance spectroscopy of liquid crystals / Ed. R.Y. Dong. World Scientific Publ. Co., Singapore (2009). Ch. 10.